Sipanje na končni potencialni jami (KPJ)

Ajasja Ljubetič

29. marec 2007

1 Sodi potencial in degenerirana stanja

1.1 Naloga

Pokaži, da lahko tudi pri degeneriranih stanjih izberemo sode in lihe lastne funkcije, če je potencial $V(-x) = V(x)$.

1.2 Rešitev

Če je potencial sodi sledi, da je tudi Hamiltonian $\hat{H}(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$ sodi:

$$\hat{H}(-x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial(-x)^2} + V(-x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial(x)^2} + V(x) = \hat{H}(x) \tag{1.1}$$

Če zapišemo Schrödingerjevo enačbo z Hamiltonianom

$$\hat{H}(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

in v enačbi zamenjamo $x \to -x$

$$\hat{H}(-x)\psi(-x) = E\psi(-x)$$

ter uporabimo enačbo (1.1) dobimo

$$\hat{H}(x)\psi(-x) = E\psi(-x)$$

iz česar sledi, da je tudi $\psi(-x)$ rešitev Schrödingerjeve enačbe z enako energijo.

$\psi(x)$ in $\psi(-x)$ sta lahko linearno odvisni ali linearno neodvisni. Če sta linearno odvisni (torej, če imamo nedegenerirano stanje) smo že pri prvi vaji pokazali da mora $\psi(x)$ biti bodisi liha, bodisi soda. Če pa sta $\psi(x)$ in $\psi(-x)$

linearno neodvisni (torej, če imamo degenerirano stanje) potem lahko iz niju tvorimo novo bazo lihih in sodih funkcij:

$$\psi_S(x) = \psi(x) + \psi(-x) \tag{1.2}$$

$$\psi_L(x) = \psi(x) - \psi(-x) \tag{1.3}$$

Tako smo pokazali, da lahko tudi za degenerirana stanja vedno izberemo sode in lihe lastne funkcije.

2 Prepustnost končne potencialne jame

2.1 Naloga

Izračunaj amplitudo za prepustnost končne potencialne jame z globino V_0 in širino a. [1]

2.2 Rešitev

Imamo potencialno jamo, se pravi potencial oblike

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{če } x \leq b & \text{- območje 1} \\ -V_0 & \text{če } |x| < b & \text{- območje 2} \\ 0 & \text{če } x \geq b & \text{- območje 3} \end{cases}$$

Sipanje je zanimivo predvsem za valovne pakete. Valovni paket pa lahko (na srečo) zapišemo kot linearno kombinacijo ravnih valov. Tako da se lahko za potrebe krede in table brez izgube splošnosti omejimo samo na ravne (potujoče) valove.

Prosti val, ki potuje v desno predstavlja e^{ik_1x}, tistega, ki potuje v levo pa e^{-ik_1x}.

$\left(k_1 = k_3 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\right)$ Tudi znotraj potencialne jame rešitve že poznamo, to so linearne kombinacije $\sin(k_2x)$ in $\cos(k_2x)$.

$\left(k_2 = \sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}\right)$

Tako imamo lahko v območji 1 val, ki potuje v levo in val, ki potuje v desno, enako pa velja za območje 3. V splošnem imamo torej valovne funkcije

[1] Rajši sem uvedel novo spremenljivko $a = 2b$ in vzel jamo od $-b$ do b kot pa od $-\frac{a}{2}$ do $\frac{a}{2}$, tako da mi ni treba vleči tistih polovičk vedno sabo. Na koncu pa bom v enačbah ponovno uvedel $a = 2b$.

$$
\begin{aligned}
\psi_1(x) &= Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \\
\psi_2(x) &= C\sin(k_2x) + D\cos(k_2x) \\
\psi_3(x) &= Fe^{ik_3x} + Ge^{-ik_3x}
\end{aligned}
$$

Vendar pa je dovolj poučen in zanimiv že primer, če prihaja val iz leve in se na potencialu sipa (del se odbije, del pa se prepusti). Tako na desni strani ni vala, ki bi potoval v levo ($G = 0$). Zanima nas prepustnost, ki je definirana kot delež amplitude vala, ki potencial preide. V našem primeru torej:

$$
T = \frac{|F|^2}{|A|^2} \tag{2.1}
$$

Ker nas zanima samo razmerje, lahko brez škode za splošnost privzamemo, da je $A = 1$. S tem smo "potihem" naredili normalizacijo.

Naše valovne funkcije so torej:

$$
\begin{aligned}
\psi_1(x) &= e^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} && (2.2) \\
\psi_2(x) &= C\sin(k_2x) + D\cos(k_2x) && (2.3) \\
\psi_3(x) &= Fe^{ik_1x} && (2.4)
\end{aligned}
$$

Tako nam ostanejo še 4 neznanke (B, C, D, F) katerih vrednosti lahko dobimo iz zahteve, da je celotna valovna funkcja zvezna in zvezno odvedljiva (problematične so samo meje potencialne jame pri $-b$ in b).

$$
\begin{aligned}
\psi_1(-b) = \psi_2(-b) &\Rightarrow Be^{ik_1b} + C\sin(k_2b) - D\cos(k_2b) = -e^{-ik_1b} \\
\psi_1'(-b) = \psi_2'(-b) &\Rightarrow Bik_1e^{ik_1b} + Ck_2\cos(k_2b) + Dk_2\sin(k_2b) = ik_1e^{-ik_1b} \\
\psi_2(b) = \psi_3(b) &\Rightarrow C\sin(k_2b) + D\cos(k_2b) - Fe^{ik_1b} = 0 \\
\psi_2'(b) = \psi_3'(b) &\Rightarrow Ck_2\cos(k_2b) - Dk_2\sin(k_2b) - Fik_1e^{ik_1b} = 0
\end{aligned}
$$

Tako dobimo (linearni) sistem 4 enačb z 4 neznankami. C in D lahko izrazimo iz prvih dveh z B ter vstavimo v drugi dve. Nato pa še iz preostalih dveh eliminiramo B in tako dobimo F. Seveda lahko koeficiente damo tudi v 4×4 matriko ter poiščemo njen inverz. Lahko pa se lotimo tudi zvitega trika. Valovne funkcije razpišemo po sodi in lihi bazi (saj smo v prejšnjem primeru pokazali, da lahko to vedno naredimo). Potem pa rešujemo problem za sode in lihe funkcije ločeno. Tako razdelimo naš prvotni 4×4 sistem na dva manjša 2×2 sistema. Rešimo vsakega posebej in potem izrazimo F z linearno kombinacijo rešitev 2×2 sistema.

Prvi pristop se mi zdi še najbolj intuitiven (posebno za sipanje) in tudi najbolj (konceptualno) enostaven:

Iz prvih dveh enačb izrazimo C in D z B

$$D = \left(Be^{ibk_1} + e^{-ibk_1}\right)\cos(bk_2) - i\frac{k_1}{k_2}\left(Be^{ibk_1} - e^{-ibk_1}\right)\sin(bk_2)$$

$$C = -i\frac{k_1}{k_2}\left(Be^{ibk_1} - e^{-ibk_1}\right)k_1\cos(bk_2) - B\left(e^{ibk_1} + e^{-ibk_1}\right)\sin(bk_2)$$

Nato vstavimo v drugi dve enačbi in rešimo 2×2 za F.

$$F = \frac{e^{-2ibk_1}}{\cos(2bk_2) - i\frac{\left(k_1^2+k_2^2\right)}{2k_1k_2}\sin(2bk_2)} \tag{2.5}$$

Če upoštevamo še $a = 2b$ dobimo:

$$F = \frac{e^{-iak_1}}{\cos(ak_2) - i\frac{\left(k_1^2+k_2^2\right)}{2k_1k_2}\sin(ak_2)} \tag{2.6}$$

Prepustnostni koeficient je potem (upoštevamo $A = 1$ in enačbo (2.1))

$$T = |F|^2 = \frac{1}{1 + \sin^2(k_2b)\left(\frac{(k_1-k_2)^2}{2k_1k_2}\right)} \tag{2.7}$$

3 Popolna prepustnost

3.1 Naloga

Pokaži pri katerih energijah je prepustnost jame enaka 1.

3.2 Rešitev

Popolno prepustnost si lahko "razložimo" tako, da si predstavljamo, da se val, ki prihaja iz desne strani odbije pri prehodu desne "stene" ($x = \frac{a}{2}$) in ponovno pri levi "steni" ($x = -\frac{a}{2}$). Če je širina jame v primerjavi z valovno dolžino ustrezna, potem se val sipa v fazi in dobimo popolno prepustnost.

Če pogledamo enačbo (2.7) potem hitro opazimo, da je $T = 1$ ko je

$$\sin^2(k_2a)\left(\frac{(k_1-k_2)^2}{2k_1k_2}\right) = 0$$

Če je $k_1 = k_2$ to pomeni, da imamo konstanten potencial (in je logično, da je prepustnost popolna:), tako da ta primer ni zanimiv.

Zanimiv primer je torej, ko je $\sin(k_2 a) = 0$, to pa se zgodi, ko

$$k_2 a = n\pi$$

Če vstavimo $k_2 = \sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}$ in malo preuredimo člene dobimo

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} - V_0 \tag{3.1}$$

kar pa so ravno vezana stanja v neskončni potencialni jami!