Lipmann-Schwingerjeva enačba in sipanje

Boštjan Maček

V prvem delu naloge iščemo valovno enačbo in prepustnost za potencial negativne delta funkcije:

$$V(x) = -\lambda\delta(x)$$

Začnemo z Lipmann-Schwingerjevo enačbo, ki je za ta porencial:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + \int \delta(x')\psi(x')\frac{-\lambda m}{i\hbar^2 k}e^{ik(x-x')}dx'$$

Uvedemo oznako z dimenzijo valovnega vektorja $k_0 = \frac{\lambda m}{\hbar^2}$ in zaradi integracije po $\delta(x)$ ostane samo podintegralska funkcija v izhodišču:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} - \psi(0)\frac{k_0}{ik}e^{ikx}$$

Če vstavimo $x = 0$ lahko izrazimo ψ v točki potenciala.

$$\psi(0) = \frac{A}{1 + \frac{k_0}{ik}}$$

Gornji izraz vstavimo v preljšno enačbo in celotna funkcija je

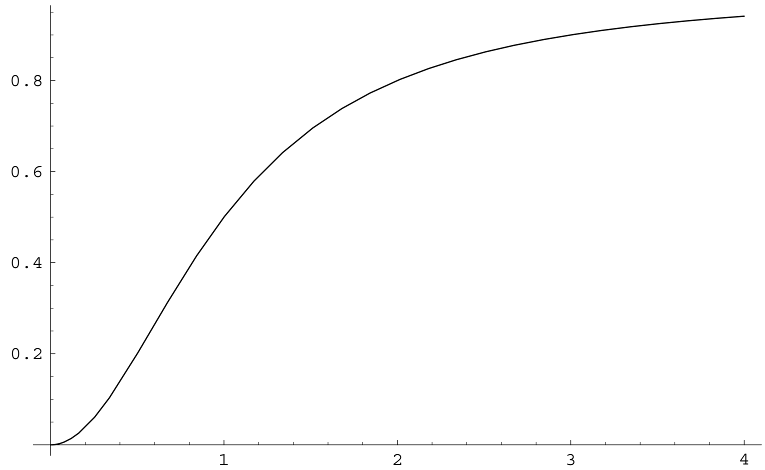
$$\psi(x) = Ae^{ikx} - A\frac{k_0}{ik(1 + \frac{k_0}{ik})}e^{ik|x|} \tag{1}$$

Če iščemo prepustnost moramo privzeti $x > 0$, saj osnovno valovanje prihaja iz smeri negativne x osi:

$$\psi(x) = Ae^{ikx}\left(1 - \frac{k_0}{ik + k_0}\right)$$

in prepustnost T

$$T = \left|1 - \frac{k_0}{ik + k_0}\right|^2 = \left|\frac{ik}{ik + k_0}\right|^2 = \frac{k^2}{k^2 + k_0^2}$$



Slika 1: *Graf prikazuje prepustnost T v odvisnosti od valovnega vektorja k. Ta os je normalizirana glede na k_0.*

Prepustnost pa lahko poiščemo tudi iterativno. V enačbo (1) za $\psi(0)$ vstavimo kar nemoten val (začeten približek), torej A in dobimo:

$$\psi(x) = A\left(e^{ikx} - \frac{k_0}{ik}e^{ik|x|}\right)$$

za $x > 0$, kjer opazujemo prepustnost je

$$\psi(x) = Ae^{ikx}\left(1 - \frac{k_0}{ik}\right) \tag{2}$$

torej je amplituda prepustnosti spodnji izraz, ki ga imenujemo prvi Bohrnov približek.

$$t = 1 - \frac{k_0}{ik}$$

kar je ustrezen razvoj točnega rezultata to drugega člena. Če želimo večjo natančnost lahko vrednost izraza (2) v zhodišču vstavimo v (1) kot naslednji (boljši) približek in tako pridobimo nov red v rezultatu za prepustnost.

Z Lipmann-Schwingerjevo enačbo pa lahko poiščemo tudi vezana stanja.Veljati mora pogoj, da ni vhodnega valovanja, torej, da v enačbi (1) A enak nič.

$$\psi(x) = -\psi(0)\frac{k_0}{ik}e^{ikx}$$

Če zopet poiščemo vrednost v izhodišču dobimo pogoj za k:

$$1 = -\frac{k_0}{ik} \Longrightarrow k = ik_0$$

Torej je valovna funkcija

$$\psi(x) = \psi(0)e^{-k|x|}$$

kar je enako rešitvi Schrodingerjeve enačbe.

Drugi primer je sipanje na dveh pozitivnih delta funkcijah. Tukaj imamo potencial:

$$V(x) = \lambda \left(\delta(x - \frac{a}{2}) + \delta(x + \frac{a}{2}) \right)$$

Zoped začnemo z Lipmann-Schwingerjevo enačbo, ki je za ta potencial:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= Ae^{ikx} + \int \left(\delta(x - \frac{a}{2}) + \delta(x + \frac{a}{2}) \right) \psi(x') \frac{\lambda m}{i\hbar^2 k} e^{ik(x-x')} dx' \\ &= Ae^{ikx} + \frac{k_0}{ik} \left[\psi(-\frac{a}{2}) e^{ik\left|x+\frac{a}{2}\right|} + \psi(\frac{a}{2}) e^{ik\left|x-\frac{a}{2}\right|} \right] \end{aligned}$$

Kot v prejšnjih primerih se prepustnost vidi iz dela valovne funkcije za katerega veljar da $x > \frac{a}{2}$. Tako lahko absolutne vednosti v eksponentih izpustimo in izpostavimo Ae^{ikx} :

$$\psi(x) = Ae^{ikx} \left[1 + \frac{k_0}{ikA} \left(\psi(-\frac{a}{2}) e^{ik\frac{a}{2}} + \psi(\frac{a}{2}) e^{-ik\frac{a}{2}} \right) \right] \tag{3}$$

Vrednost te funkcije poiščemo v točkah obeh potencialov, torej pri $x = -\frac{a}{2}$ in pri $x = \frac{a}{2}$:

$$\begin{aligned} \psi(-\frac{a}{2}) &= Ae^{-ik\frac{a}{2}} + \frac{k_0}{ik} \left[\psi(-\frac{a}{2}) + \psi(\frac{a}{2}) e^{-ika} \right] \\ \psi(\frac{a}{2}) &= Ae^{ik\frac{a}{2}} + \frac{k_0}{ik} \left[\psi(-\frac{a}{2}) e^{ika} + \psi(\frac{a}{2}) \right] \end{aligned}$$

prvo enačbo množimo z $e^{ik\frac{a}{2}}$ in drugo z $e^{-ik\frac{a}{2}}$ in vpeljemo nove spremenljivke

$$\begin{aligned} C &= \psi(\frac{a}{2}) e^{-ika} \\ D &= \psi(-\frac{a}{2}) e^{ika} \\ \alpha &= \frac{k_0}{ik} \\ \beta &= e^{2ika} \end{aligned}$$

Tako dobimo sistem dveh enačb:

$$C = A + \alpha\,[D + C]$$
$$D = A + \alpha\,[D + C\beta]$$

Sistem zapišemo in rešimo v matrični obliki.

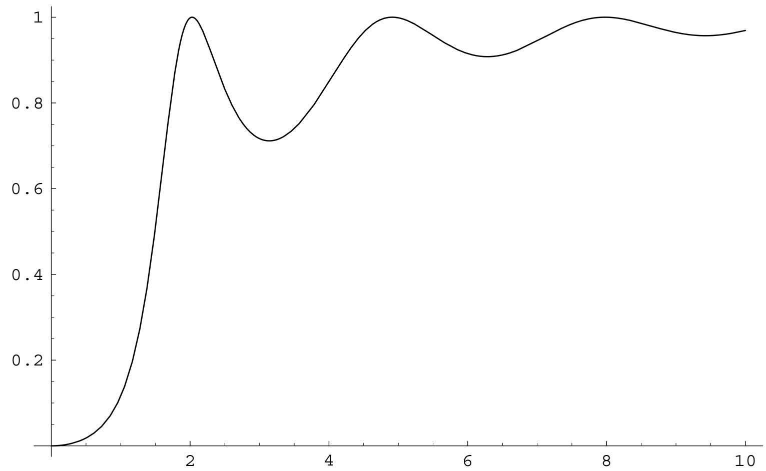
$$\begin{bmatrix} 1-\alpha & -\alpha \\ -\alpha\beta & 1-\alpha \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A \\ A \end{bmatrix}$$
$$\begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix} = \frac{1}{1-2\alpha+\alpha^2-\alpha^2\beta} \begin{bmatrix} 1-\alpha & \alpha \\ \alpha\beta & 1-\alpha \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ A \end{bmatrix}$$
$$\begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix} = \frac{A}{1-2\alpha+\alpha^2-\alpha^2\beta} \begin{bmatrix} 1 \\ 1+\alpha(\beta-1) \end{bmatrix}$$

Izraz v oglatih oklepajih enačbe (3) predstavlja amplitudo prepustnosti t:

$$t = 1 + \frac{\alpha}{A}[C + D] = 1 + \frac{A\alpha}{A(1-2\alpha+\alpha^2-\alpha^2\beta)}[1 + 1 + \alpha\beta - \alpha]$$
$$= 1 + \frac{2\alpha+\alpha^2\beta-\alpha^2}{1-2\alpha+\alpha^2-\alpha^2\beta} = \frac{1}{(1-\alpha)^2-\alpha^2\beta}$$

Sedaj vstavimo nazaj stare spremenljivke in pomnožino števec in imenovalec s k^2:

$$t = \frac{1}{\left(1-\frac{k_0}{ik}\right)^2 + \left(\frac{k_0}{k}\right)^2 e^{2ika}} = \frac{k^2}{(k+ik_0)^2 + k_0^2 e^{2ika}}$$



Slika 2: *Graf zopet prikazuje prepustnost T. Tudi tukaj je horizontalna os normalizirana glede na k_0. Privzeli smo $a = 1$.*