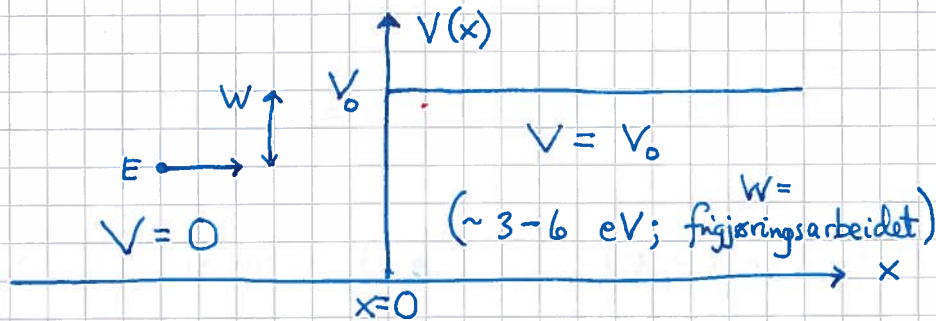
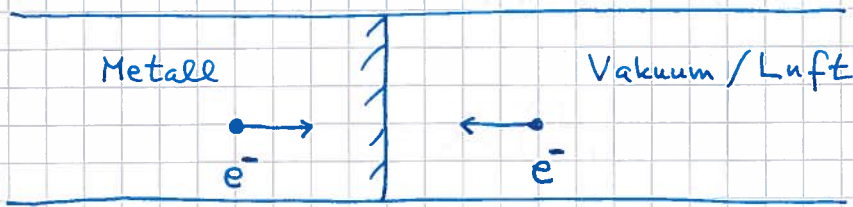


Eks 3: Potensialsprang



Modellpotensial
 (≈ realistisk potensial)

Anta plan bølge inn fra venstre.

$E > V_0$:

$$\Psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + r e^{-ikx} &; k = \sqrt{2mE}/\hbar; & x < 0 \\ t e^{iqx} &; q = \sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar; & x > 0 \end{cases}$$

Ψ og Ψ' kontinuerlige i $x=0$:

$$1+r = t; \quad ik(1-r) = iq t$$

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

$$j_i = \hbar k/m, \quad j_r = -|r|^2 \hbar k/m, \quad j_t = |t|^2 \hbar q/m \quad \swarrow \text{NB!}$$

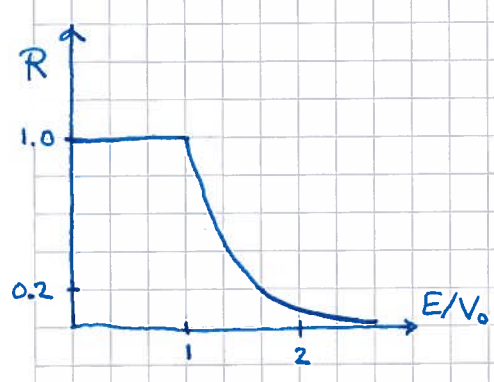
$$\Rightarrow R \equiv |j_r|/j_i = |r|^2, \quad T \equiv j_t/j_i = |t|^2 \cdot q/k$$

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

(som transv. bølge på streng med skjøt i $x=0$)

Plan bølge fra høyre med $E > V_0$:

Ombytte $q \leftrightarrow k$; gir uendret R og T . (Resiprositet)



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

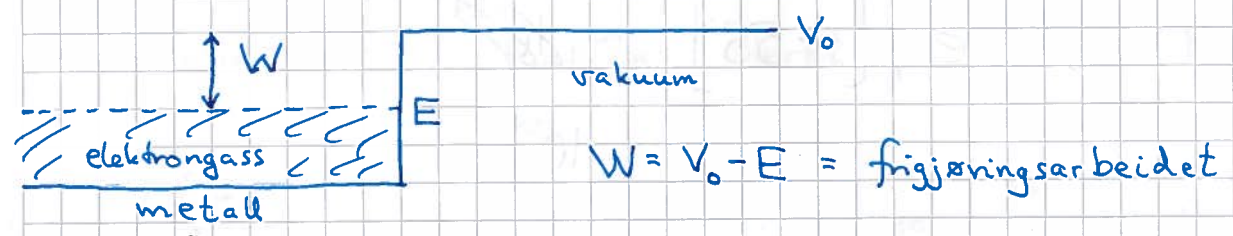
$$R = 1 \quad \text{når } E < V_0$$

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

$$\Rightarrow 1 + r = t, \quad ik(1 - r) = -\kappa t$$

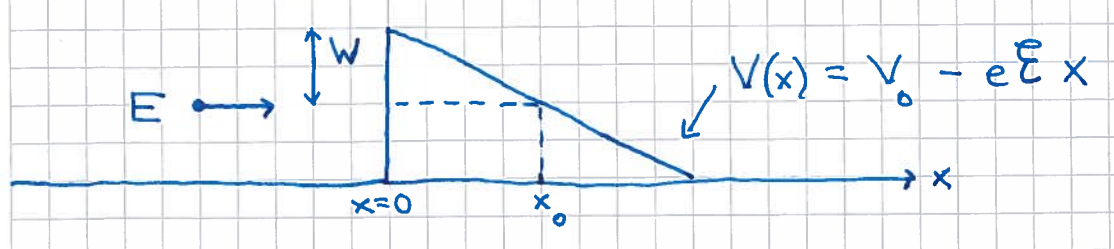
$$\Rightarrow \dots \Rightarrow R = |r|^2 = \left| -\frac{1 + ik/\kappa}{1 - ik/\kappa} \right|^2 = 1 \quad (\text{ok})$$

Eks: Feltemisjon



Kan få elektroner ut av metallet med fotoner ($h\nu > W$; fotoelektrisk effekt) eller med høy temperatur ($k_B T \sim W$).

Eller med elektrisk felt $\vec{E} = -\hat{x} dV/dx$:



Elektronene kan tunnelere ut av metallet

$$V(x_0) = E \Rightarrow V_0 - e\mathcal{E}x_0 = V_0 - W$$

(73)

$$\Rightarrow x_0 = W/e\mathcal{E}$$

Med "firkantbarriere" (s.69):

$$T \approx \underbrace{A(E)}_{\text{langsomt varierende prefaktor}} \cdot \exp[-2\mathcal{K}L] \quad ; \quad \mathcal{K} = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$$

langsomt varierende
prefaktor

WKB-tilnærmelsen [PCH 7.5; DFG 8; ikke pensum] gir

$$T \sim \exp\left[-2 \int_0^{x_0} \mathcal{K}(x) dx\right] \quad ; \quad \mathcal{K}(x) = \sqrt{2m(V(x) - E)}/\hbar \\ = \sqrt{2m(W - e\mathcal{E}x)}/\hbar$$

$$\Rightarrow T \sim \exp\left[-\frac{4\sqrt{2m} W^{3/2}}{3\hbar e \mathcal{E}}\right]$$

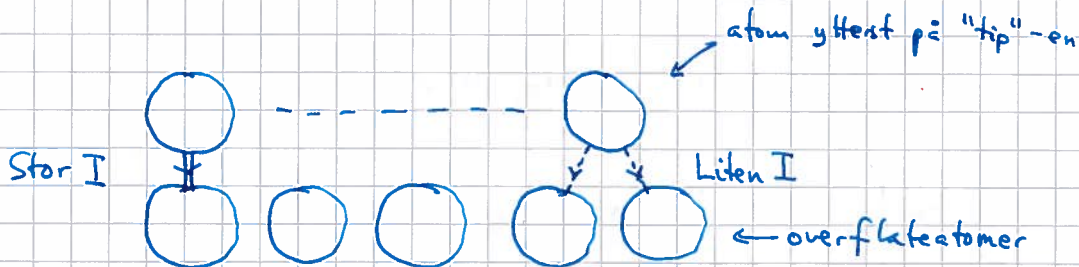
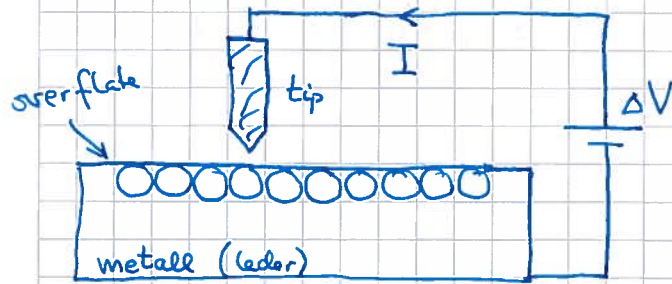
Typiske tallverdier: $W \sim 4 \text{ eV}$, $\mathcal{E} \sim 10^9 \text{ V/m}$

\Rightarrow Transm.sanns. T avhenger sterkt av feltstyrken \mathcal{E} :

$$\frac{T(\mathcal{E})}{T(\mathcal{E}/2)} \approx \exp\left[\frac{4\sqrt{2m} W^{3/2}}{3\hbar e \mathcal{E}}\right] \approx e^{55} \approx \underline{10^{24}}$$

Eks: Scanning tunneling microscope (STM)

(74)



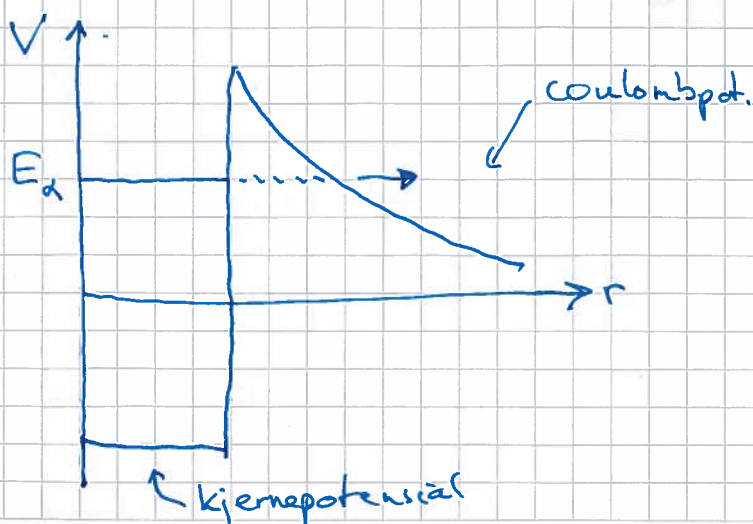
Tunnel-strøm $I \sim T \sim \exp(-2\kappa L)$ er svært følsom for endringer i avstanden L fra tip-atom til overflate-atom

⇒ Avbildning på atomært nivå.

(Binnig, Rohrer, Nobelpris 1986)

Eks: Kjernerreaksjoner

α -partikkel (${}^4_2\text{He}^{2+}$) i stor atomkjerne erfarer sterke tiltrekkende kjernekrefter med kort rekkevidde og ikke fullt så sterke frastøtende Coulombkrefter med lang rekkevidde. Modellpotensial (Gamow 1928):



α -part. kan slippe ut via tunnelering!

QM i 2 og 3 dimensjoner

[PCH 5; DFG 4; IØ 5]

Harmonisk oscillator

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{1}{2} m (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2)$$

der $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$. Dermed:

$\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z$ og TUSL har produktløsninger:

$$\begin{aligned} \hat{H}\Psi = E\Psi; \quad \Psi = \Psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) \\ = \Psi_{n_x}(x) \Psi_{n_y}(y) \Psi_{n_z}(z) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow E = \frac{\hat{H}\Psi}{\Psi} = \underbrace{\frac{\hat{H}_x \Psi_{n_x}}{\Psi_{n_x}}}_{\text{uavh. av } y \text{ og } z} + \underbrace{\frac{\hat{H}_y \Psi_{n_y}}{\Psi_{n_y}}}_{\text{uavh. av } x \text{ og } z} + \underbrace{\frac{\hat{H}_z \Psi_{n_z}}{\Psi_{n_z}}}_{\text{uavh. av } x \text{ og } y}$$

\Rightarrow Alle ledd i summen må være konstanter, som vi kan kalle hhv E_x , E_y og E_z .

Fra 1D harm. osc. kjenner vi nå Ψ_{n_x} og E_x etc:

$$E_x = (n_x + 1/2)\hbar\omega_x, \quad E_y = (n_y + 1/2)\hbar\omega_y, \quad E_z = (n_z + 1/2)\hbar\omega_z$$

$$n_x, n_y, n_z = 0, 1, 2, 3, \dots$$

$$\text{Total energi: } E = E_x + E_y + E_z$$

Relevans: Gittervibrasjoner i krystaller, "fononer".

Isotrop oscillator: $\omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega$

(76)

$$\Rightarrow V = \frac{1}{2} m \omega^2 (x^2 + y^2 + z^2) = \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 = V(r)$$

\Rightarrow Kulesymmetrisk potensial (uavh. av θ og φ)

$$\Rightarrow \text{Sentralkraft } \vec{F} = -\nabla V = -m\omega^2 r \hat{r}$$

$$\text{Energiværdier: } E_N = (n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}) \hbar \omega = (N + \frac{3}{2}) \hbar \omega ; N = 0, 1, 2, \dots$$

Degenerasjon: Flere tilstander med samme energi.

$$E_0 = \frac{3}{2} \hbar \omega ; \Psi_{000} = \Psi_0(x) \Psi_0(y) \Psi_0(z) \sim e^{-m\omega r^2/2\hbar}$$

$$g_0 = 1 \quad (\text{ikke degenerert})$$

$$E_1 = \frac{5}{2} \hbar \omega ; \left. \begin{array}{l} \Psi_{100} \sim x e^{-m\omega r^2/2\hbar} \\ \Psi_{010} \sim y \quad \text{---} \\ \Psi_{001} \sim z \quad \text{---} \end{array} \right\} g_1 = 3$$

$$\vdots$$
$$E_N = (N + \frac{3}{2}) \hbar \omega ; \left. \begin{array}{l} \Psi_{N00}, \Psi_{0N0}, \Psi_{00N}, \\ \Psi_{N-1,1,0}, \dots \end{array} \right\} g_N = ?$$

Oppdeling:

$$n_x = 0, 1, 2, \dots, N$$

For gitt n_x :

$$n_y = 0, \dots, N - n_x, \text{ dvs } N - n_x + 1 \text{ muligheter}$$

For gitt n_x og n_y :

$$n_z = N - n_x - n_y, \text{ dvs bare } \underline{\text{en}} \text{ mulighet}$$

$$\Rightarrow g_N = \sum_{n_x=0}^N (N - n_x + 1) = (N+1) + (N) + (N-1) + \dots + 1$$
$$= \underline{\underline{\frac{1}{2} (N+1)(N+2)}}$$

Generell Lærdom:

77

Symmetri medfører degenerasjon (i 2 eller flere dimensjoner)

Skifte av basis:

Med isotrop $V(r)$ er alle retninger "like gode"

\Rightarrow intet spesielt med valgt x, y, z

\Rightarrow linearkombinasjoner av ψ_{100} , ψ_{010} og/eller ψ_{001}
må kunne brukes som tilstand med energi $E_1 = \frac{5}{2} \hbar \omega$

Eks: Rotasjon vinkel α om z -aksen

$$x, y, z \rightarrow x', y', z'$$

$$x' = x \cos \alpha + y \sin \alpha$$

$$y' = -x \sin \alpha + y \cos \alpha$$

$$z' = z$$

$$\psi_{100}' \sim x' e^{-m\omega r^2/2\hbar} = (x \cos \alpha + y \sin \alpha) e^{-m\omega r^2/2\hbar}$$

$$\Rightarrow \psi_{100}' = \psi_{100} \cos \alpha + \psi_{010} \sin \alpha$$

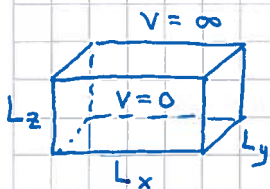
Tilsvarende:

$$\psi_{010}' = -\psi_{100} \sin \alpha + \psi_{010} \cos \alpha$$

$$\psi_{001}' = \psi_{001}$$

Partikkel i boks

[PCH 5.2]



$$V = \begin{cases} 0 & , \quad 0 < x < L_x, \quad 0 < y < L_y, \quad 0 < z < L_z \\ \infty & , \quad \text{ellers} \end{cases}$$

TUSL separerer: $E_{n_x n_y n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right)$

$$\psi_{n_x n_y n_z} = \frac{2^{3/2}}{\sqrt{L_x L_y L_z}} \sin \frac{n_x \pi x}{L_x} \sin \frac{n_y \pi y}{L_y} \sin \frac{n_z \pi z}{L_z}$$

$$n_j = 1, 2, 3, \dots \quad (j = x, y, z)$$

Degenerasjon, kubisk boks ($L_x = L_y = L_z = L$):

$$E_1 = E_{111} = \frac{3\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}; \quad g_1 = 1$$

$$E_2 = E_{211} = E_{121} = E_{112} = \frac{6\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}; \quad g_2 = 3 \quad \text{osv}$$

Relevans: Ideelle gasser, dvs partikler som ikke vekselvirker.
Enkleste modell for ^{free}elektroner i krigstaller.

Pauliprinsippet:

Ikke mer enn ett fermion i en gitt enpartikkeltilstand.

Fermioner: Elektroner, protoner, nøytroner (kvarker)

Tilstandstetthet [PCH S.2.2]

(79)

(Density of states)

En makroskopisk krystall har størrelser L_x, L_y, L_z

⇒ (enpartikkel-) tilstander $\psi_{n_x n_y n_z}$ med liken energiforskjell

⇒ kontinuerlig spektrum,
som skal fylles opp med elektroner, fra laveste energi og oppover, ett elektron i hver tilstand (pga Pauliprinsippet) i grunntilstanden (den som gir lavest total-energi)

Vi må bestemme tettheten av tilstander, dvs antall tilstander dN mellom energien E og $E + dE$.

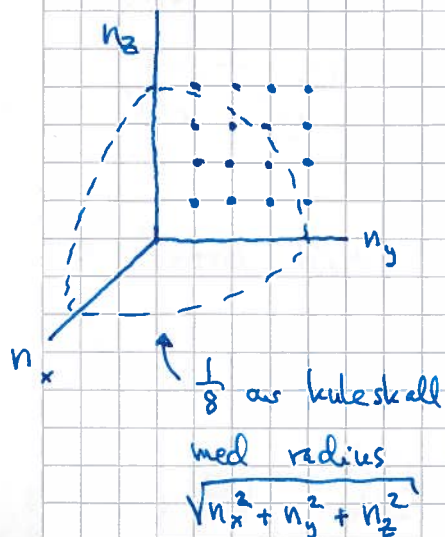
[Jf. fotongass, s. 7 og 8; Plancks strålingslov]

Anta kubisk boks, $V = L^3$.

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad (n_j \geq 1)$$

⇒ 1 tilstand pr kombinasjon (n_x, n_y, n_z)

⇒ 1 tilstand okkuperer et volum lik 1 i rommet med akser n_x, n_y, n_z



⇒ Antall tilstander med energi mindre enn

$E_{n_x n_y n_z}$ tilsvarer volumet av $\frac{1}{8}$ av kule med radius

$$\sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2} = \sqrt{\frac{2mL^2}{\pi^2 \hbar^2} E_{n_x n_y n_z}}$$

Antall tilstander mellom 0 og E:

$$\begin{aligned}
N_3(E) &= \frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi}{3} \cdot \left(\sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2} \right)^3 \\
&= \frac{\pi}{6} \cdot \left(\frac{2mL^2}{\pi^2 \hbar^2} \right)^{3/2} \cdot E^{3/2} \\
&= \frac{\pi}{6} \cdot \left(\frac{2m}{\pi^2 \hbar^2} \right)^{3/2} \cdot V \cdot E^{3/2}
\end{aligned}$$

Antall tilstander mellom E og E + dE:

$$dN_3 = N_3(E + dE) - N_3(E)$$

Tilstandstettheten, dvs antall tilst. pr energienhet:

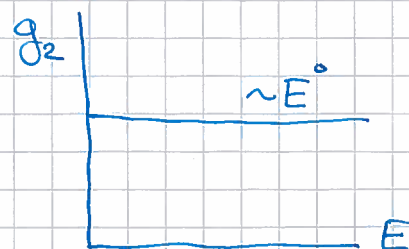
$$g_3(E) = \frac{dN_3}{dE} = \frac{\pi}{4} \left(\frac{2m}{\pi^2 \hbar^2} \right)^{3/2} \cdot V \cdot E^{1/2}$$



To dimensjoner:

Antall tilst. med energi mindre enn $E_{n_x n_y}$ tilsvareer arealet av $1/4$ av sirkel med radius

$$\sqrt{n_x^2 + n_y^2} = \sqrt{\frac{2mL^2}{\pi^2 \hbar^2} \cdot E_{n_x n_y}}$$



⇒ Antall tilst. mellom 0 og E:

$$N_2(E) = \frac{1}{4} \cdot \pi \cdot \frac{2mL^2}{\pi^2 \hbar^2} \cdot E$$

$$\Rightarrow g_2(E) = \frac{dN_2}{dE} = \frac{m}{2\pi \hbar^2} A \quad (A = L^2)$$

En dimensjon:

81

Antall tilst. med energi mindre enn E_n tilsvarende lengden er $\frac{1}{2}$ "strek" med lengde

$$2\sqrt{n^2} = 2\sqrt{\frac{2mL^2}{\pi^2\hbar^2} E_n}$$

\Rightarrow Antall tilst. mellom 0 og E :

$$N_1(E) = \frac{1}{2} \cdot 2 \cdot \sqrt{\frac{2m}{\pi^2\hbar^2}} \cdot L \cdot \sqrt{E}$$

$$\Rightarrow g_1(E) = \frac{dN_1}{dE} = \frac{1}{2} \left(\frac{2m}{\pi^2\hbar^2}\right)^{1/2} L E^{-1/2}$$

