Poročilo vaje pri predmetu kvantna mehanika

Delec v različnih delta potencialih

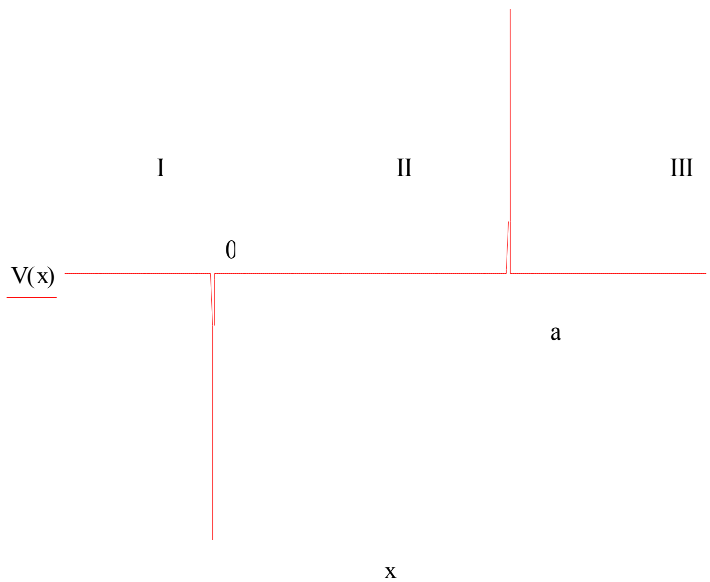
Avtor: Kristjan Anderle

Asistent: Tomaž Rejec

Imamo delec v danem potencialu:

$$V(x) = -\lambda \cdot \delta(x) + \lambda \delta(x - a)$$

Katerega prikazuje spodnja skica.



Potencial razdelimo na tri območja, ki sem jih označil z rimskimi številkami.
Vemo kakšne oblike bodo valovne funkcije povsod razen v ničli in v a-ju:

$$\psi_{I}(x) = A e^{kx}$$

$$\psi_{II}(x) = B e^{kx} + C e^{-kx}$$

$$\psi_{III}(x) = D e^{-kx}$$

kjer je k valovni vektor, ki je povezan z energijo delca na sledeč način:

$$k = \sqrt{\frac{2 \cdot m}{h^2} \cdot (-E)}$$

Kjer so A, B, C in D neznane konstante, ki jih določimo iz robnih pogojev.
Prvi robni pogoj bomo dobili, če bomo upoštevali, da mora biti valovna funkcija povsod zvezna. To zapišemo:

$$\psi\,I(0) = \psi\,II(0)$$

$$\psi\,II(a) = \psi\,III(a)$$

Iz tega pogoja dobimo prvi dve enačbi in sicer:

$$A = B + C$$

$$Be^{ka} + Ce^{-ka} = De^{-ka}$$

Zadnji dve enačbi pa dobimo če upoštevamo, da ima odvod valovne funkcije v točki nič in a skok in sicer v vrednosti:

$$\frac{d}{dx}\psi\,II - \frac{d}{dx}\psi\,I = \frac{2m}{h^2}\cdot\left(\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} V(x)\,\psi\,(x)\,dx\right) = \frac{-2m\lambda}{h^2}\cdot\psi\,(0) \quad \text{; pri točki nič}$$

$$\frac{d}{dx}\psi\,III - \frac{d}{dx}\psi\,II = \frac{-2m\lambda}{h^2}\cdot\psi\,(a) \quad ; \qquad \text{pri točki a}$$

Iz teh dveh pogojev sledita enačbi:

$$B\cdot k - C\cdot k - A\cdot k = \frac{-2\cdot m\cdot\lambda}{h^2}\cdot A$$

$$-D\cdot k\cdot e^{-ka} - B\cdot k\cdot e^{ka} + C\cdot k\cdot e^{-ka} = \frac{2\cdot m\cdot\lambda}{h^2}\cdot D\cdot e^{-ka}$$

Sedaj imamo homogen sistem štirih neznank (A, B, C in D). Zgornje enačbe bi lahko prevedli v matriko. Netrivialno rešitev bi dobili, če bi zahtevali, da mora biti determinanta enaka nič. Ker so enačbe dokaj lepe, lahko ta pogoj dobimo tudi z nekaj računske spretnosti. Zapišimo še enkrat vse štiri enačbe:

$$A = B + C$$

$$Be^{ka} + Ce^{-ka} = De^{-ka}$$

$$B\cdot k - C\cdot k - A\cdot k = -2\cdot n\cdot A$$

$$-D\cdot k\cdot e^{-ka} - B\cdot k\cdot e^{ka} + C\cdot k\cdot e^{-ka} = 2\cdot n\cdot D\cdot e^{-ka}$$

kjer smo upeljali:

$$n = \frac{m\cdot\lambda}{h^2}$$

Malo preuredimo tretjo enačbo:

$$\frac{-2\cdot n}{k}\cdot A + A = B - C$$

Če sedaj to enačbo enkrat seštejemo, drugič pa odštejemo s prvo enačbo, dobimo enačbi za B in C:

$$B = A - \frac{n}{k}\cdot A$$

$$C = \frac{n}{k}\cdot A$$

Ti dve enačbi pa lahko med sabo delimo, da se znebimo A-ja:

$$\frac{B}{C} = \frac{k - n}{n}$$

Podobno sedaj storimo s drugo in četrto enačbo. Ponovno najprej preuredimo četrto enačbo:

$$-Be^{ka} + Ce^{-ka} = \frac{2\cdot n}{k}\cdot D\cdot e^{-ka} + D\cdot e^{-ka}$$

Dobljeno enačbo ponovno enkrat seštejemo, drugič pa odštejemo od druge in dobljeni dve enačbi med sabo delimo. Dobimo:

$$\frac{C}{B} = \frac{-n - k}{n\cdot e^{-2ka}}$$

Ti dve na novo dobljeni enačbi sta ravno recipročni, tako da jih med sabo pomnožimo:

$$\frac{k - n}{n}\cdot\frac{-n - k}{n\cdot e^{-2ka}} = 1$$

Z malo premetavanja dobimo:

$$e^{-2ka} = \frac{n^2 - k^2}{n^2}$$

Rešitve te transcendente enačbe nam dajo vrednost za k. Z vpeljavo brezdimenzijskih spremenljivk:

$$k\cdot a = x$$

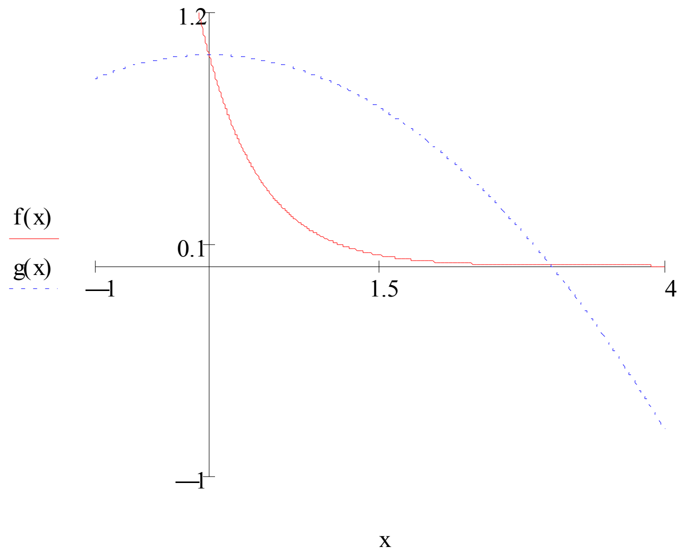
$$n\cdot a = x0$$

Dobimo

$$e^{-2x} = 1 - \left(\frac{x}{x0}\right)^2$$

Levo in desno stran dobljene enačbe lahko narišemo za nek določen x0 (v tem primeru je 3).

$$f(x) := e^{-2x} \qquad g(x) := 1 - \left(\frac{x}{3}\right)^2$$



Vidimo, da se funkciji sekata dvakrat, kar nam da dva k-ja. Očitno je za vsak x0 rešitev x=0, kar nam da k=0 in posledično E=0, kar nas ne zanima. Druga rešitev pa mora obstajati, saj eksponentna funkcija pada hitreje kot parabolična in se nekje morata sekati. Tam kjer se sekata, dobimo drugo rešitev in s tem želeno vrednost k-ja.

Radi bi tudi preverili, če se rešitev ujema za delec v potencialu:

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

Za delec v takem potencialu vemo, da so lastne energije in s tem določeni valovni vektorji, naslednje oblike:

$$k = \frac{2 \cdot m \cdot \lambda}{h^2} = n$$

Če pri našem potencialu, ki vsebuje dve delti pošljemo a v neskončnost, bomo dosegli da bo delec čutil samo potencial, ki smo ga opisali zgoraj.
Če torej prepišemo enačbo za ta delec:

$$e^{-2ka} = \frac{n^2 - k^2}{n^2}$$

in pošljemo a v neskončnost, dobimo:

$$0 = \frac{n^2 - k^2}{n^2}$$

in

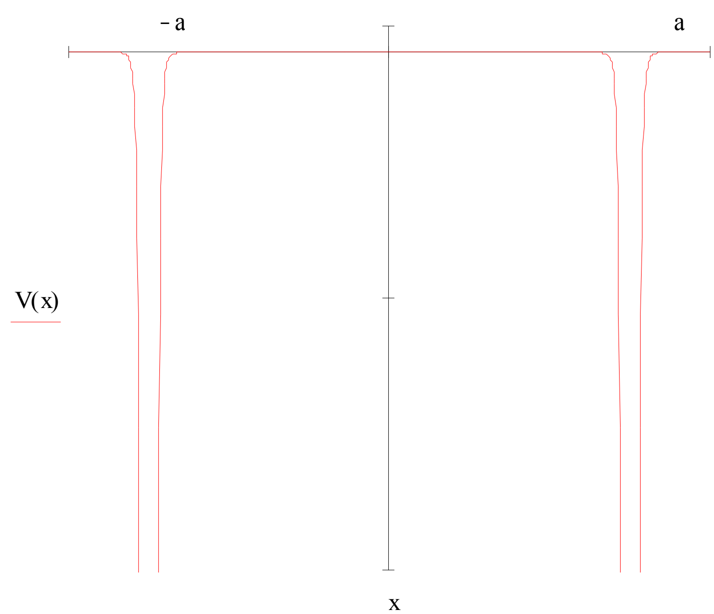
$$k = n$$

kar je enako kot smo predvidevali.

Oglejmo si sedaj še delec v podobnem potencialu:

$$V(x) = -\lambda \cdot \delta(x + a) - \lambda\delta(x - a)$$

Katerega prikazuje spodnja skica.



Tak potencial je simetričen, zato vemo, da bodo valovne funkcije sode oziroma lihe. Torej lahko gledamo samo eno delta funkcijo in napišemo kakšne bi bila valovna funkcija poleg nje ter upoštevamo, da mora biti ta valovna funkcija soda oziroma liha. Območju levo od delta funkcije označimo z **I** in desno z **II**. Tako dobimo naslednje valovne funkcije:

Sodi:

$$\psi I = A \cdot e^{kx}$$

$$\psi II = B \cdot ch(kx)$$

Lihi:

$$\psi II = A \cdot e^{kx}$$

$$\psi III = B \cdot sh(kx)$$

Enako kot prej upoštevamo zveznost valovne funkcije in skok odvodov ter dobimo naslednji enačbi:

$$A \cdot e^{-ka} = B \cdot ch(k \cdot a)$$

$$A\left(2ne^{-ka} - k \cdot e^{-ka}\right) = B \cdot k \cdot sh(k \cdot a)$$

Kjer smo z n označili že znano konstanto:

$$n = \frac{m \cdot \lambda}{h^2}$$

Zgornji dve enačbi med sabo delimo in dobimo končni izraz:

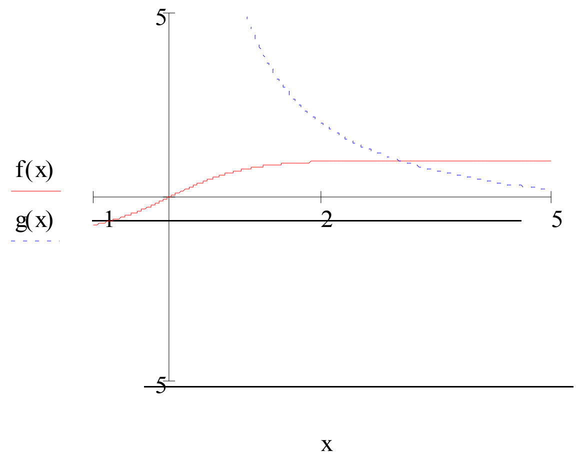
$$th(k \cdot a) = \frac{2n - k}{k}$$

Podobno enačbo dobimo tudi za lihe funkcije:

$$cth(k \cdot a) = \frac{2n - k}{k}$$

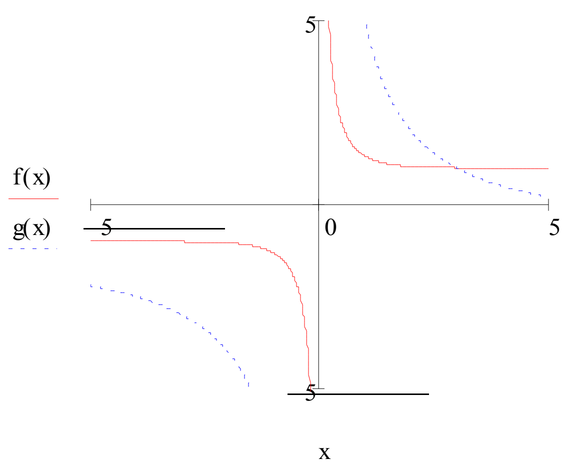
Vpeljemo brezdimenzijske spremenljivke in si funkcije skiciramo:

$f(x) := \tanh(x)$ $\qquad\qquad$ $g(x) := 2 \cdot \frac{3}{x} - 1$

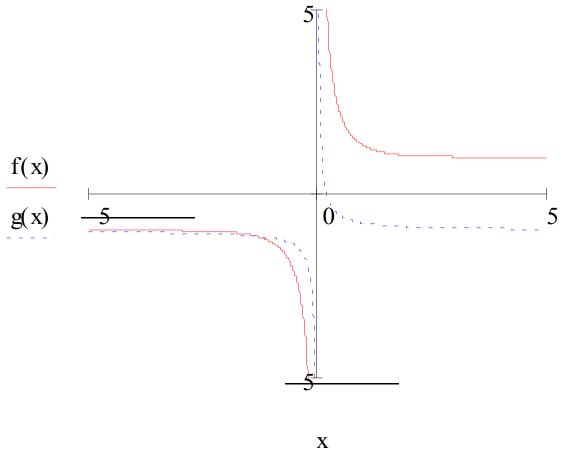


Iz skice se vidi, da bo obstajala samo ena rešitev te transcendentne enačbe in iz te rešitve nato dobimo ustrezen k in posledično energijo delca.
Podobno si lahko skiciramo tudi za lihe funkcije:

$f(x) := \frac{1}{\tanh(x)}$ $\qquad\qquad$ $g(x) := 2 \cdot \frac{3}{x} - 1$



$f(x) := \frac{1}{\tanh(x)}$ $\qquad$ $g(x) := 2 \cdot \frac{0.1}{x} - 1$



Iz teh dveh grafov vidimo, da dobimo pri lihih valovnih funkcije pozitivne rešitve samo za določene vrednosti x0. Le tega dobimo iz pogoja, da more funkcija

$$2 \cdot \frac{x0}{x} - 1$$

padati hitreje kot cth(x). Tako dobimo, da mora biti:

$$x0 > \frac{1}{2}$$

Podobno kot prej preverimo limito, ko gre a v neskončnost:

$$\lim_{a \to \infty} \tanh(ka) = 1 = \frac{2n - k}{k}$$

$$k = n$$

In vidimo, da dobimo pravilen rezultat.

Opomba: h prečna je v tem poročili zapisan kar kot h.

Kristjan Anderle