Отражение от одномерной симметричной потенциальной яме.

Задача: Найти коэффициент прохождения и коэффициент отражения для одномерной потенциальной ямы $U(x)=\begin{cases} 0, |x|>a \\ -U_{0,} |x|<a \quad (U_0>0) \end{cases}$ (рис. 1)

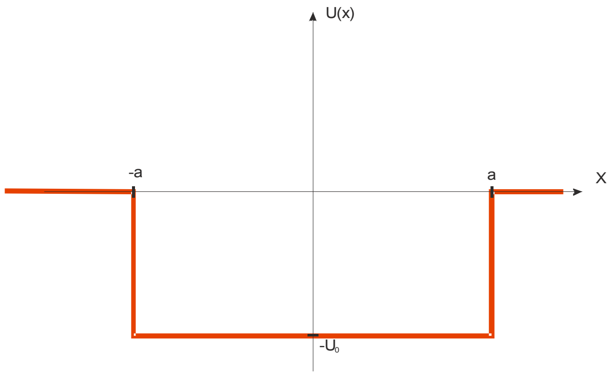

Рисунок 1: График U(x).

Необходимые утверждения из теории:

1. Волновая функция подчиняется стационарному уравнению Шредингера $\hat{H}\psi=E\psi$
$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\frac{d^2}{dx^2}+U(x)\right)\psi=E\psi$$
2. При $U=const$ решениями уравнения Шредингера являются:
    - для $E>U$ $\psi=e^{\pm ikx}$, $E-U=\dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$
    - для $E<U$ $\psi=e^{\pm \kappa x}$, $U-E=\dfrac{\hbar^2 \kappa^2}{2m}$
3. При «сшивании» решений для волновой функции, полученных в разных областях пространства необходима напрерывность и гладкость волновой функции (гладкость нарушается только на бесконечных скачках потенциала)
4. Временная зависимость волновой функции в состоянии с определённым значением энергии описывается экспонентой $e^{-iEt/\hbar}$ (нестационарное уравнение Шредингера по определению фиксирует знак $i\hbar\dfrac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi$), поэтому $k>0$ соответствует движению волны направо.
5. При неограниченном движении (решение в форме плоской волны) волновая функция Ce^{ikx} не нормирована на единичную полную вероятность. Удобно выразить поток частиц: вероятность прохождения частицы через площадку dS в интервал dt $j=\dfrac{dp}{dS\,dt}=\dfrac{|\psi|^2 dV}{dS\,dt}=|C|^2\dfrac{\hbar k}{m}$

Решение:

В этой задаче $E>0$, частицы делокализованы и обладают непрерывным спектром. Считаем для определённости, что источник частиц находится слева от потенциальной ямы. Решения уравнения Шредингера имеют форму бегущей волны. Слева от ямы (со стороны источника частиц) может присутствовать отражённая от ямы волна. Справа от ямы может быть только волна распространяющаяся от ямы. Можно выбрать нормировку, в которой падающая волна имеет единичную амплитуду.

Решение уравнения Шредингера в разных областях пространства:

при $x<-a$ $\psi=e^{ikx}+A e^{-ikx}$

при $-a<x<a$ $\psi=B_1 e^{ik'x}+B_2 e^{-ik'x}$

при $x>a$ $\psi=C e^{ikx}$

где $k=\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}$; $k'=\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E+U_0)}$

Записываем условия сшивки волновых функций на двух границах:

$$\begin{cases} e^{-ika}+A e^{ika}=B_1 e^{-ik'a}+B_2 e^{ik'a} \\ B_1 e^{ik'a}+B_2 e^{-ik'a}=C e^{ika} \\ k\left(e^{-ika}-A e^{ika}\right)=k'\left(B_1 e^{-ik'a}-B_2 e^{ik'a}\right) \\ k C e^{ika}=k'\left(B_1 e^{ik'a}-B_2 e^{-ik'a}\right) \end{cases}$$

Исключаем C

$$\begin{cases} e^{-ika}+A e^{ika}=B_1 e^{-ik'a}+B_2 e^{ik'a} \\ B_1 e^{ik'a}+B_2 e^{-ik'a}=\frac{k'}{k}\left(B_1 e^{ik'a}-B_2 e^{-ik'a}\right) \\ \frac{k}{k'}\left(e^{-ika}-A e^{ika}\right)=B_1 e^{-ik'a}-B_2 e^{ik'a} \end{cases}$$

Из второго уравнения $\frac{B_1}{B_2}=e^{-2ik'a}\frac{k+k'}{k'-k}$

Складывая и вычитая первое и третье уравнения получаем

$$\frac{e^{-ika}\left(1+\frac{k}{k'}\right)+A e^{ika}\left(1-\frac{k}{k'}\right)}{e^{-ika}\left(1-\frac{k}{k'}\right)+A e^{ika}\left(1+\frac{k}{k'}\right)}=\frac{B_1}{B_2}e^{-2ik'a}=e^{-4ik'a}\frac{k+k'}{k'-k}$$

$$\left(\frac{k'-k}{k'+k}\right)^2\frac{A+\frac{k'+k}{k'-k}e^{-2ika}}{A+\frac{k'-k}{k'+k}e^{-2ika}}=e^{-4ik'a}$$

Отсюда уже видно важное свойство: $A=0$ (отражённой волны нет) если $e^{-4ik'a}=1$ т. е. при $k(2\mathrm{a})=\pi n$. Отражения нет, если на длине ямы укладывается пол дины волны.

Общее решение для амплитуды отражённой волны имеет вид (обозначим $\alpha=\frac{k'-k}{k'+k}$

$0 \le \alpha < 1$, этот параметр тем больше чем глубже яма)

$$A = \alpha e^{-2ika} \frac{e^{-4ik'a} - 1}{\alpha^2 - e^{-4ik'a}} = \alpha e^{-2ika} \frac{\left(e^{-4ik'a} - 1\right)\left(\alpha^2 - e^{4ik'a}\right)}{\alpha^4 + 1 - 2\alpha^2 \cos(4k'a)} = \alpha e^{-2ika} \frac{\left(e^{-4ik'a} - 1\right)\left(\alpha^2 - e^{4ik'a}\right)}{(\alpha^2 - 1)^2 + 4\alpha^2 \sin^2(2k'a)}$$

Коэффициент отражения равен отношению потоков отражённых и падающих частиц и при выбранной нормировке падающего потока он оказывается равен

$$R = |A|^2 = AA^* = 2\alpha^2 \frac{1 - \cos(4k'a)}{(\alpha^2 - 1)^2 + 4\alpha^2 \sin^2(2k'a)}$$

Зависимости коэффициента отражения от $2k'a$ (ширина ямы $2a$) для некоторых значений параметра α построены на рисунке 2 ниже

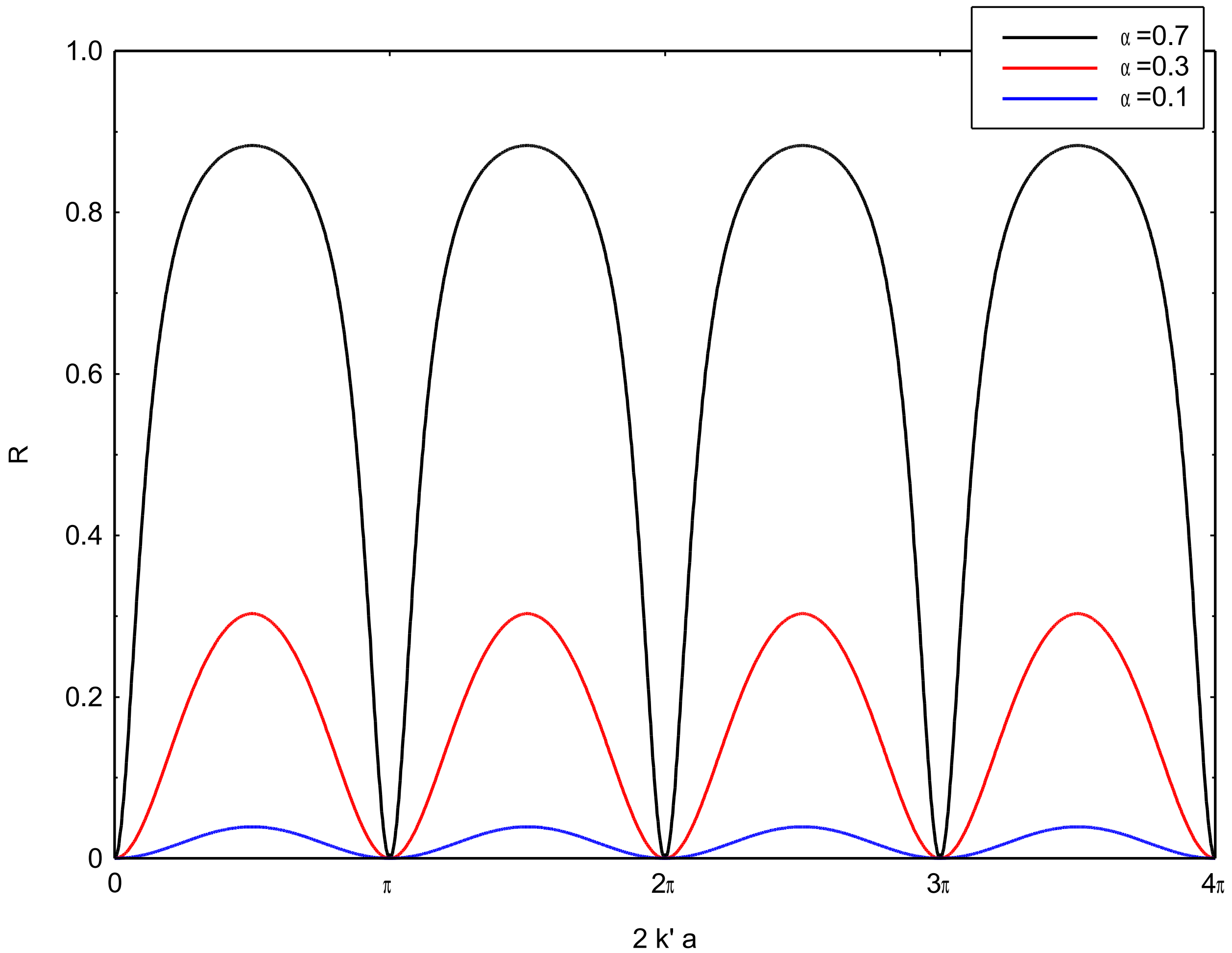

Рисунок 2: Зависимости коэффициента отражения от симметричной ямы.

Интересно отметить, что максимальное значение коэффициента отражения $R_{max} = \left(\frac{2\alpha}{1 - \alpha^2}\right)^2$ растёт с глубиной ямы.

Коэффициент прохождения (отношение потока падающих частиц к потоку частиц за ямой) $T = 1 - R$