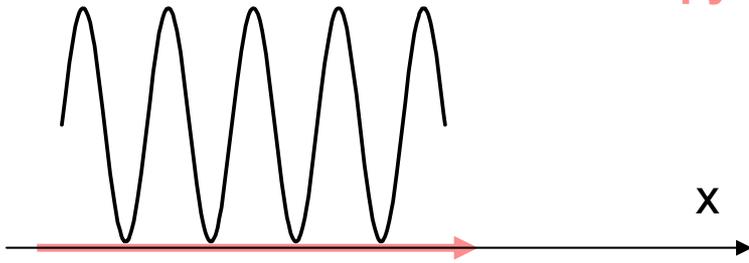


Плоская волна

Волновая функция свободной частицы



$$-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi(r) = E \cdot \varphi(r) \quad k_1 = \sqrt{2 \cdot E}$$

Волновая функция континуума $\varphi(r) = A_1 e^{ik_1 r} + B_1 e^{-ik_1 r}$

$$\frac{d}{dt} \int |\varphi|^2 dv = \int \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} \varphi^* + \frac{\partial \varphi^*}{\partial t} \varphi \right) dv = i \int (\varphi \hat{H}^* \varphi^* - \varphi^* \hat{H} \varphi) dv$$

Плотность потока

$$\frac{d}{dt} \int |\varphi|^2 dv = - \int \text{div } j dv, \quad j = \frac{i}{2} (\varphi \cdot \text{grad } \varphi^* - \varphi^* \cdot \text{grad } \varphi)$$

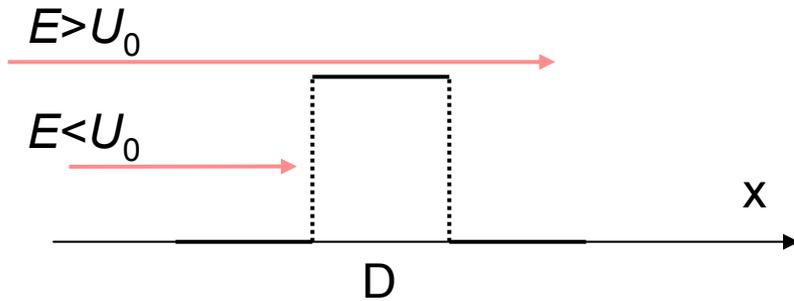
$$\frac{d}{dt} \int |\varphi|^2 dv + \int \text{div } j dv = 0$$

$$j = k_1$$

Плотность потока свободной частицы

Плоская волна

Прямоугольный потенциальный барьер



- ✓ Как зависит коэффициент отражения/прохождения от высоты и ширины барьера?
- ✓ Отражается ли волна, если энергия частицы выше барьера?
- ✓ Ослабится или усилится поглощение в системе из двух барьеров?

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi(x) + V(x)\varphi(x) = E \cdot \varphi(x)$$

$$V(x) = \begin{cases} U_0, & X_1 < x < X_2 \\ 0 & \end{cases}$$

Уравнения непрерывности

$$k_1 = \sqrt{2 \cdot E}, k_2 = \sqrt{2 \cdot (U_0 - E)}$$

$$A_1 e^{ik_1 X_1} + B_1 e^{-ik_1 X_1} = A_2 e^{k_2 X_1} + B_2 e^{-k_2 X_1}$$

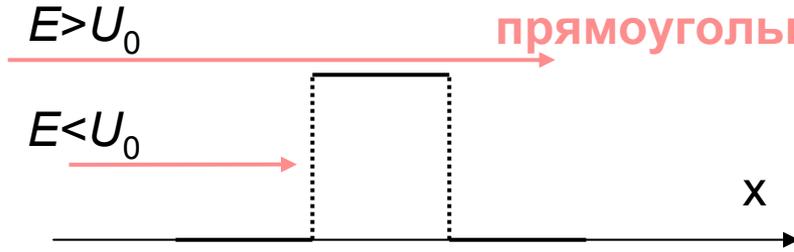
$$A_1 i k_1 e^{ik_1 X_1} - i k_1 B_1 e^{-ik_1 X_1} = A_2 k_2 e^{k_2 X_1} - k_2 B_2 e^{-k_2 X_1}$$

$$A_2 e^{k_2 X_2} + B_2 e^{-k_2 X_2} = A_3 e^{ik_1 X_2}$$

$$A_2 k_2 e^{k_2 X_2} - k_2 B_2 e^{-k_2 X_2} = A_3 i k_1 e^{ik_1 X_2}$$

Плоская волна

Коэффициент поглощения при прохождении
прямоугольного потенциального барьера



Вывод/дополнительный слайд

$$k_1 = \sqrt{2 \cdot E}, k_2 = \sqrt{2 \cdot (U_0 - E)}$$

$$A_2 = A_3 e^{ik_1 D} \frac{k_2 + ik_1}{2k_2} e^{-k_2 D}$$

$$B_2 = A_3 e^{ik_1 D} \frac{k_2 - ik_1}{2k_2} e^{k_2 D}$$

$$A_1 = \frac{ik_1 + k_2}{2ik_1} A_2 + \frac{ik_1 - k_2}{2ik_1} B_2 =$$

$$\frac{ik_1 + k_2}{2ik_1} \frac{ik_1 + k_2}{2k_2} e^{-k_2 D} + \frac{ik_1 - k_2}{2ik_1} \frac{-ik_1 + k_2}{2k_2} e^{-k_2 D} =$$

$$\frac{(ik_1 + k_2)^2 e^{-k_2 D} - (k_2 - ik_1)^2 e^{k_2 D}}{2ik_1 2k_2}$$

$$B_1 = \frac{ik_1 - k_2}{2ik_1} A_2 + \frac{ik_1 + k_2}{2ik_1} B_2 =$$

$$\frac{ik_1 - k_2}{2ik_1} \frac{ik_1 + k_2}{2k_2} e^{-k_2 D} + \frac{ik_1 + k_2}{2ik_1} \frac{-ik_1 + k_2}{2k_2} e^{-k_2 D} =$$

$$(k_1^2 + k_2^2) \frac{e^{k_2 D} - e^{-k_2 D}}{2ik_1 2k_2}$$

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi(x) + V(x) \varphi(x) = E \cdot \varphi(x)$$

$$\frac{(k_2^2 + k_1^2)^2 e^{-2k_2 D} + (k_2^2 + k_1^2)^2 e^{2k_2 D} - (ik_1 + k_2)^4 - (k_2 - ik_1)^4}{(2k_1 2k_2)^2} =$$

$$\frac{(k_2^2 + k_1^2)^2 (e^{-2k_2 D} + e^{2k_2 D}) - 2(k_2^2 - k_1^2)^2 + 4k_1^2 k_2^2}{(2k_1 2k_2)^2} =$$

$$\frac{(k_2^2 + k_1^2)^2 (e^{-2k_2 D} + e^{2k_2 D}) - 2(k_2^2 + k_1^2)^2 + 16k_1^2 k_2^2}{(2k_1 2k_2)^2}$$

$$\frac{(k_2^2 + k_1^2)^2 \text{Sh}^2 k_2 D + 4k_1^2 k_2^2}{(2k_1 k_2)^2}$$

$$\left| \frac{A_1}{A_3} \right|^2 = \frac{(k_2^2 + k_1^2)^2 e^{-2k_2 D} + (k_2^2 + k_1^2)^2 e^{2k_2 D} - (ik_1 + k_2)^4 - (k_2 - ik_1)^4}{(2k_1 2k_2)^2} =$$

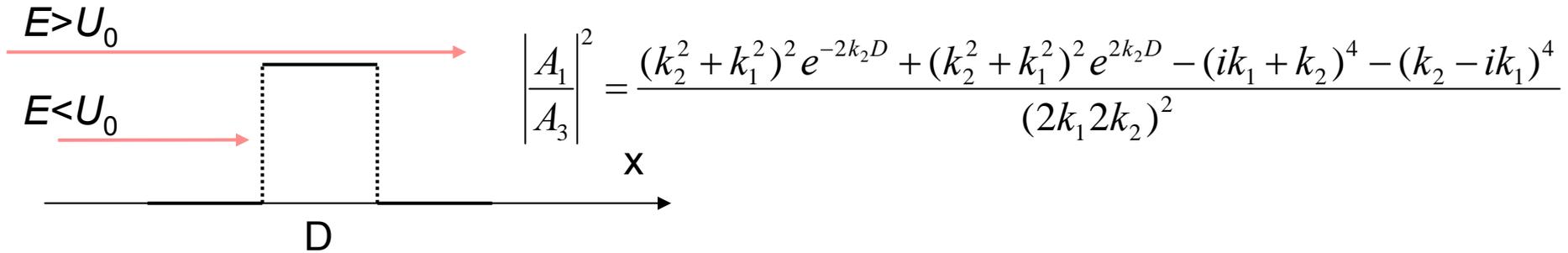
$$\frac{(k_2^2 + k_1^2)^2 (e^{-2k_2 D} + e^{2k_2 D}) - 2(k_2^2 - k_1^2)^2 + 4k_1^2 k_2^2}{(2k_1 2k_2)^2} =$$

$$\frac{(k_2^2 + k_1^2)^2 (e^{-2k_2 D} + e^{2k_2 D}) - 2(k_2^2 + k_1^2)^2 + 16k_1^2 k_2^2}{(2k_1 2k_2)^2}$$

$$\frac{(k_2^2 + k_1^2)^2 \text{Sh}^2 k_2 D + 4k_1^2 k_2^2}{(2k_1 k_2)^2}$$

Плоская волна

Прямоугольный потенциальный барьер



$$\left| \frac{A_1}{A_3} \right|^2 = \frac{(k_2^2 + k_1^2)^2 e^{-2k_2 D} + (k_2^2 + k_1^2)^2 e^{2k_2 D} - (ik_1 + k_2)^4 - (k_2 - ik_1)^4}{(2k_1 2k_2)^2}$$

$$A_2 = A_3 e^{ik_1 D} \frac{k_2 + ik_1}{2k_2} e^{-k_2 D}$$

$$B_2 = A_3 e^{ik_1 D} \frac{k_2 - ik_1}{2k_2} e^{k_2 D}$$

$$A_1 = A_3 \frac{(ik_1 + k_2)^2 e^{-k_2 D} - (k_2 - ik_1)^2 e^{k_2 D}}{2ik_1 2k_2}$$

$$B_1 = A_3 (k_1^2 + k_2^2) \frac{e^{k_2 D} - e^{-k_2 D}}{2ik_1 2k_2}$$

Коэффициент поглощения при прохождении прямоугольного потенциального барьера

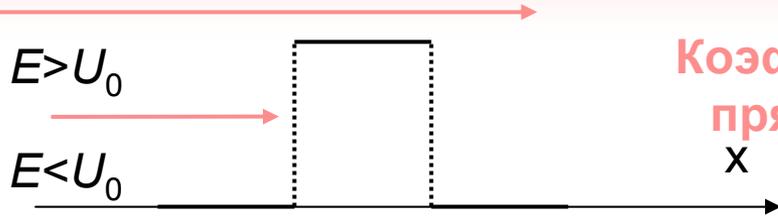
$$E < U_0 \quad k_1 = \sqrt{2 \cdot E}, \quad k_2 = \sqrt{2 \cdot (U_0 - E)}$$

$$D = \frac{(2k_1 k_2)^2}{(k_2^2 + k_1^2)^2 \operatorname{Sh}^2 k_2 D + 4k_1^2 k_2^2}$$

$$E > U_0 \quad k_1 = \sqrt{2 \cdot E}, \quad k_2 = \sqrt{2 \cdot (E - U_0)}$$

$$D = \frac{(2k_1 k_2)^2}{(k_2^2 - k_1^2)^2 \operatorname{Sin}^2 k_2 D + 4k_1^2 k_2^2}$$

Плоская волна



Коэффициент поглощения при прохождении прямоугольного потенциального барьера

$$k_1 = \sqrt{2 \cdot E}, k_2 = \sqrt{2 \cdot (U_0 - E)}$$

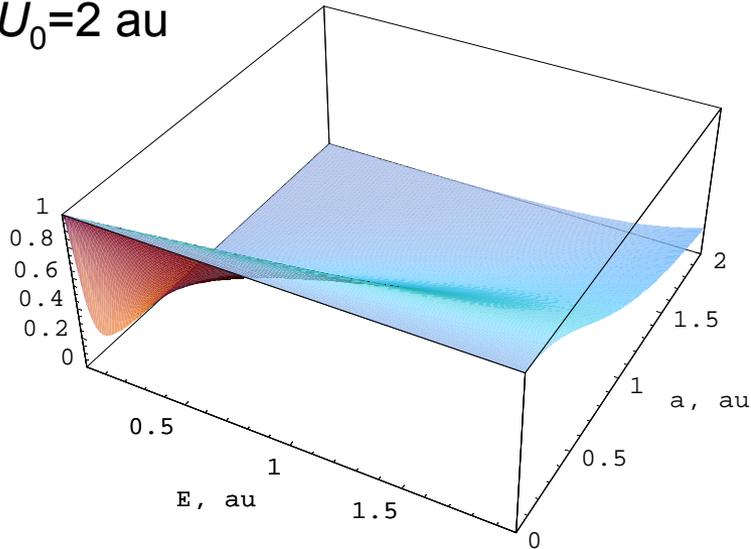
$E < U_0$

$$D = \frac{(2k_1 k_2)^2}{(k_2^2 + k_1^2)^2 \text{Sh}^2 k_2 D + 4k_1^2 k_2^2}$$

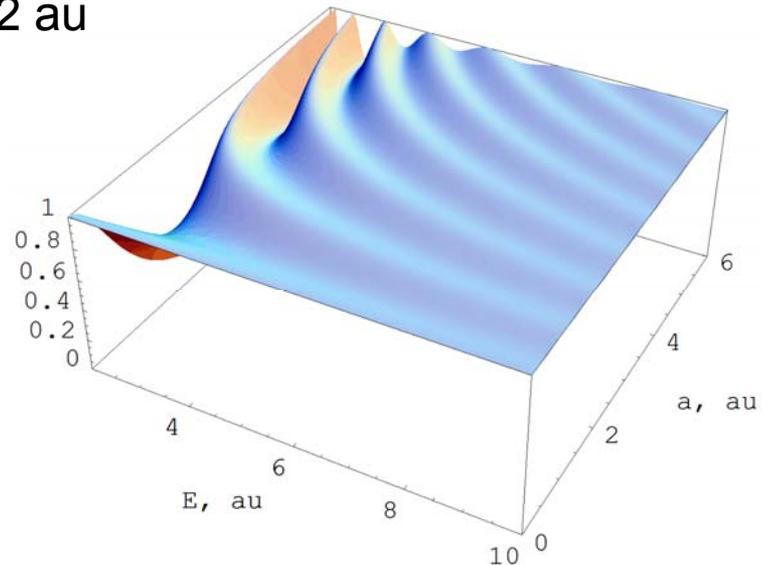
$E > U_0$

$$D = \frac{(2k_1 k_2)^2}{(k_2^2 - k_1^2)^2 \text{Sin}^2 k_2 D + 4k_1^2 k_2^2}$$

$U_0 = 2 \text{ au}$



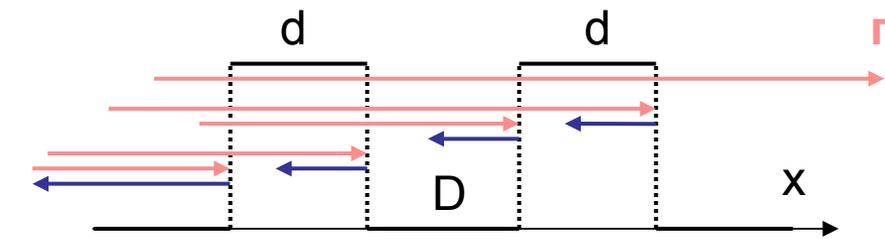
$U_0 = 2 \text{ au}$



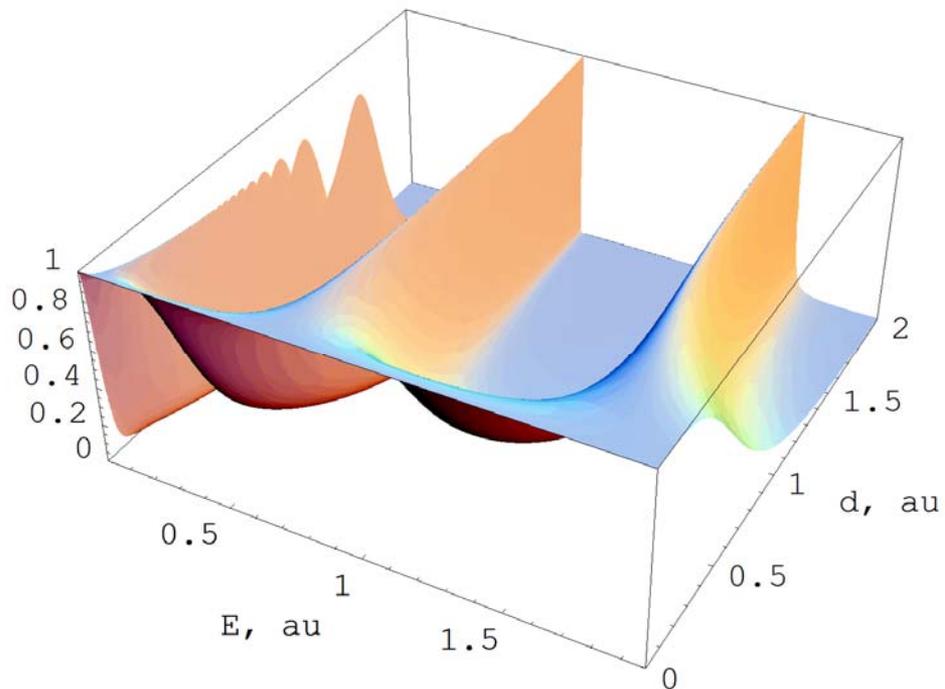
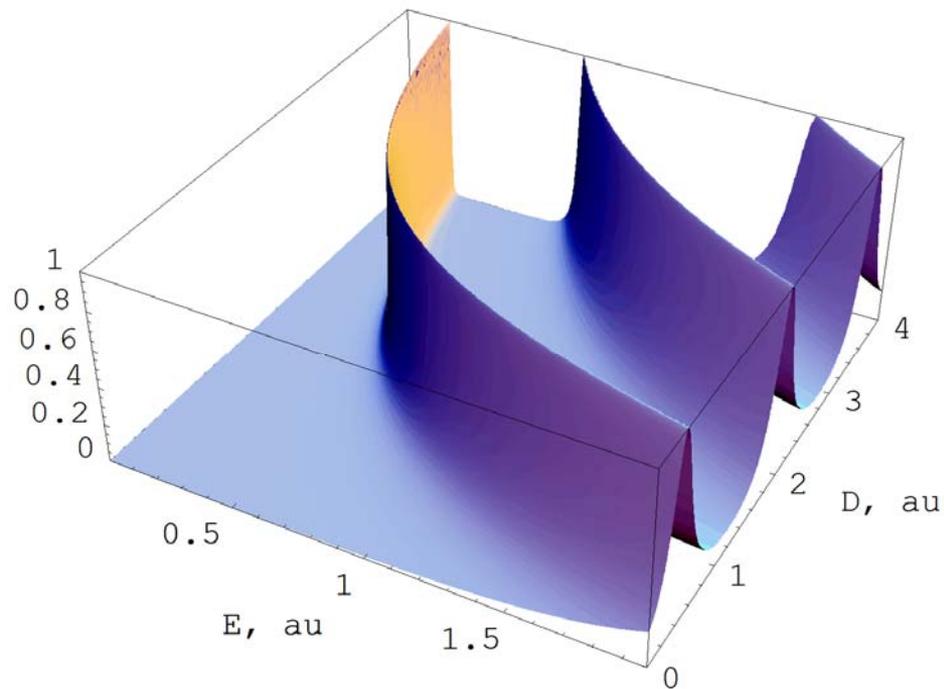
Где переход к классической (не квантовой) системе?

Плоская волна

Коэффициент поглощения при
прохождении двойного прямоугольного
потенциального барьера

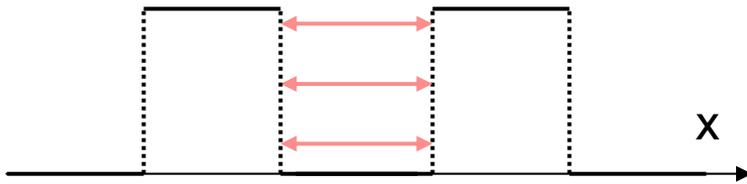


$U_0=2 \text{ au}, D=4 \text{ au}$

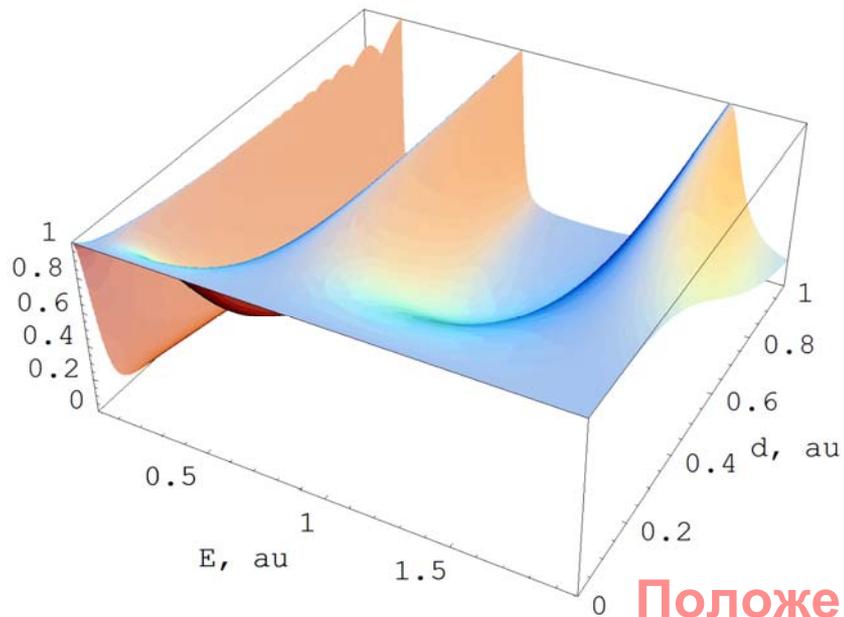


Плоская волна

Формирование автоионизационного
(квазидискретного) состояния - резонанса



$$U_0 = 2 \text{ au}, D = 4 \text{ au}$$



$$E_1 = 0.20$$
$$E_2 = 0.77$$
$$E_3 = 1.62$$

Положение резонанса не зависит от
толщины барьеров, до зависит от ширины