Cvičení 5. 5. 2021

Téma: Bariéry a jámy

Jendím z důležitých problémů na které nabízí kvantová mechanika teoretický nástroj je rozptyl částic na potenciálu. Můžeme si představit například urychlený elektron rozptylující se na atomu nebo molekule. Ze spektra získaného z dat pro různé energie elektronů je možné získat informace o atomu nebo molekule.

Budeme uvažovat volnou částici, nebo spíše tok volných částic, putující v jedné dimenzi. Při pohybu částice nad konstantním potenciálem s potenciálovým rozdílem E je její vlnový vektor k roven $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$. Přičemž vlnová funkce je úměrná $\exp(ikx)$. *Pozn.: Dnes nebudeme řešit normování a další fundamentální otázky.*

V příkladech většinou uvažujeme částice proudící z jedné strany. Tyto částice interagují s potenciálem, část se odrazí a část projde. Zajímají nás koeficienty odrazu (reflexe) a průniku (transmise), případně toky částic zpět a za bariéru (úměrné kvadrátům koeficientů).

Aby byl výpočet upočitatelný, budeme uvažovat jen jednu nebo dvě bariéry. Pro vlnovou funkci potom použijeme sešívací podmínky.

▷ Jaké podmínky musí splňovat vlnová funkce při konečné změně potenciálu?

Vyjímkou je první příklad, kdy budeme uvažovat libovolný potenciál, ale bude nás zajímat situace v $\pm\infty$, kde bude potenciál konstantní.

Koeficienty transmise a reflexe

Uvažujme potenciál o hodnotách $V(-\infty) = 0$, $V(\infty) = V_0$, mezitím cokoliv. Vlnová funkce částic je v okolí $x = -\infty$ rovna $\psi_- = e^{ikx} + Be^{-ikx}$, kde B je koeficient pro odražené částice. Pro $x = \infty$ máme $\psi_+ = Ae^{ik'x}$. Bude nás zajímat tok pravděpodobnosti daný výrazem

$$j = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^* \frac{d\psi}{dx} - \psi \frac{d\psi^*}{dx}\right)$$

▷ Vypočtěte tok pravděpodobnosti pro ψ_+ a ψ_-.

Ze Schrödingerovy rovnice plyne, že toky v obou nekonečnech si musejí být rovny. Také musí platit, že $T + R = 1$, součet podílu prošlých (T) a odražených (R) částic je roven jedné.

▷ Položte $j_+ = j_-$ a upravte na $T + R = 1$.

Podstatné zde je to, že při rozdílu potenciálu v nekonečnech nestačí získat transmisi a reflexi z kvadrátu koeficientů.

Bariéra

Částice přilétá z $-\infty$ a má energii E (oproti konstatnímu potenciálu). Potenciál se v bodě $x = 0$ zvedá na hodnotu $V = V_0$ a pokračuje tak až do ∞. Jako v předchozím případě budeme uvažovat, že částice se může odrazit, nebo letět dál.

▷ Napište vlnovou funkci pro kladnou a zápornou poloosu x. Koeficient příchozí částice bude 1, procházející A a odražené B.

▷ Napište sešívací podmínky pro vlnovou funkci.

Budeme uvažovat, že platí $V_0 = cE$, kde $0 < c < 1$, tedy částice má energii vyšší, než je potenciálový schod.

▷ Vyjádřete vlnový vektor k' částice nad valem pomocí vlnového vektoru k volné částice a koeficientu c.

▷ Vyjádřete koeficienty A a B pomocí c.

▷ Vypočtěte $T = \frac{k'}{k}|A|^2$ a $R = |B|^2$.

▷ Jaký je podíl prošlých a odražených částic pro $V_0 = \frac{3}{4}E$?

Jáma nebo val

Budeme uvažovat potenciálovou jámu o šířce a (na intervalu $(0, a)$) a hloubce V_0 a částice, které opět přilétají z $-\infty$. Potenciál v $\pm\infty$ je v obou případech 0, částice má opět energii $\mathcal{E} > 0$.

▷ Napište vlnové funkce problému, na prvním intervalu použijme koeficienty A a B, na druhém C a D, na posledním E, který bude $E = 1$.

▷ Napište sešívací podmínky pro vlnové funkce a odpovídající soustavu rovnic.

▷ *Pro rychlíky: Vyřešte.*