

Рассеяние электрона на прямоугольной потенциальной яме

**Стационарное уравнение Шредингера
(одномерное движение)**

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$$

$\hat{H}$ – оператор Гамильтона,

$\psi(x)$ – волновая функция,

E – энергия электрона $E > 0$,

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \text{ – явный вид гамильтониана,}$$

m_e – масса электрона,

$U(x)$ – потенциальная энергия электрона.

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \quad x > a \\ -|U_0|, & 0 < x < a \end{cases} \quad (1)$$

Цель задачи: Найти вероятность прохождения электрона над ямой $D(E)$

Область $x < 0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x)$$

$$0 = \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + E\psi(x) \Rightarrow \psi(x)'' + \frac{2m_e E}{\hbar^2} \psi(x) = 0$$

$$\frac{2m_e E}{\hbar^2} = k^2$$

$$\psi(x)'' + k^2 \psi(x) = 0 \quad (2)$$

$$\psi(x) = e^{ikx} + Ae^{-ikx} \quad (3)$$

Область $0 < x < a$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - |U_0| \psi(x) = E\psi(x) \Rightarrow 0 = \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + (E + |U_0|) \psi(x)$$

$$\psi(x)'' + k'^2 \psi(x) = 0, \quad (4)$$

$$k'^2 = \frac{2m_e}{\hbar} (E + |U_0|)$$

$$\psi(x) = Be^{ik'x} + B'e^{-ik'x} \quad (5)$$

Область $a < x$

$$\psi(x)'' + k^2 \psi(x) = 0 \quad (6)$$

$$\psi(x) = Ce^{ikx} \quad (7)$$

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Ae^{-ikx}, & x < 0 \\ Be^{ik'x} + B'e^{-ik'x}, & 0 < x < a \\ Ce^{ikx}, & x > a \end{cases} \quad (8)$$

Вероятность прохождения электрона над ямой $D(E)$ есть $D(E) = |C|^2$

В волновой функции (8) четыре неизвестные константы A, B, B', C

$$k^2 = \frac{2m_e E}{\hbar^2}, \quad k'^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2} (E + |U_0|)$$

Условия для нахождения этих констант

$$\begin{cases} \psi(x) \big|_{x=-0} = \psi(x) \big|_{x=+0} \\ \psi'(x) \big|_{x=-0} = \psi'(x) \big|_{x=+0} \\ \psi(x) \big|_{x=a-0} = \psi(x) \big|_{x=a+0} \\ \psi'(x) \big|_{x=a-0} = \psi'(x) \big|_{x=a+0} \end{cases} \quad (9)$$

$$\psi'(x) = \begin{cases} ike^{ikx} - ikAe^{-ikx}, & x < 0 \\ ik'Be^{ik'x} - ik'B'e^{-ik'x}, & 0 < x < a \\ ikCe^{ikx}, & x > a \end{cases} \quad (10)$$

Подстановка волновой функции $\psi(x)$ (8) и $\psi'(x)$ (10) в условие (9) позволяет получить систему линейных алгебраических уравнений с неизвестными A, B, B', C .

$$\begin{cases} 1 + A = B + B' \\ ik - ikA = ik'B - ik'B' \\ Be^{ik'a} + B'e^{-ik'a} = Ce^{ika} \\ ik'Be^{ik'a} - ik'B'e^{-ik'a} = ikCe^{ika} \end{cases} \quad (11)$$

Запишем 2 и 3 уравнения из полученной системы (11)

$$\begin{cases} k'B - k'B' = k - kA \\ Be^{ik'a} + B'e^{-ik'a} = Ce^{ika} \end{cases} \quad (12)$$

Из этой системы уравнений можно выразить B и B' через A, C и подставить в 1 и 4 уравнения системы (11). После такой подстановки будем иметь систему алгебраических уравнений с двумя неизвестными A, C . Для отыскания неизвестных B и B' из системы (12) умножим второе уравнение

(12) на k' , а первое уравнение на $e^{-ik'a}$. При этом система уравнений (12) примет следующее вид

$$\begin{cases} k'Be^{-ik'a} - k'B'e^{-ik'a} = ke^{-ik'a} - kAe^{-ik'a} \\ k'Be^{ik'a} + k'B'e^{-ik'a} = k'Ce^{ika} \end{cases} \quad (13)$$

Сложение уравнений (13)

$$+ \begin{cases} k'Be^{-ik'a} - k'B'e^{-ik'a} = ke^{-ik'a} - kAe^{-ik'a} \\ k'Be^{ik'a} + k'B'e^{-ik'a} = k'Ce^{ika} \end{cases} \quad (14)$$

$$k'Be^{-ik'a} + k'Be^{ik'a} = ke^{-ik'a} - kAe^{-ik'a} + k'Ce^{ika}$$

позволяет найти переменную B

$$B = \frac{ke^{-ik'a} - kAe^{-ik'a} + k'Ce^{ika}}{k'(e^{ik'a} + e^{-ik'a})}. \quad (15)$$

Для отыскания переменной B' в системе алгебраических уравнений (12)

$$\begin{cases} k'B - k'B' = k - kA \\ Be^{ik'a} + B'e^{-ik'a} = Ce^{ika} \end{cases} \quad (16)$$

первое уравнение в (16) умножим на $e^{ik'a}$, второе уравнение в (16) умножим на k'

$$\begin{cases} k'B e^{ik'a} - k'B' e^{ik'a} = k e^{ik'a} - kA e^{ik'a} \\ k'B e^{ik'a} + k'B' e^{-ik'a} = k' C e^{ika} \end{cases} \quad (17)$$

Вычитание уравнений (16)

$$-k'B' e^{ik'a} - k'B' e^{-ik'a} = k e^{ik'a} - kA e^{ik'a} - k' C e^{ika}$$

друг из друга позволяет найти B'

$$-k'B' (e^{ik'a} + e^{-ik'a}) = k e^{ik'a} - kA e^{ik'a} - k' C e^{ika}$$

$$B' = \frac{kA e^{ik'a} + k' C e^{ika} - k e^{ik'a}}{k'(e^{ik'a} + e^{-ik'a})}. \quad (18)$$

Подстановка выражений для B (15) и B' (18) в первое и четвёртое уравнения системы (11)

$$\begin{cases} 1 + A = B + B' \\ ik'B e^{ik'a} - ik'B' e^{-ik'a} = ikC e^{ika} \end{cases} \quad (19)$$

Позволяет получить систему линейных алгебраических уравнений, в которую входят переменные A и C

$$\begin{cases} 1 + A = \frac{ke^{-ik'a} - kAe^{-ik'a} + k'Ce^{ika}}{k'(e^{ik'a} + e^{-ik'a})} + \frac{kAe^{ik'a} + k'Ce^{ika} - ke^{ik'a}}{k'(e^{ik'a} + e^{-ik'a})} \\ ik'e^{ik'a} \frac{ke^{-ik'a} - kAe^{-ik'a} + k'Ce^{ika}}{k'(e^{ik'a} + e^{-ik'a})} - ik'e^{-ik'a} \frac{kAe^{ik'a} + k'Ce^{ika} - ke^{ik'a}}{k'(e^{ik'a} + e^{-ik'a})} = ikCe^{ika} \end{cases} \quad (20)$$

$$\begin{cases} A(ik \sin(k'a) - k' \cos(k'a)) + k' C e^{ika} = +k' \cos(k'a) + ik \sin(k'a) \\ Ak'k e^{-ika} + Ckk'(\cos(k'a) - i e^{ik'a} \sin(k'a)) = +k'k e^{-ika} \end{cases}$$

Вероятность прохождения электрона над ямой есть $D(E) = |C|^2$

$$D(E) = \frac{4E(E + |U_0|)}{4E(E + |U_0|) + |U_0|^2 \sin^2 \sqrt{2m_e(E + |U_0|)} a^2 / \hbar^2}$$

$$\frac{E}{|U_0|} = x, \quad 0 < x$$

$$D(E) = \frac{4x(x+1)}{4x(x+1) + \sin^2 \sqrt{(x+1)\bar{U}_0}} \\ \bar{U}_0 = 2m_e |U_0| \frac{a^2}{\hbar^2}$$

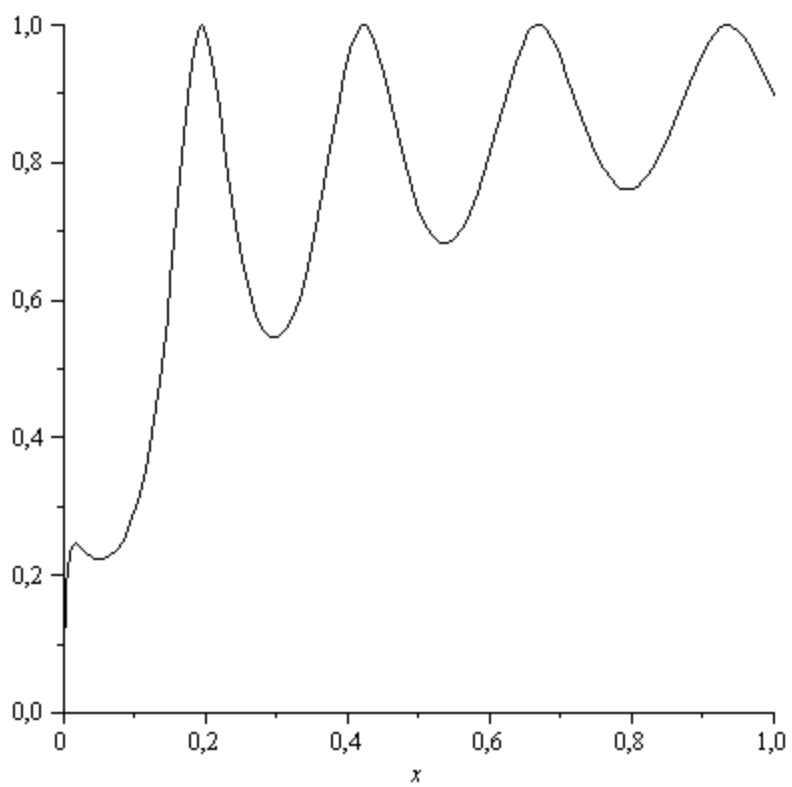


Рис. 1.

7.

Зависимость вероятности прохождения $D(x)$ электрона через потенциальную яму от величины

$$x = \frac{E}{|U_0|} \text{ при } 0 < x, \text{ когда } \bar{U}_0 = 2m_e |U_0| \frac{a^2}{\hbar^2} = 10000.$$