Kvantummechanika 1

4. gyakorlat 2023. március 21.

1. Határozzuk meg a kötött állapotok energiáit véges mélységű potenciálgödör esetén:

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & -a \leq x \leq a \\ 0 & |x| > a \end{cases} .$$

Használjunk grafikus megoldást! Hány kötött állapot van? Vizsgáljuk a következő határeseteket: a) $V_0 \to \infty,\ a = \text{konst.}$ b) $V_0 \to \infty,\ a \to 0$ és $2aV_0 = K = \text{konst.}$

2. Számítsuk ki a reflexiós és transzmissziós együtthatókat az alábbi lépcsőpotenciálra:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x \leq 0 \\ V_0 & x > 0 \end{cases} .$$

Mekkora lesz a visszaverődési együttható, ha $0 < E < V_0$?

3. Síkhullám szórás esetén vezessük le a kontinuitási egyenlet alapján, hogy a reflexiós és transzmissziós együtthatók összege mindig egy $(R + T = 1)$!

Házi feladat

- Legyen $V(x)$ potenciális energia páros függvény, $V(x) = V(-x)$! Bizonyítsuk, hogy az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet normálható megoldásai határozottan páros vagy páratlan függvények!
- A $\partial_t \varrho(x,t) + \partial_x j(x,t) = 0$ kontinuitási egyenletből következik, hogy az egydimenziós Schrödinger-egyenlet stacionárius megoldásaira $\partial_x j(x) = 0$, azaz $j(x)$ konstans függvény. Dirac-delta potenciál esetén viszont kétség merülhet fel bennünk, hogy érvényes-e a kontinuitási egyenlet. (A levezetés kihasználja, hogy $|\psi(x)|^2 \delta(x) - |\psi(x)|^2 \delta(x) \stackrel{?}{=} 0$.) Lássuk be, hogy a $K\,\delta(x)$ Dirac-delta potenciál esetén stacionárius állapotban a valószínűségi áramsűrűség az $x = 0$ pontban is folytonos, tehát fennáll, hogy $\partial_x j(0) = 0$!
- Határozzuk meg a reflexiós és transzmissziós együtthatókat $V(x) = K\delta(x)$ potenciál esetén!

A **3.** gyakorlatpélda megoldása:

Az egyszerűség kedvéért tekintsünk egy véges tartójú potenciált, melynek bal- és jobboldalán a potenciálszint különbözhet:

$$V(x) = \begin{cases} V_I(x) = 0 & x < a \\ V_{II}(x) & a \le x \le b \\ V_{III}(x) = V_0 & x > b \end{cases} .$$

Az $x < a$ (I) tartományban a hullámfüggvény

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

alakú, ahol

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} .$$

Számítsuk ki ebben a tartományban a valószínűségi áramsűrűséget:

$$j_I = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi_I^*(x)\frac{d\psi_I(x)}{dx} - \psi_I(x)\frac{d\psi_I^*(x)}{dx}\right) = \frac{\hbar}{m}\operatorname{Im}\left(\psi_I^*(x)\frac{d\psi_I(x)}{dx}\right) ,$$

amelybe a $\psi_I(x)$ hullámfüggvényt és annak deriváltját,

$$\frac{d\psi_I(x)}{dx} = ik\left(Ae^{ikx} - Be^{-ikx}\right) ,$$

behelyettesítve kapjuk, hogy

$$j_I = \underbrace{|A|^2\frac{\hbar k}{m}}_{j_b} - \underbrace{|B|^2\frac{\hbar k}{m}}_{j_v} + \frac{\hbar k}{m}\operatorname{Im}(\underbrace{iB^*Ae^{2ikx} - iA^*Be^{-2ikx}}_{2\operatorname{Re}(iB^*Ae^{2ikx})\in\mathbb{R}})$$

$$\Downarrow$$

$$j_I = j_b - j_v ,$$

azaz a valószínűségi áramsűrűség a beeső és a visszavert hullám áramsűrűségének a különbsége.

A III tartományban a hullámfüggvény,

$$\psi_{III}(x) = Ce^{iqx} ,$$

ahol $E > V_0$ esetén

$$q = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} ,$$

és az áramsűrűség az áthaladó hullám áramsűrűségével egyezik meg:

$$j_{III} = j_t = |C|^2\frac{\hbar q}{m} .$$

A kontinuitási egyenlet következménye, hogy stacionárius állapotra, $\partial_t\varrho = 0,\ \ \partial_x j(x) = 0 \to j(x) =$ konst., így tehát az I és III tartományban (is) megegyezik a valószínűségi áramsűrűség:

$$j_I = j_{III} \Rightarrow j_b - j_v = j_t \Rightarrow j_b = j_v + j_t ,$$

azaz a beeső hullám áramsűrűsége megegyezik a visszavert hullám és a továbbhaladó hullám áramsűrűségeinek összegével.

A visszaverődési (reflexiós) és áthaladási (transzmissziós) együtthatókat a megfelelő áramsűrűségek és a beeső hullám áramsűrűségének a hányadosaként definiálva,

$$R = \frac{j_v}{j_b} \quad T = \frac{j_t}{j_b}\,,$$

nyilvánvalóan fennáll az

$$R + T = 1$$

összefüggés.

Az összefüggés fennáll akkor is, ha $E < V_0$. Ekkor ugyanis

$$\psi_{III}\left(x\right) = Ce^{-qx}\,,$$

ahol

$$q = \frac{\sqrt{2m\left(V_0 - E\right)}}{\hbar}\,,$$

és

$$j_{III} = j_t = 0\,.$$

A kontinuitási egyenletből így

$$j_I = j_b - j_v = 0 \Rightarrow j_b = j_v$$

adódik, tehát

$$R = 1 \quad \text{és} \quad T = 0\,.$$