

Kvantfysik F0047T

Simon Johnsson

Luleå – HT20

Från och med lektion 6!!!

1 Potential som elastisk potentiell energi

I klassisk mekanik är elastisk potentiell energi $\frac{1}{2}kx^2$ men inte riktigt i QM.

Går att lösa på två sätt:

1. Algebraisk metod
2. Analytisk metod

1.1 Algebraisk metod

Tar ut algebraiskt med hjälp av TOSE stegoperatorerna \hat{a}_+ och \hat{a}_- . Stegoperatorerna är ej kommutativa så vi kan inte bara byta plats på dem.

Vi kan ta fram en kommutator för lägesoperatorn och rörelsemängdsoperatorn $[\hat{x}, \hat{p}]$:

Vi använder oss av en testfunktion $f(x)$ för att kunna evaluera Stegoperatorerna.

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{p}]f(x) &= (\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})f(x) = -i\hbar \left(x \frac{d}{dx} f(x) - \frac{d}{dx} (xf(x)) \right) = \\ &= -i\hbar \left[x \frac{d}{dx} f(x) - \frac{dx}{dx} f(x) - x \frac{d}{dx} f(x) \right] = i\hbar f(x) \end{aligned}$$

$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ kallas "canonical commutation relation" / "Osäkerhets sambandet"

Detta resultat appliceras på stegoperatorerna:

$$\begin{aligned} \hat{a}_- \hat{a}_+ &= \frac{1}{2\hbar m\omega} [\hat{p}^2 + (m\omega\hat{x})^2] - \frac{i}{2\hbar} [\hat{x}, \hat{p}] \\ \hat{a}_- \hat{a}_+ &= \frac{1}{\hbar\omega} \hat{H} - \frac{i}{2\hbar} (i\hbar) = \frac{1}{\hbar\omega} \hat{H} + \frac{1}{2} \end{aligned}$$

$$\hat{H} = \hbar(\hat{a}_-\hat{a}_+ - \frac{1}{2})$$

Jämföra med att byta plats på stegoperatorerna:

$$\hat{a}_+\hat{a}_- = \frac{1}{\hbar\omega}\bar{H} - \frac{1}{2}$$

$$\hat{H} = \hbar(\hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2})$$

Vilket leder till att vi kan skriva hamiltonoperatoren $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}_\mp\hat{a}_\pm \mp \frac{1}{2})$

Sätter in uttrycket i SE:

$$\hbar\omega(\hat{a}_\mp\hat{a}_\pm \mp \frac{1}{2})\Psi = E\Psi$$

Om vågfunktionen Ψ är en egenfunktion med egenvärde E , vad är $\hat{a}_\pm\Psi$?

Från SE för harmonisk oscillator: $\hat{H}\hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2} = \hbar\omega(\hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2})\hat{a}_+\Psi$

$$\hat{H}(\hat{a}_+\Psi) = \hbar\omega(\hat{a}_+\hat{a}_-\hat{a}_+ + \frac{1}{2}\hat{a}_+)\Psi = \hbar\omega\hat{a}_+(\hat{a}_-\hat{a}_+ + \frac{1}{2})\Psi$$

För att kommutatorn $[\hat{a}_-, \hat{a}_+]$ ska vara kommutativt så måste den vara lika med 1 detta leder till:

$$\hat{H}(\hat{a}_+\Psi) = \hbar\omega\hat{a}_+(1 + \hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2})\Psi = \hat{a}_+(\hat{H} + \hbar\omega)\Psi = \hat{a}_+(E + \hbar\omega)\Psi$$

Mellantermen är en konstant och kommutativ med de andra termerna:

$$\hat{H}(\hat{a}_+\Psi) = (E + \hbar\omega)\hat{a}_+\Psi$$

Detta betyder att om $\hat{H}\Psi = E\Psi$ så är $\hat{a}_+\Psi$ en egenfunktion med egenvärde $E + \hbar\omega$.

På samma sätt så ger det att $\hat{a}_-\Psi$ är en egenfunktion med egenvärde $E - \hbar\omega$.

$$\hat{H}(\hat{a}_-\Psi) = (E - \hbar\omega)\hat{a}_-\Psi$$

Detta gör så att om man multiplicerar vågfunktionen med steg-upp-operatoren \hat{a}_+ så ökar energin med $\hbar\omega$ för varje gång man gör det. Och på samma sätt för steg-ner-operatoren men denna kan inte gå oändligt långt ner utan det finns ett stopp nedåt på E_0 .

OBS: $\hat{a}_\pm\Psi$ behöver inte vara normerade även om Ψ är det.

Vi tar lägsta energinivån E_0 , om vi applicerar \hat{a}_- : $\hat{a}_-\Psi_0 = 0$

I SE:

$$\frac{d}{dx}\Psi_0 + \frac{m\omega}{\hbar}x\Psi_0 = 0$$

Om man integrerar detta får man:

$$\ln \Psi_0 = -\frac{m\omega}{\hbar} \frac{x^2}{2} + c$$

vilket kan skrivas om till:

$$\Psi_0 = Ae^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$$

För allmän lösning så behöver vi först normera Ψ_0

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |A|^2 e^{-(m\omega x^2)/\hbar} dx = A^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}}$$

$$A = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}$$

Vilket ger:

$$\Psi_0 = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$$

Detta är stationära tillståndet för harmoniska oscillatorn för lägsta energi.

Hur ser E_0 ut?

Från SE: Beräkna energi för Ψ_0 :

$$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2}) = \frac{1}{2}\hbar\omega\Psi_0 = E_0\Psi_0$$

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

Ψ_0 , E_0 är grundtillståndet vilket gör att de resterande är exiterade tillstånd och kan beskrivas med hjälp av att kliva uppåt med \hat{a}_+ :

Energi för exiterade tillstånd:

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$$

vågfunktionen för exiterade tillstånd:

$$\Psi_n(x) = A_n(\hat{a}_+)^n \Phi_0(x)$$

Där n är större eller lika med 0.

Den generella vågfunktionen skulle då bli:

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \Psi_n(x, t)$$

Titta själv på sida 45-46 och räkna på det!

1.2 Analytisk metod

OBS: Denna metod kan användas till många andra potentialer så den är mer generell än den algebraiska metoden

Lösning till SE:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\Psi = E\Psi$$

Föra över till dimensionsfri (multipliserar med $\frac{2}{\hbar\omega}$):

$$-\frac{d^2\Psi}{d\zeta^2} + \zeta^2\Psi = K\Psi$$

Löser vi SE så får vi $K > 0$ och $\zeta > \infty$ vilket ger:

$$\Psi(\zeta) = Ae^{-\frac{\zeta^2}{2}} + Be^{\frac{\zeta^2}{2}}$$

Här är första termen normerbar men inte andra då om $\zeta > \infty$ så går hela termen mot ∞ .

$$\Psi(\zeta) = h(\zeta)e^{-\frac{\zeta^2}{2}} \quad \text{Fysikaliska Lösningen}$$

Detta är fortfarande en exakt lösning.

Hur ser SE ut nu?

$$\frac{d^2\Psi}{d\zeta^2} + (K - \zeta^2)\Psi = 0$$

Vilket när man beräknat dubbelderivatnan kan skrivas som:

$$\frac{d^2h(\zeta)}{d\zeta^2} - 2\zeta \frac{dh(\zeta)}{d\zeta} + (K - 1)h(\zeta) = 0$$

- För små ζ ansätts en potensserie: $h(\zeta) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m \zeta^m$
Detta ger SE:

$$\sum_{m=0}^{\infty} a_{m+2}(m+2)(m+1)\zeta^m - 2 \sum_{m=0}^{\infty} a_m m \zeta^m + (K-1) \sum_{m=0}^{\infty} a_m \zeta^m = 0$$

$$\text{Potenser för } \zeta^m \Rightarrow a_{m+2}(m+2)(m+1) + (K-1-2m)a_m = 0$$

Hur ser serien ut?

- För stora m skulle serien vara proportionerlig med $\zeta^2 e^{\zeta^2}$ vilken inte är normerbar. D.v.s. att serien måste ha ett högsta m -värde.

$$(m+2)(m+1)a_{m+2} = (2m+1-K)a_m$$

Om $K = 2n+1$ då stannar serien ($K = \frac{2E}{\hbar\omega}$) vilket gör $\frac{2E}{\hbar\omega} = (2n+1)$ vilket ger:

$$E = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$$

Och detta är samma ekvation som i den algebraiska lösningen.

$h(\zeta)$ kallas för **Hermite polynom** $H(\zeta)$

SE (*med* $H(\zeta)$):

$$\frac{d^2 H_n(\zeta)}{d\zeta^2} - 2\zeta \frac{dH_n(\zeta)}{d\zeta} + 2nH_n(\zeta) = 0$$

Där $\Psi_n(x)$ bestäms utav:

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\zeta) e^{-\frac{\zeta^2}{2}}$$

2 Potential $V(x) = 0 \Rightarrow$ den fria partikeln

SE: $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} = E\Psi$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{E2m}{\hbar^2}\Psi = 0$$

Partikeln kan ha alla energier ($E > 0$).

Lösningen:

$$\Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

Allmänna lösningen:

$$\Psi(x, t) = Ae^{ikx}e^{-i\frac{E}{\hbar}t} + Be^{-ikx}e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

Med $\frac{E2m}{\hbar^2} = k^2 \Rightarrow E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

$$\pm ikx - i\frac{\hbar k^2}{2m}t = \pm ik\left(s \mp \frac{\hbar k}{2m}t\right)$$

$$\Psi(x, t) = Ae^{ik\left(x - \frac{\hbar k}{2m}t\right)} + Be^{-ik\left(x + \frac{\hbar k}{2m}t\right)}$$

Där första termen är en våg som går åt höger och andra en våg som går åt vänster.

Skriver vi $\Psi(x, t)$ mer kompakt:

$$\Psi_k(x, t) = Ae^{i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)}$$

Där $k = \pm \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

Vågnummer: $k = \frac{2\pi}{\lambda}$

Våglängd: $\lambda = \frac{2\pi}{|k|}$

Våghastighet:

$$V_{quantum} = \frac{\hbar|k|}{2m} = \sqrt{\frac{E}{2m}}$$

$$V_{classic} = \sqrt{\frac{2E}{m}}$$

1. $V_{quantum} = \frac{V_{classic}}{2}$

2. Normering?

$\Psi(x, t) = Ae^{i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)}$ går ej att normera. **Fri partikel kan ej beskrivas med stationärt tillstånd!**

Bygg ett vågpaket:

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)} dk$$

Denna är normerbar!

Om $\Psi(x, 0)$ känd $\rightarrow \phi(k)$ [Planchet's theorem]:

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x, 0) e^{-ikx} dx$$

alla $\omega(k)$:

- Taylor expansion ($k_0 \rightarrow \omega(k) \approx \omega_0 + \omega'_0(k - k_0)$)
- variabel $\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{i(kx - \omega t)} dk$$

3 Potential barriär (*potential step*)

Potentialen $V(x)$ består utav en stegfunktion så att den går mot oändligheten åt ena hållet med värdet 0 och sedan ett värde V_0 åt andra hållet.

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

$H(x)$ är heaviside funktionen.

FALL I: Om $V = 0, x < 0$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + k^2\Psi, \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$$

Eigenfunktion:

$$\Psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

Om vågen kommer från vänster så kommer en reflekterande tillbaka

FALL II: Om $V = V_0, x > 0$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + q^2\Psi, \quad q^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)$$

Eigenfunktion:

$$\Psi(x) = C e^{iqx}$$

Här blir det ingen reflekterad våg.

- vågfunktionen $\Psi(x)$ är kontinuerlig
- $\frac{d\Psi}{dx}$ är kontinuerlig (Om V är ändlig)

Vid randen mellan de två olika lösningarna matchar vi de två vågekvationerna.
Vid $x = 0$

$$Ae^{ik0} + Be^{-ik0} = Ce^{iq0} \implies A + B = C$$

För stationära tillstånd i 1D: **Probability current density** (se problem 1.14):

FALL I

$$j = \frac{\hbar}{2im} \left(\Psi^* \frac{d\Psi}{dx} - \frac{d\Psi^*}{dx} \Psi \right) = \frac{\hbar}{2im} \left((A^* e^{-ikx} + B^* e^{ikx})(Ae^{ikx} - Be^{-ikx}) - (-A^* ike^{-ikx} + B^* ike^{ikx})(Ae^{ikx} - Be^{-ikx}) \right)$$

$$j = \frac{\hbar k}{2m} (|A|^2 - |B|^2)$$

FALL II

$$\Psi(x) = Ce^{iqx}$$

$$j = \frac{\hbar q}{m} |C|^2$$

Strömmen i (**I**, **II**) ska vara lika vid $x = 0$:

$$j_I = j_{II}$$

Derivatan är kontinuerlig vid $x = 0$

$$\left(\frac{d\Psi}{dx} \right)_I = Aike^{ikx} - Bike^{-ikx}$$

$$\left(\frac{d\Psi}{dx} \right)_{II} = Ciqe^{ikx}$$

DEF: Reflexionskoefficient

$$R = \frac{\frac{\hbar k}{m} |B|^2}{\frac{\hbar k}{m} |A|^2} = \frac{|B|^2}{|A|^2}$$

DEF: Transmissionskoefficient

$$T = \frac{q|C|^2}{k|A|^2}$$

Uttrycka koefficienterna i endast k och q :

$$R = \frac{(k - q)^2}{(k + q)^2}$$

$$T = \frac{4kq}{(k + q)^2}$$

Beskrivet med energi och potential:

$$R = \frac{(1 - \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}})^2}{(1 + \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}})^2}$$

$$T = \frac{4\sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}}{(1 + \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}})^2}$$

4 Potential barriär

En potential barriär är en fyrkantspuls.

$$V(x) = V_0(H(x+a) - H(x-a))$$

Man kan dela upp det i tre fall, innan, i och efter barriären.

FALL II i barriären:

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

Lösningen: $\Psi_{II} = Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x}$

FALL I $\Psi_I = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$

FALL III $\Psi_{III} = Ee^{ikx}$

T ges utav:

$$|T|^2 = \frac{2k\kappa}{(k^2 + \kappa^2)^2 \sinh^2(2\kappa a) + (2k\kappa)^2}$$

Detta kallas *Tunneling*