$$v = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k \,, \qquad v' = \sum_{k=1}^{\infty} a_k k\, x^{k-1} = \sum_{k=0}^{\infty} a_{k+1} (k+1)\, x^k \,,$$

$$v'' = \sum_{k=2}^{\infty} a_k k(k-1) x^{k-2} = \sum_{k=0}^{\infty} a_{k+2} (k+2)(k+1)\, x^k$$

$$\Rightarrow \sum_{k=0}^{\infty} \underbrace{\left\{ a_{k+2} (k+2)(k+1) - 2 a_k k + (\varepsilon - 1) a_k \right\}}_{=\,0 \text{ for alle } k} x^k = 0$$

$$\Rightarrow a_{k+2} = \frac{2k + 1 - \varepsilon}{(k+1)(k+2)} a_k \quad ; \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

- $a_0 = C_0$ og $a_1 = C_1$ fastlegges ved normering av hhv ψ_0 og ψ_1
- a_0 gir $a_2, a_4, a_6, \dots$
- a_1 gir $a_3, a_5, a_7, \dots$

Hvis disse to potensrekkene <u>ikke</u> bryter av, vil $\dfrac{a_{k+2}}{a_k} \approx \dfrac{2}{k}$ for store verdier av k. Da er

$$v(x) \sim e^{x^2} = 1 + x^2 + \frac{1}{2!} x^4 + \dots = \sum_{k=0,2,4,\dots} \frac{x^k}{(k/2)!}$$

for nå er

$$\frac{a_{k+2}}{a_k} = \frac{(k/2)!}{\left(\frac{k}{2} + 1\right)!} = \frac{1}{\frac{k}{2} + 1} \approx \frac{2}{k} \quad (\text{for store } k).$$

Men i såfall blir

$$\psi(x) = v(x) e^{-x^2/2} \sim e^{x^2 - x^2/2} = e^{x^2/2} \xrightarrow{|x| \to \infty} \infty$$

som <u>ikke</u> er fysisk akseptabelt!

Konklusjon: Potensrekkene må bryte av.

Kun mulig dersom $2k+1-\varepsilon = 0$, dvs $\varepsilon =$ et odde heltall.

Dvs: Krav om fysisk akseptable løsninger har gitt energikvantisering.

$$\varepsilon_k = 2k+1 \; ; \quad k = 0, 1, 2, \ldots$$

$$\varepsilon_0 = 1 \Rightarrow a_2 = 0 \Rightarrow a_4 = a_6 = \ldots = 0$$

og $a_1 = a_3 = a_5 = \ldots = 0$ ($a_1 \neq 0$ hindrer rekkeavbrudd)

$$\varepsilon_1 = 3 \Rightarrow a_3 = 0 \Rightarrow a_5 = a_7 = \ldots 0$$

og $a_0 = a_2 = a_4 = \ldots = 0$ ($a_0 \neq 0$ hindrer rekkeavbrudd)

$$\varepsilon_2 = 5 \Rightarrow a_4 = a_6 = \ldots = 0 \quad (\text{og } a_1 = a_3 = \ldots = 0)$$

$$\varepsilon_3 = 7 \Rightarrow a_5 = a_7 = \ldots = 0 \quad (\text{og } a_0 = a_2 = \ldots = 0)$$

$\vdots$

$\varepsilon_k = 2k+1$, $v_k(x) =$ polynom av orden k ; $k = 0, 1, 2, \ldots$

$$\Rightarrow E_n = \tfrac{1}{2}\hbar\omega\,\varepsilon_n = \underline{\underline{(n+1/2)\hbar\omega}} \; ; \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

Normerte egenfunksjoner:

$$\psi_n(q) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \cdot \frac{1}{\sqrt{2^n \cdot n!}} \cdot e^{-m\omega q^2/2\hbar} \cdot H_n\left(\frac{q}{\sqrt{\hbar/m\omega}}\right)$$

Hermite-polynomene:

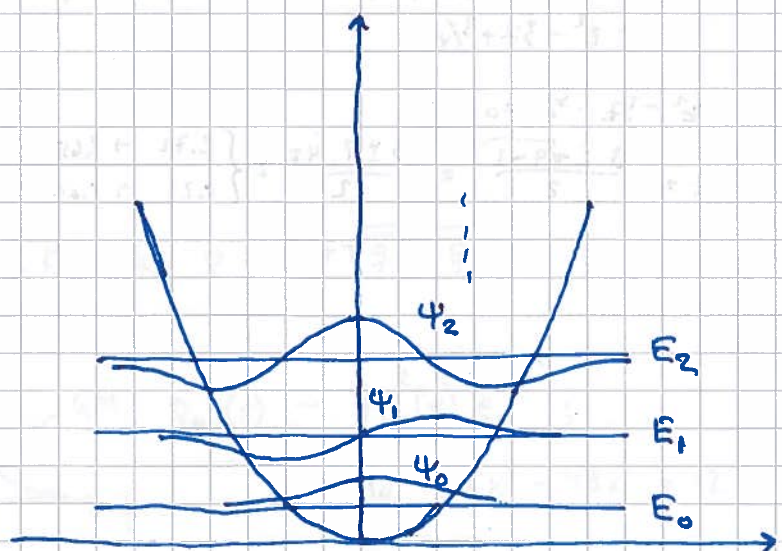
$H_0(x) = 1$

$H_1(x) = 2x$

$H_2(x) = 4x^2 - 2$

$H_3(x) = 8x^3 - 12x$

$\vdots$



QM vs klassisk harm. osc. [PCH 3.5.5 ; DJG 2.3.2 ; IØ 3.4.d]

- Sannsynlighetsfordeling

$dP = \rho(q)\,dq$ = sanns. for å finne partikkelen på $(q, q+dq)$

QM : $\rho_n(q) = |\psi_n(q)|^2$ = sanns.tetthet for stasjonær tilstand med energi $E_n = (n+1/2)\hbar\omega$

Klassisk :

dP = andel oppholdstid på $(q, q+dq) = dt/T$,

der $T = 2\pi/\omega$ = perioden og $dt = 2\,dq/v(q)$ (faktor 2 pga fram og tilbake), med fart

$v(q) = \sqrt{2K/m} = \sqrt{2(E-V)/m} = \sqrt{2E/m - \omega^2 q^2}$

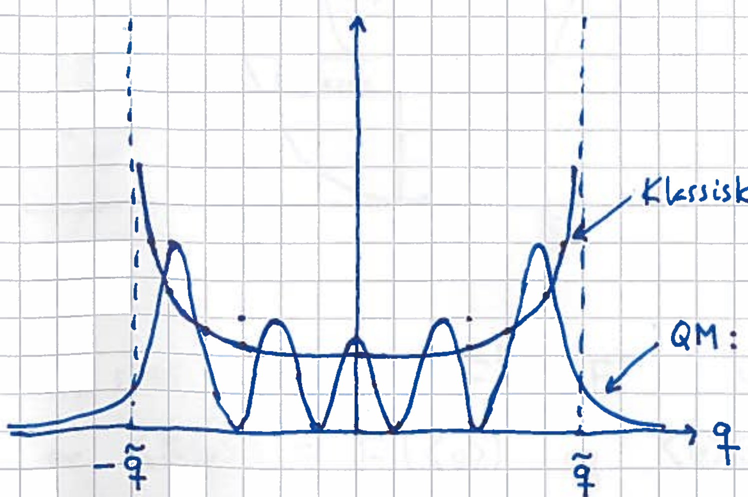
Dvs

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

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

Her må q ligge mellom de to klassiske vendepunktene $\pm\tilde{q}$, med $\tilde{q} = \sqrt{2E/m\omega^2}$, dvs der $E = V$ og $K = 0$.

Eks: $E = E_4 = \frac{9}{2}\hbar\omega$, $\tilde{q} = \sqrt{9\hbar/m\omega} = 3\sqrt{\hbar/m\omega}$



Klassisk: $\rho = \left\{\pi\sqrt{\tilde{q}^2 - q^2}\right\}^{-1}$

QM: $\rho_4(x) \sim H_4^2(x)\,e^{-x^2}$;

$H_4 \sim 16x^4 - 48x^2 + 12$

QM og klassisk $\rho(q)$ blir mer lik hverandre for økende verdi av n.

- Partikkelens bane

Klassisk: $q(t) = \tilde{q} \cos \omega t, \quad p(t) \sim \sin \omega t$

(hvis $q(0) = \tilde{q}$ og $\dot{q}(0) = 0$)

QM: For en stasjonær tilstand $\Psi_n(q,t)$ er $|\Psi_n|^2 = |\psi_n|^2$ uavhengig av t, og $\langle q \rangle = 0$, $\langle p \rangle = 0$.

Må ha bølgepakke for å beskrive en partikkel som svinger fram og tilbake,

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

F. eks. gaussformet starttilstand

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

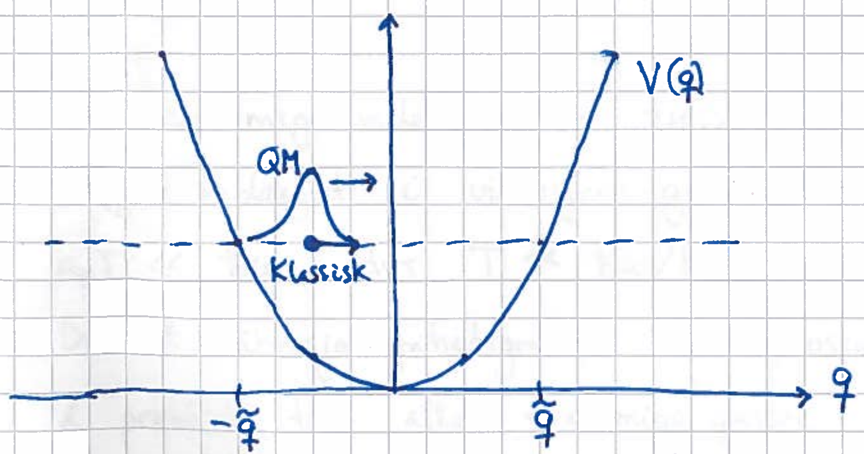
slik at $\langle q \rangle = \tilde{q}$ og $\langle p \rangle = 0$ ved $t=0$, som ovenfor.

Vet fra før at $c_n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(q)\, \Psi(q,0)\, dq$. En kan nå vise at

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

dvs fremdeles gaussisk for $t>0$, med

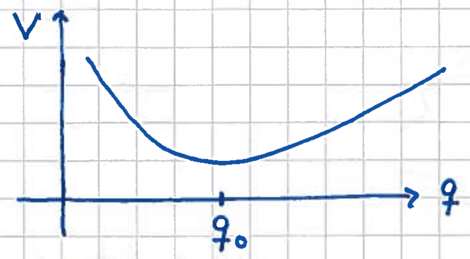
$\langle q \rangle(t) = \tilde{q} \cos \omega t$ og $\langle p \rangle (t) \sim \sin \omega t$, som klassisk.



Jf s.45: Dersom $F'' = F''' = \ldots = 0$, dvs $V''' = V'''' = \ldots = 0$, er $\langle F(q) \rangle = F(\langle q \rangle)$ og $\langle q \rangle (t)$ ~~i~~ å QM blir den samme som den klassiske $q(t)$.

- Anvendelse(r)

Har i mange situasjoner et tilnærmet harmonisk potensial, med en stabil likevekt i $q = q_0$:



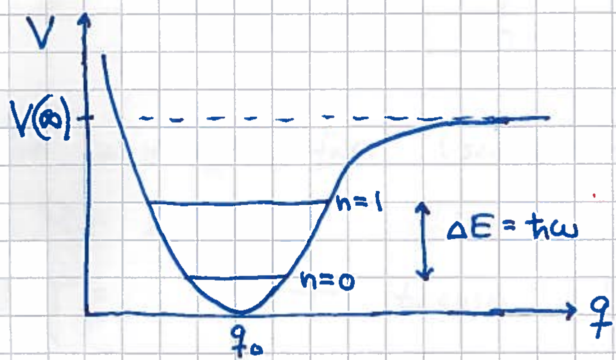
Nær q_0 kan vi skrive

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

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

Dvs: Tilnærmet harm. osc. med "fjærkonstant" $k = V''(q_0)$, og med tiln. energinivåer $E_n \approx V(q_0) + (n+1/2)\hbar\omega$ med $\omega = \sqrt{k/m} = \sqrt{V''(q_0)/m}$

Eks: Vibrasjon i toatomig molekyl



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

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

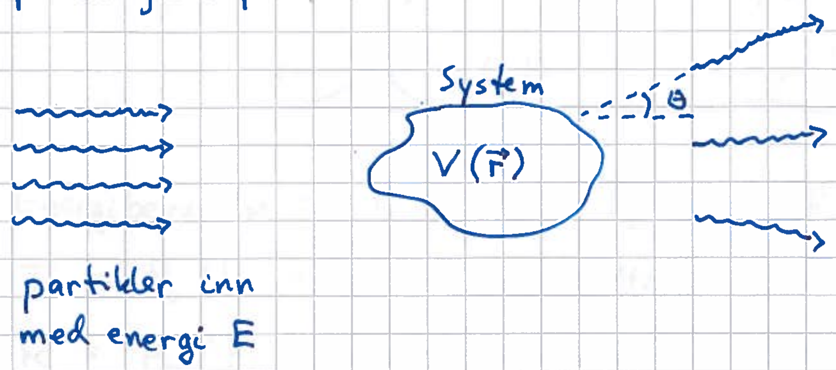
For toatomige molekyler er typisk $\hbar\omega \sim \frac{1}{10}$ eV eller mer.
Da er molekylet i vibrasjons-grunntilstanden $n=0$ dersom $k_B T \ll \hbar\omega$, dvs $T \ll \hbar\omega/k_B \sim 10^3$ K eller mer.
Dvs at vibrasjonsfrihetsgradene er "frosset ut" ved romtemperatur i praktisk talt alle toatomige gasser. Dette forklarer at $C_V = \frac{5}{2}R$, og ikke $\frac{7}{2}R$, som forventet fra det klassiske ekvipartisjonsprinsippet.

Videre er dissosiasjonsenergien, dvs ΔE for reaksjonen $AB \to A + B$, ikke $V(\infty)$, som forventet klassisk, men derimot $V(\infty) - E_0 = V(\infty) - \hbar\omega/2$, dvs mindre enn forventet klassisk.

Spredning og tunneleffekt

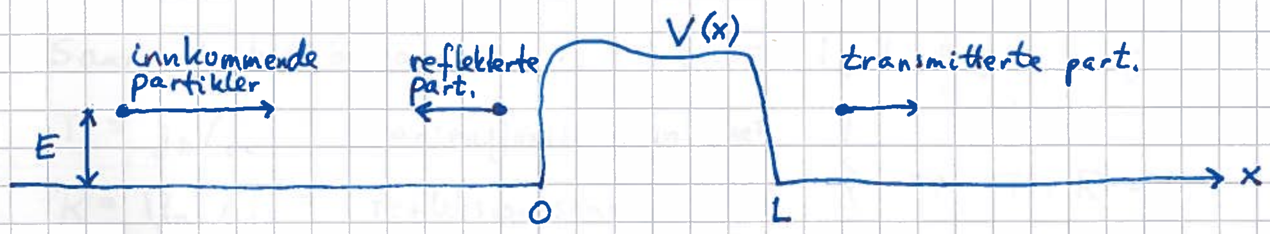
[PCH 3.6 ; DJG 2.5 – 2.7 ; IØ 3.6]

Spredningseksperimenter :



Måling av intensiteten $I(\theta\,;\,E')$ til spredte partikler gir informasjon om systemet.
(TFY4205 QM II m.fl.)

Ser her på elastisk spredning i en dimensjon $(E' = E)$.



Bare to mulige utfall (ser bort fra absorpsjon):

R = sanns. for refl.
T = —"— transm.

$\Rightarrow \quad \boxed{R + T = 1}$

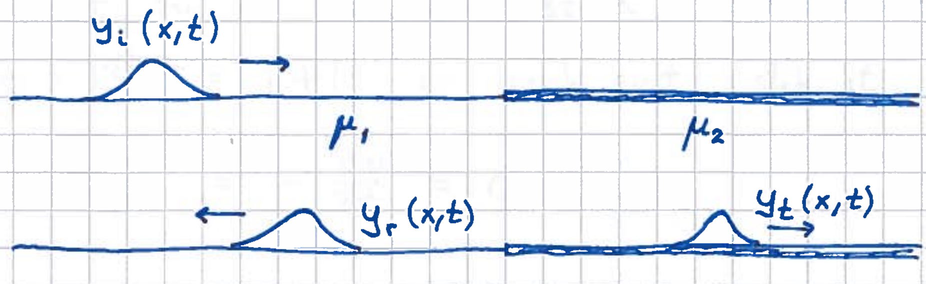
Anta partikkel inn fra venstre, med bestemt impuls $p = \hbar k$ og energi $E = \hbar^2 k^2/2m$; $V = 0$ for $x < 0$ og $x > L$.

Innkommende bølge : $\psi_i(x) = e^{ikx}$
Reflektert —"— : $\psi_r(x) = r\,e^{-ikx}$ $\Big\}\; x < 0$
Transmittert —"— : $\psi_t(x) = t\,e^{ikx}$ $\Big\}\; x > L$

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

Løses analytisk eller numerisk, og "matcher" ψ og ψ' til $\psi_i(x) + \psi_r(x)$ i $x = 0$ og $\psi_t(x)$ i $x = L$.

Klassisk analogi : Transversal bølge på streng ; ulike massetettheter μ



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

$T = P_t / P_i$ = andel transmittert effekt
$R = P_r / P_i$ = andel reflektert effekt
$\Rightarrow T + R = 1$

Med QM og plan partikkelbølge :

Sannsynlighetsbevarelse : $j_i = |j_r| + j_t$; $j = \mathrm{Re}\left\{\psi^* \frac{\hbar}{im} \psi'\right\}$

$T = j_t / j_i$ = transmisjonssannsynlighet
$R = |j_r| / j_i$ = refleksjonssannsynlighet
$\Rightarrow T + R = 1$

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

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

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

$$\Rightarrow R = |r|^2 , \quad T = |t|^2$$

$$j(x > L) = j_t = T \cdot \hbar k / m$$

$$j(x<0) = \mathrm{Re}\left\{ (\psi_i^* + \psi_r^*) \frac{\hbar}{im} \frac{d}{dx} (\psi_i + \psi_r) \right\}$$

$$= \frac{\hbar k}{m} - |r|^2 \frac{\hbar k}{m} + \frac{\hbar k}{m} \underbrace{\mathrm{Re}\left\{ r^* e^{2ikx} - r e^{-2ikx} \right\}}_{= 0 \text{ da } \{\ldots\} \text{ er rent imaginær}}$$

$$= (1 - R) \frac{\hbar k}{m} = T \frac{\hbar k}{m}$$

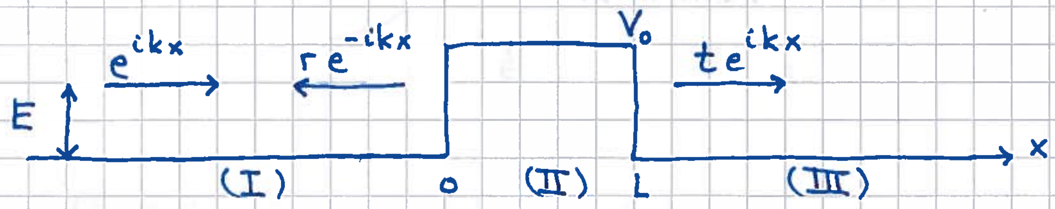
Dvs $j(x<0) = j(x>L)$, uavhengig av x.

Som ventet for en stasjonær tilstand $\Psi(x,t) = \psi(x)\, e^{-iEt/\hbar}$,

der $\rho = |\Psi|^2 = |\psi|^2$ er uavh. av t, slik at

$$\frac{\partial j}{\partial x} = -\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$$

Eks 1: Firkantbarriere



$E < V_0$: $\quad \psi_{II}'' - \kappa^2 \psi_{II} = 0 \quad ; \quad \kappa^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$

$$\psi_{II}(x) = A\, e^{\kappa x} + B\, e^{-\kappa x}$$

$E > V_0$: $\quad \psi_{II}'' + q^2 \psi_{II} = 0 \quad ; \quad q^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}$

$$\psi_{II}(x) = a e^{iqx} + b e^{-iqx}$$

Fastlegger A, B, r og t (evt a, b, r og t) ved å bruke at ψ og ψ' skal være kontinuerlige i $x = 0$ og $x = L$.
[Se f.eks. s 63-64 i notater fra 2016 for detaljer.] Vi får:

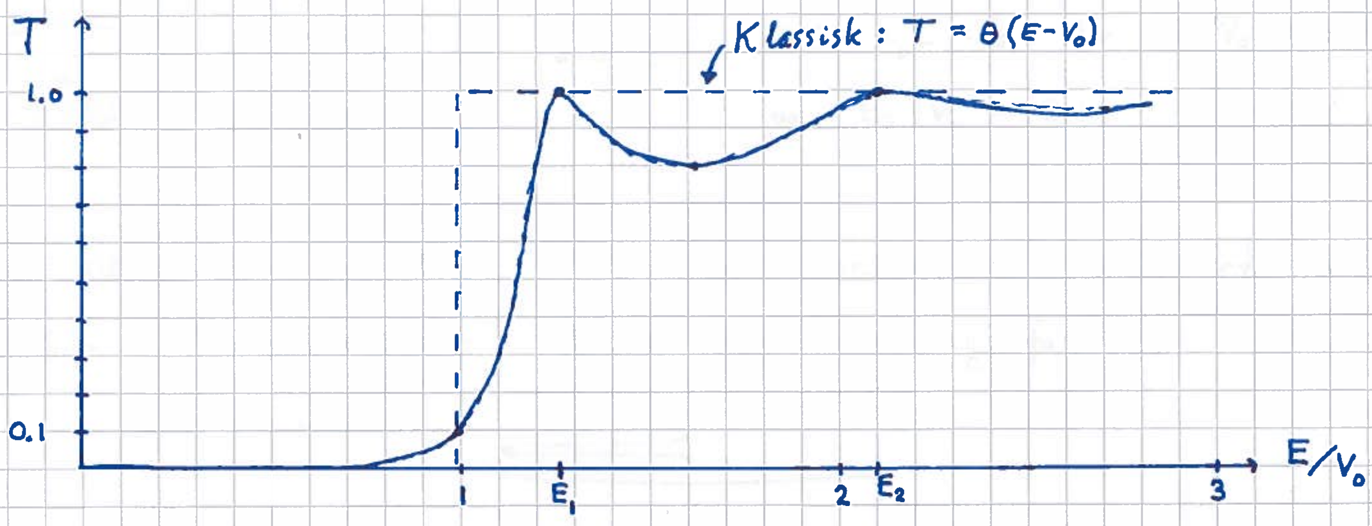
$E < V_0$: $$T = \left\{ 1 + \frac{\sinh^2\left(k_0 L \sqrt{1 - E/V_0}\right)}{4 \frac{E}{V_0}\left(1 - E/V_0\right)} \right\}^{-1}$$

$$k_0^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$$

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

$\left(\sinh x = \frac{1}{2}\left(e^x - e^{-x}\right) \quad ; \quad \sin x = \frac{1}{2i}\left(e^{ix} - e^{-ix}\right) \right)$

Talleksempel, $k_0 L = 6$, med diverse kommentarer:



- Tunneleffekt : $T > 0$ for $E < V_0$

- $R > 0$ også for $E > V_0$

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

$$\Rightarrow T(E = V_0) = \left(1 + (k_0 L/2)^2\right)^{-1} \overset{\text{her}}{=} \left(1 + 3^2\right)^{-1} = 0.1$$

- Hvis $k_0 L \sqrt{1 - E/V_0}$ er stor, dvs endel større enn 1 (f.eks. $E \ll V_0$ og $k_0 L \gg 1$), er $\sinh\left(k_0 L \sqrt{1 - E/V_0}\right) \approx \frac{1}{2} \exp\left(k_0 L \sqrt{1 - E/V_0}\right) \gg 1$.

Da er

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

dvs T avtar eksponentielt med barrierehøyde og -tykkelse.

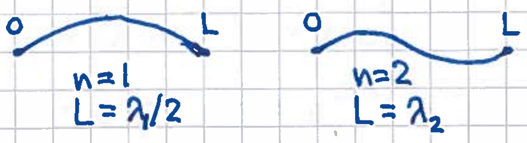
- Selv-interferens; resonans; stående bølger

$T = 1$ når $\sin\left(k_0 L \sqrt{E/V_0 - 1}\right) = 0$

$$\Rightarrow L \cdot \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E_n - V_0)} = n\pi \quad ; \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

$$\Rightarrow K_n = E_n - V_0 = \frac{\hbar^2 q_n^2}{2m} \quad \text{med} \quad q_n = \frac{n\pi}{L}, \quad \text{dvs} \quad \lambda_n = \frac{2\pi}{q_n} = \frac{2L}{n}$$

Dvs, som stående bølger i barriereområdet :

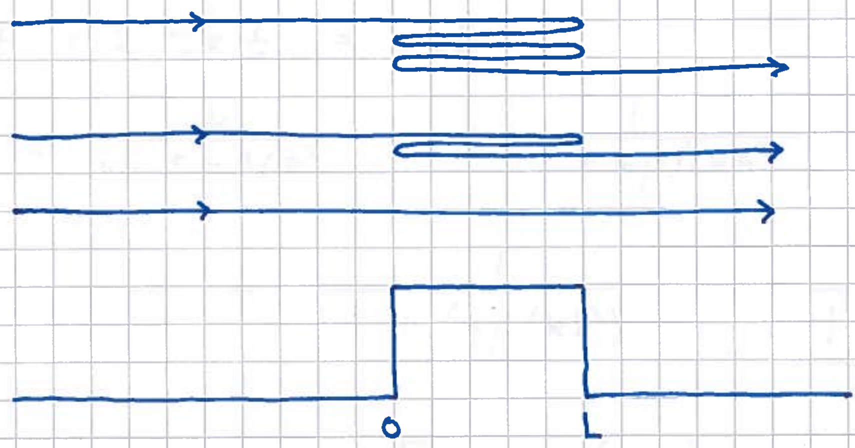


osv

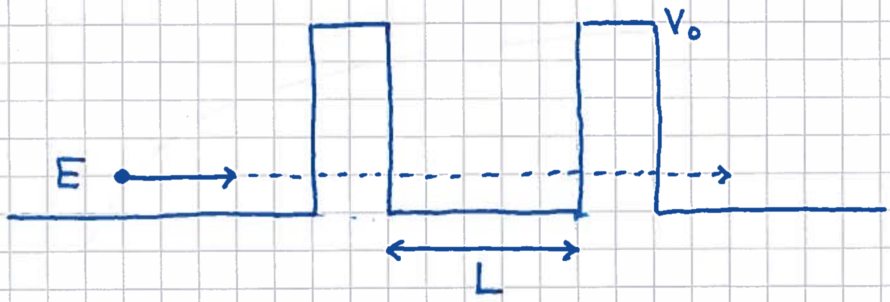
Med $k_0 L = 6$ blir $E_1 / V_0 \approx 1.27$

og $E_2 / V_0 \approx 2.10$

Kan alternativt oppfatte $T = 1$ som konstruktiv (selv-)interferens mellom "halvklassiske" baner med veilengdeforskjell $n \cdot 2L$:



Med to (eller flere) barrierer oppnås $T = 1$ også når $E < V_0$:



Konstruktiv interferens / Resonans når "brønnområdet" mellom de to barrierene har bredde $L = n \cdot \lambda/2$; $n = 1, 2, \ldots$

$\Rightarrow T = 1$ når $E = E_n = \hbar^2 k_n^2 / 2m$ med $k_n = \frac{2\pi}{\lambda_n} = \frac{n\pi}{L}$

Resonant tunnelering.