Квантовая механика. Физический факультет, 3 курс, 6 семестр.

Занятие №7. ***Одномерное движение в поле кусочно-непрерывных потенциалов (продолжение). Уравнение Шредингера в импульсном представлении. Трансфер-матрица: вычисление коэффициента прозрачности, энергетический спектр периодических потенциалов.***

1. Оператор Гамильтона в импульсном представлении для одномерного движения частицы в стационарном внешнем поле будет иметь следующий вид

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} = \frac{p^2}{2m} + U\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right), \quad p_x \equiv p.$$

Таким образом, в импульсном представлении оператор кинетической энергии $\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}$ является оператором умножения, а оператор потенциальной энергии $\hat{U}$ является интегральным оператором с ядром $U\left(p, p'\right)$ равным

$$U\left(p, p'\right) = U\left(p - p'\right), \quad U\left(p - p'\right) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int U\left(x\right)e^{\left\{-\frac{i(p-p')x}{\hbar}\right\}}dx.$$

Следовательно, одномерное УШ в импульсном представлении имеет вид

$$\frac{p^2}{2m}\Phi\left(p\right) + \int\limits_{-\infty}^{\infty} U\left(p - p'\right)\Phi\left(p'\right)dp' = E\Phi\left(p\right),$$

где $C\left(p\right)$ - волновая функция в импульсном представлении.

<u>Задача 1.</u> Рассмотреть решение задачи об уровнях энергии $\left(E < 0\right)$ частицы в поле δ–ямы

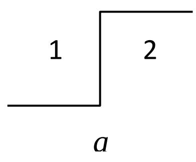
$$U(x) = -\alpha\delta(x).$$

в импульсном представлении.

2. *Трансфер-матрица*. Метод трансфер-матрицы удобно использовать для решения одномерных задач с кусочно-непрерывными потенциалами, если потенциальная энергия обладает трансляционной симметрией всюду, кроме конечной области на действительной оси.

2.1. Матрица связи локальных решений

Введем матрицу связи локальных решений, которая связывает решения стационарного уравнения Шредингера в двух смежных областях 1 и 2, если границе этих двух областей потенциал имеет особенность.



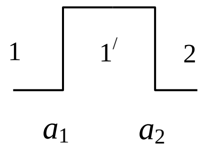
$$\psi_1 = A_1\varphi_1^{(1)} + B_1\varphi_2^{(1)};$$
$$\psi_2 = A_2\varphi_1^{(2)} + B_2\varphi_2^{(2)}.$$

Здесь 4 коэффициента связаны 2-мя условиями:

$$\psi_1(a) = \psi_2(a);$$
$$\psi_1'(a) = \psi_2'(a).$$

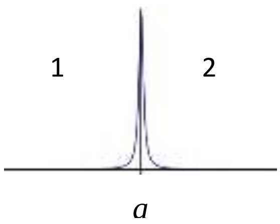
Эту связь можно записать в матричной форме $\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \hat{T}\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix}$, где $\hat{T} = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \end{pmatrix}$ – матрица связи двух локальных решений.

2.3 Трансфер-матрица



$$\psi_1 = A_1\varphi_1^{(1)} + B_1\varphi_2^{(1)};$$
$$\psi_{1'} = A_{1'}\tilde{\varphi}_1^{(1)} + B_{1'}\tilde{\varphi}_2^{(2)};$$
$$\psi_2 = A_2\varphi_1^{(1)} + B_2\varphi_2^{(1)};$$

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \hat{\hat{T}}_1\begin{pmatrix} A_{1'} \\ B_{1'} \end{pmatrix}; \quad \begin{pmatrix} A_{1'} \\ B_{1'} \end{pmatrix} = \hat{\hat{T}}_{1'}\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix}; \quad \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \hat{\hat{T}}_1 \cdot \hat{\hat{T}}_{1'}\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \hat{T}\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix}; \quad \hat{T} = \hat{\hat{T}}_1 \cdot \hat{\hat{T}}_{1'}.$$



$$\psi_2(a+0) = \psi_1(a-0);$$
$$\psi_2'(a+0) - \psi_1'(a-0) = \frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi(a).$$

Локальные решения выбирают так, чтобы $Det\hat{T} = 1$.

2.4. Коэффициент прозрачности барьера.

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_{11}A_2 & t_{12}B_2 \\ t_{21}A_2 & t_{22}B_2 \end{pmatrix};$$

Если положить $B_2 = 0$ (нет потока частиц справа), то

$$D = \frac{\left|\vec{j}_{прош.}\right|}{\left|\vec{j}_{падающ.}\right|} = \frac{|A_2|^2}{|A_1|^2} = \frac{1}{|t_{11}|^2}.$$

Задача 2. Найти коэффициент прозрачности дельта-барьера $U(x) = \alpha\delta(x)$ методом трансфер-матрицы.

2.5. Периодический потенциал из N одинаковых особенностей с периодическими граничными условиями.

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \hat{T}^N \begin{pmatrix} A_{N+1} \\ B_{N+1} \end{pmatrix}, \quad A_{N+1} = A_1, B_{N+1} = B_1, \Rightarrow, \quad \hat{T}^N = \begin{pmatrix} \lambda_1^N & 0 \\ 0 & \lambda_2^N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

$$\begin{pmatrix} t_{11} - \lambda & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} - \lambda \end{pmatrix} = 0, \quad \lambda^2 - Tr\hat{T} \cdot \lambda + Det\hat{T} = 0,$$

$$Tr\hat{T} = t_{11} + t_{22} = \lambda_1 + \lambda_2;$$

$$Det\hat{T} = 1, \Rightarrow, \lambda_1 \cdot \lambda_2 = 1, \quad \lambda_1 = \lambda = \exp(i\nu), \lambda_1 = \lambda^* = \exp(-i\nu),$$

$$\lambda^N = \exp(i\nu N) = 1, \quad \nu = \frac{2\pi l}{N}.$$

Дисперсионное уравнение

$$\boxed{Tr\hat{T} = 2\cos\nu}$$

Задача 3. Дираковская потенциальная «гребенка»: $U(x) = \sum_{n=1}^{N} \alpha\delta(x - na)$.

(ГКК, 1992 № 2.53)

3. Самостоятельная работа (~ 20 мин) – **20 баллов.**

Домашнее задание 2.48 (с помощью трансфер-матрицы), 2.50 (с помощью трансфер-матрицы).

ГКК - Галицкий Е.М., Карнаков Б.М., Коган В.И. Задачи по квантовой механике, 1981; Гр. - Гречко Л.Г., Сугаков В.И., Томасевич О.Ф., Федорченко А.М. Сборник задач по теоретической физике, 1984