А. Д. Жуковец
(ГГУ имени Ф. Скорины, Гомель)
Науч. рук. **В. Н. Капшай**, канд. физ.-мат. наук, доцент

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТОВ ПРОХОЖДЕНИЯ И ОТРАЖЕНИЯ ДЛЯ ПРЯМОУГОЛЬНОГО ПОТЕНЦИАЛА В СЛУЧАЕ ОТ –а ДО а

В классической механике прохождение частицы через потенциальный барьер возможно только в том случае, если ее полная энергия E не меньше высоты U_0 потенциального барьера. В квантовой механике движение частицы носит вероятностный характер, поэтому ее прохождение через потенциальный барьер описывают коэффициентами отражения R (нахождение в области пространства I с изменением направления движения на противоположное) и прохождения D (переход в область III) (рисунок 1).

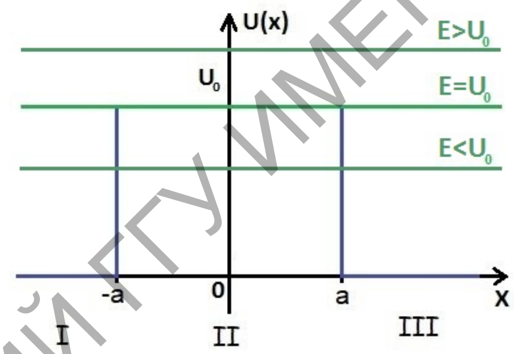

Рисунок 1 – График потенциального барьера при $E > U_0$, $E = U_0$, $E < U_0$

Для начала разберем случай с $E > U_0$ (рисунок 1). Запишем одномерное уравнение Шредингера для каждой из областей [1]:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi_I{}''(x) = E\Psi_I(x), \qquad x < -a,$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi_{II}{}''(x) + U_0(x)\Psi_{II}(x) = E\Psi_{II}(x), \qquad -a < x < a, \qquad (1)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi_{III}{}''(x) = E\Psi_{III}(x), \qquad x > a.$$

Используем условия сшивания:

$$\begin{cases} \Psi_I(-a) = \Psi_{II}(-a), \\ \Psi_I{}'(-a) = \Psi_{II}{}'(-a), \end{cases} \qquad \begin{cases} \Psi_{II}(a) = \Psi_{III}(a), \\ \Psi_{II}{}'(a) = \Psi_{III}{}'(a). \end{cases} \qquad (2)$$

Упростим выражения (1), умножив их на $-\frac{2m}{\hbar^2}$ и введя замены:

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2, \qquad \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E) = K^2,$$

тогда: $\Psi_I{}''(x) = -k^2\Psi_I(x), \Psi_{II}{}''(x) = -K^2\Psi_{II}(x), \Psi_{III}{}''(x) =$
$= -k^2\Psi_{III}(x)$.
Решения данных уравнений и первые производные от них имеют вид:

$$\Psi_I(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \qquad \Psi_I{}'(x) = Aike^{ikx} - Bike^{-ikx},$$
$$\Psi_{II}(x) = C_1e^{iKx} + C_2e^{-iKx}, \qquad \Psi_{II}{}'(x) = C_1iKe^{iKx} - C_2iKe^{-iKx},$$
$$\Psi_{III}(x) = De^{ikx}, \qquad \Psi_{III}{}'(x) = Dike^{ikx}.$$

Подставим полученные выражения в условия сшивания [2]:

$$\begin{cases} Ae^{-ika} + Be^{ika} = C_1e^{-iKa} + C_2e^{iKa}, \\ Aike^{-ika} - Bike^{ika} = C_1iKe^{-iKa} - C_2iKe^{iKa}, \\ C_1e^{iKa} + C_2e^{-iKa} = De^{ika}, \\ C_1iKe^{iKa} - C_2iKe^{-iKa} = Dike^{ika}. \end{cases} \qquad (3)$$

Решив данную систему, получим искомые коэффициенты. Однако нахождение коэффициентов прохождения и отражения способом, описываемым в большинстве учебников, является сложным и может привести к большому количеству ошибок. Поэтому используем матричный метод их определения.

Запишем два последних уравнения системы (3) в виде произведения матриц:

$$\begin{bmatrix} e^{iKa} & e^{-iKa} \\ iKe^{iKa} & -iKe^{-iKa} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{ika} & e^{-ika} \\ ike^{ika} & -ike^{-ika} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} D \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Введём замены:

$$M_1 = \begin{bmatrix} e^{iKa} & e^{-iKa} \\ iKe^{iKa} & -iKe^{-iKa} \end{bmatrix}, \qquad M_2 = \begin{bmatrix} e^{ika} & e^{-ika} \\ ike^{ika} & -ike^{-ika} \end{bmatrix}.$$

Найдем определитель матрицы M_1 и обратную матрицу ${M_1}^{-1}$:

$$detM_1 = -2iK,$$
$${M_1}^{-1} = \frac{1}{-2iK}\begin{bmatrix} -iKe^{-iKa} & -e^{-iKa} \\ -iKe^{iKa} & e^{iKa} \end{bmatrix}.$$

Теперь можно выразить коэффициенты C_1 и C_2:

$$\begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \end{bmatrix} = \frac{1}{-2iK}\begin{bmatrix} -iKe^{-iKa} & -e^{-iKa} \\ -iKe^{iKa} & e^{iKa} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} e^{ika} & e^{-ika} \\ ike^{ika} & -ike^{-ika} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} D \\ 0 \end{bmatrix} =$$
$$= {M_1}^{-1} \cdot M_2 \cdot \begin{bmatrix} D \\ 0 \end{bmatrix}. \qquad (4)$$

Запишем два первых уравнения системы (3) в виде произведения матриц:

$$\begin{bmatrix} e^{-ika} & e^{ika} \\ ike^{-ika} & -ike^{ika} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{-iKa} & e^{iKa} \\ iKe^{-iKa} & -iKe^{iKa} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \end{bmatrix}.$$

Введём замены:

$$M_3 = \begin{bmatrix} e^{-ika} & e^{ika} \\ ike^{-ika} & -ike^{ika} \end{bmatrix}, \qquad M_4 = \begin{bmatrix} e^{-iKa} & e^{iKa} \\ iKe^{-iKa} & -iKe^{iKa} \end{bmatrix}.$$

Найдем определитель матрицы M_3 и обратную матрицу ${M_3}^{-1}$:

$$detM_3 = -2ik,$$
$${M_3}^{-1} = \frac{1}{-2ik}\begin{bmatrix} -ike^{ika} & -e^{ika} \\ -ike^{-ika} & e^{-ika} \end{bmatrix}.$$

Выразим коэффициенты A и B, необходимые для определения коэффициента отражения R:

$$\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \frac{1}{-2ik}\begin{bmatrix} -ike^{ika} & -e^{ika} \\ -ike^{-ika} & e^{-ika} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} e^{-iKa} & e^{iKa} \\ iKe^{-iKa} & -iKe^{iKa} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \end{bmatrix} =$$
$$= {M_3}^{-1} \cdot M_4 \cdot \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \end{bmatrix}.$$

Подставляя в полученное выражение найденные ранее коэффициенты C_1 и C_2 (см. формулу (4)) получим:

$$\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = {M_3}^{-1} \cdot M_4 \cdot {M_1}^{-1} \cdot M_2 \cdot \begin{bmatrix} D \\ 0 \end{bmatrix}. \qquad (5)$$

Рассматривая случай с $E < U_0$ (рисунок 1), введем замены:

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2, \qquad \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E) = æ^2,$$

тогда: ${\Psi_{II}}''(x) = æ^2 \Psi_{II}(x)$.
Решение данного уравнения запишем в виде:

$$\Psi_{II}(x) = C_1 e^{-æx} + C_2 e^{æx}.$$

Первая производная:

$${\Psi_{II}}'(x) = -C_1 æ e^{-æx} + C_2 æ e^{æx}.$$

Остальные уравнения системы (2) останутся без изменений. Подставив полученные выражения в условия сшивания и проделав необходимые операции, получим выражение, аналогичное (5):

$$\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = {M_3}^{-1} \cdot M_4 \cdot {M_1}^{-1} \cdot M_2 \cdot \begin{bmatrix} D \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Только здесь матрицы ${M_1}^{-1}$ и M_4 будут иметь вид:

$${M_1}^{-1} = \frac{1}{2æ}\begin{bmatrix} æe^{æa} & -e^{æa} \\ æe^{-æa} & e^{-æa} \end{bmatrix}, \qquad M_4 = \begin{bmatrix} e^{æa} & e^{-æa} \\ -æe^{æa} & æe^{-æa} \end{bmatrix}.$$

Матрицы ${M_3}^{-1}$ и M_2 не претерпят изменений.

В случае $E = U_0$ (рисунок 1), скобка $(E - U_0)$ будет равняться нулю, вторая производная ${\Psi_{II}}''(x)$ также будет равняться нулю. Решением данного уравнения будет:

$$\Psi_{II}(x) = C_1 + C_2 x.$$

Первая производная:

$${\Psi_{II}}'(x) = C_2.$$

Здесь опять получаем аналогичное выражение вида:

$$\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = {M_3}^{-1} \cdot M_4 \cdot {M_1}^{-1} \cdot M_2 \cdot \begin{bmatrix} D \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Но матрицы ${M_1}^{-1}$ и M_4 будут уже иметь вид:

$${M_1}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & -a \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \qquad M_4 = \begin{bmatrix} 1 & -a \\ 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

В то время как матрицы ${M_3}^{-1}$ и M_2 не претерпят изменений.

Таким образом, чем меньше размеры, массы частиц, ширина потенциала и разность энергий $E - U_0$, тем больше вероятность прохождения частицы через барьер.

Литература

1. Балашов, В. В. Квантовая теория столкновений / В. В. Балашов. – М. : МАКС Пресс, 2012. – 292 с.

2. Criffiths, David J. Introduction to Quantum Mechanics / David J. Criffiths. – Prentice Hall. Upper Saddle. River, New Jersey, 1994. – 394 p.

А. Д. Жуковец
(ГГУ имени Ф. Скорины, Гомель)
Науч. рук. **В. Н. Капшай**, канд. физ.-мат. наук, доцент

МАТРИЧНЫЙ МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ КОЭФФИЦИЕНТОВ ПРОХОЖДЕНИЯ И ОТРАЖЕНИЯ ДЛЯ ПРЯМОУГОЛЬНОГО ПОТЕНЦИАЛА В СЛУЧАЕ ОТ 0 ДО a

Рассмотрим прохождение частицы через прямоугольный потенциальный барьер от 0 до а, чтобы определить коэффициенты прохождения и отражения в данном случае.