

En-dimensionale potensialer

February 13, 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 Partikkelen i brønn

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

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

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

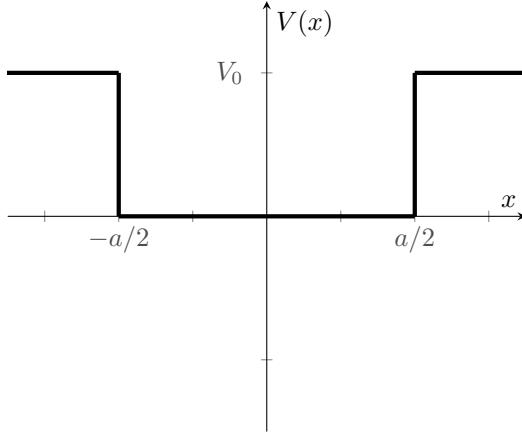


Figure 1: Potensialet $V(x)$ til partikkelen i brønn.

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-partikkelen S.L. som vi må løse. Vi minner oss på at vi har den tidsuavhengige S.L. som

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

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

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -k^2 \psi \quad (3)$$

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

$$\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (4)$$

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

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \kappa^2 \psi \quad (5)$$

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

$$\psi = Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x} \quad (6)$$

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

$$\psi = Ce^{\kappa x} \quad x < \frac{a}{2} \quad (7)$$

$$\psi = De^{-\kappa x} \quad x > \frac{a}{2} \quad (8)$$

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 $\pm a/2$.

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

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

og tilsvarende for de deriverte av bølgefunksjonen

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

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

Vi dividerer 9 på 11 for å eliminere C .

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Dette gir da når vi multipliserer 17 med 21

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

$$= 1 \quad (23)$$

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

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

hvor vi minner os på at Eulers formel gir oss

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

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

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

$$\frac{ik}{\kappa} = \frac{e^{-ik\frac{a}{2}} + e^{ik\frac{a}{2}}}{e^{-ik\frac{a}{2}} - e^{ik\frac{a}{2}}} \quad (27)$$

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

Vi skriver om litt slik at vi har

$$\tan\left(\frac{ka}{2}\right) = \frac{\frac{\kappa a}{2}}{\frac{ka}{2}} \quad (29)$$

$$= \frac{\sqrt{\left(\frac{\kappa a}{2}\right)^2}}{\frac{ka}{2}} \quad (30)$$

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

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

Videre definerer vi

$$\xi_0 = \frac{a}{2} \frac{\sqrt{mV_0}}{\hbar} \quad (33)$$

$$\xi = \frac{ka}{2} = \frac{a}{2} \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (34)$$

slik at vi får 13 på formen

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

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

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

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

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

slik at

$$\frac{k}{\kappa} = -\cot\left(\frac{ka}{2}\right) \quad (38)$$

Slik at vi får 13 på formen

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

når vi igjen innfører ξ og ξ_0 . Lign. 35 og 39 er transcendentale ligninger som vi kan bruke til å bestemme energinivåene. Disse transcendentale ligningene kan vi enten løse numerisk eller plotte de og se på de grafisk som i Fig. [2].

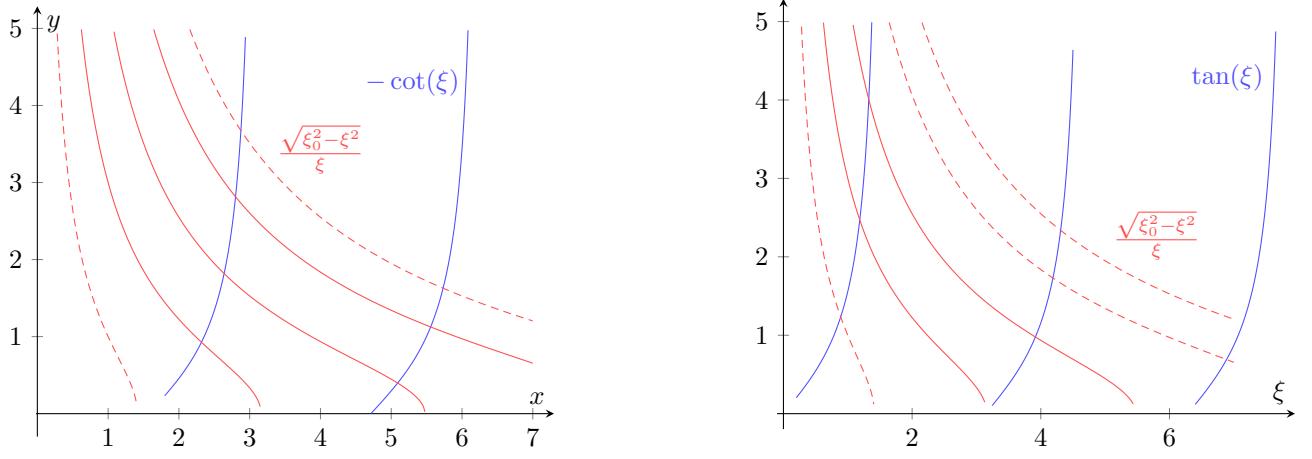


Figure 2: De transcendentale ligningene som bestemmer energien til partikkelen i boks.

Vi ser at vi bare for noen tillate løsninger for en gitt verdi av ξ_0 . Når vi øker ξ_0 , dvs øker V_0 , a eller m så får vi flere mulige bundne ($E < V_0$) tilstander, siden det er da flere krysningspunkter mellom $\sqrt{\xi_0^2 - \xi^2}/\xi$ og $-\cot(\xi)$ eller $\tan(\xi)$.

Vi ser at for $V_0 \rightarrow \infty$ har vi at energiene bestemmes av $\tan(\xi) = \infty$ og $\cot(-\xi) = \infty$, som har løsninger

$$\xi = (2n + 1)\frac{\pi}{2} \quad \wedge \quad \xi = n\pi \quad (40)$$

$$\Rightarrow E = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \quad (41)$$

som er energiene vi fant for partikkel i boks, hvilket vi burde forvente siden brønnen blir til en boks når vi sender $V_0 \rightarrow \infty$, vi ser her dog også at vi får samme resultat om vi sender bredden til brønnen $a \rightarrow \infty$.

Vi ser fra formen til bølgefunksjonene at de tilstandene med høyere energi har større sannsynlighet for å befinner seg utenfor boksen. Siden Bølgefunksjonene penetrerer lenger inn regionen hvor $V > E$, de klassisk forbudte området. Igjen har vi da i ekstremtilfellet når energien er uendelig mye lavere enn V_0 at vi får igjen partikkel i boks, hvor vi så at det er umulig for partikkelen å befinner seg utenfor boksen.

2 Kvalitative betraktninger

Vi skal nå drøfte kvalitativt oppførselen til energi egentilstander (stasjonære tilstander) i forskjellige potensialer. Vi har den generelle S.L. i et område hvor $E > V(x)$ som

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = -k^2(x)\psi \quad (42)$$

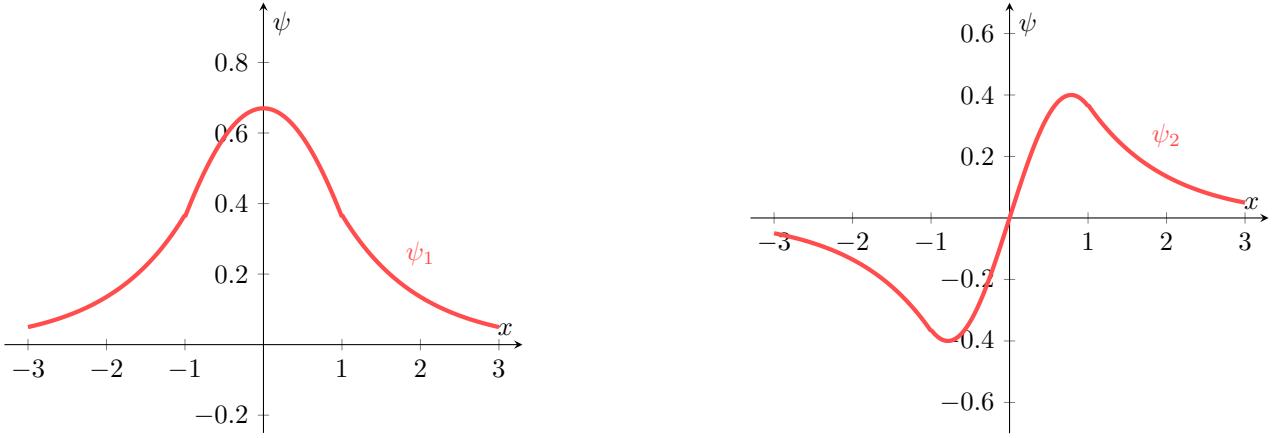


Figure 3: Bølgefunktjonene til partikkelen i boks.

hvor

$$k^2(x) = \frac{2m[E - V(x)]}{\hbar^2} \quad (43)$$

Her ser vi at den andrederiverte har motsatt fortegn som bølgefunktjonen selv. Dette betyr at bølgefunktjonen alltid blyer seg inn mot x-aksen, og det betyr altså at bølgefunktjonen oscillerer. Dette er det samme som vi fant for partikkelen i boks og brønn, men vi ser her at det gjelder helt generelt i områder hvor energien er større en potensialet.

Videre ser vi for oss et område med $E < V(x)$, hvor vi nå har

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \kappa^2(x)\psi \quad (44)$$

hvor

$$\kappa^2(x) = \frac{2m[V(x) - E]}{\hbar^2} \quad (45)$$

Her ser vi at den andrederiverte har samme fortegn som bølgefunktjonen selv. Hvilket forteller oss at i områder hvor energien er mindre en potensialet så krummer alltid bølgefunktjonen vekk vekk fra x-aksen.

Vi ser her da at vi ikke kan ha en normaliserbar bølgefunktjon hvis vi har $V(x) > E$ for alle x , vi trenger områder med $E > V(x)$ for å kunne ha en normaliserbar stasjonær tilstand. Slik var det med partikkelen i brønn hvor bølgefunktjonen krummet vekk ($V(x) > E$) ifra x-aksen til høyre og venstre for brønnen mens den oscillererte ($V(x) < E$) inne i brønnen. Tilsvarende kan vi ikke ha en normaliserbar stasjonær tilstand om vi har $V(x) < E$ overalt. Dette husker vi ifra diskusjonen rundt bølgepakken, hvor vi så at planbølgene ikke var normaliserbare.

3 Harmonisk oscillator

Vi skal nå se på harmonisk oscillator potensialet, som er et veldig viktig potensial i kvantefysikk. En av grunnene til at H.O. er et så viktig potensial er at det er en god tilnærming til mange andre potensialer rundt lokale minima. Dette kan vi se ved å Taylor-utvikle et potensial $V(x)$ om et minima x_0

$$V(x) = V(x_0) + \left(\frac{\partial V}{\partial x}\right)_{x=x_0}(x - x_0) + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 V}{\partial x^2}\right)_{x=x_0}(x - x_0)^2 + \dots \quad (46)$$

Men siden x_0 er et minimum forsvinner den førster-deriverte her og vi har

$$V(x) \approx V(x_0) + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 V}{\partial x^2}\right)_{x=x_0}(x - x_0)^2 \quad (47)$$

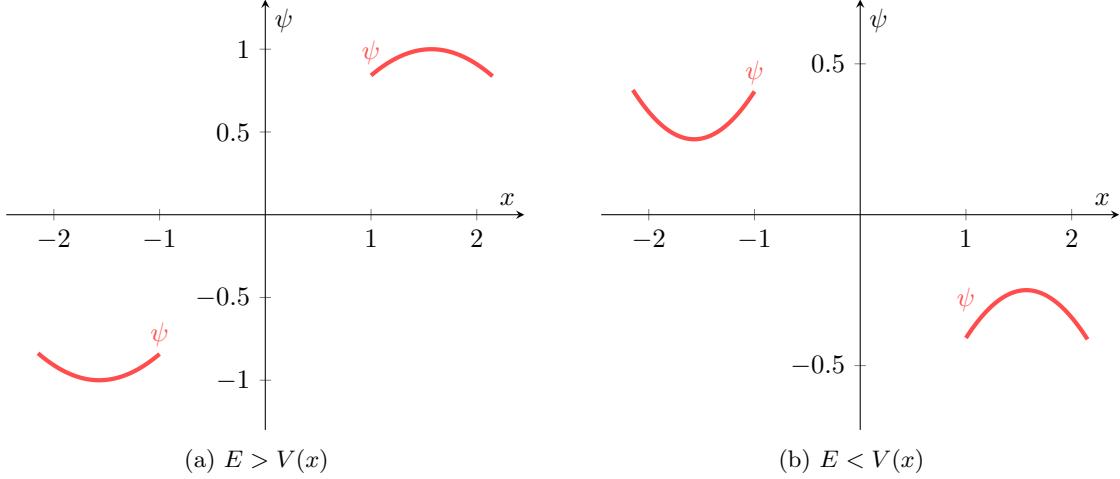


Figure 4: Energi egentilstander for områder med forskjellige potensial-størrelser.

som en god tilnærming til potensialet når utslagene ikke er altfor store. Vi lar

$$K = m\omega^2 = \left(\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} \right)_{x=x_0} \quad (48)$$

være analog til fjærkonstanten, hvor ω er angulerfrekvensen til fjæren. Vi står fritt til å legge null-nivået til energien hvor vi vil, så vi lar $V(x_0) = 0$. Vi har da

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \quad (49)$$

Slik at vi har S.L.

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{1}{2}m\omega^2x^2 - E \right) \psi \quad (50)$$

Dette er en differensiellligning som er noe komplisert å løse. Vi starter dog med å se på tilfellet hvor utslaget er stort, slik at vi har

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \approx \frac{2m\omega^2}{\hbar^2} x^2 \psi \quad (51)$$

Dette er forholdsvis enkelt å løse og vi har

$$\psi(x) = Ax^n e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} + Bx^n e^{\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \quad (52)$$

hvor vi må ha $B = 0$ siden vi må ha $\psi \rightarrow 0$ når $|x| \rightarrow \infty$. Vi kan se på tilstanden $n = 0$

$$\psi_0(x) = N_0 e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \quad (53)$$

Dette viser seg å være den eksakte grunntilstanden for H.O. uavhengig av utslaget. Vi setter inn i S.L. for å bekrefte dette

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} = E e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \quad (54)$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{m\omega}{\hbar} + \left(\frac{m\omega x}{\hbar} \right)^2 \right) e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} = E e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \quad (55)$$

$$\Rightarrow \frac{1}{2}\hbar\omega e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} = E e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \quad (56)$$

$$\Rightarrow \frac{1}{2}\hbar\omega = E \quad (57)$$

hvor vi ser at ψ_0 er en løsning med energi $E = \frac{1}{2}\hbar\omega$. Vi kan også normalisere ψ_0 hvor vi har

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |N_0|^2 e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}} dx \quad (58)$$

$$= |N_0|^2 \sqrt{\pi} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{-\frac{1}{2}} \quad (59)$$

$$\Rightarrow N_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \quad (60)$$

slik at grunntilstanden til H.O. er

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \quad (61)$$

Man kan også regne ut de alle eksakte bølgefunksjonene til H.O. og vi har at

$$\psi_n(x) = N_n H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \quad (62)$$

hvor energiene er gitt som

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad (63)$$

3.1 Null-punkts energien & Heisenberg's uskarphetsrelasjon

At det finnes en grunntilstand for H.O. som ikke har energi lik null, er interessant. Vi ser på forventningsverdien i Energi for grunntilstanden

$$\langle E \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^* \left(\frac{1}{2m} (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x})^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right) \psi_0 dx \quad (64)$$

$$= \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \langle x^2 \rangle \quad (65)$$

Vi har dog at $H\psi_0 = E_0\psi_0$, og vi har at

$$\langle x \rangle = N_n \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} dx = 0 \quad (66)$$

og

$$\langle p \rangle = N_n \int_{-\infty}^{\infty} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} dx \quad (67)$$

$$= im\omega N_n \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} dx = 0 \quad (68)$$

hvor vi har brukt symmetribetrakninger. Dette gir oss at

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle \quad (69)$$

$$(\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle \quad (70)$$

Slik at vi har

$$E_0 = \frac{(\Delta p)^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 (\Delta x)^2 \quad (71)$$

Men nå kan vi bruke Heisenberg's uskarphetsrelasjon $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$. Vi bruker nå at $2\Delta x/\hbar \geq 1/\Delta p$. Vi har nå

$$E_0 \geq \frac{\hbar^2}{8m(\Delta x)^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 (\Delta x)^2 \quad (72)$$

Dette må holde for grunntilstands energien, vi vet at naturen alltid vil være i den minst energetiske tilstanden. Vi finner minima for energien da ved å derivere mhp. Δx og sette lik 0. Dett gir oss

$$-\frac{\hbar^2}{4m(\Delta x)^3} + m\omega^2\Delta x = 0 \quad (73)$$

som leder til

$$(\Delta x)^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} \quad (74)$$

Som vi setter inn i uttrykket vårt for E_0 og finner

$$E_0 \geq \frac{1}{4}\hbar\omega \frac{1}{4}\hbar\omega = \frac{1}{2}\hbar\omega \quad (75)$$

Dette er den minste energien som er forenlig med Heisenberg's uskaphetsrelasjon, og vi kjenner det igjen som den faktiske grunntilstanden til H.O. Vi har da at den Gaussiske grunntilstanden er en minimum uskaphets-tilstand. Dette er i sterk kontrast til den klassiske H.O., hvor vi vet at grunntilstanden har energi lik null og partikkelen bare sitter stille ved $x = 0$. Dette bryter dog med Heisenberg's uskaphetsprinsipp siden vi da ville ha kjent posisjon og bevegelsesmengde skarpt samtidig.

I kvantefysikk har H.O. grunntilstanden en lik miks av forventningsverdi som kommer fra potensiell og kinetisk energi, i motsetning til klassisk hvor det bare er potensiell energi i grunntilstanden.

Denne framgangsmåten med å bruke Heisenberg's uskaphetsprinsipp for å beregne grunntilstandsen-ergien virket så bra fordi potensialet går som x^2 . For andre potensialer kan man også bruke Heisenberg uskaphetsprinsipp for å beregne energien i grunntilstanden men man må da typisk ty til approksimasjoner.

4 Dirac delta funksjon potensialet

Vi skal nå betrakte et potensiale beskrevet ved Dirac delta funksjonen, som strengt tatt ikke er en funksjon (matematisk sett), det er heller en grense av en sekvens med funksjoner. Vi kan definere det som

$$\delta(x) = \lim_{b \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{b}{\pi}} e^{-bx^2} \quad (76)$$

hvor vi ser at Dirac deltaet er normalisert

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = \lim_{b \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{b}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-bx^2} dx \quad (77)$$

$$= \lim_{b \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{b}{\pi}} \sqrt{\frac{\pi}{b}} = 1 \quad (78)$$

Vi har at i grensen $b \rightarrow \infty$ får vi

$$\delta(x) = \begin{cases} 0 & x \neq 0 \\ \infty & x = 0 \end{cases} \quad (79)$$

Typisk dukker Dirac delta opp inne i integrander. Vi har da at

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x) dx = f(0) \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = f(0) \quad (80)$$

hvor $f(x)$ er en hvilket som helst godt oppført funksjon.

Vi ser nå for oss et potensial som er null overalt bortsett fra i origo, det kan vi skrive som

$$\frac{2m}{\hbar^2} V(x) = -\frac{\alpha}{a} \delta(x) \quad (81)$$