Квантова механіка. Фізичний факультет, 3 курс, 6 семестр.

Заняття №7. ***Одномірний рух у полі частково-неперервних потенціалів (продовження). Рівняння Шрьодингера в імпульсному зображенні. Трансфер-матриця: обчислення коефіцієнта прозорості, енергетичний спектр періодичних потенціалів.***

1. Оператор Гамільтона в імпульсному зображенні для одномірного руху частинок в стаціонарному зовнішньому полі матиме вигляд

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

Таким чином, в імпульсному зображенні оператор кінетичної енергії $\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}$ є оператором множення, а оператор потенціальної енергії $\hat{U}$ є інтегральним оператором з ядром $U\left(p, p'\right)$, яке дорівнює

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

Таким чином, одномірне РШ в імпульсному зображенні має вигляд

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

де $C\left(p\right)$ - хвильова функція в імпульсному зображенні.

__**Задача 1.**__ Розглянути розв’язок задачі про рівні енергії $\left(E < 0\right)$ частинки в полі δ–ями

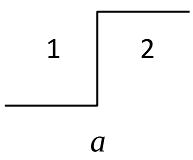
$$U(x) = -\alpha\delta(x).$$

в імпульсному представленні.

2. *Трансфер-матриця*. Метод трансфер-матриці зручно використовувати для розв’язування одномірних задач з частково-неперервними потенціалами, якщо потенційна енергія має трансляційну симетрію усюди, крім скінченної області на дійсній осі.

2.1. Матриця зв’язку локальних розв’язків

Введемо матрицю зв’язку локальних розв’язків, яка зв’язує розв’язки стаціонарного рівняння Шредінгера в двох суміжних областях 1 и 2, якщо границі цих двох областей потенціал має особливість.



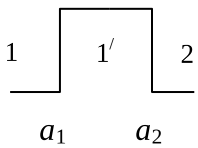
$$\psi_1 = A_1\varphi_1^{(1)} + B_1\varphi_2^{(1)};$$
$$\psi_2 = A_2\varphi_1^{(2)} + B_2\varphi_2^{(2)}.$$

Тут 4 коефіцієнти зв'язані 2-ма умовами:

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

Цей зв'язок можна записати в матричній формі $\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \hat{T}\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix}$, де $\hat{T} = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \end{pmatrix}$ – матриця зв'язку двох локальних розв'язків.

2.3 Трансфер-матриця



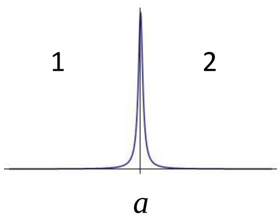
$$\psi_1 = A_1\varphi_1^{(1)} + B_1\varphi_2^{(1)};$$
$$\psi_{1'} = A_{1'}\tilde{\varphi}_1^{(1)} + B_{1'}\tilde{\varphi}_2^{(1)};$$
$$\psi_2 = A_2\varphi_1^{(2)} + B_2\varphi_2^{(2)};$$

Граничні умови для прямокутного бар'єру (прямокутної ями):

$$\psi_1(a_1) = \psi_{1'}(a_1); \quad \psi_1'(a_1) = \psi_{1'}'(a_1);$$
$$\psi_{1'}(a_2) = \psi_2(a_2); \quad \psi_{1'}'(a_2) = \psi_2'(a_2);$$

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

Граничні умови для дельта-потенціала $U(x) = \alpha\delta(x-a)$:



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

Локальні розв'язки вибираються таким чином, щоб $Det\hat{T} = 1$.

2.4. Коефіцієнт прозорості бар'єру.

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

Якщо $B_2 = 0$ (нема потоку частинок справа), то

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

<u>Задача 2.</u> Знайти коефіцієнт прозорості дельта-бар'єра $U(x) = \alpha\delta(x)$ методом трансфер-матриці.

2.5. Періодичний потенціал з N однакових особливостей з періодичними граничними умовами.

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

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

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

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

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

Дисперсійне рівняння

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

<u>Задача 3.</u> Потенційна «гребінка» Дірака: $U(x) = \sum_{n=1}^{N} \alpha\delta(x - na)$.

(ГКК, 1992 № 2.53)

3. Самостійна робота (~ 20 хв) – **<u>15 балів.</u>**

<u>Домашнє завдання</u> 2.48 (за допомогою трансфер-матриці), 2.50 (за допомогою трансфер-матриці).

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