Igor Mele

5. marec 2008

Kvantna mehanika I

Sipanje na delta potencialu

1. Izpelji operator toka in izračunaj njegovo pričakovano vrednost.

Pričakovano vrednost operatorja zapišemo kot:

$$\langle A \rangle = \int \psi^*(x')\hat{A}\,\psi(x')dx'$$

$$\rho(x) = \int \psi^*(x')\delta(x'-x)\psi(x')dx'$$

Delovanje delta funkcije na ψ:

$$\int \delta(x'-x)\psi(x')dx' = \int \psi(x)dx'$$

Preverimo, če operator delta funkcije zadošča definiciji verjetnostne gostote:

$$\rho(x) = \psi^*(x)\psi(x) = |\psi(x)|^2$$

Hitrost *v* izrazimo z gibalno količino *p*. Gostoto točkastega delca pa lahko zapišemo z delta funkcijo $\delta(x'-x)$.

$$j(x) = \rho(x)v = \delta(x'-x)\frac{p}{m} = \frac{1}{2}\left[\delta(x'-x)\frac{p}{m} + \frac{p}{m}\delta(x'-x)\right]$$

Na tem mestu upoštevamo t.i. *korespondenčni princip*, ki pravi, da dobimo kvantno mehanske operatorje tako, da zapišemo klasičen operator z *x* in *p* in ju nato nadomestimo z ustreznima kvantnima operatorjema. V našem primeru zato najprej klasični operator simetriziramo, ker gibalna količina *p* ter položaj *x* v kvantni mehaniki ne komutirata. Nato pa klasične operatorje nadomestimo s kvantnimi.
Tako dobimo:

$$\hat{j}(x) = \frac{1}{2}\left[\delta(x'-x)\frac{\hat{p}}{m} + \frac{\hat{p}}{m}\delta(x'-x)\right]$$

Operator gibalne količine: $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}$.

Izračun pričakovane vrednosti operatorja *j(x)*:

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

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

Hermitske operatorje lahko prestavimo iz člena, ki stoji za njim, na člen pred njim:

$$\langle j(x)\rangle = \frac{1}{2m}(-i\hbar\psi'(x)\psi^*(x)) + \frac{1}{2m}(-i\hbar\psi'(x))^*\psi(x) =$$

Tako dobimo končen izraz za pričakovano vrednost operatorja toka:

$$\boxed{\langle j(x)\rangle = \frac{-i\hbar}{2m}\left[\psi'(x)\psi^*(x) - (\psi'(x))^*\psi(x)\right]} \quad (1)$$

2. Za delec v potencialu $V(x) = -\lambda\delta(x)$ izračunaj amplitudi za prepustnost in odbojnost in nariši prepustnost v odvisnosti od energije delca

Za $x < 0$ uporabimo nastavek:

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

Za $x > 0$ pa:

$$\psi_2(x) = Ce^{ikx}$$

Tu se moramo zavedati, da sta valovna vektorja *k*, v nastavkih za ψ_1 in ψ_2, enaka zaradi simetričnega potenciala. V splošnem potencialu bi imeli dva različna valovna vektorja *k* in *k'*.

Upoštevamo zveznost valovnih funkcij pri *x=0*:

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

Sledi prva enačba za rešitev sistema:

$$\boxed{A + B = C} \quad (2)$$

Robni pogoj, ki povezuje odvoda valovnih funkcij je:

$$\left.\frac{\partial\psi_2}{\partial x}\right|_{x=0} - \left.\frac{\partial\psi_1}{\partial x}\right|_{x=0} = \frac{2m}{\hbar^2}\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} V(x)\psi(x)dx =$$

$$= \frac{2m}{\hbar^2}\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} -\lambda\delta(x)\psi(x)dx = \frac{2m}{\hbar^2}\lambda\psi(x=0)$$

Izračunamo še levo stran z odvodi in izenačimo:

$$ikC - (ikA + ikB) = -\frac{2m\lambda}{\hbar^2}C$$

$$-ikA + ikB = C(-ik - \frac{2m\lambda}{\hbar^2})$$

Enačbo delimo z *(-ik)* in dobimo drugo enačbo za rešitev sistema:

$$\boxed{A - B = C(1 + \frac{2n}{ik})} \quad (3)$$

Kjer smo vpeljali novo spremenljivko $\frac{m\lambda}{\hbar^2} = n$. Dobili smo 2 enačbi s tremi neznankami (A, B, C), vendar A poznamo kot amplitudo vpadnega valovanja.

Seštejemo enačbi (2) in (3):

$$2A = C(1 + \frac{2n}{ik})$$

Iz tega sledi enačba za C:

$$\boxed{C = \frac{A}{1 + \frac{n}{ik}}}$$

Iz enačbe (2) sledi:

$$B = C - A = \frac{A}{1 + \frac{n}{ik}} - A = A(\frac{-1}{1 + \frac{ik}{n}})$$

Enačba za B:

$$\boxed{B = (\frac{-A}{1 + \frac{ik}{n}})}$$

Zdaj ko imamo določena koeficienta B in C, lahko določimo $j(x)$.
Najprej za $x < 0$:

Uporabimo enačbo (1) ter nastavek $\psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$.

$$j(x) = \frac{-i\hbar}{2m}\left[\left(ikAe^{ikx} - ikBe^{-ikx}\right)\left(A^* e^{-ikx} + B^* e^{ikx}\right) - \left(-ikA^* e^{-ikx} + ikB^* e^{ikx}\right)\left(Ae^{ikx} + Be^{-ikx}\right)\right]$$

$$j(x) = \frac{-i\hbar}{2m}\left[ikAA^* + ikAB^* e^{2ikx} - ikA^* Be^{-2ikx} - ikBB^*\right] +$$
$$+ \frac{i\hbar}{2m}\left[-ikAA^* + ikAB^* e^{2ikx} - ikA^* Be^{-2ikx} + ikBB^*\right] =$$

$$j(x < 0) = \frac{-i\hbar}{2m}(2ikAA^* - 2ikBB^*) = \frac{k\hbar}{m}\left(|A|^2 - |B|^2\right)$$

Hitro lahko določimo $j(x > 0)$:

$$j(x>0)=\frac{k\hbar}{m}|C|^2$$

Določimo **prepustnost *T***:

$$T=\left|\frac{C}{A}\right|^2=\left|\frac{\frac{A}{1+\frac{n}{ik}}}{A}\right|^2=\frac{1}{\left|1+\frac{n}{ik}\right|^2}=\frac{1}{1+\frac{n^2}{k^2}}$$

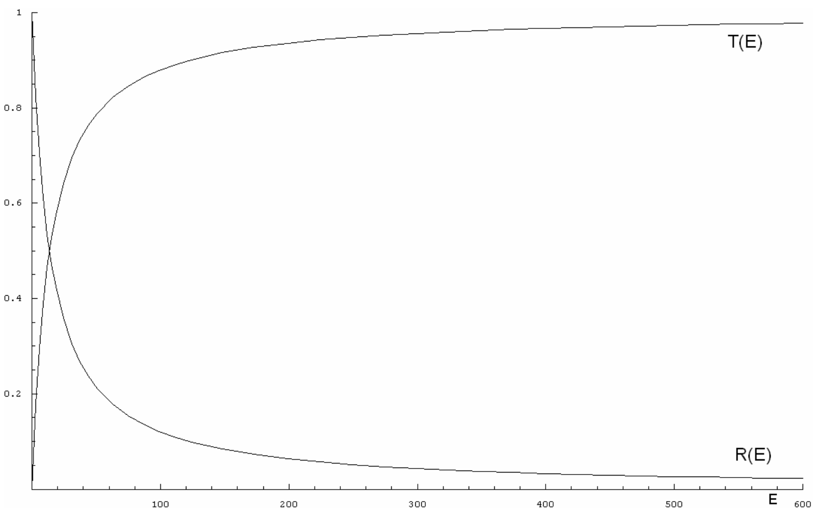
T lahko zapišemo z energijo:

$E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$ in $E_0=\frac{\hbar^2n^2}{2m}$, kjer je ponovno $n=\frac{m\lambda}{\hbar^2}$

$$T=\frac{1}{1+\frac{E_0}{E}}$$

Odbojnost *R* je definirana kot:

$R=\left|\frac{B}{A}\right|^2$ in $T+R=1$



Slika1: Prepustnost *T* in odbojnost *R* v odvisnosti od energije delca

Iz grafa se lepo vidi, ko gre energija delca v neskončnost, postane prepustnost praktično 1, odbojnost pa pada proti 0, kar je tudi za pričakovati.

Iz amplitud za prepustnost in odbojnost lahko določimo *valovne funkcije vezanih stanj* tako, da pogledamo kje so poli.

$$C = \frac{A}{1 + \frac{n}{ik}} \; ; \; B = \left(\frac{-A}{1 + \frac{ik}{n}}\right)$$

Vidimo, da je pol pri $k = in$, valovni funkciji $\psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ in $\psi_2(x) = Ce^{ikx}$ sta oblike:

$$\psi_1(k = in) = Ae^{-nx} + Be^{nx}$$
$$\psi_2(k = in) = Ce^{-nx}$$

Koeficienta B in C postaneta v primerjavi z A zelo velika (B, C >> A), zato člen pri ψ_1, ki vsebuje A, zanemarimo.