SERIA 4
ROZWIĄZANIA

MECHANIKA KWANTOWA '26

Uwaga: wprowadzamy oznaczenia $\epsilon = 2m/\hbar^2 E$ oraz $v_0 = 2m/\hbar^2 V_0$.

Zadanie 1

Treść: Cząstka o masie m bytuje w potencjale, który składa się z nieskończonej bariery w $x = 0$ oraz skończonego schodka, który można opisać wzorem

$$v(x) = -v_0\theta(a - x) + w_0 \left[\theta(x - a) - \theta(x - b)\right], \quad v_0, w_0 > 0,\ b > a,$$

jak na rysunku. Znalejdź energie stanów związanych.

Rozwiązanie:
Numerujemy kolejne dozwolone obszary jako 1: $0 < x < a$, 2: $a < x < b$ oraz 3: $x > b$. W obszarach tych, po wprowadzeniu zmiennych bezwymiarowych, mamy nastepujące równania Schrödingera :

$$\psi_1''(x) = -(v_0 - |\epsilon|)\psi_1(x) \tag{1a}$$
$$\psi_2''(x) = (w_0 + |\epsilon|)\psi_2(x) \tag{1b}$$
$$\psi_3''(x) = |\epsilon|\psi_3(x). \tag{1c}$$

Rozwiązania (po narzuceniu warunków $\psi_1(0) = 0$ oraz $\psi_3(x) \xrightarrow{x\to\infty} 0$ mają postać

$$\psi_1(x) = A\sin k_1 x, \quad k_1 = \sqrt{v_0 - |\epsilon|} \tag{2a}$$
$$\psi_2(x) = Be^{k_2 x} + Ce^{-k_2 x}, \quad k_2 = \sqrt{W_0 + |\epsilon|} \tag{2b}$$
$$\psi_3(x) = De^{-k_3 x}, \quad k_3 = \sqrt{|\epsilon|}. \tag{2c}$$

Następnie zszywamy w punktach $x = a, b$ narzucając warunek na ciągłość funkcji i pierwszej pochodnej. Otzymujemy stąd w $x = a$

$$Be^{k_2 a} + Ce^{-k_2 a} = A\sin k_1 a \tag{3a}$$
$$Be^{k_2 a} - Ce^{-k_2 a} = \frac{k_1}{k_2}A\cos k_1 a. \tag{3b}$$

oraz analogicznie w $x = b$

$$Be^{k_2 b} + Ce^{-k_2 b} = De^{-k_3 b} \tag{4a}$$
$$Be^{k_2 b} - Ce^{-k_2 b} = -\frac{k_3}{k_2}De^{-k_3 b}. \tag{4b}$$

Dodajemy i odejmujemy stronami te równania, co daje nam

$$B = \frac{1}{2}Ae^{-k_2 a}\left(\sin k_1 a + \frac{k_1}{k_2}A\cos k_1 a\right) \tag{5a}$$
$$C = \frac{1}{2}Ae^{k_2 a}\left(\sin k_1 a - \frac{k_1}{k_2}A\cos k_1 a\right) \tag{5b}$$

oraz

$$B = \frac{1}{2}De^{-(k_3+k_2)b}\left(1 - \frac{k_3}{k_2}\right) \tag{6a}$$
$$C = \frac{1}{2}De^{-(k_3-k_2)b}\left(1 + \frac{k_3}{k_2}\right). \tag{6b}$$

W następnym kroku porównujemy stronami wyrażenia na B i C i dostajemy jednorodny układ dwu równań na dwie niewiadome

$$Ae^{-k_2 a}\left(\sin k_1 a + \frac{k_1}{k_2}A\cos k_1 a\right) = De^{-(k_3+k_2)b}\left(1-\frac{k_3}{k_2}\right) \tag{7a}$$

$$Ae^{k_2 a}\left(\sin k_1 a - \frac{k_1}{k_2}A\cos k_1 a\right) = De^{-(k_3-k_2)b}\left(1+\frac{k_3}{k_2}\right). \tag{7b}$$

Wyznacznik przyrównujemy do zera, co daje równanie

$$e^{-k_2 a}\left(\sin k_1 a + \frac{k_1}{k_2}A\cos k_1 a\right)e^{-(k_3-k_2)b}\left(1+\frac{k_3}{k_2}\right) = e^{k_2 a}\left(\sin k_1 a - \frac{k_1}{k_2}A\cos k_1 a\right)e^{-(k_3+k_2)b}\left(1-\frac{k_3}{k_2}\right) \tag{8}$$

Następnie wymnażamy nawiasy tak, by powstały funkcje hiperboliczne. Efektem jest wyrażenie

$$\mathrm{tg}(k_1 a) = -\frac{k_1}{k_2}\frac{1+\frac{k_3}{k_2}\tanh(k_2(b-a))}{\tanh(k_2(b-a))+\frac{k_3}{k_2}} \tag{9}$$

Wprowadzamy zmienne $x = k_1 a$, zatem $|\epsilon| = V_0^2 - (x/a)^2$, czyli $x \leqslant x_0 \equiv \sqrt{a}\sqrt{v_0}$ oraz $x_1 = a\sqrt{v_0+w_0}$ i $\Delta = b/a - 1 > 0$, by otrzymać

$$\mathrm{tg}(x) = -\frac{x}{\sqrt{x_1^2-x^2}}\frac{\sqrt{x_1^2-x^2}+\sqrt{x_0^2-x^2}\tanh(\Delta\sqrt{x_1^2-x^2})}{\sqrt{x_0^2-x^2}+\sqrt{x_1^2-x^2}\tanh(\Delta\sqrt{x_1^2-x^2})} \equiv g(x). \tag{10}$$

Funkcja $g(x)$ zeruje się w $x=0$ zaś w x_0 przyjmuje wartość

$$g(x_0) = -\frac{v_0}{w_0}\frac{1}{\tanh(\Delta\sqrt{x_1^2-x_0^2})}. \tag{11}$$

Żeby istniało rozwiązanie równania (10), musi zachodzić $x \in]\pi/2, \pi]$. Ponadto, jako że funkcja $g(x)$ jest monotonicznie malejąca, musi zachodzić $\mathrm{tg}(x_0) \geqslant g(x_0)$. Wtedy jest jedno przecięcie (jeden stan związany).

Zadanie 2

Treść: Tym razem cząstka o masie m bytuje w potencjale “schodkowym”, czyli

$$v(x) = V_0\theta(x).$$

Opisz ruch klasycznej cząstki o pędzie p zbliżającej się do schodka z lewej strony. Rozważ dwa przypadki:

a) $V_0 < E$

b) $0 < E < V_0$.

Następnie przejdź do opisu kwantowego. Znajdź współczynniki odbicia i przejścia dla obu przypadków.

Rozwiązanie:

Klasycznie:

Jeżeli cząstka ma energię $E > V_0$, po przejściu do obszaru z niezorowym potencjałem jej prędkość spada z v do $v' = \sqrt{v^2 - 2mV_0}$. Jeżeli $E < V_0$, to cząstka sprężyście się odbija i wraca do $x \to -\infty$.

Kwantowo: $\mathbf{E > V_0}$

W opisie kwantowym rozważamy osobno równanie Schrödingera po obu stronach $x=0$. Zakładamy też osobno przypadek, gdy cząstka pada z lewej (+) i z prawej (-) strony. Mamy zatem w obu przypadkach odpowiednio

$$\psi_+(x) = \begin{cases} \alpha_< e^{ikx} + \beta_< e^{-ikx} \\ \alpha_> e^{iKx} \end{cases} \qquad \psi_-(x) = \begin{cases} \beta_< e^{-ikx} & x<0 \\ \alpha_> e^{iKx} + \beta_> e^{-iKx} & x \geqslant 0 \end{cases}. \tag{12}$$

Wprowadziliśmy następujące wektory falowe $k^2 = 2m/\hbar^2 E$ oraz $K^2 = 2m/\hbar^2(E - V_0)$. Następnie zszywamy parami te rozwiązania (równość funkcji i pierwszych pochodnych), otrzymując

$$\psi_+(x) = \begin{cases} e^{ikx} + A(k,K)e^{-ikx} \\ B(k,K)e^{iKx} \end{cases} \qquad \psi_-(x) = \begin{cases} B(K,k)e^{-ikx} & x < 0 \\ A(K,k)e^{iKx} + e^{-iKx} & x \geqslant 0 \end{cases}, \tag{13}$$

gdzie podzieliliśmy stronami przez współczynnik przy fali padającej oraz wprowadziliśmy funkcje k i K w postaci

$$A(k,K) = \frac{k-K}{k+K}, \quad A(k,K) = \frac{2k}{k+K}. \tag{14}$$

W kolejnym kroku wyznaczamy prąd związany z falą padającą (i), odbitą (r) i przechodzącą (t), zgodnie ze wzorem

$$j = \frac{\hbar}{2mi}\left[\psi^*\psi' - \psi\psi^{*'}\right]. \tag{15}$$

Otrzymujemy trzy wielkości (tu dla przykładu pokazane dla przypadku "+")

$$j_i = \frac{\hbar k}{m}, \quad j_r = -\frac{\hbar k}{m}|A(k,K)|^2, \quad j_t = \frac{\hbar k}{m}|B(k,K)|^2. \tag{16}$$

Zauważamy, że zachodzi

$$|j_i| = |j_r| + |j_t|, \tag{17}$$

zatem dzieląc stronami przez prąd padający dostajemy współczynniki odbicia i transmisji

$$R = |A(k,K)|^2, \quad T = \frac{k}{K}|B(k,K)|^2, \quad R + T = 1. \tag{18}$$

Kwantowo: $\mathbf{E < V_0}$

W tym przypadku mamy tylko padanie z lewej strony i rozwiązanie postaci

$$\psi(x) = \begin{cases} \alpha_< e^{ikx} + \beta_< e^{-ikx} & x < 0 \\ \beta_> e^{-\kappa x} & x \geqslant 0 \end{cases}, \tag{19}$$

gdzie $\kappa^2 = 2m/\hbar^2(V_0 - E)$. Warunki zszycia dają

$$\psi(x) = \begin{cases} Ce^{ikx} + e^{-ikx} & x < 0 \\ De^{-\kappa x} & x \geqslant 0 \end{cases}, \tag{20}$$

gdzie

$$C = \frac{k - i\kappa}{k + i\kappa}, \quad D = \frac{2k}{k + i\kappa} \tag{21}$$

Prąd przejścia znika (bo funkcja jest rzeczywista z dokładnością do stałej multiplikatywnej), zatem mamy współczynnik odbica $R = |C|^2 = 1$. Niemniej, prawdopodobieństwo znalezienia cząstki dla $x \geqslant 0$ jest niezerowe i $\propto e^{-2\kappa x}$.

Zadanie 3

Treść: Znajdź prawdopodobieństwo przejścia przez barierę o wysokości V_0 i szerokości a.

$$V(x) = V_0\left[\theta(x) - \theta(x-a)\right].$$

Rozważ przypadki

a) $0 < E < V_0$

b) $E > V_0$.

Rozwiązanie:

$\mathbf{E > V_0}$
Mamy w obszarach I $(x < 0)$, II $(0 \leqslant x \leqslant a)$ oraz III $x > 0$ i zakładając padanie z lewej strony:

$$\psi_I(x) = e^{ikx} + Ae^{-ikx}, \quad \psi_{II}(x) = C\cosh(\kappa x) + D\sinh(\kappa x), \quad \psi_{III}(x) = Be^{ik(x-a)}. \tag{22}$$

gdzie wektory falowe mają postać

$$k^2 = \epsilon > 0, \ \kappa^2 = v_0 - \epsilon > 0. \tag{23}$$

Warunki zszycia dają

$$\begin{cases} 1 + A = C \\ 1 - A = -i\frac{\kappa}{k}D \\ B = C\cosh(\kappa a) + D\sinh(\kappa a) \\ i\frac{k}{\kappa}B = C\sinh(\kappa a) + D\cosh(\kappa a). \end{cases} \tag{24}$$

Stąd otrzymujemy

$$B = \frac{2}{2\cosh(\kappa a) + i\left(\frac{\kappa}{k} - \frac{k}{\kappa}\right)\sinh(\kappa a)} \tag{25}$$

czyli współczynnik przejścia

$$T = |B|^2 = \frac{4}{4\cosh(\kappa a)^2 + \left(\frac{\kappa}{k} - \frac{k}{\kappa}\right)^2 \sinh(\kappa a)^2} \tag{26}$$

Łatwo się przekonać, że $T(\epsilon = 0) = 0$, zaś

$$\lim_{\epsilon \to v_0} T(\epsilon) = \frac{1}{1 + v_0\frac{a^2}{4}}. \tag{27}$$

$\mathbf{E < V_0}$
W tym przypadku należy dokonać zamiany $\kappa \to iK$, gdzie $K^2 = \epsilon - v_0$. Daje to współczynnik przejścia

$$T = \frac{4\epsilon(\epsilon - v_0)}{4\epsilon(\epsilon - v_0) + v_0^2\sin(\sqrt{\epsilon - v_0}a)^2}. \tag{28}$$

W szczególności rezonans $T = 1$ zachodzi, gdy

$$\epsilon = v_0 + \frac{n^2\pi^2}{a^2}. \tag{29}$$

Zadanie 4

Treść: Na koniec rozważamy przypadek, gdy cząstka o masie m porusza się w potencjale

$$V(x) = v_0\delta(x) + v_0\delta(x - a), \quad v_0 > 0. \tag{30}$$

Znajdź współczynniki odbica i przejścia i wyznacz, dla jakich a występuje rezonans (czyli transmisja jest pełna).

Rozwiązanie: Zapisujemy równanie Schrödingera w trzech przedziałach, zakładając, że cząstka pada od lewej, i mamy rozwiązania

$$\psi_1(x) = e^{ikx} + Ae^{-ikx}, \quad \psi_2(x) = Be^{ikx} + Ce^{-ikx}, \quad \psi_2(x) = De^{ikx}. \tag{31}$$

Następnie zszywamy wartości i wyliczamy skok pierwszej pochodnej, co daje równanie niejednorodne

$$A - B - C = -1 \tag{32a}$$

$$\left(1 + i\frac{v_0}{k}\right)A + B - C = 1 - i\frac{v_0}{k} \tag{32b}$$

$$B + e^{-2ika}C - D = 0 \tag{32c}$$

$$-B + e^{-2ika}C + \left(1 + i\frac{v_0}{k}\right)D = 0. \tag{32d}$$

Wyznacznik Δ wynosi

$$\Delta = e^{-ika}\left[2i\left(\frac{v_0}{k}\right)^2 + 4e^{-ika}\left(1 + i\frac{v_0}{k}\right)\right]. \tag{33}$$

Podstawiając kolumnę prawej strony równań odpowiednio za tę odpowiedzialną za A i D otrzymujemy

$$A = -\frac{\sin ka + 2\frac{k}{v_0}\cos ka}{\sin ka + 2\frac{k}{v_0}e^{-ika}\left(1 - i\frac{k}{v_0}\right)} \tag{34a}$$

$$D = -\frac{2i\left(\frac{k}{v_0}\right)^2 e^{-ika}}{\sin ka + 2\frac{k}{v_0}e^{-ika}\left(1 - i\frac{k}{v_0}\right)}. \tag{34b}$$

Stąd współczynniki odbicia i transmisji wynoszą

$$R = |A|^2 = \frac{\left[\frac{v_0}{2k}\sin ka + \cos ka\right]^2}{1 + \left[\frac{v_0}{2k}\sin ka + \cos ka\right]^2} \tag{35a}$$

$$T = |D|^2 = \frac{1}{1 + \left[\frac{v_0}{2k}\sin ka + \cos ka\right]^2}. \tag{35b}$$

Zachodzi $R+T = 1$. Warunek rezonansu $T = 1$ oznacza, że wyrażenie pod kwadratem w mianowniku musi się zerować,

$$\frac{v_0}{2k}\sin ka + \cos ka = 0 \quad \Rightarrow \quad \operatorname{tg} ka = -\frac{2k}{v_0}, \quad ka \neq (2n+1)\frac{\pi}{2}, \quad n \in \mathbb{N}. \tag{36}$$

Czyli otrzymujemy

$$a_n = n\frac{\pi}{k} - \frac{1}{k}\arctan\left(\frac{2k}{v_0}\right). \tag{37}$$