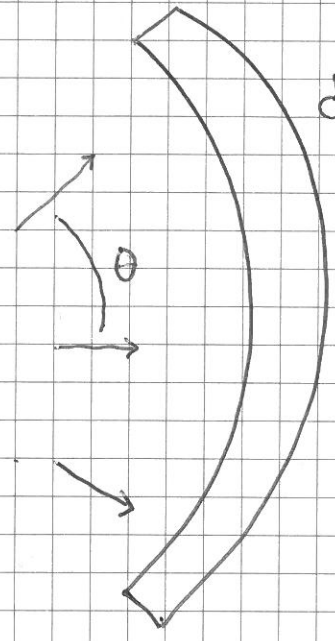
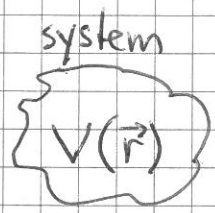


Spredning i en dimensjon

[PCH 3.6; DFG 2.5-2.7; IØ 3.6]

Spredningeksperimenter:

partikkelstråle
inn; energi E

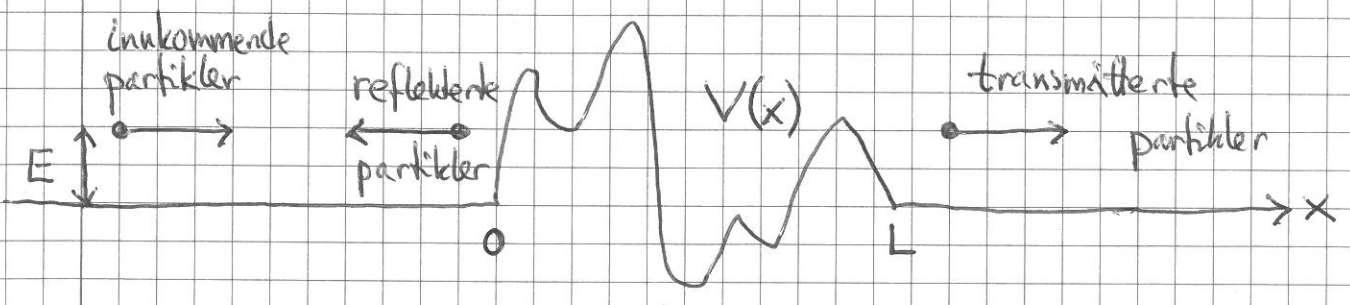


detektor;
 $I(\theta; E)$
gir informasjon om systemet

(nøytroner, elektroner, fotoner, ...)

[3D: TFX4205 QM 2]

Bare 2 muligheter i 1D: Refleksjon eller transmisjon



R = sannsynlighet for refleksjon

T = " " " " transmisjon

\Rightarrow $R + T = 1$

Klassiske analogier: Bølge på streng inn mot overgang til tykkere/tynnere streng. Plan lydølge inn mot plan grenseflate mot annet medium.

Ser på dette som stationært problem, dvs bestemt

energi E og impuls $p = \hbar k$ på innkommende partikler.

Antar $V = 0$ for $x < 0$:

Løsn. av TVSL, $-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' = E\psi$, er da $e^{\pm ikx}$,

med vilkårlig positiv energi $E = \hbar^2 k^2 / 2m$. Bare

$$\psi_i(x) = e^{ikx}$$

gir innkommende partikkel/bølge fra venstre, mens

$$\psi_r(x) = r e^{-ikx}$$

må velges for reflektert bølge (som går mot venstre).

Antar (i første omgang) også $V = 0$ for $x > L$:

$$\psi_t(x) = t e^{ikx}$$

for transmittert bølge (ingen partikler inn fra høyre).

For $0 < x < L$ er $V(x)$ et eller annet, og

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

må løses etter beste evne (analytisk evt. numerisk!)

og "matches" (kontinuerlig ψ og ψ') til

$$\psi_i(x) + \psi_r(x) \quad \text{i } x=0$$

$$\text{og } \psi_t(x) \quad \text{i } x=L$$

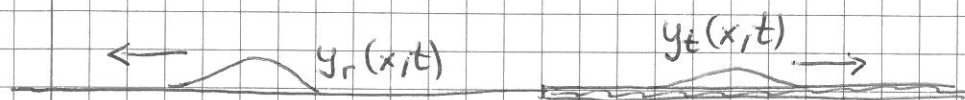
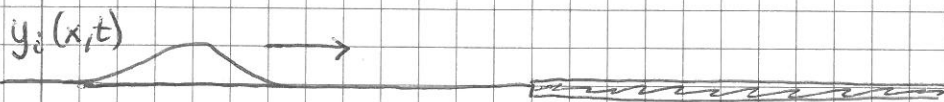
Har her ikke-normerbare bølgefunksjoner (plane bølger)

(60)

• \Rightarrow Vi betrakter heller sannsynlighetsstrømmen (s. 37)

$$j = \text{Re} \left\{ \Psi^* \frac{\hbar}{im} \Psi' \right\}$$

For klassiske bølger, f.eks. transversal bølge på streng:



Energiebevarelse: $\bar{P}_i = \bar{P}_r + \bar{P}_t$ (middlere effekt)

Transm. koeff: $T = \bar{P}_t / \bar{P}_i =$ andel transmittert effekt

Refl. koeff: $R = \bar{P}_r / \bar{P}_i =$ andel reflektert effekt

$$\Rightarrow T + R = 1$$

• Tilsvarende, med plan "partikkelbølge":

Sannsynlighetsbevarelse: $j_i = |j_r| + j_t$

Transmisjonssanns: $T = j_t / j_i =$ "andel transmittert sannsynlighet"

Refleksjonssanns: $R = |j_r| / j_i =$ "andel reflektert —"

$$\Rightarrow T + R = 1$$

Regner ut de tre sannsynsstrømmene (hver for seg):

(61)

$$j_i = \operatorname{Re} \left\{ e^{-ikx} \frac{\hbar}{im} ik e^{ikx} \right\} = \frac{\hbar k}{m} \quad (= p/m = v)$$

$$j_r = \operatorname{Re} \left\{ r^* e^{ikx} \frac{\hbar}{im} (-ik) r e^{-ikx} \right\} = -|r|^2 \frac{\hbar k}{m}$$

$$j_t = \operatorname{Re} \left\{ t^* e^{-ikx} \frac{\hbar}{im} ik t e^{ikx} \right\} = |t|^2 \frac{\hbar k}{m}$$

$$\Rightarrow R = |j_r|/j_i = |r|^2 \quad ; \quad T = j_t/j_i = |t|^2$$

Opplagt at $j(x > L) = j_t = |t|^2 \hbar k/m$, siden $\psi_t(x) = t e^{ikx}$ er hele bølgefunksjonen når $x > L$.

Ikke like opplagt at $j(x < 0) = j_i + j_r = j_i - |j_r|$, dvs som om innkommende og reflektert bølge ikke "møter" hverandre. Men slik er det:

$$\begin{aligned} j(x < 0) &= \operatorname{Re} \left\{ (e^{-ikx} + r^* e^{ikx}) \frac{\hbar}{im} \frac{d}{dx} (e^{ikx} + r e^{-ikx}) \right\} \\ &= \frac{\hbar k}{m} - |r|^2 \frac{\hbar k}{m} + \frac{\hbar k}{m} \operatorname{Re} \left\{ r^* e^{2ikx} - r e^{-2ikx} \right\} \\ &= j_i + j_r + \frac{\hbar k}{m} \operatorname{Re} \left\{ (r e^{-2ikx})^* - r e^{-2ikx} \right\} \\ &= j_i - |j_r| + \frac{\hbar k}{m} \operatorname{Re} \left\{ -2i \operatorname{Im}(r e^{-2ikx}) \right\} \\ &= j_i - |j_r| \end{aligned}$$

$$\underline{j_i - |j_r|}$$

Vc ser at $j(x < 0) = (1-R) \frac{\hbar k}{m} = T \frac{\hbar k}{m} = j(x > L)$,

• dvs uavhengig av x. Som vekt for stasjonære tilstander,

$$\Psi(x,t) = \Psi(x) e^{-iEt/\hbar}$$

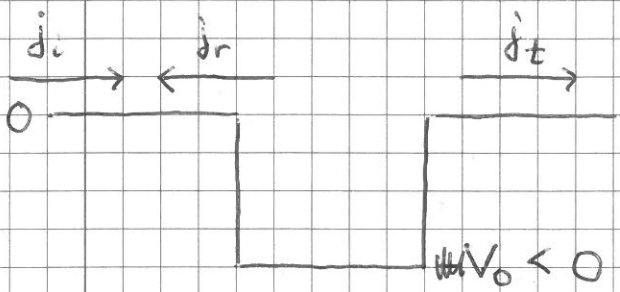
for da er $g = |\Psi|^2 = |\Psi(x)|^2$ uavh. av t, dvs

$\partial g / \partial t = 0$, og da gir kontinuitetsligningen

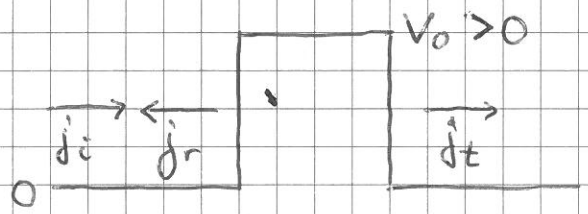
$$\frac{\partial j}{\partial x} = -\frac{\partial g}{\partial t} = 0, \text{ dvs } j \text{ uavh. av } x.$$



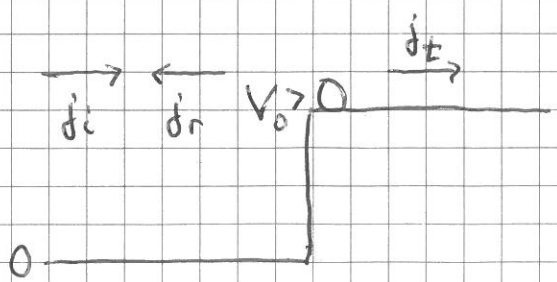
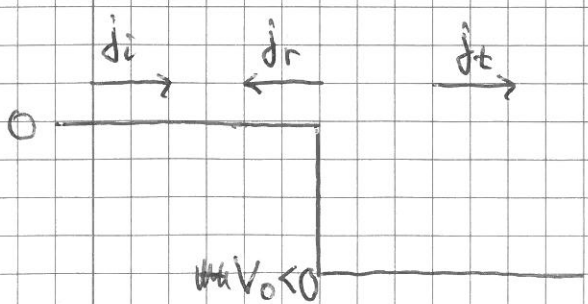
Interessante, og "enkle", spesialtilfeller:



"firkantbrønn"



"firkantbarriere"

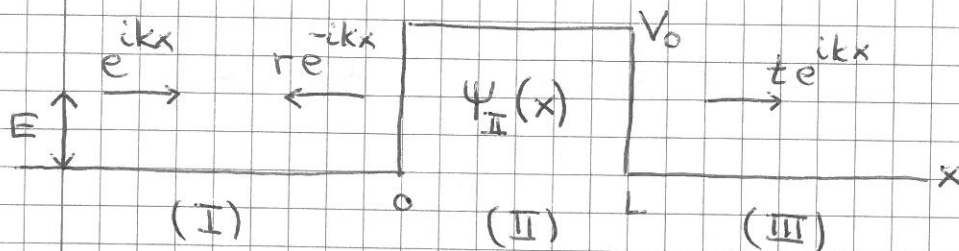


potensialsprang

Firkantbrønn eller -barriere:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & ; x < 0 \text{ og } x > L \\ V_0 & ; 0 < x < L \end{cases}$$

La oss ta detaljene for det mest interessante tilfellet,
 $V_0 > 0$, $E < V_0$:



$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Psi_{II}'' + V_0 \Psi_{II} = E \Psi_{II}$$

$$\Rightarrow \Psi_{II}(x) = a e^{-\kappa x} + b e^{\kappa x} ; \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

De fire ukjente a, b, r, t bestemmes med de fire grensebetingelsene: Ψ og Ψ' kontinuerlige i $x=0$ og $x=L$.

$$\Rightarrow 1 + r = a + b \quad [\Psi(0)] \quad (1)$$

$$ik(1 - r) = -\kappa(a - b) \quad [\Psi'(0)] \quad (2)$$

$$a e^{-\kappa L} + b e^{\kappa L} = t e^{ikL} \quad [\Psi(L)] \quad (3)$$

$$-\kappa(a e^{-\kappa L} - b e^{\kappa L}) = i\kappa t e^{ikL} \quad [\Psi'(L)] \quad (4)$$

(3) \pm (4) gir a og b uttrykt ved t :

$$a = \frac{1}{2} t e^{ikL} e^{\kappa L} \left(1 - \frac{i\kappa}{\hbar}\right) ; \quad b = \frac{1}{2} t e^{ikL} e^{-\kappa L} \left(1 + \frac{i\kappa}{\hbar}\right)$$

Innsetting i (1) og (2) eliminerer a og b:

(64)

$$1+r = \frac{1}{2} t e^{ikL} \left\{ \underbrace{\left(e^{\frac{\hbar E}{\hbar k} L} + e^{-\frac{\hbar E}{\hbar k} L} \right)}_{2 \cosh \frac{\hbar E}{\hbar k} L} - \frac{ik}{\hbar} \underbrace{\left(e^{\frac{\hbar E}{\hbar k} L} - e^{-\frac{\hbar E}{\hbar k} L} \right)}_{2 \sinh \frac{\hbar E}{\hbar k} L} \right\}$$

$$1-r = \frac{1}{2} t e^{ikL} \left\{ -\frac{\hbar E}{ik} \underbrace{\left(e^{\frac{\hbar E}{\hbar k} L} - e^{-\frac{\hbar E}{\hbar k} L} \right)}_{2 \sinh \frac{\hbar E}{\hbar k} L} + \underbrace{\left(e^{\frac{\hbar E}{\hbar k} L} + e^{-\frac{\hbar E}{\hbar k} L} \right)}_{2 \cosh \frac{\hbar E}{\hbar k} L} \right\}$$

Addisjon av disse elim. r og gir:

$$2 = t e^{ikL} \left\{ 2 \cosh \frac{\hbar E}{\hbar k} L - i \left(\frac{\hbar E}{\hbar k} - \frac{\hbar E}{\hbar k} \right) \sinh \frac{\hbar E}{\hbar k} L \right\}$$

$$\Rightarrow T = |t|^2 = \left\{ \cosh^2 \frac{\hbar E}{\hbar k} L + \frac{1}{4} \left(\frac{\hbar E}{\hbar k} - \frac{\hbar E}{\hbar k} \right)^2 \sinh^2 \frac{\hbar E}{\hbar k} L \right\}^{-1}$$

"Forenkling":

$$\begin{aligned} \frac{1}{4} \left(\frac{\hbar E}{\hbar k} - \frac{\hbar E}{\hbar k} \right)^2 &= \frac{1}{4} \left(\frac{\hbar^2 E^2}{\hbar^2 k^2} + \frac{\hbar^2 E^2}{\hbar^2 k^2} - 2 \right) = \frac{1}{4} \left(\frac{\hbar^2 E^2}{\hbar^2 k^2} + \frac{\hbar^2 E^2}{\hbar^2 k^2} + 2 \right) - 1 \\ &= \frac{1}{4} \left(\frac{\hbar E}{\hbar k} + \frac{\hbar E}{\hbar k} \right)^2 - 1 \end{aligned}$$

$$\cosh^2 \frac{\hbar E}{\hbar k} L - \sinh^2 \frac{\hbar E}{\hbar k} L = 1$$

$$\Rightarrow T = \left\{ 1 + \frac{1}{4} \left(\frac{\hbar E}{\hbar k} + \frac{\hbar E}{\hbar k} \right)^2 \sinh^2 \frac{\hbar E}{\hbar k} L \right\}^{-1}$$

Tilbake til E og V_0 :

$$\left(\frac{\hbar E}{\hbar k} + \frac{\hbar E}{\hbar k} \right)^2 = \left(\frac{\hbar^2 E^2 + \hbar^2 E^2}{\hbar^2 k^2} \right)^2 = \frac{(E + V_0 - E)^2}{(V_0 - E) E} = \frac{V_0^2}{(V_0 - E) E} = \frac{1}{(1 - E/V_0) \cdot (E/V_0)}$$

$$\frac{\hbar E}{\hbar k} = \frac{L}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} = \frac{L}{\hbar} \sqrt{2mV_0} \cdot \sqrt{1 - E/V_0} = k_0 L \sqrt{1 - E/V_0}$$

der $k_0 L$ (= γ hos IØ) angir "styrken" på barrieren.

$$\Rightarrow T = \left\{ 1 + \frac{\sinh^2(k_0 L \sqrt{1 - E/V_0})}{4 \frac{E}{V_0} (1 - E/V_0)} \right\}^{-1}; \quad 0 < \frac{E}{V_0} < 1$$

Grensetilfeller:

$E \ll V_0$ og $k_0 L \gg 1$:

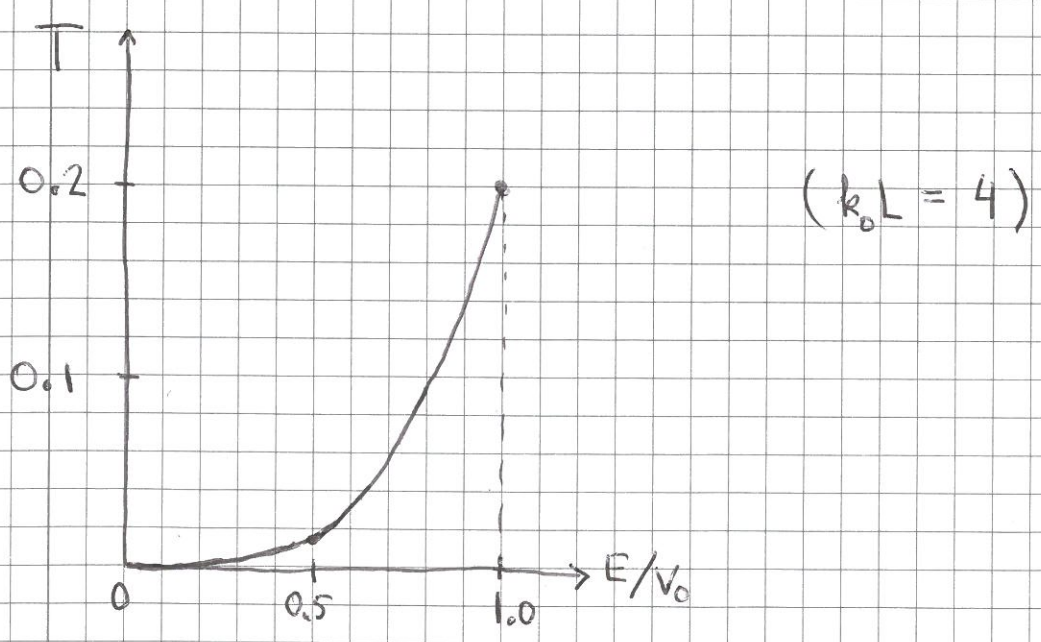
$$\sinh(k_0 L \sqrt{1 - E/V_0}) \approx \frac{1}{2} e^{k_0 L \sqrt{1 - E/V_0}} \gg 1$$

$$\Rightarrow T \approx 16 \frac{E}{V_0} (1 - \frac{E}{V_0}) e^{-2k_0 L \sqrt{1 - E/V_0}}$$

$E \rightarrow V_0$:

$$\sinh^2(k_0 L \sqrt{1 - E/V_0}) \approx (k_0 L)^2 (1 - E/V_0)$$

$$\Rightarrow T \rightarrow \left\{ 1 + (k_0 L / 2)^2 \right\}^{-1}$$



Tunnelering: Partiklene har en viss sanns. for å "spasere" gjennom det klassiske forbudte området, der $E < V_0$!

Med brønn, $V_0 < 0$, eller barriere med $E > V_0 > 0$:

$\Psi_{II}(x) = a e^{iqx} + b e^{-iqx}$; $q = \sqrt{2m(E - V_0)} / \hbar$

dvs $\hbar k \rightarrow -iq$ s. 63-64

$\Rightarrow 2 = t e^{ikL} \left\{ 2 \cosh(-iqL) + \left(\frac{k}{q} + \frac{q}{k} \right) \sinh(-iqL) \right\}$

Her er

$\cosh(-iqL) = \frac{1}{2} (e^{-iqL} + e^{iqL}) = \cos(qL)$

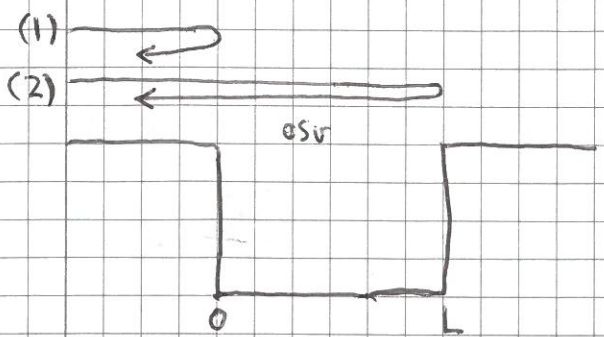
$\sinh(-iqL) = \frac{1}{2} (e^{-iqL} - e^{iqL}) = \frac{1}{2} \cdot (-2i) \sin(qL) = -i \sin(qL)$

$\Rightarrow T = |t|^2 = \left\{ \cos^2 qL + \left(\frac{k^2}{q^2} + \frac{q^2}{k^2} - 2 + 4 \right) \cdot \frac{1}{4} \sin^2 qL \right\}^{-1}$
 $= \left\{ 1 + \frac{1}{4} \left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q} \right)^2 \sin^2 qL \right\}^{-1}$ (Brønn: $q > k$)
 (Barriere: $q < k$)

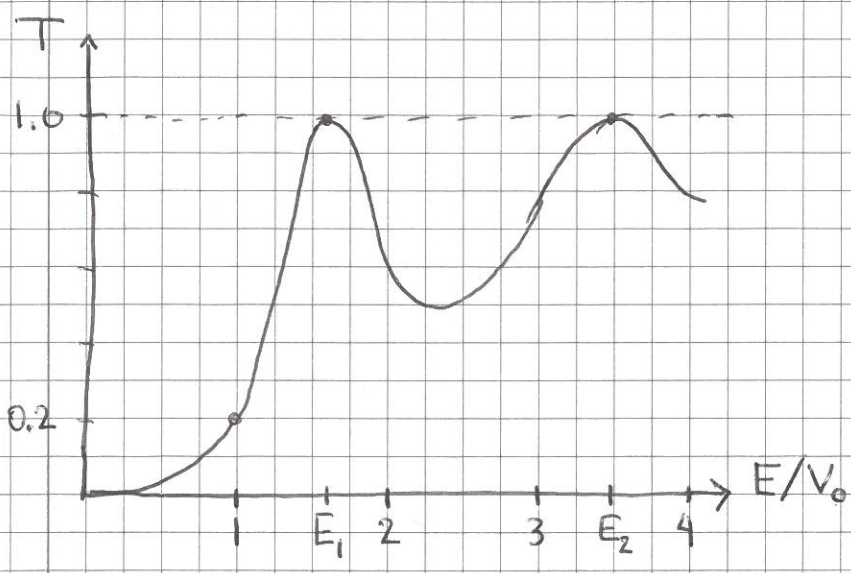
UUUUU

• $T < 1$; "ikke-klassisk refleksjon" for de aller fleste verdier av E

• $T = 1$ når $\sin qL = 0$, dvs $qL = n\pi$ ($n=1,2,\dots$)
 dvs $L = \frac{n\pi}{q} = n\pi \cdot \frac{\lambda}{2\pi} = n \cdot \frac{\lambda}{2}$, dvs $2L = n\lambda$:



Nettresultatet blir her destruktiv interferens mellom baner med veilengdeforskjell $2L, 4L, 6L, \dots$

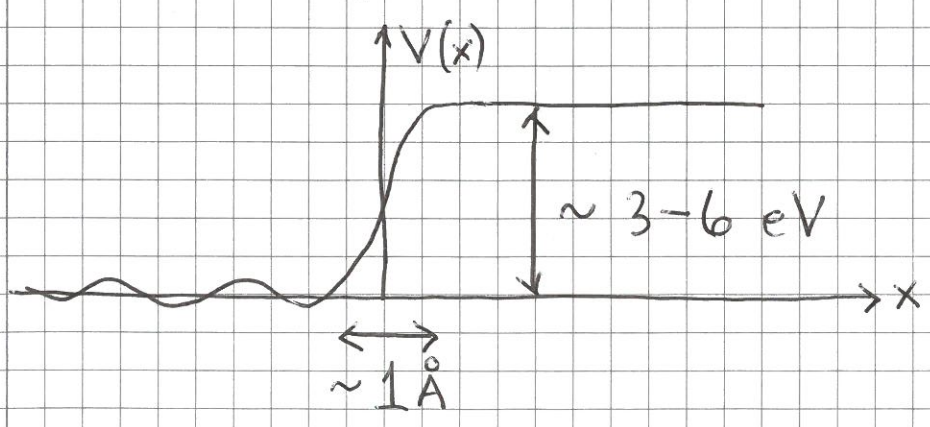
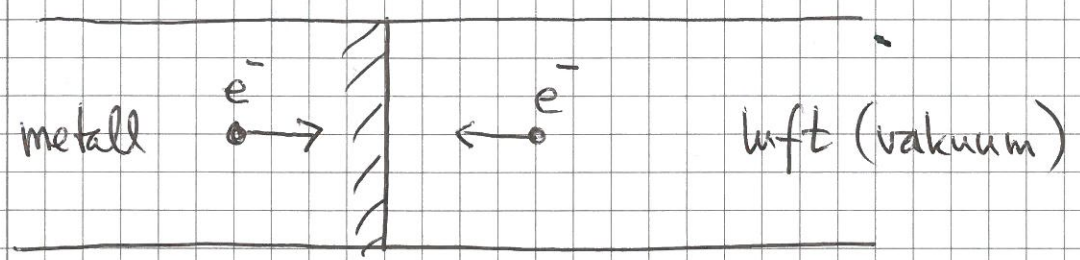


Eks:
 Barriere med
 $k_0 L = 4$ (som $s \leq 65$)
 \downarrow
 $E_1 = V_0 + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = 1.62V_0$
 $E_2 = V_0 + \frac{4\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = 3.47V_0$
 \vdots

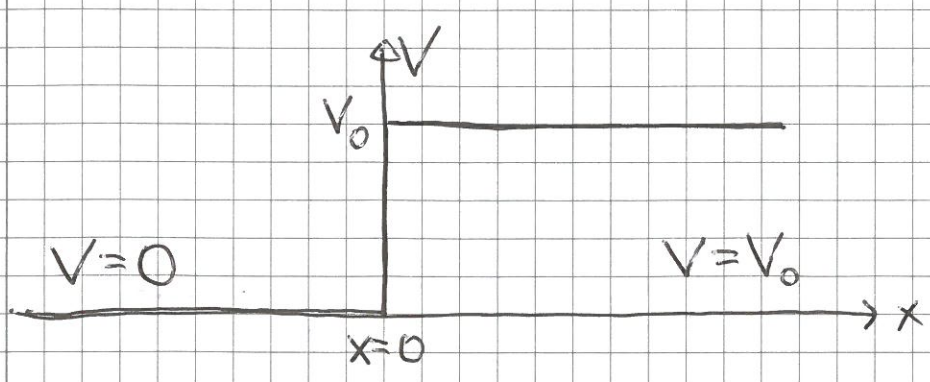
$$qL = n\pi \Rightarrow q^2 = \frac{2m(E_n - V_0)}{\hbar^2} = \frac{n^2 \pi^2}{L^2} \Rightarrow E_n = V_0 + \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

$$T(E_n) = 1 ; n = 1, 2, 3, \dots$$

Spredning med potensialsprang



Realistisk
 potensial



Modell-
 potensial

Med plan bølge inn fra venstre, $E > V_0$:

$$\Psi(x < 0) = e^{ikx} + r e^{-ikx} ; \quad k = \sqrt{2mE}/\hbar$$

$$\Psi(x > 0) = t e^{iqx} ; \quad q = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar < k$$

$$\Rightarrow 1 + r = t \quad \text{og} \quad ik(1 - r) = iq t$$

$$\Rightarrow \cancel{r} = \frac{k - q}{k + q}, \quad t = \frac{2k}{k + q}$$

Sanns. strømmer: $j_i = \frac{\hbar k}{m}$, $j_r = -|r|^2 \frac{\hbar k}{m}$

$$j_t = |t|^2 \frac{\hbar q}{m}$$

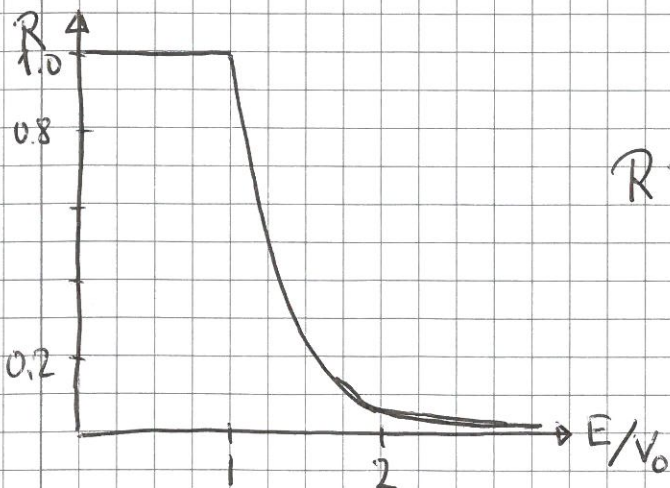
$$\Rightarrow R \equiv |j_r|/j_i = |r|^2 ; \quad T \equiv j_t/j_i = |t|^2 q/k$$

$$\Rightarrow \boxed{R = \left(\frac{k - q}{k + q}\right)^2 ; \quad T = \frac{4kq}{(k + q)^2}} \quad (R + T = 1)$$

[Sammenlign trans. bølge på streng!]

Med plan bølge inn fra høyre, $E > V_0$:

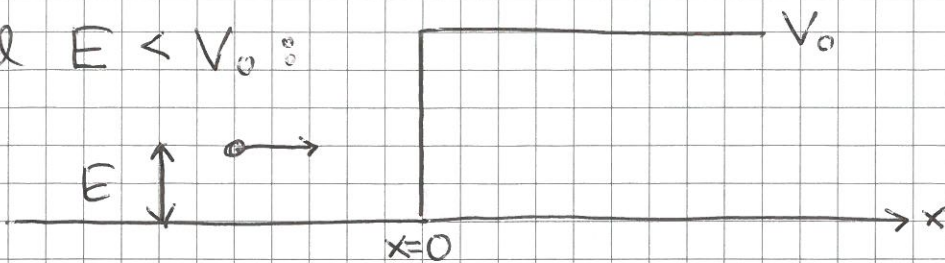
$q \leftrightarrow k \Rightarrow$ uendret R og T ! ("resiprositet")



$$R = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - V_0/E}}{1 + \sqrt{1 - V_0/E}}\right)^2 \quad \text{for } E > V_0$$

$$R = 1 \quad \text{for } E < V_0$$

Med $E < V_0$:



(69)

Må ha $\Psi(x > 0) \neq \infty$ när $x \rightarrow \infty$

$$\Rightarrow \Psi(x > 0) = t e^{-\alpha x} ; \quad \alpha = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar > 0$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow j_t &= \text{Re} \left\{ t^* e^{-\alpha x} \frac{\hbar}{im} (-\alpha) t e^{-\alpha x} \right\} \\ &= \text{Re} \left\{ i |t|^2 \frac{\hbar \alpha}{m} e^{-2\alpha x} \right\} = 0 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \underline{T=0} ; \quad \underline{R=1}$$

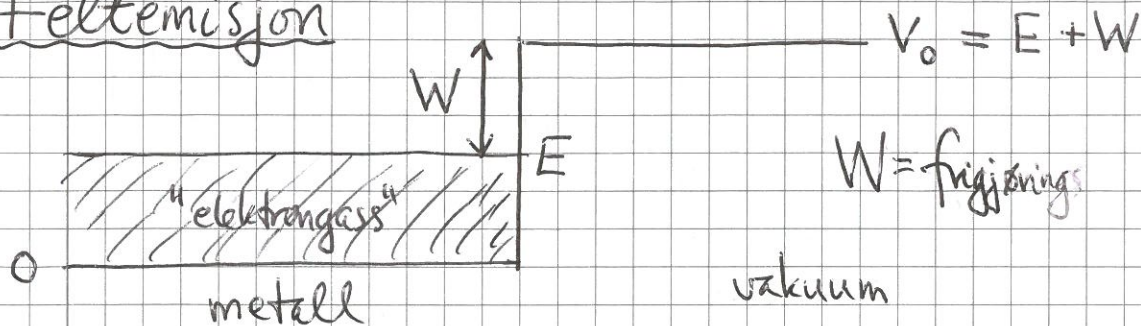
Evt: $1+r=t$, $ik(1-r) = -\alpha t \Rightarrow (1-r) \frac{ik}{\alpha} = -t$

$$\Rightarrow \cancel{1+r} + \frac{ik}{\alpha} (1-r) = 0$$

$$\Rightarrow r \left(1 - \frac{ik}{\alpha}\right) + \left(1 + \frac{ik}{\alpha}\right) = 0$$

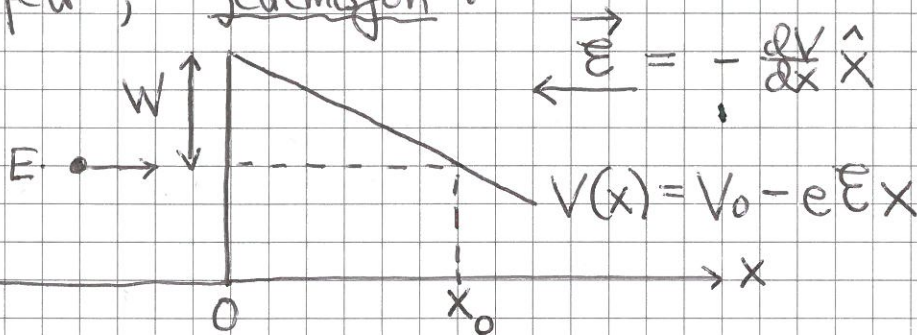
$$\Rightarrow r = - \frac{1 + ik/\alpha}{1 - ik/\alpha} \Rightarrow |r|^2 = 1 \Rightarrow \underline{\underline{R=1}}$$

Feltemisjon



Hvordan få elektroner ut av metallet?

- (a) Fotoner med energi $h\nu > W$; fotoelektrisk effekt
- (b) Høy temperatur, $kT \sim W$; "glødetråd"
- (c) Elektrisk felt; feltemisjon:



⇒ Mulig for elektroner å tunnelere ut!

$$V_0 - eEx_0 = E = V_0 - W \Rightarrow x_0 = W/eE$$

Fra s.65: $T \approx A(E) e^{-2\mathcal{H}L}$ for tunnelling gjennom tykk og/eller høy barriere, med forholdsvis langsomt varierende "prefaktor" $A(E)$.

Dvs: $T \sim e^{-2\mathcal{H}L} = e^{-2 \int_0^L \mathcal{H} dx}$ når $\mathcal{H} = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} = \text{konst.}$

Det viser seg at $T \sim e^{-2 \int_0^{x_0} \mathcal{H}(x) dx}$ også med (langsomt) varierende barrierehøyde $V(x)$ mellom 0 og x_0
 [WKB-tilnærmsen; PCH 7.5; DFG 8]

Med $V(x) = V_0 - eEx$ er $\mathcal{H}(x) = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \sqrt{W - eEx}$

som gir

$$T \sim \exp \left\{ - \frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} \int_0^{x_0} \sqrt{W - eEx'} dx' \right\}$$

$$= \exp \left\{ - \frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} \frac{W/eE}{0} (W - eEx)^{3/2} \cdot \frac{2}{3} \cdot \left(-\frac{1}{eE}\right) \right\}$$

$$= \exp \left\{ - \frac{4\sqrt{2m} W^{3/2}}{3\hbar eE} \right\}$$

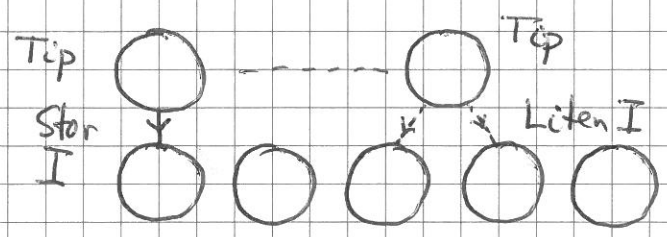
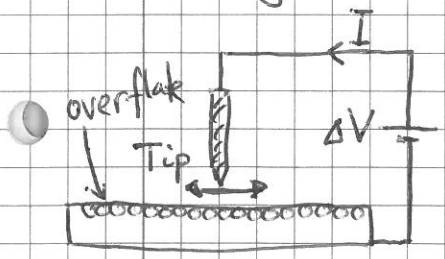
Typiske tallverdier: $W = 4\text{eV}$, $E = 10^9\text{V/m}$

$\Rightarrow T \sim \exp\{-55\} \sim 10^{-24}$; liten, men ikke null!

Avhenger sterkt av E : $E \rightarrow \frac{1}{2} \cdot 10^9 \frac{\text{V}}{\text{m}} \Rightarrow T \sim 10^{-48}$

$E \rightarrow 2 \cdot 10^9 \frac{\text{V}}{\text{m}} \Rightarrow T \sim 10^{-12}$

Scanning Tunneling Microscopy (STM)



Binnig & Rohrer,
IBM Zürich [NP 1986]

Tunnelingsstrøm $I \sim T \sim \exp(-2\mathcal{H}L)$ svært følsom

for endringer i tåp-overflate-avstanden L

\Rightarrow Avbildning på atomært nivå!