

ΚΒΑΝΤΟ II

1^ο ΜΑΘΗΜΑ 22/2/12 (Α.Φ. Τεργίης)

Κβαντομηχανική ενός σωματιδίου σε δύο και τρεις διαστάσεις.

Σωματίο μάζας m σε δυοσθενικό $V(x, y)$, όπου $V(x, y) = V_x(x) + V_y(y)$

Εξίσωση Schrödinger $\left(\frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m}\right) \Psi(x, y) + V(x, y) \Psi(x, y) = E \Psi(x, y)$

$$p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, p_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + V_x(x) \Psi + V_y(y) \Psi = E \Psi \quad (1)$$

Μεθοδολογία χωρισμένων μεταβλητών $\Psi(x, y) = X(x) Y(y) \quad (*)$

Η (1) παίρνει την μορφή (με $X'' = d^2 X/dx^2$, $Y'' = d^2 Y/dy^2$)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} X'' - \frac{\hbar^2}{2m} Y'' + V_x(x) X + V_y(y) Y = E X(x) Y(y) \rightarrow \text{διαίρει με } X \cdot Y$$

$$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{X''}{X} + V_x(x)}_{\text{συνάρτηση του } x} = E - \underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{Y''}{Y} + V_y(y)\right)}_{\text{συνάρτηση του } y}$$

Η ισότητα γίνεται να ισχύει μόνο όταν κάθε στέλος της είναι ίσο με μια σταθερά

Μεθοδολογία ανάλογη αυτής που εφαρμόσαμε για να λύσουμε την χρονοεξαρτημένη εξ. Schrödinger, εκεί είχαμε x, t -

Έτσι παίρνουμε τελικά

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{X''}{X} + V_x(x) = E_x \quad (1a) \text{ και } -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{Y''}{Y} + V_y(y) = E_y \quad (1b) \Rightarrow E_x = E - E_y \Rightarrow \boxed{E = E_x + E_y} \quad (2)$$

Διχάζουμε δύο μονοδιαστάτες χρονοεξαρτητές Schrödinger εξισ. οι οποίες λύνονται ανεξάρτητα με λύσεις των 1a & 1b και συνολική λύση την $(*)$

ΠΡΟΦΑΝΟΣ Η ΙΔΙΑ ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ ΕΦΑΡΜΟΖΕΤΑΙ ΚΑΙ ΓΙΑ ΤΡΙΔΙΑΣΤΑΤΟ

ΠΡΟΒΛΗΜΑ, ΑΝ $V(x, y, z) = V_x(x) + V_y(y) + V_z(z)$.

Η ολική ενέργεια είναι $E = E_x + E_y + E_z$ και $\Psi(x, y, z) = X(x) Y(y) Z(z)$

Εφαρμογή 1 Ελεύθερο σωματίο ($V=0$)

$$2D \text{ (δύο διαστάσεων)} \quad V(x, y) = 0 \rightarrow V(x, y) = 0 + 0 = V_x(x) + V_y(y)$$

$$(1a) \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{X''}{X} = E_x \rightarrow X'' + \frac{2m}{\hbar^2} E_x X = 0 \rightarrow \left(k_x^2 = \frac{2m E_x}{\hbar^2}\right)$$

$$X'' + k_x^2 X = 0 \rightarrow X(x) = e^{ik_x x} \text{ με } E_x = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} \quad \parallel$$

$$\text{με } E_y = \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m}$$

$$\text{ανάλογα από } (1b) \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{Y''}{Y} = E_y \rightarrow Y'' + \frac{2m}{\hbar^2} E_y Y = 0 \rightarrow Y'' + k_y^2 Y = 0 \rightarrow Y(y) = e^{ik_y y}$$

Η ολική κυματοσυνάρτηση είναι $\Psi(x, y) = e^{i(k_x x + k_y y)}$

$$\text{με } E = E_x + E_y = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2)$$

Η $\Psi(x, y)$ είναι ιδιοσυνάρτηση της ορμής, δηλαδή

$$\hat{p} \Psi(x, y) = p_x \hat{x} + p_y \hat{y} = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \hat{x} - i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \hat{y}\right) e^{i(k_x x + k_y y)} = \hbar(k_x \hat{x} + k_y \hat{y}) \Psi(x, y)$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{\vec{p} = \hbar \vec{k}}$

3D (τρεις διαστάσεις) $V(x, y, z) = 0$

Με ανάλογη μεθοδολογία βρίσκουμε

$$\Psi(x, y, z) = e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} = e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}}$$

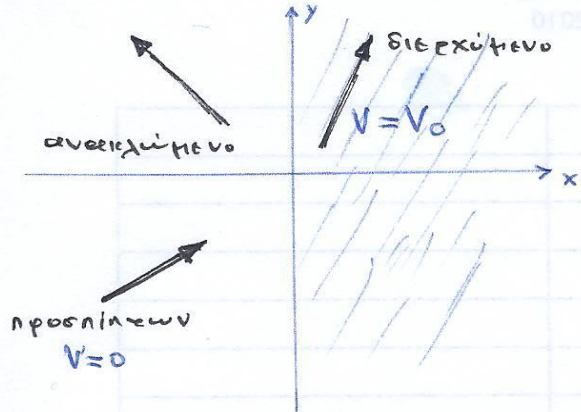
$$\text{και } E = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$$

όπου $k \in (-\infty, +\infty)$ με $i = x, y, z$

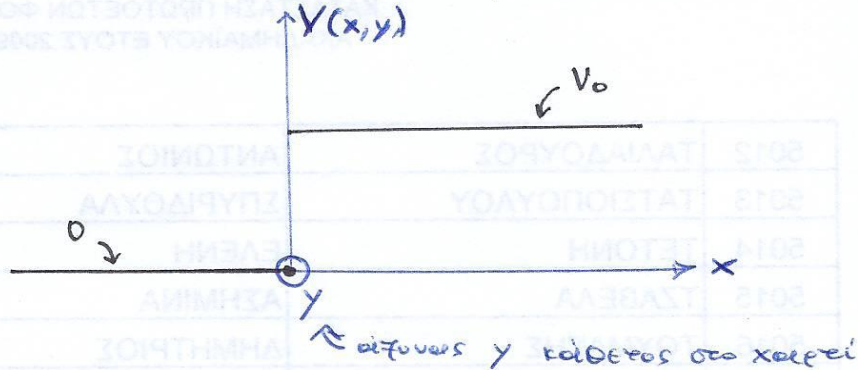
Εφαρμογή 2. Σκέδαση σωματιδίου μήκους λ από βαθμίδα δυναμικού

$$V(x,y) = V_0 \Theta(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & x > 0 \end{cases}$$

Σχηματική αναπαράσταση της σκέδασης στον πραγματικό χώρο (βιδοσκοπική σκέδαση) *



Γραφική αναπαράσταση δυναμική ενέργειας

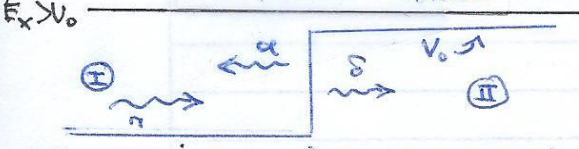


Από την μεθοδολογία για δυναμικά της μορφής $U(x,y) = V_x(x) + V_y(y) = V_0 \Theta(x) + 0$, έχουμε

$$-\frac{\hbar^2}{2m} X'' + V(x)X = E_x X \quad \text{και} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} Y'' = E_y Y \quad \text{με} \quad E = E_x + E_y, \quad \Psi(x,y) = X(x)Y(y)$$

μονοδιάστατη σκέδαση από βαθμίδα δυναμικού

ελεύθερο σωματίο με λύση $Y(y) = e^{ik_y y}$ και $E_y = \frac{\hbar^2}{2m} k_y^2$



με $k_x^2 = \frac{2mE_x}{\hbar^2}$ και $k_x'^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E_x - V_0) > 0$ για $E_x > V_0$

$\Psi_I(x) = e^{ik_x x} + A e^{-ik_x x}$ $\Psi_{II}(x) = B e^{ik_x' x}$
 προσπίπτων \swarrow \nwarrow \nearrow \searrow
 ανακλώμενο \nwarrow \swarrow \nearrow \searrow
 μετακλώμενο

Από συνολικές συνθήκες στο $x=0$:

$\Psi_I(0) = \Psi_{II}(0) \rightarrow 1 + A = B$
 $\Psi_I'(0) = \Psi_{II}'(0) \rightarrow ik_x(1 - A) = ik_x' B$

$$B = \frac{2k_x}{k_x + k_x'} \quad A = \frac{k_x - k_x'}{k_x + k_x'}$$

Συνολική διδασκαλία κυματοσυνάρτησης

$$\Psi(x,y) = \begin{cases} e^{i(k_x x + k_y y)} + \frac{k_x - k_x'}{k_x + k_x'} e^{i(-k_x x + k_y y)} & \text{I} \\ \frac{2k_x}{k_x + k_x'} e^{i(k_x x + k_y y)} & \text{II} \end{cases}$$

με $E = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2) = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x'^2 + k_y^2) + V_0$

Ουσιαστικά έχουμε μονοδιάστατη σκέδαση,

$$R = \frac{I_R}{I_I} = \frac{\frac{\hbar^2 k_x}{m} |A|^2}{\frac{\hbar^2 k_x}{m}} = \left| \frac{k_x - k_x'}{k_x + k_x'} \right|^2 \quad \text{και} \quad T = \frac{I_{II}}{I_I} = \frac{\frac{\hbar^2 k_x'}{m} |B|^2}{\frac{\hbar^2 k_x}{m}} = \frac{4k_x k_x'}{(k_x + k_x')^2}$$

Μπορούμε να γράψουμε τις παραπάνω εκφράσεις συναρτήσει της γωνίας και της ενέργειας του προσπίπτοντος κύματος.

$\tan \theta = \frac{k_y}{k_x}$ και $E = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2) = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \rightarrow k_x = k \cos \theta$
 Έτσι βρίσκουμε $R(E, \theta) = \left| \frac{\sqrt{E} \cos \theta - \sqrt{E \cos^2 \theta - V_0}}{\sqrt{E} \cos \theta + \sqrt{E \cos^2 \theta - V_0}} \right|^2$

Με ανάλογη επιχειρήματα, όπως αυτά που χρησιμοποιήσαμε στην μονοδιάστατη σκέδαση (ΕΒΑΝΤΟ I), βρίσκουμε ότι για $E_x < V_0$ έχουμε $R=1$ ($T=0$).

* Κλασική περιγραφή, αντιστοιχεί σε κίνηση σε δύο διαστάσεις μήκους με ταχύτητες u_x και u_y (γωνία $\tan \theta = u_y/u_x$) και άσκηση $F_x = -\partial V / \partial x = -\infty$ με αποτέλεσμα μικρότερη ταχύτητα u_x' και νέα διεύθυνση κίνησης ($\tan \theta' = u_y'/u_x'$)
 Από Α.Δ.Ε. $\frac{1}{2} m u_x^2 + \frac{1}{2} m u_y^2 = \frac{1}{2} m u_x'^2 + \frac{1}{2} m u_y'^2 + V_0$

ΑΣΚΗΣΗ 1

Στη γενική περίπτωση (3D) το ρεύμα πιθανότητας ορίζεται από την σχέση

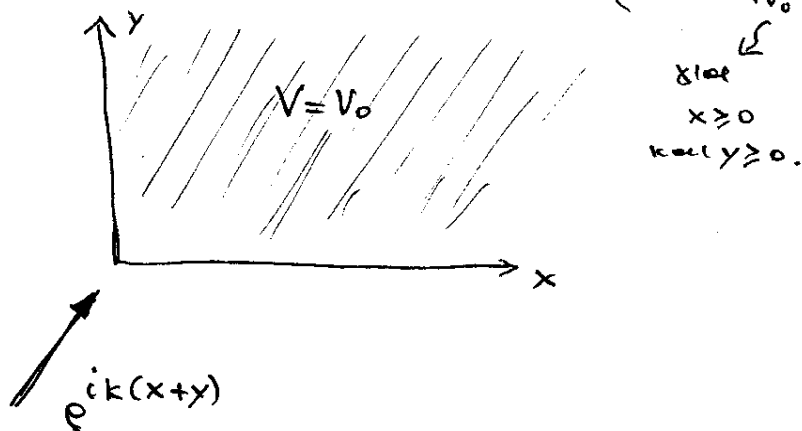
$$\vec{J} = \frac{\hbar}{2mi} [\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*] \quad \text{Συντελεστής της } \vec{J} = \frac{\hbar}{2mi} \left[\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right].$$

(α) Για την μονοδιάστατη περίπτωση να ληφθεί ως $I_0, I_{\text{α}}, I_{\text{β}}, I_{\text{I}}, I_{\text{II}}$ όπου η προσημείωση, α: αυξανόμενο, β: διερχόμενο, I ($x < 0$), II ($x > 0$)

(β) Να γίνει το ίδιο για την δι-διάστατη περίπτωση. ~~Συγκρίνεται με την περίπτωση 1D~~
~~Συγκρίνεται την \vec{J}_{I} με το $\vec{J}_{\text{α}}$ και $\vec{J}_{\text{β}}$.~~

ΑΣΚΗΣΗ 2

Να μελετηθεί η σκέδαση για την παρακάτω περίπτωση $V(x,y) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & x \geq 0 \end{cases}$



Χημική: $k_x = k_y = k$ ($\theta = 45^\circ$)

και $V(x,y) = V_x(x) + V_y(y)$ με $V_x(x) = \begin{cases} V_0 & x \geq 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases}$

$$V_y(y) = \begin{cases} V_0 & y \geq 0 \\ 0 & y < 0 \end{cases}$$

ή ισοδύναμα $V(x,y) = \underbrace{V_0 \Theta(x)}_{V_x} + \underbrace{V_0 \Theta(y)}_{V_y}$

ΑΣΚΗΣΗ 3

Να μελετηθεί η τριδιάστατη έκδοση της προηγούμενης άσκησης με ευχαίρα πρόσθεσης (k_x, k_y, k_z) .