

7 Proste układy dynamiczne

7.1 Nieskończona studnia potencjału

Rozpatrzmy teraz potencjał

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < -L/2 \text{ oraz } L/2 < x \\ 0 & -L/2 < x < L/2 \end{cases} \quad (7.1)$$

Wiemy, że wewnątrz studni ogólne rozwiązanie równania Schrödingera jest superpozycją fal płaskich

$$u(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} = A' \sin(kx) + B' \cos(kx). \quad (7.2)$$

Dodatkowo zauważmu, że hamiltonian

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \quad (7.3)$$

jest niezmienniczy ze względu na transformację odbicia:

$$x \rightarrow -x \quad (7.4)$$

Co oznacza, że

$$u(x) \rightarrow u(-x) = \varepsilon u(x). \quad (7.5)$$

Dwukrotne zastosowanie tej transformacji daje

$$u(x) = \varepsilon^2 u(x) \implies \varepsilon = \pm 1. \quad (7.6)$$

Zatem funkcje własne hamiltonianu symetrycznego ze względu na odbicia są albo symetryczne, albo antysymetryczne:

$$\begin{aligned} u_s(x) &= B \cos(kx), \\ u_a(x) &= A \sin(kx). \end{aligned} \quad (7.7)$$

Nieskończoność potencjału na brzegach implikuje warunki brzegowe:

$$u(-L/2) = u(L/2) = 0. \quad (7.8)$$

Tylko jeden z tych warunków jest niezależny. Mamy zatem dwa typy rozwiązań:

$$\begin{aligned} \cos(kL/2) = 0 &\implies k = \frac{\pi}{L}(1 + 2n_s) = \frac{\pi}{L}n'_s \text{ gdzie } n_s = 1, 3, 5 \dots \\ \sin(kL/2) = 0 &\implies k = \frac{\pi}{L}2(1 + n_a) = \frac{\pi}{L}n'_a \text{ gdzie } n'_a = 2, 4, 6 \dots \end{aligned} \quad (7.9)$$

Zatem ogólnie

$$k = \frac{\pi}{L}n \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

i energia wynosi

$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2. \quad (7.10)$$

Poziomy energetyczne są skwantowane. Kwantyzacja bierze się z warunków przegowych.

Równanie ciągłości 4.2

$$\begin{aligned}
 i\hbar \partial_t \rho &= i\hbar \left\{ (\partial_t \psi^*) \psi + \psi^* \partial_t \psi \right\} \\
 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ (\nabla^2 + V) \psi^* \cdot \psi - \psi^* (\nabla^2 + V) \psi \right\} \\
 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ (\nabla^2 \psi^*) \psi - \psi^* (\nabla^2 \psi) \right\} = \\
 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \psi^* \cdot \psi - \psi^* \vec{\nabla} \psi) = \\
 &= -i\hbar \vec{\nabla} \cdot \vec{j}
 \end{aligned}$$

gdzie $\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*)$
 $= \frac{\hbar}{2mi} \text{Im} (\psi^* \vec{\nabla} \psi)$

Zatem $\partial_t \rho = -\vec{\nabla} \cdot \vec{j}$

Wersja całkowa:

$$\partial_t \int_V dv \cdot \rho_t = - \int_V dv \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = \int_S d\vec{\sigma} \cdot \vec{j}$$

Przedstokesa

Zmiana prawdopodobieństwa w pewnej objętości jest równa sumie przepływów prawdopodobieństwa wypływających poprzez powierzchnię ograniczającą tę objętość

Prostokątna bariera potencjału

Piotr Szańkowski

Zadanie 1: Znajdź współczynniki transmisji i odbicia od bariery opisanej wzorem

$$V(x) = \begin{cases} 0 & , \quad x < 0 \\ V_0 & , \quad 0 \leq x \leq a \\ 0 & , \quad a < x \end{cases} \quad (1)$$

Rozwiązanie —

Obliczmy prąd prawdopodobieństwa dla fali płaskiej $\phi(x) = \exp(ipx/\hbar)$

$$j = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left[\phi^* \frac{\partial \phi}{\partial x} \right] = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left[e^{-i \frac{px}{\hbar}} \left(i \frac{p}{\hbar} \right) e^{i \frac{px}{\hbar}} \right] = \frac{p}{m} \quad (2)$$

Można powiedzieć, że fala płaska (stan o ustalonym pędzie) opisuje cząstkę poruszającą się z prędkością $v = p/m$. Zanim zastanowimy się czym dokładnie są współczynniki transmisji i odbicia rozwiążmy równanie Schrödingera z naszym potencjałem $V(x)$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi(x, t) \quad (3)$$

Będziemy szukać rozwiązania o ustalonej energii, tzn.

$$\psi(x, t) = e^{-iEt/\hbar} \phi(x).$$

To podstawienie doprowadza nas (jak zwykle) do równania Schrödingera niezależnego od czasu

$$E\phi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \phi(x) \quad (5)$$

Przepiszmy nasze równanie do postaci wygodniejszej do rozwiązywania

$$\phi''(x) = \frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E) \phi(x) \quad (6)$$

Mamy tu podobną sytuację jak poprzednio: potencjał jest nieciągły i dzieli przestrzeń na trzy obszary. Znowu rozwiążemy ten problem jak poprzednio, czyli rozwiążemy równanie w każdym z obszarów z osobna i zażądamy ciągłości rozwiązania i jego pierwszej pochodnej.

Rozwiązania:

$$\begin{cases} \phi_1(x) = e^{i \frac{px}{\hbar}} + R e^{-i \frac{px}{\hbar}} & , \quad x \leq 0 \\ \phi_2(x) = A e^{\kappa x} + B e^{-\kappa x} & , \quad 0 \leq x \leq a \\ \phi_3(x) = T e^{i \frac{px}{\hbar}} & , \quad a \leq x \end{cases} \quad (7)$$

gdzie

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)} \quad (8)$$

i energia

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad (9)$$

Taki wybór rozwiązań oznacza, że rozważamy sytuację, gdy mamy strumień cząstek poruszających się z pędem $p < \sqrt{2mV_0}$, który pada na barierę potencjału V_0 . Następnie, część cząstek odbija się od bariery, co reprezentuje

człon $R \exp(-ipx/\hbar)$, a część wnika do wnętrza bariery, co reprezentuje część ϕ_2 rozwiązania. Cząstki, które spenetrowały barierę mogą przez nią przeniknąć dając strumień $T \exp(ipx/\hbar) = \phi_3$.

Kontynuujemy. Teraz musimy zażądać ciągłości funkcji falowej i jej pierwszej pochodnej na granicach obszarów, a więc

$$\phi_1(0) = \phi_2(0) \quad (10)$$

$$\phi_1'(0) = \phi_2'(0) \quad (11)$$

$$\phi_2(a) = \phi_3(a) \quad (12)$$

$$\phi_2'(a) = \phi_3'(a), \quad (13)$$

$$(14)$$

co daje

$$1 + R = A + B \quad (15)$$

$$i\frac{p}{\hbar}(1 - R) = \kappa(A - B) \quad (16)$$

$$Ae^{\kappa a} + Be^{-\kappa a} = Te^{i\frac{pa}{\hbar}} \quad (17)$$

$$\kappa(Ae^{\kappa a} - Be^{-\kappa a}) = i\frac{p}{\hbar}Te^{i\frac{pa}{\hbar}}. \quad (18)$$

Po kilku minutach algebry dochodzimy do wyniku

$$A = \frac{1}{2}T \left(1 + i\frac{p}{\hbar\kappa}\right) e^{i\frac{p}{\hbar}a - \kappa a} \quad (19)$$

$$B = \frac{1}{2}T \left(1 - i\frac{p}{\hbar\kappa}\right) e^{i\frac{p}{\hbar}a + \kappa a} \quad (20)$$

$$R = -iT e^{i\frac{p}{\hbar}a} \frac{\hbar^2 \kappa^2 + p^2}{2\hbar p \kappa} \sinh(\kappa a) \quad (21)$$

Chwilowo nie będziemy się przejmować wyznaczeniem T .

Teraz zastanówmy się czym są współczynniki transmisji i odbicia. Obliczmy prądy prawdopodobieństwa stowarzyszone z falą padającą, odbitą i przechodzącą:

1. Fala padająca $e^{i\frac{px}{\hbar}}$

$$j_I = \frac{p}{m} \quad (22)$$

2. Fala odbita $Re^{-i\frac{px}{\hbar}}$

$$j_R = -|R|^2 \frac{p}{m} \quad (23)$$

3. Fala przechodząca $Te^{i\frac{px}{\hbar}}$

$$j_T = |T|^2 \frac{p}{m}. \quad (24)$$

Współczynnik odbicia definiujemy jako stosunek:

$$\mathcal{R} \equiv \frac{|j_R|}{|j_I|} = |R|^2, \quad (25)$$

współczynnik transmisji

$$\mathcal{T} \equiv \frac{|j_T|}{|j_I|} = |T|^2. \quad (26)$$

Aby obliczyć szukane współczynniki potrzebujemy jeszcze T ... ale czy na pewno? Rozważmy prawo zachowania prawdopodobieństwa (w trzech wymiarach):

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi(\vec{r}, t)|^2 = \vec{\nabla} \cdot \vec{j}. \quad (27)$$

Wycalkujmy to równanie po pewnej objętości V i skorzystajmy z twierdzenia Gaussa:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV = \int_S \vec{j} \cdot d\vec{S}, \quad (28)$$

dla stanów o ustalonej energii

$$\psi(\vec{r}, t) = e^{-iE\frac{t}{\hbar}} \phi(\vec{r}), \quad (29)$$

mamy

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} |\phi(\vec{r})|^2 dV = 0, \quad (30)$$

a więc

$$\int_S \vec{j} \cdot d\vec{S} = 0. \quad (31)$$

Zastosujmy ten wynik do naszego przypadku. Jako objętość wybierzmy odcinek $[x_L, x_R]$ taki, że $x_L < 0$ i $x_R > a$, wtedy dostajemy, że

$$-j(x_L) + j(x_R) = 0 \quad (32)$$

$$-\frac{p}{m} (1 - |R|^2) + \frac{p}{m} |T|^2 = 0 \quad (33)$$

$$1 - |R|^2 = |T|^2. \quad (34)$$

Wstawiając do tej równości znajdujemy wsp. transmisji $\mathcal{T} = |T|^2$

$$|T|^2 = \left(1 + \frac{\eta^2}{4(\eta - 1)} \sinh^2 \left[\frac{pa}{\hbar} \sqrt{\eta - 1} \right] \right)^{-1}, \quad (35)$$

gdzie

$$\eta = \frac{V_0}{E} = \frac{2mV_0}{p^2}. \quad (36)$$

A więc prawdopodobieństwo przeniknięcia przez barierę jest niezerowe! W mechanice klasycznej takie zjawisko nie może mieć miejsca, w mechanice kwantowej ma i zwie się je *tunelowaniem*.

Zauważmy, że $|T|^2$ dąży do zera w granicy klasycznej, czyli gdy $\hbar \rightarrow 0$:

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} |T|^2 = 0. \quad (37)$$

Dodatkowo zauważmy, że $|T|^2$ maleje bardzo raptownie wraz z szerokością bariery i/lub jej wysokością

$$|T|^2 \rightarrow_{\infty} e^{-\frac{p}{\hbar} \sqrt{\eta - 1} a} \quad (38)$$

dla $a \rightarrow \infty$ lub $\eta = V_0/E \rightarrow \infty$.