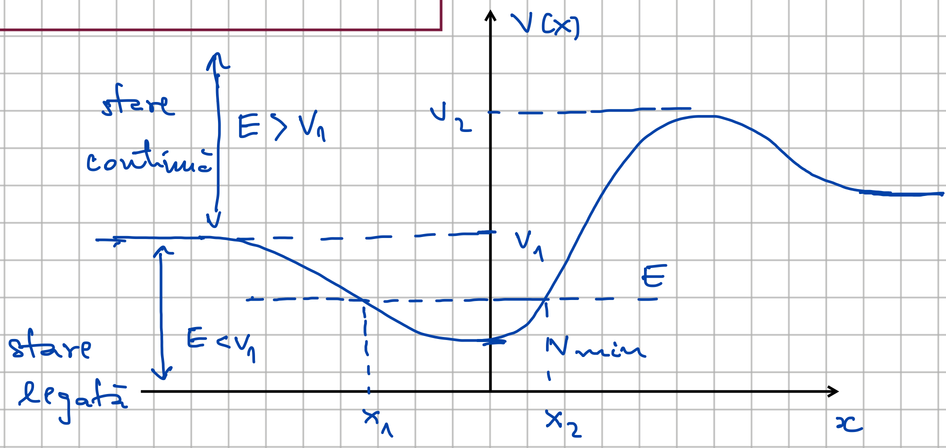
Curs 6

Probleme unidimensionale

- se dorește rezolvarea ec. Schrödinger, independentă de timp pentru o particulă într-o groapă de potențial $V(x)$. Particula se consideră ca având masa m.

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+V(x)\cdot\psi(x)=E\psi(x)}$$



- E - energia particulei

pentru $E < V_1$ - particula se găsește într-o stare legată

pentru $E > V_1$ - stare continuă.

$V_1 < E < V_2$ - particula se poate deplasa la $-\infty$

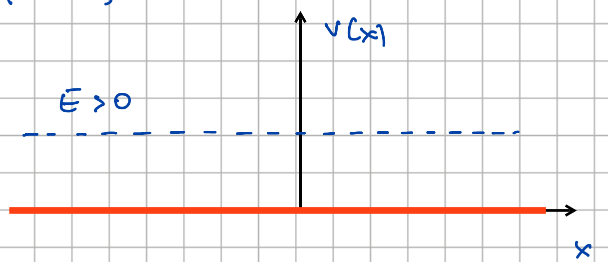
$E > V_2$ - particula se poate deplasa la $\pm\infty$.

În general într-o stare legată, energia este cuantificată, adică poate lua doar anumite valori, iar într-o stare continuă, energia poate lua orice valoare în general.

Particula liberă

- corespunde la cazul când potențialul $V(x) = 0$ pe axa Ox.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\psi''(x) = E\cdot\psi(x)\ \Big|\cdot\left(-\frac{2m}{\hbar^2}\right)$$



Considerăm doar cazul fizic corespunzător la $E > 0$.

$$\psi''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\cdot\psi(x) = 0.$$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \Rightarrow \boxed{k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}}$$

$$\psi''(x) + k^2 \cdot \psi(x) = 0.$$

Se caută soluții de forma $\psi(x) = e^{\lambda x}$: $\psi'(x) = \lambda e^{\lambda x}$

$\psi''(x) = \lambda^2 e^{\lambda x}$

$$\lambda^2 \cdot e^{\lambda x} + k^2 e^{\lambda x} = 0 \quad \Big| : e^{\lambda x}$$

$\boxed{\lambda^2 + k^2 = 0}$ - ecuația caracteristică

$$\lambda = \pm i k$$

$$\boxed{\psi_k(x) = A_+ \cdot e^{ikx} + A_- \cdot e^{-ikx}}$$

A_+, A_- sunt două constante.

$$\psi_k(x) = \psi_+(x) + \psi_-(x)$$

$\boxed{\psi_+(x) = A_+ \, e^{ikx}}$ - reprezintă o undă plană care se deplasează spre dreapta (spre $+\infty$)

$\boxed{\psi_-(x) = A_- \cdot e^{-ikx}}$ - reprezintă o undă plană care se deplasează spre stânga (spre $-\infty$).

$$|\psi_+(x)|^2 = \overbrace{A_+ \, e^{ikx}}^{\psi_+} \cdot \overbrace{A_+^* \cdot e^{-ikx}}^{\psi_+^*} = A_+ \cdot A_+^* = |A_+|^2.$$

$$|\psi_-(x)|^2 = |A_-|^2.$$

$$z = a + ib$$
$$z^* = a - ib$$
$$|z|^2 = z \cdot z^* = a^2 + b^2$$

Ptr o particulă liberă, funcția de undă nu poate fi normată.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_+^*(x) \cdot \psi_+(x) \, dx = |A_+|^2 \cdot \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx}_{} = |A_+|^2 \cdot \infty = \infty$$

Densitatea de curent de probabilitate:

$$j(x,t) = \frac{\hbar}{2mi} \cdot \left(\psi^*(x)\, \psi'(x) - \psi(x) \cdot \psi^{*\prime}(x) \right)$$

$$j_+(x,t) = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi_+^*(x)\cdot\psi_+'(x) - \psi_+(x)\cdot\psi_+^{*\prime}(x)\right).$$

$$\psi_+(x) = A_+ e^{ikx} \qquad \psi_+'(x) = ik A_+ e^{ikx}$$

$$\psi_+^*(x) = A_+^* e^{-ikx} \qquad \psi_+^{*\prime}(x) = -ik A_+^* e^{-ikx}$$

$$j_+(x,t) = \frac{\hbar}{2mi}\left(A_+^* \cancel{e^{-ikx}}\cdot(ik)\cdot A_+ \cancel{e^{ikx}} - A_+ \cancel{e^{ikx}}\cdot(-ik)\cdot A_+^* \cancel{e^{-ikx}}\right)$$

$$j_+(x,t) = \frac{2\cancel{i}k\hbar}{2m\cancel{i}}\cdot|A_+|^2 = \frac{\hbar\cdot k}{m}\cdot|A_+|^2.$$

$$\boxed{j_+(x,t) = \frac{\hbar\cdot k}{m}\cdot|A_+|^2}$$

$\hbar\cdot k$ - impulsul particulei

$\frac{\hbar\cdot k}{m}$ - viteza particulei

$j_+(x,t)$ - reprezintă curentul generat de o particulă care se mișcă spre $+\infty$.

$\rightsquigarrow +\infty$

$$j_-(x,t) = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi_-^*(x)\cdot\psi_-'(x) - \psi_-(x)\cdot\psi_-^{*\prime}(x)\right)$$

$$\psi_-(x) = A_-\cdot e^{-ikx} \qquad \psi_-'(x) = (-ik)A_- e^{-ikx}$$

$$\psi_-^*(x) = A_-^* e^{ikx} \qquad \psi_-^{*\prime}(x) = ik\cdot A_-^* e^{ikx}$$

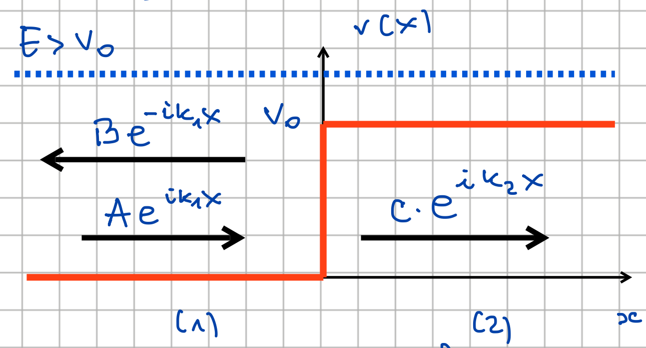
$$\boxed{j_-(x,t) = -\frac{\hbar k}{m}\cdot|A_-|^2}$$

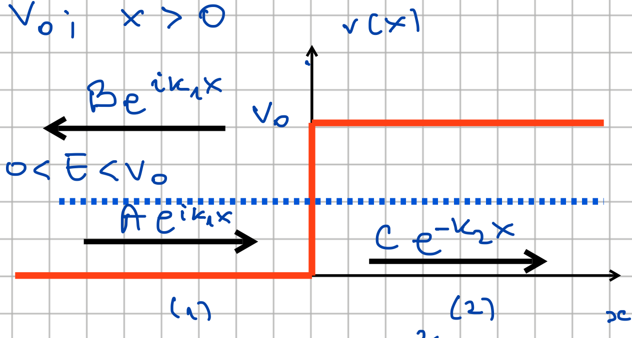
- semnul $(-)$ indică faptul că particula se mișcă spre $-\infty$

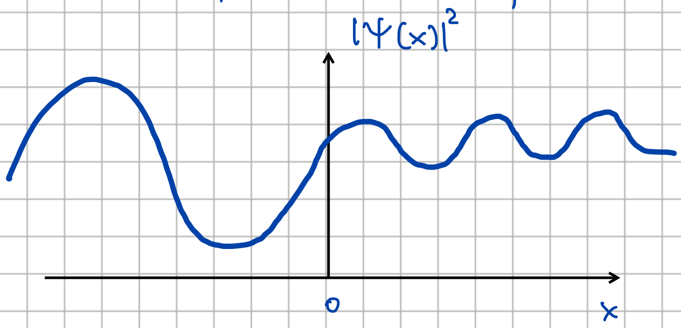
$-\infty \leftsquigarrow$

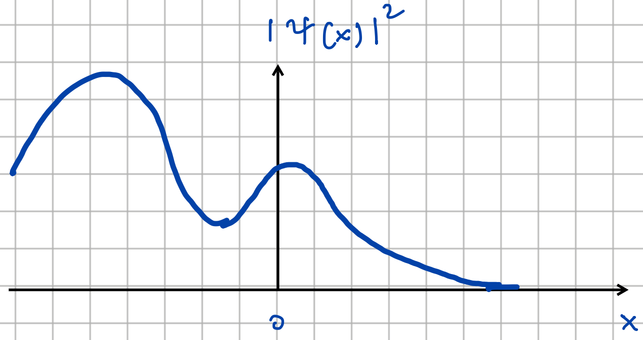
Potențialul treaptă

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









a) $\underline{\underline{E > V_0}}$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\psi''(x) + V(x)\cdot\psi(x) = E\cdot\psi(x)$$

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x); & x < 0 \\ \psi_2(x); & x > 0 \end{cases}$$

(1): $$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_1''(x) = E\psi_1(x) \quad \Big| \left(-\frac{2m}{\hbar^2}\right)$$

$$\psi_1''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_1(x) = 0; \qquad k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}; \quad k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$\psi_1''(x) + k_1^2\psi_1(x) = 0.$$

$$\boxed{\psi_1(x) = A\cdot e^{ik_1x} + B\, e^{-ik_1x}}; \quad x < 0.$$

unda incidentă   unda reflectată.

(2): $$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_2''(x) + V_0\cdot\psi_2(x) = E\psi_2(x); \quad \Big|\cdot\left(-\frac{2m}{\hbar^2}\right)$$

$$\psi_2''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)\cdot\psi_2(x) = 0.$$

$E > V_0$

$$k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)$$

$$\psi_2''(x) + k_2^2\,\psi_2(x) = 0.$$

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)}$$

$$\psi_2(x) = C\cdot e^{ik_2x} + D\,e^{-ik_2x} \quad ; \quad x > 0.$$

unda transmisă

unda reflectată în regiunea $x>0$ nu are semnificație fizică $\Rightarrow D = 0$.

$$\boxed{\psi_2(x) = C\cdot e^{ik_2x}} \quad x > 0.$$

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = A\cdot e^{ik_1x} + B\,e^{-ik_1x} & ; \ x<0 \\ \psi_2(x) = C\,e^{ik_2x} & ; \ x>0. \end{cases}$$

Pentru găsirea constantelor A, B și C impunem condițiile de continuitate și derivabilitate a fct de undă la frontieră.

$\boxed{\psi(x) \text{ - este o funcție continuă și derivabilă.}}$

$$\begin{cases} \psi_1(0) = \psi_2(0) \\ \psi_1'(0) = \psi_2'(0) \end{cases}$$

$$\psi'(x) = \begin{cases} \psi_1'(x) = ik_1 A\,e^{ik_1x} - ik_1 B\,e^{-ik_1x} & ; \ x<0 \\ \psi_2'(x) = ik_2\,C\,e^{ik_2x} & ; \ x>0. \end{cases}$$

$\psi_1(0) = \psi_2(0)$

$\psi_1'(0) = \psi_2'(0)$

$$\begin{cases} A + B = C \\ ik_1\cdot A - ik_1\cdot B = ik_2\cdot C \end{cases}$$

$$\begin{cases} A + B = C \\ k_1(A-B) = k_2\cdot C \end{cases}$$

$$\boxed{B = \frac{k_1-k_2}{k_1+k_2}\cdot A \qquad C = \frac{2k_1}{k_1+k_2}\cdot A}$$

A reprezintă amplitudinea undei incidente.

curentul incident generat de unda incidentă $A e^{ik_1 x}$

$$j_{incident} = \frac{\hbar \cdot k_1}{m} \cdot |A|^2.$$

curentul reflectat generat de unda reflectată $B e^{-ik_1 x}$

$$j_{reflectat} = -\frac{\hbar k_1}{m} \cdot |B|^2.$$

curentul transmis generat de unda transmisă $C \cdot e^{ik_2 x}$

$$j_{trans} = \frac{\hbar \cdot k_2}{m} \cdot |C|^2.$$

Coeficienții de reflexie și transmisie

$$R = \frac{|j_{reflectat}|}{|j_{incident}|} \qquad T = \frac{|j_{transmis}|}{|j_{incident}|}$$

$$R = \frac{\frac{\hbar \cdot k_1}{m} \cdot |B|^2}{\frac{\hbar k_1}{m} \cdot |A|^2} = \left|\frac{B}{A}\right|^2 ; \quad T = \frac{\frac{\hbar k_2}{m} |C|^2}{\frac{\hbar k_1}{m} |A|^2} = \frac{k_2 |C|^2}{k_1 |A|^2}.$$

$$\boxed{R = \left|\frac{B}{A}\right|^2} \qquad \boxed{T = \frac{k_2 |C|^2}{k_1 |A|^2}}$$

$$\frac{B}{A} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}$$

$$\frac{C}{A} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}$$

$$\boxed{R = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} \qquad T = \frac{4 k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}}$$

$$\boxed{T + R = 1}$$

- condiția de conservare a curentului de probabilitate.

b) $\underline{\underline{E < V_0}}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\psi''(x) + V(x)\cdot\psi(x) = E\cdot\psi(x)$$

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x)\,; & x<0 \\ \psi_2(x) & ;\ x>0 \end{cases}$$

$$\Big|\ \left(-\frac{2m}{\hbar^2}\right)$$

$$\frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\boxed{\psi_1(x) = A \qquad + B\,e^{-ik_1x} \quad ; \quad x<0.}$$

$$+ V_0\cdot\psi_2(x) = E\,\psi_2(x)\ ;$$

$$\boxed{\psi_2(x) = C\cdot e^{-kx} \quad ; \quad x>0}$$