

> restart;

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ
 (В.М. ГАЛИЦКИЙ, В.М. КОРНАКОВ, В.И. КОГАН.
 ЗАДАЧИ ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ
 Журавлев В.М.
 Ульяновский государственный университет, 2020

ОДНОМЕРНАЯ ТЕОРИЯ РАССЕЯНИЯ

```

> with(plots):
  with(plottools):
    Формат графиков
> frm:=axes=boxed,gridlines=true,labelfont=[TIMES,BOLD,16],titlefont=[TIMES,BOLD,20],font=[TIMES,BOLD,20],symbol=solidcircle,symbolsize=18,legendstyle=[font=[TIMES,BOLD,18],location=bottom],size=[900,600];
frm := axes = boxed, gridlines = true, labelfont = [TIMES, BOLD, 16], titlefont = [TIMES, BOLD, 20], font = [TIMES, BOLD, 20], symbol = solidcircle, symbolsize = 18, legendstyle = [font = [ "TIMES", BOLD, 18], location = bottom], size = [900, 600]
  
```

ОБЩИЙ ПОДХОД

Уравнение Шредингера для рассеяния частиц на барьерах

1. В одномерном случае оператор Гамильтона (оператор полной энергии) \hat{H} имеет в общем случае вид:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + U(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)$$

Здесь $U(x)$ - потенциальная энергия системы.

2. Потенциальным барьером называется область значений потенциальной энергии вблизи ее максимального в данной области координат значения. При этом предполагается, что на бесконечности потенциальная энергия либо монотонно убывает, либо стремится к некоторым постоянным значениям.

3. В классической механике движение в потенциальной яме всегда ограничено точками поворота на конечном интервале. Такое движение называется **финитным** (конечным). Движение вне потенциальной ямы не ограничено хотя бы с одной стороны. Поэтому такое движение называется **инфinitным** (бесконечным). В квантовой механике **финитному движению** соответствует **спектр энергий с конечным или счетным множеством энергетических уровней**. Такой спектр называется **дискретным**. Инфинитному движению в квантовой механике соответствует **непрерывный спектр энергий**, т.е. число допустимых энергий занимает определенную часть вещественной оси. В этом случае удобнее для описания состояний использовать не энергию а импульс p или волновое число $k=p/\hbar$.

Заготовки функций

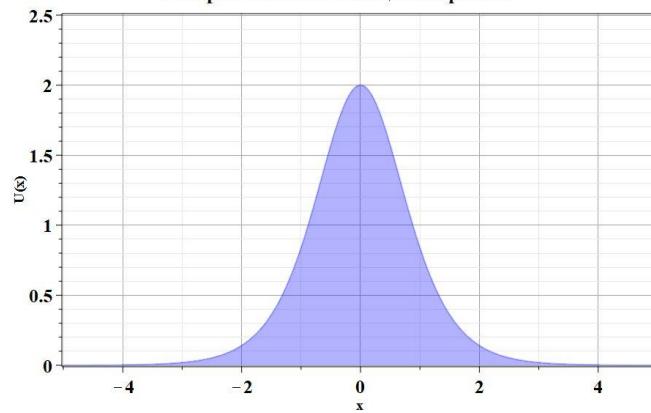
```

> U1:=(x)->x^2/(x^4+1);
U2:=(x,k,a)->2*k^2/cosh(k*(x-a))^2;
U3:=(x,a,b,U0,U1)->piecewise(x<-a,-a<=x and x<=b, U1,U0);
U4:=(x,a,b,c,U0,U1,U2)->piecewise(x<a,U0,a<=x and x<=b,U1,b<=x and x<=c, U2,U0);
UD:=(x,k)->k/cosh(k*x)^2;

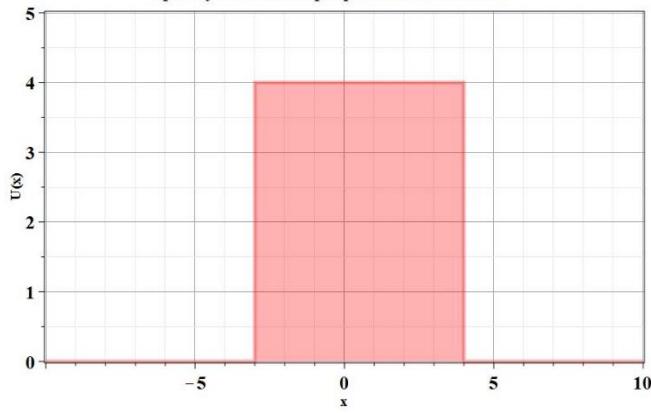
> plot(U1(x),x=-6..6,frm,color="DarkGreen",filled=true,thickness=2,title="Пример барьера с ямой",labels=[["x","U(x")]);
picU2:=plot(U2(x,1,0),x=-5..5,frm,color=blue,filled=true,thickness=2,transparency=0.7,title="Безотражательный потенциал Баргмана",labels=[["x","U(x")],view=[-5..5,0..2.5]];
picU3:=plot(U3(x,3,4,0),x=-10..10,frm,color=red,filled=true,thickness=5,transparency=0.7,title="Прямоугольный барьер конечной высоты",labels=[["x","U(x")],view=[-10..10,0..5]];
plot(U4(x,-5,4,6,0,3,-2),x=-10..10,frm,color=gold,filled=true,thickness=5,transparency=0.7,title="Прямоугольный несимметричный барьер с ямой конечной глубины",labels=[["x","U(x")],view=[-10..10,-3.5..6]);
  
```

Пример барьера с ямой

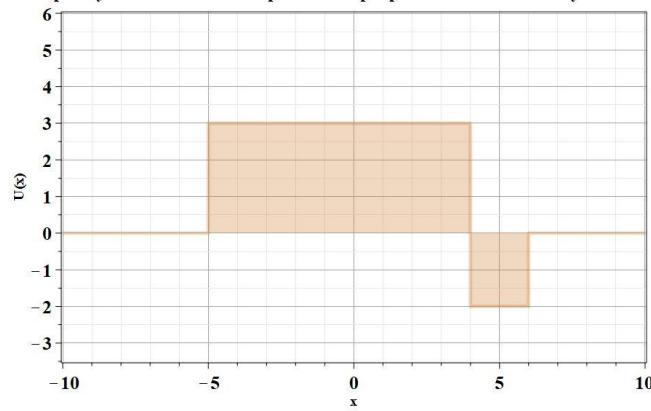
Безотражательный потенциал Баргмана



Прямоугольный барьер конечной высоты



Прямоугольный несимметричный барьер с ямой конечной глубины



=

3. Стационарное уравнение Шредингера для одномерного инфинитного движения имеет такой вид:

$$\hat{H} \psi(x; E) = \left(\frac{1}{2m} (\hat{p})^2 + U(x) \right) \psi(x; E) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \right) \psi(x; E) = E \psi(x; E)$$

Решением уравнения являются волновые функции состояний с фиксированной энергией, т.е. такие состояния, в которых измерение энергии всегда будет давать значение энергии равное E .

4. Границные условия для волновых функций непрерывного спектра имеют такой вид :

4.1. Для частицы, энергия которой лежит выше верхнего значения потенциальной энергии, волновая функция $\psi(x; E)$:

a) в пределе $x \rightarrow \pm \infty$ стремится к волновой функции свободной частицы с фиксированной энергией :

$$\lim_{x \rightarrow \pm \infty} \psi(x; E) = A_{\pm} e^{ik_{\pm} x} + B_{\pm} e^{-ik_{\pm} x}.$$

Здесь k_{\pm} , A_{\pm} , B_{\pm} – волновые числа и амплитуды в пределе $x \rightarrow \pm \infty$.

Смысл этого граничного условия состоит в том, что при удалении от области взаимодействия частицы с полем, частица движется как свободная частица.

Все остальные граничные условия синеки остаются в силе.

4.2. Граничные условия на краях разрывов потенциальной энергии остаются теми же, что и раньше.

A

Если потенциальная энергия как функция координаты в точке $x=0$ имеет бесконечный по энергии разрыв то волновая функция $\psi(x; E)$ в пределе $x \rightarrow x=0$ стремится к нулю :

$$\lim_{x \rightarrow 0} \psi(x; E) = 0.$$

B

Если потенциальная энергия как функция координаты в точке $x=0$ имеет конечный по энергии разрыв то :

a) волновая функция $\psi(x; E)$ в пределах справа и слева к этой точке :

$x \rightarrow x=0+$ и $x \rightarrow x=0-$ непрерывна :

$$\lim_{x \rightarrow x=0+} \psi(x; E) = \lim_{x \rightarrow x=0-} \psi(x; E)$$

b) производная волновой функции $\psi(x; E)$ в пределах справа и слева к этой точке :

$x \rightarrow x=0+$ и $x \rightarrow x=0-$ непрерывна :

$$\lim_{x \rightarrow x=0+} \frac{d}{dx} \psi(x; E) = \lim_{x \rightarrow x=0-} \frac{d}{dx} \psi(x; E)$$

4.3. Задачи, связанные с движением частиц с энергией вне потенциальных ям,

требуют уточнения граничных условий на бесконечности.

Спектр энергий для таких задач является непрерывным в отличие от задач, когда частица находится внутри ямы.

Для уточнения постановки задачи указывают положение источника частиц и их детекторов.

Будем полагать при решении задач, что источник частиц (I) один и располагается $x = -\infty$ (см. рис.).

Детекторы $D1$ и $D2$ частиц будут располагаться как при $x = -\infty$, так и при $x = +\infty$.

> h1:=-0.025; w1:=5; xD1:=-35; xD2:=35;

```

h1 := -0.025
w1 := 5
xD1 := -35
xD2 := 35

```

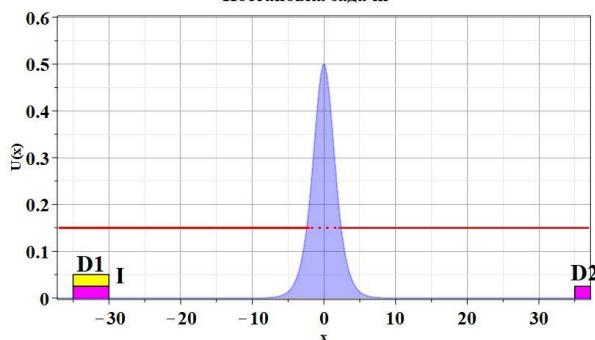
(3)

```

> rD1:=rectangle([xD1,h1],[xD1+w1,-h1],color=magenta):
rD2:=rectangle([xD2,h1],[xD2+w1,-h1],color=magenta):
rI:=rectangle([xD1,-2*h1],[xD1+w1,-h1],color=yellow):
txtDI:=textplot([[xD1+6.7,0.05,"I"],[xD1+2.5,0.075,"D1"],[xD2+1.5,0.055,"D2"],[-15,1.7,"E"]],color=black,font=[TIMES,BOLD,25]):
picU21:=plot(U2(x,0.5,0),x=-45..45,frm,color=blue,filled=true,thickness=2,transparency=0.7,title="Постановка
задачи",labels=[["x","U(x)"],view=[-37..37,0..0.6]]:
picE1:=plot(0.15,x=-37..-2,frm,color=red,thickness=3):
picE11:=plot(0.15,x=-2..3,frm,color=red,thickness=3,linestyle=dot):
picE12:=plot(0.15,x=2..37,frm,color=orange,thickness=3):
> BK:=display(picU21,rD1,rD2,rI,txtDI,picE1,picE11,picE12);

```

Постановка задачи



Источник создает частицы, летящие в положительном направлении оси х. Эти частицы могут детектироваться в детекторе D1. Кроме этого, после взаимодействия с энергетическим барьером частицы могут отразиться и вернуться в к источнику. Здесь они опять будут зарегистрированы детектором D1 как частицы, летящие в обратном направлении. Детектор D2 будет регистрировать частицы, прошедшие через барьер. При такой постановке задачи граничные условия должны иметь такой вид:

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} \psi(x; E) = A_- e^{ik_- x} + B_- e^{-ik_- x},$$

$$\lim_{x \rightarrow +\infty} \psi(x; E) = C e^{ik_+ x}$$

Два из этих коэффициентов находятся из граничных условий. Один является нормировочным коэффициентом.

Для непрерывного спектра условие нормировки в обычном виде не выполняется.

Поэтому вместо нормировки используется условие ортогональности:

$$\int_{-\infty}^{\infty} (\psi(x; k))^* \psi(x; k') dx = \delta(k - k'),$$

Здесь $\psi(x; k)$ – состояние с фиксированной энергией, как функция волнового числа:

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0 \text{ и } k = \pm \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

При таком определении коэффициентов фактически пространство разбивается на области, внутри которых частица находится с вероятностью 1.

Другим вариантом определения амплитуды A_- является задание числа частиц, вылетающих из источника в единицу времени.

В этом случае важную роль играют коэффициенты отражения и прозрачности барьера.

Комплексными коэффициентами отражения r и прозрачности t называются числа:

$$r = \frac{B_-}{A_-} \text{ и } t = \frac{C}{A_-}$$

Коэффициентами отражения R и прозрачности T барьера называются квадраты модулей r и t :

$$R = |r|^2 = \left| \frac{B_-}{A_-} \right|^2, \text{ и } T = |t|^2 = \left| \frac{C}{A_-} \right|^2.$$

Эти коэффициенты представляют собой относительные числа частиц, регистрируемых детекторами D1 (R) и D2 (T) в единицу времени.

Задачей теории рассеяния является отыскание коэффициентов R и T

4.4 В отличие от классической механики квантовая частица может преодолевать энергетический барьер даже в случае, если ее энергия меньше высоты барьера.

Такой эффект называется туннелированием.

Решение задач

Задача 2.43 ГКК

2.43. Для свободной частицы, движение которой ограничено непроницаемой стенкой, т. е.

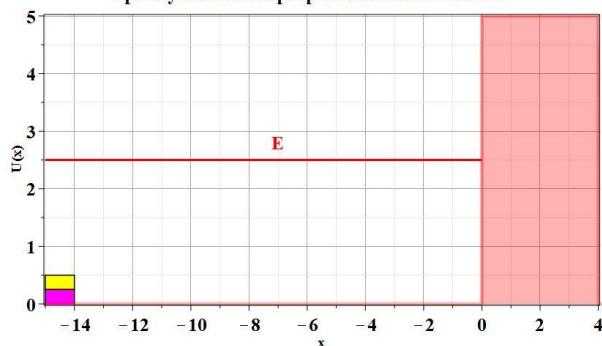
$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0, \\ 0, & x > 0, \end{cases}$$

найти волновые функции стационарных состояний. Нормировать их на б-функцию по энергии. Убедиться в полноте полученной системы функций на интервале $x > 0$.

```
> picU31:=plot(U3(x,0,4,0,5),x=-15..10,frm,color=red,filled=true,thickness=5,transparency=0.7,title="Прямоугольный барьер бесконечной высоты",labels=[["x","U(x)"],view=[-15..4,0..5]):  
picE:=plot(2.5,x=-15..0,frm,color=red,thickness=3):  
  
> h1:=-0.25;w1:=1;xD1:=-15;  
> rD1:=rectangle([xD1,h1],[xD1+w1,-h1],color=magenta):  
rI:=rectangle([xD1,-2*h1],[xD1+w1,-h1],color=yellow):  
txtE:=textplot([-7,2.8,"E"],frm,color=red):
```

```
> display(picU31,rD1,rI,picE,txtE);
```

Прямоугольный барьер бесконечной высоты



Уравнение Шредингера для данной задачи имеет вид уравнения для свободной частицы:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x; E) = E \psi(x; E), E > 0$$

Границное условие на бесконечности при $x \rightarrow -\infty$ соответствует свободной частице с фиксированной энергией:

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} \psi(x; E) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}.$$

Границное условие при $x = 0$ соответствует бесконечному скачку энергии:

$$\psi(0, E) = 0.$$

Вводим волновое число:

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0 \text{ и } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0$$

В этом случае при $x < 0$ имеем уравнение:

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

Решение этого уравнения имеет следующий вид:

$$\psi(x; E) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

Из первого граничного условия находим:

$$A = A_-, B = B_-$$

Из второго:

$$A + B = 0.$$

В результате имеем:

$$\psi(x; E) = A \cdot \sin(kx).$$

Вычисляем условие ортонормированности:

$$\int_{-\infty}^{\infty} (\psi(x; k))^* \psi(x; k') dx = A^2 \int_0^{\infty} \sin(kx) \sin(k'x) dx =$$

Задача 2.44 ГКК

2.44. Найти волновые функции стационарных состояний частицы в поле (рис. 10)

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

для случая, когда энергия частицы E меньше высоты потенциальной стены U_0 . Убедиться в ортогональности полученных функций и нормировать их на δ -функцию по энергии. Образуют ли полученные функции полную систему?

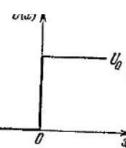
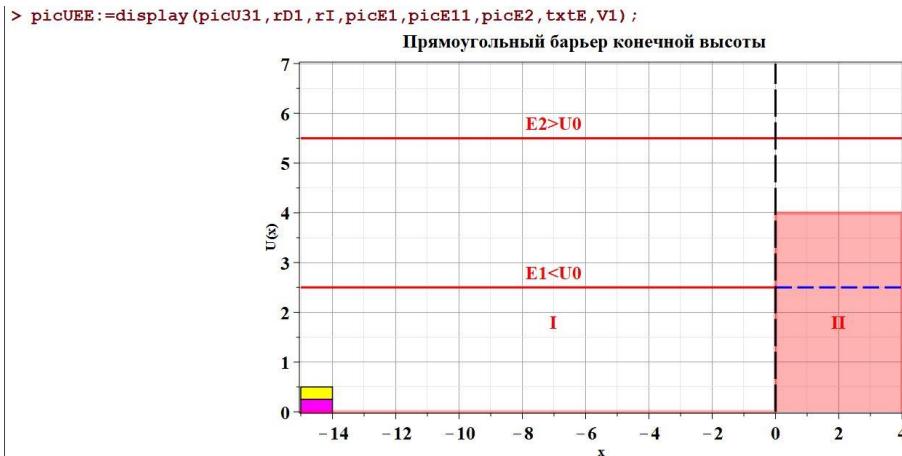


Рис. 10.

Создаем изображение условия задачи

```
> picU31:=plot(U3(x,0,4,0,4),x=-15..10,frm,color=red,filled=true,thickness=5,transparency=0.7,title=
"Прямоугольный барьер конечной высоты",labels=[["x","U(x)"],view=[-15..4,0..7]):
picE1:=plot(2.5,x=-15..0,frm,color=red,thickness=3):
picE11:=plot(2.5,x=0..4,frm,color=blue,thickness=3,linestyle=dash):
picE2:=plot(5.5,x=-15..4,frm,color=red,thickness=3):

> h1:=-0.25;w1:=1;xD1:=-15;
> rD1:=rectangle([xD1,h1],[xD1+w1,-h1],color=magenta):
rI:=rectangle([xD1,-2*h1],[xD1+w1,-h1],color=yellow):
V1:=line([0,0],[0,7],color=black,thickness=3,linestyle=longdash):
txtE:=textplot([-7,2.8,"E1<U0"],[-7,5.8,"E2>U0"],[-7,1.8,"I"],[2,1.8,"II"],frm,color=red):
```



Вариант E < U_0

Волновое число в зоне I (перед барьером):

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0 \text{ и } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0$$

Волновое число в зоне II (за барьером):

$$kI^2 = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2} > 0 \text{ и } kI = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}} > 0$$

$$kI^2 = k_0^2 - k^2, \quad k_0 = \sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2}}$$

Уравнения для волновых функций примут такой вид:

Зона I

$$\Psi_I''(x; E) + k^2 \Psi_I'(x; E) = 0$$

Зона II

$$\Psi_{II}'''(x; E) - kI^2 \Psi_{II}''(x; E) = 0$$

Решение в зоне I имеет такой вид:

$$\Psi_I(x; E) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

Решение в зоне II имеет такой вид :

$$\Psi_{II}(x; E) = Ce^{-kI \cdot x}$$

Эти соотношения автоматически учитывают граничные условия на бесконечности.

Вычисляем коэффициенты волновых функций, используя другие граничные условия.

Это условия сингулярности в точке x = 0. Имеем два условия :

$$\Psi_I(0; E) = A + B = \Psi_{II}(0; E) = C$$

$$\Psi_I'(0; E) = ik(A - B) = \Psi_{II}'(0; E) = -kI \cdot C$$

или

$$A + B = C$$

$$A - B = i \frac{kI}{k} C$$

Вводим комплексные коэффициенты отражения $r = \frac{B}{A}$ и прозрачности $t = \frac{C}{A}$.

Для этих коэффициентов получаем такие уравнения :

$$1 + r = t \quad 1 - r = i \frac{kI}{k} t$$

Отюда находим :

$$2 = \left(1 + i \frac{kI}{k}\right)t$$

или :

$$t = \frac{2}{\left(1 + i \frac{kI}{k}\right)}$$

Соответственно:

$$r = t - 1 = \frac{1 - i \frac{k l}{k}}{\left(1 + i \frac{k l}{k}\right)}$$

Учитывая, что

$$k l^2 = k_0^2 - k^2, \quad k_0 = \sqrt{\frac{2 m U_0}{\hbar^2}}$$

вычисляем коэффициенты отражения и прозрачности

$$R = |r|^2 = 1$$

$$T = |t|^2 = \frac{4 k^2}{k^2 + k l^2} = \frac{2 k}{k^2 + k_0^2 - k^2} = \frac{4 k^2}{k_0^2},$$

Выражение для коэффициента отражения получается равным единице, поскольку k и $k l$ – вещественные.

Это означает, что при условии

$$E < U_0$$

все частицы, падающие на барьер в единицу времени отражаются обратно к источнику.

В этом случае коэффициент прозрачности описывает число частиц, которые проникают в подбарьерную область, но не задерживаются там.

Задача 2.46 ГКК

2.46. Определить коэффициент отражения частиц от потенциальной стены из 2.44 при энергии частиц $E > U_0$.
Рассмотреть предельные случаи $E \rightarrow \infty$ и $E \rightarrow U_0$.

Эта задача является продолжением предыдущей задачи. Поэтому исходные данные представлены на рис. к этой задаче.

Вариант $E > U_0$

Волновое число в зоне I (перед барьером):

$$k^2 = \frac{2 m E}{\hbar^2} > 0 \text{ и } k = \sqrt{\frac{2 m E}{\hbar^2}} > 0$$

Волновое число в зоне II (за барьером):

$$k l^2 = \frac{2 m (E - U_0)}{\hbar^2} > 0 \text{ и } k l = \sqrt{\frac{2 m (E - U_0)}{\hbar^2}} > 0$$

$$k l^2 = k^2 - k_0^2, \quad k_0 = \sqrt{\frac{2 m U_0}{\hbar^2}}$$

Уравнения для волновых функций примут такой вид:

Зона I

$$\psi_I''(x; E) + k^2 \psi_I'(x; E) = 0$$

Зона II

$$\psi_{II}'''(x; E) + k l^2 \psi_{II}'(x; E) = 0$$

Решение в зоне I имеет такой вид:

$$\Psi_I(x; E) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

Решение в зоне II имеет такой вид:

$$\Psi_{II}(x; E) = C e^{ikl \cdot x}$$

Эти соотношения автоматически учитывают граничные условия на бесконечности.

В зоне II нет частиц, которые бы летели в отрицательном направлении оси x , поскольку на $+\infty$ нет источников.

Вычисляем коэффициенты волновых функций, используя другие граничные условия.

Это условия сингулярности в точке $x = 0$. Имеем два условия:

$$\Psi_I(0; E) = A + B = \Psi_{II}(0; E) = C$$

$$\Psi_I'(0; E) = ik(A - B) = \Psi_{II}'(0; E) = i k l \cdot C$$

или

$$A + B = C$$

$$A - B = \frac{k l}{k} C$$

Вводим комплексные коэффициенты отражения $r = \frac{B}{A}$ и прозрачности $t = \frac{C}{A}$.

Для этих коэффициентов получаем такие уравнения:

$$1 + r = t \quad 1 - r = \frac{k l}{k} t$$

Отюда находим :

$$2 = \left(1 + \frac{kI}{k}\right)t$$

или :

$$t = \frac{2}{\left(1 + \frac{kI}{k}\right)}$$

Соответственно :

$$r = t - 1 = \frac{1 - \frac{kI}{k}}{\left(1 + \frac{kI}{k}\right)}$$

Вычисляем коэффициенты отражения и прозрачности

$$R = |r|^2 = \frac{\left(1 - \frac{kI}{k}\right)^2}{\left(1 + \frac{kI}{k}\right)^2}$$

$$T = |t|^2 = \frac{4 k^2}{(k + kI)^2} = \frac{4 k^2}{(k + \sqrt{2 k^2 - kI^2})^2}$$

Коэффициент отражения зависит от энергии налетающей частицы, как и коэффициент прозрачности. Теперь частицы, которые прошли через барьер, достигают детектора D2. Сумма числа частиц, которые в единицу времени попали в детекторы D1 и D2 должны быть равны числу частиц, вылетевших из источника. Т.е

. должно выполняться условие $R + T = 1$. Проверяя это соотношение, обнаруживаем, что оно не выполняется . Это связано с тем, что вычисленный коэффициент T описывает число частиц, пересекающих барьер в единицу времени . Но к детектору D2 эти частицы летят со скоростью, которая связана с волновым числом kI , а число частиц, падающих на барьер в единицу времени связано с числом k .

Поэтому для подсчета числа частиц,

попавших в детектор D2 в единицу времени коэффициент T необходимо умножить на относительную скорость частиц или на

число $\left(\frac{kI}{k}\right)^2$. В результате находим :

$$T_1 = \frac{kI^2}{k^2} T = \frac{4 k I^2}{(k + \sqrt{2 k^2 - kI^2})^2}$$

В результате, находим :

$$R + T_1 = \frac{\left(1 - \frac{kI}{k}\right)^2}{\left(1 + \frac{kI}{k}\right)^2} + \frac{4\left(\frac{kI}{k}\right)^2}{\left(1 + \frac{kI}{k}\right)^2} = 1$$

Построим общий график коэффициентов отражения и прозрачности.

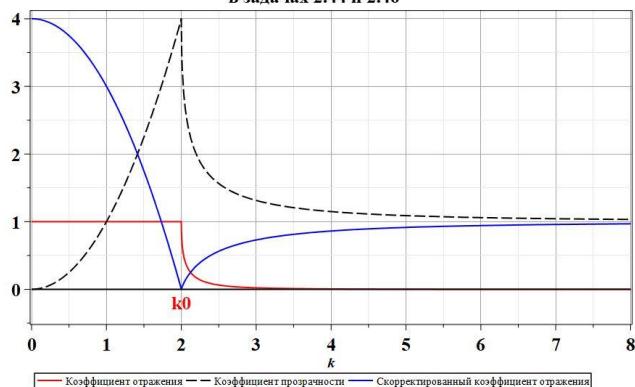
$$> R := (k, k0) \rightarrow \text{piecewise}(0 \leq k \text{ and } k < k0, 1, k \geq k0, (k - \sqrt{k^2 - k0^2}) / (k + \sqrt{k^2 - k0^2}), 0)^2; \\ R := (k, k0) \rightarrow \text{piecewise}\left(0 \leq k \text{ and } k < k0, 1, k0 \leq k, \frac{k - \sqrt{k^2 - k0^2}}{k + \sqrt{k^2 - k0^2}}, 0\right)^2 \quad (4)$$

$$> T := (k, k0) \rightarrow \text{piecewise}(0 \leq k \text{ and } k < k0, 2 * k / k0, k \geq k0, 2 * k / (k + \sqrt{k^2 - k0^2}), 0)^2; \\ T1 := (k, k0) \rightarrow \text{piecewise}(0 \leq k \text{ and } k < k0, 2 * \sqrt{k0^2 - k^2} / k0, k \geq k0, 2 * \sqrt{k^2 - k0^2} / (k + \sqrt{k^2 - k0^2}), 0)^2; \\ T := (k, k0) \rightarrow \text{piecewise}\left(0 \leq k \text{ and } k < k0, \frac{2 k}{k0}, k0 \leq k, \frac{2 k}{k + \sqrt{k^2 - k0^2}}, 0\right)^2 \\ T1 := (k, k0) \rightarrow \text{piecewise}\left(0 \leq k \text{ and } k < k0, \frac{2 \sqrt{k0^2 - k^2}}{k0}, k0 \leq k, \frac{2 \sqrt{k^2 - k0^2}}{k + \sqrt{k^2 - k0^2}}, 0\right)^2 \quad (5)$$

$$> k0 := 2; \\ k0 := 2 \quad (6)$$

$$> \text{picRTT} := \text{plot}([R(k, k0), T(k, k0), T1(k, k0), 0], k=0..4*k0, \text{color}=[red, black, blue, black], \text{thickness}=2, \text{linestyle}=[solid, dash, solid, solid], \text{frm}, \text{legend}=[\text{"Коэффициент отражения"}, \text{"Коэффициент прозрачности"}, \text{"Скорректированный коэффициент отражения"}, "], \text{title}=\text{"Общие графики коэффициентов отражения и прозрачности барьера\n в задачах 2.44 и 2.46 "}; \\ \text{txtk0} := \text{textplot}([[2, -0.2, "k0"]], \text{frm}, \text{color}=red); \\ > \text{display}(\text{picRTT}, \text{txtk0}, \text{view}=[0..4*k0, -0.5..4.1]);$$

Общие графики коэффициентов отражения и прозрачности барьера
в задачах 2.44 и 2.46



Анализ задачи

- Коэффициент отражения в случае $E < U_0$ при всех значениях энергии равен 1. Хотя частицы частично проникают в подбарьерную область (наподобие электромагнитных волн), тем не менее, они все возвращаются к источнику и регистрируются детектором D1 (на $-\infty$).
- Коэффициент прозрачности при $E < U_0$ дает лишь интенсивность частиц, проникающих в подбарьерную область. Детектор D2 в этом случае частицы не регистрирует.
- В случае $E > U_0$ часть частиц отражается и регистрируется детектором D1, а часть проходит к детектору D2. Коэффициенты отражения R и прозрачности T зависят в этом случае от энергии налетающей частицы. Коэффициент R определяет интенсивность потока частиц (число частиц в единицу времени), которые регистрируются датчиком D1. Коэффициент T описывает число частиц, пересекающих барьер. Для того, чтобы вычислить число частиц, регистрируемых датчиком D2 коэффициент T необходимо скорректировать, учитывая, что скорость частиц в забарьерной области меньше. Скорректированный коэффициент прозрачности получается умножением T на квадрат отношения скоростей частиц перед барьером и за ним. Поскольку волновое число связано с импульсом частицы формулой: $p = \hbar k$ и $p_1 = \hbar k_1$, то отношение скоростей частиц равно отношению волновых чисел, поэтому: $T_1 = (k_1/k)^2 T$.
- При увеличении энергии при условии $E > U_0$ коэффициент отражения убывает и стремится к нулю. Коэффициент прозрачности T_1 при этом стремится к 1.

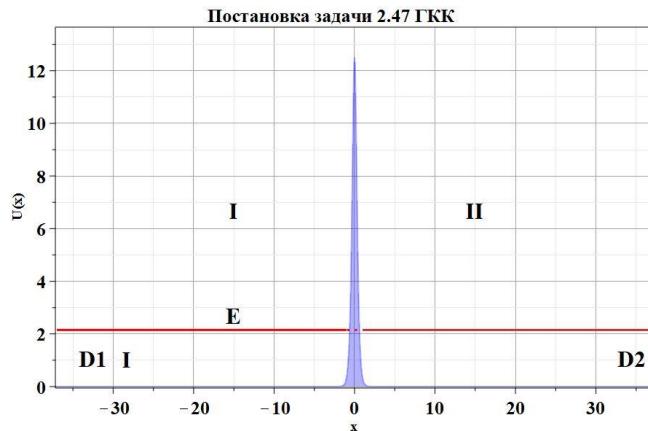
Задача 2.47 ГКК

2.47. Определить коэффициенты прохождения и отражения частиц в случае б-функционального потенциала $U(x) = \alpha b(x)$ (рис. 11). Рассмотреть предельные случаи $E \rightarrow \infty$ и $E \rightarrow 0$.

Обсудить аналитические свойства амплитуд отражения $A(E)$ и прохождения $B(E)$ частиц как функций комплексной переменной E . Убедиться, что точки $E = 0$ и $E = \infty$ являются точками ветвления этих функций. Проведя в плоскости комплексной переменной E разрез от точки $E = 0$ вдоль вещественной полуполосы $E > 0$, найти особенности функций $A(E)$ и $B(E)$ на первом, так называемом физическом, и других листах их римановой поверхности (физический лист фиксируется условием, что фаза точек E на вещественной полуполосе $E > 0$ сверху равна нулю). Показать, что такими особенностями являются полюсы, и установить соответствие между положением полюсов и уровнями дискретного спектра.

Строим графическое изображение постановки задачи.

```
> h1:=-0.025;w1:=5;xD1:=-35;xD2:=35;
> picU21:=plot(U2(x,2.5,0),x=-45..45,frm,color=blue,filled=true,thickness=2,transparency=0.7,title="Постановка
задачи 2.47 ГКК",labels=[["x","U(x)"],view=[-37..37,0..13.6]):
picE1:=plot(2.15,x=-37..-1,frm,color=red,thickness=3):
picE11:=plot(2.15,x=-0.9..-1.0,frm,color=red,thickness=3,linestyle=dot):
picE12:=plot(2.15,x=1..37,frm,color=orange,thickness=3):
txtDI:=textplot([[xD1+6.7,1.05,"I"],[xD1+2.5,1.075,"D1"],[xD2-0.5,1.055,"D2"],[-15,2.7,"E"],[-15,6.7,"I"],[15,
6.7,"II"]],color=black,font=[TIMES,BOLD,25]):
BK1:=display(picU21,txtDI,picE1,picE11,picE12);
```



Волновое число в обеих зонах I (перед барьером) и II (за барьером) одно и то же:

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0 \text{ и } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0$$

Уравнения для волновых функций примут одинаковый вид:

$$\begin{array}{ll} \text{Зона I} & \text{Зона II} \\ \psi_I(x; E)'' + k^2 \psi_I(x; E) = 0 & \psi_{II}(x; E)'' + k^2 \psi_{II}(x; E) = 0 \end{array}$$

На бесконечности имеем стандартные граничные условия, которые дают общее решения в зоне I:

$$\psi_I(x; E) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

и в зоне II

$$\psi_{II}(x; E) = C e^{ikx}$$

Границные условия в точке $x=0$ будут соответствовать условию спивки для δ -образного потенциала:

$$\psi_I(0; E) = \psi_{II}(0; E)$$

$$\frac{d}{dx} \psi_{II}(0; E) - \frac{d}{dx} \psi_I(0; E) - \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi_{II}(0; E) = 0$$

Отсюда находим:

$$A + B = C$$

$$ik(A - B) - ikC = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} C$$

Для комплексных коэффициентов отражения и прозрачности имеем:

$$1 + r = t$$

$$1 - r = \left(1 - i \frac{2m\alpha}{k\hbar^2}\right) t$$

Отсюда находим:

$$2 = \left(2 - i \frac{2m\alpha}{k\hbar^2}\right) t$$

и при

$$t = \frac{1}{1 - i \frac{m\alpha}{k\hbar^2}}$$

Соответственно, находим:

$$r = t - 1 = \frac{i \frac{m\alpha}{k\hbar^2}}{1 - i \frac{m\alpha}{k\hbar^2}}$$

Вычисляем коэффициенты отражения и прозрачности:

$$R = |r|^2 = \frac{(m\alpha)^2}{k^2 \hbar^4 + m^2 \alpha^2}$$

$$T = |t|^2 = \frac{k^2 \hbar^4}{k^2 \hbar^4 + m^2 \alpha^2}$$

Обозначим $k_0 = \frac{m\alpha}{\hbar^2}$. Тогда эти выражения можно записать в таком виде:

$$R = \frac{k\theta^2}{k^2 + k\theta^2}, \quad T = \frac{k^2}{k^2 + k\theta^2}$$

Проверяем: $R + T = 1$ – суммарное число частиц, излучаемых источником в единицу времени равно числу частиц, регистрируемых детекторами D1 (R) и D2 (T) в единицу времени.

> $R := (\mathbf{k}, \mathbf{k}0) \rightarrow \mathbf{k}0^2 / (\mathbf{k}^2 + \mathbf{k}0^2)$;

$$R := (\mathbf{k}, \mathbf{k}0) \rightarrow \frac{k\theta^2}{k^2 + k\theta^2} \quad (7)$$

> $T := (\mathbf{k}, \mathbf{k}0) \rightarrow \mathbf{k}^2 / (\mathbf{k}^2 + \mathbf{k}0^2)$;

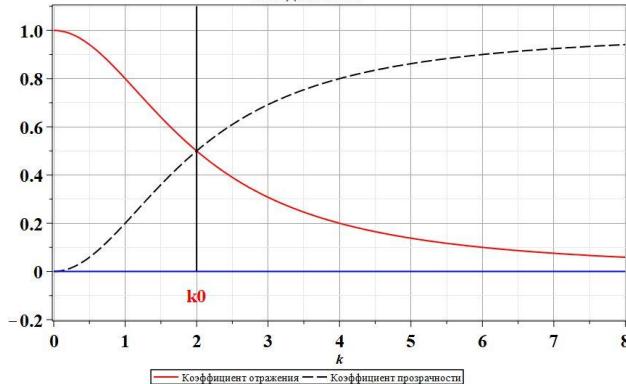
$$T := (\mathbf{k}, \mathbf{k}0) \rightarrow \frac{k^2}{k^2 + k\theta^2} \quad (8)$$

> $\mathbf{k}0 := 2$;

$$k0 := 2 \quad (9)$$

```
> picRTTd:=plot([R(k,k0), T(k,k0), 0], k=0..4*k0, color=[red, black, blue, black], thickness=2, linestyle=[solid, dash, solid, solid], frm, legend=["Коэффициент отражения", "Коэффициент прозрачности", "", ""], title="Общие графики коэффициентов отражения и прозрачности барьера\nв задаче 2.47"):
txtk0:=textplot([[2, -0.1, "k0"]], frm, color=red):
Vk0:=line([[k0, 0], [k0, 1.1]], color=black, thickness=2):
V0:=CURVES([[2., 0.], [2., 1.1]], COLOUR(RGB, 0., 0., 0.), THICKNESS(2))
> display(picRTTd, txtk0, Vk0, view=[0..4*k0, -0.2..1.1]);
```

Общие графики коэффициентов отражения и прозрачности барьера
в задаче 2.47



Анализ задачи

- При всех энергиях часть частиц отражается от данного потенциала и регистрируется детектором D1, а часть проходит к детектору D2. Коэффициенты отражения R и прозрачности T зависят в этом случае от энергии налетающей частицы. Коэффициент R определяет интенсивность потоков частиц (число частиц в единицу времени), которые регистрируются датчиком D1. Коэффициент T описывает число частиц, пересекающих барьер. Поскольку перед барьером и за ним скорости частиц одинаковы, то корректировать коэффициент отражения нет необходимости. Это означает, что T определяет число частиц, регистрируемых датчиком D2 в единицу времени.
- При увеличении энергии коэффициент отражения убывает и стремится к нулю. Коэффициент прозрачности T при этом стремится к 1.

Задача 2.48 ГКК

2.48. Найти коэффициент прохождения частиц через прямоугольный потенциальный барьер (рис. 12)

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \text{ и } x > a, \\ U_0, & 0 < x < a \quad (U_0 > 0). \end{cases}$$

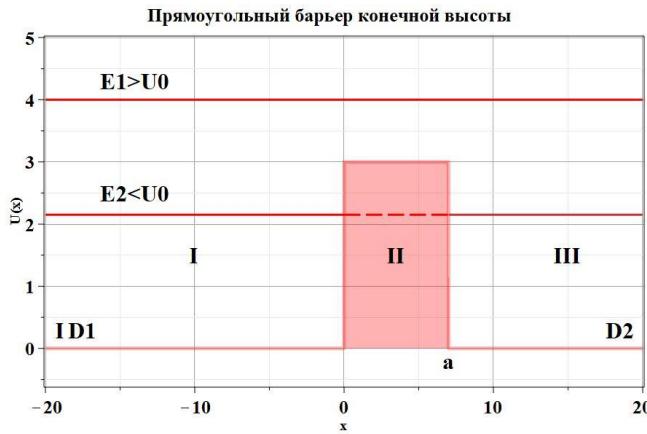
Специально обсудить следующие частные случаи:

- a) $E \rightarrow \infty$ (фактически $E \gg U_0$);
- б) случай барьера малой прозрачности $(U_0 - E)ma^2/\hbar^2 \gg 1$;
- в) $E \rightarrow 0$ (фактически $E \ll ma^2U_0/\hbar^2$ и $E \ll U_0$);
- г) $ma^2U_0/\hbar^2 \ll 1$ и $ma^2E/\hbar^2 \ll 1$.

В последнем случае сравнивать с результатом предыдущей задачи.

Графическая постановка задачи

```
> h1:=-0.25; w1:=1; xD1:=-20; xD2:=19;
> picU33:=plot(U3(x, 0, 7, 0, 3), x=-20..20, frm, color=red, filled=true, thickness=5, transparency=0.7, title=
"Прямоугольный барьер конечной высоты", labels=[["x", "U(x)"], view=[-20..20, -0.6..5]]:
picE1:=plot(2.15, x=-20..0, frm, color=red, thickness=3):
picE13:=plot(4, x=-20..20, frm, color=red, thickness=3):
picE11:=plot(2.15, x=0..7.0, frm, color=red, thickness=3, linestyle=dash):
picE12:=plot(2.15, x=7..20, frm, color=orange, thickness=3):
txtD1:=textplot([[xD1+1, 0.3, "I"], [xD1+2.5, 0.3, "D1"], [xD2-0.5, 0.3, "D2"], [-14, 4.3, "E1>U0"], [-14, 2.5, "E2<U0"], [-10, 1.5, "I"], [3.5, 1.5, "II"], [15, 1.5, "III"], [7, -0.2, "a"]], color=black, font=[TIMES, BOLD, 25]):
BK2:=display(picU33, txtD1, picE1, picE11, picE12, picE13);
```



Вариант $E < U_0$

Волновое число в зонах I (перед барьером) и III (за барьером):

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0 \text{ и } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0$$

Волновое число в зоне II (подбарьерная зона):

$$kI^2 = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2} > 0 \text{ и } kI = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}} > 0$$

$$kI^2 = k0^2 - k^2, \quad k0 = \sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2}}$$

Уравнения для волновых функций примут такой вид:

Зоны I и III	Зона II
$\psi_I''(x; E) + k^2 \psi_I(x; E) = 0,$	$\psi_{II}''(x; E) - kI^2 \psi_{II}(x; E) = 0,$
$\psi_{III}''(x; E) + k^2 \psi_{III}(x; E) = 0$	

Границные условия теперь должны иметь такой вид:

$$\psi_I = A e^{ikx} + B e^{-ikx}, \quad \psi_{III} = C e^{ikx}$$

Эти соотношения определяют вид решений в зонах I и III. Общее решение в зоне II будет таким :

$$\psi_{II} = F e^{kI \cdot x} + H e^{-kI \cdot x}$$

Для определения коэффициентов волновых функций используем условия сингулярности в двух точках $x = 0$ и $x = a$.

Эти условия состоят из равенства самих волновых функций в этих точках и их производных :

$$\psi_I(0; E) = \psi_{II}(0; E), \quad \psi_I'(0; E) = \psi_{II}'(0; E)$$

$$\psi_{II}(a; E) = \psi_{III}(a; E), \quad \psi_{II}'(a; E) = \psi_{III}'(a; E).$$

Эти условия приводят к системе из четырех алгебраических уравнений. Имеем :

$$A + B = F + H, \quad ik(A - B) = kI(F - H),$$

$$C e^{ika} = F e^{kIa} + H e^{-kIa}, \quad ikC e^{ika} = kI(F e^{kIa} - H e^{-kIa})$$

Введем как и раньше комплексные коэффициенты отражения $r = \frac{B}{A}$ и прозрачности $t = \frac{C}{A}$.

Для остальных коэффициентов введем обозначения $f = \frac{F}{A}$ и $h = \frac{H}{A}$.

Тогда эта система примет такой вид :

$$1 + r = f + h, \quad 1 - r = -i \frac{kI}{k} (f - h),$$

$$t e^{ika} = f e^{kIa} + h e^{-kIa}, \quad ikt e^{ika} = kI(f e^{kIa} - h e^{-kIa}).$$

Решение этой системы вручную достаточно громоздко.
Поэтому получим его с помощью системы Maple.

Записываем систему уравнений в виде отдельных уравнений

```

> Eq1:=1+r-f-h;
Eq2:=1-r+I*k1*(f-h)/k;
Eq3:=t*exp(I*k*a)-f*exp(k1*a)-h*exp(-k1*a);
Eq4:=t*exp(I*k*a)+I*k1*(f*exp(k1*a)-h*exp(-k1*a))/k;
Eq1 := 1 + r - f - h
Eq2 := 1 - r +  $\frac{Ik1(f-h)}{k}$ 
Eq3 :=  $t e^{ika} - f e^{ika} - h e^{-ika}$ 
Eq4 :=  $t e^{ika} + \frac{Ik1(f e^{ika} - h e^{-ika})}{k}$  (11)

```

Используем функцию solve() для решения системы алгебраических уравнений

```

> Sol:=solve([Eq1,Eq2,Eq3,Eq4],[r,t,f,h]);
Sol :=  $\left[ \begin{array}{l} r = \frac{I(e^{ika}k^2 + e^{ika}kl^2 - e^{-ika}k^2 - e^{-ika}kl^2)}{-2e^{ika}kk1 - 2e^{-ika}kk1 + Ie^{ika}k^2 - Ie^{ika}kl^2 - Ie^{-ika}k^2 + Ie^{-ika}kl^2}, t = \\ \frac{4k1e^{ika}e^{-ika}k}{e^{ika}(-2e^{ika}kk1 - 2e^{-ika}kk1 + Ie^{ika}k^2 - Ie^{ika}kl^2 - Ie^{-ika}k^2 + Ie^{-ika}kl^2)}, f = \\ \frac{2e^{-ika}k(1k + k1)}{-2e^{ika}kk1 - 2e^{-ika}kk1 + Ie^{ika}k^2 - Ie^{ika}kl^2 - Ie^{-ika}k^2 + Ie^{-ika}kl^2}, h = \\ \frac{2e^{ika}k(1k - k1)}{-2e^{ika}kk1 - 2e^{-ika}kk1 + Ie^{ika}k^2 - Ie^{ika}kl^2 - Ie^{-ika}k^2 + Ie^{-ika}kl^2} \end{array} \right] \quad (12)$ 

```

Выделяем нужные нам решения для r и t:

```

> rsol:=subs(Sol[1],r);
rsol :=  $\frac{I(e^{ika}k^2 + e^{ika}kl^2 - e^{-ika}k^2 - e^{-ika}kl^2)}{-2e^{ika}kk1 - 2e^{-ika}kk1 + Ie^{ika}k^2 - Ie^{ika}kl^2 - Ie^{-ika}k^2 + Ie^{-ika}kl^2} \quad (13)$ 

```

```

> tsol:=subs(Sol[1],t);
tsol :=  $-\frac{4k1e^{ika}e^{-ika}k}{e^{ika}(-2e^{ika}kk1 - 2e^{-ika}kk1 + Ie^{ika}k^2 - Ie^{ika}kl^2 - Ie^{-ika}k^2 + Ie^{-ika}kl^2)} \quad (14)$ 

```

Упрощаем решения

```

> srsol:=subs(k1=sqrt(K0^2-k^2),simplify(rsol));
srsol :=  $\frac{I(e^{2\sqrt{K0^2-k^2}a}-1)K0^2}{(1k^2-I(K0^2-k^2)-2\sqrt{K0^2-k^2}k)e^{2\sqrt{K0^2-k^2}a}-1k^2+I(K0^2-k^2)-2\sqrt{K0^2-k^2}k} \quad (15)$ 

```

```

> stsol:=subs(k1=sqrt(K0^2-k^2),simplify(tsol));
stsol :=  $-\frac{4\sqrt{K0^2-k^2}e^{-a(1k-\sqrt{K0^2-k^2})}k}{(1k^2-I(K0^2-k^2)-2\sqrt{K0^2-k^2}k)e^{2\sqrt{K0^2-k^2}a}-1k^2+I(K0^2-k^2)-2\sqrt{K0^2-k^2}k} \quad (16)$ 

```

Находим коэффициенты отражения R и прозрачности T

Заметим, что перед барьером и за барьером потенциальная энергия равна нулю. Поэтому скорость частиц в обеих зонах одинакова. Поэтому не требуется корректировки коэффициента отражения, для вычисления скорости регистрации частиц в датчике D2.

Вычисления с помощью Maple можно провести несколькими способами. Можно явно задать функции R и T. Сначала записываем явно знаменатель выражения для R:

```

> Z:=(k,K0,a)->sqrt(4*k^2*(K0^2-k^2)*(exp(2*sqrt(K0^2-k^2)*a)+1)^2+(exp(2*sqrt(K0^2-k^2)*a)-1)^2*(2*k^2-K0^2)^2);
Z := (k, K0, a) →  $\sqrt{4k^2(K0^2-k^2)(e^{2\sqrt{K0^2-k^2}a}+1)^2+(e^{2\sqrt{K0^2-k^2}a}-1)^2(2k^2-K0^2)^2} \quad (17)$ 

```

А теперь определяем функцию R явно

```

> R:=(k,K0,a)->evalf((exp(2*sqrt(K0^2-k^2)*a)-1)*K0^2/Z(k,K0,a))^2;
R := (k, K0, a) → evalf( $\left(\frac{(e^{2\sqrt{K0^2-k^2}a}-1)K0^2}{Z(k, K0, a)}\right)^2 \quad (18)$ )

```

Можно скопировать полученные результаты из srsol и stsol. Результаты будут одинаковы.

```

> Rs:=(k,K0,a)->evalf(evalc(abs(I*(exp(2*sqrt(K0^2-k^2)*a)-1)*K0^2/((I*k^2-I*(K0^2-k^2)-2*k*sqrt(K0^2-k^2))*exp(2*sqrt(K0^2-k^2)*a)-I*k^2+I*(K0^2-k^2)-2*k*sqrt(K0^2-k^2))))^2;
Rs := (k, K0, a) → evalf $\left(\left(\frac{I(e^{2\sqrt{K0^2-k^2}a}-1)K0^2}{(1k^2-I(K0^2-k^2)-2k\sqrt{K0^2-k^2})e^{2\sqrt{K0^2-k^2}a}-1k^2+I(K0^2-k^2)-2k\sqrt{K0^2-k^2}}\right)\right)^2 \quad (19)$ 

```

```

> T:=(k,K0,a)->evalf(evalc(abs(-4*sqrt(K0^2-k^2)*exp(-a*(I*k-sqrt(K0^2-k^2)))*k/((I*k^2-I*(K0^2-k^2)-2*k*sqrt(K0^2-k^2))*exp(2*sqrt(K0^2-k^2)*a)-I*k^2+I*(K0^2-k^2)-2*k*sqrt(K0^2-k^2))))^2;
T := (k, K0, a) → evalf $\left(\left(-\frac{4\sqrt{K0^2-k^2}e^{-a(1k-\sqrt{K0^2-k^2})}k}{(1k^2-I(K0^2-k^2)-2k\sqrt{K0^2-k^2})e^{2\sqrt{K0^2-k^2}a}-1k^2+I(K0^2-k^2)-2k\sqrt{K0^2-k^2}}\right)\right)^2 \quad (20)$ 

```

```

[ Полезная проверка правильного задания функции
> R(1,2,2);
Rs(1,2,2);
T(1,2,2);
0.9970636012
0.9970636004
0.002936399289
(21)

```

```

[ Создаем подписи цвета к рисункам
> Lg:=sprintf("a=%3.1f",0.5),seq(sprintf("a=%3.1f",a),a=1..5);
Clr:=[brown,red,coral,magenta,"DarkGreen",blue];
Lg := "a=0.5", "a=1.0", "a=2.0", "a=3.0", "a=4.0", "a=5.0"
Clr := [ brown, red, coral, magenta, "DarkGreen", blue ]
(22)

```

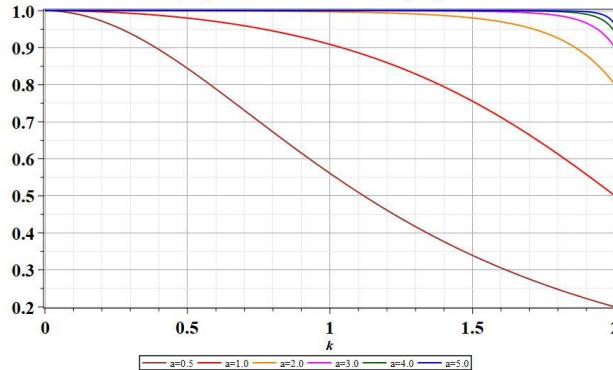
Вывод на экран графиков $R(k,k0,a)$ для различных значений ширины ямы

```

> picRa:=plot([R(k,2,0.5),R(k,2,1),R(k,2,2),R(k,2,3),R(k,2,4),R(k,2,5)],k=0..2,frm,color=Clr,legend=[Lg],
thickness=2,title="Коэффициент отражения как функция волнового числа\nпри различной толщине а барьера");

```

Коэффициент отражения как функция волнового числа
при различной толщине а барьера



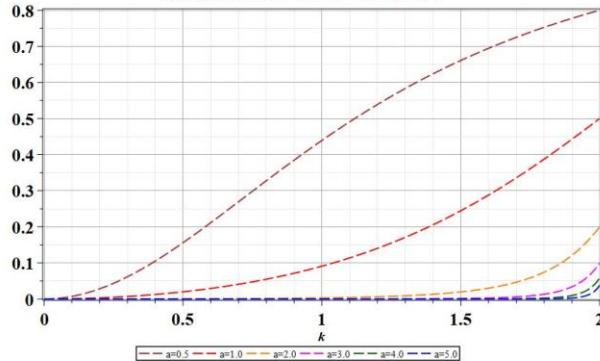
Вывод на экран графиков $T(k,k0,a)$ для различных значений ширины ямы

```

> picTa:=plot([T(k,2,0.5),T(k,2,1),T(k,2,2),T(k,2,3),T(k,2,4),T(k,2,5)],k=0..2,frm,color=Clr,legend=[Lg],
thickness=2,linestyle=dash,title="Коэффициент прозрачности как функция волнового числа\nпри различной толщине а барьера");

```

Коэффициент прозрачности как функция волнового числа
при различной толщине а барьера



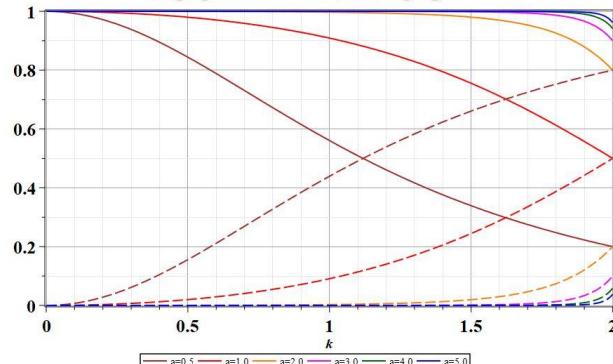
Вывод на экран объединенных графиков $R(k,k0,a)$ и $T(k,k0,a)$ для различных значений ширины ямы

```

> display(picRa,picTa);

```

Коэффициент отражения как функция волнового числа
при различной толщине а барьера



Графики демонстрируют эффект туннелирования. В отличие барьера в виде ступени (задачи 2.44 и 2.46) коэффициент прозрачности для энергий $E < 0$ не равен нулю. Это означает, что даже для таких энергий часть частиц проникает через барьер и регистрируется датчиком D2.

Вариант E>U0

Волновое число в зонах I (перед барьером) и III (за барьером):

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0 \text{ и } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0$$

Волновое число в зоне II (подбарьерная зона):

$$kl^2 = \frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2} > 0 \text{ и } kl = \sqrt{\frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}} > 0$$

$$kl^2 = k^2 - ko^2 > 0, \quad ko = \sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2}}$$

Уравнения для волновых функций примут такой вид:

Зоны I и III	Зона II
$\psi_I''(x; E) + k^2 \psi_I(x; E) = 0,$	$\psi_{II}''(x; E) + kl^2 \psi_{II}(x; E) = 0,$
$\psi_{III}''(x; E) + k^2 \psi_{III}(x; E) = 0$	

Границные условия теперь должны иметь такой вид:

$$\psi_I = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad \psi_{III} = Ce^{ikx}$$

Эти соотношения определяют вид решений в зонах I и III. Общее решение в зоне II будет таким:

$$\psi_{II} = Fe^{ikl x} + He^{-ikl x}$$

Для определения коэффициентов волновых функций используем условия сингулярных точек в точках $x = 0$ и $x = a$.

Эти условия состоят из равенства самих волновых функций в этих точках и их производных:

$$\psi_I(0; E) = \psi_{II}(0; E), \quad \psi_I'(0; E) = \psi_{II}'(0; E)$$

$$\psi_{II}(a; E) = \psi_{III}(a; E), \quad \psi_{II}'(a; E) = \psi_{III}'(a; E).$$

Эти условия приводят к системе из четырех алгебраических уравнений. Имеем:

$$A + B = F + H, \quad ik(A - B) = ikl(F - H),$$

$$Ce^{ika} = Fe^{ikla} + He^{-ikla}, \quad ikCe^{ika} = ikl(Fe^{ikla} - He^{-ikla})$$

Введем как и раньше комплексные коэффициенты отражения $r = \frac{B}{A}$ и прозрачности $t = \frac{C}{A}$.

Для остальных коэффициентов введем обозначения $f = \frac{F}{A}$ и $h = \frac{H}{A}$.

Тогда эта система примет такой вид:

$$1 + r = f + h, \quad 1 - r = \frac{kl}{k}(f - h),$$

$$te^{ika} = fe^{ikla} + he^{-ikla}, \quad te^{ika} = \frac{kl(fe^{ikla} - he^{-ikla})}{k}.$$

Решение этой системы вручную достаточно громоздко. Хотя эти вычисления можно проделать вручную, тем не менее, удобно получить решения с помощью системы Maple.

```
> Eq11:=1+r-f-h;
Eq21:=1-r-k1*(f-h)/k;
Eq31:=t*exp(I*k*a)-f*exp(I*k1*a)-h*exp(-I*k1*a);
Eq41:=t*exp(I*k*a)-k1*(f*exp(I*k1*a)-h*exp(-I*k1*a))/k;
Eq11 := 1 + r - f - h
Eq21 := 1 - r -  $\frac{kl(f - h)}{k}$ 
Eq31 := t eIka - f eika - h e-ika
Eq41 := t eika -  $\frac{kl(fe^{ika} - he^{-ika})}{k}$  (23)
```

```
> Sol1:=solve([Eq11,Eq21,Eq31,Eq41],[r,t,f,h]);
Sol1 := 
$$\left[ \begin{aligned} r &= \frac{e^{ika}k^2 - e^{ika}kl^2 - e^{-ika}k^2 + e^{-ika}kl^2}{e^{1ika}k^2 - 2e^{1ika}kkI + e^{1ika}kl^2 - e^{-1ika}k^2 - 2e^{-1ika}kkI - e^{-1ika}kl^2}, t = \\ &\quad \frac{4e^{1ika}e^{-1ika}kkI}{e^{1ka}(e^{1ka}k^2 - 2e^{1ka}kkI + e^{1ka}kl^2 - e^{-1ka}k^2 - 2e^{-1ka}kkI - e^{-1ka}kl^2)}, f = \\ &\quad \frac{2ke^{-1ika}(kl+k)}{e^{1ka}k^2 - 2e^{1ka}kkI + e^{1ka}kl^2 - e^{-1ka}k^2 - 2e^{-1ka}kkI - e^{-1ka}kl^2}, h \\ &= \frac{2e^{1ka}k(-kl+k)}{e^{1ka}k^2 - 2e^{1ka}kkI + e^{1ka}kl^2 - e^{-1ka}k^2 - 2e^{-1ka}kkI - e^{-1ka}kl^2} \end{aligned} \right] (24)$$

```

Выделяем нужные нам решения для r и t :

```
> rsol:=subs(Sol1[1],r);
rsol := 
$$\frac{e^{1ka}k^2 - e^{1ka}kl^2 - e^{-1ka}k^2 + e^{-1ka}kl^2}{e^{1ka}k^2 - 2e^{1ka}kkI + e^{1ka}kl^2 - e^{-1ka}k^2 - 2e^{-1ka}kkI - e^{-1ka}kl^2} (25)$$

```

$$tsol := -\frac{4 e^{ik a} e^{-ik l a} k k l}{e^{ik a} (e^{ik l a} k^2 - 2 e^{ik l a} k k l + e^{ik l a} k l^2 - e^{-ik l a} k^2 - 2 e^{-ik l a} k k l - e^{-ik l a} k l^2)} \quad (26)$$

Упрощаем решения

$$srsol := -\frac{2 i \sin(\sqrt{-K0^2 + k^2} a) K0^2}{(\sqrt{-K0^2 + k^2} + k)^2 e^{-1 \sqrt{-K0^2 + k^2} a} - e^{1 \sqrt{-K0^2 + k^2} a} (-\sqrt{-K0^2 + k^2} + k)^2} \quad (27)$$

$$stsol := \frac{4 e^{-ik a} k \sqrt{-K0^2 + k^2}}{(\sqrt{-K0^2 + k^2} + k)^2 e^{-1 \sqrt{-K0^2 + k^2} a} - e^{1 \sqrt{-K0^2 + k^2} a} (-\sqrt{-K0^2 + k^2} + k)^2} \quad (28)$$

Находим коэффициенты отражения R и прозрачности T

Заметим, что перед барьером и за барьером потенциальная энергия равна нулю. Поэтому скорость частиц в обеих зонах одинакова. Поэтому не требуется корректировки коэффициента отражения для вычисления скорости регистрации частиц в датчике D2.

Записываем явно знаменатель выражения для R и T:

$$Z1 := (k, K0, a) \rightarrow 2 * \sqrt{4 k^2 (k^2 - K0^2) \cos(\sqrt{k^2 - K0^2} a)^2 + (2 k^2 - K0^2)^2 \sin(\sqrt{k^2 - K0^2} a)^2} \quad (29)$$

$$R1 := (k, K0, a) \rightarrow evalf\left(\frac{2 |\sin(\sqrt{k^2 - K0^2} a)| K0^2}{Z1(k, K0, a)}\right)^2 \quad (31)$$

А теперь определяем функции R и T явно

$$T1 := (k, K0, a) \rightarrow evalf\left(\frac{4 \sqrt{k^2 - K0^2} k}{Z1(k, K0, a)}\right)^2 \quad (32)$$

Полезная проверка правильного задания функции для k>k0 и выполнения условия R+T=1

$$\begin{aligned} & R1(3, 2, 2); \\ & T1(3, 2, 2); \\ & R1(3, 2, 2) + T1(3, 2, 2); \\ & \quad 0.07736825384 \\ & \quad 0.9226317456 \\ & \quad 0.9999999994 \end{aligned} \quad (33)$$

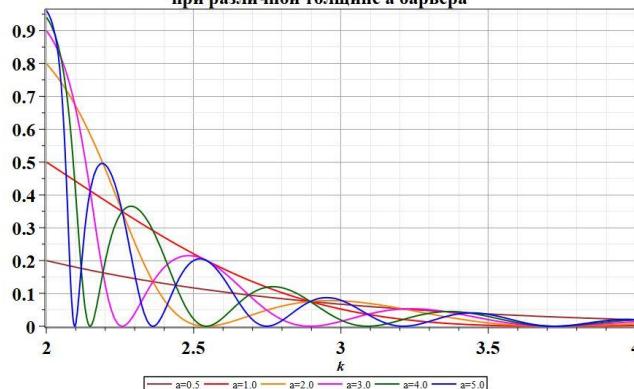
Создаем подписи цвета к рисункам

$$\begin{aligned} & Lg := sprintf("a=%3.1f", 0.5), seq(sprintf("a=%3.1f", a), a=1..5); \\ & Clr := [brown, red, coral, magenta, "DarkGreen", blue]; \\ & Vk0 := line([k0, 0], [k0, 1], color=black, thickness=4); \\ & Lg := "a=0.5", "a=1.0", "a=2.0", "a=3.0", "a=4.0", "a=5.0" \\ & Clr := [brown, red, coral, magenta, "DarkGreen", blue] \\ & Vk0 := CURVES([[2., 0.], [2., 1.]], COLOUR(RGB, 0., 0., 0.), THICKNESS(4)) \end{aligned} \quad (34)$$

Вывод на экран графиков R(k,k0,a) для различных значений ширины ямы

$$> picR1a := plot([R1(k, 2, 0.5), R1(k, 2, 1), R1(k, 2, 2), R1(k, 2, 3), R1(k, 2, 4), R1(k, 2, 5)], k=2..4, fmr, color=Clr, legend=[Lg], thickness=2, title="Коэффициент отражения как функция волнового числа\n при различной толщине а барьера");$$

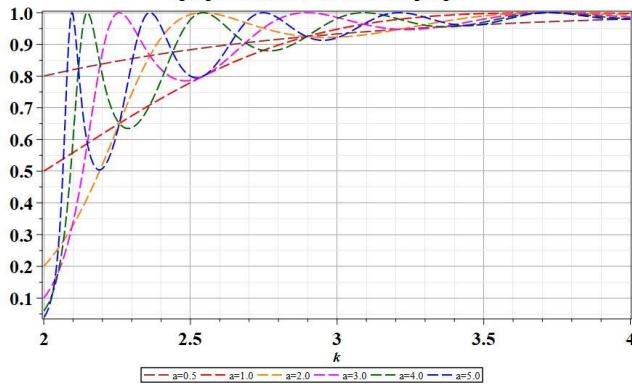
Коэффициент отражения как функция волнового числа
при различной толщине а барьера



Вывод на экран графиков T(k,k0,a) для различных значений ширины ямы

$$> pict1a := plot([T1(k, 2, 0.5), T1(k, 2, 1), T1(k, 2, 2), T1(k, 2, 3), T1(k, 2, 4), T1(k, 2, 5)], k=2..4, fmr, color=Clr, legend=[Lg], thickness=2, linestyle=dash, title="Коэффициент прозрачности как функция волнового числа\n при различной толщине а барьера");$$

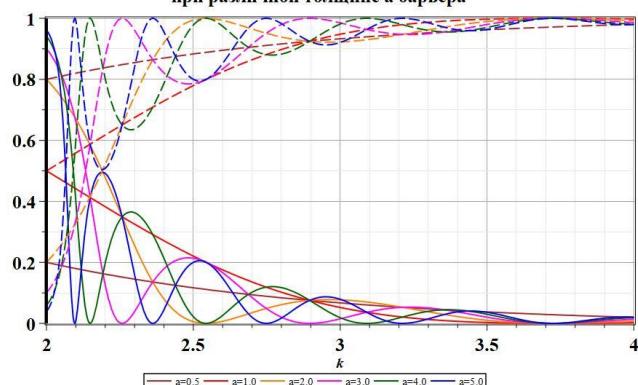
**Коэффициент прозрачности как функция волнового числа
при различной толщине а барьера**



Вывод на экран объединенных графиков $R(k, k_0, a)$ и $T(k, k_0, a)$ для различных значений ширины ямы

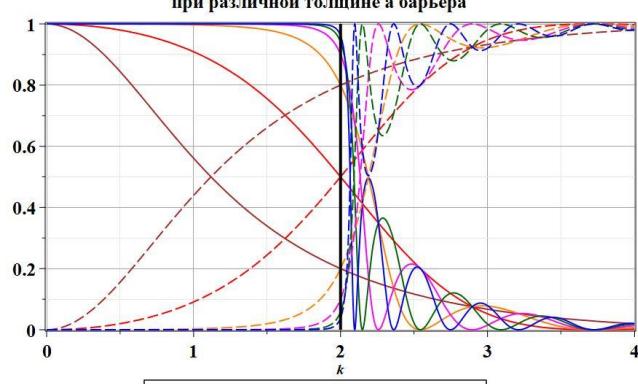
> display(picR1a,picT1a,Vk0);

**Коэффициент отражения как функция волнового числа
при различной толщине а барьера**



> display(picR1a,picT1a,picRa,picTa,Vk0);

**Коэффициент отражения как функция волнового числа
при различной толщине а барьера**



Данные графики дают полное решение задачи об отражении от барьера конечной высоты и ширины. Следует отметить, что функции R и T при пересечении значения $k=k_0$, которое соответствует энергии барьера U_0 , являются непрерывными. Это иллюстрируют совместные графики.

Анализ задачи

- Общая схема вычислений коэффициентов отражения и прозрачности остается такой же, как в предыдущей задаче. Отличие состоит в числе зон, в которых решать задачу приходится по отдельности. Границные условия на бесконечности и условия сшивки остаются такими же как в предыдущей задаче. Формально можно усложнить форму потенциального барьера, добавив новые области постоянства потенциальной энергии. При этом схема решений останется прежней. Увеличится число зон.
- В случае $E < U_0$ наблюдаем эффект туннелирования частиц сквозь барьер. В классической механике это невозможно. В квантовом случае это выражается в том, что коэффициент прозрачности барьера не равен нулю и поток частиц, регистрируемый датчиком $D2$ ($x = -\infty$), отличен от нуля. Поскольку потенциальная энергия перед барьером и за ним одинакова и равна 0, то корректировки коэффициента прозрачности не требуется.
- Случай $E > U_0$ отличается от предыдущего только тем, что коэффициенты отражения и прозрачности начинают осциллировать в зависимости от значений энергии или волнового числа k . При определенных значениях коэффициент отражения обращается в ноль. Условием этого является соотношение:

$$a\sqrt{k^2 - k_0^2} = \pi n$$

- Функции $R(k)$ и $T(k)$ являются непрерывными в точке $k = k_0$.

Задача 2.48 ГКК

2.50. Найти значения энергий, при которых частицы не отражаются от потенциального барьера вида (рис. 13)

$$U(x) = a[\delta(x) + \delta(x-a)].$$

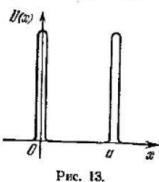


Рис. 13.

Найдите решение задачи самостоятельно. Постройте графики коэффициента отражения и прозрачности, используя Maple.
В качестве дополнения найдите уровни энергии в этой задаче, если они существуют.

Задача (Дополнительно)

1. Найти коэффициент отражения и прозрачности для потенциала:

$$U(x)=a\delta(x+a)+U_1(x), \quad U_1(x)=0, \quad x<0, \quad U_0, \quad x>0.$$

2. Найти дискретные состояния в яме, образованной δ -потенциалом при энергиях $E < U_0$, если они существуют.

```
> picU22:=plot([U2(x,2.5,-10),U3(x,0,40,0,4)],x=-45..45,frm,color=blue,filled=true,thickness=2,transparency=0.7,
title="Постановка задачи",labels=[["x","U(x)"],view=[-37..37,0..13.6]):
picE1:=plot(2.15,x=-40..-10.5,frm,color=red,thickness=3):
picE13:=plot(8,x=-40..40,frm,color=red,thickness=3):
picE11:=plot(2.15,x=-0.40..0,frm,color=red,thickness=3,linestyle=dash):
picE14:=plot(2.15,x=-10.5..-9.5,frm,color=magenta,thickness=3,linestyle=dash):
picE12:=plot(2.15,x=-9.5..0,frm,color=orange,thickness=3):
V11:=line([0,0],[0,13],color=black,thickness=3,linestyle=longdash):
txtDI:=textplot([-16,3.3,"E1<U0"],[-16,8.5,"E2>U0"],[16,4.5,"U0"],[-25,1.5,"I"],[-5,1.5,"II"],[15,1.5,"III"],
[7,-0.2,"a"]],color=black,font=[TIMES,BOLD,25]):
picE1:=plot(2.15,x=-37..-1,frm,color=red,thickness=3):
> picUEE:=display(picU22,picE1,picE11,picE12,picE13,picE14,txtDI,V11);
```

Постановка задачи

