

KAPITTEL 4: LØSNINGER AV 1D TIDSAVHENGIG SL

Løsninga

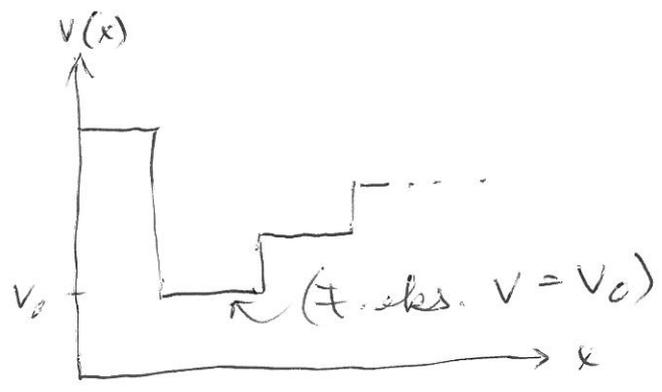
$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + V(x) \psi = E \psi} \quad (4.1)$$

har anvendelse f. eks. i elektronrør og halvleder-
heterostruktur.

Vi skal se på både bundne og ubundne løsninger,
samt også innfallende partikler som vil reflekteres fra
eller trenge gjennom potensialvegger.
Det sistnevnte er tunnelfektet.

4.1 Ubundne tilstander, spredning og tunnelling

Betrakt her stykkevis konstante potensialer:



vi kan ha

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + V_0 \psi = E \psi$$

eller:

$$\boxed{\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \psi = 0} \quad (4.2)$$

hvis

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + A y = 0 \quad (4.3)$$

så

$$y = C e^{mx}$$

$$\frac{d^2 y}{dx^2} = C m^2 e^{mx}$$

$$m^2 C e^{mx} + A C e^{mx} = 0 \Rightarrow m = \pm \sqrt{-A}$$

Generell løsning:

$$\boxed{y = C_1 e^{\sqrt{-A} x} + C_2 e^{-\sqrt{-A} x}} \quad (4.4)$$

hvis $A < 0$, sum av positive og negative
eksponensialfunksjoner.

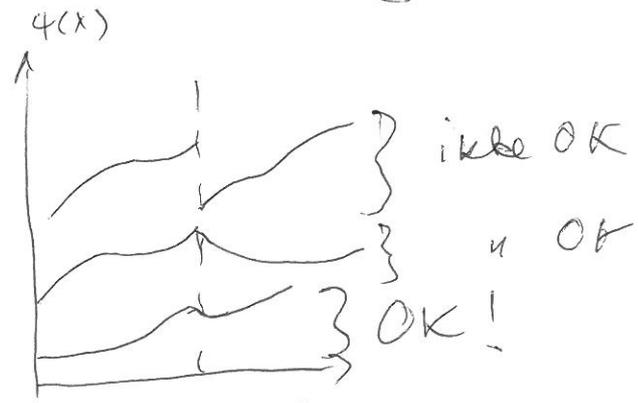
Men hvis $A > 0$:

$$\boxed{y = C_1 e^{i\sqrt{A} x} + C_2 e^{-i\sqrt{A} x}} \quad (4.5)$$

$$= D_1 \cos(\sqrt{A} x) + D_2 \sin(\sqrt{A} x) \quad (4.6)$$

Disse stykkevis konstante potensialer:

Både ψ og $\frac{d\psi}{dx}$ må være kontinuerlige



Merk at den generelle løsningen i $V=0$ - tilfellet er en sum av bølger i alle retninger!

$$\psi = C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx}$$

$$= C_1 e^{i(\sqrt{2mE}/\hbar)x} + C_2 e^{-i(\sqrt{2mE}/\hbar)x} \quad (A = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar})$$

$$\Psi(x,t) = \psi(x) e^{-iEt/\hbar} \quad (E = \hbar\omega)$$

$$= \underbrace{C_1 e^{i(kx - \omega t)}}_{\text{høyre-løpende}} + \underbrace{C_2 e^{i(-kx - \omega t)}}_{\text{venstre-løpende}}$$

se løsning (3.30)

De to bidragene er hver for seg impuls egenfunksjoner men summen ($C_1 \neq 0 \wedge C_2 \neq 0$) er ikke det!

(Se oppgave 4.2)

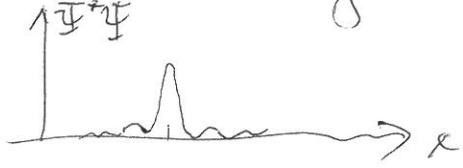
Hva med posisjonen?
Betrakt høyre-løpende:

$$\Psi(x,t) = C_1 e^{i(kx - \omega t)}$$

$$\Psi^* \Psi = C_1^* C_1 \quad \text{posisjonsuavhengig!}$$

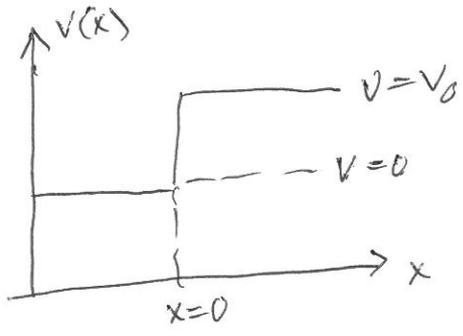
Samme sjanse til å finne partikkelen overalt i rommet!!

Uprobsis, en partikkel vil bli representert ved en sum av alle bølger mellom $k=0$ og $k=k_0$ (Fourier) og man får en ølgepakett.



Spredning fra trin-potensial

Betrakt dette: (Partikkel inn fra venstre)



Ydeliser:
La ψ ene være egenfunksjoner for impuls.

Klassisk: (E inkomme energi)

$$E > V_0 \Rightarrow$$

$$p_1 = \sqrt{2mE}$$

$$p_2 = \sqrt{2m(E - V_0)}$$

Kvantemekaniske bølger:

$$k_1 = \frac{p_1}{\hbar} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$k_2 = \frac{p_2}{\hbar} = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$$

Tilfellet $E > V_0$

Her har vi

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi = 0 \quad (x < 0) \Rightarrow \psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x} \quad \begin{matrix} (4.10) \\ (4.12) \end{matrix}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \psi = 0 \quad (x > 0) \Rightarrow \psi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x} \quad \begin{matrix} (4.11) \\ (4.13) \end{matrix}$$

For å få full bølgefunksjon i mult med $e^{-iE\psi/\hbar}$ (som vi har sett)

da er $B_2 = 0$

siden ingen venstre-løpende bølge til høyre for spangot!

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \Rightarrow A_1 + B_1 = A_2 \quad (4.17)$$

$$\frac{d\psi_1(0)}{dx} = \frac{d\psi_2(0)}{dx} \Rightarrow ik_1 A_1 - ik_1 B_1 = ik_2 A_2 \quad (4.18)$$

So løsninger, tre uløste:

$$A_1 = \frac{1}{2} A_2 \left(1 + \frac{k_2}{k_1} \right) \quad (4.19)$$

$$B_1 = \frac{1}{2} A_2 \left(1 - \frac{k_2}{k_1} \right) \quad (4.20)$$

Eksempel 4.1

Når er trimpunktionspotensialet i ~~det klassiske~~ kvante-regimet?

Anta elektron, akselerert over 100 V :

$$E = e\phi$$

$$= 1.6 \times 10^{-19} \times 10 \text{ C} \times \text{V}$$

$$= 1.6 \times 10^{-17} \text{ J}$$

$$\lambda = \frac{h\nu}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}}$$

$$= \frac{6.6 \times 10^{-34}}{\sqrt{2 \times 9.1 \times 10^{-31} \times 1.6 \times 10^{-17}}} \text{ m} = \frac{1.2 \times 10^{-10} \text{ m}}{\text{(omtrent en atomradius)}}$$

Trimpbedden må være mye større enn dette for at man skal være helt og holdent i det klassiske regimet.

praksis: Kvanteeffekter i trimpotensialer ser man bare på atom- og kjernemåler.

Tilfellet $E < V_0$

Omtrent identiske regnetrim, som vi tar summarisk: vi setter

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (\text{som før})$$

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad (\text{annen rekkefølge})$$

Løsningen for $x \geq 0$ blir forskjellig:

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x} \quad (x < 0)$$

$$\psi_2(x) = A_2 e^{k_2 x} + B_2 e^{-k_2 x} \quad (x \geq 0) \quad (\text{ombyttet rekkefølge})$$

Vi ha

$$A_2 = 0$$

så ikke løsninga "eksploderer" for $x \rightarrow \infty$.

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \Rightarrow A_1 + B_1 = B_2$$

$$\frac{d\psi_1(0)}{dx} = \frac{d\psi_2(0)}{dx} \Rightarrow ik_1 A_1 - ik_1 B_1 = -k_2 B_2$$

Løs og få:

$$A_1 = \frac{1}{2} B_2 \left(1 + i \frac{k_2}{k_1} \right)$$

$$B_1 = \frac{1}{2} B_2 \left(1 - i \frac{k_2}{k_1} \right)$$

Full løsning altså

$$\psi_1(x) = \frac{1}{2} B_2 \left(1 + i \frac{k_2}{k_1} \right) e^{i k_1 x} + \frac{1}{2} B_2 \left(1 - i \frac{k_2}{k_1} \right) e^{-i k_1 x}, \quad x < 0$$

$$\psi_2(x) = B_2 e^{-k_2 x}, \quad x \geq 0$$

Refleksjons sannsynlighet:

$$R = \frac{B_1 + B_1}{A_1 + A_1} = \frac{\left(\frac{1}{2} B_2 \right)^2 \left(1 + i \frac{k_2}{k_1} \right) \left(1 - i \frac{k_2}{k_1} \right)}{\left(\frac{1}{2} B_2 \right)^2 \left(1 - i \frac{k_2}{k_1} \right) \left(1 + i \frac{k_2}{k_1} \right)}$$

$$= 1$$

$$T = 1 - R = 0$$

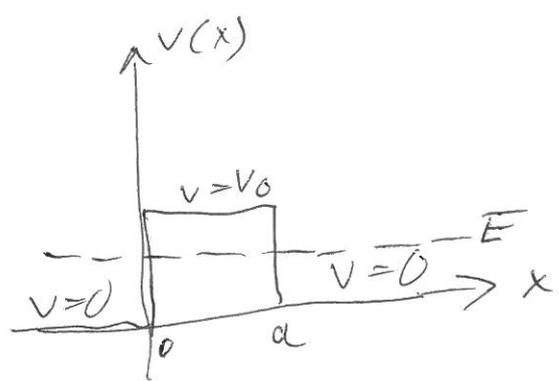
Alltid refleksjon - resultat i overensstemmelse med det klassiske.

Men $\psi_2 \neq 0$ for $x > 0$; å finne partikkelens sannsynligheten for å finne partikkelen i det klassiske forbudte området er til stede!

Dette kan ha virkelige konsekvenser på atom- og ~~for~~ atomkjernestruktur.
 → grensen av "v" høy barrierer ($V_0 \gg E$) går $k_2 \rightarrow \infty$,
 og $\psi_2(x) \rightarrow 0$ for gitt $x > 0$.

Tunnel-effekten

hva hvis steppen har en endelig bredde? ~~og~~



Forvent oscillerende oppførsel for $x < 0$ og $x > a$, men eksponentiell unnt.

Som før ($V_0 > E$):

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x} \quad (x < 0)$$

$$\psi_2(x) = A_2 e^{k_2 x} + B_2 e^{-k_2 x} \quad (0 \leq x < a)$$

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

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

mens

$$\psi_3(x) = B_3 e^{ik_1 x} \quad (x \geq a)$$

Nå, 2 par grensebetingelser:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \quad (4.23)$$

$$\frac{d\psi_1(0)}{dx} = \frac{d\psi_2(0)}{dx} \quad (4.24)$$

$$\psi_2(a) = \psi_3(a) \quad (4.25)$$

$$\frac{d\psi_2(a)}{dx} = \frac{d\psi_3(a)}{dx} \quad (4.26)$$

Det gir først

$$A_1 + B_1 = A_2 + B_2$$

$$ik_1 A_1 - ik_1 B_1 = k_2 A_2 - k_2 B_2$$

$$A_2 e^{k_2 a} + B_2 e^{-k_2 a} = B_3 e^{ik_1 a}$$

$$k_2 A_2 e^{k_2 a} - k_2 B_2 e^{-k_2 a} = ik_1 B_3 e^{ik_1 a}$$

4 likninger med 5 ukjente.

Transmisjons sannsynlighet:

$$T = \frac{B_3^* B_3}{A_1^* A_1}$$

Løse koka beregner det for oss:

$$T = \frac{1}{1 + \left(\frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)}\right) \sinh^2(k_2 a)} \quad (4.27)$$

En partikkel kan "tunnelere" gjennom barrieren også, for $E < V_0$ og komme ut på den andre sida!

Klassisk regime: $k_2 a \gg 1$ og $T \rightarrow 0$.

Eksempel 4.2

Baseball mot vegg, $m = 0.14 \text{ kg}$, $v = 1.0 \text{ m/s}$, $a = 0.2 \text{ m}$

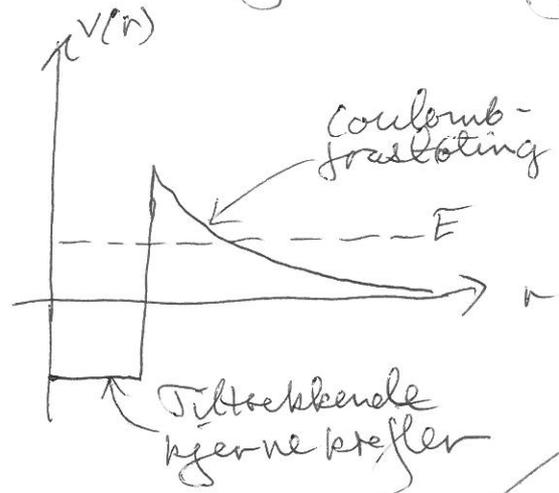
$$k_2 = \frac{p}{\hbar} = \frac{0.14 \times 1.0}{1.05 \times 10^{-34}} \text{ m}^{-1} = 1.3 \times 10^{33} \text{ m}^{-1}$$

$$k_2 a = 2.6 \times 10^{32}$$

$$\begin{aligned} \sin^2(k_2 a) &\approx e^{2k_2 a} \\ &\approx e^{5.2 \times 10^{32}} \\ &\approx 10^{(10^{32})} \end{aligned}$$

$$T \approx 10^{-10^{32}} \quad (> 0!)$$

Tunnel-effekter ser man på atomkjerneskala, f. eks. for α -henfall av U^{238}



$$\tau(U^{238}) = 6.5 \times 10^9 \text{ år}$$

(halve universets alder)

Åmen anvendelse: Tunnel dioder

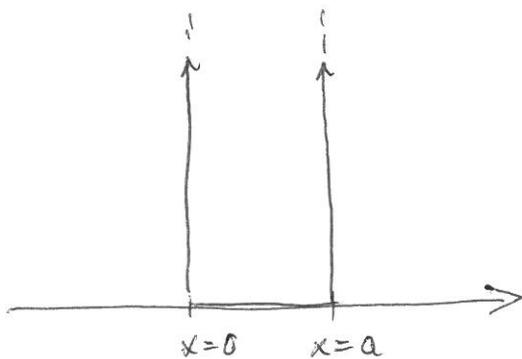
4.3 Bundne systemer

To eksempler i 1D:

- Uendelig dyb firkantkassen (partikkel i boks) - enklest
- Harmonisk oscillator

Forberedelse for 3D systemer i kapittel 6!

Partikkel i boks



$$V(x) = 0, \quad 0 \leq x \leq a$$

$$V(x) = \infty, \quad x < 0 \text{ eller } x > a$$

God approksimasjon for alle systemer med potensialbarrierer hvor $V \gg E$

Tidsuavhengig SL:

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi = 0 \quad (4.28)$$

Trigonometrisk form mer hensiktsmessig enn kompleks eksponentialfunksjon:

$$\psi(x) = C_1 \cos\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x\right) + C_2 \sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x\right)$$

venstre grensebetingelse:

$$\psi(0) = C_1 \cos(0) + C_2 \sin(0) = C_1 = 0$$

⇒

$$\psi(x) = C_2 \sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x\right) \quad (4.29)$$

høyre grensebetingelse:

$$\psi(a) = 0 \Rightarrow \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} a = n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.31)$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.32)$$

$n=1$, laveste energi:

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \quad \text{nullpunktenergi} \quad (4.33)$$

Ansætning og normalisering av bølgefunktion:

$$\psi_n = C_2 \sin \frac{n\pi x}{a}$$

$$\int_0^a \psi_n^*(x) \psi_n(x) dx = |C_2|^2 \int_0^a \sin^2 \frac{n\pi x}{a} dx \quad (\frac{n\pi x}{a} = y, dx = \frac{a}{n\pi} dy)$$

$$= |C_2|^2 \frac{a}{n\pi} \int_0^{n\pi} \sin^2 y dy$$

$$= |C_2|^2 \frac{a}{\pi} \underbrace{\int_0^{\pi} \sin^2 y dy}_{= \frac{\pi}{2}}$$

$$= 1 \quad (\text{se tidligere resultat})$$

Velg C_2 reell og positiv:

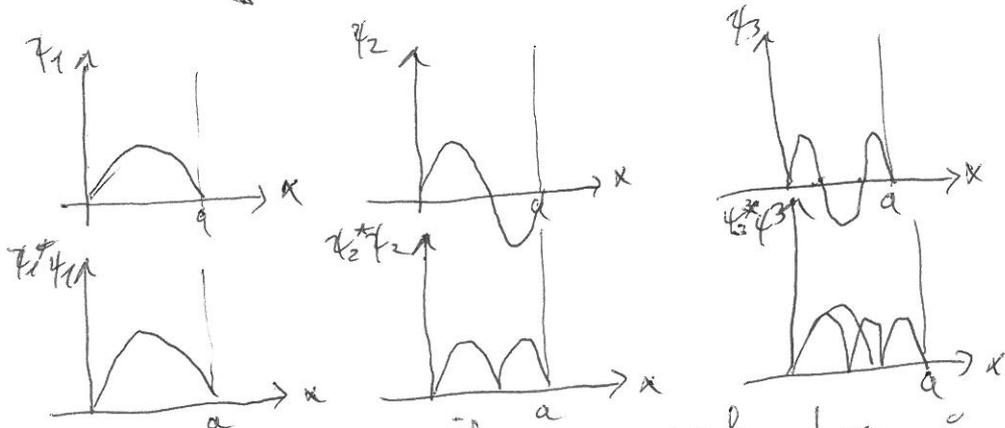
$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right), \quad 0 \leq x \leq a$$

$$\psi_n = 0, \quad x < 0 \text{ eller } x > a$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

ψ_n er {symmetrisk / antisymmetrisk} for {like / odde} n -verdier



I grensen $n \rightarrow \infty$, uniform ssh. for a finne partikkelen et hvilket som helst sted i boksen, hvis $V < \infty$ (dvs. regninga approksimativ):
 et endelig # kontinuerlige tilstander, max-verdi for $n \rightarrow \infty$ (Analogi til stående bølger i orgelpipe)

Realisering:

Tykt halvlederlag mellom to tykkere lag av annen halvleder.
 Hvis i 3D: quantum dot ("krantedott"?)

Harmonisk oscillator - potensial

Liksom funnet i oppgave 3.1:

$$V(x) = \frac{1}{2} K x^2 \tag{4.34}$$

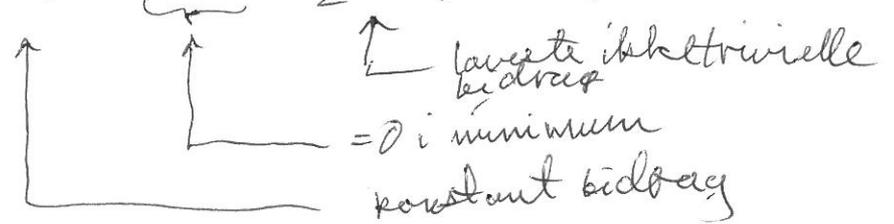
Tilsvarende i klassisk mekanikk, masse fastgjort til fjær:

$$\begin{aligned}
 F(x) &= -Kx \\
 m \frac{d^2 x}{dt^2} &= -K(x) \\
 x &= A \cos(\omega t) \\
 v &= -A \omega \sin(\omega t)
 \end{aligned}
 \left. \vphantom{\begin{aligned} F(x) \\ m \frac{d^2 x}{dt^2} \\ x \\ v \end{aligned}} \right\} \omega = \sqrt{\frac{K}{m}}$$

$$\begin{aligned}
 E &= \frac{1}{2} m v^2 + \frac{1}{2} K x^2 \\
 &= \frac{1}{2} m A^2 \omega^2 \sin^2(\omega t) + \frac{1}{2} K A^2 \cos^2(\omega t) \\
 &= \frac{1}{2} K A^2
 \end{aligned}
 \tag{4.35}$$

Uansett et potensial av kvantemekanisk interesse? For vilkårlig potensial, minimum flyttet til $x=0$:

$$V(x) = V(0) + V'(0)x + \frac{1}{2}V''(0)x^2 + \frac{1}{6}V'''x^3 + \dots$$



For små x , viktigste bidrag er

$$V(x) = \frac{1}{2} V''(x)$$

- brukes ofte for å approksimere ionebvegebeer i krysfallgitter

Vi skal nå løse tidsuavhengig SL, som vi først skal løse:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{1}{2} K x^2 \psi = E \psi \tag{4.36}$$

$$s = \frac{(Km)^{1/4}}{\hbar^{1/2}} x \quad (\text{sml. oppgave 3.1})$$

$$\lambda = \frac{2}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{K}} E \tag{4.37}$$

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + (\lambda - s^2) \psi = 0 \tag{4.38}$$

De dimensjonsløse s og λ har ingen fysisk betydning ut over å forenkle problemet.

Se først på grensetilfellet $s^2 \gg \lambda$;

~~Oppgave~~ $\frac{d^2 y}{dx^2} - s^2 y = 0$ (4.39)

Prøv tilnærmet løsning, gyldig for store s:

$$y = A e^{s^2/2} + B e^{-s^2/2}$$

$$\frac{d^2 y}{dx^2} = A(1+s^2)e^{s^2/2} - B(1-s^2)e^{-s^2/2} \approx A s^2 e^{s^2/2} + B s^2 e^{-s^2/2} \text{ (for } s \gg 1)$$

Må ha A=0, ellers er løsningen ikke normaliserbar!

Prøv derfor å se på løsning av formen

$$v(s) = f(s) e^{-s^2/2} \quad (4.41)$$

$$\frac{dv}{ds} = f'(s) e^{-s^2/2} - f(s) s e^{-s^2/2}$$

$$\frac{d^2 v}{ds^2} = \{f''(s) - 2f'(s)s + f(s)s^2\} e^{-s^2/2} \left(\frac{1}{e^{-s^2/2}} \right)$$

Ansatt og forkortet:

$$\frac{d^2 f}{ds^2} - 2s \frac{df}{ds} + (\lambda - 1)f = 0$$

 (4.42)

Utvikling i potensrække prøver:

$$f(s) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n s^n \quad (4.43)$$

$$f'(s) = \sum_{n=1}^{\infty} n a_n s^{n-1}$$

$$f''(s) = \sum_{n=2}^{\infty} n(n-1) a_n s^{n-2} = \sum_{m=0}^{\infty} (m+2)(m+1) a_{m+2} s^m$$

(Opps) (Opps) (Opps)

Can attempt to change the summation variable!

Ansatt:

$$\sum_{n=0}^{\infty} (n+2)(n+1) a_{n+2} s^n + (\lambda - 2n - 1) \sum_{n=0}^{\infty} a_n s^n = 0$$

Dette må stemme potens for potens i s. Det gir følgende rekursjonsrelasjon:

$$a_{n+2} = \frac{2n+1-\lambda}{(n+2)(n+1)} a_n \quad (4.44)$$

Hvis a_0 og a_1 er kjent, kan alle de andre finnes!

så kommer en matematisk lørdow:

Hvis $f(s)$ er et endelig polynom, så vil eksponential-faktoren $e^{-s^2/2}$ dominere over $f(s)$. For store s , mens et uendelig polynom vil dominere for store s .

Summen i $f(s)$ må derfor ha et endelig # ledd. λ må være et heltall!

KVANTISERING!

Å fastlegge λ tilsvarende å fastlegge E_n .

Betrakt

$$\lambda = 2n + 1 \tag{4.45}$$

Det gir n -verdien hvor $a_{n+2} = 0$. Hvis n er et like tall, så er det ingen relasjon som kan fastlegge $a_{n+3} = 0$. Og tilsvarende for odde n .

Attså:

Den endelige summen i $f(s)$ må inkludere enten bare ~~like~~ like eller bare ulike potenser av s , der høyeste potens som gir $a_{2n+1} \neq 0$ bestemmes av λ .

Det gir løsningene (Hermite-polynomene):

$n=0, \psi_0(s) = C_0 e^{-s^2/2}$	(4.46)
$n=1, \psi_1(s) = C_1 (2s) e^{-s^2/2}$	(4.47)
$n=2, \psi_2(s) = C_2 (4s^2 - 2) e^{-s^2/2}$	(4.48)
⋮	

med tilsvarende normalisering:

$$C_n = \frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{2^n n!}}$$

(4.37) og (4.45) gir energiværdier:

$$2n + 1 = \lambda = \frac{2}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{k}} E$$

Med $\omega = \sqrt{k/m}$ (klassisk harmonisk oscillator):

$$E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega \quad (n=0, 1, 2, \dots) \tag{4.51}$$

Merke:

Uttrykkene for $\psi_n(x)$ er det en konvensjon at ψ_n 's høyeste potens er $\propto 2^n$.
Det avspeiler seg i uttrykkene for C_n .

Harmonisk oscillator har en nullpunktenergi:

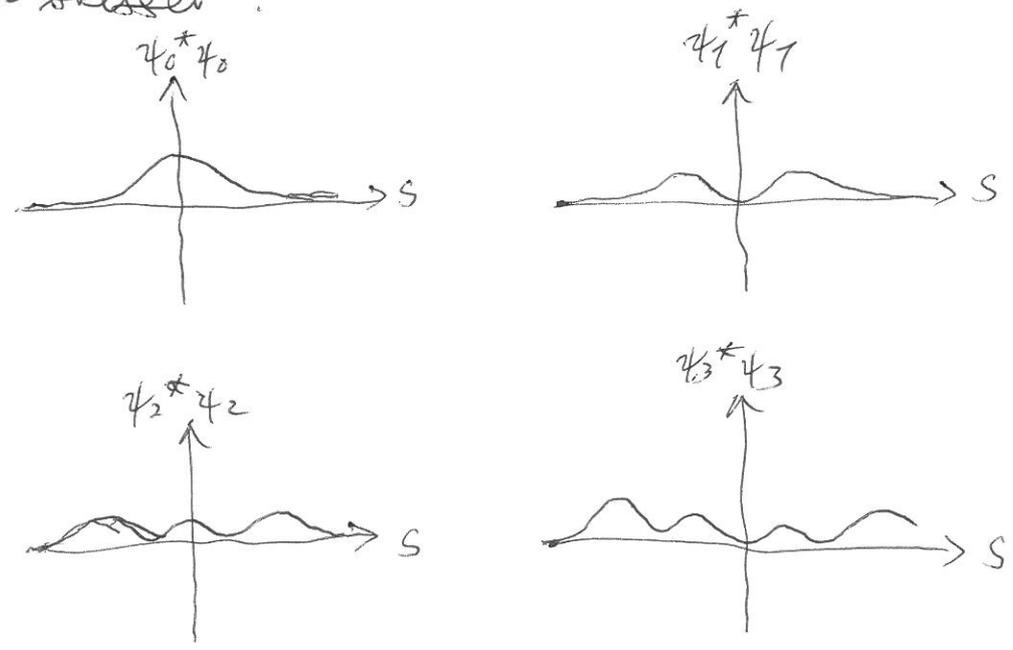
$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega$$

Sml. klassisk harmonisk oscillator:

Polynomene i ψ_n for harmonisk oscillator kalles Hermite-polynommer.

$\psi_n \neq 0$ også i det klassisk forbudte området $V > E$.

Beh-skisser:



Klassisk:

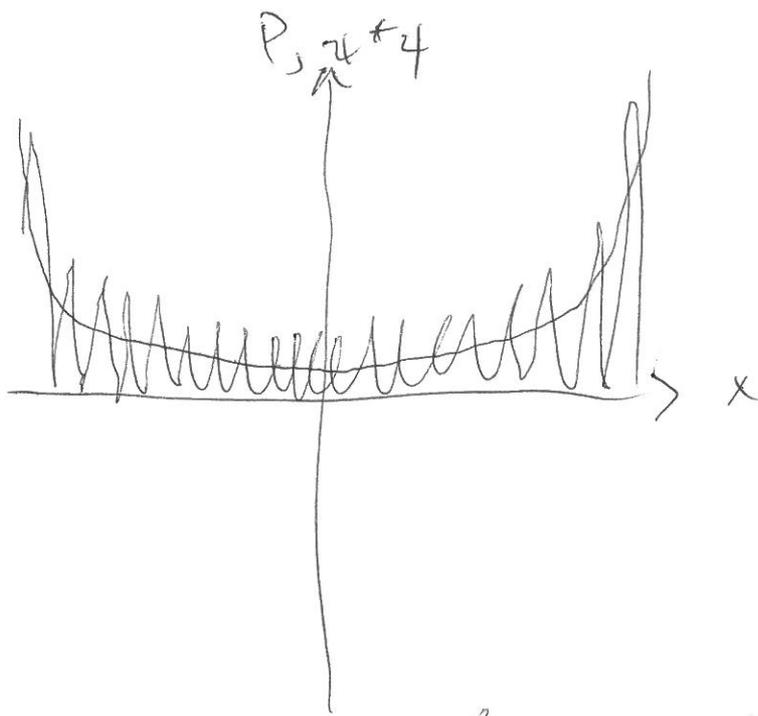
$$-\sqrt{\frac{2E}{K}} < x < \sqrt{\frac{2E}{K}}$$

(størst hastighet midt i)

$$v = \sqrt{(2E - Kx^2)/m}$$

Pvs. siden $dt = \frac{dx}{v}$: $P \propto \sqrt{\frac{m}{2E - Kx^2}} dx$

Små. QM ssk. for $n=50$:



as grensen $n \rightarrow \infty$ vil QM ssk. nærme seg til det klassiske resultatet.

Eksempel på Korrespondanseprinsippet.

Anvendelse av QM HO:

F. eks. vibrasjoner i diatomiske molekyler, som blir godt beskrevet.

Samt skallmodellen for atomkjerner, og tilsvarende for kvarkmodell for baryoner og mesoner.