Kvantummechanika A – gyakorlat
4. gyakorlat

1-dimenziós szóráselmélet, transzfermátrix formalizmus

Szórásállapotok és a kontinuitási egyenlet

Az előző gyakorlaton láttuk, hogy az 1-dimenziós esetben megkülönböztethetünk kötött és szórásállapotokat az energia és a potenciál viszonya alapján. Ha $E > V(x \to \pm\infty)$ – elegendő csak az egyik határon teljesülnie, akkor szórás-, míg ellenkező esetben kötött állapotról beszélünk. Továbbá, kötött állapotok esetén láttuk, hogy normálható $\psi(x)$ hullámfüggvényeink voltak, azonban most azt is látni fogjuk, hogy a szórásállapotokra ez nem fog teljesülni az $\sim e^{\pm ikx}$ síkhullámalak miatt. Ennek ellenére úgy gondoljuk, hogy léteznek szabad részecskék, amik részt tudnak venni szórási folyamatokban, szóráskísérletekben.

A szórásokban – ha normálni a hullámfüggvényt nem is lehet – meg tudjuk határozni, hogy milyen valószínűséggel fog a részecskénk visszaverődni (**reflexió**, R) vagy áthaladni (**transzmisszió**, T) egy adott akadályon (potenciálon).

Mindenek előtt ismételjük át a kvantummechanikában – és mindenhol máshol is – felbukkanó **kontinuitási egyenlet**et[1], melyet most a valószínűségre írhatunk fel. Az egyenlet általános alakja

$$\frac{\partial \varrho(\mathbf{x},t)}{\partial t} + \mathrm{div}\mathbf{j}(\mathbf{x},t) = 0 \ ,$$

ahol most $\varrho(\mathbf{x},t) = |\psi(\mathbf{x},t)|^2$ a valószínűségi sűrűség és $\mathbf{j}(\mathbf{x},t)$ a valószínűségi áramsűrűség:

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m}\Big[\psi(\nabla\psi^*) - \psi^*(\nabla\psi)\Big] \ .$$

Ha $\varrho(\mathbf{x},t) = \varrho(\mathbf{x})$ stacionárius, akkor a ki- és befolyó áramok megegyeznek, azaz

$$\mathbf{j}_{\mathrm{be}} = \mathbf{j}_{\mathrm{ki}} = \mathbf{j}_R + \mathbf{j}_T \ .$$

Az 1-dimenziós esetben az áramsűrűségek is csak skalármennyiségek, így az R és T együtthatók a kontinuitásból

$$R = \frac{j_R}{j_{\mathrm{be}}} \ , \qquad T = \frac{j_T}{j_{\mathrm{be}}} \ ,$$

és észrevehető, hogy $R + T = 1$ (ez nagyon hasznos, mert így pl. házi feladatban elég csak az egyiket kiszámolni).

Fizikai motivációnk a következő: szeretnénk leírni majd egy a $-\infty$-ből *jobbra* haladó síkhullámot, ami szóródik valmailyen potenciálon. Ennek eredményeként kapunk majd egy *balra* haladó visszavert (R) és egy *jobbra* tartó áthaladó (T) hullámot. Írjuk fel

[1] `https://www.youtube.com/watch?v=b5TEg3WO7_Q`

a szokásos módon a potenciál bal és jobb oldalán az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet megoldását $E > V$ esetben:

$$\psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \; ,$$
$$\psi_2(x) = Ce^{ikx} + De^{-ikx} \; ,$$

ahol rendre az A, B, C együtthatók tartoznak a beérkező, a visszavert és az áthaladó hullámokhoz és $D = 0$ (nincs bejövő hullám jobbról). A bal oldahoz tartozó áram – $(\nabla \to \partial/\partial x)$

$$\begin{aligned} j_1 = \frac{i\hbar}{2m}\Big[&\left(Ae^{ikx} + Be^{-ikx}\right)\left(A^*(-ik)e^{-ikx} + B^*(ik)e^{ikx}\right) \\ &- \left(A^*e^{-ikx} + B^*e^{ikx}\right)\left(A(ik)e^{ikx} + B(-ik)e^{-ikx}\right)\Big] \\ = \frac{\hbar k}{m}&\left(|A|^2 - |B|^2\right) = j_{\mathrm{be}} - j_R \; , \end{aligned}$$

míg a jobb oldal egyszerűen analóg módon

$$j_2 = \frac{\hbar k}{m}|C|^2 = j_T \; .$$

A megjelenő $\hbar k/m = v$ egy sebesség jellegű mennyiségként képzelhető el ($\hbar k/m = p/m$). Általánosan az A, B és C együtthatók energiafüggő mennyiségek, ahogy ezt mindjárt látni is fogjuk. Az áramosűrűségekre kapott összefüggések alapján

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{|r|^2}{|A|^2} \; , \qquad T = \frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{|t|^2}{|A|^2} \; .$$

Transzfermátrix formalizmus

Egy tetszőleges szóró potenciálra a Schrödinger-egyenlet linearitása miatt a potenciálgát két oldalán lévő síkhullámok amplitúdói között lineáris az összefüggés, ennélfogva felírható a

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \mathbf{T}(k)\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \qquad \Longrightarrow \qquad \begin{cases} C = T_{11}A + T_{12}B \\ D = T_{21}A + T_{22}B \end{cases}$$

egyenletrendszer, ahol $\mathbf{T}$ mátrixot fogjuk **transzfermátrix**nak nevezni (most egy időre $D \neq 0$ az általánosság kedvéért).

Ha vesszük a Schrödinger-egyenlet adjungáltját, akkor egy olyan egyenletet kapunk, amiben $\psi(x)$ hullámfüggvény helyett $\psi^*(x)$ komplex konjugált hullámfüggvény szerepel, ami szemlétesen a mi esetünkben annyit tesz, hogy a hullámok haladási irány megfordult ($e^{\pm ikx} \to e^{\mp ikx}$) és az amplitúdóknak is a konjugáltja jelenik meg. Mivel k valós és $\mathbf{T}(k)$ a potenciált jellemzi és nem a hullámfüggvényt

$$\begin{pmatrix} D^* \\ C^* \end{pmatrix} = \mathbf{T}(k)\begin{pmatrix} B^* \\ A^* \end{pmatrix} \qquad \Longrightarrow \qquad \begin{cases} D^* = T_{11}B^* + T_{12}A^* \\ C^* = T_{21}B^* + T_{22}A^* \end{cases} \; .$$

Ha konjugáljuk az egyik egyenletrendszerünket, akkor leolvasható, hogy a transzfermátrix elemei nem lesznek függetlenek egymástól: $T_{11} = T_{22}^*$ és $T_{12} = T_{21}^*$, ennélfogva általános a mátrixunk

$$\mathbf{T}(k) = \begin{pmatrix} M & N \\ N^* & M^* \end{pmatrix}$$

alakban írható.

Ezek után mutassuk meg, hogy $\det \mathbf{T} = k_1/k_2$, ha a potenciálgát bal oldalán k_1 a hullámszám, míg a jobb oldalán k_2! A két egyenletrendszerünk alapján

$$\begin{aligned} |C|^2 = CC^* &= (T_{11}B + T_{12}B)(T_{21}B^* + T_{22}A^*) \\ &= T_{11}T_{22}|A|^2 + T_{12}T_{21}|B|^2 + T_{11}T_{21}AB^* + T_{12}T_{22}A^*B \ , \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} |D|^2 = DD^* &= (T_{21}A + T_{22}B)(T_{11}B^* + T_{12}A^*) \\ &= T_{12}T_{21}|A|^2 + T_{11}T_{22}|B|^2 + T_{11}T_{21}AB^* + T_{12}T_{22}A^*B \ , \end{aligned}$$

míg a kontinuitási egyenlet szerint

$$\begin{aligned} k_1(|A|^2 - |B|^2) = k_2(|C|^2 - |D|^2) &= k_2(T_{11}T_{22} - T_{12}T_{21})(|A|^2 - |B|^2) \\ &= k_2 \det \mathbf{T}((|A|^2 - |B|^2) \ , \end{aligned}$$

azaz valóban $\det \mathbf{T} = k_1/k_2$. A mi speciális esetünkben $D = 0$, így a megoldandó egyenletrendszer (egyszerűsítettünk A-val):

$$\begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix} = \mathbf{T}(k) \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} \ ,$$

ahonnan

$$r = -\frac{T_{21}}{T_{22}} \qquad \text{és} \qquad t = \frac{\det \mathbf{T}}{T_{22}} \ .$$

Na de, mi is ez a mátrix adott potenciál esetén?

1. Lépcsőpotenciál

A lépcsőpotenciál

$$V(x) = \begin{cases} V_1 \text{ , ha } x < 0 \\ V_2 \text{ , ha } x > 0 \end{cases} \ ,$$

ahol most legyen $E > V_2 > V_1$. Definiáljuk a hullámszámokat a potenciálgát két oldalán mint

$$k_{1,2}^2 = \frac{2m(E - V_{12})}{\hbar^2} \ ,$$

amivel a Schrödinger-egyenlet megoldásai a lépcső két oldalán:

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \ , \\ \psi_2(x) &= Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x} \ . \end{aligned}$$

A jól ismert (ld. előző gyakrolat) illesztési feltételek miatt $\psi(x)$ és $\psi'(x)$ folytonos $x=0$-ban, azaz

$$\begin{aligned} A+B &= C+D \ , \\ k_1(A-B) &= k_2(C-D) \ , \end{aligned}$$

ahonnan véges mennyiségű algebrával

$$\begin{aligned} C &= \frac{1}{2}\left(1+\frac{k_1}{k_2}\right)A + \frac{1}{2}\left(1-\frac{k_1}{k_2}\right)B \ , \\ D &= \frac{1}{2}\left(1-\frac{k_1}{k_2}\right)A + \frac{1}{2}\left(1+\frac{k_1}{k_2}\right)B \ . \end{aligned}$$

Ekkor már a transzerfmátrix elemei egyszerűen leolvashatók (figyeljük mindig a k-függésben az argumentumok sorrendjét!):

$$\mathbf{T}(k_2,k_1) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+\frac{k_1}{k_2} & 1-\frac{k_1}{k_2} \\ 1-\frac{k_1}{k_2} & 1+\frac{k_1}{k_2} \end{pmatrix} \ .$$

2. Eltolt lépcsőpotenciál

Ha eltolják a potenciállépcsőnket $x=0$-ból $x=a$-ba, akkor ennek hatására más fázisban fogják elérni a hullámok a gátat. Vezessük be ez alapján az

$$\tilde{A} = Ae^{ik_1a}, \tilde{B} = Be^{-ik_1a}, \tilde{C} = Ce^{ik_2a}, \tilde{D} = De^{-ik_2a}$$

amplitúdókat. Belátható, hogy az illesztésre felírt egyenletek ekkor

$$\begin{aligned} \tilde{A}+\tilde{B} &= \tilde{C}+\tilde{D} \\ k_1(\tilde{A}-\tilde{B}) &= k_2(\tilde{C}-\tilde{D}) \end{aligned}$$

alakban írhatók, azaz $\mathbf{T}$ nem változik:

$$\begin{pmatrix} \tilde{C} \\ \tilde{D} \end{pmatrix} = \mathbf{T}(k_2,k_1)\begin{pmatrix} \tilde{A} \\ \tilde{B} \end{pmatrix} \ .$$

Az eredeti együtthatókkal is felírható az egyenletrendszer. Megmutatható, hogy

$$\begin{pmatrix} e^{ik_2a} & 0 \\ 0 & e^{-ik_2a} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \mathbf{T}(k_2,k_1)\begin{pmatrix} e^{ik_1a} & 0 \\ 0 & e^{-ik_1a} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \ ,$$

ahol jelölje a fázisokat tartalmazó mátrixot (figyeljünk az előjelekre!)

$$\mathbf{E}_a(k) = \begin{pmatrix} e^{-ika} & 0 \\ 0 & e^{ika} \end{pmatrix} \ .$$

Ezzel a potenciált eltoló mátrixszal tudunk váltani az (A,B,C,D) és a $(\tilde{A},\tilde{B},\tilde{C},\tilde{D})$ együtthatókat között, továbbá látható, hogy $\mathbf{E}_a^{-1}(k) = \mathbf{E}_{-a}(k)$. Az eredeti A,B és C,D együtthatókkal a teljes egyenletrendszer

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \mathbf{M}_a(k_2,k_1)\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \ , \qquad \text{ahol} \qquad \mathbf{M}_a(k_2,k_1) = \mathbf{E}_a(k_2)\mathbf{T}(k_2,k_1)\mathbf{E}_{-a}(k_1) \ .$$

3. Véges potenciálgát

Véges potenciálgát esetén a potenciál

$$V(x) = \begin{cases} V_0 \ , & \text{ha } 0 < x < a \\ 0 \ , & \text{egyébként} \end{cases}$$

1. eset: $E > V_0 > 0$ (szórásállapot).

Az eddigiek ismeretében szinte rögtön fel tudjuk írni a transzfermátrixot, csak oda kell figyelni a mátrixot megfelelő sorrendjére. Megint osszuk fel a x-tengelyt három részre (potenciálgát előtt, benne és után) és legyen

$$\begin{aligned} k_1^2 = k_3^2 &= \frac{2mE}{\hbar^2} \ , \\ k_2^2 &= \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \ . \end{aligned}$$

A potenciálgát előtt és után $k_1 = k_3$, ennélfogva $\det \mathbf{M} = 1$. Ahogy a hullám halad balról jobbra először eléri a lépcsőpotenciált $x = 0$-ban, amit majd követ egy „másik” lépcső lefelé $x = a$-ban: ehhez az eltolt potenciállépcső esetét használhatjuk fel (ebben a jelölésben „csak” $k_1 \leftrightarrow k_2$), azaz

$$\mathbf{M} = \mathbf{E}_a(k_1)\mathbf{T}(k_1, k_2)\mathbf{E}_{-a}(k_2)\mathbf{T}(k_2, k_1) \ .$$

Ekkor pl. (szorgalmi feladat ellenőrizni)

$$T = |t|^2 = \frac{1}{|T_{22}|^2} = \frac{1}{\cos^2(k_2 a) + \frac{1}{4}\left(\frac{k_1^2 + k_2^2}{k_1 k_2}\right)^2 \sin^2(k_2 a)} \ .$$

2. eset: $V_0 < 0 < E$ (szórásállapot).

Szórásállapotról beszélünk akkor is, ha $V_0 < 0 < E$: ekkor a bejövő hullám egy potenciálgödrön szóródik a gát helyett. A számolás teljesen analóg, azzal a kölünbséggel, hogy ekkor az $(E - V_0)$ kifejezéseket $(E + |V_0|)$-ra cseréljük.

3. eset: $0 < E < V_0$ (szórásállapot).

Ekkor a gáton belül nem az eddigi komplex exponenciálisok szerepelnek, hanem (a már szintén jól ismert) valós exponenciálisok. Szerencsére az áttérés ekkor is egyszerű, hiszen

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} = \sqrt{-\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} = i\sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} = i\kappa_2 \ .$$

Ezek után pedig kihasználhatjuk, hogy $\sin(ix) = i\mathrm{sh}(x)$ és $\cos(ix) = \mathrm{ch}(x)$.

4. eset: $V_0 < E < 0$ (kötött állapot).

Ez az eset a már korábban látott kötött állapotok problémája véges potenciálgödörben. Azonban, a korábbi szórásállapotokra kapott eredményeinkből tudunk következtetni a kötött állapotokra is. A gödör falán kívül megint $k \to i\kappa$ cserét kell végrehajtani. A normálhatóság miatt (ld. az előző gyakorlat) $A = D = 0$. Ekkor az egyenletrendszerünk

$$\begin{pmatrix} C \\ 0 \end{pmatrix} = \mathbf{T} \begin{pmatrix} 0 \\ B \end{pmatrix}$$

alakban írható. Látható, hogy most $T_{22} = 0$, azaz (feltéve, hogy korábban megoldottuk az említett szorgalmit)

$$T_{22}(k_2, i\kappa_1) = e^{-\kappa_1 a} \left[\cos(k_2 a) - \frac{k_2^2 - \kappa_1^2}{2k_2\kappa_1} \sin(k_2 a) \right] = 0 \; .$$

Osszunk le a valós exponenciálissal és hozzuk közös nevezőre a sin és cos együtthatóit úgy, hogy szorzunk $2k_2\kappa_1/(k_2^2 + \kappa_1^2)$-tel, majd vegyük észre, hogy ekkor az együtthatók négyzetösszege 1, azaz legyen

$$\frac{2k_2\kappa_1}{k_2^2 + \kappa_1^2} = \sin\delta \qquad \text{és} \qquad \frac{k_2^2 - \kappa_1^2}{k_2^2 + \kappa_1^2} = \cos\delta \; .$$

Egy régi trigonometrikus azonosságot felhasználva

$$\sin\delta\cos(k_2 a) - \cos\delta\sin(k_2 a) = \sin(\delta - k_2 a) = 0 \; ,$$

azaz $\delta = k_2 a + n\pi$, ahol $n \in \mathbb{Z}$. Ezen felül egy másik azonosság alapján

$$\operatorname{tg}\frac{\delta}{2} = \frac{1 - \cos\delta}{\sin\delta} = \frac{\kappa_1}{k_2} \; ,$$

ennélfogva

$$\operatorname{tg}\left(\frac{k_2 a}{2} + \frac{n\pi}{2}\right) = \frac{\kappa_1}{k_2} \; ,$$

ami egy – az előző gyakorlaton látottal kompatibilis (mutassuk meg!) – transzencedens egyenlet az energiára, azaz valóban megkaptuk a szórásállapotok segítségével a kötött állapotok energiáit.

4. Dirac-delta potenciál

Anélkül, hogy elárulnám a 3. házi feladat megoldását a $V(x) = \alpha\delta(x)$ alakú potenciál esetén a transzfermátrix

$$\mathbf{T}_\delta(k, \alpha) = \begin{pmatrix} 1 + \frac{m\alpha}{ik\hbar^2} & \frac{m\alpha}{ik\hbar^2} \\ -\frac{m\alpha}{ik\hbar^2} & 1 - \frac{m\alpha}{ik\hbar^2} \end{pmatrix} \; .$$