

Глава 3

Одномерное уравнение Шрёдингера

§ 3.1. «Оправдание» одномерной модели

Из курса уравнений математической физики хорошо известно, что в случае, когда оператор Гамильтона не зависит от времени (консервативная система), временные и координатные переменные можно разделить. Итак, пусть поставлена формальная математическая задача:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}, t), \quad \Psi(\mathbf{r}, t)|_{t=0} = \Psi_0(\mathbf{r}). \quad (3.1)$$

В этом случае решение задачи Коши всегда можно представить в виде ряда (2.33):

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = U(t)\Psi_0(\mathbf{r}) = \sum_E a_E \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right)\psi_E(\mathbf{r}), \quad (3.2)$$

где функции $\psi_E(\mathbf{r})$ есть собственные функции *стационарного* уравнения Шрёдингера:

$$\hat{H}\psi_E(\mathbf{r}) = E\psi_E(\mathbf{r}), \quad (3.3)$$

а коэффициенты a_E — коэффициенты Фурье:

$$a_E = \int \psi_E^*(\mathbf{r})\Psi_0(\mathbf{r}) \, d\mathbf{r}.$$

Суммирование в формуле (3.2) проводится по *всем* решениям (состояниям) стационарного уравнения Шрёдингера.

Ясно, что в общем случае никакого аналитического решения уравнения (3.3) не существует. Поэтому представляет интерес рассмотреть простейшие случаи, когда можно сделать относительно общие выводы о свойствах решения стационарного уравнения Шрёдингера. Данное замечание прежде всего относится к так называемому одномерному уравнению, к которому мы приходим, если, например, оператор потенциальной энергии имеет вид

$$U(\mathbf{r}) = U_1(x) + U_2(y, z).$$

Заметим, что при этом и гамильтониан системы может быть также представлен в виде суммы двух операторов

$$\widehat{H}(\mathbf{r}) = \widehat{H}_1(x) + \widehat{H}_2(y, z),$$

где

$$\widehat{H}_1(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U_1(x), \quad \widehat{H}_2(y, z) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + U_2(y, z).$$

Очевидно, что операторы в сумме коммутируют между собой:

$$[\widehat{H}_1(x), \widehat{H}_2(y, z)] = 0.$$

Таким образом, волновая функция (3.2) получается в результате действия произведения двух операторов, каждый из которых определяет эволюцию по «своим» степеням свободы:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = U_1(t)U_2(t)\Psi_0(x, y, z), \quad \text{где } U_{1,2}(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\widehat{H}_{1,2}t\right).$$

Собственные функции гамильтониана в трехмерном стационарном уравнении (3.3) также можно искать, разделяя переменные, представив $\psi(\mathbf{r})$ в виде $\psi(\mathbf{r}) = \psi_1(x)\psi_2(y, z)$:

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{2m}\hat{p}_x^2 + U_1(x)\right)\psi_1(x) &= E_1\psi_1(x), \\ \left(\frac{1}{2m}\hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 + U_2(y, z)\right)\psi_2(y, z) &= E_2\psi_2(y, z), \\ E &= E_1 + E_2. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Таким образом, решение (3.2) может быть записано в виде

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{E_1, E_2} a_{E_1, E_2} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_1t\right)\psi_{E_1}(x) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_2t\right)\psi_{E_2}(y, z). \quad (3.5)$$

Естественно, решение одномерного уравнения Шрёдингера позволяет делать выводы только о свойствах движения, соответствующих *данной степени свободы*. Безусловно, анализ свойств решения одномерного уравнения Шрёдингера не может претендовать на обобщение для трехмерного случая, однако он полезен, поскольку, как мы увидим в дальнейшем, одномерное уравнение получается не только в таком тривиальном случае.

§ 3.2. Общий анализ решений одномерного уравнения Шрёдингера

В одномерном случае уравнение становится обыкновенным дифференциальным уравнением без первой производной. Обычно при-

нато коэффициент при старшей производной полагать равным единице:

$$\psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U(x))\psi(x) = 0. \quad (3.6)$$

Свойства решения уравнения (3.6) определяются свойствами потенциальной энергии, входящей в уравнение. Реальные физические потенциалы всегда непрерывны, поэтому можно сказать, что волновая функция также должна быть дважды непрерывно дифференцируема. Однако используемые *модельные* потенциалы могут быть разрывны, тогда и свойства волновой функции будут такими, чтобы ее вторая производная имела соответствующий разрыв.

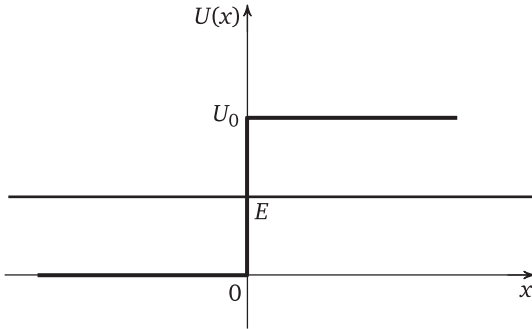


Рис. 2. Модель потенциальной энергии, имеющей разрыв первого рода в одномерном случае

Пусть модельный потенциал имеет разрыв I рода. Рассмотрим окрестность разрыва (см. рис. 2). Если $E < U_0$, тогда

$$\begin{aligned} \psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi(x) &= 0, & x < 0, \\ \psi''(x) - \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)\psi(x) &= 0, & x > 0. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Соответствующие решения имеют вид

$$\begin{aligned} \psi(x) &= A \exp(ikx) + B \exp(-ikx) & \text{при } x < 0, & \text{ где } k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E, \\ \psi(x) &= C \exp(\chi x) + D \exp(-\chi x) & \text{при } x > 0, & \\ & & \text{где } \chi^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E) = 0. & \end{aligned} \quad (3.8)$$

В силу непрерывности плотности потока вероятности имеем

$$j|_{x<0} = \frac{\hbar k}{m}(|A|^2 - |B|^2) = j|_{x>0} = 0,$$

следовательно, $|A| = |B|$ и решение слева от разрыва имеет вид стоячей волны:

$$\psi(x)|_{x<0} = 2|A| \cos(kx + \varphi).$$

Сама же волновая функция должна быть везде гладкой, т. е. один раз непрерывно дифференцируемой:

$$\psi(+0) = \psi(-0), \quad \psi'(+0) = \psi'(-0), \quad \text{или} \quad \frac{\psi'(+0)}{\psi(+0)} = \frac{\psi'(-0)}{\psi(-0)}. \quad (3.9)$$

Говорят, что непрерывна логарифмическая производная.

Рассмотрим теперь разрыв II рода, т. е. пусть $U_0 \rightarrow \infty$. В силу конечности волновой функции следует положить $C = 0$. Тогда из непрерывности логарифмической производной следует, что

$$D = -\frac{ik}{x}(A - B) = 0 \quad \text{при} \quad U_0 \rightarrow \infty.$$

Соответственно $\psi(0) = 0$ и

$$\psi(x)|_{x<0} = \tilde{A} \sin kx.$$

В этом случае требование гладкости заменяется условием

$$\psi(x)|_{x \geq 0} = 0.$$

Обычно математически задача определена на всей оси: $-\infty < x < \infty$, поэтому *граничные условия* определяют значение волновой функции на бесконечности. Есть две принципиальные возможности, которые соответствуют разным физическим постановкам задачи.

1. Условие $\psi(x)|_{x \rightarrow \infty} = 0$ означает равную нулю вероятность обнаружить частицу на бесконечности и соответствует финитному движению, или *связанному состоянию*.

2. Условие $\psi(x)|_{x \rightarrow \infty} = \text{const}$ означает, что частица может быть обнаружена с отличной от нуля вероятностью во всем пространстве, и соответствует инфинитному движению.

§ 3.3. Связанные состояния

Рассмотрим для простоты анализа задачу о связанных состояниях частицы в потенциальной яме с условиями $U(x)|_{x \rightarrow \pm\infty} = 0$, причем начало координат поместим в точку минимума энергии, т. е. $U(0) = U_{\min}$, как показано на рис. 3.

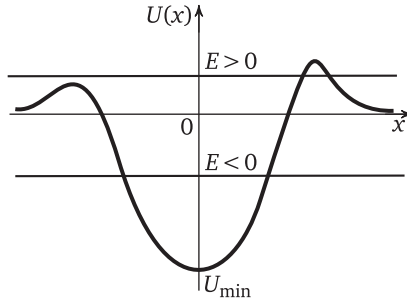


Рис. 3. Одномерная потенциальная яма, в которой существуют связанные состояния

Связанным состояниям отвечают значения энергии $E < 0$. Действительно, в уравнении Шрёдингера имеем

$$\frac{2m}{\hbar^2}(E - U)|_{x \rightarrow \pm\infty} = -\frac{2m}{\hbar^2}|E| = -\kappa^2,$$

поэтому «на бесконечности» волновая функция удовлетворяет нужным граничным условиям:

$$\psi(x)|_{x \rightarrow \pm\infty} \sim \exp(\mp \kappa x)|_{x \rightarrow \pm\infty} \rightarrow 0.$$

Если же $E > 0$, то на бесконечности получается осциллирующее решение, отвечающее инфинитному движению.

Получим сейчас одно простое, но очень важное для дальнейшего утверждение.

Поскольку одномерное стационарное уравнение Шрёдингера есть обыкновенное линейное дифференциальное уравнение второго порядка, оно имеет два линейно независимых решения: $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$. Иными словами,

$$\begin{aligned} \psi_1''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U(x))\psi_1(x) &= 0, \\ \psi_2''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U(x))\psi_2(x) &= 0. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Умножим первое уравнение на $\psi_2(x)$, а второе — на $\psi_1(x)$ и вычтем одно из другого:

$$\psi_1''(x)\psi_2(x) - \psi_2''(x)\psi_1(x) = 0. \quad (3.11)$$

Проинтегрируем полученное уравнение и получим

$$W(x) = \psi_1'(x)\psi_2(x) - \psi_2'(x)\psi_1(x) = \text{const}, \quad (3.12)$$

где $W(x)$ есть определитель Вронского.

Пусть $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$ описывают связанные состояния с энергией E , тогда на $\pm\infty$ волновые функции в силу граничных условий обращаются в нуль и $W(x) = 0$. Из равенства нулю определителя Вронского получаем

$$\psi_2(x) = \text{const} \cdot \psi_1(x), \quad (3.13)$$

т. е. волновые функции линейно зависимы. Это означает, что в одномерном случае энергетический спектр связанных состояний *обязательно невырожден*.

Спектр будет невырожденным и для инфинитного в одну сторону движения. В случае инфинитного движения в обе стороны (при $x \rightarrow \pm\infty$) спектр двукратно вырожден.

§ 3.4. Осцилляционная теорема

Пусть точки $x = x_1, x_2$ — решения уравнения $E - U(x) = 0$. Эти же точки в таком случае будут точками перегиба решения уравнения Шрёдингера (волновой функции). Области $x < x_1$ и $x > x_2$ недоступны для классической частицы (классически недоступные области), поэтому обычно точки $x_{1,2}$ называют классическими точками поворота. Заметим, что для потенциальной ямы, изображенной на рисунке, решение должно быть гладким. Из этого следует тривиальное замечание, что *обязательно* $E \geq U_{\min}$. Рассмотрим сначала $E = U_{\min}$, тогда обе точки перегиба совпадают, т. е. $x_1 = x_2 = 0$, и волновая функция должна удовлетворять условиям гладкости, т. е. должны быть выполнены одновременно два условия (3.9). Но в нашем случае получаем либо $\psi(-0) = \psi(+0)$, но $\psi'(-0) = -\psi'(+0)$, либо $\psi'(-0) = \psi'(+0)$, но $\psi(-0) = -\psi(+0)$. Иными словами, условие (3.9) может быть выполнено, только если $\psi(x) = 0$. Поэтому *обязательно* $E > U_{\min}$ и соответственно $x_1 < 0$ и $x_2 > 0$.

Обозначим через x_0 точку, для которой выполняется условие $U(\pm x_0) \ll |E|$, тогда для всех $|x| > x_0$ потенциальной энергией в уравнении Шрёдингера можно пренебречь. Получаем *асимптотическое* поведение волновой функции:

$$\psi(x)|_{x \rightarrow \pm\infty} \sim \exp(\mp \kappa x), \quad (3.14)$$

где $\kappa = \sqrt{2m|E|/\hbar}$. Будем искать решение с минимальной энергией (первое отличное от нуля). В силу непрерывности функции мы должны, исходя из асимптотики волновой функции (3.14), считать,

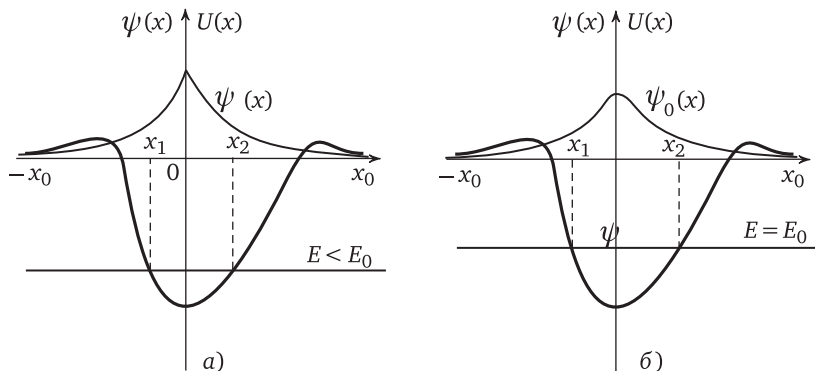


Рис. 4. Волновая функция первого связанного состояния в одномерной потенциальной яме

что ее знак одинаковый как слева, так и справа от нуля. Поскольку теперь $E > U_{\min}$, точки перегиба будут существовать при $|x_{1,2}| < x_0$, и для выполнения условия гладкости функции (3.9) мы должны потребовать выполнения равенства $\psi'(-0) = -\psi'(0) = 0$, которое может быть верно не при любом, а при каком-то определенном значении параметра $E = E_0$ (энергии). Это и есть условие существования *первого* (минимального) уровня энергии связанного состояния. В этом случае волновая функция имеет вид, изображенный на рис. 4 б, и *нигде* в классически разрешенной области в нуль не обращается.

Если после этого увеличивать значение E , условие гладкости (3.9) перестанет выполняться, однако тенденция изменения волновой функции такова, что теперь для выполнения условия гладкости нужно потребовать, чтобы имело место соотношение

$$\psi'(-0) = \psi'(0) \neq 0,$$

но при этом обязательно должно быть верно равенство

$$\psi(-0) = -\psi(0) = 0,$$

которое может быть выполнено не при любом, а при определенном значении параметра $E = E_1 > E_0$. Если такое значение параметра существует, значит, есть второе связанное состояние со значением энергии E_1 , при этом волновая функция имеет вид, показанный на рис. 5 б, и обращается один раз в нуль в классически разрешенной области.

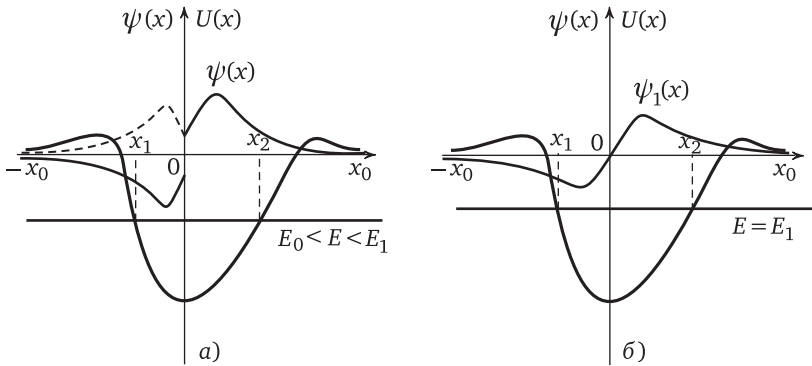


Рис. 5. Волновая функция второго связанного состояния в одномерной потенциальной яме

Такую процедуру можно продолжить и получить, что если существует значение параметра $E = E_2 > E_1$, при котором $\psi(-0) = \psi(+0)$, но $\psi'(-0) = -\psi'(0) = 0$, то это будет третье связанное состояние с энергией E_2 , волновая функция которого имеет два нуля в классически разрешенной области.

Все вышесказанное обобщается в так называемую *осцилляционную теорему*, суть которой состоит в том, что спектр связанных состояний обязательно *дискретен*, а волновая функция обращается в нуль в классически разрешенной области $n - 1$ раз, где $n = 1, 2, 3, \dots$ — номер уровня энергии (связанного состояния).

§ 3.5. Непрерывный спектр

Пусть потенциальная энергия имеет вид, показанный на рис. 6. В этом случае частица совершает инфинитное движение. Поскольку

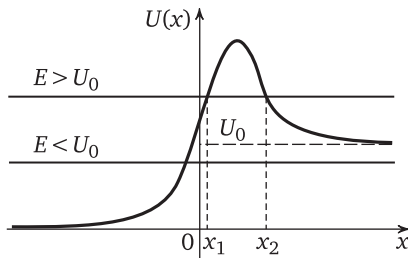


Рис. 6. Одномерный потенциальный барьер

для любого значения энергии $E > 0$ нет обязательного требования обращения в нуль волновой функции одновременно на $\pm\infty$, условие гладкости может быть выполнено для любого значения параметра E и частица обладает непрерывным спектром энергии. Поэтому и задача ставится не об определении уровней энергии, а о нахождении волновой функции (состояния). Обычно такая задача может рассматриваться как одномерный аналог задачи о рассеянии частицы на каком-либо потенциале. Поэтому прежде всего интересуются *асимптотическим* поведением волновой функции.

Если энергия частицы E меньше чем U_0 , то в этом случае при $x \rightarrow \pm\infty$ волновая функция может быть записана в виде

$$\begin{aligned}\psi(x)|_{x \rightarrow -\infty} &= A \exp(ik_1x) + B \exp(-ik_1x), \\ \psi(x)|_{x \rightarrow +\infty} &= D \exp(-\chi x),\end{aligned}\tag{3.15}$$

где $k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$, $\chi = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}$.

Поскольку при $x > x_1$ плотность потока имеет вид

$$j|_{x > x_1} = 0,$$

получаем $|A| = |B|$ и $\psi(x)|_{x \rightarrow -\infty} = A \cos(kx + \varphi)$. Иными словами, если в начальный момент времени частица двигалась слева направо, то она отразится от барьера и образуется суперпозиция падающего и отраженного состояний в виде стоячей волны.

Если $E > U_0$, то асимптотика волновой функции имеет вид

$$\begin{aligned}\psi(x)|_{x \rightarrow -\infty} &= A \exp(ik_1x) + B \exp(-ik_1x), \\ \psi(x)|_{x \rightarrow +\infty} &= C \exp(ik_2x) + D \exp(-ik_2x),\end{aligned}\tag{3.16}$$

где $k_2 = \sqrt{2m(E - U_0)/\hbar^2}$. С такой асимптотикой волновая функция есть решение стационарного уравнения Шрёдингера (стационарная постановка задачи). Обычно же задача ставится не стационарно. А именно, пусть в начальный момент времени частица падала из $-\infty$ на потенциальный барьер и требуется определить коэффициент отражения и прохождения частицы через барьер. В таком случае на $-\infty$ будет суперпозиция состояний падающей и отраженной частицы, а на $+\infty$ будет только состояние прошедшей частицы. Все это можно записать в виде

$$\begin{aligned}\psi(x)|_{x \rightarrow -\infty} &= \exp(ik_1x) + B \exp(-ik_1x), \\ \psi(x)|_{x \rightarrow +\infty} &= A \exp(ik_2x).\end{aligned}\tag{3.17}$$

Ясно, что волновая функция с такой асимптотикой уже не будет собственной функцией гамильтониана. Это просто функция для *определённым образом заданного начального условия*.

Для записанной таким образом волновой функции получаем плотности потока в соответствующих состояниях:

$$j_{\text{пад}} = \frac{\hbar k_1}{m} = v_1, \quad j_{\text{пр}} = \frac{\hbar k_2}{m} |A|^2, \quad j_{\text{отр}} = \frac{\hbar k_1}{m} |B|^2. \quad (3.18)$$

Коэффициенты прохождения и отражения соответственно равны

$$D = \frac{j_{\text{пр}}}{j_{\text{пад}}} = \frac{k_2}{k_1} |A|^2, \quad R = \frac{j_{\text{отр}}}{j_{\text{пад}}} = |B|^2. \quad (3.19)$$

При этом выполняется очевидное условие $D + R = 1$.

Вновь вернемся к стационарной постановке задачи и запишем общий вид асимптотик волновой функции:

$$\psi(x) = \begin{cases} A_1 \exp(ik_1 x) + B_1 \exp(-ik_1 x), & x \rightarrow -\infty, \\ A_2 \exp(ik_2 x) + B_2 \exp(-ik_2 x), & x \rightarrow +\infty. \end{cases} \quad (3.20)$$

Мы помним, что из уравнения Шрёдингера следует сохранение плотности потока вероятности. Поскольку выражение (3.20) определяет асимптотику волновой функции, должно выполняться обязательное условие равенства плотностей потока вероятности на $\pm\infty$. Иными словами, коэффициенты не являются независимыми. Связь между коэффициентами следует из равенства $j(x)_{x \rightarrow -\infty} = j(x)_{x \rightarrow +\infty}$, поэтому получаем

$$\frac{\hbar k_1}{m} (|A_1|^2 - |B_1|^2) = \frac{\hbar k_2}{m} (|A_2|^2 - |B_2|^2). \quad (3.21)$$

Однако только этим соотношением связь коэффициентов между собой не ограничивается. Действительно, поскольку в формуле (3.20) асимптотики определяют выражение одной и той же функции, но в разных точках, между коэффициентами A_1, B_1 и A_2, B_2 должна быть линейная связь, например,

$$A_2 = \alpha A_1 + \beta B_1, \quad B_2 = \gamma A_1 + \delta B_1. \quad (3.22)$$

Соотношение (3.22) можно переписать в векторной форме:

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \widehat{T} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}. \quad (3.23)$$

Заметим, что коэффициенты A и B можно рассматривать как представление волновой функции, поэтому матрица \widehat{T} в соотноше-

нии (3.23) есть выражение некоторого оператора в том же представлении. Таким образом, можно записать

$$\psi(x)|_{x \rightarrow -\infty} = \widehat{T}\psi(x)|_{x \rightarrow +\infty}.$$

Оператор \widehat{T} описывает изменение волновой функции частицы при ее переходе из $-\infty$ к $+\infty$, и его можно рассматривать как *оператор перехода*. Матрица в соотношении (3.23) в этом случае будет матрицей перехода¹.

Мы помним, что непрерывный спектр двукратно вырожден, поэтому есть две линейно независимые функции. Очевидно, что функция, комплексно-сопряженная к функции (3.20), будет линейно независимой:

$$\psi^*(x) = \begin{cases} A_1^* \exp(-ik_1x) + B_1^* \exp(ik_1x), & x \rightarrow -\infty, \\ A_2^* \exp(-ik_2x) + B_2^* \exp(ik_2x), & x \rightarrow +\infty. \end{cases} \quad (3.24)$$

Соответственно должны выполняться соотношения

$$A_2^* = \alpha^* A_1^* + \beta^* B_1^*, \quad B_2^* = \gamma^* A_1^* + \delta^* B_1^*.$$

Сравнивая выражение для функции (3.20) с комплексно-сопряженным (3.24), видим, что связь (3.22) должна иметь место и для комплексно-сопряженных коэффициентов:

$$B_2^* = \alpha B_1^* + \beta A_1^*, \quad B_2 = \alpha^* B_1 + \beta^* A_1. \quad (3.25)$$

Таким образом, матрица \widehat{T} может быть записана в виде

$$\widehat{T} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \beta^* & \alpha^* \end{pmatrix}, \quad \det \widehat{T} = |\alpha|^2 - |\beta|^2. \quad (3.26)$$

Поскольку в стационарном случае $j|_{x \rightarrow -\infty} = j|_{x \rightarrow +\infty}$, получаем

$$\frac{k_1}{k_2} = \frac{|A_2|^2 - |B_2|^2}{|A_1|^2 - |B_1|^2} = |\alpha|^2 - |\beta|^2 = \det \widehat{T}.$$

Рассмотрим случай, когда $U(x \rightarrow -\infty) = U(x \rightarrow +\infty)$ и соответственно $k_2 = k_1$. В этом случае $\det \widehat{T} = 1$. Вновь вернемся к нестационарной постановке задачи и положим $B_2 = 0$ (частица «рассеивается» на потенциальном барьере при движении слева направо). Из соотношения (3.25) получаем $\frac{A_1}{B_1} = -\frac{\alpha^*}{\beta^*}$ и находим коэффициент отражения:

$$R_{\rightarrow} = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} = \frac{|\beta|^2}{|\alpha|^2}. \quad (3.27)$$

¹ Матрицу оператора \widehat{T} также принято называть трансфер-матрицей.

Пусть теперь частица отражается от барьера при движении справа налево, тогда мы должны положить $A_1 = 0$. В этом случае получаем $\frac{A_2}{B_2} = \frac{\beta^*}{\alpha^*}$. Соответственно коэффициент отражения равен

$$R_{\leftarrow} = \frac{|A_2|^2}{|B_2|^2} = \frac{|\beta|^2}{|\alpha|^2} = R_{\rightarrow}. \quad (3.28)$$

Итак, коэффициент отражения частицы определяется не «фронтом» потенциала, а его площадью, которая не зависит от того, с какой стороны падает на него частица.

Вопросы для самоконтроля

1. Запишите одномерное стационарное уравнение Шрёдингера.
2. Каким требованиям должна удовлетворять волновая функция? Какова связь свойств волновой функции со свойствами модельного потенциала?
3. Сформулируйте постановку задачи для определения связанных состояний.
4. Как ставится задача для инфинитного движения?
5. Какой вид имеет асимптотическое поведение волновой функции в классически запрещенной области?
6. Какими свойствами обладает энергетический спектр связанных состояний в одномерном случае?
7. Сформулируйте осцилляционную теорему.
8. Каковы свойства определителя Вронского для решений одномерного уравнения Шрёдингера?
9. Как определяются коэффициенты прохождения и отражения от потенциального барьера?
10. Как связаны между собой коэффициенты отражения от потенциального барьера при падении частицы слева (из $-\infty$) и справа (из $+\infty$)?

Задачи и упражнения

1. Определите уровни энергии и волновые функции частицы в потенциальной яме, имеющей вид

$$U(x) = \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{m} \chi_0 \delta(x), & |x| < a, \\ \infty, & |x| \geq a. \end{cases}$$

2. Определите энергию связанного состояния частицы в потенциале

$$\tilde{U}(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ U_0 - \frac{\hbar^2}{m} \chi_0 \delta(x), & x \geq 0. \end{cases}$$

3. Определите коэффициенты прохождения и отражения частицы в потенциале из предыдущей задачи.

4. Частица массы m находится в одномерном потенциальном ящике

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

В момент времени $t = 0$ параметры потенциального ящика внезапно (мгновенно) изменяются и он принимает вид

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & |x| > a, \\ 0, & |x| \leq a. \end{cases}$$

Пусть при $t \leq 0$ частица находилась на основном уровне энергии недеформированного потенциального ящика. Какова вероятность того, что частица останется на основном уровне энергии? Определите также вероятность того, что частица перейдет на первый возбужденный уровень энергии.

5. Частица массы m находится в одномерном потенциале, описываемом δ -функцией:

$$U(x) = -\frac{\hbar^2 \chi_0}{m} \delta(x).$$

В момент времени $t = 0$ внезапно (мгновенно) появляется барьер и потенциал становится равным

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ U_0 - \frac{\hbar^2 \chi_0}{m} \delta(x), & x \geq 0. \end{cases}$$

Пусть при $t \leq 0$ частица находилась в связанном состоянии в исходном потенциале δ -функции. Какова вероятность того, что частица останется в связанном состоянии?