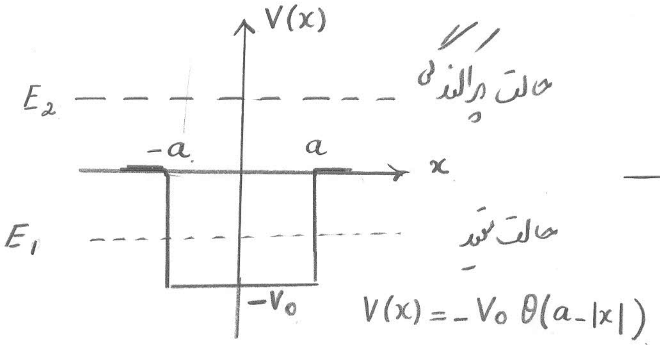
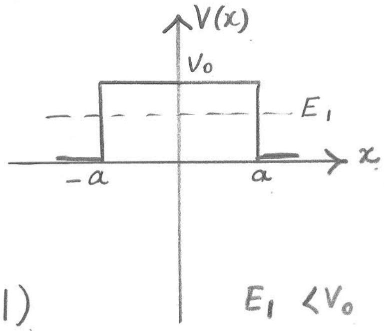
مقدمه‌ای بر بحث پراکندگی : (خلاصه نصف مطالب بخش ۳ کتاب Schwabl QMI)

در بحث پتانسیل‌های یک بعدی و حل معادله شرودینگر غیر وابسته به زمان (معادله ویژه مقداری انرژی) متعارفاً به دو نوع مسئله پتانسیل برخورده بودیم:



$V(x) = -V_0\,\theta(a-|x|)$



$E_1 < V_0$

$E_1 < 0 \qquad |E_1| < V_0 \qquad\qquad V(x) = V_0\,\theta(a-|x|)$

$E_2 > 0 \qquad E_2 > -V_0$

مرور می‌کنیم :

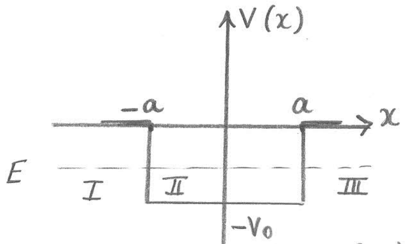
الف) حالت مقید

ب) مسئله تونل‌زنی

ج) مفهوم پراکندگی

د) آشنایی با کمیت‌های مرتبط با پراکندگی در مثال‌های ساده

الف) تشکیل حالت مقید :



$V(x) = -V_0\,\theta(a-|x|) \quad ; \quad E > -V_0$

$V_0 > 0 \ , \ E < 0$

معادلات ویژه مقداری انرژی

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi_I(x) - \kappa_B^2\,\psi_I(x) = 0$$
$$\frac{d^2}{dx^2}\psi_{II}(x) + q^2\,\psi_{II}(x) = 0$$
$$\frac{d^2}{dx^2}\psi_{III}(x) - \kappa_B^2\,\psi_{III}(x) = 0$$

with $\kappa_B^2 = \dfrac{2m|E|}{\hbar^2}$

$$q^2 = \frac{2m}{\hbar^2}\left(V_0 - |E|\right) > 0$$

پیشنهاد جواب :

$$\psi_I(x) = C_1\, e^{\kappa_B x} \qquad x < -a \qquad (I)$$
$$\psi_{II}(x) = A\cos qx + B\sin qx \qquad -a < x < a \qquad (II)$$
$$\psi_{III}(x) = C_2\, e^{-\kappa_B x} \qquad x > a$$

شرایط مرزی:

$$1)\ \psi_I(-a) = \psi_{II}(-a) \qquad 3)\ \frac{d}{dx}\psi_I(-a) = \frac{d}{dx}\psi_{II}(-a)$$

$$2)\ \psi_{II}(a) = \psi_{III}(a) \qquad 4)\ \frac{d}{dx}\psi_{II}(a) = \frac{d}{dx}\psi_{III}(a)$$

$$\frac{(4)}{(2)} \Rightarrow \quad \kappa_B = \frac{Aq\sin qa - Bq\cos qa}{A\cos qa + B\sin qa}$$

$$\frac{(3)}{(1)} \Rightarrow \quad \kappa_B = \frac{Aq\sin qa + Bq\cos qa}{A\cos qa - B\sin qa}$$

$$\curvearrowright AB = 0 \Rightarrow A = 0 \text{ or } B = 0$$

اگر $B = 0 \ \& \ A \neq 0 \Rightarrow \psi_{II}(x) = A\cos qx$ — جواب زوج

اگر $A = 0 \ \& \ B \neq 0 \Rightarrow \psi_{II}(x) = B\sin qx$ — جواب فرد

(a) جواب زوج:

$B = 0$

$$(1)\ C_1 e^{-\kappa_B a} = A\cos qa$$

$$(2)\ A\cos qa = C_2 e^{-\kappa_B a}$$

$$(3)\ C_1\kappa_B e^{-\kappa_B a} = Aq\sin qa$$

$$(4)\ Aq\sin qa = +\kappa_B C_2 e^{-\kappa_B a}$$

$$C_1 = +C_2 \quad \curvearrowright \quad \kappa_B = q\,\mathrm{tg}\,qa \quad \text{or} \quad \frac{\kappa_B}{q} = \mathrm{tg}\,qa$$

(b) جواب فرد:

$A = 0$

$$(1)\ C_1 e^{-\kappa_B a} = -B\sin qa$$

$$(2)\ B\sin qa = C_2 e^{-\kappa_B a}$$

$$(3)\ C_1\kappa_B e^{-\kappa_B a} = Bq\cos qa$$

$$(4)\ Bq\cos qa = -\kappa_B C_2 e^{-\kappa_B a}$$

$$C_1 = -C_2 \quad \curvearrowright \quad \kappa_B = -q\,\mathrm{cotg}\,qa \quad \text{or} \quad \frac{\kappa_B}{q} = -\mathrm{cotg}\,qa$$

در هر دو حالت:

$$\kappa_B = \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}$$

$$q = \frac{\sqrt{2m(V_0 - |E|)}}{\hbar}$$

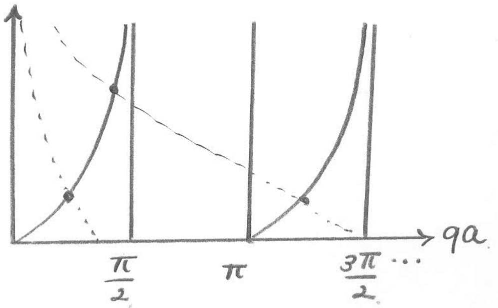
Def:

$$\xi^2 \equiv \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} \quad \text{or} \quad \xi = \sqrt{2mV_0}\,\frac{a}{\hbar}$$

(a) جواب‌های زوج:

$$\frac{\varkappa_B}{q} = \frac{\sqrt{\xi^2-(qa)^2}}{qa} = \sqrt{\frac{|E|}{V_0-|E|}}$$

$$tg\, qa = \frac{\varkappa_B a}{qa} = \frac{\sqrt{\xi^2-(qa)^2}}{qa}$$ transcendental equation



خطوط پیوسته: $tg\,qa$

خطوط نقطه‌چین: $\frac{\sqrt{\xi^2-(qa)^2}}{qa}$ به ازای ξ انتخاب شده

از طرفی

$$\begin{cases} (qa) = \frac{a\sqrt{2m(V_0-|E|)}}{\hbar} \rightarrow (qa)^2 = \xi^2 - \frac{2ma|E|}{\hbar^2} \\ \Longrightarrow |E| = +V_0\left(1-\frac{(qa)^2}{\xi^2}\right) \end{cases}$$

$$\rightarrow \quad E = -V_0\left(1-\frac{(qa)^2}{\xi^2}\right)$$

به ازای qa هایی که از نقاط تلاقی بدست می‌آیند می‌توان انرژی E حالت‌های مقید با تقارن زوج را بدست آورد.

نکته: (۱) حتی اگر ξ خیلی کوچک هم باشد باز هم یک حالت مقید با تقارن زوج بدست می‌آید.

(۲) اگر $V_0 \to \infty$ (چاه خیلی عمیق) در نتیجه $\xi \to \infty$ ↶ $tg\,qa \to \infty$

$$\curvearrowright \quad q_n a \cong \frac{\pi}{2}(2n+1) \quad \curvearrowright \quad q_n \simeq \frac{\pi}{2a}(2n+1) \; ; \; n = 0,1,2,\ldots$$

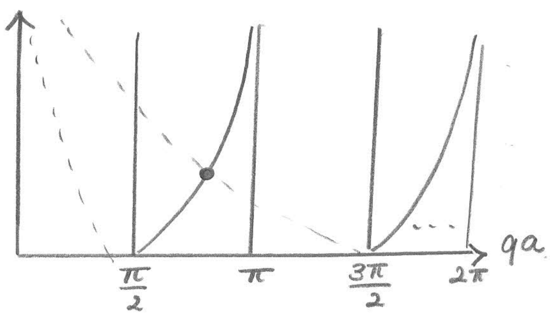
$$\boxed{E_n \simeq -V_0 + \frac{(n+\frac{1}{2})^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}}$$

جواب‌های مقید در چاه پتانسیل ∞ عمیق با تقارن زوج

(b) جواب‌های فرد:

$$\varkappa_B = -q\, cotg\, qa$$

$$-cotg\, qa = \frac{\sqrt{\xi^2-(qa)^2}}{qa} = tg\left(qa+\frac{\pi}{2}\right)$$



خطوط پیوسته: $tg\left(qa+\frac{\pi}{2}\right)$

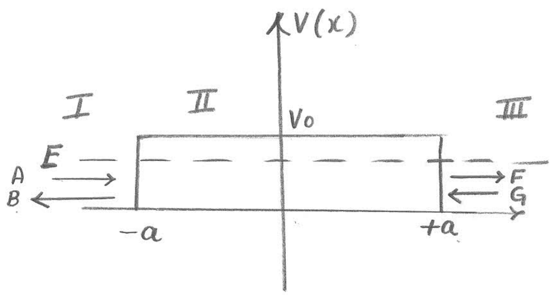
خطوط نقطه‌چین: $\frac{\sqrt{\xi^2-(qa)^2}}{qa}$ به ازای ξ انتخاب شده

اگر $V_0 \to \infty \quad (\xi \to \infty) \Rightarrow q_n a \cong n\pi \qquad n = 1,2,\ldots$

$$q_n \simeq \frac{n\pi}{a} \longrightarrow E = -V_0\left(1-\frac{(qa)^2}{\xi^2}\right)$$

در اینجا هم مشخص است که عمق چاه به اندازه کافی عمیق باشد جواب با تقارن فرد داریم:

$$\boxed{E_n \simeq \frac{n^2\hbar^2\pi^2}{2ma^4} - V_0}$$



ب) سد پتانسیل و مسئله تونل زنی :

$$V(x) = V_0\,\theta(a-|x|) \qquad E<V_0 \;,\; E, V_0>0 .$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi_I(x) + k^2\psi_I(x) = 0$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi_{II}(x) - \varkappa^2\psi_{II}(x) = 0$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi_{III}(x) + k^2\psi_{III}(x) = 0$$

with $\quad k = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

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

پیشنهاد جواب

$$A e^{ikx} + B e^{-ikx} \qquad x<-a$$

$$C e^{-\varkappa x} + D e^{+\varkappa x} \qquad -a<x<a$$

$$F e^{ikx} + G e^{-ikx} \qquad x>a$$

شرایط مرزی :

1) $\psi_I(-a) = \psi_{II}(-a)$ 3) $\dfrac{d}{dx}\psi_I(-a) = \dfrac{d}{dx}\psi_{II}(-a)$

2) $\psi_{II}(+a) = \psi_{III}(+a)$ 4) $\dfrac{d}{dx}\psi_{II}(a) = \dfrac{d}{dx}\psi_{III}(a)$

$$\left.\begin{aligned}\begin{pmatrix}A\\B\end{pmatrix} &= M(a)\begin{pmatrix}C\\D\end{pmatrix}\\ \begin{pmatrix}F\\G\end{pmatrix} &= M(-a)\begin{pmatrix}C\\D\end{pmatrix}\end{aligned}\right\} \rightarrow \begin{pmatrix}A\\B\end{pmatrix} = M(a)M^{-1}(-a)\begin{pmatrix}F\\G\end{pmatrix}$$

$$M(a) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}\left(1+\frac{i\varkappa}{k}\right)e^{\varkappa a+ika} & \left(1-\frac{i\varkappa}{k}\right)e^{-\varkappa a+ika}\\ \left(1-\frac{i\varkappa}{k}\right)e^{\varkappa a-ika} & \left(1+\frac{i\varkappa}{k}\right)e^{-\varkappa a-ika}\end{pmatrix}$$

Def : $\quad \epsilon \equiv \dfrac{\varkappa}{k} - \dfrac{k}{\varkappa}$

$$\eta \equiv \frac{\varkappa}{k} + \frac{k}{\varkappa}$$

$$M(a)M^{-1}(a) = \begin{pmatrix}\left(\cosh 2\varkappa + \frac{i\epsilon}{2}\sinh 2\varkappa a\right)e^{2ika} & \frac{i\eta}{2}\sinh 2\varkappa a\\ -\frac{i\eta}{2}\sinh 2\varkappa a & \left(\cosh 2\varkappa a - \frac{i\epsilon}{2}\sinh 2\varkappa a\right)e^{-i2ka}\end{pmatrix}$$

• فرض کنید ذرات از سمت چپ فرود میایند : $\quad A\neq 0 \;,\; (G=0)$

$$A = F\left(\cosh 2\varkappa a + \frac{i\epsilon}{2}\sinh 2\varkappa a\right)e^{2ika}$$

$$B = F\left(-\frac{i\eta}{2}\right)\sinh 2\varkappa a$$

Transmission amplitude:

$$S(E) = \frac{F}{A} = \frac{\text{دامنه ذرات خروجی}}{\text{دامنه ذرات ورودی}} = \frac{e^{-2ika}}{\cosh 2\kappa a + \frac{i\epsilon}{2}\sinh 2\kappa a}$$

چگالی احتمال تونل‌زنی ذره از یک سد پتانسیل :

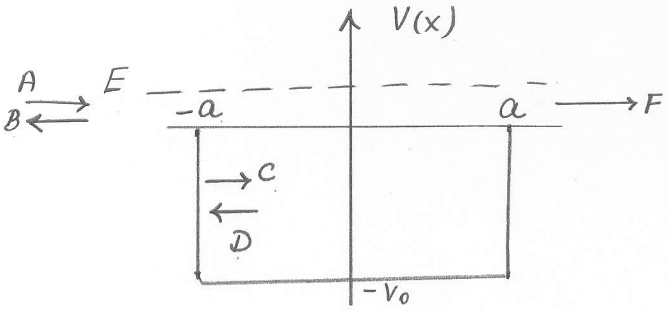
$$|S(E)|^2 = \frac{1}{1 + \left(1 + \frac{\epsilon^2}{4}\right)\sinh^2 2\kappa a}$$

اگر $\kappa a \gg 1 \Longrightarrow \sinh 2\kappa a \approx \frac{1}{2} e^{2\kappa a}$

$$\underset{\substack{\kappa a \gg 1 \\ \epsilon \gg 1}}{|S(E)|^2 \cong} \left(1 + \frac{\epsilon^2}{4}\right)^{-1} 4 e^{-4\kappa a} = \frac{16\kappa^2 k^2}{(\kappa^2 + k^2)^2} e^{-4\kappa a}$$

$$|S(E)|^2 \simeq \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} \exp\left(-4\sqrt{2m(V_0 - E)}\,\frac{a}{\hbar}\right)$$

$$\boxed{|S(E)|^2 \simeq \exp\left(-\frac{4a}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)}\right)}$$



(ج) چاه لندی

جوابها همان جوابهای قسمت (ب) است فقط به جای V_0 باید $-V_0$ گذاشت.

$$\kappa^2\Big|_{V_0 \to -V_0} = \frac{-2m(V_0 + E)}{\hbar^2} \equiv -q^2.$$

$$V(x) = -V_0\,\theta(a - |x|) \qquad E > 0,\ V_0 > 0$$

هرجا κ^2 داریم باید آن را با $-q^2$ جایگزین کنیم :

$$\kappa = +iq \longleftarrow \kappa^2 = -q^2$$

$$q = \frac{\sqrt{2m(E + V_0)}}{\hbar} \qquad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$x < -a: \quad \psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

$$x > a \quad \psi = F e^{ikx}$$

$$F = S(E)A \quad \& \quad B = F\left(-\frac{i\eta}{2}\right)\sinh 2(iq)a =$$

$$= S(E)A\left(-\frac{i\eta}{2}\right) i \sin 2qa =$$

$$= S(E)A\,\frac{1}{2}\left(\frac{iq}{k} + \frac{k}{iq}\right)\sin 2qa$$

$$= S(E)A\,\frac{i}{2}\left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q}\right)\sin 2qa$$

$x<-a \quad : \quad \psi = Ae^{ikx} + A\,S(E)\,\frac{i}{2}\left(\frac{q}{k}-\frac{k}{q}\right)\sin 2qa \; e^{-ikx}$

$x>a \quad : \quad \psi = A\,S(E)\,e^{ikx}$

ضریب گذردهی **Transmission Coefficient:**

$$|S(E)|^2 = \left|\frac{F}{A}\right|^2 = \frac{1}{1+\left(1+\frac{\epsilon^2}{4}\right)\sinh^2 2\kappa a}\Bigg|_{\kappa=iq}$$

$$= \frac{1}{1+\frac{1}{4}\left(\frac{q}{k}-\frac{k}{q}\right)^2\sin^2 2qa} = \left(1+\frac{\sin^2 2qa}{4\left(\frac{E}{V_0}\right)\left(1+\frac{E}{V_0}\right)}\right)^{-1}$$

ضریب بازتاب **Reflection Coefficient:**

$$|R(E)|^2 = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \left|S(E)\,\frac{i}{2}\left(\frac{q}{k}-\frac{k}{q}\right)\sin 2qa\right|^2 = 1-|S(E)|^2$$

خواص $|S(E)|^2$

$|S(E)|^2 \in [0,1]$ (a)

اگر $2qa = n\pi$, $n=0,1,\dots$ باشد آنگاه $\sin 2qa = 0$

و $|R(E)|^2 = 0$, لذا $|S(E)|^2 = 1$ می‌شود.

$$2qa = n\pi \rightarrow \frac{2\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}\,a = n\pi \longrightarrow \boxed{E_R = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2} - V_0 \,, \quad n\in\mathbb{N}_0}$$

Resonance

انرژی تشدید.

نکته: البته باید n به اندازه کافی بزرگ باشد تا $E_R>0$ شود. برای ذراتی که این مقدار انرژی دارند پتانسیل کاملاً گذرنده است.

← قبلاً داشتیم برای پتانسیل ∞ عمیق $V_0\to\infty$ $\quad q_{n'}a \simeq \frac{\pi}{2}(2n'+1)$ $\quad n'=0,1,\dots$ جواب‌های زوج

جواب‌های فرد $n'=1,\dots$ $\quad q_{n'}a \cong \pi n'$

ادغام $\quad q_{n'}a = \frac{(n'+1)\pi}{2} \longrightarrow$ برای پتانسیل ∞ عمیق با جواب‌هایی که یکی در میان زوج و فرد هستند

از طرفی:

برای چاه ∞ عمیق $\quad q_n = \frac{(n+1)\pi}{2a} \,, \quad n=0,1,2,\dots$

using $q_n = \frac{\sqrt{2m(V_0-|E|)}}{\hbar} \quad \longleftarrow \quad q_n \approx \frac{n\pi}{2a}$ برای nهای بزرگ

we get $\quad \boxed{-|E_n| = \frac{n^2\hbar^2\pi^2}{8ma^2} - V_0} \,, \quad n=0,1,2,\dots$

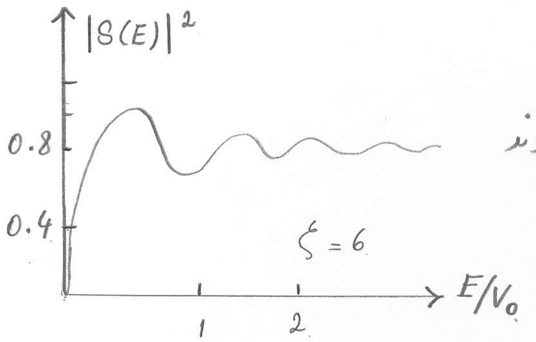
نتیجه اینکه ماکزیمم های $|S(E)|^2$ دقیقاً همان ویژه مقادیر انرژی پتانسیل ∞ عمیق است (البته به ازای n های بزرگ)

$$E_R = \frac{n^2\hbar^2\pi^2}{8ma^2} - V_0$$ انرژی تشدید

(b) در مورد کمینه های $|S(E)|^2$ را از الف $2qa = \frac{\pi}{2}(2n+1)$ بدست میاید

$$\sin^2 2qa = 1 \longrightarrow |S(E)|^2 = \left(1 + \frac{1}{4\left(\frac{E}{V_0}\right)\left(1+\frac{E}{V_0}\right)}\right)^{-1}$$

$$= \frac{\frac{4E}{V_0}\left(1+\frac{E}{V_0}\right)}{1+\frac{4E}{V_0}\left(1+\frac{E}{V_0}\right)}$$



هر چقدر ζ بزرگتر باشد رزنانس ها تیزتر می شوند $\quad \zeta^2 = \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}$

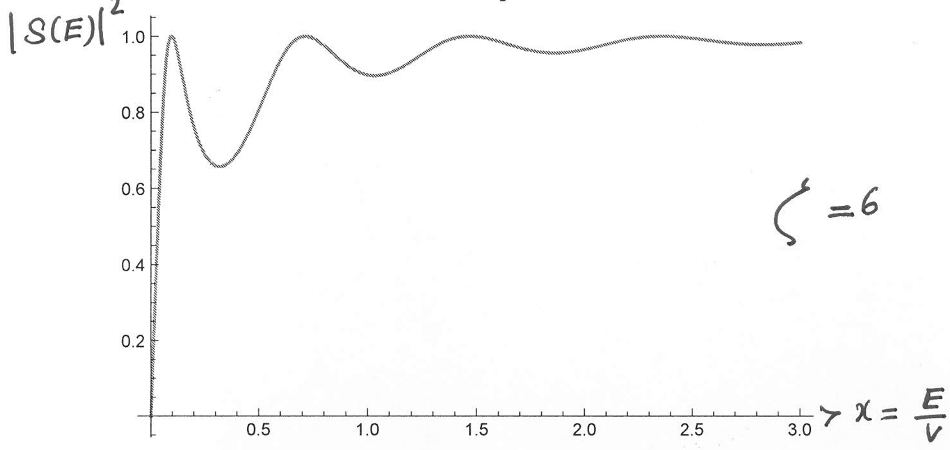
$$qa = \zeta\sqrt{1+\frac{E}{V_0}} \quad \text{with} \quad \zeta^2 = \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}$$

ζ را در مرتبه ۱۰ بگیرید.

$$|S(E)|^2 = \left(\frac{4x(1+x) + \sin^2 2\zeta\sqrt{1+x}}{4x(1+x)}\right)^{-1}$$

$$\text{with } x \equiv \frac{E}{V_0}$$

```
Plot[((4 * x * (1 + x) + (Sin[2 × 6 * Sqrt[1 + x]])^2) / (4 x * (1 + x)))^-1,
  {x, 0, 3}, PlotRange → All]
```




```
Plot[((4 * x * (1 + x) + (Sin[2 × 60 * Sqrt[1 + x]])^2) / (4 x * (1 + x)))^-1,
  {x, 0, 3}, PlotRange → All]
```