

Naloga: Poiščimo vezana stanja delca v končni, neskončno ozki potencialni jami. Velja:

$$V(x) = -\lambda\delta(x)$$

Pričakujemo, da bomo (vsaj v limiti) dobili rezultat

$$\psi_0(x) = \sqrt{\kappa_0} e^{\kappa_0|x|}, \quad \kappa_0 = \frac{m\lambda}{\hbar^2}$$

Vemo: $V(-x) = V(x)$. Vemo, da bo valovna funkcija bodisi soda, bodisi liha, zato jo v obeh primerih izračunajmo.

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - \lambda\delta(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} \lambda\delta(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

Na obeh straneh integriramo preko nekega intervala $[-a, a]$ in nato limitiramo $a \rightarrow 0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dx} \psi(x) \Big|_{-a}^a - \lambda\psi(x) \Big|_{x=0} = E \int_{-a}^a \psi(x) dx = 0$$

Stvar je enaka 0, dokler je funkcija omejena. Sledi:

$$\lim_{a \rightarrow 0} -\frac{\hbar^2}{2m} [\psi'(a) - \psi'(-a)] = \lambda\psi(0)$$

Torej odvod valovne funkcije v $x = 0$ ni zvezen. Za opis prvega odvoda valovne funkcije potrebujemo Heavyside funkcijo, kar pomeni, da funkcija sama ne more biti liha. Sledi, da je naš nastavek za valovno funkcijo:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{-\kappa x} & x < 0 \\ Ae^{\kappa x} & \text{sicer.} \end{cases}$$

Zdaj preverimo še pogoj $\lim_{x \rightarrow 0} [\psi'(x) - \psi'(-x)] = -2\kappa_0\psi(0)$

$$\lim_{x \rightarrow 0} \psi' = -A\kappa e^{-\kappa x} = -A\kappa$$

$$\lim_{x \rightarrow 0} \psi' = A\kappa e^{\kappa x} = A\kappa$$

$$\lim_{x \rightarrow 0} [\psi'(x) - \psi'(-x)] = -2\kappa = -2\kappa_0$$

Sledi $\kappa = \kappa_0$

Naloga: Za neki števili $a, b \in \mathbb{R}$, $b > a$ imamo potencial oblike

$$V(x) = \begin{cases} V_1 & x < a \\ V_2 & x > b \\ V_3(x) & \text{sicer} \end{cases}$$

Vemo, da je lahko $V_3(x) > E$, toprej obstaja verjetnost, da delec uide iz vezanega stanja. Zanima nas, kakšna ta verjetnost je.

Gostota verjetnostnega toka:

$$j(x) = \frac{\hbar}{2mi} [\psi^*(z)\psi'(x) - \psi(x)\psi'^*(x)]$$

Vemo, da je na območjih 1 in 2 valovna funkcija enaka:

$$\psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{V_1}} [A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}]$$

$$\psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{V_2}} [A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}]$$

Pri čemer je $k = \sqrt{\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}}$. Ko to vstavimo v enačbo za verjetnostni tok, dobimo:

$$j_1(x) = |A_1|^2 - |B_1|^2$$

$$j_2(x) = |B_2|^2 - |A_2|^2$$

Kaj lahko povemo o območju 3? Potenciala ne poznamo, pričakujemo pa, da lahko zanj zapišemo valovno funkcijo, ki bo linearna kombinacija dveh neodvisnih rešitev (matematiki pravijo, da to smemo).

$$\psi_3(x) = C\varphi(x) + D\chi(x)$$

Imamo tudi robne pogoje (kajti pričakujemo, da bo naša valovna funkcija zvezna in zvezno odvedljiva).

$$\psi_1(a) = \psi_3(a)$$

$$\psi'_1(a) = \psi'_3(a)$$

$$\psi_2(b) = \psi_3(b)$$

$$\psi'_2(b) = \psi'_3(b)$$

V igri imamo šet konstant (A_1, B_1, A_2, B_2, C, D), pri čemer konstanti A_1 in A_2 obravnavamo kot že vnaprej znani. Vemo, da lahko tako izrazimo C in D , da dobimo le enačbi za B_1 in B_2 . Dobili bomo sistem

$$\begin{bmatrix} B_1 \\ B_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r & t' \\ t & r' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \end{bmatrix} \equiv S \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \end{bmatrix}$$

Matriki S rečemo sipalna matrika. Je kompleksna in njenih koeficientov zaenkrat ne bomo računali (ne zdaj, temveč naslednjič). Vemo pa:

$$j_1(x) = 1 - |r|^2$$

$$j_2(x) = |t|^2$$

Količini $R = |r|^2$ pravimo represivnost (ali odbojnost), $T = |t|^2$ pa transmitivnost (ali prepustnost). Pričakujemo, da bo njuna vsota enaka 1 (v relativistični kvantni mehaniki to ni nujno res - delci se lahko anihilirajo ali zlijejo ali kaj podobnega, s takimi primeri se ne bomo ukvarjali). Seštejmo celoten tok, ki potuje prosti sipalcu in stran od sipalca:

$$\begin{array}{ll} \text{Proti sipalcu:} & |A_1|^2 + |A_2|^2 \\ \text{Stran od sipalca:} & |B_1|^2 + |B_2|^2 \end{array}$$

$$|A_1|^2 + |A_2|^2 = (A_1^*, A_2^*) \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} = A^H A$$

Če se verjetnost nikjer ne izgublja (kar bi veljalo v relativističnih primerih, mi pa to ignoriramo), velja:

$$A^H A = B^H B$$

$$A^H A = (SA)^H (SA)$$

$$A^H A = A^H (S^H S) A$$

Sledi, da je $S^H S = I$ oziroma je S unitarna.

Če je Hamiltonian realen:

$$\begin{aligned} \psi_1^*(x) &= \frac{1}{\sqrt{V_1}} [A_1^* e^{-ik_1 x} + B_1^* e^{ik_1 x}] \\ \psi_2^*(x) &= \frac{1}{\sqrt{V_2}} [B_2^* e^{-ik_2 x} + A_2^* e^{ik_2 x}] \end{aligned}$$

Spet je $A^* = SB^*$ oziroma $S^T A^* = B^*$. Sledi: $S^T = S$, torej $t' = t$. Ponuja se vprašanje, ali Hamiltonian kdaj ni realen? Da, in sicer v primeru magnetnega polja. Iz klasične mehanike se spomnimo:

$$H = \frac{(\vec{p} - e\vec{A})^2}{2m} + V(\vec{r})$$

Pri prehodu v kvantno mehaniko vektor \vec{A} ostane realen, vektor \vec{p} pa postane $i\hbar\nabla$. Tako da realnosti Hamiltoniana ne moremo kar tako predpostaviti.

Mi bomo obravnavali primer, ko je realen, in hkrati poseben primer, ko je potencial soda funkcija. To pomeni $k_1 = k_2 = k$ in $V_1 = V_2 = V$. Izrazimo $\psi(-x)$:

$$\psi_1(-x) = \frac{1}{\sqrt{V}} = B_2 e^{-ikx} + A_2 e^{ikx}$$

$$\psi_2(-x) = \frac{1}{\sqrt{V}} = B_1 e^{-ikx} + A_1 e^{ikx}$$

Zapišimo enačbo v matrični obliki:

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_2 \\ B_1 \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} A_2 \\ A_1 \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix}$$

Novo matriko označimo s σ_x .

$$B = \sigma_x S \sigma_x A$$

$$\sigma_x S \sigma_x = \begin{pmatrix} r' & t \\ t' & r \end{pmatrix}$$

Sledi, da je $r' = r$ in $t' = t$.