KVANTNA MEHANIKA 1 VAJE
Domača naloga: Odboj valovnega paketa na delta potencialu

Jernej Kamenik
matematično fizikalna smer

4.5.2002

1 Naloga

Gaussov valovni paket oblike $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma^2}} \exp{(-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2})} \exp{\imath k_0 x}$ pošljemo proti potencialnemu skoku v obliki delta funkcije $V(x) = \tilde{V}\delta(x)$. Naredili bomo časovni razvoj valovnega paketa po lastnih funkcijah takšnega potenciala in simulirali sipanje.

2 Rešitev

2.1 Lastne funkcije delta potenciala

Najprej bomo s pomočjo znanega nastavka poiskali lastne funkcije delta potenciala in pokazali, da sestaljajo poln sistem.

2.1.1 Nastavek

Problema se kot ponavadi lotimo z nastavkom ravnih valov. Če smo v prejšnjih primerih obravnavali le valovanje, vpadajoče z leve, moramo v splošnem upoštevati tudi valovanje z desne. Nastavek za lastne funkcije delta potenciala tedaj zapišemo kar kot superpozicijo obeh nastavkov:

$$\begin{aligned} \varphi(x)_k = &((A \exp \imath kx + B \exp -\imath kx)\chi(-x) + (C \exp \imath kx)\chi(x))\chi(k)+ \\ &+((A^* \exp \imath kx + B^* \exp -\imath kx)\chi(x) + (C^* \exp \imath kx)\chi(-x))\chi(-k) \end{aligned} \tag{1}$$

Koeficiente A, B, C seveda določimo iz robnih pogojev.

2.1.2 Reševanje robnih pogojev

Robne pogoje in njihove rešitve poznamo že od prej, zato samo povzemimo.

Pri $x = 0$, kjer je stičišče obeh delov rešitve in je potencial edino od nič različen velja, da morajo biti valovne funkcije φ zvezne, njihovi gradienti pa morajo imeti skok $\frac{\partial\varphi}{\partial x}|_{x=-0} - \frac{\partial\varphi}{\partial x}|_{x=+0} = -\frac{2m\tilde{V}}{\hbar^2}\varphi(0)$. Iz teh dveh robnih pogojev lahko določimo konstani B in C v odvisnosti od A. Če vpeljemo še nov parameter $\beta = \frac{m\tilde{V}}{\hbar^2} \quad [\frac{1}{m}]$, dobimo:

$$B = \frac{A \cdot \beta}{\imath k - \beta}, \qquad C = \frac{A \cdot \imath k}{\imath k - \beta}.$$

2.1.3 Pogoj polnosti

Na valovno funkcijo (1) lahko tedaj gledamo kot na ravni val z majhnimi popravki ($A \to 1$). Dejansko lahko pokažemo, da valovna funkcija (1) izpolnjuje pogoj polnosti:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x)_k \varphi^*(x')_k dk = \delta(x - x'), \tag{2}$$

če sta x in x' enako predznačena. Vstavimo torej našo rešitev v gornji izraz, pa dobimo:

$$\int_{-\infty}^{0} \frac{k^2}{k^2+\beta^2} \exp(\imath k(x-x'))\chi(-x)\chi(-x')dk+$$

$$+\int_{0}^{\infty} (\exp(\imath kx) + \frac{\beta}{\imath k-\beta}\exp(-\imath kx))(\exp(-\imath kx') + \frac{\beta}{-\imath k-\beta}\exp(\imath kx'))\chi(-x)\chi(-x')dk+$$

$$+\int_{-\infty}^{0} (\exp(\imath kx) + \frac{\beta}{-\imath k-\beta}\exp(-\imath kx))(\exp(-\imath kx') + \frac{\beta}{\imath k-\beta}\exp(\imath kx'))\chi(x)\chi(x')dk+$$

$$+\int_{0}^{\infty} \frac{-k^2}{k^2+\beta^2} \exp(\imath k(x-x'))\chi(x)\chi(x')dk.$$

V tem izrazu sem že izpustil ničelne mešane člene ($\chi(x)\chi(-x')$, $\chi(k)\chi(-k)$,...). Takoj opazimo da se druga dva integrala v gornjem izrazu skorajda prepišeta v prva dva, če naredimo substitucijo $k \Rightarrow -k$. Razlika je potem le še v predznaku koordinat x in x'. Izrazi so torej na celotni koordinatni osi identični in lahko stopničaste funkcije izpustimo ter hkrati predpostavimo $x<0$ in $x'<0$. Če še zmnožimo oba izraza v oklepajih znotraj drugega integrala dobimo:

$$\int_{-\infty}^{0} \frac{k^2}{k^2+\beta^2} \exp(\imath k(x-x'))dk+$$

$$+\int_{0}^{\infty} (\exp(\imath k(x-x'))+\frac{\beta^2}{k^2+\beta^2}\exp(\imath k(x'-x))+\frac{\beta}{\imath k-\beta}\exp(-\imath k(x+x'))+\frac{\beta}{-\imath k-\beta}\exp(\imath k(x+x')))dk$$

Zadnja dva člena lahko spet prevedemo na skupen integral po celotni k-osi, če v zadnjem členu uvedemo substitucijo $k \Rightarrow -k$, enako pa storimo tudi z drugim členom, tako da ga prevedmo na integral po negativnem k-poltraku. Dobimo torej:

$$\int_{-\infty}^{0} (\frac{k^2}{k^2+\beta^2} \exp(\imath k(x-x')) + \frac{\beta^2}{k^2+\beta^2}\exp(\imath k(x-x')))dk+$$

$$+\int_{0}^{\infty} \exp(\imath k(x-x'))dk+$$

$$+\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\beta}{\imath k-\beta}\exp(-\imath k(x+x'))dk$$

Takoj opazimo, da se prva dva integrala seštejeta v znan integral delta funkcije - izrek je torej dokazan, če uspemo pokazati, da je zadnji integral enak nič, torej da velja:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\beta}{\imath k-\beta}\exp(-\imath k(x+x'))dk = 0.$$

Zapišimo torej gornji integral še malo drugače:

$$-\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\beta(\imath k+\beta)}{k^2+\beta^2}(\cos k(x+x') - \imath \sin k(x+x'))dk$$

Zmnožimo med sabo še obe vsoti, da dobimo:

$$-\int_{-\infty}^{\infty} (\imath\beta\frac{k\cos k(x+x')}{k^2+\beta^2} - \imath\beta^2\frac{\sin k(x+x')}{k^2+\beta^2} + \beta^2\frac{\cos k(x+x')}{k^2+\beta^2} + \beta\frac{k\sin k(x+x')}{k^2+\beta^2})dk$$

Prva dva člena v vsoti sta lihi funkciji zato sta njuna integrala enaka nič. Druga dva člena pa s substitucijo $u = k/\beta$ nekoliko uredimo, tako da ostane:

$$-2(\int_{0}^{\infty} \beta\frac{\cos u\beta(x+x')}{u^2+1}du + \int_{0}^{\infty} \beta\frac{u\sin u\beta(x+x')}{u^2+1}du)$$

Če uvedemo še nov parameter $a = \beta(x+x')$ lahko oba integrala najdemo v kakšni zbirki rešenih integralov[1] kjer upoštevamo še $a < 0$, pa dobimo želeno identiteto:

$$-2\beta(\int_0^\infty \frac{\cos au}{u^2+1}du + \int_0^\infty \frac{u \sin au}{u^2+1}du) = -2\beta(\frac{\pi}{2}\exp{(-|a|)} - \frac{\pi}{2}\exp{(-|a|)}) = 0.$$

QED.

2.2 Časovni razvoj valovnega paketa

Časovni razvoj valovnega paketa delamo po lastnih funkcijah, kot smo jih naračunali v prejšnjem razdelku. V splošnem tak razvoj ni analitično izračunljiv, pa tudi numerično je precej zahteven. Tukaj nas bo zanimal predvsem pojav odboja in razcepa valovnega paketa na delta funkciji, zato poskušamo koeficienta B in C razviti v okolici točke polovičnega odboja torej ko velja:

$$B^*B = C^*C.$$

Pogoj nam da $k = \pm\beta$, če pa se omejimo še na valovni paket, ki potuje z leve proti desni ($k_0 \gg 0$ in $1/\sigma \ll k_0$), in se lahko omejimo le na $k > 0$, se razvoja koeficientov B in C do prvega netrivialnega reda zapišeta kot:

$$B = \frac{k/\beta - \imath}{2} - 1 \qquad C = \frac{k/\beta - \imath}{2}$$

Predpostavimo še, da se valovni paket ob času $t = 0$ nahaja daleč stran od izhodišča na levi polosi ($x_0 \ll 0$ in $|\sigma| \ll |x_0|$), pa se razvoj Gaussovega paketa po lastnih funkcijah delta potenciala še nekoliko poenostavi, saj lahko integriramo le po negativni polosi:

$$\psi(k>0) = \int_{-\infty}^{0} \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma^2}} \exp{(-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2})} \exp{\imath k_0 x}(\exp{\imath kx} + (\frac{k/\beta - \imath}{2} - 1)\exp{-\imath kx})dx.$$

Vsi integrali so sedaj dejansko analitično rešljivi saj jih lahko prevedemo na kompleksne Gaussove integrale, a jih tukaj zaradi obsežnosti rešitve ne bom razpisal.

Časovni razvoj lastnih funkcij delta potenciala je po drugi strani zelo enostaven. Ker med energijo posameznega stanja (W) in valovnim vektorjem (k) velja enaka zveza kot pri razvoju po ravnih valovih v konstantnem potencialu, namreč $W_k = \frac{k^2\hbar^2}{2m}$, lahko uvedemo nov parameter $\alpha = \frac{\hbar}{2m} \quad [\frac{m^2}{s}]$ in zapišemo kar

$$\varphi(x,t)_k = \varphi(x)_k \exp{-\imath\alpha k^2 t}$$

Sedaj nam ne preostane drugega, kot da pointegriramo produkt časovnega razvoja lastnih funkcij delta potenciala in razvoja Gaussovega paketa po teh lastnih funkcijah:

$$\psi(x,t) = \int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} \psi(k)\varphi(x,t)_k dk$$

Integriramo le po okolici srednje vrednosti valovnega vektorja Gaussovega paketa ($k_0 \pm \Delta k$), na kateri zavzame integrand ($\psi(k)$) signifikantno od nič različne vrednosti (Δk zavisi od parametrov k_0 ter σ). Na žalost pa ta integral ni več analitično rešljiv, zato moramo uporabiti numerične metode.

2.3 Simulacija sipanja

Na koncu si poglejmo numerično simulacijo sipanja Gaussovega valovnega paketa na potencialni delta funkciji. Sipanje sem simuliral pri parametrih $\alpha = 1$, $\beta = 1$, $\sigma = 10$, $x_0 = -20$, $k_0 = 1$, grafično sem določil še $\Delta k \sim 0.5$, potencialni skok pa je pri $x = 0$. Gibanje valovenga paketa na delta funkciji sem primerjal z gibanjem nemotenega valovnega paketa.:

Iz diagramov na sliki 1 je lepo razvidnen razcep valovnega paketa na delta funkciji. Polovica paketa stunelira skozi potencialni skok, polovica pa se ga odbije ter interferira s samim seboj.

[1] Npr. Bronštejn, Matematični priročnik, str. 894

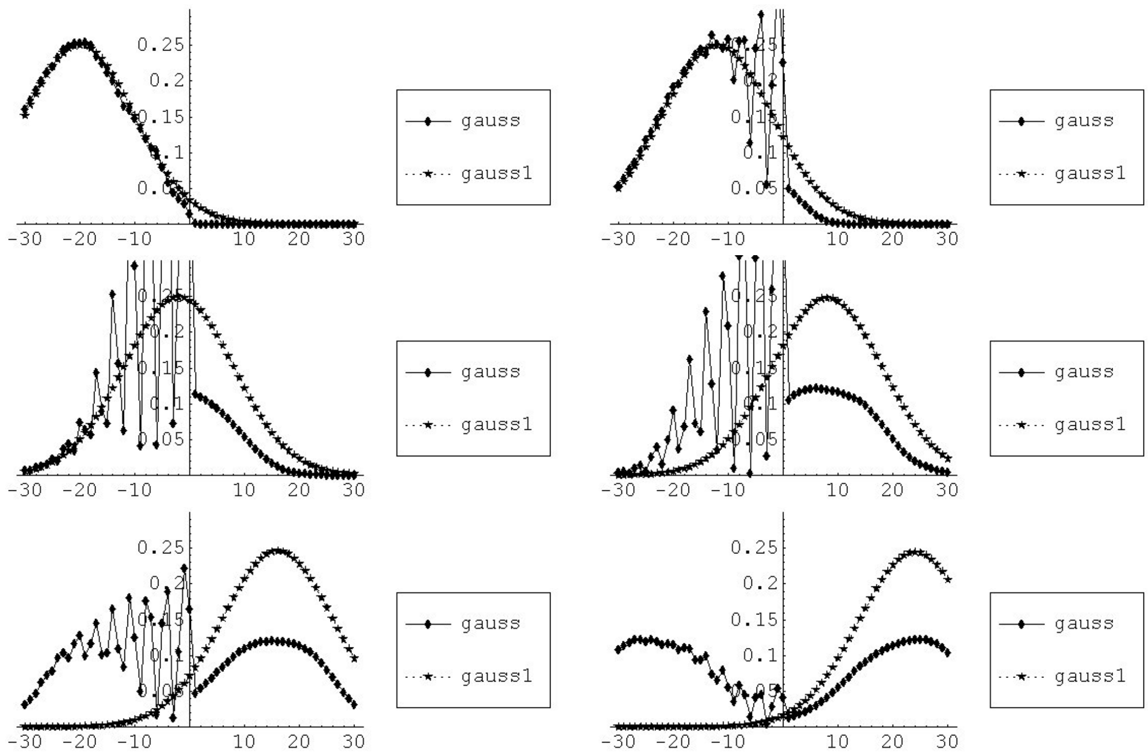

Figure 1: **Simulacija sipanja valovnega paketa na delta funkciji. Porazdelitvi verjetnostne gostote nezmotenega valovnega paketa (gauss1), ter valovnega paketa sipanega na delta funkciji (gauss).**