

Harmonisk oscillator, QM vs klassisk

[PCH 3.5.5; DFG 2.3.2; IØ 3.4.d]

$$dP = g(q) dq = \text{sannsk. for å finne partikkelen på } (q, q+dq)$$

$$\text{QM: } g_n(q) = |\Psi_n(q)|^2 = \text{sannsk. tetthet for partikkel med energi } E_n = (n+1/2)\hbar\omega$$

Klassisk:

$$dP = \text{andel tid på } (q, q+dq) = dt/T$$

med $T = 2\pi/\omega = \text{perioden}$

$$dt = 2 \cdot dq/v(q) \quad (\text{fram og tilbake} \Rightarrow \text{faktor 2})$$

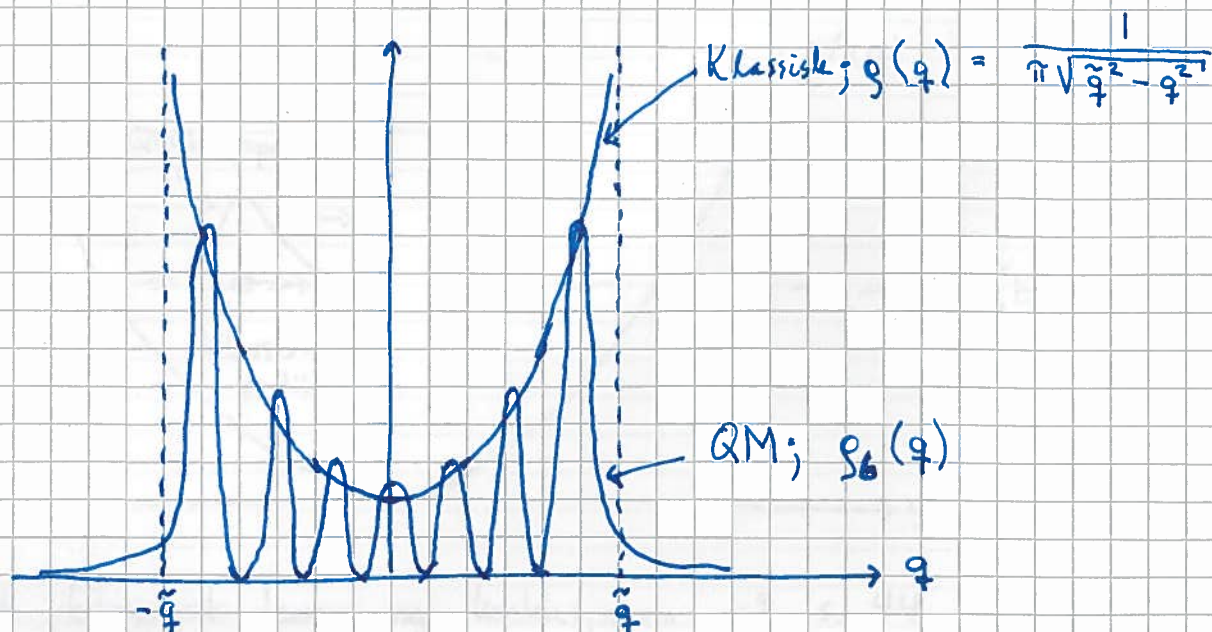
$$\text{Fart: } v(q) = \sqrt{2K/m} = \sqrt{2(E - \frac{1}{2}m\omega^2 q^2)/m} = \sqrt{2E/m - \omega^2 q^2}$$

$$\Rightarrow g(q) = dP/dq = (2/v(q)) / (2\pi/\omega) = \frac{1}{\pi \sqrt{2E/m\omega^2 - q^2}}$$

der q må ligge mellom de to klassiske vendepunktene $\pm \tilde{q}$:

$$E = V(\pm \tilde{q}) = \frac{1}{2} m\omega^2 \tilde{q}^2 \Rightarrow \tilde{q} = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} \quad (K(\pm \tilde{q}) = 0)$$

$$\text{Eks: } n=6, E = E_6 = \frac{13}{2}\hbar\omega, \tilde{q} = \sqrt{\frac{13\hbar}{m\omega}}$$



Klassisk bane: $q(t) = \tilde{q} \cos \omega t$ ($\Rightarrow \dot{q}(0) = \tilde{q}$ og $\ddot{q}(0) = 0$) (62)

QM: Stasjonær $\Psi_n(q, t) \Rightarrow |\Psi_n|^2 = |\psi_n|^2$ uavhengig av t

Men bølgepakke kan beskrive partikkel som svinger fram og tilbake:

$$\Psi(q, t) = \sum_n c_n \psi_n(q) e^{-iE_n t/\hbar}$$

Eks: $\Psi(q, 0) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-m\omega(q - \tilde{q})^2/2\hbar}$

Dvs, $\langle q \rangle = \tilde{q}$ og $\langle p \rangle = 0$ ved $t=0$ (som klassisk ovenfor)

Bestemmer c_n slik:

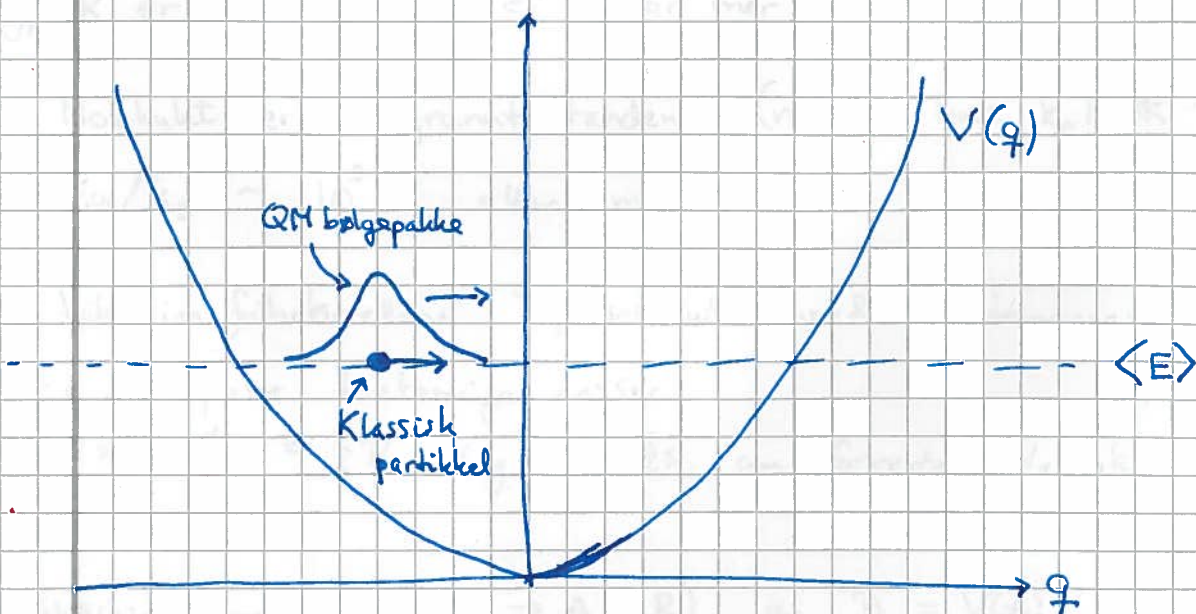
$$\Psi(q, 0) = \sum_n c_n \psi_n(q) \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \psi_j^*(q) \Psi(q, 0) dq = c_j$$

(fordi $\sum_n c_n \int_{-\infty}^{\infty} \psi_j^*(q) \psi_n(q) dq = \sum_n c_n \cdot \delta_{jn} = c_j$)

En god del regning gir nå

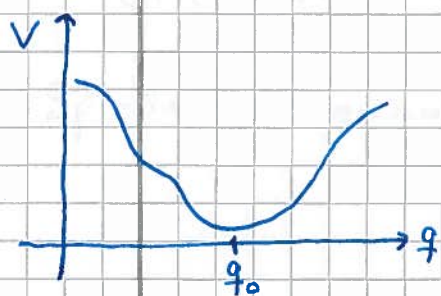
$$|\Psi(q, t)|^2 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-m\omega(q - \tilde{q} \cos \omega t)^2/\hbar}$$

dvs gaussformet bølgepakke med $\langle q \rangle(t) = \tilde{q} \cos \omega t$
og $\langle p \rangle(t) \sim \sin \omega t$, som den klassiske partikkelen!



I tråd med Ehrenfests teorem og konklusjonen på s. 44!

"Vilkårlig" potensial med stabil likevekt i $q = q_0$: (63)



Nær q_0 :

$$V(q) = V(q_0) + (q - q_0) \underbrace{V'(q_0)}_{=0} + \frac{1}{2} (q - q_0)^2 V''(q_0) + \dots$$

$$\approx V(q_0) + \frac{1}{2} k (q - q_0)^2$$

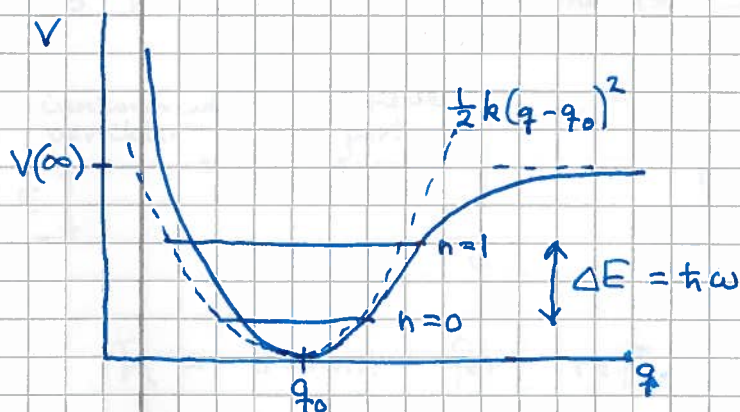
da tilnærmet harmonisk oscillator

med fjærkonstant $k = V''(q_0)$

⇒ Tilnærmede energinivåer: $E_n \approx V(q_0) + \cancel{h\omega} (n + 1/2) h\omega$

$$\text{med } \omega = \sqrt{k/m} = \sqrt{V''(q_0)/m}$$

Eks: Vibrasjon i toatomig molekyl



$$m = \frac{m_A m_B}{m_A + m_B} \quad (\text{reduert masse})$$

$$\omega = \sqrt{V''(q_0)/m}$$

Typisk er $h\omega \sim \frac{1}{10}$ eV eller mer

⇒ Molekylet er i grunntilstanden ($n=0$) hvis $k_B T \ll h\omega$;

$$h\omega/k_B \sim 10^3 \text{ K eller mer}$$

⇒ Vibrasjonsfrihetsgradene "frosset ut" ved romtemperatur

i de fleste toatomige gasser

$$\Rightarrow C_V = \frac{5}{2} R \quad (\text{og ikke } \frac{7}{2} R, \text{ som forventet klassisk})$$

Dissosiasjonsenergien ($AB \rightarrow A + B$) er $D_0 = V(\infty) - E_0$,

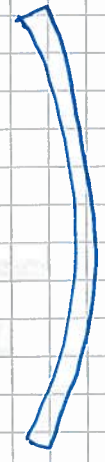
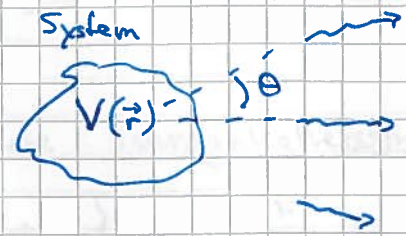
og ikke $V(\infty)$, som forventet klassisk.

Spredning i en dimensjon

[PCH 3.6 ; DFG 2.5-2.7 ; IØ 3.6]

Spredningeksperimentet, generelt:

partikler/bølger inn; energi E



Detektor, måler

$$I(\theta; E)$$



Informasjon om systemet!

[TFY4205 QM II]

To muligheter i en dimensjon: Refleksjon eller transmisjon



$$\left. \begin{array}{l} R = \text{sanns. for refl.} \\ T = \text{---||--- transm.} \end{array} \right\} \Rightarrow \boxed{R + T = 1}$$

Betraktes som stasjonært problem, med bestemt energi $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ og impuls $p = \hbar k$ på innkommende partikkel. Antar $V=0$ for $x < 0$ og $x > L$, og kun partikkel inn fra venstre.

Løsn. av TUSL der $V=0$: $e^{\pm ikx}$

$$\begin{array}{l}
 \Rightarrow \text{Innkommende bølge: } \Psi_i(x) = e^{ikx} \\
 \text{Reflektert ---||---: } \Psi_r(x) = r e^{-ikx} \\
 \text{Transmittert ---||---: } \Psi_t(x) = t e^{ikx}
 \end{array}
 \left. \begin{array}{l} \\ \\ \end{array} \right\} \begin{array}{l} x < 0 \\ \\ x > L \end{array}$$

For $0 < x < L$: $-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x)$

Løses (analytisk eller numenisk) og matches (kont. ψ, ψ')

til

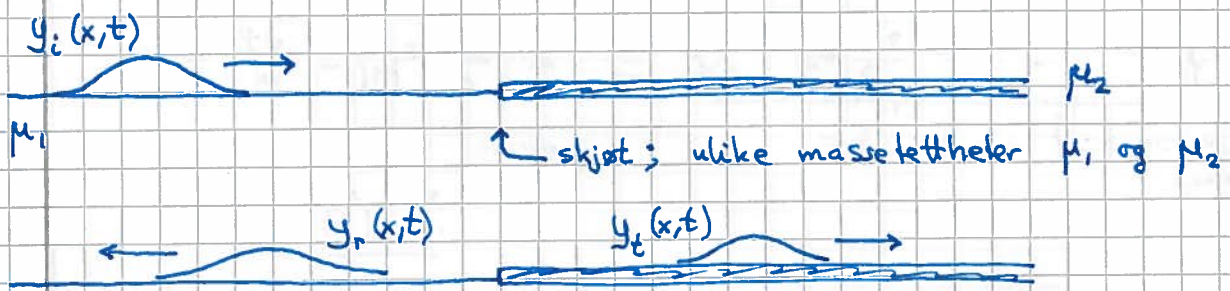
$\psi_i(x) + \psi_r(x)$ i $x = 0$

og $\psi_t(x)$ i $x = L$

Naturlig å betrakte sannsynlighetsstrømmen her:

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

Klassisk analogi: Transversal bølge på streng.



Energibevarelse: $P_i = P_r + P_t$ ($P =$ midlere effekt)

Transm. koeff: $T = P_t / P_i =$ andel transm. effekt
Refl. koeff: $R = P_r / P_i =$ andel refl. effekt } $T+R=1$

Nå, med plan "partikkelbølge":

Sannsynlighetsbevarelse: $j_i = |j_r| + j_t$

Transm. sanns: $T = j_t / j_i$
Refl. sanns: $R = |j_r| / j_i$ } $T+R=1$

De tre sands. strømmene er:

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

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

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

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

Dvs: $j(x > L) = j_t = |t|^2 \hbar k/m = \underline{T \cdot \hbar k/m}$

$$\begin{aligned} j(x < 0) &= \text{Re} \left\{ (\psi_i + \psi_r)^* \frac{\hbar}{im} \frac{d}{dx} (\psi_i + \psi_r) \right\} \\ &= \frac{\hbar k}{m} - |r|^2 \frac{\hbar k}{m} + \frac{\hbar k}{m} \underbrace{\text{Re} \left\{ r^* e^{2ikx} - r e^{-2ikx} \right\}}_{= 0 \text{ fordi } \{ \dots \} \text{ er rent imaginært}} \\ &= \underline{(1-R) \frac{\hbar k}{m}} \end{aligned}$$

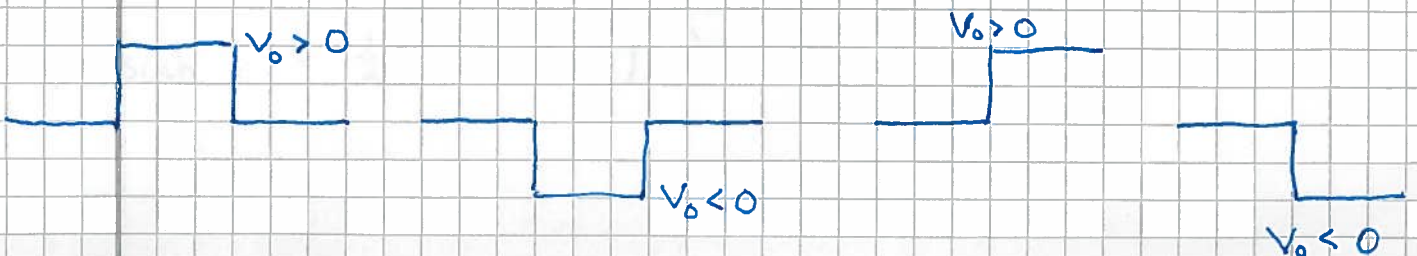
$\Rightarrow j(x < 0) = j(x > L)$, uafh. af x , som ventet for stationære tilstande

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

for da er $\rho = |\Psi|^2 = |\Psi|^2$ uafh. af tiden t , $\partial \rho / \partial t = 0$, og kont.lign. gir

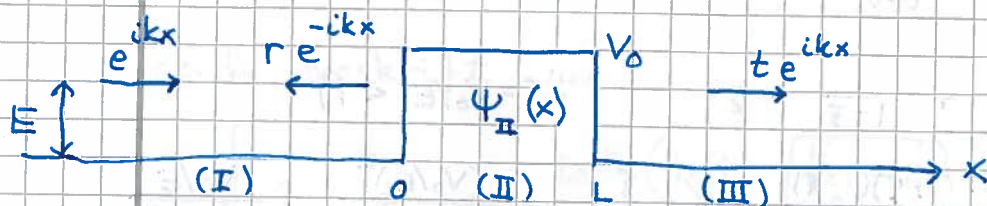
$$\partial j / \partial x = -\partial \rho / \partial t = 0$$

Enkle eksempler:



Eks 1: Firkantbarriere (evt. brønn)

(67)



Anta først $E < V_0$:

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

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

Kontinuerlige ψ og ψ' i $x=0$ og $x=L$ gir 4 lign. for bestemmelse av de 4 ukjente, a, b, r og t :

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

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

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

$$-\kappa(a e^{-\kappa L} - b e^{\kappa L}) = ikt e^{ikL} \quad [\psi'(L)]$$

Eliminasjon av a, b og r gir t , og dermed (detaljer s 63-64 i notater 2016!)

$$T = \left\{ 1 + \frac{\sinh^2(k_0 L \sqrt{1 - E/V_0})}{4 \frac{E}{V_0} (1 - \frac{E}{V_0})} \right\}^{-1} \quad ; \quad k_0 = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}$$

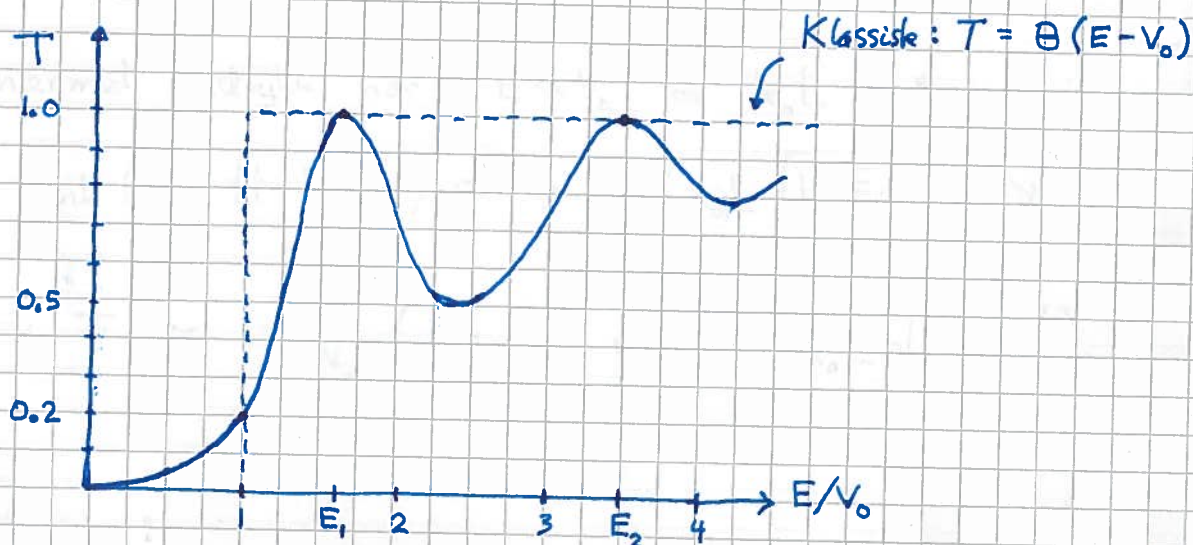
$$\left(\sinh x = \frac{1}{2}(e^x - e^{-x}) \right)$$

Hvis $E > V_0$, er $\Psi_{II}(x) = a e^{iqx} + b e^{-iqx}$; $q = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$ (68)

Tilsvarende oppskrift gir

$$T = \left\{ 1 + \frac{\sin^2(k_0 L \sqrt{\frac{E}{V_0} - 1})}{4 \frac{E}{V_0} (\frac{E}{V_0} - 1)} \right\}^{-1}$$

Eks: Barriere med $k_0 L = 4$



- Tunnelering : $T > 0$ selv om $E < V_0$!
- Ikke-klassisk refleksjon : $R > 0$ selv om $E > V_0$!

- $T = 1$ når $\sin(k_0 L \sqrt{\frac{E}{V_0} - 1}) = 0$, dvs når $k_0 L \sqrt{\frac{E}{V_0} - 1} = n\pi$, dvs $qL = n\pi$

$$\Rightarrow \frac{2\pi}{\lambda} \cdot L = n\pi \Rightarrow 2L = n\lambda \quad (n=1,2,3,\dots)$$

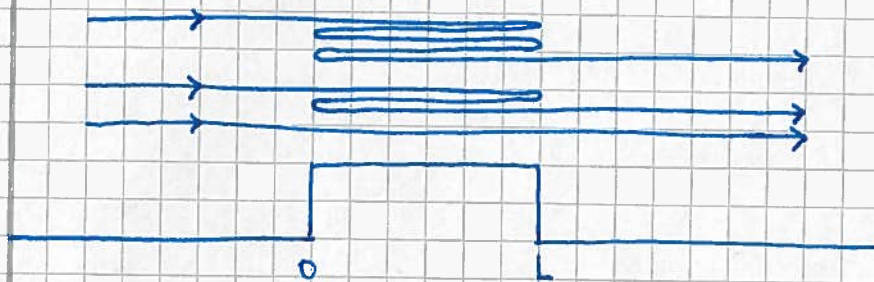
$$\text{Da er } \frac{\sqrt{2m(E_n - V_0)}}{\hbar} \cdot L = n\pi$$

$$\text{dvs } E_n = V_0 + \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}, \text{ som med } k_0 L = 4, \text{ dvs}$$

$$\frac{\hbar^2}{2mL^2} = V_0/16, \text{ gir}$$

$$E_1 = V_0 + \frac{\pi^2}{16} V_0 \approx 1.62 V_0, \quad E_2 = V_0 + \frac{\pi^2}{4} V_0 \approx 3.47 V_0 \quad \text{osv.}$$

Vi kan betrakte resultatet $T=1$ for $2L = n\lambda$ som konstruktiv interferens mellom "halv-klassiske" baner med veilengdeforskjell $2L, 4L, 6L$ etc :



- Tilnærmet uttrykk når $E \ll V_0$ og $k_0 L \gg 1$:

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

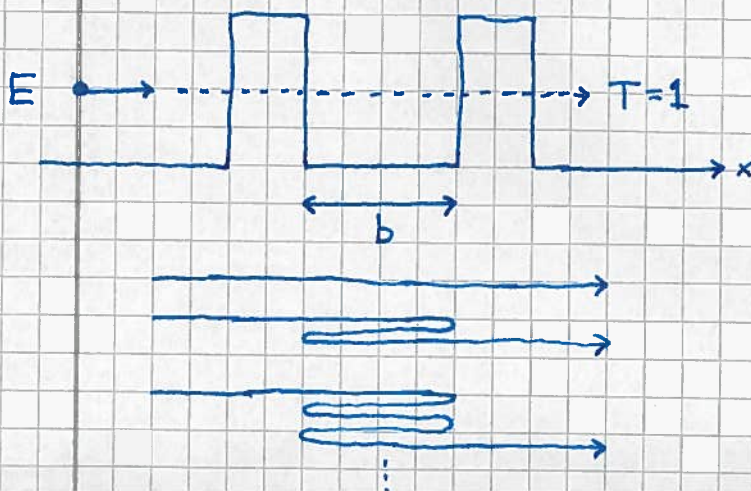
$$\Rightarrow T \approx 16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right) \exp(-2k_0 L \sqrt{1 - E/V_0})$$

- $E = V_0$:

$$\lim_{E \rightarrow V_0} \frac{\sinh^2(k_0 L \sqrt{1 - E/V_0})}{4 \frac{E}{V_0} (1 - E/V_0)} = \frac{(k_0 L)^2 (1 - E/V_0)}{4 (1 - E/V_0)} = \left(\frac{k_0 L}{2}\right)^2$$

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

- Resonant tunnelering :



Konstruktiv interferens,

som ovenfor, når $2b = n\lambda$

$$\Rightarrow p = h/\lambda = nh/2b = n\pi\hbar/b$$

$$\Rightarrow E = n^2 \pi^2 \hbar^2 / 2mb^2$$

gir $T=1$

Bølglengdene tilsvarer stående bølger på lengden b :

$n=1, 2, \dots$

Eks 2: Spredning på $V(x) = -\beta \delta(x)$

(70)

$$x < 0: \Psi = e^{ikx} + r e^{-ikx}$$

$$\Psi' = ik(e^{ikx} - r e^{-ikx})$$

$$x > 0: \Psi = t e^{ikx}$$

$$\Psi' = ikt e^{ikx}$$

$$\Psi \text{ kontinuert i } x=0 \Rightarrow 1 + r = t$$

$$\Psi' \text{ diskontinuert i } x=0: \Psi'(0^+) - \Psi'(0^-) = -\frac{2m\beta}{\hbar^2} \Psi(0)$$

$$\Rightarrow ikt - ik \underbrace{(1-r)}_{=2-t} = -\frac{2m\beta}{\hbar^2} t$$

$$\Rightarrow 2ikt + \frac{2m\beta}{\hbar^2} t = 2ik$$

$$\Rightarrow t = \left(1 + \frac{m\beta}{ik\hbar^2}\right)^{-1}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow T = |t|^2 &= \left(1 + \left(\frac{m\beta}{k\hbar^2}\right)^2\right)^{-1} \\ &= \underline{\underline{\left(1 + m\beta^2/2E\hbar^2\right)^{-1}}} \end{aligned}$$

Dvs: Samme T for brønn og barriere med samme "styrke" β !