

En-dimensionale potensialer

February 18, 2022

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

Partikkel i brønn

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

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

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.

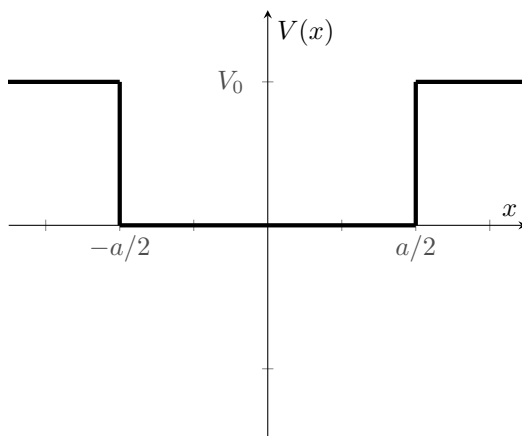


Figure 1: Potensialet $V(x)$ til partikkel-brønn.

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

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

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 løsningen 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

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

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

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

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

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 plote de og se på de grafisk som i Fig. [2].

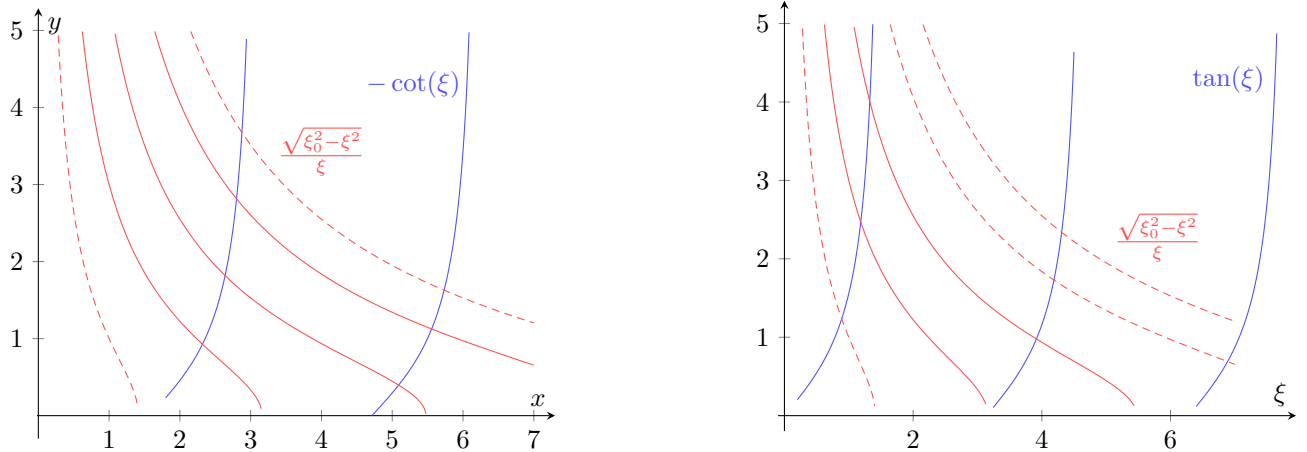


Figure 2: De transcendentale ligningene som bestemmer energien til partikkel i boks.

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 $\sqrt{\xi_0^2 - \xi}/\xi$ 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 befinne 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 befinne seg utenfor boksen.

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

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

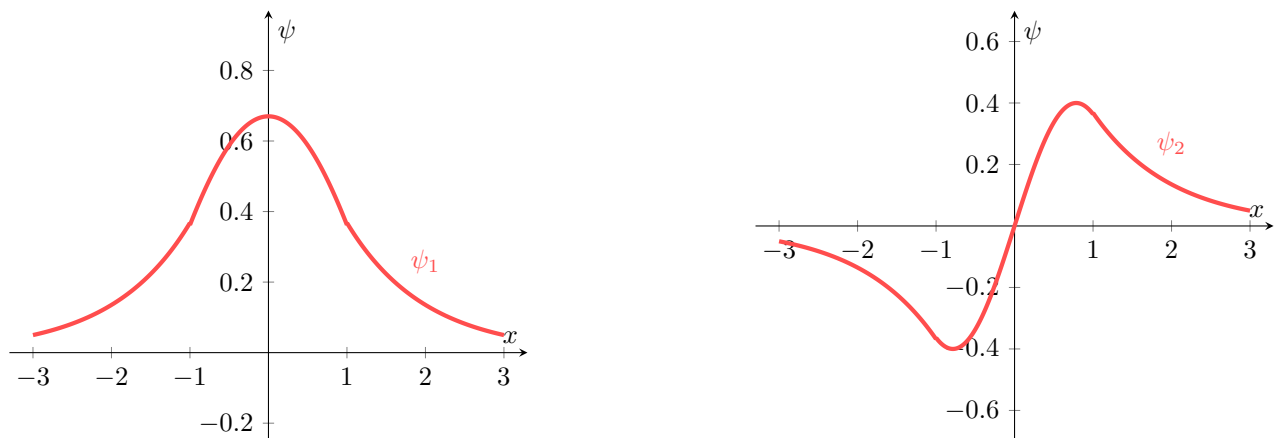


Figure 3: Bølgefunksjonene til partikkel i boks.

hvor

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

Her ser vi at den andrederiverte har motsatt fortegn som bølgefunksjonen selv. Dette betyr at bølgefunksjonen alltid blyer seg inn mot x-aksen, og det betyr altså at bølgefunksjonen oscillerer. Dette er det samme som vi fant for partikkel 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 bølgefunksjonen selv. Hvilket forteller oss at i områder hvor energien er mindre en potensialet så krummer alltid bølgefunksjonen vekk vekk fra x-aksen.

Vi ser her da at vi ikke kan ha en normaliserbar bølgefunksjon 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 partikkel i brønn hvor bølgefunksjon 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.

Harmonisk oscillator

Vi skal nå se på harmonisk oscillator potensialet, som er et veldig viktig potensiale 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 første-deriverte her og vi har

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

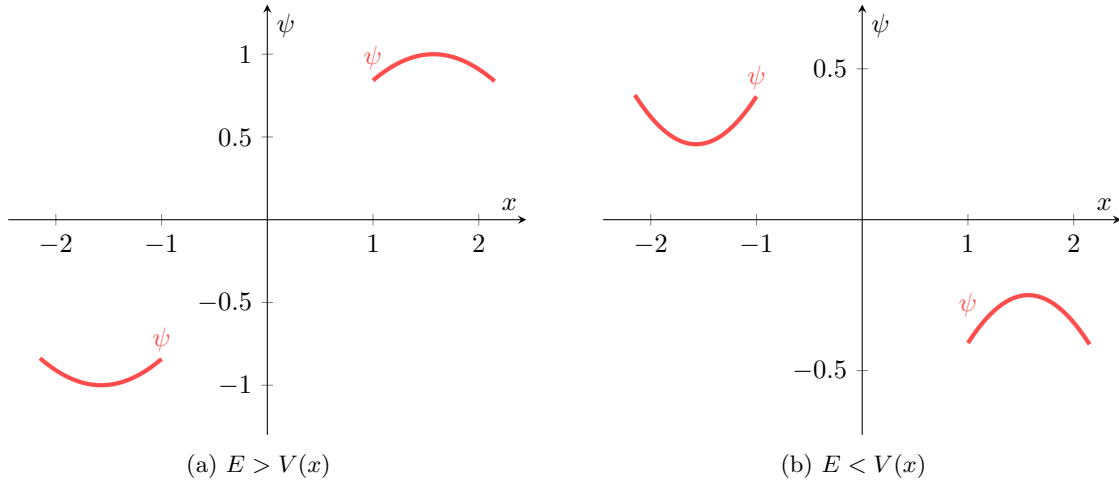


Figure 4: Energi egentilstander for områder med forskjellige potensial-størrelser.

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

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

Slik at vi har S.L.

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

Dette er en differensialligning 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 de 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

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

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

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

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

hvor vi har brukt symmetribetraktninger. 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 forenelig med Heisenberg's uskarphetsrelasjon, og vi kjenner det igjen som den faktiske grunntilstanden til H.O. Vi har da at den Gaussiske grunntilstanden er en minimum uskarphets-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 uskarphetsprinsipp 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 uskarphetsprinsipp for å beregne grunntilstandsenergien virket så bra fordi potensialet går som x^2 . For andre potensialer kan man også bruke Heisenberg uskarphetsprinsipp for å beregne energien i grunntilstanden men man må da typisk ty til approksimasjoner.

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

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

hvor vi merker oss at $\frac{2m}{\hbar^2}$ har dimensjoner $\frac{1}{\text{lengde}^2}$. Siden delta-funksjonen har dimension $\frac{1}{\text{lengde}}$ må vi da ha med konstanten $\frac{\alpha}{a}$ hvor α er dimensionsløs og a har dimensjon lengde. Vi kan nå variere α for å justere styrken på potensialet.

Vi vet at vi egentlig alltid ønsker oss kontinuerlige bølgefunksjoner og deriverte av bølgefunksjonene. Men hvis vi ser på

$$\int_{0-}^{0+} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} dx = \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)_{0+} - \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)_{0-} \quad (82)$$

$$= \frac{2m}{\hbar^2} \int_{0-}^{0+} (V(x) - E) dx \quad (83)$$

hvor vi har brukt S.L. og kalkulusens fundamental teorem. Vi har videre

$$\frac{2mE}{\hbar^2} \int_{0-}^{0+} \psi(x) dx = 0 \quad (84)$$

fordi bølgefunksjonen ikke kan være uendelig og integrasjonsdomenet infinitesimalt. Vi har videre at

$$\frac{2m}{\hbar^2} \int_{0-}^{0+} V(x) \psi(x) dx = -\frac{\alpha}{a} \int_{0-}^{0+} \delta(x) \psi(x) dx = -\frac{\alpha}{a} \psi(0) \quad (85)$$

Slik at vi har

$$\left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)_{0+} - \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)_{0-} = -\frac{\alpha}{a} \psi(0) \quad (86)$$

og vi ser at at den første-deriverte av bølgefunksjonen er diskontinuerlig. Og vi ser hvorfor bølgefunksjonen som regel er kontinuerlig og det er kun når potensialet er singulært at vi har diskontinuerlige bølgefunksjoner. Dette er også tilfellet for partikkel i boks hvor vi også hadde at potensialet gikk fra 0 til uendelig i punktet ved boksens ender. Vi ser over at venstresiden alltid forsvinner over et infinitesimalt intervall for alle ikke-singulære potensialer.

Vi løser nå S.L., og vi ser at til høyre og venstre for boksen har vi S.L.

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{-2mE}{\hbar^2} \psi \quad (87)$$

Vi ønsker bundne tilstander, dvs $E < 0$ og at partikkelen holder seg i nærheten av dirac deltaet. Vi definerer derfor

$$\kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \quad (88)$$

So gir på begge sidene av $x = 0$

$$\psi(x) = Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x} \quad (89)$$

hvor vi må se bort ifra de potensialene divergerer når $x \rightarrow \infty$ som da gir

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{-i\kappa x} & x \leq 0 \\ Ae^{i\kappa x} & x \geq 0 \end{cases} \quad (90)$$

Vi setter in for bølgefunksjonen i betingelsen for diskontinuerlighet av bølgefunksjonens deriverte i Lign. 86 og finner

$$-2\kappa A = -\frac{\alpha}{a} A \quad (91)$$

$$\Rightarrow \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} = \frac{\alpha}{2a} \quad (92)$$

$$\Rightarrow E = -\frac{\alpha^2 \hbar^2}{8ma^2} \quad (93)$$

Vi har bare en bundet tilstand for Dirac delta potensialet. Dette kunne vi også ha sett utifra våre kvalitative betraktninger om bølgefunksjonens krumning, hvor vi ser at bølgefunksjonen må ha positiv andre-derivert overalt, og i tillegg være kontinuerlig. Da er det bare en mulig bølgefunksjon som kan oppfylle dette. Dette burde vi kanskje også forvente utifra det vi så om partikkel i brønn, hvor vi fant at samme hvor stor eller dyb brønnen var, vil den alltid ha minst en bundet tilstand.

Dobbelt brønn og molekylærbinding

Vi har sett at vi kan se for oss potensialbrønnen som representativ for et elektron fanget av e.g. et Hydrogen atom, hvor potensialbrønnen befinner seg rundt protonet. Veien er kort derfra til å se for seg at vi kan bruke to potensialbrønner til å beskrive molekylærbinding til e.g. et H_2^+ ion. Vi kan bruke det til å se på hvorfor molekylær overhodet kan eksistere.

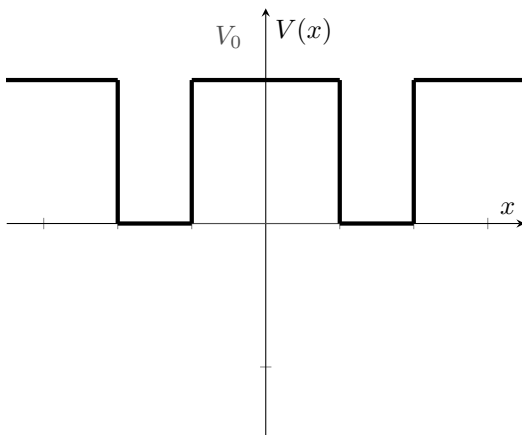


Figure 5: Potensialet $V(x)$ til dobbelt brønn.

Vi kan see kvalitativt på hvordan bølgefunksjonen ser ut for dobbel-brønnpotensialet. Igjen har vi at bølgefunksjonen er oscillatorisk inne i brønnen og eksponensiell utenfor. Vi har også at potensialet er symmetrisk $V(-x) = V(x)$ og derfor vil også bølgefunksjonen være det. Vi ser da at dette vil føre til at sannsynligheten for å finne elektronet er like stor i begge brønnene, altså ved begge protonene. Denne elektron-delingen er det som gjør at slike molekyler er stabile. Det er energetisk fordelaktig å dele på elektronet. Dette er litt knotete å regne ut dette nøyaktig siden vi får 8 randbetingelser vi må ta hensyn til. Vi ser derfor istedet på et enklere system som beskriver det samme konseptet.

Vi ser på en dobbel Dirac delta potensial.

$$\frac{2m}{\hbar^2}V(x) = -\frac{\alpha}{a}[\delta(x+a) - \delta(x-a)] \quad (94)$$

hvor vi igjen har

$$\psi(x) = Ae^{-\kappa x} + Be^{\kappa x} \quad (95)$$

i både til høyre og venstre og imellom brønnene. I mellom brønnene trenger vi ikke forkaste noen av leddene siden vi ikke har $x \rightarrow \infty$ her. Dette gir en symmetrisk

$$\psi_{sym}(x) = \begin{cases} Ae^{\kappa x} & x \leq -a \\ B \cosh(\kappa x) & x \in [-a, a] \\ Ae^{-\kappa x} & x \geq a \end{cases} \quad (96)$$

og en asymmetrisk

$$\psi_{asym}(x) = \begin{cases} Ae^{\kappa x} & x \leq -a \\ B \sinh(\kappa x) & x \in [-a, a] \\ -Ae^{-\kappa x} & x \geq a \end{cases} \quad (97)$$

bølgefunksjon, hvor vi minner om at vi har

$$\cosh(x) = \frac{e^x + e^{-x}}{2} \quad (98)$$

$$\sinh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{2} \quad (99)$$

$$\tanh(x) = \frac{\sinh(x)}{\cosh(x)} = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}} \quad (100)$$

$$(101)$$

Symmetrisk

Vi ser at bølgefunksjonen er symmetrisk rundt origo $\psi(-x) = \psi(x)$. Vi får nå at kontinuerlighet av bølgefunksjonen gir at vi må ha

$$B \cosh(\kappa a) = Ae^{-\kappa a} \quad (102)$$

og betingelsen for diskontinuerligheten for den første deriverte ved brønnen e.g. til høyre gir

$$\left(\frac{\partial \psi}{\partial x}\right)_{a^+} - \left(\frac{\partial \psi}{\partial x}\right)_{a^-} = -\frac{\alpha}{a} \psi(a) \quad (103)$$

$$\Rightarrow -\kappa A e^{-\kappa a} - \kappa B \sinh(\kappa a) = -\frac{\alpha}{a} B \cosh(\kappa a) \quad (104)$$

$$\Rightarrow -\kappa B \cosh(\kappa a) - \kappa B \sinh(\kappa a) = -\frac{\alpha}{a} B \cosh(\kappa a) \quad (105)$$

$$\Rightarrow -1 - \tanh(\kappa a) = -\frac{\alpha}{\kappa a} \quad (106)$$

$$\Rightarrow \tanh(\kappa a) = \frac{\alpha}{\kappa a} - 1 \quad (107)$$

hvor vi har brukt betingelsen for kontinuerlighet av bølgefunksjonen. Vi vet at $\tanh(\kappa a)$ alltid er mindre enn

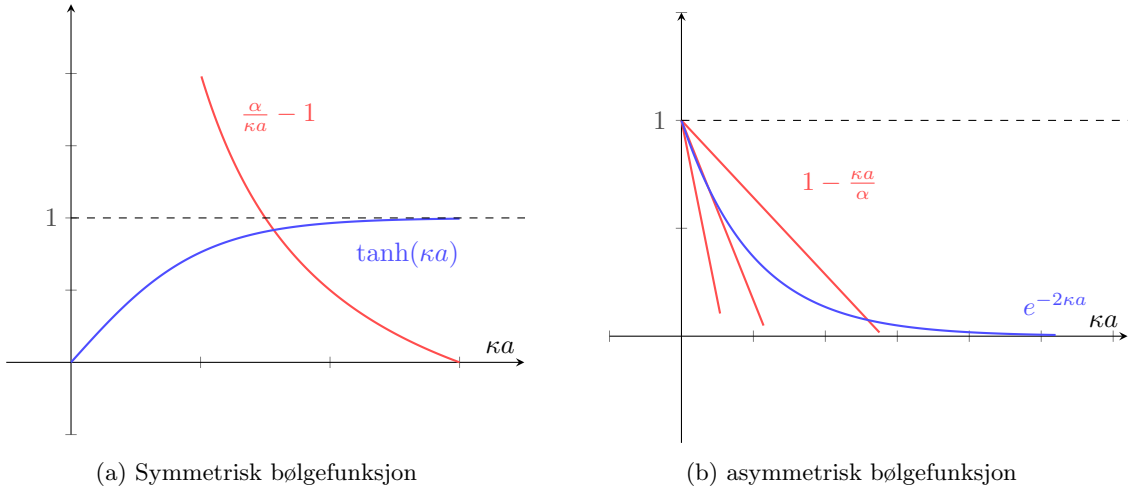


Figure 6: Transcendental ligning for energien i til dobbel Dirac delta potensial.

1 siden tangens hyperbolicus funksjonen er begrenset. Dette gir da

$$\frac{\alpha}{\kappa a} - 1 < 1 \quad (108)$$

$$\Rightarrow \kappa < \frac{\alpha}{2a} \quad (109)$$

$$\Rightarrow E < -\frac{\hbar^2 \alpha^1}{8ma^2} \quad (110)$$

Asymmetrisk

Vi ser nå på den asymmetriske bølgefunksjonen rundt origo $\psi(-x) = -\psi(x)$. Vi får nå at kontinuerlighet av bølgefunksjonen i dette tilfellet ved $x = a$ gir

$$B \sinh(\kappa x) = -Ae^{-\kappa x} \quad (111)$$

og betingelsen for diskontinuerligheten for den første deriverte ved brønnen e.g. til høyre gir

$$\left(\frac{\partial \psi}{\partial x}\right)_{a^+} - \left(\frac{\partial \psi}{\partial x}\right)_{a^-} = -\frac{\alpha}{a} \psi(a) \quad (112)$$

$$\Rightarrow \kappa A e^{-\kappa a} - \kappa B \cosh(\kappa a) = -\frac{\alpha}{a} B \sinh(\kappa a) \quad (113)$$

$$\Rightarrow -\kappa B \sinh(\kappa a) - \kappa B \cosh(\kappa a) = -\frac{\alpha}{a} B \sinh(\kappa a) \quad (114)$$

$$\Rightarrow -(e^{\kappa a} - e^{-\kappa a}) - (e^{\kappa a} + e^{-\kappa a}) = -\frac{\alpha}{\kappa a} (e^{\kappa a} - e^{-\kappa a}) \quad (115)$$

$$\Rightarrow -2e^{\kappa a} = -\frac{\alpha}{\kappa a} (e^{\kappa a} - e^{-\kappa a}) \quad (116)$$

$$\Rightarrow \frac{2e^{\kappa a}}{e^{\kappa a} - e^{-\kappa a}} = \frac{\alpha}{\kappa a} \quad (117)$$

$$\Rightarrow \frac{1}{1 - e^{-2\kappa a}} = \frac{\alpha}{2\kappa a} \quad (118)$$

$$\Rightarrow e^{-2\kappa a} = 1 - \frac{2\kappa a}{\alpha} \quad (119)$$

hvor vi har brukt betingelsen for kontinuerlighet av bølgefunksjonen.

Vi har nå funnet den transcendentale ligningen for energinivåer for den asymmetriske bølgefunksjon. Vi ser at vi trenger å ha at H.S. stiger fortere en $e^{-2\kappa a}$ ved $\kappa a = 0$ for at ligningen har en løsning. Vi ser derfor på stigningstallene gitt ved de deriverte ved $x = 0$ av V.S.

$$\left[\frac{\partial}{\partial \kappa a} e^{-2\kappa a}\right]_0 = \left[-2 \tanh^{-2\kappa a}\right]_0 = -2 \quad (120)$$

og H.S.

$$\left[\frac{\partial}{\partial \kappa a} \left(1 - \frac{2\kappa a}{\alpha}\right)\right]_0 = -\frac{2}{\alpha} \quad (121)$$

Vi har da følgende krav for at det finnes asymmetriske bundne tilstander

$$-\frac{2}{\alpha} < -2 \quad (122)$$

$$\Rightarrow \alpha > 1 \quad (123)$$

$$(124)$$

hvor vi da ser at vi bare har en bundet tilstand med asymmetrisk bølgefunksjon og bare når $\alpha > 1$. Hvis $\alpha < 1$ har vi kun en bundet tilstand, nemlig den symmetriske, siden potensialet ikke er sterkt nok til å holde på mer energetiske tilstander.

Molekyler

Hvor vi ser at et elektrons energi er mindre hvis det er bundet i en dobbeltbrønn enn om det er bundet i en enkeltbrønn. Dette er grunnen til at molekyler dannes og at vi ikke bare har atomer. Dette er noe som går igjen i flere sammenhenger, og det at bølgefunksjonen til elektroner kan være på flere atomer samtidig gjør at det er energetisk fordelaktig for elektroner å slå seg sammen til molekyler.

Spredning og trinnpotensialet

Vi har til nå sett på tilstander som har vært bundne, til forskjellige potensialer. Vi skal nå igjen se på løsninger av S.L. hvor partikkelen ikke er bundet, slik som var tilfellet for den frie S.L. Vi vil da igjen se at vi ikke får noen føringer på tillatte energier, og vi finner et kontinuum av energier. Vi har da at vi må overlagre løsninger fra kontinuumet av S.L. elementære løsninger med forskjellige energier for å lage en lokalisert og normaliserbar bølgepakke som er en fysisk tillatt bølgefunksjon. Bølgepakken består av løsninger med forskjellige energier så den vil utvikle seg i tid, og vi ser nå på hvordan slike løsninger utvikler seg i tid når de treffer potensialer. Vi kaller vi spredning når ikke-bundne tilstander's tidsutvikling betraktes.

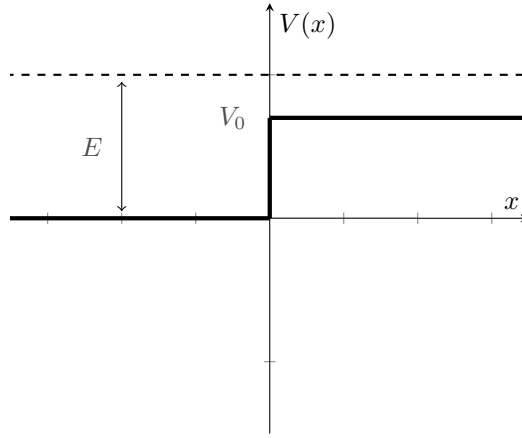


Figure 7: Trinnpotensialet $V(x)$ til en som en partikkel spredes på.

Vi starter med å betrakte

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & x > 0 \end{cases} \quad (125)$$

Nå antar vi at energien er større enn potensial-barrieren $E > V_0$. Vi har da S.L.

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi \quad x < 0 \quad (126)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \psi \quad x > 0 \quad (127)$$

hvor vi definerer

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (128)$$

$$k_0 = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} = \sqrt{k^2 - \frac{2mV_0}{\hbar^2}} \quad (129)$$

Vi finner da løsningene

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & x < 0 \\ Ce^{ik_0x} + De^{-ik_0x} & x > 0 \end{cases} \quad (130)$$

Dette er ikke normaliserbart så vi kan ikke bruke normaliseringskravet for å bestemme konstantene, det vi istedenfor gjør er å se på sannsynlighetsstrømmen

$$j(x) = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \frac{\partial}{\partial x} \psi - \psi \frac{\partial}{\partial x} \psi^* \right) \quad (131)$$

som for vår bølgefunksjon blir

$$j(x) = \begin{cases} \frac{\hbar k}{m} (|A|^2 - |B|^2) & x < 0 \\ \frac{\hbar k_0}{m} (|C|^2 - |D|^2) & x > 0 \end{cases} \quad (132)$$

Her ser vi at de positive leddene representerer sannsynlighetsstrøm mot høyre langs x-aksen, og de negative leddene til venstre, og vi ser at sannsynlighetsstrømmen beveger seg med hastighet som er gitt ved farten til partikkelen i det mediumet den befinner seg i. Vi ser her også at vi må sette $D = 0$, det er fordi dette representerer en sannsynlighetsstrøm som kommer inn fra høyre mot trinnpotensialet og det er ikke dette vi ønsker å se på. Vi vil betrakte en som kommer fra venstre og spres på potensial trinnet. Vi definerer

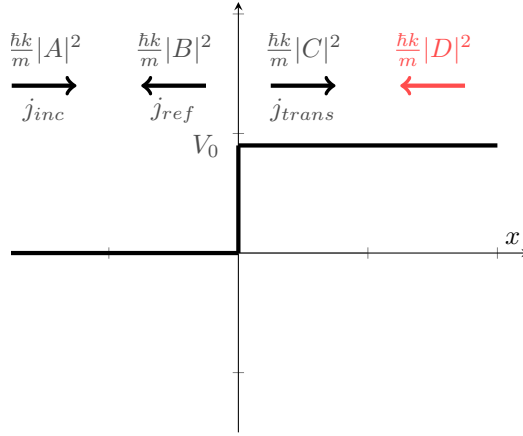


Figure 8: sannsynlighetsstrømmen til en partikkel som spres på et trinn potensiale.

refleksjons og transmisjonskoeffisientene som

$$R = \frac{j_{ref}}{j_{inc}} = \frac{\frac{\hbar k}{m}|B|^2}{\frac{\hbar k}{m}|A|^2} = \frac{|B|^2}{|A|^2} \quad (133)$$

$$T = \frac{j_{trans}}{j_{inc}} = \frac{\frac{\hbar k_0}{m}|C|^2}{\frac{\hbar k}{m}|C|^2} \frac{j_{trans}}{j_{inc}} = \frac{k_0|C|^2}{k|A|^2} \quad (134)$$

Vi ser da at transmisjonskoeffisienten ikke bare er $|C|^2/|A|^2$ siden partikkelen beveger seg saktere i regionen til høyre for trinnet ($x > 0$).

Vi bruker nå kravet om at bølgefunksjonen må være kontinuerlig overalt, og spesielt ved $x = 0$ til å finne

$$A + B = C + D \quad (135)$$

og kontinuitet av de første deriverte gir

$$Aik - ikB = ik_0C - ik_0D \quad (136)$$

Vi har 2 ligninger for å bestemme 4 ukjente. Det er mange måter å oppfylle dette underbestemte lignings-

settet. Vi valgte allerede å sette $D = 0$ på fysikalsk grunnlag. Så vi får nå

$$A + B = \frac{k}{k_0}(A - B) \quad (137)$$

$$\Rightarrow k_0(A + B) = k(A - B) \quad (138)$$

$$\Rightarrow A(k_0 - k) = -B(k_0 + k) \quad (139)$$

$$\Rightarrow \frac{A}{B} = \frac{k + k_0}{k - k_0} \quad (140)$$

$$(141)$$

og

$$ik_0C = ikA - ikA \frac{k - k_0}{k_0 + k} \quad (142)$$

$$k_0C(k + k_0) = kA(k + k_0) - kA(k - k_0) \quad (143)$$

$$k_0C(k + k_0) = Akk_0 + Akk_0 \quad (144)$$

$$C(k + k_0) = 2Ak \quad (145)$$

$$\frac{A}{C} = \frac{k + k_0}{2k} \quad (146)$$

Vi ser nå at vi ikke har noe krav om hvilke energier som er tillatt. Dette kommer av at vi har en situasjon hvor partikkelen ikke er restriktet til et avgrenset område i rommet. Vi får da

$$R = \frac{(k - k_0)^2}{(k + k_0)^2} \quad (147)$$

$$T = \frac{4kk_0}{(k + k_0)^2} \quad (148)$$

Vi har da også

$$R + T = 1 \quad (149)$$

som vi selvsagt burde ha.

Spredning av bølgepakke

Vi har allerede sett at vi kan lage normaliserbare bølgefunksjoner som en superposisjon av planbølger med forskjellig energi. Vi kan her skrive det som

$$\Psi(x, t) = \begin{cases} \int_{-\infty}^{\infty} [A(k)e^{i(kx - \frac{E}{\hbar}t)} - B(k)e^{i(kx + \frac{E}{\hbar}t)}] dx & x < 0 \\ \int_{-\infty}^{\infty} C(k)e^{i(k_0x - \frac{E}{\hbar}t)} dx & x > 0 \end{cases} \quad (150)$$

hvor vi ser at leddet med $A(k)$ og $C(k)$ er bølger som beveger seg mot høyre og $B(k)$ beveger seg mot venstre. Vi kan også beregne transmissjon og refleksjons koeffisientene ved å beregne integralene og finne et eksakt uttrykk for $\Psi(x, t)$ og deretter integrere $|\Psi|^2$ på høyre og venstre side av potensial trinnet etter partikkelen treffer potensialet.

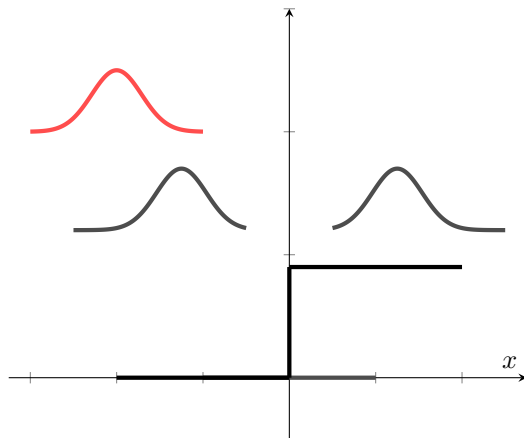


Figure 9: sannsynlighetsstrømmen til en partikkel som spres på et trinn potensiale.