Egyszerű kvantummechanikai rendszerek

1. Potenciál gödör

Keressük meg a

$$V(x) = \begin{cases} 0 & |\, x \,| \geq a \\ -V_0 & |\, x \,| < a \end{cases}$$

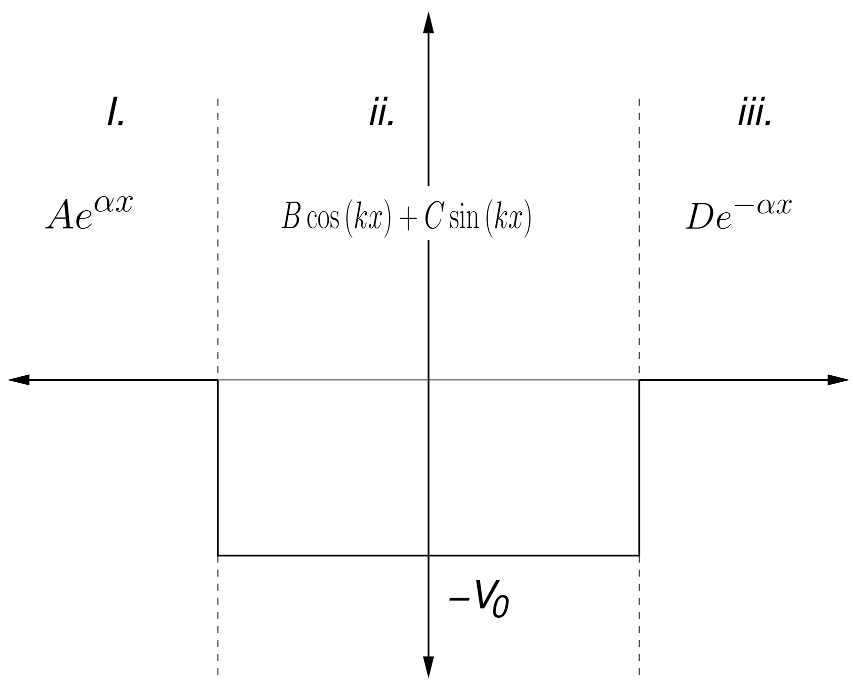
potenciál ($a > 0$, $V_0 > 0$) kötött állapotait ($-V_0 < E < 0$)! Diszkutáljuk a megoldások paritását valamint a végtelen mély gödör határesetet!

Megoldás:

Osszuk fel teret három tartományra az ábrának megfelelően. Az első és harmadik tartományban az időfüggetlen Schrödinger egyenlet alakja a következőlesz:

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

Csak akkor kaphatunk lecsengő megoldásokat, azaz normálható hullámfüggvényt, ha a sajátenergia negatív.



Az I. tartományban a hullámfüggvény $\varphi(x) = Ae^{\alpha x}$, a III. tartományban $\varphi(x) = De^{-\alpha x}$, ahol

$$\alpha = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}.$$

A II. tartományban az időfüggetlen Schrödinger egyenletet akövetkezőképpen lehet felírni:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^\varphi}{dx^2} = (E + V_0)\varphi(x)$$

A megoldások alakja

$$\varphi(x) = B\cos(kx) + C\sin(kx)\,, \quad \text{ahol} \;\; k = \sqrt{\frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2}}\,.$$

α és k között egyszerű összefüggés áll fenn:

$$\alpha^2 + k^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}\,. \tag{1}$$

A tartományok határain a hullámfüggvényeknek és azok deriváltjainak folytonosnak kell lenniük:

I/II tartomány határa

$$\begin{aligned} Ae^{-\alpha a} &= B\cos(ka) - C\sin(ka) \\ \alpha Ae^{-\alpha a} &= kB\sin(ka) + kC\cos(ka) \end{aligned}$$

II/III tartomány határa

$$\begin{aligned} De^{-\alpha a} &= B\cos(ka) + C\sin(ka) \\ -\alpha De^{-\alpha a} &= -kB\sin(ka) + kC\cos(ka) \end{aligned}$$

Adjuk össze és vonjuk ki egymásból az egymás melletti egyenleteket:

$$(A + D)e^{-\alpha a} = 2B\cos(ka) \tag{2}$$
$$\alpha(A + D)e^{-\alpha a} = 2kB\sin(ka) \tag{3}$$
$$(A - D)e^{-\alpha a} = -2C\sin(ka) \tag{4}$$
$$\alpha(A - D)e^{-\alpha a} = 2kC\cos(ka) \tag{5}$$

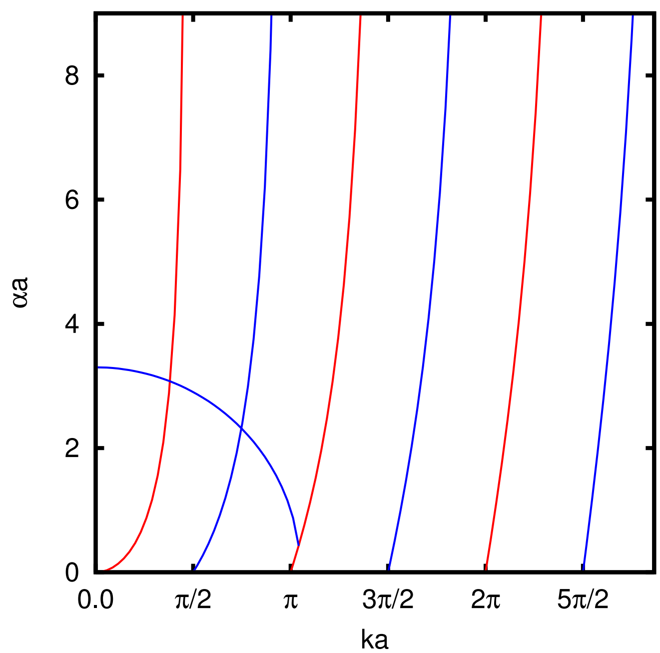
Az amplitúdókat eltüntethetjük, ha elosztjuk egymással az egyenleteket:

$$\alpha = k\,\mathrm{tg}(ka) \tag{6}$$
$$\alpha = -k\,\mathrm{ctg}(ka) \tag{7}$$

A 1. számú ábráról leolvasható, hogy a 6 és 7 egyenletek nem elégíthetőek ki egyszerre, viszont a 2-5 egyenleteknek teljesülnie kell. Bontsuk két részre a lehetséges megoldásokat: ha a 6 teljesül akkor a 4 és 5 számú egyenletek csak akkor elégülhetnek ki, ha $A = D$ és $C = 0$. Ha a másik, 7 számú egyenlet teljesül, akkor $A = -D$ és $B = 0$. Vizsgáljuk meg a két különböző típusú megoldások szimmetria tulajdonságait:

a.)

$$\alpha a = ka\,\mathrm{tg}(ka)\,, \quad A = D \text{ és } C = 0\,.$$



1. ábra. Az $ka\text{tg}(ka)$ és$-ka\text{ctg}(ka)$ függvények, valamint a 1. számú egyenlet által adott kör.

$$\varphi(x) = \begin{cases} Ae^{\alpha x} & \text{ha} x \leq -a \\ B\cos(kx) & \text{ha} - a \geq x \geq a \\ Ae^{-\alpha x} & \text{ha} x \geq a \end{cases}$$

Az ebbe az osztályba tartozó hullámfüggvények párosak lesznek. Az energiát a 1. számú ábráról olvashatjuk le az 1 egyenlet által meghatározott kör és a $ka\,\text{tg}(ka)$ függvény metszéspontjaiban.

b.)

$$\alpha a = -ka \operatorname{ctg}(ka)\ , \quad A = -D \text{ és } B = 0\,.$$

$$\varphi(x) = \begin{cases} Ae^{\alpha x} & \text{ha} x \leq -a \\ C \sin{(kx)} & \text{ha} - a \geq x \geq a \\ -Ae^{-\alpha x} & \text{ha} x \geq a \end{cases}$$

Az ebbe az osztályba tartozó hullámfüggvények páratlanok lesznek. Az energiát a 1. számú ábráról olvashatjuk le az 1 egyenlet által meghatározott kör és a $-ka \operatorname{ctg}(ka)$ függvény metszéspontjaiban.

A 1. ábráról mleolvashatjuk a megoldások számát is:

$$n = \frac{2a}{\pi}\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} + 1\ .$$

Megjegyzés: A potenciál és a Hamilton operátor invariáns a tükrözéssel szemben. Ebből következik, hogy a tükrözés operátorának és a Hamilton operátornak közös sajátfüggvény rendszere van. A tükrözés operátorának a sajátértékei 1 éa -1 lehetnek, vagyis az időfüggetlen Schrödinger egyenlet megoldási is vagy nem váltanak előjelet vagy előjelet váltanak a tükrözés hatására.

Végtelen mély potenciál gödör határesete: Ha $V_0 \to \infty$, akkor az 1. ábrán a tangens és minusz kotangens függvények függőleges vonalakká válnak. A kör sugara tart a végtelenhez, vagyis megfelelő magasságban vízszintesen metszi a tangens, minusz kotangens függvényeket. A metszéspontok nyivánvalóan a $ka = n\pi/2$ értékeknél lesznek, vagyis $k_n = n\frac{\pi}{2a}$.

Dirac-delta potenciál: Tartsunk a potenciál $2a$ szélességével nullához úgy, hogy a potenciál magasságának és a szélességének a szorzata maradjon állandó:
$2V_0 a = \gamma$. Vizsgáljuk, hogy hogyan viselkedik a ka szorzat:

$$ka = a\sqrt{\frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2}} \overset{a\to 0}{\approx} \sqrt{\frac{am\gamma}{\hbar^2}}\,. \tag{8}$$

Tehát a ka szorzat is tart nullához. Az 1 ábráról leolvashatjuk, hogy csak egy metszéspontunk lesz, vagyis csak egy kötött állapotot kapunk. Fejtsük sorba a tangens függvényt a 6. számú egyenletben:

$$\alpha a = (ka)^2 = \frac{am\gamma}{\hbar^2}\,,$$

tehát $\alpha = \frac{m\gamma}{\hbar^2}$, amely már független a potenciál gödör szélességétől.

2. Vonzó Dirac delta potenciál

Egydimenziós Dirac–delta potenciál esetén milyen határfeltétel szabható ki a hullámfüggvény deriváltjára? Határozzuk meg egy vonzó Dirac–delta potenciál kötött állapotának energiáját!

Megoldás:

Legyen az időfüggetlen Schrődinger egyenletnek a következő alakja:

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

Integráljuk az egyenlet minkét oldalát egy kicsiny $-\varepsilon$ értéktől ε-ig:

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2} - \gamma\delta(x)\varphi\right)dx = \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} E\varphi(x)dx \ .$$

Feltételezhetjük, hogy a sajátenergia véges, ezért ha az ε mennyiségekkel tartunk nullához, akkor a jobb oldal eltünik:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d\varphi(+0)}{dx} - \frac{d\varphi(-x)}{dx}\right) = \gamma\varphi(0) \ ,$$

tehát a hullámfüggvény deriváltjának a Dirac delta helyén ugrása van:

$$\frac{d\varphi(+0)}{dx} - \frac{d\varphi(-0)}{dx} = -\frac{2m\gamma}{\hbar^2}\varphi(0) \ . \tag{9}$$

A Dirac delta jobb- és baloldalán lecsengő megoldásoknak kell lennniük:

$$\varphi(x) = \begin{cases} Ae^{\alpha x} & \text{ha} x \leq 0 \\ Ae^{-\alpha x} & \text{ha} x \geq 0 \end{cases}$$

Használjuk ki a hullámfüggvény deriváljaira vonatkozó 9 feltételt:

$$-A\alpha - A\alpha = -\frac{2m\gamma}{\hbar^2}A \ ,$$

ahonnan $\alpha = \frac{m\gamma}{\hbar^2}$ adódik, megegyezően az előző feladat utolsó pontjának a megoldásával.

3. Kontinuitási egyenlet

A kontinuitási egyenletet a kövtekező alakban írhatjuk fel:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathrm{div}\mathbf{j} = 0 \; . \tag{10}$$

Valószínűségi sűrűségként a hullámfüggvény négyzetét értelmezzük és próbáljuk meg előállítani az idő szerinti parciális deriváltját a Schrödinger egyenlet segítségével:

$$i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V\psi \tag{11}$$

$$-i\hbar\frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi^* + V\psi^* \; , \tag{12}$$

ahol a második egyenlet az első komplex konjugáltjából adódik. Szorozzuk be a két egyenletet ψ-vel, illetve ψ^*-gal:

$$i\hbar\psi^*\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi^*\Delta\psi + V\psi^*\psi \tag{13}$$

$$-i\hbar\psi\frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi\Delta\psi^* + V\psi\psi^* \; . \tag{14}$$

Az előző két egyenletet kivonva egymásból sikerült becsempésznünk a sűrűség idő szerinti parciális deriváltját:

$$i\hbar\frac{\partial \psi^*\psi}{\partial t} = i\hbar\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\psi^*\Delta\psi - \psi\Delta\psi^*\right) \; . \tag{15}$$

A baloldalon, tehát, megjelent a sűrűség idő szerinti parciális deriváltja, a baloldalon pedig a valószínűségi áramsűrűség divergenciájának kellene lennie. Vizsgáljuk meg a következő kifejezést:

$$\mathrm{div}\left(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*\right) = \sum_{i=1}^{3}\partial_i\left(\psi^*\partial_i\psi - \psi\partial_i\psi^*\right) = \sum_{i=1}^{3}\partial_i\psi^*\partial_i\psi + \psi^*\partial_i^2\psi - \partial_i\psi\partial_i\psi^* - \psi\partial_i^2\psi^* \tag{16}$$

Az utolsó tag éppen az 15. számú egyenlet bal oldalán szereplő taggal egyezik meg:

$$\sum_{i=1}^{3}\psi^*\partial_i^2\psi - \psi\partial_i^2\psi^* = \psi^*\Delta\psi - \psi\Delta\psi^* \tag{17}$$

Felhasználva a 15. és 17 egyenleteket a következő egyenletet kapjuk:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\hbar}{im} \mathrm{div} \left(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^* \right) = 0 \ . \tag{18}$$

Tehát, ha a hullámfüggvény abszolutérték négyzetét valószínűségi sűrűségként értelmezzük, akkor a valószínűségi áramsűrűségre a kontinuitási egyenletből a

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{im} \left(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^* \right) \tag{19}$$

kifejezés adódik.