Kvantemekanik, afl. 5

Gorm Balle Feldstedt

En partikel bevæger sig langs x-aksen i potentialet $V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & x > 0 \end{cases}$. Det oplyses, at løsninger til den stationærer Schrödinger-ligning med energi $E > V_0$ kan skrives på formen $\psi_k(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Be^{-ikx} & x < 0 \\ Fe^{iqx} & x > 0 \end{cases}$.

1) Bestem, hvordan konstanterne k og q afhænger af V_0 og E, og at $\frac{q}{k} = \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}$.

Vi benytter den stationære Schrödinger-ligning for x større end hhv. mindre end 0:

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

$x < 0$:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_k}{dx^2} &= \frac{\hbar^2}{2m}k^2(e^{ikx} + Be^{-ikx}) \\ &= E\psi = E(e^{ikx} + Be^{-ikx}) \\ &\Updownarrow \\ k &= \frac{\sqrt{2Em}}{\hbar} \end{aligned}$$

$x > 0$:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_k}{dx^2} &= \frac{\hbar^2}{2m}q^2Fe^{iqx} \\ &= (E - V_0)\psi = (E - V_0)Fe^{iqx} \\ &\Updownarrow \\ q &= \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} \end{aligned}$$

Det giver os

$$\frac{q}{k} = \frac{\hbar\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar\sqrt{2mE}} = \sqrt{\frac{E - V_0}{E}} = \sqrt{1 - V_0/E}$$

2) Vis, at $B = \frac{1-q/k}{1+q/k}$ og $F = \frac{2}{1+q/k}$.

Vi må kræve, at partiklens bølgefunktion er kontinuert i $x = 0$. Det vil sige: $\psi(0_+) = \psi(0_-)$

$$\begin{aligned} \psi(0_+) &= Fe^{iq0} = F \\ = \psi(0_-) &= e^{ik0} + Be^{-ik0} = 1 + B \\ &\Updownarrow \\ F &= 1 + B \end{aligned}$$

Ligeledes må vi kræve, at den afledte af bølgefunktionen er kontinuert i $x = 0$.

$$\begin{aligned} \left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{0_-} &+ = ike^{ik0} - ikBe^{ik0} \\ = \left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{0_+} &+ = iqFe^{iq0} \\ &\Updownarrow \\ k(1 - B) &= qF = q(1 + B) \\ k - kB &= q + qB \\ k - q &= B(k + q) \\ B &= \frac{k - q}{k + q} = \frac{1 - q/k}{1 + q/k} \end{aligned}$$

$$F = B + 1 = \frac{1 - q/k}{1 + q/k} + 1 = \frac{1 - q/k}{1 + q/k} + \frac{1 + q/k}{1 + q/k} = \frac{2}{1 + q/k}$$

3) Betragt tilfældet $E < V_0$ med løsninger $\psi_k(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Be^{-ikx} & x < 0 \\ Fe^{-i\lambda x} & x > 0 \end{cases}$. Bestem k, λ, B og F.

Vi bruger samme fremgangsmåde. Først benyttes den stationære Schrödinger-ligning for $x < 0$ og $x > 0$. Først $x < 0$:

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} &= \frac{k^2\hbar^2}{2m}(e^{ikx} + Be^{-ikx}) \\ &= E\psi = E(e^{ikx} + Be^{-ikx}) \\ &\Updownarrow \\ k &= \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \end{aligned}$$

Dernæst $x > 0$:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi}{dx^2} &= -\frac{\hbar^2\lambda^2}{2m}Fe^{-\lambda x} \\ &= (E - V_0)\psi = (E - V_0)Fe^{-\lambda x} \end{aligned}$$

Det giver os:

$$
\begin{aligned}
-\lambda^2 = i^2\lambda^2 &= \frac{(E - V_0)2m}{\hbar^2} \\
\lambda &= \frac{\sqrt{(E - V_0)2m}}{\hbar i} \\
&= -i\frac{\sqrt{(E - V_0)2m}}{\hbar}
\end{aligned}
$$

Ligesom før kan vi beregne $\lambda/k = -i\sqrt{(E - V_0)/E} = -i\sqrt{1 - V_0/E}$. Og ligesom før kan vi kræve, at bølgefunktionen er kontinuert, hvilket giver os:

$$
\begin{aligned}
\psi(0_+) &= F \\
= \psi(0_-) &= 1 + B
\end{aligned}
$$

Desuden kræver vi, at den afledte er kontinuert:

$$
\begin{aligned}
\left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{0_+} &= i\lambda F \\
= \left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{0_-} &= ik - ikB \\
&\Updownarrow \\
\lambda F = \lambda(B + 1) &= k(1 - B) \\
k - \lambda &= B(\lambda + k) \\
B &= \frac{k - \lambda}{k + \lambda} = \frac{1 - \lambda/k}{1 + \lambda/k}
\end{aligned}
$$

Og som før følger det, at

$$
F = \frac{1 - \lambda/k}{1 + \lambda/k} + 1 = \frac{1 - \lambda/k}{1 + \lambda/k} + \frac{1 + \lambda/k}{1 + \lambda/k} = \frac{2}{1 - \lambda/k}.
$$

4) $R = |B|^2$ kan fortolkes som en reflektionskoefficient. Hvilke værdier kan R antage i tilfældene $E > V_0$ og $E < V_0$. Argumenter for den fysiske fornuft.

Vi følger en række af implikationer:

$$
E > V_0 \Rightarrow \sqrt{1 - V_0/E} \text{ reel} \Rightarrow q/k = 1 - V_0/E > 0 \Rightarrow B < 1 \Rightarrow |B|^2 < 1
$$

I tilfældet $E = V_0$ får vi $q/k = 0 \Rightarrow B = 0$.
For $E < V_0$ får vi

$$
E < V_0 \Rightarrow q/k = \sqrt{1 - V_0/E} \text{ imaginær, så } q/k \text{ kan skrives som } q/k \equiv \alpha i \Rightarrow |B|^2 = \frac{1 - \alpha i}{1 + \alpha i} \cdot \frac{1 + \alpha i}{1 - \alpha i} = 1
$$

Dvs. hvis partiklens energi er lavere end energibarrieren, bliver den fuldstændig reflekteret. Med klassisk tankegods er det ikke mærkeligt, men vi har set animationer, der viser, at for en barriere af endelig bredde, kan noget af bølgefunktionen "skvulpe" op over sit egentlige energiniveau og komme ud på den anden side af barrieren. Idet barrieren i dette tilfælde er uendelig, er der ikke nogen anden side, og partiklen kan derfor ikke tunnellere sig igennem. For partikelenergier højere end potentialforskellen ser vi som ventet en reflektionskoefficient mellem 0 og 1.