Rozptyl na přímce na potenciálu konečného dosahu

Martin Štefaňák

15. prosince 2020

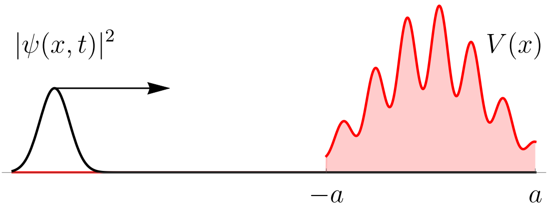
Přehled

Přehled

1. Rozptyl na potenciálu konečného dosahu

2. Rozptyl na pravoúhlé potenciálové bariéře

Rozptyl na přímce na potenciálu konečného dosahu



- Potenciál $V(x)$ nenulový jen pro $|x| < a$
- Částice připravená daleko před potenciálem s energií E
- Koeficienty průniku T a odrazu R v závislosti na E

Koeficienty průniku T a odrazu R

- Stav částice v čase t - řešení časové Schrödingerovy rovnice

$$\hat{H}\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}, \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

Koeficienty průniku T a odrazu R

$$T = \lim_{t\to\infty}\int_a^{\infty}|\psi(x,t)|^2 dx, \quad R = \lim_{t\to\infty}\int_{-\infty}^{-a}|\psi(x,t)|^2 dx$$

- Nebude nutné řešit časovou Schrödingerovu rovnici
- Stačí vyřešit bezčasovou Schrödingerovu rovnici s okrajovými podmínkami, tj. najít zobecněnou vlastní funkci celkového hamiltoniánu se správným tvarem pro $|x| > a$

Počáteční podmínka

- Částice v čase $t_0 = 0$ dobře lokalizovaná v $x_0 \ll -a$
- Střední hodnota hybnosti p_0, malá neurčitost v hybnosti Δp
- Gaussovský vlnový balík, minimalizuje relace neurčitosti

$$\psi_0(x) = C \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{4(\Delta x)^2} + \frac{i}{\hbar} p_0 x\right), \quad \Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$$

- Daleko od potenciálu — volná částice, $\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2}{dx^2}$
- Po nějakou dobu se časový vývoj neliší od volné částice

$$\psi_0(x,t) = \int\limits_{\mathbb{R}} e^{\frac{i}{\hbar}px} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2M}t}\, \tilde{\psi}(p)\, dp$$

$$x_0(t) = x_0 + \frac{p_0}{M}t, \quad (\Delta x(t))^2 = (\Delta x)^2 + \frac{(\Delta p)^2}{M^2}t^2$$

Vliv potenciálu na časový vývoj

- Částice s přiblíží k bariéře — vliv potenciálu nelze zanedbat
- Musíme v integrálu nahradit $e^{\frac{i}{\hbar}px}$ zobecněnými vlastními funkcemi celkového hamiltoniánu ϕ_k, $k = \frac{p}{\hbar}$

$$\hat{H}\phi_k = \frac{k^2\hbar^2}{2M}\phi_k \iff \left(\frac{d^2}{dx^2} + k^2\right)\phi_k = U(x)\phi_k, \quad U(x) = \frac{2M}{\hbar^2}V(x)$$

- Časový vývoj vlnové funkce je pak daný vztahem

$$\psi(x,t) = \int\limits_{\mathbb{R}} \phi_{\frac{p}{\hbar}}(x)e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2M}t}\,\tilde{\psi}(p)\,dp$$

Lippmann-Schwingerova rovnice

- Převedeme bezčasovou Schrödingerovu rovnici pro celkový hamiltonián na integrální rovnici

$$\phi_k(x) = e^{ikx} + \int_{\mathbb{R}} G_k(x - x')\, U(x')\, \phi_k(x')\, dx'$$

- $G_k(x)$ je Greenova funkce (fundamentální řešení) bezčasové Schrödingeorvy rovnice pro volnou částici

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + k^2\right) G_k(x) = \delta(x)$$

- Greenova funkce je rovna

$$G_k(x) = \frac{e^{ik|x|}}{2ik} = \Theta(x)\frac{e^{ikx}}{2ik} + \Theta(-x)\frac{e^{-ikx}}{2ik}$$

Zobecněná vlastní funkce celkového hamiltoniánu

- Dosadíme $G_k(x)$ do L-S rovnice, $U(x) = 0$ pro $|x| > a$

$$\phi_k(x) = e^{ikx}(1 + C(k,x)) + A(k,x)e^{-ikx}$$

- Funkce $A(k,x)$ a $C(k,x)$

$$\begin{aligned} A(k,x) &= \int_x^a \frac{e^{ikx'}}{2ik} U(x')\Phi_k(x')dx' \\ C(k,x) &= \int_{-a}^x \frac{e^{-ikx'}}{2ik} U(x')\Phi_k(x')dx' \end{aligned}$$

ϕ_k mimo potenciál

- V oblasti za potenciálem — $x > a$

$$A(k,x) = 0, \quad C(k,x) = C(k,a)$$

- V oblasti před potenciálem — $x < -a$

$$A(k,x) = A(k,-a) \equiv A(k), \quad C(k,x) = 0$$

- Mimo potenciál je $\phi_k(x)$ superpozicí zobecněných vlastních funkcí hamiltoniánu volné částice

$$\begin{aligned} x > a \quad &\Longrightarrow \quad \phi_k(x) = B(k)e^{ikx}, \quad B(k) = 1 + C(k,a) \\ x < -a \quad &\Longrightarrow \quad \phi_k(x) = e^{ikx} + A(k)e^{-ikx} \end{aligned}$$

Časový vývoj vlnové funkce

- Vlnová funkce v čase t je rovna součtu tří funkcí

$$\psi(x,t) = \psi_0(x,t) + \psi_A(x,t) + \psi_C(x,t)$$

- $\psi_0(x,t)$ — vlnová funkce volné částice, nezanedbatelná jen v okolí $x_0(t) = x_0 + \frac{p_0}{M}t$
- Funkce $\psi_A(x,t)$ je nulová pro $x > a$

$$\psi_A(x,t) = \int\limits_{\mathbb{R}} A\left(\frac{p}{\hbar}, x\right) e^{-\frac{i}{\hbar}px} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2M}t} \tilde{\psi}(p) dp$$

- Funkce $\psi_C(x,t)$ je nulová pro $x < -a$

$$\psi_C(x,t) = \int\limits_{\mathbb{R}} C\left(\frac{p}{\hbar}, x\right) e^{\frac{i}{\hbar}px} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2M}t} \tilde{\psi}(p) dp$$

Asymptotické chování vlnové funkce

- Riemann-Lebesgueova věty $\Longrightarrow$ ψ_A a ψ_C vymizí v oblasti potenciálu v limitě $t \to \infty$
- Pro velká t lze napsat vlnovou funkci jako superpozici dvou vln

$$\psi(x,t) = \psi_T(x,t) + \psi_R(x,t)$$

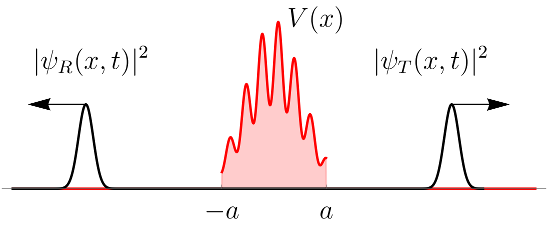
- Před bariérou — odražená vlna $\psi_R(x,t)$

$$x < -a \ \longrightarrow \psi(x,t) = \psi_R(x,t) = \int_{\mathbb{R}} A\left(\frac{p}{\hbar}\right) e^{-\frac{i}{\hbar}px} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2M}t} \tilde{\psi}(p) dp$$

- Za bariérou — transmitovaná vlna $\psi_T(x,t)$

$$x > a \ \longrightarrow \psi(x,t) = \psi_T(x,t) = \int_{\mathbb{R}} B\left(\frac{p}{\hbar}\right) e^{\frac{i}{\hbar}px} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2M}t} \tilde{\psi}(p) dp$$

Koeficienty průniku a odrazu



- Koeficient průniku a odrazu

$$T = \lim_{t\to\infty} \int_a^\infty |\psi_T(x,t)|^2 dx, \quad R = \lim_{t\to\infty} \int_{-\infty}^{-a} |\psi_R(x,t)|^2 dx$$

- V limitě $t \to \infty$ vlnová funkce vymizí v oblasti potenciálu

$$T + R = 1$$

Transmitovaná a odražená vlna

- Dopadající částice má dobře určenou hybnost — Δp je malé
- $\tilde{\psi}(p)$ je nezanedbatelná jen v Δp okolí p_0
- $A(\frac{p}{\hbar})$ a $B(\frac{p}{\hbar})$ se mění pomalu — nahradíme hodnotami v p_0
- Transmitovaná vlna

$$\psi_T(x,t) = B\left(\frac{p_0}{\hbar}\right)\int_{\mathbb{R}} e^{\frac{i}{\hbar}px} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2M}t}\tilde{\psi}(p)dp = B\left(\frac{p_0}{\hbar}\right)\psi_0(x,t)$$

- Odražená vlna

$$\psi_R(x,t) = A\left(\frac{p_0}{\hbar}\right)\int_{\mathbb{R}} e^{-\frac{i}{\hbar}px} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2M}t}\tilde{\psi}(p)dp = A\left(\frac{p_0}{\hbar}\right)\psi_0(-x,t)$$

Koeficienty průniku a odrazu

- Koeficient průniku

$$
\begin{aligned}
T &= \left|B\left(\frac{p_0}{\hbar}\right)\right|^2 \lim_{t\to\infty} \int\limits_a^{\infty} |\psi_0(x,t)|^2 dx \\
&= \left|B\left(\frac{p_0}{\hbar}\right)\right|^2 \lim_{t\to\infty} \int\limits_{-\infty}^{\infty} |\psi_0(x,t)|^2 dx = \left|B\left(\frac{p_0}{\hbar}\right)\right|^2
\end{aligned}
$$

- Koeficient průniku

$$
R = \left|A\left(\frac{p_0}{\hbar}\right)\right|^2
$$

Rozptyl na potenciálu konečného dosahu

- Koeficienty průniku a odrazu jsou dané funkcemi $A(k)$ a $B(k)$
- Tyto funkce lze určit řešením bezčasové Schrödingerovy rovnice pro celkový hamiltonián s okrajovými podmínkami

$$
\begin{aligned}
\hat{H}\phi_k = E\phi_k \quad &\Longleftrightarrow \quad \frac{d^2\phi_k}{dx^2} + k^2\phi_k = \frac{2M}{\hbar^2}V(x)\phi_k \\
x > a \quad &\longrightarrow \quad \phi_k(x) = B(k)e^{ikx} \\
x < -a \quad &\longrightarrow \quad \phi_k(x) = e^{ikx} + A(k)e^{-ikx}
\end{aligned}
\tag{1}
$$

- Rovnici (1) vyřešíme pro $|x| < a$, a spojitě do 1. derivace navážeme na řešení mimo bariéru — podmínky na $A(k)$ a $B(k)$

Zjednodušené odvození koeficientů průniku a odrazu

- Místo gaussovského vlnového balíku budeme uvažovat dopadající částici s přesně určenou energií a hybností
- $\phi_k(x)$ — stacionární rozptylový stav

$$\begin{aligned} x > a \quad &\longrightarrow \quad \phi_k(x) = B(k)e^{ikx} \\ x < -a \quad &\longrightarrow \quad \phi_k(x) = e^{ikx} + A(k)e^{-ikx} \end{aligned}$$

- $A(k)$ — amplituda odražené vlny
- $B(k)$ — amplituda transmitované vlny
- Amplituda dopadající vlny je zvolena rovna jedné
- $R = |$ amplituda odražené / dopadající vlny $|^2 = |A(k)|^2$
- $T = |$ amplituda transmitované / dopadající vlny $|^2 = |B(k)|^2$

Přehled

Rozptyl na pravoúhlé potenciálové bariéře

- Potenciál tvaru $V(x) = V_0, \ |x| < a$
- Hledáme stacionární rozptylový stav — $\hat{H}\phi_k = E\phi_k$, $E = \frac{k^2\hbar^2}{2M}$

$$
\begin{aligned}
x > a \quad &\longrightarrow \quad \phi_k(x) = B(k)e^{ikx} \\
x < -a \quad &\longrightarrow \quad \phi_k(x) = e^{ikx} + A(k)e^{-ikx} \\
|x| < a \quad &\longrightarrow \quad \frac{d^2\phi_k}{dx^2} + \underbrace{\left(k^2 - \frac{2M}{\hbar^2}V_0\right)}_{k'^2}\phi_k = 0
\end{aligned}
$$

- ϕ_k musí být spojitá do 1. derivace

Energie částice je větší než bariéra

$$E = \frac{k^2\hbar^2}{2M} > V_0 \implies k'^2 > 0$$

- Řešení uvnitř bariéry

$$|x| < a \longrightarrow \phi_k(x) = C(k)e^{ik'x} + D(k)e^{-ik'x}$$

- Spojitost funkce a 1. derivace v bodech $x = \pm a$

$$\begin{aligned}
x = a: \quad \phi_k(a) &= Be^{ika} = Ce^{ik'a} + De^{-ik'a} \\
\phi_k'(a) &= ikBe^{ika} = ik'Ce^{ik'a} - ik'De^{-ik'a} \\
x = -a: \quad \phi_k(-a) &= e^{-ika} + Ae^{ika} = Ce^{-ik'a} + De^{ik'a} \\
\phi_k'(-a) &= ike^{-ika} - ikAe^{ika} = ik'Ce^{ik'a} - ik'De^{-ik'a}
\end{aligned}$$

- Soustava 4 rovnic pro A, B, C, D

Energie částice je větší než bariéra

- Vyloučením C a D dostaneme

$$
\begin{aligned}
B(k) &= e^{2ik'a}\left(e^{-2ika} + \frac{k'-k}{k'+k}A(k)\right) \\
A(k) &= V_0 e^{-2ika}\left(2E - V_0 + 2i\sqrt{E(E-V_0)}\cot(2k'a)\right)^{-1}
\end{aligned}
$$

Koeficient odrazu

$$R = |A(k)|^2 = \left(1 + \frac{4E(E-V_0)}{V_0^2\sin^2(2k'a)}\right)^{-1}$$

Koeficient průniku

$$T = 1 - R = \left(1 + \frac{V_0^2\sin^2(2k'a)}{4E(E-V_0)}\right)^{-1}$$

Rezonanční energie

Koeficient průniku

$$T = \left(1 + \frac{V_0^2 \sin^2(2k'a)}{4E(E - V_0)}\right)^{-1}$$

- Částice projde bariérou s jistotou $\iff 2k'a = n\pi$

$$2k'a = 2\sqrt{\frac{2M(E - V_0)}{\hbar^2}} = n\pi$$

- Částice projde s jistotou jen pro rezonanční energie E_n

$$E_n = V_0 + \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8Ma^2}, \quad n \in \mathbb{N}$$

- Odpovídají energiím částice v ∞ jámě posunutým o V_0

Energie částice je menší než bariéra

$$E = \frac{k^2\hbar^2}{2M} < V_0 \implies k'^2 < 0$$

- Řešení uvnitř bariéry

$$|x| < a \longrightarrow \phi_k(x) = C(k)e^{|k'|x} + D(k)e^{-|k'|x}$$

- Další postup stejný jako pro $E > V_0$
- Ve výsledku nahradíme $\sin(2k'a)$ za $i\sinh(2|k'|a)$

Koeficient průniku

$$T = \left(1 - \frac{V_0^2 \sinh^2(2|k'|a)}{4E(E - V_0)}\right)^{-1}$$

Tunelový jev

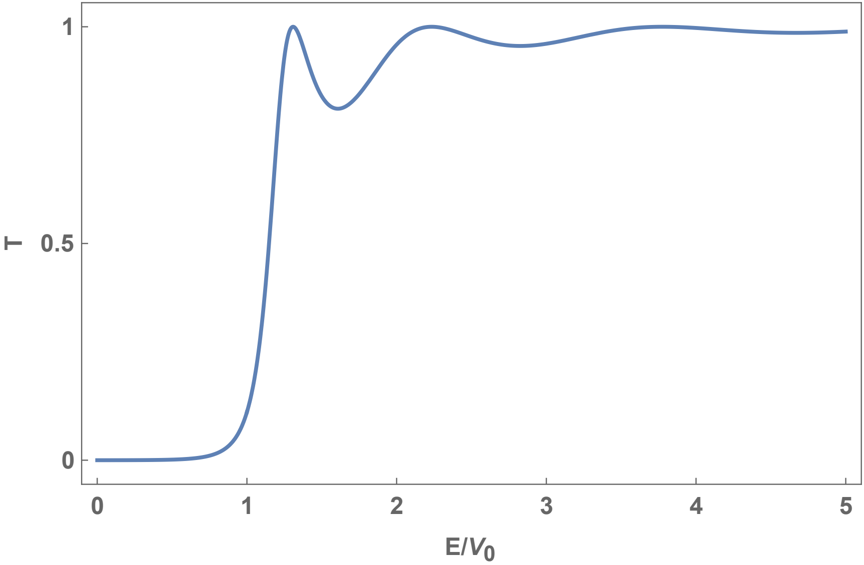
Koeficient průniku

$$T = \left(1 - \frac{V_0^2 \sinh^2(2|k'|a)}{4E(E - V_0)}\right)^{-1}$$

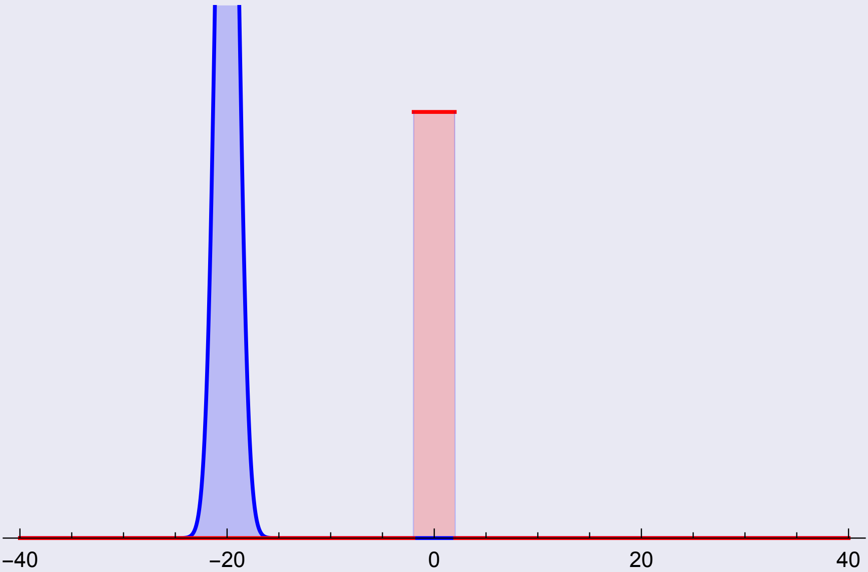
- Částice může projít bariérou i pokud má energii menší než V_0
- Pro $V_0 \gg E$ pravděpodobnost průniku klesá exponenciálně

$$T \sim \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} \exp\left(-\frac{4a}{\hbar}\sqrt{2M(V_0 - E)}\right)$$

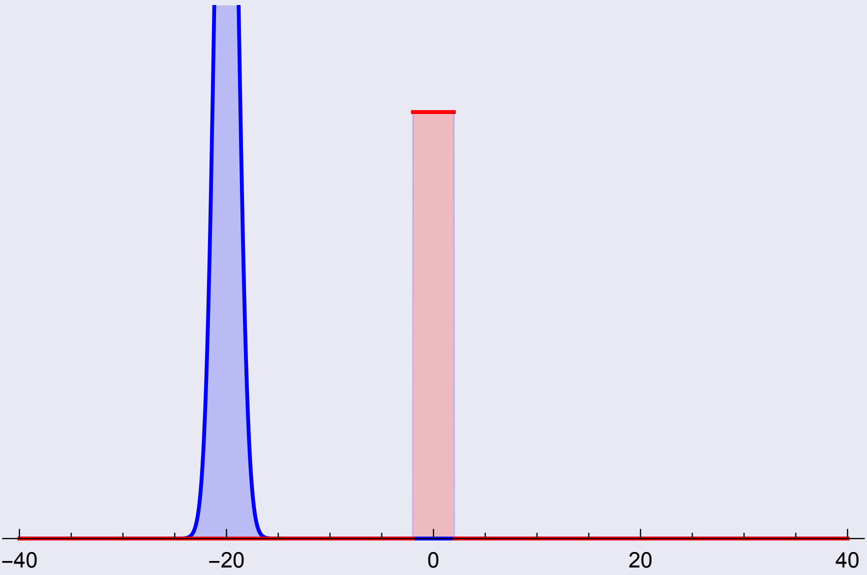
Pravděpodobnost průniku bariérou



Energie menší než bariéra $E = 0.9\,V_0 \Longrightarrow T \approx 0.04$



Energie větší než bariéra, $E \approx 1.6\,V_0 \implies T \approx 0.81$



Rezonanční energie $E_n = V_0 + \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{8Ma^2} \Longrightarrow T = 1$