

## Projekt nr C.7.5

# Wyznaczanie współczynników transmisji i odbicia cząstki na potencjałach schodkowych metodą macierzy transferu

## Wprowadzenie

Na wstępnym kursie mechaniki kwantowej rozważany jest zazwyczaj problem odbicia i transmisji cząstki kwantowej, opisywanej falą płaską o danym wektorze falowym od prostokątnej bariery potencjału, o danej wysokości i szerokości. Warunki ciągłości funkcji falowej i jej pierwszej pochodnej na brzegach bariery dają możliwość wyznaczenia amplitudy funkcji za barierą, a tym samym i współczynnika odbicia. W tak postawionym problemie otrzymuje się do rozwiązania układ równań  $4 \times 4$  na współczynniki funkcji falowej, co stwarza zazwyczaj kłopoty rachunkowe.

Okazuje się, że zadanie można stosunkowo łatwo rozwiązać numerycznie dla dużo ogólniejszej klasy barier potencjału, tzw. potencjałów schodkowych, czyli potencjałów przedziałami stałych. Robi się to przez zastosowanie tzw. macierzy transferu. Wiąże ona wektor współczynników funkcji falowej w dowolnym punkcie z wektorem współczynników w jakimś ustalonym punkcie startowym (odniesienia). Konieczne jest zdefiniowanie dwóch typów macierzy transferu: macierzy opisującej propagację w obszarze przestrzeni o stałym potencjale (macierzy propagacji) oraz macierzy wiążącej współczynniki po obu stronach skoku potencjału (macierzy odbicia). Wtedy macierz transferu do dowolnego punktu na badanym obszarze można otrzymać jako złożenie odpowiednich macierzy propagacji i macierzy odbicia.

Szczegóły rachunkowe, razem ze wszystkimi niezbędnymi wzorami na macierze propagacji i odbicia można znaleźć w publikacji J.S.Walkera i J.Gathrighta pt. „Transfer matrix approach to one-dimensional quantum mechanics” [2].

## Zadania do wykonania

- A
- 1) Napisać podprogramy dające macierze propagacji dla danego wektora falowego fali płaskiej oraz macierze odbicia dla danego wektora falowego i wartości skoku potencjału.
  - 2) W oparciu o te podprogramy utworzyć program, który wylicza współczynnik transmisji dla układu dwóch barier prostokątnych o szerokościach  $a_1$  i  $a_2$  oraz wysokościach  $V_1$  i  $V_2$  znajdujących się w odległości  $D$  od siebie.
  - 3) Program testować na rozwiązywalnym analitycznie przypadku jednej bariery ( $V_2=0$ ).

**Dane wejściowe:** zakres  $k$  (lub  $E$ ),  $a_1$ ,  $a_2$ ,  $V_1$ ,  $V_2$ ,  $D$

**Dane wyjściowe:** wsp. transmisji jako funkcja  $k$  (lub  $E$ ) w postaci tabeli oraz wykresu

- B**
- 1) W oparciu o podprogramy z zadania 1 napisać program liczący współczynnik transmisji przez układ barier potencjału o jednakowej wysokości  $V$ , szerokości  $b$ , ułożonych periodycznie z okresem równym  $a$ .
  - 2) W oparciu o powyższe wyniki znaleźć dopuszczalne pasmo energetyczne dla cząstki propagującej się przez taki modelowy kryształ. Użyć kryterium związanego z wartościami własnymi macierzy opisującej transfer cząstki przez jeden period sieci (patrz wzory 11 i następne w [2]).

**Dane wejściowe:**  $V$ ,  $b$ ,  $a$ , zakres  $k$  (lub  $E$ )

**Dane wyjściowe:** wsp. transmisji jako funkcja  $k$  (lub  $E$ ) – wykres.

## Literatura

- [1] L. Schiff – Mechanika kwantowa
- [2] J.S.Walker, J.Gathright “Transfer matrix approach to one-dimensional quantum mechanics” – Computers in Physics, 6(1992), 393