Kvantna mehanika I, domača naloga

Sipanje Gaussovega valovnega paketa na potencialnem skoku

Samo Ratnik

1 Naloga

Razišči sipanje valovnega paketa s pričakovano vrednostjo energije E na ostrem potencialnem skoku višine V_0 za primere, ko je $E < V_0$, ter $E > V_0$; v slednjem primeru tudi interpretiraj, kaj se dogaja, ko je $V_0 < 0$. V primeru $E > V_0$ poišči verjetnost za prehod. V primeru $E < V_0$ oceni, ob katerem času je verjetnost, da se delec nahaja v prepovedanem območju največja in kolikšna je.

2 Splošni valovni paket [3]

Lokalizirana stanja (koncentrirana v kraju) dobimo s superpozicijo ravnih valov:

$$\psi(x,t) = \int \frac{dk}{2\pi}\, \varphi(k)\ \exp(\mathrm{i}(kx - \omega(k)t)), \quad \text{kjer je} \quad \omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}.$$

Za splošni valovni paket zapišemo

$$\varphi(k) = g(k) \exp(\mathrm{i}\eta(k)).$$

Realna utež $g(k)$ ima maksimum pri $k = k_0$ in je samo v področju $|k - k_0| \lessapprox \Delta k$ drastično različna od 0. Za večino vrednosti pozicijske spremenljivke x fazni faktor nad tem območjem za k močno variira in da zato kot rezultat integracije $\psi(x,t) = 0$. $\psi(x,t)$ je maksimalna pri tisti vrednosti x, kjer je faza *stacionarna* – veljati mora

$$\frac{\partial}{\partial k}\Big[kx - \omega(k)t + \eta(k)\Big]_{k=k_0} = 0.$$

Ko izvedemo odvajanje, dobimo:

$$\frac{\partial}{\partial k}\Big[kx - \omega(k)t + \eta(k)\Big]_{k=k_0} = x - \frac{\hbar k_0}{m}t + \frac{d\eta}{dk}\Big|_{k=k_0} = x - v_0 t - x_0 = 0,$$

iz tega pa $x(t) = x_0 + v_0 t$. Za to vrednost $x(t)$ se faza v odvisnosti od k v okolici k_0 ne spreminja močno. Torej je $\psi(x,t)$ na mestu $x(t)$ velika. Vrednost $x(t)$ opisuje torej center valovnega paketa in jo lahko klasično gledamo kot mesto, kjer se nahaja delec, ki se premika z grupno hitrostjo v_0.

Za dejanski izračun integrala razvijemo fazo v okolici k_0:

$$kx - \omega(k)t + \eta(k) = k_0 x - \omega(k_0) + \eta(k_0) + \frac{\partial}{\partial k}\Big[kx - \omega(k)t + \eta(k)\Big]_{k=k_0} \cdot (k - k_0) + ... \approx$$

$$\approx k_0x - \omega(k_0)t + \eta(k_0) + \big(x - x(t)\big)(k - k_0)$$

Še nekoliko natančnejši (vendar tudi bolj razvlečen in zahteven) uvod k snovi je podan v [2] (poglavje 1, odstavek C).

3 Sipanje valovnega paketa

Po uvodu se lahko posvetimo glavnemu delu naloge. Vse primere rešimo po istem postopku: najprej rešimo primer sipanja na potencialnem skoku za ravni val, nato naredimo superpozicijo, da dobimo valovni paket in končno aproksimiramo fazo. Za valovni paket vstavimo premaknjen (fazni del) Gaussov paket

$$\varphi(k) = g(k)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k-k_0)x_0}, \quad \text{kjer je} \quad g(k) = A\exp\big(-\frac{(k-k_0)^2}{2\sigma_k^2}\big)$$

3.1 $V(x) = V_0\ \theta(x);\ E > V_0$

S $\theta(x)$ smo označili t.i. Heavisidovo oz. step funkcijo:

$$\theta(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ 1, & x > 0 \end{cases}$$

3.1.1 Ravni val

Razpišemo po podočjih 1) in 2) (glej sliko 1):

Stacionarna Schrödingerjeva enačba

1) $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi = E\psi \quad$ oz. $\quad \frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0$

2) $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi + V_0\psi = E\psi \quad$ oz. $\quad \frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi + \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}\psi = 0$

Nastavka

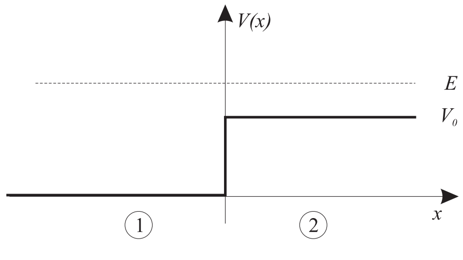
1) $\psi_1(x) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + r\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \qquad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

2) $\psi_2(x) = \tau\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}qx} \qquad q^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}$

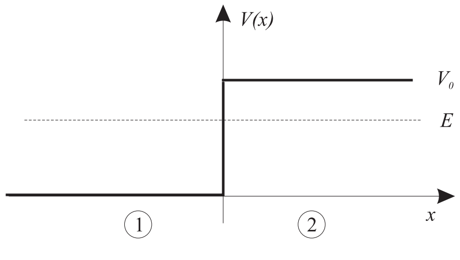
Robni pogoji

I) $\psi_1(x=0) = \psi_2(x=0)$

II) $\frac{d\psi_1}{dx}|_{x=0} = \frac{d\psi_2}{dx}|_{x=0}$



Slika 1: $E > V_0$



Slika 2: $E < V_0$

Iz I) in II) sledi $r = \frac{k-q}{k+q}$ in $\tau = \frac{2k}{k+q}$

Rešitvi lahko združimo s pomočjo step funkcije

$$\psi(x) = \psi_1(x)\theta(-x) + \psi_2(x)\theta(x)$$

Gostota toka
$j := \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\{\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x} - \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\}$
$|j_0| = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}(-\mathrm{i}k)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}(\mathrm{i}k)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\} = \frac{\hbar k}{m}$
$|j_{REFL.}| = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\{r\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}r^*(\mathrm{i}k)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} - r^*\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}r\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\} = \frac{\hbar k}{m}|r|^2$
$|j_{TRANS.}| = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\{\tau\mathrm{e}^{\mathrm{i}qx}\tau^*(-\mathrm{i}q)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}qx} - \tau^*\mathrm{e}^{-\mathrm{i}qx}\tau\mathrm{e}^{\mathrm{i}qx}\} = \frac{\hbar q}{m}|\tau|^2$

Verjetnosti

$$R = |\frac{j_{REFL.}}{j_0}| = |r|^2 \qquad T = |\frac{j_{TRANS.}}{j_0}| = \frac{q}{k}|\tau|^2$$

$$R + T = \frac{(k-q)^2 + 4kq}{(k+q)^2} = \frac{k^2 + q^2 - 2kq + 4kq}{(k+q)^2} = \frac{(k+q)^2}{(k+q)^2} = 1$$

Opombe

- delec se odbije z verjetnostjo R.
- klasično ne bi bilo odboja, ampak bi se delec gibal naprej (v desno) z manjšo energijo. Odboj je analogija odboja svetlobe na meji dveh potencialnih sredstev z različnima lomnima količnikoma.
- prehod v klasično limito (Ehrenfestov teorem) imamo samo pri $E \to \infty$ ($\lambda \to 0$), kjer dobimo $q \to k$, $r \to 0$ in $\tau \to 1$.
- kontinuitetna enačba je izpolnjena: $j_0 = j_{REFL.} + j_{TRANS.}$

3.1.2 Superpozicija

Po analogiji z 2. odstavkom sedaj zapišemo

$$\psi_{LEVO}(x,t) = \int \frac{dk}{2\pi}\varphi(k)\psi_1(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(k)t} = \int \frac{dk}{2\pi}g(k)\big(\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + r\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\big)\exp\big(\mathrm{i}(-\omega(k)t - (k-k_0)x_0)\big) =$$

$$= \int \frac{dk}{2\pi}g(k)\exp\big(\mathrm{i}(kx - \omega(k)t - (k-k_0)x_0)\big) + \int \frac{dk}{2\pi}g(k)r(k)\exp\big(\mathrm{i}(-kx - \omega(k)t - (k-k_0)x_0)\big) = I_1 + I_2$$

Sedaj za vsak integral posebej razvijemo fazni faktor okoli k_0. Za I_1:

$$\frac{\partial}{\partial k}\Big[kx - \omega(k)t - (k-k_0)x_0\Big]_{k=k_0} = x - v_0t - x_0 = 0 \Rightarrow x_1(t) = x_0 + v_0t \quad \text{(iste oznake kot v 2. odstavku)}$$

$$kx - \omega(k)t - (k-k_0)x_0 \approx k_0x - \omega(k_0)t + \big(x - x_1(t)\big)(k-k_0)$$

Za I_2:

$$\frac{\partial}{\partial k}\Big[-kx - \omega(k)t - (k-k_0)x_0\Big]_{k=k_0} = -x - v_0t - x_0 = 0 \Rightarrow x_2(t) = -x_0 - v_0t$$

$$-kx-\omega(k)t-(k-k_0)x_0 \approx -k_0x-\omega(k_0)t+\big(-x-+x_2(t)\big)(k-k_0) \quad \text{in še} \quad r(k)\approx r(k_0)$$

Vstavimo:

$$I_1=\frac{A}{2\pi}\int dk\,\exp\left\{-\frac{(k-k_0)^2}{2\sigma_k^2}+\mathrm{i}\Big(k_0x-\omega(k_0)t+\big(x-x_1(t)\big)(k-k_0)\Big)\right\}=$$

$$=\frac{A}{2\pi}\int_0^\infty dk\,\exp\left\{-\frac{1}{2\sigma_k^2}k^2+\Big(\frac{k_0}{\sigma_k^2}+\mathrm{i}\big(x-x_1(t)\big)\Big)k-\left[\frac{k_0^2}{2\sigma_k^2}-\mathrm{i}\Big(k_0x-\omega(k_0)t-\big(x-x_1(t)\big)k_0\right]\right\}$$

Sedaj uporabimo naslednjo enakost (na to obliko lahko prevedemo tudi vse sledeče integrale)

$$\int_0^\infty dk\,\exp\big\{-ak^2+bk-c\big\}=\exp\Big(\frac{b^2}{4a}-c\Big)\int_0^\infty dk\,\exp\Big\{-a(k-\frac{b}{2a})^2\Big\}=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a}}\exp\Big(\frac{b^2-4ac}{4a}\Big)$$

Torej

$$I_1=...=\frac{\sqrt{2}A\sigma_k}{4\pi}\exp\left\{-\frac{\sigma_k^2}{2}(x-x_0-v_0t)^2+\mathrm{i}(k_0x-\omega(k_0)t)\right\}$$

Podobno razrešimo še I_2:

$$I_2=...=\frac{\sqrt{2}A\sigma_k}{4\pi}\frac{k_0-q}{k_0+q}\exp\left\{-\frac{\sigma_k^2}{2}(-x-x_0-v_0t)^2-\mathrm{i}(k_0x+\omega(k_0)t)\right\}$$

Rešitve za $x>0$:

$$\psi_{DESNO}(x,t)=\int\frac{dq}{2\pi}g(q)\tau(q)\exp\big(-\mathrm{i}(q-q_0)x_0+\mathrm{i}qx-\mathrm{i}\omega(q)t\big) \quad \text{kjer je} \quad g(q)=B\mathrm{e}^{-(q-q_0)^2/(2\sigma_q^2)}$$

Spet razvijemo fazni faktor:

$$\frac{\partial}{\partial q}\Big[qx-\omega(q)t-(q-q_0)x_0\Big]_{q=q_0}=x-u_0t-x_0=0 \;\Rightarrow x(t)=x_0+u_0t, \quad u_0=\frac{\hbar q_0}{m}$$

$$qx-\omega(q)t-(q-q_0)x_0\approx q_0x-\omega(q_0)t+\big(x-x_(t)\big)(q-q_0)$$

Dobimo:

$$\psi_{DESNO}=\frac{B}{2\pi}\tau(q_0)\int dq\,\exp\left\{-\frac{(q-q_0)^2}{2\sigma_q^2}+\mathrm{i}(q_0x-\omega(q_0)t+(x-x(t))(q-q_0))\right\}=...=$$

$$\frac{\sqrt{2}B\sigma_q}{4\pi}\tau(q_0)\exp\left\{-\frac{\sigma_q^2}{2}(x-x_0-u_0t)^2+\mathrm{i}(q_0x-\omega(q_0)t)\right\}$$

Kar je isto kot I_1 prej, le da namesto k sedaj nastopa q.

3.2 $V(x) = V_0\ \theta(x);\ E < V_0$

3.2.1 Ravni val

Spet za obe področji posebej (slika 2):

Stacionarna Schrödingerjeva enačba

1) $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi = E\psi$ oz. $\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0$

2) $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi + V_0\psi = E\psi$ oz. $\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi + \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}\psi = 0$

Nastavka

1) $\psi_1(x) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + r\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$ $\quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

2) $\psi_2(x) = \tau\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}qx} = \tau \mathrm{e}^{-\kappa x}$ $\quad q = \mathrm{i}\kappa \quad \kappa^2 = \frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}$

Robni pogoji

I) $\psi_1(x=0) = \psi_2(x=0)$

II) $\frac{d\psi_1}{dx}|_{x=0} = \frac{d\psi_2}{dx}|_{x=0}$

Iz I) in II) sledi $r = \tau - 1 = \frac{k-\mathrm{i}\kappa}{k+\mathrm{i}\kappa}$ in $\tau = \frac{2k}{k+\mathrm{i}\kappa}$

Opombe

- delec sicer prodre v globino stopnice, vendar ni nobenega toka ($R = |r|^2 = 1$).
- za $V_0 \to \infty$ dobimo $\kappa \to \infty$, $\tau = 0$, $r = 1$. S tem dobimo pogoj za neskončne potenciale: $\psi|_{na\ robu} = 0$.

3.2.2 Superpozicija

Za $x < 0$:
Pišemo $r = |r|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma(k)}$. Vemo: $|r| = 1$, potrebujemo še $\gamma(k)$.

$$r = \frac{k-\mathrm{i}\kappa}{k+\mathrm{i}\kappa} = \frac{k^2-\kappa^2-2\mathrm{i}\kappa k}{k^2+\kappa^2} \qquad \tan\gamma = -\frac{2k\kappa}{k^2-\kappa^2} \Rightarrow \gamma(k) = -\arctan\frac{2\kappa k}{k^2-\kappa^2}$$

$$\psi_{LEVO} = \int \frac{dk}{2\pi}\varphi(k)\psi_1(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(k)t} = \int \frac{dk}{2\pi}g(k)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(k-k_0)x_0}\big(\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma(k)}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\big)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(k)t} =$$

$$= \int \frac{dk}{2\pi}g(k)\exp\Big\{\mathrm{i}(kx-\omega(k)t-(k-k_0)x_0)\Big\} + \int \frac{dk}{2\pi}g(k)\exp\Big\{\mathrm{i}(-kx-\omega(k)t+\gamma(k)-(k-k_0)x_0)\Big\} = I_1 + I_2$$

Z *metodo ostrega pogleda* vidimo (glej I_1 v odstavku 3.1.2) da je

$$I_1 = \frac{\sqrt{2}A\sigma_k}{4\pi}\exp\Big\{-\frac{\sigma_k^2}{2}(x-x_0-v_0t)^2 + \mathrm{i}(k_0x-\omega(k_0)t)\Big\}$$

Za I_2 po analogiji s prejšnjimi primeri razvijemo fazni faktor:

$$\frac{\partial}{\partial k}\Big[-kx-\omega(k)t+\gamma(k)-(k-k_0)x_0\Big]_{k=k_0} = -x-x_0-v_0t+\gamma'(k_0) = 0 \ \Rightarrow \gamma'(k_0) = 2(x+x(t))$$

$$-kx-\omega(k)t-(k-k_0)x_0+\gamma(k) \approx -k_0x-\omega(k_0)t+\gamma(k_0)+\big(-x-x(t)+\gamma'(k_0)\big)(k-k_0)$$

Torej je:

$$I_2 = A\int \frac{dk}{2\pi}\exp\Big\{-\frac{(k-k_0)^2}{2\sigma_k^2}+\mathrm{i}\Big(-k_0x-\omega(k_0)t+\gamma(k_0)+\big(-x-x(t)+\gamma'(k_0)\big)(k-k_0)\Big)\Big\} =$$

$$= \frac{A}{2\pi}\int dk\exp\Big\{-\frac{1}{2\sigma_k^2}k^2+\Big(\frac{k_0}{\sigma_k^2}-\mathrm{i}\big(x+x(t)-\gamma'(k_0)\big)\Big)k-\Big(\frac{k_0^2}{2\sigma_k^2}-\mathrm{i}\big(-k_0x-\omega(k_0)t+\gamma(k_0)-k_0(-x-x(t)+\gamma'(k_0))\big)\Big)\Big\} =$$

$$= \ldots = \frac{\sqrt{2}A\sigma_k}{4\pi}\exp\Big\{-\frac{\sigma_k^2}{2}\big(x+x(t)\big)^2-\mathrm{i}k_0x-\mathrm{i}\omega(k_0)t+\gamma(k_0)\Big\}$$

Še za $x > 0$:

$$\tau(\kappa) = \frac{2k}{k+\mathrm{i}\kappa} = \frac{2k(k-\mathrm{i}\kappa)}{k^2+\kappa^2} = \frac{2k^2-2\mathrm{i}k\kappa}{k^2+\kappa^2}, \quad \tau = |\tau|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta(\kappa)} \Rightarrow |\tau(\kappa)| = \sqrt{\frac{4k^4+4k^2\kappa^2}{(k^2+\kappa^2)^2}} = \frac{2k}{\sqrt{k^2+\kappa^2}}$$

$$\text{in} \quad \tan\delta(\kappa) = -\frac{k\kappa}{k^2} \Rightarrow \delta(k) = -\arctan\frac{\kappa}{k}$$

Valovna funkcija:

$$\psi_{DESNO} = \int\frac{d\kappa}{2\pi}|\tau(\kappa)|B\exp\Big\{-\frac{(\kappa-\kappa_0)^2}{2\sigma_\kappa^2}-\kappa x+\mathrm{i}\big(\delta(\kappa)-\omega(\kappa)t-(\kappa-\kappa_0)x_0\big)\Big\}$$

Razvoj faznega faktorja:

$$\frac{\partial}{\partial\kappa}\Big[\delta(\kappa)-\omega(\kappa)t-(\kappa-\kappa_0)x_0\Big]_{\kappa=\kappa_0} = \delta'(\kappa_0)-u_0t-x_0 = 0 \Rightarrow \delta'(\kappa_0) = x_0+u_0t \quad \big(u_0 = (\hbar\kappa_0)/m\big)$$

$$\delta(\kappa)-\omega(\kappa)t-(\kappa-\kappa_0)x_0 \approx \delta(\kappa_0)-\omega(\kappa_0)t+\big(\delta'(\kappa_0)-x_0-u_0t\big)(\kappa-\kappa_0)$$

Torej:

$$\psi_{DESNO} = \frac{B}{2\pi}|\tau(\kappa_0)|\int d\kappa\exp\Big\{-\frac{1}{2\sigma_\kappa^2}\kappa^2+\Big(\frac{\kappa_0}{\sigma_\kappa^2}-x\Big)\kappa-\Big(\frac{\kappa_0^2}{2\sigma_\kappa^2}-\mathrm{i}\big(\delta(\kappa_0)-\omega(\kappa_0)t\big)\Big)\Big\} =$$

$$= \ldots = \frac{\sqrt{2}B\sigma_\kappa}{4\pi}|\tau(\kappa_0)|\exp\Big\{\frac{x^2\sigma_\kappa^2}{2}-\kappa_0x+\mathrm{i}\big(\delta(\kappa_0)-\omega(\kappa_0)t\big)\Big\}$$

Na priloženih slikah (3,4,5) je prikazan časovni razvoj valovne funkcije za različne potenciale. In sicer:
Slika 3: $V(x) = V_0\theta(x),\ E > V_0$
Slika 4: $V(x) = -V_0\theta(x),\ E > V_0$
Slika 5: $V(x) = V_0\theta(x),\ E < V_0$

Slike so vzete iz [1].

Literatura

[1] Brandt, Siegmund in Hans Dieter Dahmen (1995) *The picture book of quantum mechanics.* 2nd edition. New York: Springer.

[2] Cohen–Tannoudji, Claude, Bernard Diu in Franck Laloë (1977) *Quantum mechanics.* New York: John Wiley.

[3] Schwabl, Franz (1992) *Quantenmechanik.* 3. Auflage. Berlin: Springer-Verlag.