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

$x > 0$: $\psi = t\,e^{ikx}$, $\psi' = ikt\,e^{ikx}$

$x < 0$: $\psi = e^{ikx} + r\,e^{-ikx}$, $\psi' = ik\,(e^{ikx} - r\,e^{-ikx})$

$$\psi(0^+) = \psi(0^-) \Rightarrow t = 1 + r \Rightarrow r = t - 1$$

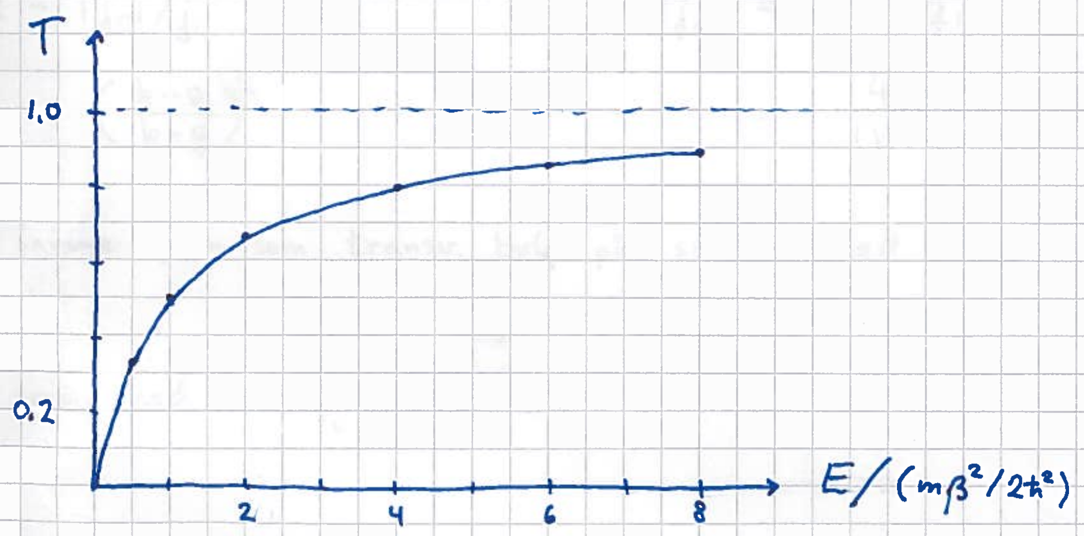
$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = -\frac{2m\beta}{\hbar^2}\psi(0) \Rightarrow ikt - ik\underbrace{(1-r)}_{=2-t} = -\frac{2m\beta}{\hbar^2}t$$

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

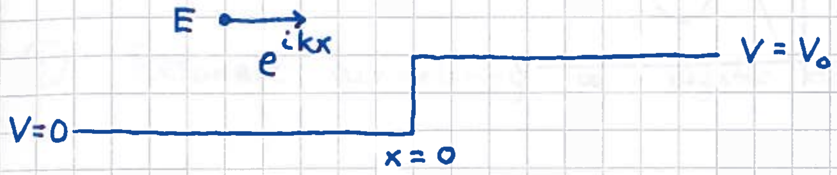
$$\Rightarrow t = \frac{ik}{ik + m\beta/\hbar^2} = \frac{1}{1 + m\beta/ik\hbar^2}$$

$$\Rightarrow T = |t|^2 = \frac{1}{1 + (m\beta/k\hbar^2)^2} = \frac{1}{1 + m\beta^2/2E\hbar^2}$$

Dvs, samme T for δ-brønn ($\beta > 0$) og δ-barriere ($\beta < 0$).



Eks 3: Potensialsprang



$E > V_0$:

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

ψ og ψ' kontinuerlige i $x = 0$

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

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

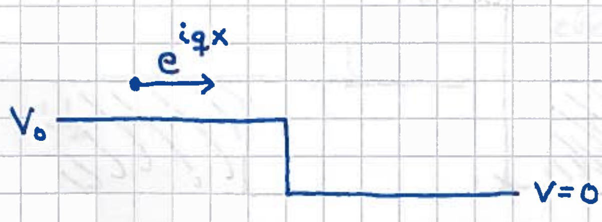
$$j_i = \hbar k/m \, , \qquad j_r = -|r|^2 \hbar k/m \, , \qquad j_t = |t|^2 \hbar q/m$$

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

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

(På samme form som transv. bølge på streng med skjøt i $x=0$!)

Hvis sprang ned:



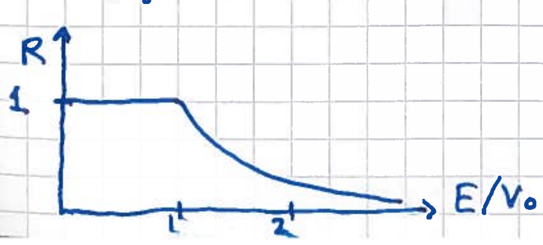
Vi ser at ombytte $k \leftrightarrow q$ gir uendret R og T ! (Resiprositet)

Hvis $E < V_0$ forventes selvsagt $T = 0$ og $R = 1$:

$$\psi(x>0) = t\,e^{-\kappa x} \quad ; \quad \kappa^2 = 2m(V_0 - E)/\hbar^2$$

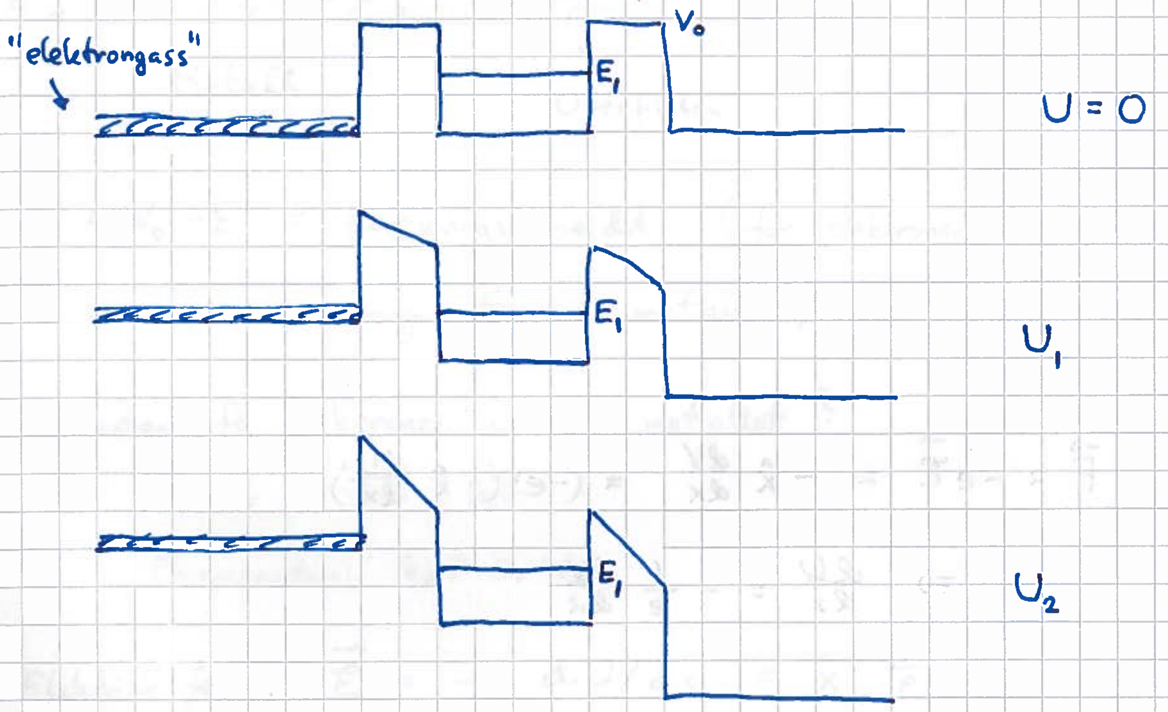
$$\Rightarrow \quad 1 + r = t \quad \text{og} \quad ik(1-r) = -\kappa t \quad \Rightarrow \quad R = |r|^2 = \left|\frac{\kappa + ik}{\kappa - ik}\right|^2 = 1 \; ; \quad \text{OK}$$

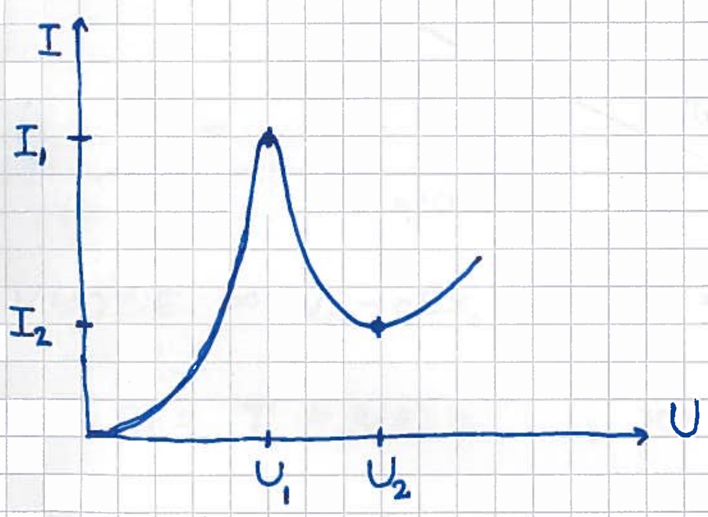
$\Rightarrow$



Anvendelser, spredning i 1D:

① Resonant tunnelering og negativ differensiell resistans





F.eks. lagdelt halvlederstruktur GaAs – AlGaAs – GaAs – AlGaAs – GaAs

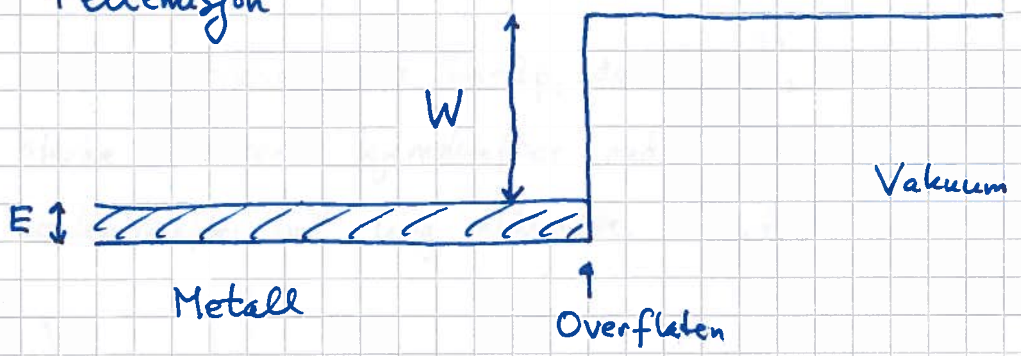
der AlGaAs repr. en potensialbarriere for elektronene i GaAs.

Mellom U_1 og U_2 er resistansen $R = U/I > 0$, men den <u>differensielle resistansen</u>

$$r = \frac{dU}{dI} < 0$$

Interessant egenskap!

② Feltemisjon

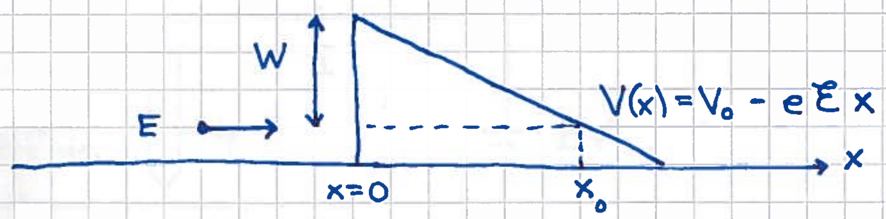


$W = V_0 - E$ = frigjøringsarbeidet (for elektronene med høyest energi, E, i metallet)

Hvordan få elektroner ut av metallet?

- Fotoner, $h\nu > W$
- Temperatur, $k_B T \gtrsim W$

Elektrisk felt, $\vec{\mathcal{E}} = -\hat{x}\, dU/dx = \hat{x}\,\frac{1}{e}\,\frac{dV}{dx}$, og tunnelering:



$(\Rightarrow \vec{\mathcal{E}} = -\mathcal{E}\hat{x})$

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

Fra s. 71: $T \approx A(E)\, e^{-2\kappa L}$; $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ for firkantbarriere

WKB-tilnærmelsen (ikke pensum): $e^{-2\kappa L} \rightarrow \exp\left[-2\int_0^{x_0} \kappa(x)\,dx\right]$

Her er $\kappa(x) = \sqrt{2m(V-E)}/\hbar = \sqrt{2m(V_0 - e\mathcal{E}x - E)}/\hbar = \sqrt{2m(W - e\mathcal{E}x)}/\hbar$

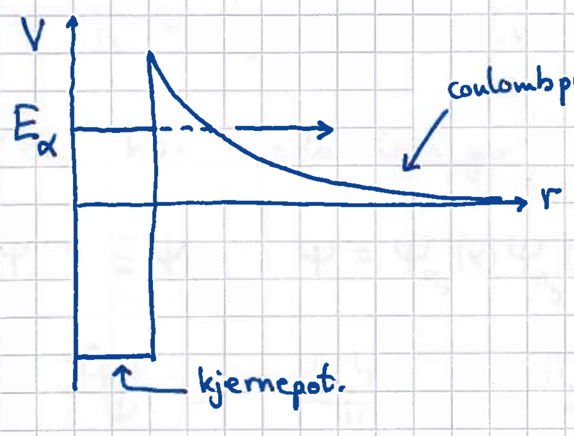
$$\Rightarrow T \sim \exp\left[-2\int_0^{W/e\mathcal{E}} \sqrt{2m(W - e\mathcal{E}x)}\,dx/\hbar\right] = \exp\left[-\frac{4\sqrt{2m}\,W^{3/2}}{3\hbar e\mathcal{E}}\right]$$

Poenget her er først og fremst at T øker raskt med økende feltstyrke $\mathcal{E}$:
Med $W \sim 4$ eV og $\mathcal{E} \sim 10^9$ V/m (typiske tallverdier) blir

$$T(\mathcal{E})/T(\tfrac{1}{2}\mathcal{E}) \approx \exp\left[\frac{4\sqrt{2m}\,W^{3/2}}{3\hbar e\mathcal{E}}\right] \approx \exp(55) \approx 10^{24}$$

3 α - stråling

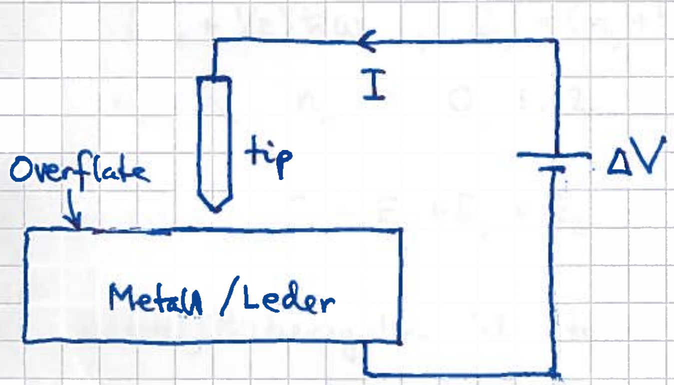
En α-partikkel, dvs $2n + 2p$, dvs ${}^4_2He^{2+}$, i en stor atomkjerne opplever sterke tiltrekkende kjernekrefter med kort rekkevidde og svakere frastøtende Coulombkrefter med lang rekkevidde. Modell potensial (Gamow 1928):

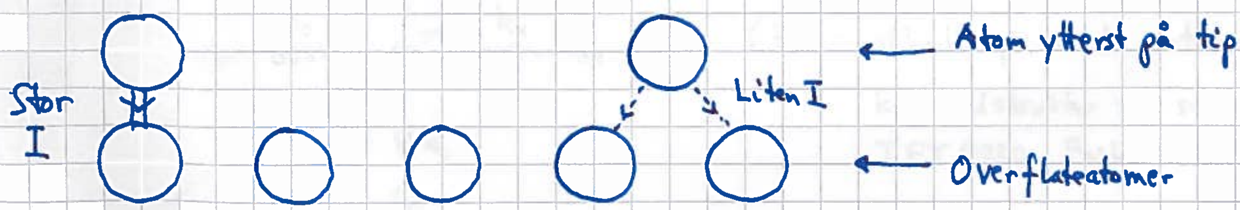


α-partikkelen kan tunnelere ut av kjernen

$\rightarrow$ α-decay

4 Scanning - tunneling - mikroskop (STM)





Strøm $I \sim T \sim \exp(-2\kappa L)$ størst når tip-atom rett over (dvs nærmest) overflateatom.

Avbildning på atomært nivå. [Binnig, Rohrer; NP 1986]

QM i 2D og 3D [PCH 5; DJG 4; IØ 5]

Harmonisk oscillator

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

$$= \hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z \qquad \left(\text{med } \hat{H}_x = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega_x^2 x^2 \quad \text{etc}\right)$$

$\Rightarrow$ TUSL har produktløsninger:

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

$$\Rightarrow E = \frac{\hat{H}\Psi}{\Psi} = \underbrace{\frac{\hat{H}_x\psi_{n_x}}{\psi_{n_x}}}_{\text{kun avh. av } x} + \underbrace{\frac{\hat{H}_y\psi_{n_y}}{\psi_{n_y}}}_{\text{...av } y} + \underbrace{\frac{\hat{H}_z\psi_{n_z}}{\psi_{n_z}}}_{\text{...av } z} = E_x + E_y + E_z$$

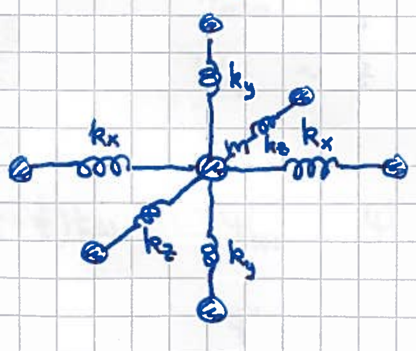
der vi fra før vet at

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

med $n_x, n_y, n_z = 0, 1, 2, \ldots$

Total energi: $E = E_x + E_y + E_z$

Eks: Vibrasjonsbevegelsen til atomer i krystaller ("fononer")



(Her: såkalt primitivt ortorombisk krystallstruktur; se TFY 4220 Faste stoffers fysikk)

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

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

dvs uavh. av θ og φ, dvs kulesymmetrisk potensial,
med radielt rettet kraft, $\vec{F} = -\nabla V = -\hat{r}\,\partial V/\partial r = -m\omega^2 r\,\hat{r}$,
såkalt sentralkraft.

Mulige energier: $E_N = (n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2})\hbar\omega = (N + \frac{3}{2})\hbar\omega$; $N = 0, 1, 2, \ldots$

[I to dimensjoner: $(N+1)\hbar\omega$; $N = n_x + n_y$]

Her har vi degenerasjon: flere tilstander med samme energi
[1D: ingen degenerasjon ; se PCH 3.1.3 for bevis]

g_N = # tilstander med energi E_N = degenerasjonsgraden

$E_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega$; $\psi_{000} = \psi_0(x)\psi_0(y)\psi_0(z) \sim e^{-m\omega r^2/2\hbar}$

$g_0 = 1$

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

$$E_N = (N + \tfrac{3}{2})\hbar\omega \;;\quad \left.\begin{array}{l} \psi_{N00},\ \psi_{0N0},\ \psi_{00N}, \\ \psi_{N-1,1,0},\ \psi_{N-1,0,1}, \ldots \\ \ldots \end{array}\right\} \Rightarrow g_N = ?$$

Kan ha $n_x = 0, 1, 2, \ldots, N$.
For gitt n_x kan vi ha $n_y = 0, 1, \ldots, N - n_x \Rightarrow N - n_x + 1$ mulige
(For gitt n_x og n_y er $n_z = N - n_x - n_y \Rightarrow$ kun én mulighet)

$$\Rightarrow g_N = \sum_{n_x=0}^{N} (N - n_x + 1) = (N+1) + N + (N-1) + \ldots + 2 + 1 = \underline{(N+2)\cdot(N+1)/2}$$

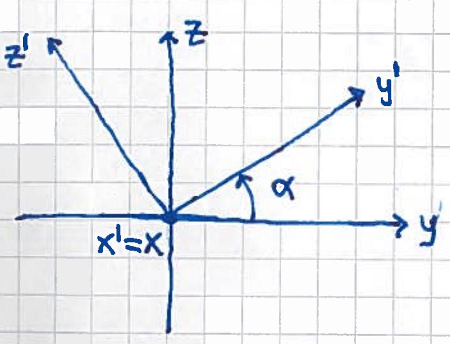
Generelt :

- Symmetri $\Rightarrow$ Degenerasjon (i 2 og 3 dimensjoner)

- Basisbytte :

Isotropt potensial $V(r)$ betyr at alle retninger er likeverdige.
Anta f.eks. at energien er $E_1 = \frac{5}{2}\hbar\omega$.
Da beskrives partikkelen med en av tilstandene ψ_{100}, ψ_{010} eller ψ_{001}, eller en vilkårlig (normert) lineær-kombinasjon av disse tre

Eks: Rotasjon av koordinatsystemet en vinkel α om x-aksen



Med (xyz) gir TUSL $\psi_{100} \sim x\, e^{-m\omega r^2/2\hbar}$ osv

Med $(x'y'z')$ gir TUSL $\psi'_{100} \sim x'\, e^{-m\omega r^2/2\hbar}$ osv

Hva er sammenhengen mellom $\{\psi'\}$ og $\{\psi\}$?

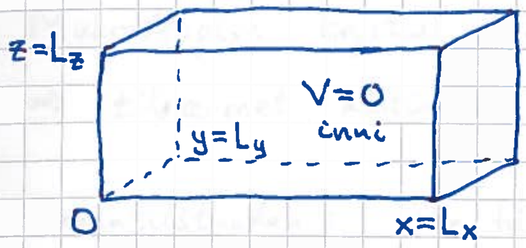
Ser at vi må finne sammenhengen mellom $\{x'y'z'\}$ og $\{x\,y\,z\}$.
Ser (fra figuren) at $y' = y\cos\alpha + z\sin\alpha$, $z' = -y\sin\alpha + z\cos\alpha$
og $x' = x$, dvs

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \quad \text{med} \quad A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\alpha & \sin\alpha \\ 0 & -\sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix}$$

Men da er også (siden ψ_{100} og ψ'_{100} er prop. med hhv x og x', osv)

$$\begin{pmatrix} \psi'_{100} \\ \psi'_{010} \\ \psi'_{001} \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} \psi_{100} \\ \psi_{010} \\ \psi_{001} \end{pmatrix}$$

Partikkel i boks. Pauliprinsipp. Tilstandstetthet [PCH 5.2] 81



$V = \infty$
utenfor

I likhet med 3D harmonisk oscillator:

TUSL separerer og gir produktløsninger;

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

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2}\right) \qquad (n_j = 1, 2, 3, \ldots ;\ j = x, y, z)$$

Kubisk boks, $L_x = L_y = L_z = L$ (symmetri!) $\Rightarrow$ degenerasjon:

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

$E_2 = E_{211} = E_{121} = E_{112} = 6\pi^2\hbar^2/2mL^2$; $g_2 = 3$

osv

Eks: Ideelle gasser (ikke-vekselvirkende partikler)

Frie elektroner i metaller (enkleste modell)

Pauliprinsippet: Maksimalt <u>ett</u> fermion i en gitt enpartikkeltilstand

Fermioner: elektron, proton, nøytron (m/fl)

Bosoner: foton. (m/fl)

(Ingen begrensning på antall bosoner i en gitt enpartikkeltilstand)