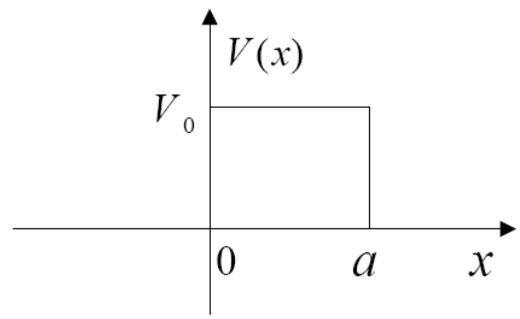
Wykład XVI Mechanika kwantowa

Jednowymiarowy problem rozpraszania

Rozważamy rozpraszanie cząstek padających na barierę potencjału pokazaną na rysunku.



Rozwiązanie równania Schrödingera dla $x<0$ ma postać rozwiązania swobodnego, czyli

$$\psi(t,x) = A\exp\left(-\frac{i}{\hbar}(Et \pm px)\right),$$

gdzie p jest pędem cząstki, $E=\frac{p^2}{2m}$ jej energią, a A stałą normalizacyjną. Przyjmujemy, że $p>0$, więc rozwiązanie z minusem odpowiada fali poruszającej się w prawo, a rozwiązanie z plusem odpowiada fali poruszającej się w lewo.

Rozwiązanie dla $x<0$ wybieramy w postaci

$$\varphi(x) = A\exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right) + B\exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right),$$

gdzie pierwszy człon odpowiada cząstkom padającym na barierę, drugi zaś cząstkom odbitym od bariery. Pominęliśmy tutaj zależność czasową, tzn. $\varphi(x)$ jest rozwiązaniem równania Schrödingera bez czasu. Rozwiązanie dla $x>a$ odpowiadające cząstkom poruszającym się w prawo ma tylko jeden człon

$$\varphi(x) = C\exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right).$$

Aby lepiej zrozumieć sens stałych *A*, *B* i *C* obliczmy prąd prawdopodobieństwa

$$S(t,x) = \frac{\hbar}{2im}\left(\psi^*(t,x)\frac{d\psi(t,x)}{dx} - \frac{d\psi^*(t,x)}{dx}\psi(t,x)\right)$$

odpowiadający rozwiązaniom dla $x<0$ i dla $x>a$. Znajdujemy

$$S(t,x) = \begin{cases} \dfrac{p}{m}\left(|A|^2 - |B|^2\right), & x<0, \\ \dfrac{p}{m}|C|^2, & a<x. \end{cases}$$

<u>Wykład XVI cd.</u> Mechanika kwantowa

A zatem prąd prawdopodobieństwa równy jest kwadratowi modułu stałej normalizacyjnej razy prędkość. Uzasadnia to zdefiniowanie współczynników odbicia od bariery (R) (*reflection*) i przejścia przez barierę (T) (*transmission*) jako

$$R \equiv \frac{|B|^2}{|A|^2}, \qquad T \equiv \frac{|C|^2}{|A|^2}.$$

Aby znaleźć współczynniki odbicia i przejścia, należy określić rozwiązanie w obszarze $0 < x < a$. Jego postać zależy od tego, czy energia cząstki jest większa czy mniejsza niż wysokość bariery.

1) $E > V_0$ $\qquad \varphi(x) = D\exp\left(\frac{ikx}{\hbar}\right) + F\exp\left(-\frac{ikx}{\hbar}\right), \qquad k = \sqrt{2m(E - V_0)}$

2) $E < V_0$ $\qquad \varphi(x) = D\exp\left(\frac{\chi x}{\hbar}\right) + F\exp\left(-\frac{\chi x}{\hbar}\right), \qquad \chi = \sqrt{2m(V_0 - E)}.$

Musimy teraz „zszyć" rozwiązania w $x = 0$ i $x = a$. Żądamy, aby funkcja falowa i jej pochodna były ciągłe. Rozważamy kolejno przypadek 1) i 2).

1) Przypadek $E > V_0$

Warunki zszycia mają postać

$$x = 0, \qquad A + B = D + F, \qquad p(A - B) = k(D - F)$$

$$x = a, \qquad D\exp\left(\frac{ika}{\hbar}\right) + F\exp\left(-\frac{ika}{\hbar}\right) = C\exp\left(\frac{ipa}{\hbar}\right),$$

$$k\left(D\exp\left(\frac{ika}{\hbar}\right) - F\exp\left(-\frac{ika}{\hbar}\right)\right) = pC\exp\left(\frac{ipa}{\hbar}\right).$$

Mamy 4 równania na 5 stałych normalizacyjnych A, B, C, D, F, możemy więc wyrazić stałe B, C, D, F przez stałą $A.$ Równania zapisujemy jako

$$\begin{cases} A + B = D + F, \\ A - B = \dfrac{k}{p}(D - F), \\ D\exp\left(\dfrac{ika}{\hbar}\right) + F\exp\left(-\dfrac{ika}{\hbar}\right) = C\exp\left(\dfrac{ipa}{\hbar}\right), \\ D\exp\left(\dfrac{ika}{\hbar}\right) - F\exp\left(-\dfrac{ika}{\hbar}\right) = \dfrac{p}{k}C\exp\left(\dfrac{ipa}{\hbar}\right). \end{cases}$$

Dodając i odejmując stronami równania 1) i 2) oraz 3) i 4) dostajemy

$$\begin{cases} A = \dfrac{p+k}{2p} D + \dfrac{p-k}{2p} F, \\ B = \dfrac{p-k}{2p} D + \dfrac{p+k}{2p} F, \\ D \exp\left(\dfrac{ika}{\hbar}\right) = \dfrac{k+p}{2k} C \exp\left(\dfrac{ipa}{\hbar}\right), \\ F \exp\left(-\dfrac{ika}{\hbar}\right) = \dfrac{k-p}{2k} C \exp\left(\dfrac{ipa}{\hbar}\right). \end{cases}$$

Z pierwszego równania wyznaczamy $D = \dfrac{2p}{p+k}\left(A - \dfrac{p-k}{2p} F\right)$ i podstawiamy do równania trzeciego. Dzieląc teraz stronami równanie trzecie przez czwarte dostajemy

$$\frac{2p}{p+k}\left(\frac{A}{F} - \frac{p-k}{2p}\right)\exp\left(2\frac{ika}{\hbar}\right) = \frac{k+p}{k-p},$$

co daje

$$F = \frac{2p(k-p)}{(k+p)^2 \exp\left(-2\dfrac{ika}{\hbar}\right) - (k-p)^2} A.$$

Teraz z pierwszego równania wyznaczamy $F = \dfrac{2p}{p-k}\left(A - \dfrac{p+k}{2p} D\right)$ i podstawiamy do równania trzeciego. Dzieląc stronami czwarte równanie przez trzecie dostajemy

$$\frac{2p}{p-k}\left(\frac{A}{D} - \frac{p+k}{2p}\right)\exp\left(-2\frac{ika}{\hbar}\right) = \frac{k-p}{k+p},$$

co daje

$$D = \frac{2p(k+p)}{(k+p)^2 - (k-p)^2 \exp\left(2\dfrac{ika}{\hbar}\right)} A.$$

Mając wyznaczone stałe D i F możemy znaleźć stosunki C/A oraz B/A. Pierwszy z nich znajdujemy podstawiając znalezione D i F do, odpowiednio, trzeciego lub czwartego równania. Tak otrzymujemy

$$\frac{C}{A} = \frac{4pk \exp\left(\dfrac{i(k-p)a}{\hbar}\right)}{(k+p)^2 - (k-p)^2 \exp\left(2\dfrac{ika}{\hbar}\right)}.$$

Stosunek *B/A* znajdujemy podstawiając znalezione *D* i *F* do drugiego równania

$$\frac{B}{A}=\frac{\left(p^2-k^2\right)\left(1-\exp\left(2\frac{ika}{\hbar}\right)\right)}{(k+p)^2-(k-p)^2\exp\left(2\frac{ika}{\hbar}\right)}.$$

Współczynniki odbicia i przejścia przyjmują postać

$$T\equiv\frac{|C|^2}{|A|^2}=\left(1+\frac{V_0^2}{4E(E-V_0)}\sin^2\left(\frac{ka}{\hbar}\right)\right)^{-1},\qquad R\equiv\frac{|B|^2}{|A|^2}=\left(1+\frac{4E(E-V_0)}{V_0^2}\frac{1}{\sin^2\left(\frac{ka}{\hbar}\right)}\right)^{-1}.$$

Zauważmy, że $T+R=1$, co wyraża zasadę zachowania prawdopodobieństwa – cząstka może się odbić od bariery lub przez nią przejść. Zauważmy też, że <u>klasycznie</u> mielibyśmy $T=1, R=0$ dla przypadku $E > V_0$. Kwantowo $T=1, R=0$ występuje, gdy $ka=0, \pi\hbar, 2\pi\hbar, 3\pi\hbar,\ldots$ czyli pod barierą mieści się całkowita liczba połówek fali de Borglie'a. Warto też zauważyć, że granica $E\to V_0$ nie jest osobliwa. Mamy wtedy

$$T=\left(1+\frac{mV_0a^2}{2\hbar^2}\right)^{-1},\qquad R=\left(1+\frac{2\hbar^2}{mV_0a^2}\right)^{-1}.$$

2) Przypadek $E < V_0$

Zauważmy, że wystarczy w końcowych wzorach zamienić *k* na $-i\chi$, co daje

$$\frac{C}{A}=\frac{-4ip\chi\exp\left(\frac{(\chi-ip)a}{\hbar}\right)}{(i\chi-p)^2-(i\chi+p)^2\exp\left(2\frac{\chi a}{\hbar}\right)},\qquad \frac{B}{A}=\frac{\left(p^2+\chi^2\right)\left(1-\exp\left(2\frac{\chi a}{\hbar}\right)\right)}{(i\chi-p)^2-(i\chi+p)^2\exp\left(2\frac{\chi a}{\hbar}\right)}.$$

Współczynniki odbicia i przejścia równe są

$$T\equiv\frac{|C|^2}{|A|^2}=\left(1+\frac{V_0^2}{4E(V_0-E)}\sinh^2\left(\frac{ka}{\hbar}\right)\right)^{-1},\qquad R\equiv\frac{|B|^2}{|A|^2}=\left(1+\frac{4E(V_0-E)}{V_0^2}\frac{1}{\sinh^2\left(\frac{ka}{\hbar}\right)}\right)^{-1}.$$

Tak jak poprzednio mamy $T+R=1$. Zauważmy też, że <u>klasycznie</u> mielibyśmy $T=0$, $R=1$ dla przypadku $E < V_0$. Kwantowo natomiast $T>0$, co oznacza zachodzenie zjawiska <u>tunelowego przejścia pod barierą</u>.