En-dimensionale potensialer

February 11, 2022

Vi skal i dette kapitelet se på en rekke forskjellige en-dimensionale potensialer, som vi løser S.L. for og finner bølgefunksjonene til, og ser på tolkninger av.

1 Partikkel i brønn

Vi skal nå se på en partikkel som befinner seg i en potensial-brønn. Dette er beskrevet av potensialet

$$V(x) = \begin{cases} 0 & |x| < \frac{a}{2} \\ V_0 & |x| \geq \frac{a}{2} \end{cases} \tag{1}$$

Dette ligner partikkel i boks scenarioet vi så tidligere, men her er ikke potensialet uendelig stort utenfor boksen, slik at partikkelen kan befinne seg der også.

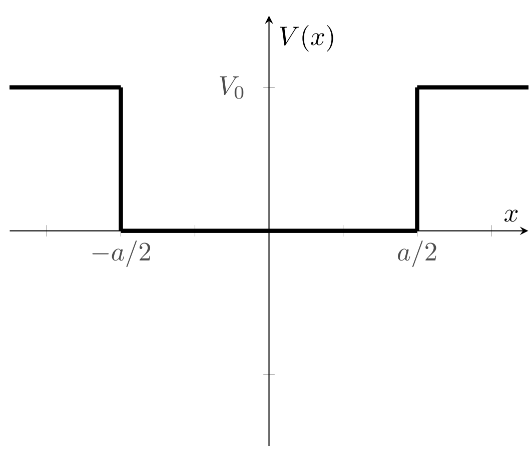

Figure 1: Potensialet $V(x)$ til partikkel-brønn.

Vi løser nå S.L. for dette potensialet ved å dele opp problemet i flere områder. Vi ser på løsningene for $|x| < a/2$, $x > a/2$ og $x < -a/2$ hver for seg og bruker randbetingelser for å fuge de sammen til en koherent bølgefunksjon. Vi skal også begrense oss til å se på bølgefunksjoner som har energi mindre enn V_0. For hver av de tre tilfellene får vi essensielt en fri-partikkel S.L. som vi må løse. Vi minner oss på at vi har den tidsuavhengige S.L. som

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

Vi starter med $|x| < a$, hvor vi har

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = -k^2\psi \tag{3}$$

hvor $k = \sqrt{2mE}/\hbar$. Her kjenner vi de elementære løsningene

$$\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \tag{4}$$

For $|x| > a/2$ har vi

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = \kappa^2\psi \tag{5}$$

hvor vi nå har $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$. Vi husker at vi antok $E < V_0$ og vi får da den generelle løsningene på høyre og venstre siden for brønnen

$$\psi = Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x} \tag{6}$$

Vi bruker nå randbetingelser og at vi vil ha en fysikalsk, dvs. normaliserbar, bølgefunksjon. Vi må derfor ha at $\psi \to 0$ når $|x| \to \infty$, hvilket fører til at vi har

$$\psi = Ce^{\kappa x} \qquad x < \frac{a}{2} \tag{7}$$

$$\psi = De^{-\kappa x} \qquad x > \frac{a}{2} \tag{8}$$

Vi må nå fuge sammen bølgefunksjonene i de tre regionene ved å bruke kravet om at bølgefunksjonene og deres deriverte skal være kontinuerlige. Siden om dette ikke er tilfellet så eksisterer strengt talt ikke den andre-deriverte og da er det vanskelig å gi mening til S.L. Vi krever derfor at bølgefunksjonene i de forskjellige regionene er like i $\pm a/2$.

$$Ce^{-\kappa\frac{a}{2}} = Ae^{-ik\frac{a}{2}} + Be^{ik\frac{a}{2}} \tag{9}$$

$$De^{-\kappa\frac{a}{2}} = Ae^{ik\frac{a}{2}} + Be^{-ik\frac{a}{2}} \tag{10}$$

og tilsvarende for de deriverte av bølgefunksjonen

$$\kappa Ce^{-\kappa\frac{a}{2}} = ik(Ae^{-ik\frac{a}{2}} - Be^{ik\frac{a}{2}}) \tag{11}$$

$$-\kappa De^{-\kappa\frac{a}{2}} = ik(Ae^{ik\frac{a}{2}} - Be^{-ik\frac{a}{2}}) \tag{12}$$

Vi dividerer 9 på 11 for å eliminere C.

$$\frac{ik}{\kappa} = \frac{Ae^{-ik\frac{a}{2}} + Be^{ik\frac{a}{2}}}{Ae^{-ik\frac{a}{2}} - Be^{ik\frac{a}{2}}} \tag{13}$$

$$\Rightarrow \quad ik(Ae^{-ik\frac{a}{2}} - Be^{ik\frac{a}{2}}) = \kappa(Ae^{-ik\frac{a}{2}} + Be^{ik\frac{a}{2}}) \tag{14}$$

$$\Rightarrow \quad ikAe^{-ik\frac{a}{2}} - \kappa Ae^{-ik\frac{a}{2}} = ikBe^{ik\frac{a}{2}} + \kappa Be^{ik\frac{a}{2}} \tag{15}$$

$$\Rightarrow \quad (ik - \kappa)Ae^{-ik\frac{a}{2}} = (ik + \kappa)Be^{ik\frac{a}{2}} \tag{16}$$

$$\Rightarrow \quad \frac{A}{B} = \frac{ik + \kappa}{ik - \kappa}e^{ika} \tag{17}$$

Tilsvarende kan vi dividerer 10 på 12 for å eliminere D.

$$\frac{ik}{-\kappa} = \frac{Ae^{ik\frac{a}{2}} + Be^{-ik\frac{a}{2}}}{Ae^{ik\frac{a}{2}} - Be^{-ik\frac{a}{2}}} \tag{18}$$

$$\Rightarrow \quad ik(Ae^{ik\frac{a}{2}} - Be^{-ik\frac{a}{2}}) = -\kappa(Ae^{ik\frac{a}{2}} + Be^{-ik\frac{a}{2}}) \tag{19}$$

$$\Rightarrow \quad (ik + \kappa)Ae^{ik\frac{a}{2}} = (ik - \kappa)Be^{-ik\frac{a}{2}} \tag{20}$$

$$\Rightarrow \quad \frac{A}{B} = e^{-ika}\frac{ik - \kappa}{ik + \kappa} \tag{21}$$

Dette gir da når vi multipliserer 17 med 21

$$(\frac{A}{B})^2 = e^{-ika}\frac{ik - \kappa}{ik + \kappa}e^{ika}\frac{ik + \kappa}{ik - \kappa} \tag{22}$$

$$= 1 \tag{23}$$

Hvilket gir $A = B$ eller $A = -B$. Vi ser på de to tilfellene hver for seg, og starter med $A = B$ hvor vi umiddelbart ser fra 9 og 10 at vi da får $C = D$. Vi har bølgefunksjonen som

$$\psi = \begin{cases} Ce^{\kappa x} & x < \frac{a}{2} \\ 2A\cos(kx) & |x| \leq \frac{a}{2} \\ Ce^{-\kappa x} & x > \frac{a}{2} \end{cases} \tag{24}$$

hvor vi minner os på at Eulers formel gir oss

$$\cos(kx) = \frac{e^{ikx} + e^{-ikx}}{2} \tag{25}$$

$$\sin(kx) = \frac{e^{ikx} - e^{-ikx}}{2i} \tag{26}$$

Vi ser her at bølgefunksjon er symmetrisk $\psi(x) = \psi(-x)$. Videre har vi for $A = B$ at 13 blir

$$\frac{ik}{\kappa} = \frac{e^{-ik\frac{a}{2}} + e^{ik\frac{a}{2}}}{e^{-ik\frac{a}{2}} - e^{ik\frac{a}{2}}} \tag{27}$$

$$= \frac{\cos(\frac{ka}{2})}{-i\sin(\frac{ka}{2})} \tag{28}$$

Vi skriver om litt slik at vi har

$$\tan(\frac{ka}{2}) = \frac{\frac{\kappa a}{2}}{\frac{ka}{2}} \tag{29}$$

$$= \frac{\sqrt{(\frac{\kappa a}{2})^2}}{\frac{ka}{2}} \tag{30}$$

$$= \frac{\sqrt{\frac{a^2}{4}\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}}{\frac{ka}{2}} \tag{31}$$

$$= \frac{\sqrt{\frac{a^2}{2}\frac{mV_0}{\hbar^2} - (\frac{ka}{2})^2}}{\frac{ka}{2}} \tag{32}$$

Videre definerer vi

$$\xi_0 = \frac{ka}{2} \tag{33}$$

$$\xi = \frac{a}{2}\frac{\sqrt{mV_0}}{\hbar} \tag{34}$$

slik at vi får 13 på formen

$$\tan(\xi) = \frac{\sqrt{\xi_0^2 - \xi^2}}{\xi} \tag{35}$$

Tilsvarende har vi med $A = -B$ at fra 9 og 10 at vi må ha $C = -D$. Vi har bølgefunksjonen som

$$\psi = \begin{cases} Ce^{\kappa x} & x < \frac{a}{2} \\ 2Ai\sin(kx) & |x| \leq \frac{a}{2} \\ -Ce^{-\kappa x} & x > \frac{a}{2} \end{cases} \tag{36}$$

hvor vi har brukt Eulers formel slik at vi har Vi ser her at bølgefunksjon er asymmetrisk $\psi(x) = -\psi(-x)$. Videre har vi for $A = -B$ at 13 blir

$$\frac{-ik}{\kappa} = \frac{e^{-ik\frac{a}{2}} - e^{ik\frac{a}{2}}}{e^{-ik\frac{a}{2}} + e^{ik\frac{a}{2}}} = \frac{i\sin(\frac{ka}{2})}{\cos(\frac{ka}{2})} \tag{37}$$

slik at

$$\frac{k}{\kappa} = -\cot(\frac{ka}{2}) \tag{38}$$

Slik at vi får 13 på formen

$$-\cot(\xi) = \frac{\sqrt{\xi_0^2 - \xi^2}}{\xi} \tag{39}$$

når vi igjen innfører ξ og ξ_0. Lign. 35 og 39 er transcendentale ligninger som vi kan bruke til å bestemme energinivåene.