

Χωρική Κβάνωση

(1)

Σε πρόβλημα με άπειρα πηγάδια
στη στερεωμένες οριζόντιες είναι

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2} \quad n=1, 2, \dots$$

όπου m η μάζα του σωματιδίου. Για
πηγάδια με μη οριζόντιες πλευρές
η πηγάδια πεπερασμένου βάθους δεν
μπορούμε να αγνοήσουμε την απλή
βάση (1). Πρέπει όμως περιμένουμε
κβάνωση των ενεργειακών σταθμών και
με βάση την αρχή της αβεβαιότητας,
δεν έχουμε

$$E_n \sim \frac{\hbar^2}{ma^2} \quad (2)$$

Είναι προφανές ότι για να παρα-
χρηστούμε την κβάνωση σε μικρής
πόσους n , απόσταση ανάμεσα στις
ενεργειακές στάθμες να είναι
σημαντική σε σχέση με την θερμική
ενέργεια

$$E_{n+1} - E_n \gg kT$$

δύο σε αντίθετη περίπτωση θα είχαμε
ίσους πιθανώς, σε χημικές (ενεργειακές)
καταστάσεις, και οι συστάσεις μεταβάσεις
μεγάλης n . Δεν θα επηρεάζει την παρα-
γωγή των κβαντικών φαινομένων.

Εάν το ηδονοκροτικό αέριο είναι
εκφυλισμένο και έχει ενέργεια Fermi,
 E_F τότε πρέπει $E_2 > E_F > E_1$. Σε
αξίωμα όριο, $E_F \gg E_{n+1} - E_n$, τότε
μένουμε κβαντικά φαινόμενα ενσωματωμένων
μικρή επίδραση.

Μια ζεστασιά συνδυάζει οφέλη
στην σκέδαση φορέων από ατέλειες ή
ζεστασιάς (φωτόνια) ως ατέλειες. Η πινα-
κόγραμμα σκέδασης παρακρηλίσματα από τον
από τον επαγωγής (μέσω ελαστικού χρόνου) τ
που συνδέεται με την ευκινησία των
φορέων $\mu = e\tau/m$. Λόγω της αρχής
της αβεβαιότητας, μία πεπερασμένη
ζώνη με τ αντιστοιχεί σε αβεβαι-
ότητα $\Delta E \approx \hbar/\tau$. Εξοί η παρουσία
των διακριτών καταστάσεων θα είναι
ορατή μόνο αν η απόσταση δύο γειτο-
νικών σταθμών είναι πολύ μεγαλύτερη
της αβεβαιότητας ΔE σε μια στάθμη. Εξοί

$$E_{n+1} - E_n \gg \Delta E \approx \frac{\hbar}{\tau} = \frac{\hbar e}{m\mu}$$

Η τάση αυτή είναι ισοδύναμη με την περιορισμένη διήθηση μέσω διαβρωτής ή είναι πολύ μεγαλύτερη από το πάχος του υμενίου α.

Εξαιτίας αυτού για να παρατηρηθούν καθαρά φαινόμενα πρέπει να έχουμε υμένα μικρού πάχους, σε αρκετά υψηλές θερμοκρασίες, με φορείς υψηλής ειςίτησας και θα υψηλή πυκνότητα φορέων. Εξαιτίας π.χ. για ένα υμενίο με ενεργό μάζα $m_e^* = 0.1 m_0$ σε θερμοκρασία διαρροής, πρέπει να έχουμε υμένο πάχους $a \leq 1000 \text{ \AA}$ για να παρατηρηθούν καθαρά φαινόμενα. Η δέ ειςίτησα των φορέων πρέπει να είναι αρκετά μεγαλύτερη των $10000 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{sec}$.

Μια τελευταία συνθήκη είναι ότι η ενδοπιφάνεια όπου διηρηθώσαι η ανάλυση πρέπει να είναι πολύ καλής ποιότητας ώστε ένα ηλεκτρονίο που πέφτει να έχει μόνο ανάκλαση στην μεμβράνη της ορθής των παράλληλα στην επιφάνεια.

Μεταβολή της ορθής παράλληλα στην ενδοπιφάνεια ισοδύναμη με σκέδαση όπου το σφαιρίδιο κινείται με ταχύτητα σε άλλη κατεύθυνση. Στην περίπτωση αυτή η μέση ενεργή διαδρομή είναι $l=0$, και δεν ικανοποιείται η συνθήκη $l \gg a$. Επειδή όμως αναπόφευκτα οι κλάσεις ενδοπιφάνεια έχουμε ανομοιογένειες αυτές πρέπει να έχουν μέγεθος \ll πολύ μικρότερο από το μέγεθος κλάσης de Broglie του ηλεκτρονίου. Ταυτόχρονα στην ενδοπιφάνεια δεν πρέπει να υπάρχουν καθ' ύλην με φορείς, που είναι μια επιπλέον πηγή σκέδασης.

Κβαττικό πηγάδι

(1)

Είδαμε ότι ένα ηλεκτρόνιο ή άλλο κβατισματικό συμπύκνωμα περιορισμένο σε ένα ζεραγωγικό δυναμικό μπορεί να έχει μόνο διακριτές τιμές της ενέργειας.

Το ίδιο ισχύει για οιοδήποτε δυναμικό χύρω από ένα ελάστικο, όταν φυσικά κατοπτρίζεται μία συνθήκη που συνδέει το χιτόμετρο με βάθος και πηγάδι και τον άξονα.

Η ύπαρξη διακριτών ενεργειακών οαυρών (δηλ. διακριτό φάσμα ως εκδοχή της ενέργειας) λόγω του περιορισμού στον χώρο οφείδεται κυρίως κήνωση. Το φαινόμενο αυτό είναι παραμυρταίο

σήμερα σε μικροσκοπικές ημερήσιες, όπως π.α. κβατισματικά πηγάδια σε ποτήρι ή πολλαπλή διάταξη. Οι διατάξεις αυτές κατασκευάζονται από την διαδοακή επίοργαση διαφορετικών ημε-αγωγικών ^{επίοργαση} _{πολλών δευτών} ^{υφέντων}, πάχους της τάξης 200Å.

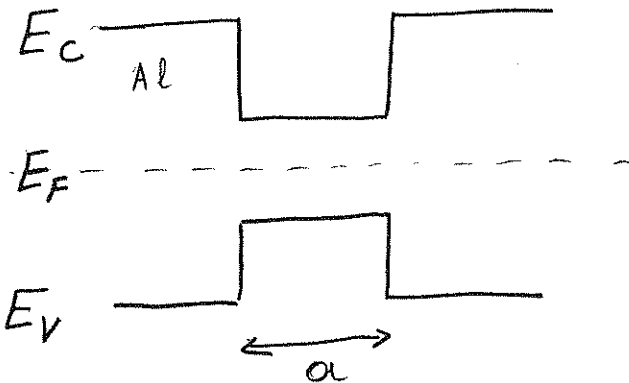
Τα διάφορα ημερήσιες υλικά έχουν διαφορετικό ενεργειακό χάσμα ^{Eg} ανάμεσα στην ζώνη αγωγιμότητας (όπου τα ηλεκτρόνια κινούνται εύκολα με την εφαρμογή ενός μικρού ημερήσιου πεδίου) και στην ζώνη αείων (όπου απαιτείται μία εδδαογή ενέργεια ίση με το ενεργειακό χάσμα για να έχουμε κίνηση των ηλεκτρονίων). ~~Αυτά είναι~~ Το χάσμα οφείδεται στην περιορισμένη του κρυσταλλικής δυναμική, ενώ ^{για τους ημε-αγωγούς αέφωνα με την ~~απόρριψη~~ ^{απόρριψη} του Pauli} η ζώνη αείων είναι πλήρης και η ζώνη αγωγιμότητας άδεια. Τα ηλεκτρόνια στην ζώνη αείων είναι εντοπισμένα σε ατομικό επίπεδο, ενώ τα ηλεκτρόνια στην αγωγιμότητας μπορεί να διακινούνται ελεύθερα ημερήσια.

Εάν δύο υλικά έχουν διαφορετικό χάσμα τότε η ενέργεια της ζώνης αγωγιμότητας έχει ασυνέχεια στις ενδοεπιφάνειες μεταδίδει των υφέντων. Εάν π.α. ένα υλικό με μικρότερο ενεργειακό χάσμα βρίσκεται ανάμεσα σε δύο υφένια με μεγαλύτερο Eg

(2)

1. Σε μία διάταξη πάντα έχουμε μια κβατισματικό δέσμη καταβολή για ένα ζεραγωγικό πηγάδι.

εδώ έχουμε την εικόνα ως σύμβολο
 (1) για την κάτω ενέργεια της ζώνης
 αγωγής (E_c) και την άνω ενέργεια της
 ζώνης αδίου (E_v). Για ημιαγωγούς τύπου

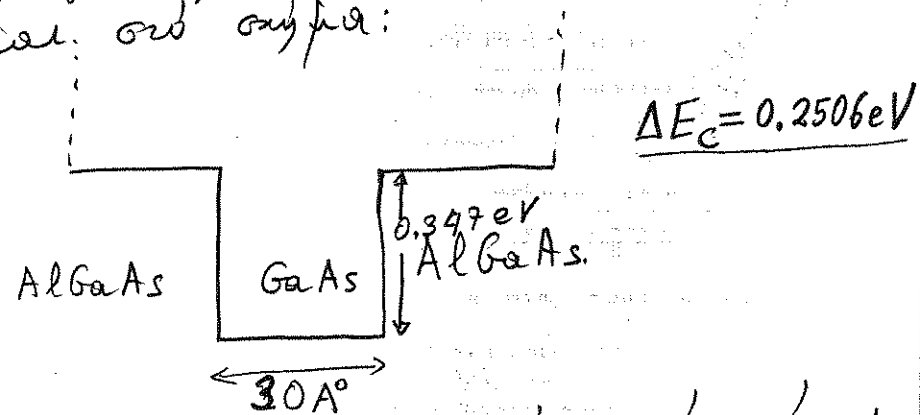


Σχ. 1

προβλεπεί η ενέργεια Fermi (E_F)
 βρίσκεται στο μέσον της ζώνης αγωγής
 και αδίου $E_F = \frac{E_c + E_v}{2}$ και είναι
 ίδια κατά μήκος της διάταξης, δηλ.
 και στα δισκία, για να εφάρμοζε
 σε ισσοροπία. Τα E_c και E_v όμως
 μεταβάλλονται στο χώρο.

1. Για τον ορισμό της ενέργειας Fermi σε ημι-
 αγωγούς δες Kittel σελ. ... Ο ορισμός δίνει
 δίνει το ίδιο νόημα όπως στα μέταλλα όπου
 $E_F(T=0)$ είναι η μέγιστη ενέργεια, αλλά σε $T \neq 0$
 ο ορισμός δίνει για ορισμένα.

Ετσι η ηλεκτρονία στην ζώνη αγωγής
 της δεν είναι απαραίτητα ελεύθερη
 αλλά, μπορούμε να έχουμε και άτομα
 κατασχευμένα εάν η ενέργεια είναι
 μικρότερη από την μέγιστη της E_c .
 Ετσι η $E_c(x)$ παρουσιάζει
 ένα χαρακτηριστικό δυναμικό πεπερασμένου
 βάθους. Οι δόμες αυτές παράγονται εύκολα
 στο εργαστήριο και το στεγνό δυναμικό
 $E_c(x)$ για μία περίπτωση $AlGaAs/GaAs$
 δίνεται στο σχήμα:



Το εύρος $\alpha = 10 \text{ \AA}$ σημαίνει ότι έχουμε
 περίπου 7 ατομικές επιστρώσεις GaAs. Το
 δε βάθος εφάρμοζε από το ποσοστό
 Al ή Ga στα εσωτερικά στρώματα.
 Είναι αυτονόητο ότι στα άκρα της ζώνης

1. Πιο συγκεκριμένη περίπτωση είναι πάνω
 από 30 \AA πάχος. Η ζεακή αναπνοή της
 MBE, παρόλο που είναι πολύ εξελιγμένη είναι
 δύσκολο να δημιουργήσει ελεύθερα μοριακούς
 σπινθάρια. Υπάρχει ισχυρότητα και για μικρότερα

το διαφορετικό πάλι αισιότητες ω ηλεκτρονίου
 είναι άπειρο. Στην προηγούμενη άσκηση ω
 το ηλεκτρονίο έχει μάζα m_0 αυτή
 ως ελεύθερο ηλεκτρονίου. Στην πραγματικό-
 τητα τα ηλεκτρονία βέ είναι σε ένα στερεό
 συμπεριφέρονται σαν να έχουν "εφεξής" μάζα
 m_e^* δίπλα στο ηλεκτρονίο αισιότητες
 στην περιοδική δομή των κρυστάλλων.
 Μάλιστα η m_e^* είναι συνάρτηση
 και μόνο της ενέργειας αλλά
 και της "ορμής" $\hbar k$ ως ηλεκτρονίου.³
 Εάν υπολογίσουμε το επιπέδες
 ενεργειακές στάθμες των ηλεκτρονίων
 έχουμε⁴ για $m = m_e^*$

4. Η ενέργεια μετρήεται από το βάθος του πηγάδιού δηλ. από E_c (GaAs).

3. Στο κεφάλαιο 11 θα συζητήσουμε εκτενέστερα το θέμα αυτό.

2. Για την $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/AlGaAs$ κλασικό πηγάδι, το βάθος του πηγάδιού δίνεται φανερά από την σχέση

Πίνακας I.

n	E_n	$E_n^* (m_e^* = 0.0790)$
1	0.0140 eV	0.1772
2	0.0379	συνεχές

Στην πραγματικότητα όμως η μάζα, ^{"εφεξής"}
 των ηλεκτρονίων είναι διαφορετική στο
 πηγάδι (GaAs) και στο φράγμα (AlGaAs).
 Π.α για $\alpha = 0.3$ έχουμε

$$m_e^*(GaAs) = 0.0665 m_0$$

$$m_e^*(Al_xGa_{1-x}As, \alpha = 0.3) = 0.0916 m_0$$

Στην πρώτη προσέγγιση θα θεωρήσουμε
 την ενεργό μάζα σαν την μέση τιμή
 των δύο μαζών δηλ. $m_e^* = 0.0790$.
 Τότε βλέπουμε ότι έχουμε μόνο μία
 διακριτή κατάσταση στο πηγάδι και
 φυσικά για $E > \Delta E_c$ έχουμε ένα
 συνεχές φάσμα. Η τιμή αυτή δίνεται
 στην τιμή στην ως πίνακα I.

1. Δεν είναι απόλυτα συνεχές, διότι για υψηλότερες ενέργειες έχουμε λάσπια. Εδώ επίσης υποθέσαμε $\Delta E_c = 0.347 eV$ είναι κάπως ώστε να μην έχουμε επικαλύψεις ζωνών.

Για μεγαλύτερη ακρίβεια πρέπει να λύσουμε την εξίσωση Schrodinger αλλά με διαφορετική μάζα. Αυτό σημαίνει ότι το κυματοδάνεια στο πηγάδι είναι

$$k = \sqrt{\frac{2m_w^*}{\hbar^2} E}$$

ενώ στο φράγμα έχουμε για το αντίστοιχο μήκος διαόδου

$$K = \sqrt{\frac{2m_b^*(V_b - E)}{\hbar^2}}$$

όπου m_w^* (m_b^*) είναι οι εφεξής μάζες στο πηγάδι (φράγμα) αντίστοιχα, και $V_b = \Delta E_c$. Η διαφορετική μάζα σημαίνει ότι στο σημείο συνάφης $x = \pm \frac{a}{2}$, δεν έχουμε συνέχεια της $\frac{\partial \psi}{\partial x}$ αλλά της ψήμης πυκνότητας. ($f \sim \frac{1}{m^*}$). Φυσικά έχουμε συνέχεια της κυματοσυνάρτησης και στο $x = \pm \frac{a}{2}$ ψ και $\frac{1}{m} \frac{\partial \psi}{\partial x}$ συνεχώς. Η εξίσωση για τις ιδιοτιμές της ενέργειας δίνεται σε αναλογία με την () από την

$$K = \frac{m_b^*}{m_w^*} k \tan\left(k \frac{a}{2}\right)$$

Έτσι π.χ. για $a = 100 \text{ \AA}$, $V_b = \Delta E_c = 0.2506 \text{ eV}$, $m_w^* = 0.0665 m_0$, $m_b^* = 0.0916 m_0$ έχουμε για τη συνάρτηση ενεργειακή κατάσταση $E_{c1} = 30.7 \text{ meV}$.

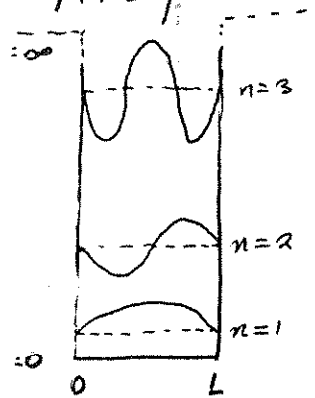
Για ένα ατύρο πηγάδι το εμβαδόν L_{eff} , για να έχουμε την ίδια δυναμική ενέργεια $E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m^* L_{\text{eff}}^2}$ δίνεται ως

$$L_{\text{eff}} = \sqrt{\frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_c^* E_{c1}}} = 136 \text{ \AA}$$

Αυτό προσεγγιστικά είναι 100 με $a + \frac{2}{K}$ δηλ. το εμβαδόν του σφαιρικού αν το μήκος διαόδου για τις δύο πλάκες. Φυσικά το L_{eff} είναι διαφορετικό για κάθε στάση καθώς το μήκος διαόδου μεταβάλλεται με την στάση και αυξάνει με το ύψος της ενεργειακής στάσης.

7/10

Απειρόβαθο πηγάδι σε 1-D $\psi = \text{ΜΟΝΟΤΟΝΗ}$
 $V(z) = \begin{cases} \infty & z < 0, z > L \\ 0 & 0 < z < L \end{cases}$



$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dz^2} = E \psi(z)$$

Το V μπαίνει σε οριακές συνθήκες
 $\psi(0) = 0, \psi(L) = 0$

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin k_n z, \quad k_n = \frac{n\pi}{L}$$

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} k_n^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m L^2} n^2, \quad n=1, 2, \dots$$

V (συμμετρικό ως προς $z = \frac{L}{2}$)
 $\Rightarrow \psi$ { συμμετρικό (n=1, 3, ...) ως προς $z = \frac{L}{2}$
 ασυμμετρικό (n=2, 4, ...) ως προς $z = \frac{L}{2}$

Ελάχιστη ενέργεια $E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m L^2}$

$n=0$ δεν είναι λύση

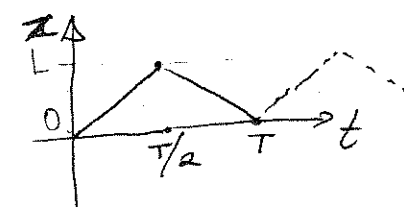
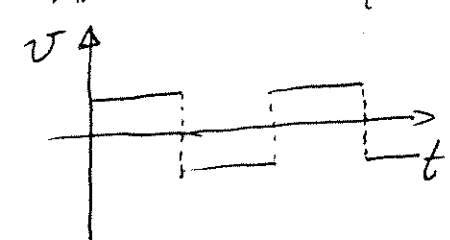
Αρχή της αβεβαιότητας
 $\Delta x \approx L, \Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2} \Rightarrow \frac{\Delta p^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{8m L^2}$

Ναι αλλά δεν έχει ίδια πιθανότητα σε L
 $|\Delta x| = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \frac{L}{\pi} \sqrt{\frac{\pi^2}{12}} \Rightarrow \Delta p = \frac{\hbar \pi}{L}, \Delta p \Delta x \approx \frac{\hbar}{1.9} \Rightarrow E_1 \approx \frac{(\Delta p)^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m L^2} \dots$

α) Διακριτές καταστάσεις
 β) $\Delta E \sim \frac{1}{L^2}$ $E_1 \sim \frac{1}{L^2}$ εγροπισμός αυξάνει E_1 και απόσταση ΔE

γ) $|\psi_n(z)|^2$ - κατανομή στο χώρο, διαφορετική με n
 $\sim \frac{2}{L} \sin^2 k_n z$
 Αύξηση κόμβων \rightarrow περιεχόμενος εγροπισμός \Rightarrow μεγαλύτερη ενέργεια.

δ) Πεδίο διαφορετική από την συμπεριφορά κλασσικών σωματιδίου



εδώ $\psi(z,t) = \psi_n(z) e^{-i\omega_n t}$
 $|\psi(z,t)|^2 = |\psi_n(z)|^2$ ανεξάρτητη ως προς χρόνο

Για να δούμε κίνηση χρειάζεται συνδυασμό ψ_n

$$\psi(z,0) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(z) + \psi_2(z))$$

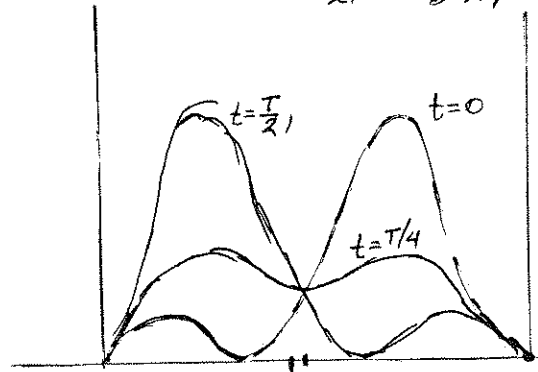
$$\psi(z,t) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(z) e^{-iE_1 t/\hbar} + \psi_2(z) e^{-iE_2 t/\hbar})$$

Μια σταθμη κατάσταση της CE Schrödinger δεν αναπτύσσεται χρονικά.

$$|\Psi(x,t)|^2 = \frac{1}{L} \left\{ \sin^2 \frac{\pi x}{L_1} + \sin^2 \frac{2\pi x}{L_2} + 2 \cos \frac{E_2 - E_1}{\hbar} t \sin \frac{\pi x}{L_1} \sin \frac{2\pi x}{L_2} \right\}$$

περιγράφει ταλάντωση με $\omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} = \frac{3E_1}{\hbar}$

Περίοδος $T = \frac{2\pi}{\omega_{21}} = \frac{2\pi \hbar}{3E_1} = \frac{2\pi}{3} \tau$, $\tau = \hbar/E_1$



$t=0 \quad \langle x \rangle = \frac{L}{2} \left(1 + 2 \frac{61}{9\pi^2} \right)$

$\langle p \rangle = 0$

$t = \frac{T}{4} \quad \langle x \rangle = L/2$

$\langle p \rangle = -\frac{8\hbar}{3L}$

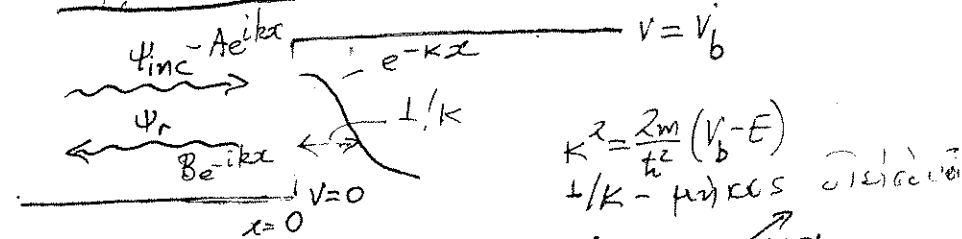
$t = \frac{T}{2} \quad \langle x \rangle$

$\langle p \rangle = 0$ αταξερροφύ κίηης

Γιά τή περιγράφουμε σωματίδιο δέλωμε κυματοπακέτο.

Μονοδιάστατα προβλήματα

Πρώτα Σκέψασμις ⇒ συνέχεις φάσμα



$E < V_b \quad x > 0 \quad \psi = C e^{-kx} + D e^{+kx}$

$\frac{1}{k}$ αυξάνει με την E αλλά
 την δίνει ρώμα

$f(x) = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\psi^* \frac{\partial}{\partial x} \psi - \psi \frac{\partial}{\partial x} \psi^* \right) = 0$

για ψ - πραγματικό (e^{-kx})

$x < 0 \quad \psi = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

$f(x) = \frac{i\hbar}{2m} \left\{ (A^* e^{-ikx} + B^* e^{ikx}) (ikA e^{ikx} - ikB e^{-ikx}) - c.c. \right\}$
 $= -\frac{i\hbar}{2m} \left\{ ik|A|^2 - ik|B|^2 + ik \underbrace{(A^* B e^{-2ikx} + B^* A e^{2ikx})}_{\text{πραγματικό}} \right\} - c.c.$

$f(x) = \frac{\hbar k}{m} \left\{ |A|^2 - |B|^2 \right\} = 0$ δίδει $f(x > 0) = 0$
 → ανακλώμενο ρώμα
 → προσπίπτον ρώμα

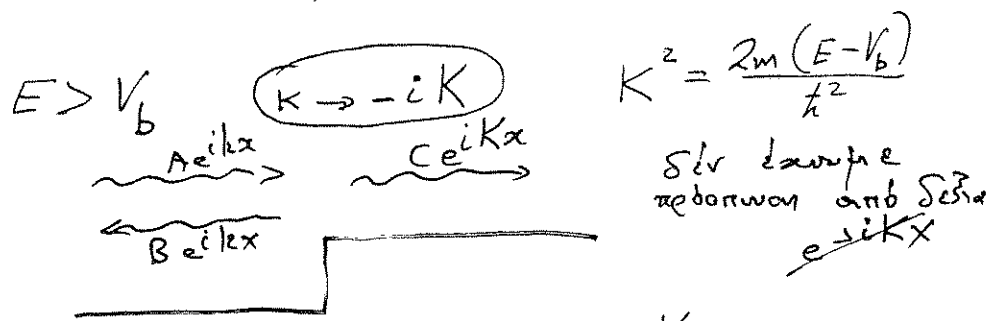
⇒ $|A| = |B|$ λόγω συνέχειας των ρώματων
 Υπάρχει φάση (δλ δώμε αργότερα)
 ορίσεται από την συνέχεια της ψ στο $x=0$

υποθέτουμε ανάκλαση

$$R = \frac{|J_R|}{J_{inc}} = \frac{\frac{\hbar k}{m} |B|^2}{\frac{\hbar k}{m} |A|^2} = 1 \quad E < V_b$$

υποθέτουμε διαπεραση

$$T = \frac{J_T}{J_{inc}} = \frac{\hbar k}{m} |C|^2}{\frac{\hbar k}{m} |A|^2} = 0$$



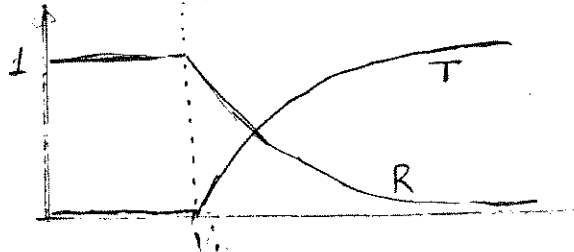
$x > 0 \quad \psi(x) = Ce^{iKx}$
 $x < 0 \quad \text{όπως πριν}$

Συνθήκη ψ και πρώτων αderiv. στο $x=0 \Rightarrow$

$$\frac{C}{A} = \frac{2k}{k+K} \quad \frac{B}{A} = \frac{k-K}{k+K}$$

$$T = \frac{J_T}{J_{inc}} = \frac{\frac{\hbar K}{m} |C|^2}{\frac{\hbar k}{m} |A|^2} = \frac{K |C|^2}{k |A|^2} = \frac{4kK}{(k+K)^2}$$

$$R = \frac{|J_R|}{J_{inc}} = \frac{\frac{\hbar k}{m} |B|^2}{\frac{\hbar k}{m} |A|^2} = \left(\frac{k-K}{k+K}\right)^2 \quad T + R = 1$$



είναι επανέκρουση για $E < V_b$, $R=1$ πλήρης ανάκλαση αλλά εί αλληλεπίδραση ή φάση

και αρχικά ορισμός συνθήκες στο $x=0$

$$\psi(0) \text{ συνεχής} \Rightarrow A+B=C$$

$$\frac{d\psi}{dx} \text{ } f. x=0 \Rightarrow ik(A-B) = -iK C$$

$$\frac{C}{A} = \frac{2ik}{ik-K} \quad \frac{B}{A} = \frac{ik+K}{ik-K} \Rightarrow |B|=|A|$$

$$B = A e^{-i\theta} \quad \theta = 2 \tan^{-1} \frac{K}{k}$$

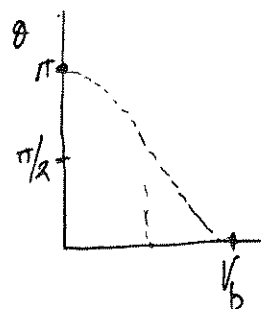
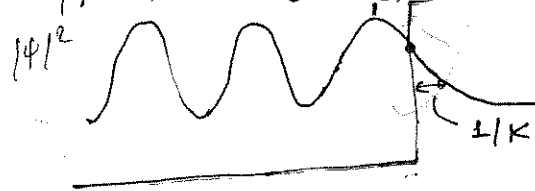
$$\theta=0 \quad E=V_b$$

$$\theta=\pi \quad E=0$$

$$\theta=\frac{\pi}{2} \quad E=\frac{V_b}{2}$$

$$x < 0 \quad \psi(x) = A [e^{ikx} + e^{-i(kx+\theta)}]$$

$$|\psi(x)|^2 = 2A^2 \{1 + \cos(2kx + \theta)\}$$



Λογικό: όσο E μεγαλύτερη φάση \rightarrow μεγαλύτερη μετατόπιση μέγιστου από αρχική

Αρτίως: αν $V_b \rightarrow \infty \quad K \rightarrow \infty \quad \theta \rightarrow \pi$
 $\psi(0)=0$ και $\psi(x=0)=0 \Rightarrow C=0 \Rightarrow A=-B$

$V_b \rightarrow 0 \quad k=K$ τανύει μόνο για $E=0$

$$E > V_b$$

$$\frac{C}{A} = \frac{2k}{k+K} > 1$$

$$\frac{B}{A} = \frac{k-K}{k+K} > 0$$

$$\frac{K}{k} = \frac{\sqrt{E-V_b}}{\sqrt{E}} < 1$$

$$E = V_b$$

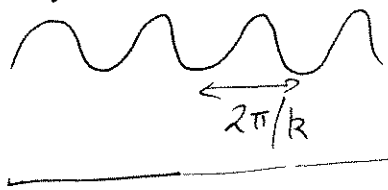
$$\frac{B}{A} = 1$$

$$\frac{C}{A} = 2$$

Αλυσίδα

από

$x=0$



$$k < k_0$$

$$E \rightarrow \infty$$

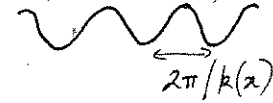
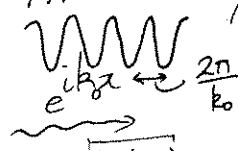
$$\frac{C}{A} \rightarrow 1$$

$$\frac{B}{A} \sim \frac{1}{4E}$$

WKB προσέγγιση

Αν έχουμε

σφαίρα μεταβαλλόμενη $1/x$



$$k_0 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)}$$

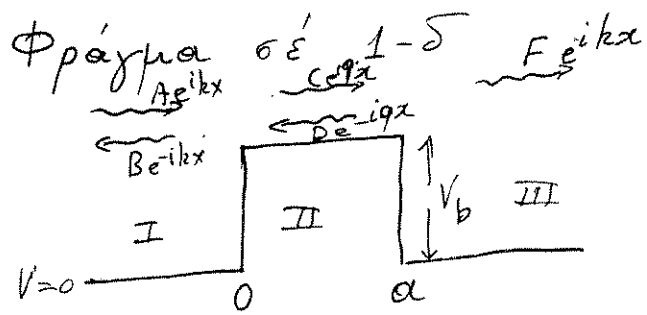
V_0

$$k(x) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-V(x))}$$

$$e^{\pm i k_0 x} \longrightarrow (?) e^{\pm i \int dx k(x)}$$

$$\Delta\phi = k d \longrightarrow \Delta\phi = \int_0^d k(x) dx$$

Και το πλάτος μεταβάλλεται με x ώστε να διατηρείται το ψ .



$E > V_b$ $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ $q = \sqrt{\frac{2m(E-V_b)}{\hbar^2}}$

$\psi_I = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$ $x < 0$

$\psi_{II} = C \sin qx + D \cos qx$ $0 \leq x \leq a$

$\psi_{III} = F e^{ikx}$ $x > a$

A, B, C, D, F συνεχής φάσμα $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

$\psi(a)$ $\psi'(a)$ συνεχής στα $x=0, a \Rightarrow 4 \text{ εἴδη}$
+ κανονικοποίηση $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$

$$F = \frac{e^{-ika}}{\cos qa - \frac{i}{2} \left(\frac{k}{q} + \frac{q}{k} \right) \sin qa}$$

$$T = \frac{\frac{\hbar k}{m} |F|^2}{\frac{\hbar k}{m} |A|^2} = \frac{1}{\cos^2 qa + \frac{1}{4} \left(\frac{k}{q} + \frac{q}{k} \right)^2 \sin^2 qa}$$

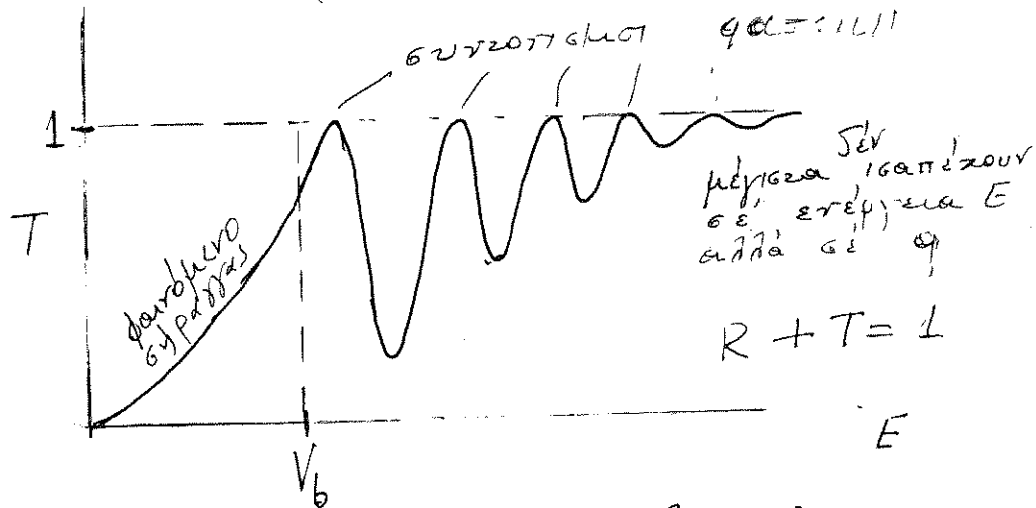
$E > V_b$

$$T = \frac{1}{1 + \left(\frac{k^2 - q^2}{2kq} \right)^2 \sin^2 qa}$$

μέγιστα ($qa = n\pi$)
ελάχιστα
($qa = \frac{\pi}{2}(2m+1)$)

$E < V_b$ $q \rightarrow -ik$ $e^{iqx} \rightarrow e^{-kx}$

$T = \frac{1}{1 + \left(\frac{R^2 + K^2}{2kK} \right)^2 \sinh^2 ka}$ εκθετική μείωση



Μέγιστα $qa = n\pi$ $\lambda_n = \frac{2\pi}{q_n} = \frac{2a}{n}$

$2a = n \lambda_n$

Έχουμε πολλαπλές κκευάσεις

$\lambda \cdot d = 2a \cdot \theta = 2\pi n \Rightarrow \text{είδη } \pm \delta \sin$

$$E \ll V_b \quad T \ll 1$$

$$F = \frac{e^{-ika}}{\cosh k + \frac{i}{2} \left(\frac{k}{k} - \frac{k}{k} \right) \sinh ka}$$

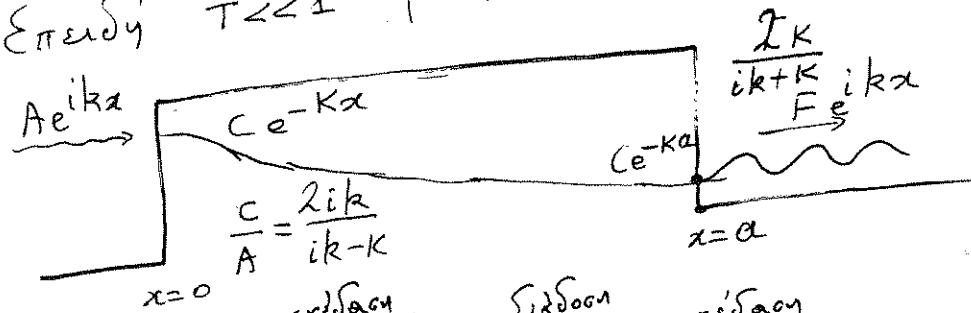
$$\frac{k}{k} = \frac{\sqrt{E}}{\sqrt{V_b - E}} \ll 1 \quad \text{και } ka \gg 1$$

$$T = \frac{1}{\left(\frac{2k}{k} \right)^2 e^{2ka}} = \left(\frac{k}{2k} \right)^2 e^{-2ka} \rightarrow \frac{4E}{V_b} e^{-2ka}$$

$$T \Rightarrow \left(\frac{2k}{k^2 + k^2} \right)^2 e^{-2ka} \quad \text{καλύτερη προσέγγιση}$$

$k^2 + k^2 \approx V_b$

Επειδή $T \ll 1$ μόνη σκέδαση αρκεί



$$F \sim \frac{2ik}{ik - k} e^{-ka} \frac{2k}{ik + k} + \dots$$

πολλές σκέδασεις

$$T \approx \left(\frac{2k}{k^2 + k^2} \right)^2 e^{-ka}$$

$$E > V_b$$

$$T \rightarrow \frac{1}{1 + \left(\frac{V_b}{2\sqrt{E(E-V_b)}} \right)^2 \sin^2 qa}$$

$$T \rightarrow \frac{1}{1 + \left(\frac{V_b}{2E} \right)^2 \sin^2 qa}$$

$$\approx 1 - \left(\frac{V_b}{2E} \right)^2 \sin^2 qa \quad E \gg V_b$$

$$T \rightarrow 1 \quad \text{αν } \frac{1}{E^2}$$

Στο βήμα δυναμικού έχουμε ένα μόνο σφύρο σκέδασης και δεν βλέπουμε φαινόμενα συνοχής

$$qa \ll 1$$

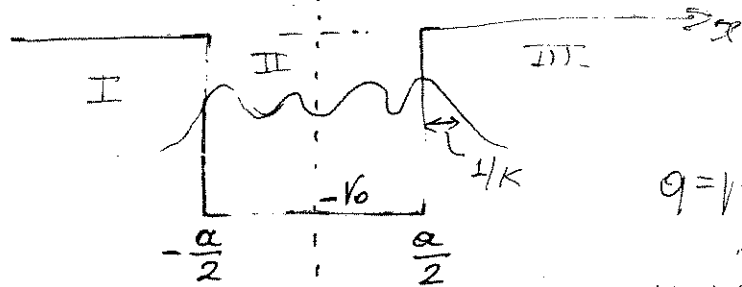
$$T = \frac{1}{1 + \alpha^2 \frac{(k^2 - q^2)^2}{4k^2}} = \frac{1}{1 + \alpha^2 k^2}$$

$$T \rightarrow 1 \quad \text{αν επίσης } ak \ll 1$$

Στο φράγμα δεν σκεδάζει και μικρό

Δεσμένες καταστάσεις σε πηλίκο

V_0 - πεπερασμένες τάσεις



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

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

I $\psi_I = Be^{Kx}$

II $\psi_{II} = B e^{iqx} + D e^{-iqx} = C' \cos qa + D' \sin qa$

III $\psi_{III} = F e^{-Kx}$

συμμετρικές αυτίου

$\psi(x)$ συνεχής $Be^{-K\frac{a}{2}} = C'$

Ανταρθε μόνο για $x \geq 0$

Συμμετρικές $D' = C$

$$\frac{d\psi}{dx} \Big|_{x=0} = 0$$

$$\psi_{II} \left(\frac{a}{2} \right) = \psi_{III} \left(\frac{a}{2} \right) = C' \cos q \frac{a}{2} = F e^{-K \frac{a}{2}}$$

$$\psi'_{II} \left(\frac{a}{2} \right) = \psi'_{III} \left(\frac{a}{2} \right) = -C' q \sin q \frac{a}{2} = -K F e^{-K \frac{a}{2}}$$

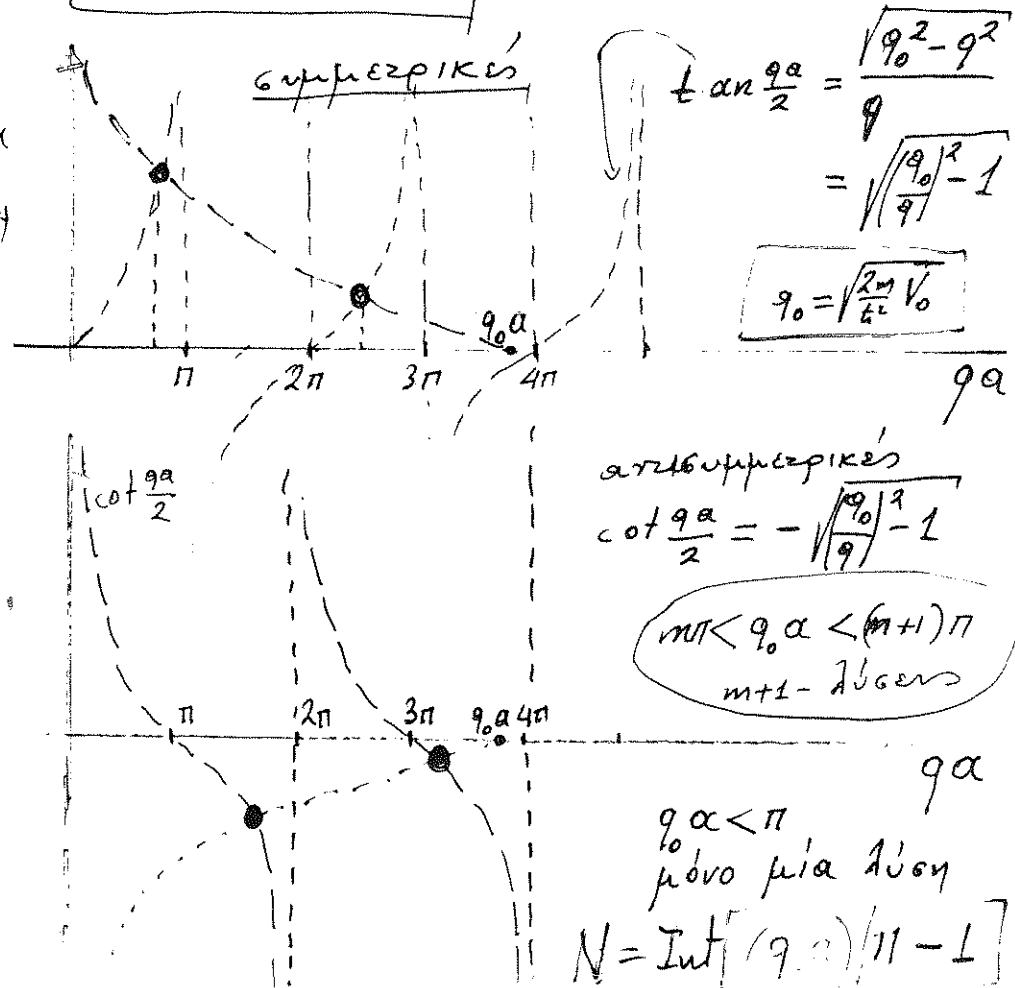
$$\tan q \frac{a}{2} = \frac{K}{q}$$

Ασυμμετρικές $C=0$ λόγω $\psi'_{II}(0) = C$

$$\psi_{II} \left(\frac{a}{2} \right) = \psi_{III} \left(\frac{a}{2} \right) \Rightarrow D' \sin \frac{qa}{2} = F e^{-K \frac{a}{2}}$$

$$\psi'_{II} \left(\frac{a}{2} \right) = \psi'_{III} \left(\frac{a}{2} \right) \Rightarrow D' q \cos \frac{qa}{2} = -K F e^{-K \frac{a}{2}}$$

$$\boxed{-\cot \left(\frac{qa}{2} \right) = \frac{K}{q}}$$



$$\tan \frac{qa}{2} = \frac{\sqrt{q_0^2 - q^2}}{q} = \sqrt{\left(\frac{q_0}{q}\right)^2 - 1}$$

$$\boxed{q_0 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} V_0}}$$

ασυμμετρικές

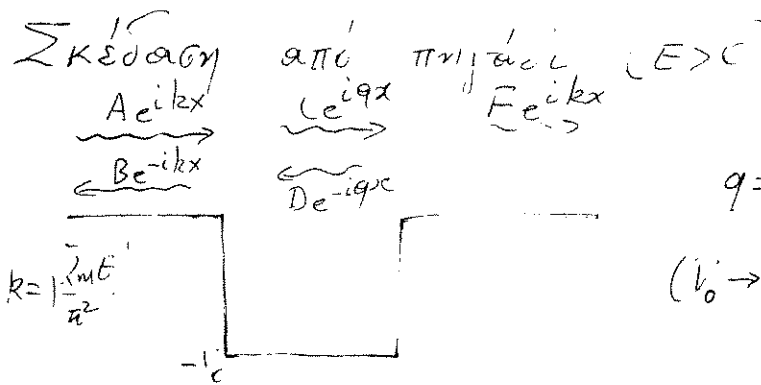
$$\cot \frac{qa}{2} = -\sqrt{\left(\frac{q_0}{q}\right)^2 - 1}$$

$$m\pi < q_0 a < (m+1)\pi$$

$m+1$ - λύσεις

$q_0 a < \pi$
μόνο μία λύση

$$N = \text{Int} \left[\frac{(q_0 a)}{\pi} - 1 \right]$$



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

($V_0 \rightarrow -V_0$ φράγμα $E > V_0$)

είναι σχέση για T όπως για φράγμα, αλλά σιωπαστικά

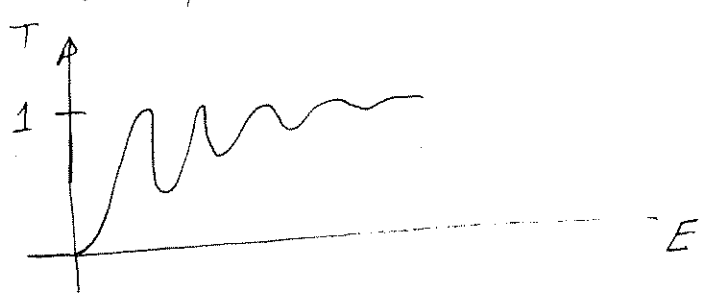
$$T = \frac{1}{1 + \left(\frac{k^2 - q^2}{2kq}\right)^2 \sin^2 qa}$$

$T=1$ για $qa = n\pi \Rightarrow E_m = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} m^2 - V_0$

δηλ. στις τέτοιες καταστάσεις είναι υπερέκκεντο άτομα πηχάσι από το $-V_0$

Παρά $m\lambda_m = 2a$

λ_m - μήκος κύματος στο $0 < x < a$



$T < 1$

Μπορούμε όμως τα Solu με τι αδιάκριτα $E < V_0$? Έτσι δει έχουμε ποσότητες κίμα ($E < V_0$) αλλά αντιστρέφει $E < V_0$ δίνει $E < V_0$ $-ik \rightarrow k$

Αυτο είναι συνάρτη μόνον δι $T \rightarrow \infty$ δίνει κρη προσπίμων ($A=0$) παίρνουμε διεκχόμεν $x \rightarrow \infty, F e^{-kx}$

$k \rightarrow ik$

$$T = \frac{1}{1 - \left(\frac{k^2 + q^2}{2kq}\right)^2 \sin^2 qa}$$

$T \rightarrow \infty$ διαρ μηδενίσει ο παρονομαστής

δηλ. $\frac{(k^2 + q^2)^2}{2kq} \sin^2 qa = 1$

Η σχέση αυτή καταποικία δει $E = E_n$ δηλ. ήγουμε in εόρμω καυόζάσει

οπως $\sin qa = 2 \sin \frac{qa}{2} \cos \frac{qa}{2} = \frac{2 \frac{k}{q}}{1 + \left(\frac{k}{q}\right)^2} = \frac{2kq}{q^2 + k^2}$

δηλ. οι δει $\tan \frac{qa}{2} = \frac{k}{q}$

Σκέδαση σε 1-διάστατα (κυματοπακέτου) ΦΛΥΤΖΑΝΗΣ

Ένα ενοπιόμενο κυματίδιο ορίσεται με ένα κυματοπακέτο

$$\Psi_{\text{WP}}(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk \phi(k) \psi_k(x) e^{-iE_k t/\hbar} \quad (1)$$

όπου ψ_k και E_k ιδιοκαταστάσεις και ιδιοσυμπεριφορές της $H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$ (2)

$$H \psi_k(x) = E_k \psi_k(x) \quad (3)$$

Εάν το ψ_k ικανοποιεί την (3) τότε ως προς η (1) ικανοποιεί

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = H \Psi \quad (4)$$

Εάν $V=0 \Rightarrow \psi_k \rightarrow e^{ikx}$ (5)

Στην (1) η $\phi(k) \sim e^{-\alpha(k-k_0)}$ (6)

οπότε $\Psi \sim e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} e^{-(x-v_g t)^2/4\alpha^2}$ (7)

Για μικρούς χρόνους $\hbar t/m\alpha^2 \ll 1$ ή $\frac{\hbar k_0}{m} t/\alpha \ll k_0 \alpha$ (είναι αμελητέα αντά). $\hbar k_0$ είναι η μέση ορμή, $\omega_0 = \frac{\hbar k_0^2}{2m}$

$$v_g = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} = \frac{\hbar k_0}{m} \quad (8)$$

Η μέγιστη πυκνότητα $|\Psi|^2$ είναι στο $x = v_g t$, και το μέγιστο κινείται με ταχύτητα v_g .

Το πρόβλημα της σκέδασης είναι αχρονο-εξαρτημένο. Αν θεωρήσουμε $t=0$ την "στιγμή" της σκέδασης τότε σε

$t \rightarrow -\infty$ έχουμε ένα προσπίπτον κυματοπακέτο από το $x = -\infty$ που εδώνει προς δεξιά, με ταχύτητα $v_g = \hbar k_0/m$ και κέρνο $v_g t$ προσπίπτον κ.π. $\Rightarrow A e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} e^{-(x-v_g t)^2/4\alpha^2}$ (9)

$t \rightarrow +\infty$ μετά την σκέδαση έχουμε

α) ένα ανακλώμενο κυματοπακέτο $\tau e^{-i(k_0 x + \omega_0 t)} e^{-(x+v_g t)^2/4\alpha^2}$ (10)

κέρνο στο $x_r = -v_g t$, $\langle p \rangle = -\hbar k_0$ και $v = -\frac{\hbar k_0}{m}$ (Προσέδξε διαφέρει από προσπίπτον)

β) διερχόμενο κυματοπακέτο $\tau e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} e^{-(x-v_g t)^2/4\alpha^2}$ (11)

κέρνο στο $x = v_g t$

Τα (α) και (β) βρίσκονται ενισχυμένα σε διαφορετικά σημεία (σε (α) κεντρικά στο $x = -\infty$ και σε β στο $x = +\infty$)

Τα παραπάνω είναι απλώς φράσεις συνθήκες για την κατάσταση $\Psi(x,t)$ που περιγράφει την σκέδαση.

Η $\Psi(x,t)$ απαιτεί την ύπαρξη της (4) με κάποιες συνθήκες στο $t = -\infty$. Δύσκολο πρόβλημα. Αλλά εννοώντας στην φασματοσκοπία μακρινά πεδίου δεν μας χρειάζεται λεπτομερής πληροφορία. Αρκεί να γνωρίζουμε τι γίνεται στο $x = \pm \infty$ όπου έχουμε και τα όργανα μέτρησης.

Εάν τώρα $V(x) \neq 0$ για $|x| < b$ τότε τα $\psi_k(x) \rightarrow D_k e^{\pm i k x}$, $|x| \gg b$ όπου $D_k = |D_k| e^{i \theta_k}$. Έτσι αν μας ενδιαφέρει τι γίνεται στο άπειρο ($\pm \infty$) στην (1) μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την (12). Αυτό σημαίνει ότι και αν ακόμη $V(x) \neq 0$ τα κυματοπακέτα ασυμπτωτικά περιγράφονται με (9-11) με μόνη διαφορά ότι δεν γνωρίζουμε ακόμη τα A, Γ, τ . Σ' αυτά κρύβεται όλη η πληροφορία της σκέδασης.

Συμφωνία με τα παραπάνω (4)
 $x \rightarrow -\infty \quad \Psi \simeq A e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} e^{-(x - v_0 t)^2 / 2 \alpha^2} + \tau e^{i(-k_0 x - \omega_0 t)} e^{-(x + v_0 t)^2 / 2 \alpha^2}$ (13)

$x \rightarrow \infty \quad \Psi \simeq \tau e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} e^{-(x - v_0 t)^2 / 2 \alpha^2}$ (14)

Ενδιάμεσα δεν δίνουμε τίποτα. Να επιβεβαιώσουμε ότι ασυμπτωτικά η Ψ είναι συμφωνη με τις ορισμένες συνθήκες

Έως $x \rightarrow -\infty$ α) $t \rightarrow -\infty$ μόνο το προσπίπτον υπάρχει
 β) $t \rightarrow +\infty$ " " ανακλώμενο "

Έως $x \rightarrow +\infty$ α) $t \rightarrow -\infty$ δεν υπάρχει τίποτα
 β) $t \rightarrow +\infty$ μόνο το διερχόμενο υπάρχει.

Συμ. για $x \rightarrow -\infty, t \rightarrow -\infty \quad e^{-(x - v_0 t)^2 / 2 \alpha^2} \sim 1$
 $x \rightarrow -\infty, t \rightarrow +\infty \quad \simeq 0$

Ας υπολογίσουμε τώρα
 $J^{(x,t)} = \text{Re} \left[\Psi^* \frac{p}{m} \Psi \right], \quad p = -i \hbar \frac{\partial}{\partial x}$ (15)

Δεν μπορούμε να εσ υπολογίσουμε ⁽⁵⁾
 παρ'ότι, αλλά μόνο όπου γνωρίζουμε εσ
 $\Psi(x,t)$ δηλ. για $x \rightarrow \pm\infty$ και $t \rightarrow \pm\infty$

Ετσι, για εσ ρεύμα σε $t = -\infty$
 έχουμε

$$\text{σε } \underline{x = -\infty} \quad J(x \rightarrow -\infty, t \rightarrow -\infty) \simeq \frac{\hbar k_0}{m} |A|^2 \quad \textcircled{1} \quad (16)$$

Σημ. μόνο η δρση εσ $\frac{\partial}{\partial x}$ εσ φέρει κέρμα,
 $e^{i(k_0 x - \omega t)}$ δηλ δρση ανεισφορα,
 ο άλλος όρος είναι εκδευκα
 μικρός.

$$x \rightarrow +\infty \quad J(+\infty, t \rightarrow -\infty) = 0$$

$$\underline{x \rightarrow -\infty} \quad J(x \rightarrow -\infty, t \rightarrow +\infty) \simeq \frac{\hbar k_0}{m} |r|^2 \quad (17)$$

$$x \rightarrow +\infty \quad J(x \rightarrow +\infty, t \rightarrow +\infty) \simeq \frac{\hbar k_0}{m} |t|^2 \quad (18)$$

Ετσι για $t \rightarrow -\infty$ έχουμε εσ προσάπτων
 ρεύμα

$$J_{\text{inc}} = \frac{\hbar k_0}{m} |A|^2$$

και για $t \rightarrow \infty$ έχουμε δύο ρεύματα ⁽⁶⁾
 εσ ανακλώμενο J_r και διαδιδόμενο J_T , ώστε

$$t \rightarrow \infty \quad J = J_r + J_T = \frac{\hbar k_0}{m} (|r|^2 + |t|^2)$$

και από την διατήρηση εσ ρεύματος
 έχουμε $|A|^2 = |r|^2 + |t|^2$

① Εκτός από ένα παράγοντα ο οποίος
 είναι κοινός σε όλους τους όρους.

(5a)

Λεπτομέρειες στον υπολογισμό
της (46)

Στον υπολογισμό του ρεύματος πρέπει να υπολογίσουμε την παράγωγο.

$$-\frac{i\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial x} \psi = -\frac{i\hbar}{m} \int_{-\infty}^{\infty} dk \phi(k) A e^{ikx} e^{-iE_k t} (ik)$$

όπου χρησιμοποιήσαμε την (1) με $\psi = A e^{ikx}$.

Επειδή η $\phi(k) \sim e^{-\alpha(k-k_0)^2}$ είναι στενή γύρω από $k=k_0$, μπορούμε να πάρουμε $ik \approx ik_0$ και να βρούμε δώ από το ολοκλήρωμα. Αυτό δεν μπορούμε να το κάνουμε για την e^{ikx} διότι για $x \rightarrow \infty$ έχουμε ισχυρές ταλαντώσεις με αλλαγές προσήμου. Χρησιμοποιώντας όμως ανάπτυγμα Taylor για τον εκθέτη γύρω από $k=k_0$, καταλήγουμε όπως προηγουμένως σε

$$\frac{\hbar k_0}{m} A \int_{-\infty}^{\infty} dk \phi(k) e^{ikx} e^{-iE_k t} \approx \frac{\hbar k_0}{m} A \bar{\Psi}_{wp}(x,t) \quad \text{για } x \rightarrow \infty$$

(6b)

Επίσης $\psi = A \bar{\Psi}_{wp}(x,t)$

Ετσι

$$J(x \rightarrow \infty, t \rightarrow -\infty) = \frac{\hbar k_0}{m} |A|^2 |\bar{\Psi}_{wp}(x,t)|^2 \equiv J_{inc}$$

Εδώ παραδείξαμε τον ανακλώμενο όρο, διότι για $x \rightarrow -\infty, t \rightarrow -\infty$ στην εκθετική μικρή συνιστώσα.

Παρόμοια, πάρουμε για το ανακλώμενο κύμα παλιό το οποίο ανεισφέρει μόνο στο $x \rightarrow -\infty, t \rightarrow \infty$.

Ετσι $J(x \rightarrow -\infty, t \rightarrow \infty) = -\frac{\hbar k_0}{m} |A|^2 |\bar{\Psi}_{wp}(x,t)|^2$

Το "-" επειδή $\phi(k) \sim e^{-\alpha(k+k_0)^2}$ με μέση ορμή $\langle p \rangle = -\hbar k_0$. Ο τελευταίος παράγοντας είναι ο ίδιος και θα μπορούσε να ενσωματωθεί στο A ή στο Γ αριστερά.

(7)

Βλέπουμε λοιπόν ότι τα ρεύματα πυκνότητας δίνονται από κάποιες σχέσεις πν' περιέχουν τους συντελεστές A, Γ, τ που ορίζονται από τις ασυμπτωτικές μορφές των στάσιμων καταστάσεων ψ_k

και συγκεκριμένα του φέρουτος κυματοδιαστάματος k_0 . Έτσι ανιτά θέλουμε το χρονοεξαρτημένο πρόβλημα σκέδασης με $\Psi(x, t)$ αρκεί να θέλουμε το πρόβλημα των στάσιμων καταστάσεων και μάλιστα μόνο στο $x \rightarrow \pm \infty$.

Ο χρόνος μπαίνει φυσιολογικά από την αρχική εξέλιξη της στάσιμης κατάστασης.

Αρκεί λοιπόν να υπολογίσουμε τα A, Γ, τ που είναι συναρτήσεις της ενέργειας και του δυναμικού $V(x)$.

(8)

Η λύση της στάσιμης κατάστασης σε ενέργεια E_k μιας δίρας ($k_0 \equiv k$)

$$\psi_k(x \rightarrow -\infty) = A e^{ika} + \tau e^{-ika} \quad (19)$$

$$\psi_k(x \rightarrow +\infty) = \tau e^{ika} \quad (20)$$

Σε χρόνο t με $E_k = \hbar \omega(k)$, έχουμε

$$\psi_k(-\infty, t) = A e^{i(kx - \omega t)} + \tau e^{i(-kx - \omega t)} \quad (21a)$$

$$\psi_k(+\infty, t) = \tau e^{i(kx - \omega t)} \quad (21b)$$

Έτσι το $A \dots$ μιας δίρας οδεύον κύμα με ταχύτητα φάσης θετική $\frac{\omega}{k} = v$, και το $\tau e^{i \dots}$ οδεύον κύμα προς αριστερά με ταχύτητα φάσης $-v$

Αν τώρα υπολογίσουμε το ρεύμα πυκνότητας για ψ_k

$$j_k = \text{Re} \left(\psi_k^* \frac{p}{m} \psi_k \right) \quad (22)$$

$$j_k(x \rightarrow -\infty) = \frac{\hbar k}{m} (|A|^2 - |\Gamma|^2) \quad (23a)$$

$$j_k(x \rightarrow +\infty) = \frac{\hbar k}{m} |\tau|^2 \quad (23b)$$

Από τις (16) και (17) μπορούμε να ερμηνεύσουμε την 23α ως

$$f_{inc} - f_{ref} \quad (24)$$

και λόγω της διατήρησης του ρεύματος πιθανότητας, από την (18) και (23β) έχουμε

$$f_{inc} - f_{ref} = f_{tr} \quad (25)$$

$$\frac{1}{\eta} \quad 1 - R = T \quad (26)$$

$$\text{οπότε (2)} \quad R = \frac{f_{ref}}{f_{inc}} = \frac{|\Gamma|^2}{|A|^2} \quad (27a)$$

$$T = \frac{f_{tr}}{f_{inc}} = \frac{|\tau|^2}{|A|^2} \quad (27b)$$

Εδώ να παρατηρήσουμε ότι για την ακέδαση από ένα φράγμα ύψους μπορούμε να λύσουμε αναλυτικά για τα τ και Γ . Για γενικό δυναμικό $V(x)$ είναι χρήσιμο να ορίσουμε ένα προσεγγιστικό τρόπο για τον υπολογισμό

των τ και Γ . Για τον σκοπό αυτό θα δώσουμε τον πίνακα ακέδασης ο οποίος δίνει όλες τις πληροφορίες για την ακέδαση από ένα δυναμικό, όταν η πρόσπτωση είναι είτε από αριστερά είτε από δεξιά. Ο μόνος περιορισμός για τον ορισμό του πίνακα ακέδασης είναι το δυναμικό να όρια $x \rightarrow -\infty$ και $x \rightarrow \infty$ να πάρει σταθερές τιμές, οι οποίες δεν είναι απαραίτητο να είναι ίδιες.

(2) Το υψος του δυναμικού είναι ίδιο στο $x = -\infty$ και $+\infty$. Εάν ήταν διαφορετικό, τότε η ταχύτητα θα είναι διαφορετική στα δύο άκρα, και η (27b) δεν θα προσαρμόζεται.

Ροή και πιθανότητα

9a

Κλασικά η ροή από μία πηγή σφαιρικών ορίσεων ως ρv όπου ρ η πυκνότητα των σωματιδίων (σχήν 1-δ ανά μονάδα μήκους) και v η ταχύτητα των σωματιδίων. Σχήν κλασικοποιημένη μιάμε για ροή πυκνότητας πιθανότητας η οποία ορίζεται ως

$$J = \text{Re}(\psi^* v \psi)$$

όπου $v = -\frac{i\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial x}$ και J είναι η γρομιά

μας πυκνότητα ρεύματος πιθανότητας. Για το προσπίπτον κύμα πακέτο.

$$J_{inc} = v_0 |A|^2 |\psi_{inc}|^2$$

όπου $v_0 = \hbar k_0 / m$.

Εάν δε υπολογίσουμε την οδική ροή πρέπει να ολοκληρώσουμε ως προς όλο τον χώρο και έχουμε

1. Σε 1-δ ο αριθμός των σωματιδίων σε χρόνο dt πού περνά από ένα σημείο x είναι ο αριθμός των σωματιδίων σε μήκος $v dt$ πριν από το x , δηλ $\rho v dt$, και η ροή (αριθμός ανά μονάδα χρόνου) είναι ρv . Σε 3-δ πάλι, έχουμε ρv , αλλά ρ είναι η πυκνότητα ανά μονάδα όγκου.

9b

$$J_{inc, tot} = v_0 |A|^2$$

Ετσι μπορούμε να ερμηνεύσουμε το $|A|^2$ σαν τον αριθμό των προσπίπτοντων σωματιδίων.

Η πιθανότητα να λάβει ανάθεση ορίζεται ως,

$$\frac{|J_{refl}|}{|J_{inc}|}$$

$$\frac{|J_{refl}|}{|J_{inc}|}$$

δηλ. ροή είναι ο αριθμός των σωματιδίων ανά μονάδα χρόνου πού περνά ένα σημείο, και η οδική ροή είναι το ολοκλήρωμα στον χώρο της σφαιρικής ροής.

Πίνακας Μεταφοράς

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

2ης τάξης Δ.Ε. $\Rightarrow \psi_1(x) \neq \psi_2(x)$ γραμμικά ανεξάρτητες

$$\psi(x) = c_1 \psi_1(x) + c_2 \psi_2(x) \quad \text{γραμμική Δ.Ε.}$$

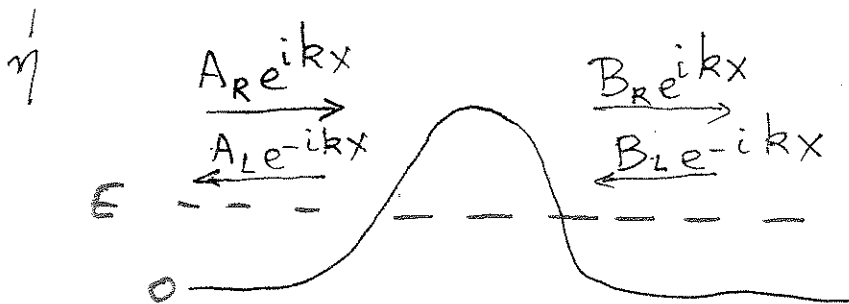
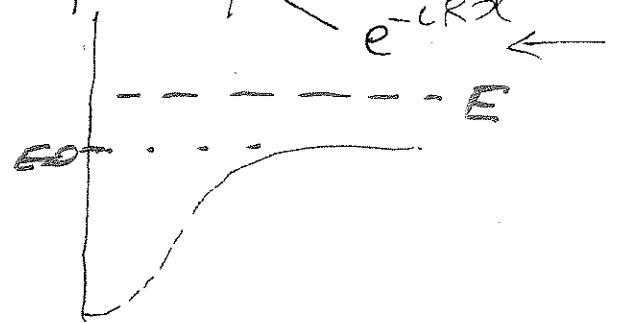
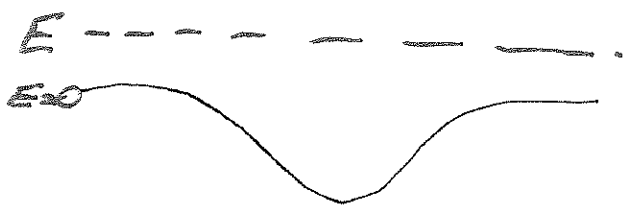
Επιορισμένη κυματοσυνάρτηση

$$\Rightarrow \psi(-\infty) = 0 \quad \& \quad \psi(+\infty) = 0 \Rightarrow c_1, c_2, E_n$$

+ κανονικοποίηση

Πρόβλημα εκέδρασης διαφορικές οριακές συνθήκες. $V(x)$ επιορισμένο. \Rightarrow

$|x| \rightarrow \infty$ ομαλίδιο ελεύθερο $\psi \begin{cases} e^{ikx} \rightarrow \\ e^{-ikx} \leftarrow \end{cases}$



$$\begin{pmatrix} A_R \\ A_L \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} B_R \\ B_L \end{pmatrix}$$

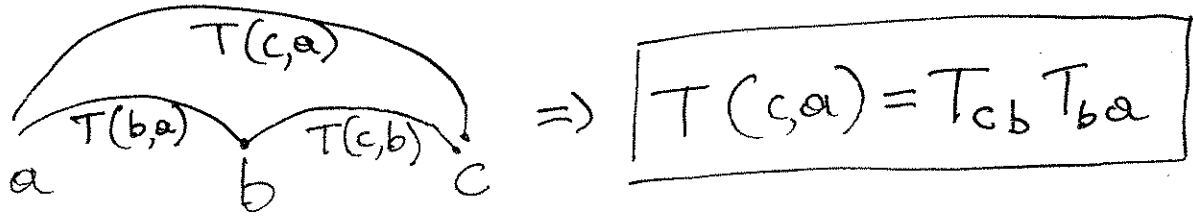
$$\psi(x) \simeq A_R e^{ikx} + A_L e^{-ikx} \quad x \rightarrow -\infty$$

$$\psi(x) \simeq B_R e^{-ikx} + B_L e^{-ikx} \quad x \rightarrow \infty$$

πίνακας μεταφοράς

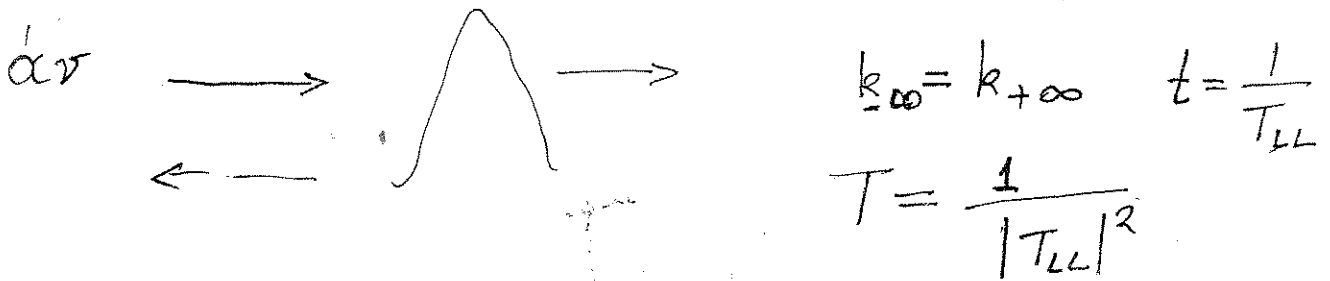
$$\begin{pmatrix} B_R \\ B_L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{RR} & T_{RL} \\ T_{LR} & T_{LL} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_R \\ A_L \end{pmatrix}$$

Ο πίνακας μεταφοράς εξαρτάται από
 την επιλογή των συναρτήσεων βάσης.
 π.α. συνδιασμούς αυτών



Ισοδύναμα $T' \neq T$

$$\begin{pmatrix} \psi(b) \\ \psi'(b) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T'_{00} & T'_{01} \\ T'_{10} & T'_{11} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi(a) \\ \psi'(a) \end{pmatrix}$$

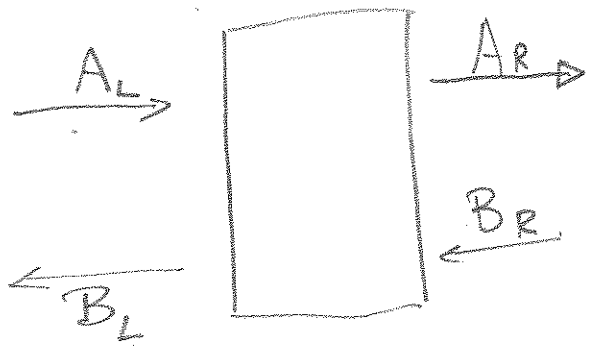


Αν $k_{-\infty} \neq k_{+\infty}$ $T = \frac{k_{-\infty}}{k_{+\infty}} \frac{1}{|T_{LL}|^2}$

Εύρεση Πίνακα μεταφοράς \Rightarrow λύση Schrödinger

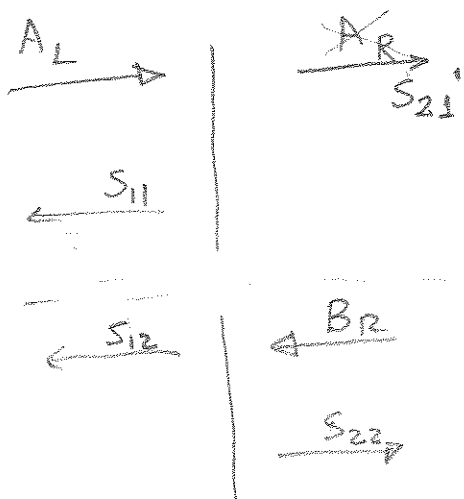
$$\det(T) = 1$$

Σκέδαση Πινακός Σκέδασης και Μεταφοράς



$$\begin{bmatrix} B_L \\ A_R \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix}}_{\text{πίνακας σκέδασης}} \begin{pmatrix} A_L \\ B_R \end{pmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} A_R \\ B_R \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} T_{aa} & T_{ab} \\ T_{ba} & T_{bb} \end{bmatrix}}_{\text{πίνακας μεταφοράς}} \begin{pmatrix} A_L \\ B_L \end{pmatrix}$$



$$\begin{cases} A_R = T_{aa} A_L + T_{ab} B_L & (1) \\ B_R = T_{ba} A_L + T_{bb} B_L & (2) \end{cases}$$

$$\begin{cases} B_L = S_{11} A_L + S_{12} B_R & (3) \\ A_R = S_{21} A_L + S_{22} B_R & (4) \end{cases}$$

Απαλείφουμε B_L μεταξύ (1) & (3)

$$(1) \quad A_R = (T_{aa} + T_{ab} S_{11}) A_L + T_{ab} S_{12} B_R \equiv S_{21} A_L + S_{22} B_R$$

⇓

$$\begin{cases} S_{21} = T_{aa} + T_{ab} S_{11} & (5) \\ S_{22} = T_{ab} S_{12} & (6) \end{cases}$$

Αντικαθιστούμε στη (3) στη (2) απαλείφοντας
 το B_L

$$(2)' \quad B_R = T_{ba} A_L + T_{bb} S_{11} A_L + T_{bb} S_{12} B_R.$$

$$\begin{cases} B_R \\ A_L \\ B_R \end{cases}$$

Επειδή ισχύει για κάθε A_L & B_R

$$\begin{cases} 1 = T_{bb} S_{12} & (7) \end{cases}$$

$$\begin{cases} 0 = T_{ba} + T_{bb} S_{11} & (8) \end{cases}$$

$$T = \begin{bmatrix} S_{21} - S_{22} S_{12}^{-1} S_{11} & S_{22} S_{12}^{-1} \\ -S_{12}^{-1} S_{11} & S_{12}^{-1} \end{bmatrix}$$

και

$$S = \begin{bmatrix} -T_{bb}^{-1} T_{ba} & T_{bb}^{-1} \\ T_{aa} - T_{ab} T_{bb}^{-1} T_{ba} & T_{ab} T_{bb}^{-1} \end{bmatrix}$$

Δέσμες παρασώβου + Συντονισμοί

$V = 0 \text{ eV}$

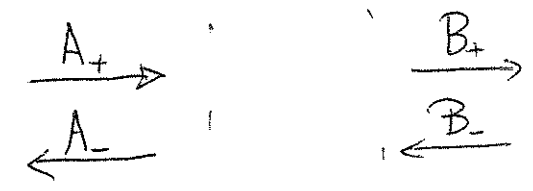


$V = -20 \text{ eV}$
 $L = 8 \text{ \AA}$

$T_{11} B^+ = 0$
 $A^- = T_{21} B^+$

$E < 0$

$A^+ = 0, B^- = 0$



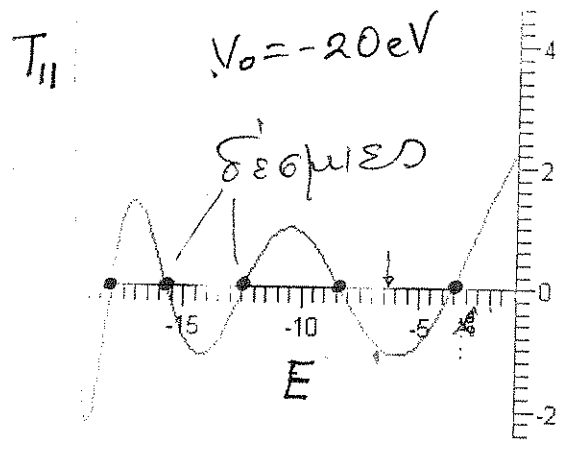
$$\begin{pmatrix} A^+ \\ A^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B^+ \\ B^- \end{pmatrix}$$

πραγματικό

$$T_{11} = \cos kL + \frac{1}{2} \left(\frac{k_0}{k} - \frac{k}{k_0} \right) \sin kL$$

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

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (-E)} \quad V_0 < E < 0$$



$V_0 \rightarrow -\infty \Rightarrow kL = n\pi$

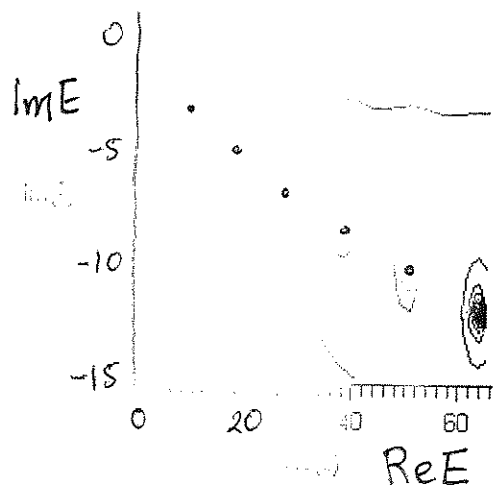
$E > 0$

μηδενισμοί $T_{11} \Rightarrow$ δέσμες
 \Rightarrow πόλοι του S

$$T_{11} = \cos kL - \frac{i}{2} \left(\frac{k'}{k} + \frac{k}{k'} \right) \sin kL$$

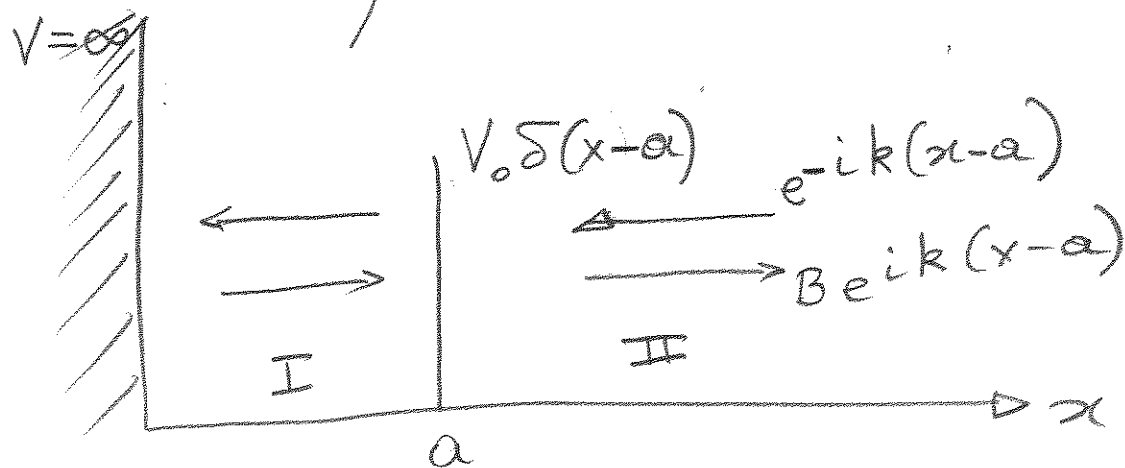
T_{11} - μιγαδικό $E > 0$

$$k' = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}$$



$E > 0$ T_{11} μιγαδικό
μηδενίζεται για μιγαδική E

Συννοτιομοί



$$x > 0 \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + V_0 \delta(x-a) = E \psi$$

$$\psi(0) = 0$$

Λύση

$$0 < x < a \quad \psi_{\text{I}}(x) = C e^{ikx} + D e^{-ikx}, \quad \psi(0) = 0$$

$$= C \sin kx \quad D = -C$$

$$x > a \quad \psi_{\text{II}}(x) = e^{-ik(x-a)} + B e^{ik(x-a)}$$

εισάγουμε φάση για να απο-
φύγουμε εκδερικά όταν $x=a$.

$$\text{συνέχεια } \psi_+(a) = \psi_-(a) \Rightarrow C \sin ka = 1 + B$$

$$\psi'_+(a) - \psi'_-(a) = \frac{V_0 2m}{\hbar^2} \psi(a) \Rightarrow ik(B-1) - Ck \cos ka = k_0(1+B)$$

$$k_0 = \frac{V_0 2m}{\hbar^2}$$

$$C = \frac{1+B}{\sin ka} \quad ik(B-1) - \frac{k}{k_0}(1+B) \frac{\cos ka}{\sin ka} = k_0(1+B)$$

$$B \left[\sin ka \left(1 - \frac{ik}{k_0}\right) + \frac{k}{k_0} \cos ka \right] = \frac{1}{\sin ka} \left(1 + \frac{ik}{k_0}\right) - \frac{k}{k_0} \cos ka$$

$$B \left[\sin ka + \frac{k}{k_0} e^{ika} \right] = - \left[\sin ka + \frac{k}{k_0} e^{-ika} \right]$$

$$B = - \frac{\sin ka + \frac{k}{k_0} e^{ika}}{\sin ka + \frac{k}{k_0} e^{-ika}}$$

$$-i \frac{k}{k_0} \sin ka + \frac{k}{k_0} \cos ka = \frac{k}{k_0} e^{-ika}$$

$$-i \frac{k}{k_0} \sin ka - \frac{k}{k_0} \cos ka = - \frac{k}{k_0} e^{ika}$$

$$|B| = 1 \quad B = - e^{2i\delta}$$

δ-δ-δ

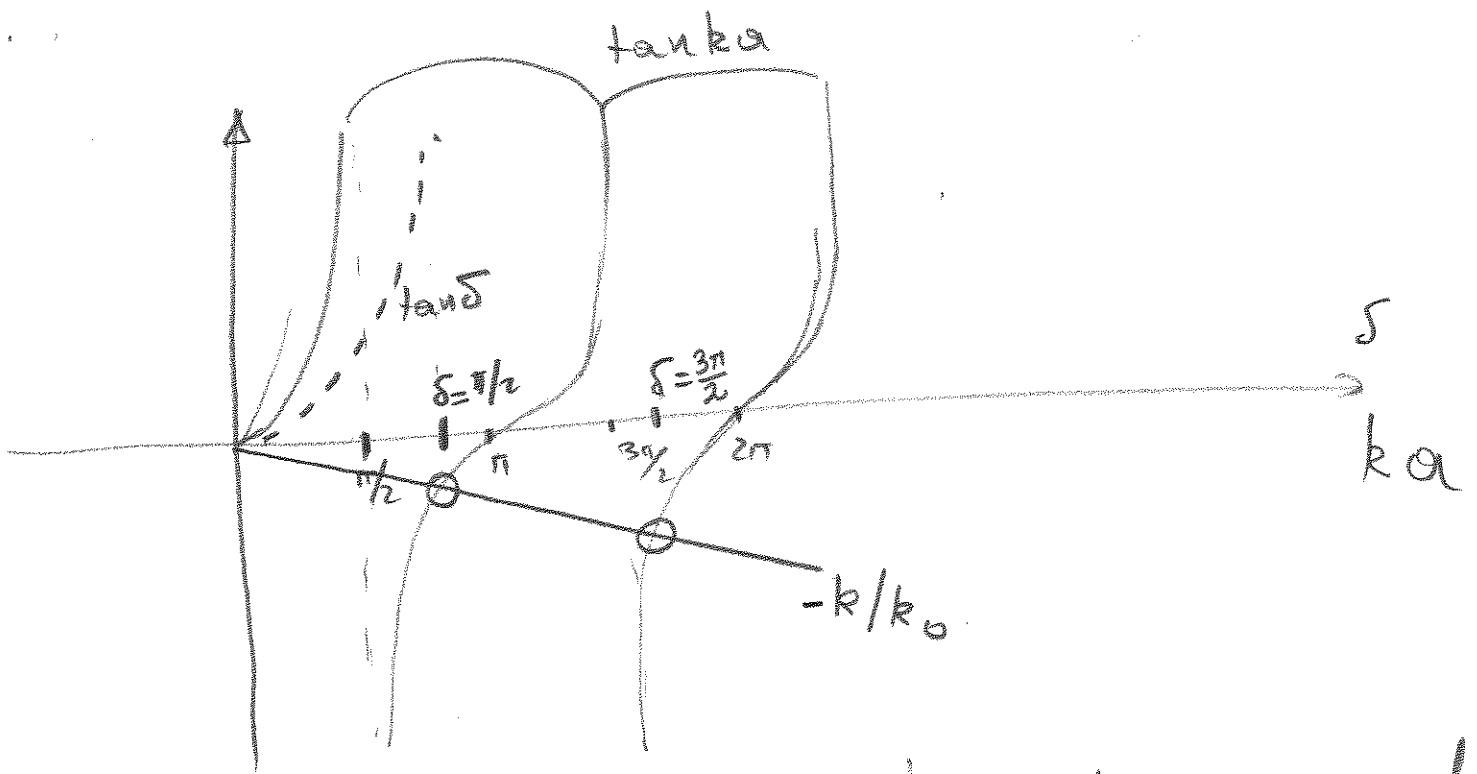
$$B = - \frac{\tan ka + \frac{k}{k_0} + i \left(\frac{k}{k_0} \right) \tan ka}{\tan ka + \frac{k}{k_0} - i \left(\frac{k}{k_0} \right) \tan ka}$$

$$\tan \delta = \frac{\tan ka}{1 + \frac{k_0}{k} \tan ka}$$

$$B = 1 \quad \text{à} \quad e^{2i\delta} = -1 \Rightarrow 2\delta = \pi(2n+1)$$

$$\delta = \frac{\pi}{2}(2n+1) \Rightarrow \tan \delta = \infty \Rightarrow 1 + \frac{k_0}{k} \tan ka = 0$$

$$\tan ka = - \frac{k}{k_0}$$



Στά σημεία συνροτισμού απόρριξη μεγαλύ-
της φάσης δ γύρω από $\delta_n = \frac{\pi}{2}(2n+1)$

$$a \rightarrow 0 \quad \delta' = 0$$

$$k_0 \rightarrow \infty \quad ka \approx n\pi \quad (\text{σταθερών δεσφίσις})$$

$$\Rightarrow \delta \approx n\pi \Rightarrow B \approx -1$$

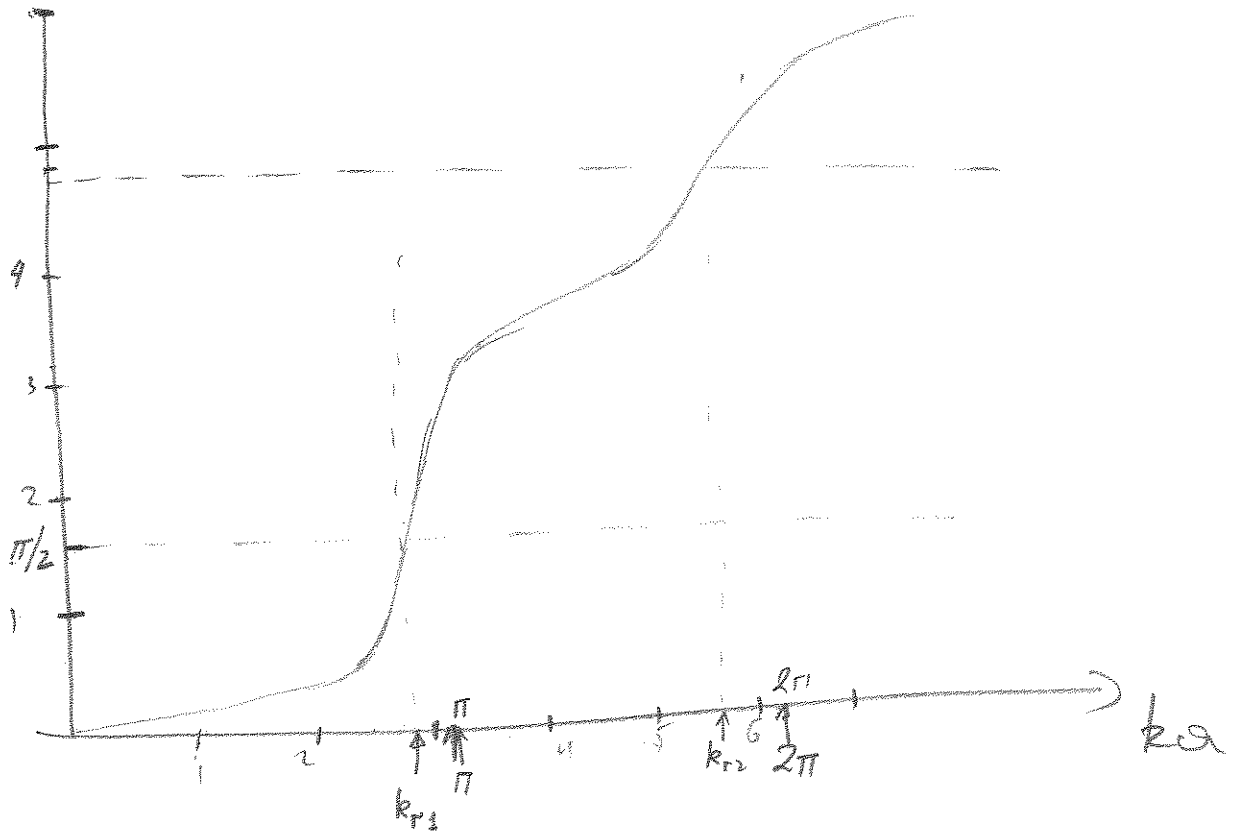
εξωτερικό

$$C \sin ka = 1 + B \approx 0$$

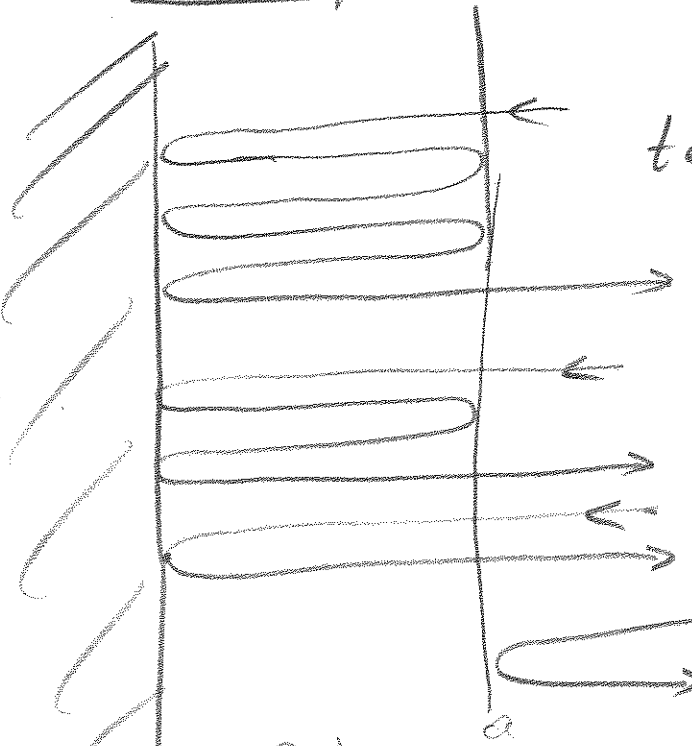
$$C \neq 0 \text{ αν } ka \approx n\pi$$

Ετσι το προσπίπτον κύμα ανακλύ-
εται πλήρως, ενώ για $ka \approx n\pi$
έχουμε δεσφίσις καταστροφική.

$\delta(ka)$



2ος τρόπος



$$te^{ika}(-1)e^{ika}re^{ika}(-1)e^{ika}re^{ika}(-1)e^{ika}t$$

$$(-1)e^{ika}t$$

$$te^{ika}(-1)e^{ika}re^{ika}(-1)e^{ika}t$$

$$te^{ika}(-1)e^{ika}t$$

r

Προσδιορίζουμε τα πλάτη στο $x=a^+$ για όλους τις διαδρομές
 Στον χώρο $r_w = -1$

$$\Gamma_{tot} = r - t^2 e^{2ika} + t^2 r e^{4ika} - t r^2 e^{6ika} + \dots$$

$$\Gamma_{tot} = r - \frac{t^2 e^{2ika}}{1 + r e^{2ika}}$$

$$= \frac{r + (r^2 - t^2) e^{2ika}}{1 + r e^{2ika}}$$

$$= \frac{z - (1+z) e^{2ika}}{1 - z + z e^{2ika}}$$

$$r = \frac{z}{1-z} \quad \left| \quad z = \frac{mV_0/h}{ik}$$

$$t = \frac{1}{1-z} \quad \left| \quad = \frac{k_0}{2ik}$$

$$r^2 - t^2 = \frac{z^2}{(1-z)^2} = -\frac{1+z}{1-z}$$

= -500 - επίπεδη σε 1/2

$$R = |\Gamma_{tot}|^2 = |B|^2 = 1$$

Παρομοιωτής.

$$e^{ika} \left[(1-z) e^{-ika} + z e^{ika} \right]$$

$$\left[\cos ka + i(z-1) \sin ka \right]$$

$$z = \frac{k_0}{2ik}$$

$$2iz \sin ka - i \sin ka + \cos ka$$

$$2iz \tan ka - i \tan ka + 1$$

$$e^{ika} \cos \frac{k_0}{k} \left[\tan ka + \frac{k}{k_0} - i \frac{k}{k_0} \tan ka \right]$$

Αντιπροσχηματισμός

$$e^{ika} \left[z e^{-ika} - (1+z) e^{ika} \right]$$

$$\left[-2z i \sin ka - \cos ka - i \sin ka \right]$$

$$-e^{-ika} \frac{k_0}{k} \cos ka \left[\tan ka + \frac{k}{k_0} + i \frac{k}{k_0} \tan ka \right]$$

Νόμος Σίρεσης στο Β

Πίνακας Σκέδασης

Για την σκέδαση σωματιδίων ενέργειας $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ από ενοποιημένο δυναμικό $V(x)$ αρκεί να μελετήσουμε ασυμπτωτικά την σχέση καύωσης $\psi_k(x)$ με ενέργεια E_k , που γράφεται ως

$$(1a) \quad \psi_k(x) \underset{x \rightarrow -\infty}{=} e^{ikx} + S_{11} e^{-ikx}, \quad k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_{-\infty})}$$

$$(1b) \quad \underset{x \rightarrow +\infty}{=} S_{12} \sqrt{\frac{k'}{k}} e^{ik'x}, \quad k' = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_{+\infty})}$$

όπου για να περιλάβουμε και την περίπτωση $k' \neq k$ (δηλ. $V(+\infty) \neq V(-\infty)$) ορίσαμε τα S_{11} και S_{12} αντί των Γ και τ . Απομένουν δύο στοιχεία ενός 2×2 πίνακα S που ονομάζεται πίνακας σκέδασης. Τα άλλα δύο στοιχεία S_{22} και S_{21} συνδέονται με διαφορετικό πρόβλημα σκέδασης, όπου έχουμε προσπίπτον κύμα από τα δεξιά. Οι οριακές συνθήκες γι' αυτό το πρόβλημα είναι

$$\psi_k \underset{x \rightarrow +\infty}{=} e^{-ik'x} + S_{22} e^{ik'x} \quad (2a)$$

$$\underset{x \rightarrow -\infty}{=} S_{21} \sqrt{\frac{k'}{k}} e^{-ikx}. \quad (2b)$$

Ο δε πίνακας σκέδασης

$$S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \quad (3)$$

έχει μερικές σημαντικές ιδιότητες. Είναι ένας μοναδιαίος πίνακας δηλ. $SS^+ = S^+S = \mathbb{1}$. Αυτό σημαίνει

$$\text{δηλ.} \quad |S_{11}|^2 + |S_{12}|^2 = 1 \quad (4a)$$

$$\text{δηλ.} \quad |S_{21}|^2 + |S_{22}|^2 = 1 \quad (4b)$$

που συμφωνεί με τις σχέσεις για την διατήρηση του ρεύματος, πυκνότητας. Τώρα γίνεται κατανοητό γιατί θεωρήσαμε ως παράγοντα $\sqrt{k'/k}$ στην (1). Έχουμε λοιπόν για το ρεύμα

$$j(x \rightarrow -\infty) = \frac{\hbar k}{m} (1 - |S_{11}|^2) \quad (5a)$$

$$j(x \rightarrow +\infty) = \frac{\hbar k'}{m} |S_{12}|^2 \quad (5b)$$

Από τις οποίες παίρνει η (4). Η
 ιδιότητα της μοναδιαότητας του S είναι
 συνάρτηση με την εξίσωση συνέχειας

$$\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0. \quad (6)$$

Εάν $\psi = \psi_k(x) e^{-iEt/\hbar}$ τότε η $|\psi|^2$ είναι
 ανεξάρτητη του χρόνου και η (6) γίνεται
 $\partial j / \partial x = 0$ που σημαίνει ότι η j είναι
 σταθερή. Έτσι αρκεί να κεντράσουμε στο
 $x = -\infty$ και $+\infty$ για το j και να εστιά-
 σουμε τα αποτελέσματα. Το ίδιο ισχύει και
 για την $\psi_k(x)$.

Για την μοναδιαότητα πρέπει να
 δούμε επίσης ότι $S_{11} \cdot S_{21}^* + S_{12} S_{22}^* = 0. \quad (7)$

Αν θεωρήσουμε το σωματίο $\langle \psi_k | \psi_k \rangle$
 και παραγωγίσουμε ως προς τον χρόνο
 έχουμε

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \psi_k | \psi_k \rangle = \frac{\partial j_{kk}}{\partial x} \quad (8)$$

όπου η γενικευμένη ροή
 $j_{kk} = \text{Re}(\psi_k^* v \psi_k)$ (9)

Προσέγγιση Born

Εάν το V(x) είναι "μικρό" (και ενοχλητικό)
 το σωματίο του S-πλάκα έχουμε

$$S_{11} = -\frac{i}{2k} \int_{-\infty}^{\infty} e^{2ika'} \frac{2m}{\hbar^2} V(x') dx' \quad (1)$$

$$S_{12} = 1 - \frac{i}{2k} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2m}{\hbar^2} V(x') dx' \quad (2)$$

Ο τρόπος να ερμηνεύσουμε π.χ.
 το S₁₁ είναι ότι το δυναμικό V(x)
 δημιουργεί μεταβάσεις ανάμεσα στο
 προσπίπτον κύμα e^{ika} και το ανα-
 κλώμενο στην κατεύθυνση e^{-ika} δηλ. S₁₁
 $\sim \langle -k | V(x) | k \rangle \quad (3)$

Έτσι η πιθανότητα ανάκλασης είναι

$$P_{11} = |S_{11}|^2 = \left(\frac{m}{\hbar k}\right)^2 \left| \int_{-\infty}^{\infty} dx' e^{2ika'} V(x') \right|^2 \quad (4)$$

όπου $p = \hbar k$ η ορμή.

Το ίδιο αποτέλεσμα παίρνει αν
 χρησιμοποιήσουμε τον άρυσό κανόνα
 Fermi, με ρυθμό

$$W_{11} = \frac{2m_0}{\hbar} (-k) \left| \langle -k | V(x) | k \rangle \right|^2 \quad (5)$$

όπου $\rho = \frac{m}{2\pi\hbar^2}$ είναι η πυκνότητα καταστάσεων σε μια διάσταση για την ελεύθερη κατάσταση με ορμή $\hbar k$.

Ο ρυθμός W_{11} είναι ίσος με την πιθανότητα P_{1L} επί της ροής ανά μονάδα μήκους που είναι $v = \frac{P}{m}$.

2. Εδώ χρησιμοποιήσαμε $\frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx}$ για την κανονικοποιημένη κατάσταση με $L=1$

$$2. \text{ Σελ } 1-5 \quad \rho(E) \sim E^{-1/2} \sim 1/P$$

Δέσμες παρασώβου + Συντονισμοί

$V=0\text{eV}$

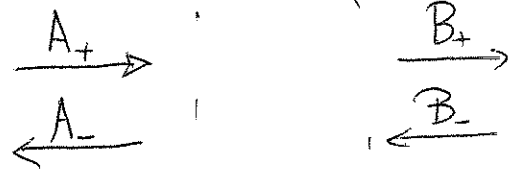
$\kappa \quad \kappa \quad \kappa$

$V=-20\text{eV}$
 $L=8\text{\AA}$

$E < 0$

$A^+ = 0, B^- = 0$

$T_{11} B^+ = 0$
 $A^- = T_{21} B^+$



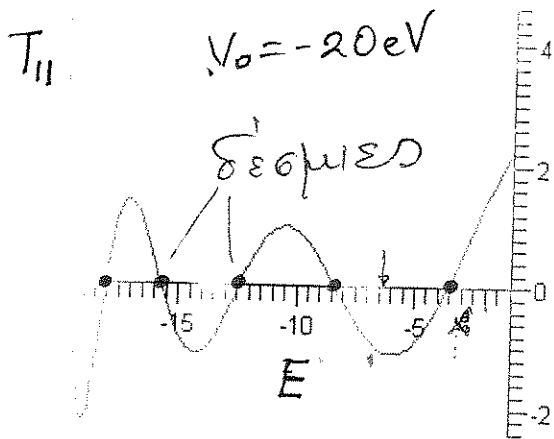
$$\begin{pmatrix} A^+ \\ A^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B^+ \\ B^- \end{pmatrix}$$

πραγματικο

$$T_{11} = \cos kL + \frac{1}{2} \left(\frac{k_0}{k} - \frac{k}{k_0} \right) \sin kL$$

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

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (-E)} \quad V_0 < E < 0$$



$V_0 \rightarrow -\infty \Rightarrow kL = n\pi$

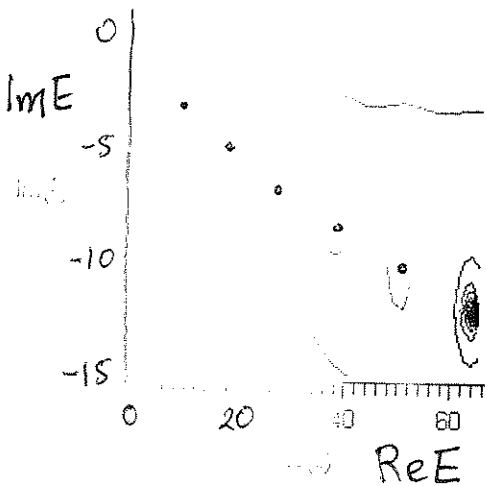
μηδενισμοί $T_{11} \Rightarrow$ δέσμες
 \Rightarrow πόλοι του S

$E > 0$

$$T_{11} = \cos kL - \frac{i}{2} \left(\frac{k'}{k} + \frac{k}{k'} \right) \sin kL$$

T_{11} - μιγαδικό $E > 0$

$$k' = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}$$



$E > 0$ T_{11} μιγαδικό
μηδενίζεται για μιγαδική E