

Kvantummechanika 1.

Asbóth János

March 5, 2024

Abstract

Jegyzetek.

1 Szórás

A szórás kísérletek a fizika alapvető eszközei az anyag szerkezetének, akár végső építőköveinek vizsgálatára. Ezen az órán az egyszemélyes kvantummechanikában a szórással ismerkedünk meg.

1.1 Ismétlés: Negatív Dirac-delta egyetlen energia-sajátállapota negatív energián – kötött állapot

A múlt órán megkerestük a negatív forrásrősségű Dirac-delta potenciál kötött állapotát. Egy dimenzióban mindig van kötött állapot, és mindig csak egy van. Gyorsan ismétljük át a számolást.

Az energia-sajátállapot keresése = az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet megoldása,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \alpha\delta(x)\psi(x) = E\psi(x). \quad (1)$$

Mivel kötött állapotot keresünk, a peremfeltétel, hogy a hullámfüggvény "elég gyorsan" tartson 0-hoz az $x \rightarrow \pm\infty$ esetben. Ez úgy teljesül, ha a két tartományban:

$$\psi(x) = \underbrace{Ae^{\kappa x}}_{I:x<0} \quad \underbrace{Ce^{-\kappa x}}_{II:x>0}. \quad (2)$$

A két tartományon vett megoldások illesztése úgy történik, hogy két egyenletet írunk fel. A hullámfüggvény $x=0$ -ban folytonos, és az első derivált ugrik. Az ugráshoz a Schrödinger-egyenletből kifejezzük $d^2\psi/dx^2$ -et, majd azt integráljuk át a 0-án, azaz $-\epsilon$ -től ϵ -ig, majd vegyük az $\epsilon \rightarrow 0$ határt.

$$\frac{d\psi(0_+)}{dx} = \frac{d\psi(0_-)}{dx} + \frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi(0). \quad (3)$$

Ha $\alpha < 0$, "vonzó" potenciál: Kötött állapot $-E_0$ energián,

$$E_0 = \frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}. \quad (4)$$

1.2 Dirac-delta energia-sajátállapotai pozitív energián

Most keressünk energia-sajátállapotokat $E > 0$ energiával. Itt nem tudjuk előírni azt, hogy az állapot hullámfüggvénye lecsengjen az $x \rightarrow \pm\infty$ határon - a legtöbb, amit tehetünk, hogy síkhullám-szerű viselkedést írunk elő. (megj: a Hamilton-operátor spektruma itt folytonos). Tehát, hasonlóan a szabad részecskéhez ($V(x) = 0$), itt is az energia-sajátállapotok, azaz az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet megoldásai, nem normálhatóak. Nem preparálható a részecske ilyen sajátállapotban. Attól még ezek a sajátállapotok közelítőleg előállíthatók: olyan hullámcsomagokból, amik energiában nagyon élesek, ezért valós térben nagyon hosszúak.

Az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet megoldásának menete: I és II tartományban felírjuk a hullámfüggvényt, illesztjük a határon, ami $x = 0$ -ban van.

$$\psi(x) = \underbrace{Ae^{ikx} + Be^{-ikx}}_{I:x<0} \quad \underbrace{Ce^{ikx} + De^{-ikx}}_{II:x>0}, \quad (5)$$

ahol minden $E > 0$ energiához tudunk keresni megoldást, a hozzá tartozó k hullámszámra:

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E. \quad (6)$$

1.2.1 Amplitúdók és valószínűségi áram

Amint az első előadáson láttuk, egy $\psi(x) = |\psi(x)| e^{i\alpha(x)}$ hullámfüggvényben a valószínűségi áram:

$$J(x) = \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\psi^* \frac{d}{dx} \psi) = \frac{\hbar}{m} |\psi|^2 \frac{d\alpha}{dx}. \quad (7)$$

Ebbe beírva $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ -et:

$$J(x) = \frac{\hbar k}{m} (|A|^2 - |B|^2). \quad (8)$$

Tehát az energia-sajátállapotunk ugyan stacionárius állapot, de folyik benne részecskeáram.

1.2.2 Illesztési egyenletek

Az illesztési egyenletek: a hullámfüggvény folytonos, első deriváltja ugrik:

$$(a) : A + B = C + D \quad (9a)$$

$$(b) : ik(A - B) + \frac{2m\alpha}{\hbar^2}(A + B) = ik(C + D) \quad (9b)$$

$$(b') : A(1 - 2i\beta) - B(1 + 2i\beta) = C - D, \quad (9c)$$

ahol a (b') -öt (b) -ből kaptuk, ik -val osztással, és bevezetve egy dimenziótlan β komplex számot, ami a Dirac-delta szórási erősségét jellemzi:

$$\beta = \frac{m\alpha}{\hbar^2 k}. \quad (10)$$

Fontos, hogy ez a szórási erősség függ attól, milyen energián szórunk (azaz milyen k hullámszámmal). Ahogy az energia 0-hoz tart felülről, $\beta \rightarrow \infty$.

Az illesztési egyenletek megoldását többféleképpen is felírhatjuk, mi szeretnénk az A és D amplitúdókat paraméternek kezelni - mivel ezek írják le bejövő hullám amplitúdóját, lesznek az ismeretlenek. A fenti (a) és (b') egyenleteket tehát kombináljuk, kiejtve előbb B -t, majd C -t:

$$(1 + 2i\beta)(a1) + (b1) : 2A = (2 + 2i\beta)C + 2i\beta D; \quad (11a)$$

$$(a1) - (b1) : -2i\beta A + (2 + 2i\beta)B = 2D. \quad (11b)$$

Összefoglalva: minden $E > 0$ energiára van energiasajátállapota a Dirac-delta potenciálnak, még hozzá sajátállapotoknak egy két paraméteres altere. Ezek a sajátállapotok nem normálhatók, és pl. az alábbi alakban írhatók fel (a tetszőleges $A, D \in \mathbb{C}$ paraméterekkel, a (11) egyenletek rendezésével):

$$x < 0 : \psi(x) = Ae^{ikx} + \left(\frac{-i\beta}{1+i\beta}A + \frac{1}{1+i\beta}D \right) e^{-ikx}; \quad (12)$$

$$x > 0 : \psi(x) = De^{-ikx} + \left(\frac{i\beta}{1+i\beta}D + \frac{1}{1+i\beta}A \right) e^{ikx}. \quad (13)$$

1.2.3 Transzmissziós és reflexiós amplitúdók

Mivel, mint fentebb láttuk, az A, B, C, D amplitúdók közvetlen kapcsolatban vannak a részecskeárammal, ezért szemléletes bevezetni a szóráshoz tartozó τ és τ' reflexiós és t és t' transzmissziós amplitúdókat. Ezek azt mondják meg, hogy milyen mértékben verődik vissza a beeső hullám a potenciálról, ill. milyen mértékben halad át rajta. Matematikailag:

$$C = tA + \tau'D; \quad B = \tau A + t'D; \quad (14)$$

Beazonosíthatjuk a fenti egyenletekből, hogy a β paraméterű Dirac-delta potenciálra,

$$t = \frac{1}{1+i\beta}; \quad \tau' = \frac{i\beta}{1+i\beta}; \quad \tau = \frac{-i\beta}{1+i\beta}; \quad t' = \frac{1}{1+i\beta}. \quad (15)$$

A transzmisszió, ill. reflexió valószínűsége a megfelelő amplitúdók abszolútérték-négyzete. Esetünkben,

$$T = |t| = |t'| = \frac{1}{1+\beta^2} = \frac{1}{1+E_0/E}; \quad (16)$$

$$R = 1 - T = |\tau|^2 = |\tau'|^2 = \frac{\beta^2}{1+\beta^2} = \frac{1}{1+E/E_0}. \quad (17)$$

1.2.4 Alagúteffektus

Azaz hiába végtelen magas a Dirac-delta potenciál, minden pozitív energián áthalad rajta valamilyen egy beeső síkhullámból. Ha az energia lényegesen nagyobb E_0 -nál, ami a negatív forrásrősségű Dirac-delta potenciál kötött állapotának energiájának a nagysága, akkor a transzmisszió közel egységnyi,

$$E \gg E_0 : \quad T \approx 1 - \frac{E_0}{E}. \quad (18)$$

Ezt tekinthetjük a kvantumos alagúteffektus egy esetének. Ugyanakkor kicsit zavaró, hogy a Dirac-delta potenciál furcsa eset, mivel bár végtelen magas, végtelen vékony is.

1.3 Szórás derékszögű potenciálgáton: az alapegyenletek, ha az energia nagyobb a potenciálgátnál

A kvantumos alagutazást és a szórást is jobban megérthetjük, ha megvizsgálunk egy derékszögű potenciálgáton való szórást. Egy V_0 magasságú derékszögű potenciálgátat tekintünk, mely $x = 0$ és $x = d$ között van. Ezért a szórási állapot most három részből tevődik össze. Ha $E > V_0$, akkor ezek:

$$\psi(x) = \underbrace{Ae^{ikx} + Be^{-ikx}}_I \quad \underbrace{Ce^{ik'x} + De^{-ik'x}}_{II} \quad \underbrace{Fe^{ikx}}_{III}. \quad (19)$$

Az I és II rész határán, azaz az 1-es határon való illesztésnél a hullámfüggvény és deriváltja is folytonos:

$$(a1) \quad A + B = C + D \quad (20a)$$

$$(b1) \quad ik(A - B) = ik'(C - D). \quad (20b)$$

Ezeket lineárkombinálva kapunk egyenleteket, melyekből az 1-es illesztéshez tartozó reflexiós és transzmissziós amplitúdókat leolvashatjuk.

$$k(a1) - i(b1) : \quad 2kA = (k + k')C + (k - k')D; \quad (21a)$$

$$k'(a1) + i(b1) : \quad (k' - k)A + (k + k')B = 2k'D. \quad (21b)$$

Ezekből,

$$B = r_1 A + t'_1 D; \quad C = r'_1 D + t_1 A, \quad (22)$$

ahol

$$t_1 = \frac{2k}{k + k'} \quad r'_1 = -\frac{k - k'}{k + k'}; \quad r_1 = \frac{k - k'}{k + k'}; \quad t'_1 = \frac{2k'}{k + k'}. \quad (23)$$

Vigyázat! Itt a t és t' értékek valójában nem transzmissziós amplitúdók, csupán az egyenletekben előforduló együtthatók, amik arányosak a transzmissziós amplitúdókkal. Ennek oka, hogy az 1-es határ két oldalán eltérő nagyságú a potenciál - ezt a gyakorlaton még tovább részletezzük.

A 2-es illesztési ponton hasonlóan járhatunk el:

$$(a2) \quad Ce^{ik'd} + De^{-ik'd} = Fe^{ikd}; \quad (24)$$

$$(b2) \quad ik'(Ce^{ik'd} - De^{-ik'd}) = ikFe^{ikd}. \quad (25)$$

$$k'(a1) - i(b1) : \quad 2k'Ce^{ik'd} = (k + k')Fe^{ikd}; \quad (26)$$

$$k(a1) + i(b1) : \quad (k - k')C + (k + k')D = 0. \quad (27)$$

Ezekből

$$t_2 = \frac{2k'}{k + k'}; \quad r_2 = \frac{k' - k}{k + k'}, \quad (28)$$

mármint abban az értelemben, hogy

$$Fe^{ikd} = t_2 Ce^{ik'd}; \quad (29)$$

$$De^{-ik'd} = r_2 Ce^{ik'd}. \quad (30)$$

A fenti (28) amplitúdókat megkaphattuk volna az 1-es határon levezetett képletekből is, számolás nélkül, kétféleképpen. Vagy egyszerűen $k \leftrightarrow k'$ cserével, vagy tükrözéssel, $t_2 = t'_1$, $r_2 = r'_1$.

1.4 Oldjuk meg a szórási egyenleteket!

$$F = t_{\text{tot}}A; \quad t_{\text{tot}} = ? \quad (31)$$

Egyrészt,

$$Fe^{ikd} = t_2 e^{ik'd} C. \quad (32)$$

Másrészt, C -t kifejezzük az (22) és (30) egyenletekkel:

$$C = t_1 A + r'_1 D = t_1 A + r'_1 r_2 e^{2ik'd} C. \quad (33)$$

We can solve this for C ,

$$C = \frac{t_1}{1 - r'_1 r_2 e^{2ik'd}} A. \quad (34)$$

A fun remark: we can obtain the formula for C also by iteratively inserting Eq. (33) into itself. This results in an infinite series, which has a direct physical interpretation, as a multiple scattering expansion.

$$C = \sum_{n=0}^{\infty} (r'_1 r_2 e^{2ik'd})^n t_1 A. \quad (35)$$

Anyway, we have

$$t_{\text{tot}} = \frac{e^{-ikd} e^{ik'd} t_2 t_1}{1 - r'_1 r_2 e^{2ik'd}}. \quad (36)$$

Before we go on with the calculation, let's note that we can already see scattering resonances from this formula.

$$t_{\text{tot}} = \frac{e^{-ikd} \frac{4kk'}{(k+k')^2}}{e^{-ik'd} - \frac{(k-k')^2}{(k+k')^2} e^{ik'd}} = \frac{e^{-ikd}}{\frac{(k+k')^2}{4kk'} e^{-ik'd} - \frac{(k-k')^2}{4kk'} e^{ik'd}} = \frac{e^{-ikd}}{-i \frac{k^2+k'^2}{2kk'} \sin k'd + \cos k'd}. \quad (37)$$

We need the absolute value for the transmission probability. This is easy because we have separated the real and imaginary parts in the denominator,

$$E > V_0: \quad T = |t_{\text{tot}}|^2 = \frac{1}{\cos^2 k'd + \frac{k^4+k'^4+2k^2k'^2}{4k^2k'^2} \sin^2 k'd} = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(E-V_0)} \sin^2(k'd)}, \quad (38)$$

ahol $k' = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$.

A $E < V_0$ energiákra ezzel teljesen analóg számítással kapjuk, hogy

$$E < V_0: \quad T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0-E)} \sinh^2(\kappa'd)}, \quad \text{ahol } \kappa' = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}. \quad (39)$$

Ezt megkaphattuk volna az $E > V_0$ transzmissziós valószínűség analitikus kiterjesztésével is. .

1.5 Transzmissziós rezonanciák

Olyankor, amikor az energia magasabb, mint a potenciálgát, a bizonyos energiákon a transzmisszió 100% -os, nincs visszaverődés. Ezek a transzmissziós rezonanciák.

A rezonáns energiaértékeket megkaphatjuk, ha a (38) egyenletre pillantunk. Rezonancia akkor van, ha a szinusz értéke 1, azaz:

$$k'd = n\pi; \quad E - V_0 = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2md^2}. \quad (40)$$

Ha olyan a bejövő hullámcsomag, hogy energiában nagyon éles egy ilyen rezonáns energia körül, akkor nem lesz visszaverődés. Ilyenkor a hullámcsomag valós térben nagyon kiterjedt, akár nagyobb, mint a potenciálgát maga. Ugyanakkor ez nem azt jelenti, hogy a hullámcsomag úgy megy tovább, mintha ott sem lett volna a potenciálgát: valamennyi időkésést szenved. Ezt az időkésést itt nem számoljuk ki, az ún. Wigner-féle késési idővel számolható ki.

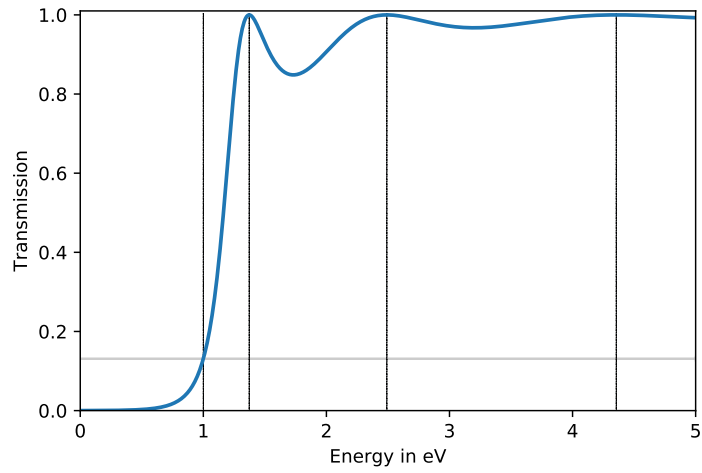


Figure 1: A transzmisszió valószínűsége, ahol a tömeg az elektron tömege, $m = m_e$, a potenciálgát paramétereit $V_0 = 1$ eV, $d = 1$ nm. Az $E = V_0$ értéket és a rezonanciákat a függőleges vonalak jelölik.

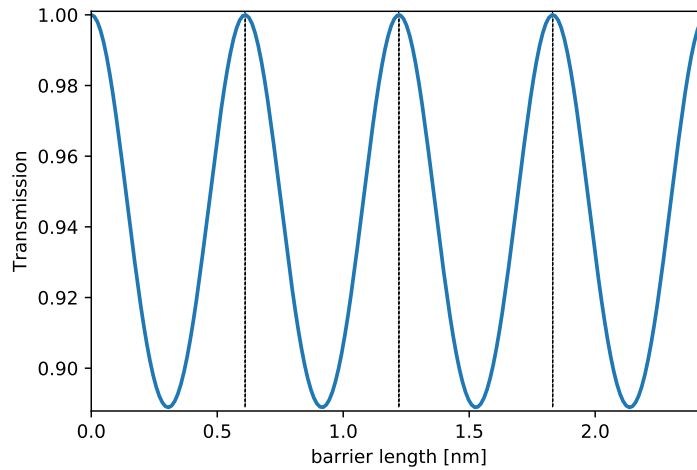


Figure 2: Amikor $E > V_0$, a transzmisszió valószínűsége a hossz függvényében periodikusan változik. Itt $m = m_e$, $V_0 = 1$ eV, $E = 2$ eV. A rezonanciákat a függőleges szaggatott vonalak jelölik.

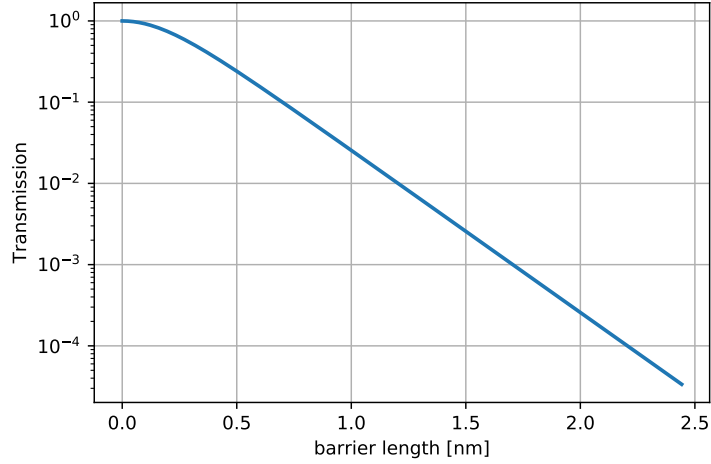


Figure 3: Amikor $E < V_0$, a transzmisszió valószínűsége a hossz függvényében közel exponenciálisan csökken. Itt $m = m_e$, $V_0 = 1$ eV, $E = 0.5$ eV.

1.6 Alagutazás

Olyankor, amikor az energia alacsonyabb a potenciálgátnál, is van valamennyi transzmisszió. Ez az ún. kvantumos alagutazás. A $\kappa'd \gg 0$ esetben ezt közelíthetjük, figyelembe véve, hogy ilyenkor $\sinh(\kappa'd) \approx e^{\kappa'd}/2$,

$$T \approx 16 \frac{E}{V_0} \frac{(V_0 - E)}{V_0} e^{-2\kappa'd}. \quad (41)$$

Látjuk, hogy a transzmisszió valószínűsége exponenciálisan kicsi a potenciálgát hosszában.

References