TMA4121

Forberedelser til eksamen

Peter Pham

2023-05-08

Contents

Oppgave 1

Ulike former for bølger

Vi starter med bølger, Det finnes to hovedtyper av bølger: mekaniske- og elektromagnetiske bølger. Mekaniske bølger er bølger som beveger seg gjennom et medium, for eksempel vannbølger eller lydbølger. Elektromagnetiske bølger er bølger som ikke trenger et medium for å bevege seg, for eksempel lys og radiobølger.

Bølger kan bevege seg transversale eller longitudinale.

Det kan være verdt å nevne at bølger har noder, som er punkter langs bølgen der amplituden er null, mens antinoder er det punker på bølgen der amplituden er maksimal

Bølgelikningen i en dimmensjon

Hvordan bølger beveger seg gjennom rom og tid kan beskrives med bølgelikningen gitt ved:

$$\frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

Her er v bølgens hastighet.

Harmoniske bølger

Bølger som oppfyller bølgelikninen og kan skrives som en sinus- eller cosinusfunksjon av formen:

$$u(x,t) = A \cdot \cos(kx - \omega t + \phi)$$

her er ϕ fasekonstanten, k er bølgetallet, ω vinkelfrekvensen og ϕ fasekonstanten som bestmmer posisjonen og fasen til bølgen ved $t = 0$.

Vi kan se her at formelen oppfyller bølgelikningen dersom bølgehastigheten $v = \frac{\omega}{k}$

Stående bølger

Når vi har to bølger med samme frekvens og amplitude som beveger seg i motsatt retning og overlapper hverandre så får vi en konstruktiv og destruktiv inteferens. dette resulterer i stående bølger, ha har nodene og antinodene nevnt tidligere stasjonere punkter.
Figur: en illustrasjon av stående bølge med noder og antinoder.

Bølgepakker

Bølgepakker er kombinasjoner av flere harmoniske bølger med ulike frekvenser og amplituder. De kan representeres matematisk som følger:

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} A(k) e^{i(kx-\omega(k)t)} dk$$

Bølgepakker er lokalisert i rom og tid, noe som betyr at de har en begrenset utstrekning i både posisjon og tidsdomene.
Ved hjelp av Fourier-analyse kan vi finne spekteret av bølgepakker, dvs. frekvens- og amplitude-modulene til de harmoniske bølgene som utgjør bølgepakken. Fourier-transformasjonen er gitt ved:

$$A(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x,t) e^{-ikx} dx$$

Figur: En illustrasjon av en bølgepakke i rom og tid, samt dens frekvensspektrum.

Schrödingerlikninga:

Schrödingerlikningen er den grunnleggende likningen for kvantemekanikk, og den beskriver hvordan en bølgefunksjon utvikler seg i tid. Den tidsavhengige Schrödingerlikningen er:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x,t) \right] \psi(x,t)$$

Her er $\psi(x,t)$ bølgefunksjonen, $\hbar$ er Plancks reduserte konstant, m er partikkelens masse, og $U(x,t)$ er det potensielle energifeltet.

For stasjonære tilstander, der potensialet ikke er tidsavhengig, kan vi skille ut tids- og romkomponentene i bølgefunksjonen og løse den tidsuavhengige Schrödingerlikningen:

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

Figur: En illustrasjon av en partikkel i et potensialfelt, og hvordan bølgefunksjonen endrer seg i tid og rom.

Bølgefunksjonen:

Bølgefunksjonen, vanligvis representert ved $\psi(x,t)$, beskriver sannsynlighetsfordelingen til et kvantemekanisk system. Dens kvadrat, $|\psi(x,t)|^2$, gir sannsynlighetstettheten for å finne partikkelen i en bestemt posisjon og tid.

For å sikre at den totale sannsynligheten for å finne partikkelen i hele rommet er lik 1, må bølgefunksjonen være normalisert:

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x,t)|^2dx=1$$

Egenfunksjoner og egenverdier er viktige konsepter i kvantemekanikken. Egenfunksjonene til en lineær operatør, som for eksempel Hamiltonoperatøren, er funksjonene som ikke endrer form når operatøren virker på dem, men blir multiplisert med en konstant, kalt egenverdi:

$$\hat{H}\psi_n(x)=E_n\psi_n(x)$$

Figur: En illustrasjon av en bølgefunksjon, dens sannsynlighetstetthet og eksempler på egenfunksjoner for en partikkel i en potensiell brønn.

Heisenbergs uskarpleiksrelasjon:

Heisenbergs usikkerhetsrelasjon er et fundamentalt prinsipp i kvantemekanikken. Det innebærer en begrensning i samtidig presis måling av komplementære variabler, som for eksempel posisjon (x) og impuls (p):

$$\Delta x\Delta p\geq\frac{\hbar}{2}$$

Her er Δx og Δp usikkerhetene i målingene av posisjon og impuls, og $\hbar$ er Plancks reduserte konstant.

Usikkerhetsprinsippet har viktige konsekvenser for mikroskopiske systemer, som at en partikkel ikke kan ha både en nøyaktig definert posisjon og impuls samtidig.

Oppgave 1 fortsetter på neste side. . .

Figur: En illustrasjon som viser hvordan usikkerhet i posisjon og impuls øker når nøyaktigheten i målingen av den ene variabelen øker. Dette kan visualiseres med bølgepakker som blir smalere i rom, men bredere i impulsrom, og omvendt.

Dobbeltspalteeksperimentet:

Dobbeltspalteeksperimentet er et sentralt eksperiment i kvantemekanikken som demonstrerer bølge-partikkel-dualiteten og interferens. Det viser at elektroner, fotoner og andre partikler kan opptre både som bølger og partikler, avhengig av omstendighetene.

Når partikler sendes gjennom to parallelle spalter og treffer en skjerm bak spaltene, vil de danne et interferensmønster som er karakteristisk for bølgefenomener. Dette indikerer at partiklene opptre som bølger underveis. Intensiteten på skjermen er gitt ved:

$$I(x) \propto |\psi_1(x) + \psi_2(x)|^2$$

Her er $\psi_1(x)$ og $\psi_2(x)$ bølgefunksjonene som beskriver partiklene som passerer gjennom henholdsvis den første og andre spalten.

Dobbeltspalteeksperimentet illustrerer også prinsippet om kvantesuperposisjon, der partiklene eksisterer i en superposisjon av alle mulige baner mellom spaltene og skjermen, inntil en måling utføres og bølgefunksjonen kollapser.

Figur: En illustrasjon av dobbeltspalteeksperimentet, med partikler som sendes gjennom to spalter og danner et interferensmønster på skjermen bak. Vis hvordan interferensmønsteret endrer seg når man prøver å måle hvilken spalte partikkelen har passert gjennom.

Oppgave 2

Kvantebrønn

Kvantebrønner er en modell som beskriver oppførselen til partikler som elektroner i potensialbrønner på kvantemekanisk nivå.

Figur: tegn en kvantebrønn.

Uendeleg djup kvantebrønn i 1D

Vi starter med en uendelig dyp kvantebrønn.

figur: tegn en brønn.

Denne brønnen er en forenklet modell der potensialbrønnen er uendelig dyp og partikler kan ikke eksistere utenfor brønnen.

Schrödinger-ligningen for en partikkel i en én-dimensjonal uendelig dyp kvantebrønn er:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x),$$

hvor $\hbar$ er Plancks reduserte konstant, m er partikkelens masse, $\psi(x)$ er bølgefunksjonen og E er energien til partikkelen.

Vi kan også skrive:

$$\psi'' = \frac{2mE}{\hbar}, \text{ der, } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Vi ser at den dobbelderiverte av bølgefunksjonen gir oss en negativ konstant foran.

$$\psi(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx)$$

med grensebetingelsene $\psi(0) = \psi(L) = 0$

får vi at:

$$\psi(x) = \sqrt[root]{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

grunnet grensebetingelsene har vi at.

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

hvor n er en positiv heltall og L er brønnens bredde.

tegn brønn med flere nivåer.

Endeleg kvantebrønn

En endelig kvantebrønn er en mer realistisk modell enn en uendelig dyp kvantebrønn, der potensialet i brønnen er endelig og partikler kan eksistere utenfor brønnen, men med en lavere sannsynlighet. Dette fører til at både bundne og spredningstilstander kan eksistere i en endelig kvantebrønn.

Schrödinger-ligningen for en partikkel i en én-dimensjonal endelig kvantebrønn er den samme som for en uendelig dyp kvantebrønn, men med en endret potensialfunksjon $V(x)$:

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

En viktig forskjell mellom endelig og uendelig dyp kvantebrønn er at bølgefunksjonene i en endelig kvantebrønn ikke er begrenset til å være null ved brønnens kanter og kan ha en liten, men ikke-null verdi utenfor brønnen. Dette betyr at elektronene i en endelig kvantebrønn har en viss sannsynlighet for å bli funnet utenfor brønnen.

For å illustrere en endelig kvantebrønn, kan du tegne en figur som viser potensialbrønnen og bølgefunksjonene til de forskjellige energinivåene, inkludert hvordan bølgefunksjonene strekker seg utenfor brønnen.

Bundne og spreiande tilstandar

Bundne og spredningstilstander er løsninger av Schrödinger-ligningen avhengig av potensialet og partikkelens energi. Bundne tilstander har diskrete energinivåer og partikler begrenset innenfor et område, mens spredningstilstander har kontinuerlige energinivåer og partikler som beveger seg fritt. I en uendelig dyp kvantebrønn er alle tilstander bundne, og det er ingen spredningstilstander. Disse tilstandene påvirker elektriske og optiske egenskaper i faste stoffer, med bundne tilstander relatert til elektroner i atomer, molekyler eller krystaller, og spredningstilstander relatert til ledningselektroner som bidrar til elektrisk ledningsevne. For å illustrere dette, tegn en figur som viser potensialbrønnen og bølgefunksjonene til de forskjellige energinivåene.

Tunnellering

Kvantetunnellering er et fenomen der partikler, som elektroner, kan passere gjennom en potensialbarriere som de normalt ikke ville kunne gjøre i klassisk mekanikk. Dette fenomenet er relevant for kvantebrønner fordi det tillater elektroner å bevege seg fra en brønn til en annen gjennom en potensialbarriere, noe som har viktige konsekvenser for faststoffelektronikk.

Tunnellering i en endelig kvantebrønn kan analyseres ved å løse Schrödinger-ligningen for partikkelen inne i og utenfor potensialbarrieren. For en partikkel som befinner seg utenfor barrieren, vil bølgefunksjonen ha en eksponentiell form som representerer den avtagende sannsynligheten for å finne partikkelen utenfor brønnen:

$$\psi(x) = Ae^{-\kappa x},$$

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

Perturbasjonsteori

Perturbasjonsteori er en metode for å finne energinivåer og bølgefunksjoner i kvantebrønner med små forstyrrelser i potensialet, der den eksakte løsningen av Schrödinger-ligningen er vanskelig eller umulig å finne. Perturbasjonsteori tar utgangspunkt i en kjent løsning og beregner endringene som skyldes forstyrrelsen.

For å anvende perturbasjonsteori, skriv Schrödinger-ligningen som:

$$(\hat{H}_0 + \hat{V}')\psi(x) = E\psi(x),$$

der $\hat{H}_0$ er den kjente Hamilton-operatøren uten forstyrrelsen, $\hat{V}'$ er forstyrrelsen og $\psi(x)$ og E er bølgefunksjonen og energien til partikkelen, henholdsvis.

Perturbasjonsteori benytter seg av en styrkeparameter λ for å beskrive forholdet mellom forstyrrelsen og den opprinnelige potensialbrønnen:

$$\hat{V}' = \lambda\hat{V}.$$

Ved å ekspandere bølgefunksjonen og energien i en potensrekke i λ, kan man finne approksimerte løsninger for de korrigerte energinivåene og bølgefunksjonene.

Perturbasjonsteori har mange anvendelser i faststoffelektronikk, for eksempel i beregning av energinivåene og bølgefunksjonene i krystaller med defekter, eller i systemer med eksterne elektriske eller magnetiske felt.

Målepostulatet

Målepostulatet er et grunnleggende prinsipp i kvantemekanikk som beskriver hvordan målinger av partikkelens posisjon, energi og andre egenskaper utføres. Målepostulatet sier at når en måling utføres på en partikkel, vil partikkelen bli funnet i en bestemt tilstand som er beskrevet av en egenfunksjon til den målte operator og dens respektive egenverdi.

For måling av elektronposisjon og energi i en kvantebrønn, kan man benytte seg av posisjons- og energioperatorer:

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x),$$

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x),$$

hvor $\hat{x}$ er posisjonsoperatøren og $\hat{H}$ er Hamilton-operatøren.

Usikkerhetsprinsippet, formulert av Heisenberg, setter en fundamental grense på nøyaktigheten av målinger av partiklers posisjon og bevegelsesmengde (og dermed energi). Dette prinsippet er spesielt viktig i kvantebrønner, der partiklene er begrenset i et lite område og har kvantemekaniske egenskaper som bølge-partikkel-dualitet.

Målepostulatet og usikkerhetsprinsippet har praktiske implikasjoner for faststoffelektronikk, for eksempel i utformingen av nanoskala enheter og systemer, hvor kvanteeffekter blir mer fremtredende og må tas i betraktning for å forstå og styre elektroniske egenskaper.

Under presentasjonen kan du vurdere å tegne en figur som viser en kvantebrønn med en partikkel, og deretter vise hvordan målepostulatet og usikkerhetsprinsippet påvirker partikkelens posisjon og energi.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)\right]\psi(X) = E\psi(x)$$

Oppgave 3

Oppgave 4

Oppgave 4 fortsetter på neste side. . .

Oppgave 5

Oppgave 6