Kvantna mehanika

Nataša Grlj

30.3.2003

SIPANJE V 1D (I)

1) Izpelji operator toka in izračunaj njegovo pričakovano vrednost.

Operator toka smo izpeljali že na predavanju, tokrat pa ga bomo še enkrat, malo drugače. Vzamemo klasičen izraz za gostoto toka: j = ρ·v. Najprej na primeru ravnega vala preverimo, če tudi kvantni izraz $j = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^* \frac{d\psi}{dx} - \psi \frac{d\psi^*}{dx}\right)$ (znan iz predavanj) ustreza klasičnemu:

$$\psi = Ae^{ikx}$$

$$j = -\frac{i\hbar}{2m}\left(A^* e^{-ikx} Aike^{ikx} + Ae^{ikx} ikA^* e^{-ikx}\right) = -\frac{i\hbar}{m} AA^* ike^{ikx} e^{-ikx} = \frac{\hbar k}{m} AA^*$$

Vemo, da je: $\frac{\hbar k}{m} = \langle v \rangle$ in $\rho(x) = \psi^* \psi = A^* A$, zato dobimo za vrednost gornjega izraza: $j = \rho v$.

Sedaj bomo vzeli primer točkastega delca in zgornji izraz pretvorili v kvantnega:

- Gostoto točkastega delca v točki x\` lahko zapišemo kot $\rho(x') = \delta(x - x')$.
- Tako se izraz za gostoto toka spremeni v $j = \rho v = \delta(x - x')\frac{p}{m} = \frac{1}{2}\left(\delta(x - x')\frac{p}{m} + \frac{p}{m}\delta(x - x')\right)$ (To zadnje, na videz nepotrebno dejanje, naredimo zaradi korespondenčnega principa, enega od aksiomov kvantne mehanike. Ta govori o tem, kako klasične izraze spremeniš v kvantne. Recept za gostoto toka gre takole: Vzamemo klasični sistem za točkast delec (x , p), obe koordinati zamenjamo za kvantne operatorje, vendar je treba pred tem izraz simetrizirati (to naredimo zaradi tega, ker kvantno x in p ne komutirata). In to pojasni naše skrivnostno računanje.)
- V naslednjem koraku količine pretvorimo v operatorje: $\hat{j} = \frac{1}{2}\left(\delta(x - x')\frac{\hat{p}}{m} + \frac{\hat{p}}{m}\delta(x - x')\right); \hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$.
- Pričakovana vrednost operatorja ĵ je:

$$j = \int \psi^* \left(\frac{1}{2}\left(\delta(x - x')\frac{\hat{p}}{m} + \frac{\hat{p}}{m}\delta(x - x')\right)\right)\psi dx =$$

$$= \int \psi^* \frac{1}{2}\delta(x-x')\frac{\hat{p}}{m}\psi dx + \int \frac{1}{2}\left(\frac{\hat{p}}{m}\psi\right)^* \delta(x-x')\psi dx =$$

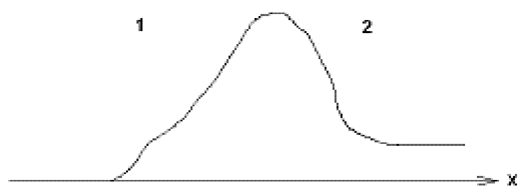
$$= -\frac{i\hbar}{2m}\int \psi^* \delta(x-x')\frac{\partial \psi}{\partial x}dx + \frac{i\hbar}{2m}\int \frac{\partial \psi^*}{\partial x}\delta(x-x')\psi dx =$$

$$= -\frac{i\hbar}{2m}\psi^*(x')\frac{\partial \psi}{\partial x}\bigg|_{x=x'} - \frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial \psi^*}{\partial x}\bigg|_{x=x'}\psi(x') = \frac{\hbar}{m}\mathrm{Im}\left(\psi^*(x')\frac{\partial \psi}{\partial x}\bigg|_{x=x'}\right)$$

Najprej opazimo, da predzadnji izraz ustreza že izpeljani enačbi za gostoto toka delcev. Zadnji je morda presenetljiv, a nismo naredili nič čudnega. Vemo, $z - \bar{z} = 2\,\mathrm{Im}\,z$ in to je tudi vsa čarovnija. Mogoče nam bo kdaj tak okrajšani izraz prišel prav.

2) **Izračunaj prepustnost in odbojnost za sipanje delca na potencialu oblike V(x) = V₀ δ(x)**

Najprej izračunamo prepustnost in odbojnost ravnega vala za sipanje na nekem splošnem potencialu:



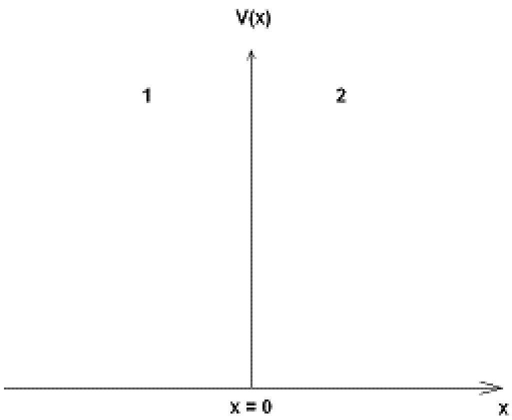
1) $\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$

2) $\psi = Ce^{i\tilde{k}x}$

Že prej smo izračunali vrednost toka za ravni val: $j = |A|^2 \dfrac{\hbar k}{m}$.

Torej je prepustnost: $T = \dfrac{j_{prepuščre}}{j_{vpaden}} = \dfrac{|C|^2 \frac{\tilde{k}\hbar}{m}}{|A|^2 \frac{k\hbar}{m}} = \dfrac{|C|^2 \tilde{k}}{|A|^2 k}$, odbojnost pa: $R = \dfrac{j_{odbit}}{j_{vpaden}} = \dfrac{|B|^2}{|A|^2}$.

Zdaj pa nazaj k nalogi:



1) $\psi_1 = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$

2) $\psi_2 = Ce^{ikx}$

Robni pogoji:

$$\psi_1\big|_{x=0} = \psi_2\big|_{x=0} \Rightarrow A + B = C$$

$$\left.\frac{\partial \psi_1}{\partial x}\right|_{x=0} - \left.\frac{\partial \psi_2}{\partial x}\right|_{x=0} = 2q\psi; q = \frac{ma}{\hbar^2} \Rightarrow Aik - Bik - Cik = 2q(A+B)$$

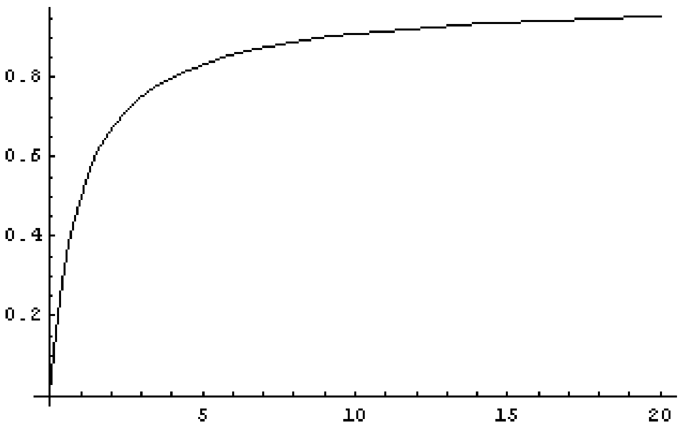
$$\Rightarrow C = A\frac{ik}{ik+q}$$

$$\Rightarrow B = -A\frac{q}{ik+q}$$

$T = \left|\frac{ik}{ik+q}\right|^2 = \frac{k^2}{k^2+q^2}$ Nas zanima T(E), kar ne bo težko izpeljati:

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \Rightarrow T(E) = \frac{2mE}{\hbar^2\left(\frac{m^2a^2}{\hbar^4} + \frac{2mE}{\hbar^2}\right)} = \frac{E}{\frac{a^2m}{2\hbar^2} + E}$$

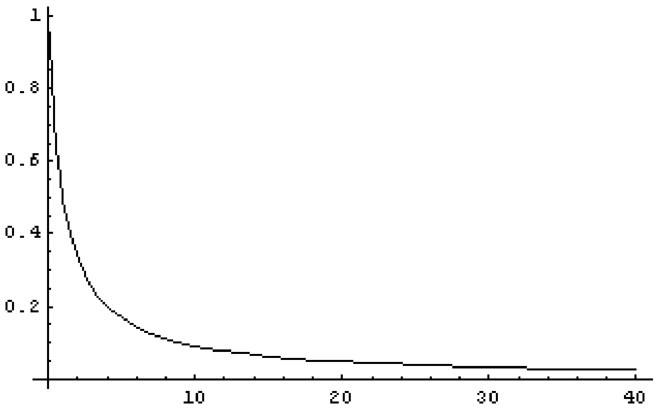
T(E):



$$R = \left| -\frac{q}{ik+q} \right|^2 = \frac{q^2}{k^2+q^2}$$

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \Rightarrow R(E) = \frac{1}{\frac{2\hbar^2}{ma^2}E+1}$$

R(E):



Za konec si poglejmo še, kaj se zgodi v klasičnem opisu delca, ki vpada na delta potencial. Ker je le-to funkcija, ki je povsod 0, le v točki x = 0 gre v neskončnost, je (čisto po zdravi pameti) odbojnost 1, prepustnost pa 0. Če bi bil potencial nekakšen »končen« delta, potem bi bil graf za R in T stopnica: