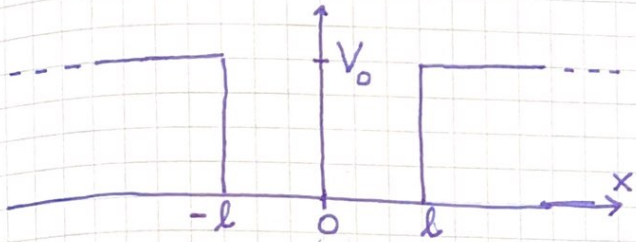
Endelig potensialbrønn [PCH 3.3; DJG 2.6; IØ 3.2]



$$V(x) = \begin{cases} 0 \; ; & |x| < \ell \\ V_0 \; ; & |x| \geq \ell \end{cases}$$

TUSL:

$$\psi''(x) = \frac{2m}{\hbar^2}\left[V(x)-E\right]\psi(x) = \begin{cases} -k^2\psi(x) \; ; \; |x|<\ell \; ; & k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \\ \kappa^2\psi(x) \; ; \; |x| \geq \ell \; ; & \kappa^2 = \frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2} \end{cases}$$

$$= k_0^2 - k^2$$

Bundne tilstander når $E < V_0$:

$$\psi(x) = \begin{cases} A\, e^{\kappa x} & (x \leq -\ell) \\ C \sin kx + D\cos kx & (|x| < \ell) \\ B\, e^{-\kappa x} & (x \geq \ell) \end{cases}$$

(Må ha $|\psi| \to 0$ når $|x| \to \infty$.)

Symmetrisk $V(x)$ $\Rightarrow$ Symm. $|\psi(x)|^2$ $\Rightarrow$ Mulige $\psi(x)$ er enten symm. (S) eller antisymm. (AS)

$\Rightarrow$ Vi har $D\cos kx$ (S) og $C\sin kx$ (AS) hver for seg!

Med gitt S eller AS holder det å kreve at $\psi(x)$ og $d\psi(x)/dx$ er kontinuerlige i (f.eks.) $x = \ell$.

S: $B e^{-\kappa\ell} = D\cos k\ell$

$-\kappa B e^{-\kappa\ell} = -kD\sin k\ell$

$\Rightarrow \tan k\ell = \kappa/k$

AS: $B e^{-\kappa\ell} = C\sin k\ell$

$-\kappa B e^{-\kappa\ell} = kC\cos k\ell$

$\Rightarrow \tan k\ell = -k/\kappa$

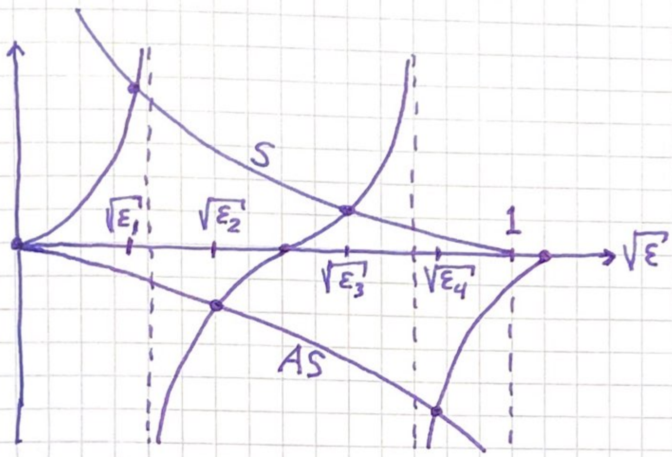
Løsningene gir tillatte k-verdier, og dermed tillatte energier E for bundne tilstander.

Med $\varepsilon = E/V_0$; $0 < \varepsilon < 1$:

$\varepsilon = k^2/k_0^2$, $k^2 = \varepsilon k_0^2$, $k\ell = \sqrt{\varepsilon}\, k_0 \ell$

$\varkappa/k = \sqrt{\frac{k_0^2 - k^2}{k^2}} = \sqrt{\frac{1-\varepsilon}{\varepsilon}}$, $-k/\varkappa = -\sqrt{\frac{\varepsilon}{1-\varepsilon}}$

$$\Rightarrow \tan\left(\sqrt{\varepsilon}\, k_0 \ell\right) = \begin{cases} \sqrt{\frac{1-\varepsilon}{\varepsilon}} & (S) \\ -\sqrt{\frac{\varepsilon}{1-\varepsilon}} & (AS) \end{cases}$$



Minst 1 bundet tilstand, uansett brønnens dybde og bredde.

Her 4 bundne tilst.

$\tan(\sqrt{\varepsilon}\, k_0\ell)$ har asymptoter for $\sqrt{\varepsilon}\, k_0 \ell = (n + 1/2)\pi$ og nullpunkter for $\sqrt{\varepsilon}\, k_0\ell = n\pi$; $n = 0, 1, 2, \ldots$

\# nullpunkter < 1 = # bundne S

\# asymptoter < 1 = # bundne AS

$\Rightarrow$ # bundne : $N = 1$ + heltallsverdien av $2k_0\ell/\pi$

Ser at $|\psi|^2 > 0$ for $|x| > \ell$ selv om $E < V_0$. Dvs, partikkelen kan befinne seg i det klassisk forbudte området, med inntrengningsdybde

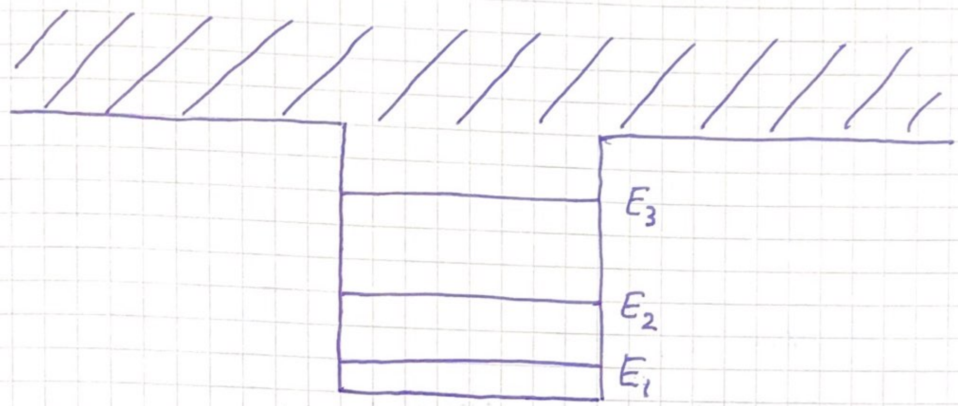
$$\frac{1}{\varkappa} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}} \quad \text{slik at} \quad \left| \frac{\psi(\ell + 1/\varkappa)}{\psi(\ell)} \right| = \frac{1}{e}$$

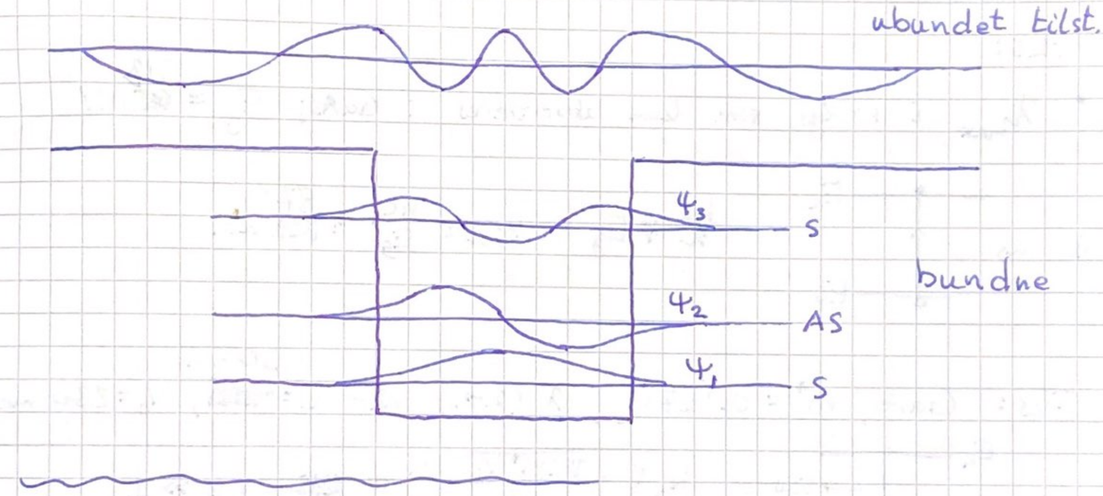
Ubundne tilstander når $E > V_0$:

For $|x| > \ell$ er nå

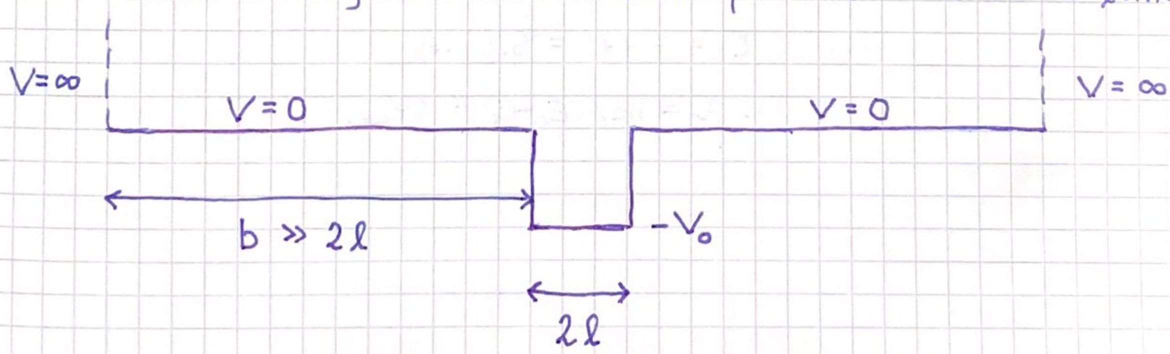
$$\psi(x) = a \sin Kx + b \cos Kx \quad ; \quad K = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$$

og kontinuerlig ψ og $d\psi/dx$ i $x = \pm \ell$ kan realiseres for alle $E > V_0$, dvs vi har et kontinuum.





Numerisk : Velg store områder på hver side av brønnen.



Eks: Hva blir E for bundne tilstander når $V_0 \gg E$?

Løsn: $\varepsilon = E/V_0 \to 0 \;\Rightarrow\; \sqrt{(1-\varepsilon)/\varepsilon} \to \infty \;;\; -\sqrt{\varepsilon/(1-\varepsilon)} \to 0$

$$\Rightarrow \tan k\ell = \infty \;(S) \;;\; 0 \;(AS)$$

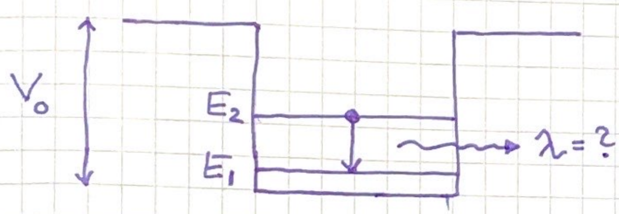
$$\Rightarrow k\ell = \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}, \ldots \;(S) \;;\; \pi, 2\pi, \ldots \;(AS)$$

$$= n\pi/2 \;;\; n = 1, 2, 3, 4, \ldots$$

$$\Rightarrow E_n = \hbar^2 k^2/2m = n^2\pi^2\hbar^2/2mL^2 \;;\; L = 2\ell$$

Som for partikkel i boks, som ventet.

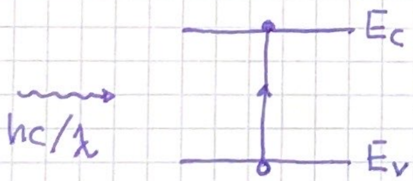
Eks 2: GaAs, $L = 30$ nm, $V_0 = 0.23$ eV, $m^* = 0.067\, m_e$



Løsn. 2: Hvis $E_2 \ll V_0$, kan vi bruke $E_n \approx n^2\pi^2\hbar^2/2m^*L^2$.
Her blir $E_2 \approx 25$ meV og $E_1 \approx 6.2$ meV ($\ll V_0$).
Dermed: $\lambda = hc/(E_2 - E_1) = \underline{66\ \mu m}$

Eks 3: Hvilken del av lyset fra sola kan absorberes av GaAs, med $E_g = 1.43$ eV ?

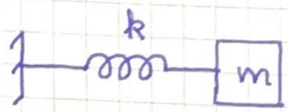
Løsn 3:



$$hc/\lambda \geq E_g$$
$$\Downarrow$$
$$\lambda \leq \frac{hc}{E_g} \approx \underline{870 \text{ nm}}$$

Harmonisk oscillator [PCH 3.5; DJG 2.3.2; IØ 3.4]

Klassisk :



$\longleftrightarrow$ $q(t)$ = utsving fra likevekt

Hookes lov: $F = -kq \Rightarrow V = \frac{1}{2}kq^2$

N2: $-kq = m\ddot{q} \Rightarrow \ddot{q} + \omega^2 q = 0$; $\omega^2 = k/m$

Med f.eks. $q(0) = q_0$ og $\dot{q}(0) = 0$ er

$q(t) = q_0 \cos\omega t$ og $\dot{q}(t) = -\omega q_0 \sin\omega t$ slik at total energi blir $E = K + V = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 q_0^2$.

Klassiske vendepunkter, dvs $K = 0$ og $E = V$, ved $q = \pm q_0$.

Kvantemekanisk : Med symmetrisk $V(q) = \frac{1}{2}m\omega^2 q^2$ forventer vi at TUSL har bundne tilstander, vekselvis symm. og antisymm., med økende antall nullpunkter.

TUSL: $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dq^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2\psi = E\psi$$

Divisjon med $\frac{1}{2}\hbar\omega$ gir (husk: $[\hbar\omega] = [E]$)

$$\frac{\hbar}{m\omega}\frac{d^2}{dq^2}\psi + \left(\frac{2E}{\hbar\omega} - \frac{m\omega}{\hbar}q^2\right)\psi = 0$$

Hensiktsmessige dimensjonsløse størrelser er derfor:

$$\varepsilon = E/\left(\tfrac{1}{2}\hbar\omega\right) \quad \text{og} \quad x = q/\sqrt{\hbar/m\omega}$$

Med TUSL på formen

$$\psi''(x) + (\varepsilon - x^2)\psi(x) = 0 \quad ; \quad \psi'' = \frac{d^2\psi}{dx^2}$$

Systematisk løsning starter med noen innledende kvalitative betraktninger.

Vet at $|\psi| \to 0$ når $|x| \to \infty$. Når $x^2 \gg \varepsilon$:

$$\psi'' - x^2\psi \approx 0$$

Da passer det med $\psi(x) \sim \exp(-x^2/2)$, som gir
$\psi'(x) \sim -x\exp(-x^2/2)$ og $\psi''(x) \sim x^2\exp(-x^2/2)$.

Med forventning (visshet!?) om symm. grunntilstand $\psi_0(x)$ uten nullpunkter og antisymm. 1. eksiterte tilstand $\psi_1(x)$ med 1 nullpunkt prøver vi

$$\psi_0(x) = a_0\exp(-x^2/2) \quad \text{og} \quad \psi_1(x) = a_1 x\exp(-x^2/2)$$

Gir:

$$\psi_0' = -a_0 x e^{-x^2/2} \; ; \quad \psi_0'' = a_0(x^2-1)e^{-x^2/2}$$

$$\psi_1' = a_1(1-x^2)e^{-x^2/2} \; ; \quad \psi_1'' = a_1(x^3-3x)e^{-x^2/2}$$

Innsetting i TUSL gir:

$$a_0\left[(x^2-1) + (\varepsilon_0 - x^2)\right]e^{-x^2/2} = 0 \Rightarrow \varepsilon_0 = 1 \Rightarrow E_0 = \tfrac{1}{2}\hbar\omega$$

$$a_1\left[(x^3-3x) + (\varepsilon_1 - x^2)x\right]e^{-x^2/2} = 0 \Rightarrow \varepsilon_1 = 3 \Rightarrow E_1 = \tfrac{3}{2}\hbar\omega$$

Våre "gjetninger" var riktige, ψ_0 og ψ_1 er løsninger av TUSL. Normering fastlegger a_0 og a_1 :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^2(q)\,dq = 1 \Rightarrow a_0 = (m\omega/\pi\hbar)^{1/4}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^2(q)\,dq = 1 \Rightarrow a_1 = \sqrt{2\pi}\,(m\omega/\pi\hbar)^{3/4}$$

Har her brukt at $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2}dx = \sqrt{\pi/\alpha}$ og at

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2}dx = -\frac{d}{d\alpha}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2}dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2\alpha^{3/2}}$$

Bruker nå <u>potensrekkemetoden</u> for å finne <u>generell</u> løsning:

$$\psi(x) = v(x)\, e^{-x^2/2} \quad ; \quad v(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k$$

Her <u>vet</u> vi:

$\psi_0(x) = v_0(x)\, e^{-x^2/2}$ med $v_0(x) = a_0$

$\psi_1(x) = v_1(x)\, e^{-x^2/2}$ med $v_1(x) = a_1 x$

Og <u>forventer</u>:

$v_2(x) = a_0 + a_2 x^2 \Rightarrow \psi_2(x)$ symm. med 2 nullpunkter

$v_3(x) = a_1 x + a_3 x^3 \Rightarrow \psi_3(x)$ antisymm. med 3 —"—

$v_4(x) = a_0 + a_2 x^2 + a_4 x^4 \Rightarrow \psi_4(x)$ symm. med 4 —"—

osv.

NB: Med <u>ulike</u> a_0 i $v_0, v_2, v_4, \ldots$; <u>ulike</u> a_1 i $v_1, v_3, \ldots$ osv

To derivasjoner av $\psi(x) = v(x)\exp(-x^2/2)$ og innsetting i TUSL gir:

$$\left[v'' - 2x v' + (\varepsilon - 1) v \right] e^{-x^2/2} = 0$$

dvs: $$v'' - 2x v' + (\varepsilon - 1) v = 0$$

med

$$x v' = x \sum_{k=1}^{\infty} a_k k x^{k-1} = \sum_{k=1}^{\infty} a_k k x^k = \sum_{k=0}^{\infty} a_k k x^k$$

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

$$\Rightarrow \sum_{k=0}^{\infty} \left\{ a_{k+2}(k+2)(k+1) - 2a_k k + (\varepsilon - 1) a_k \right\} x^k = 0$$

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

Hvis potensrekka ikke bryter av blir $a_{k+2} \approx \frac{2}{k} a_k$ når $k \gg 1$. Da divergerer $v(x)$ som $\exp(x^2)$ for store $|x|$:

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

$$\Rightarrow a_{k+2}/a_k = (k/2)!/(\tfrac{k}{2}+1)! = (\tfrac{k}{2}+1)^{-1} \approx \frac{2}{k} \quad \text{når } k \gg 1$$

Men da divergerer $\Psi(x)$ som $\exp(x^2/2)$; uakseptabelt.

Potensrekka bryter av, og $v_n(x)$ blir polynom av orden n dersom $a_{n+2} = 0 \cdot a_n$, dvs:

$$2n + 1 - \varepsilon_n = 0 \Rightarrow \varepsilon_n = 2n+1 \Rightarrow E_n = (n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega$$

Tilhørende bølgefunksjon:

$$\Psi_n(x) = \begin{cases} (a_n x^n + a_{n-2}x^{n-2} + \dots + a_0)\, e^{-x^2/2} & ;\ \text{symm.} ;\ n \text{ partall} \\ (a_n x^n + a_{n-2}x^{n-2} + \dots + a_1 x)\, e^{-x^2/2} & ;\ \text{antisymm.} ;\ n \text{ oddetall} \end{cases}$$

<u>Enten</u> bare like <u>eller</u> bare odde potenser av x i en gitt $\Psi_n(x)$. I motsatt fall bryter potensrekka ikke av, og $\Psi_n(x)$ divergerer for store $|x|$.

Normering fastlegger a_0 i $\Psi_0, \Psi_2, \Psi_4, \dots$ og a_1 i $\Psi_1, \Psi_3, \Psi_5, \dots$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^2(q)\, dq = 1 \quad ; \quad q = x \cdot \sqrt{\hbar/m\omega}$$

Resultat:

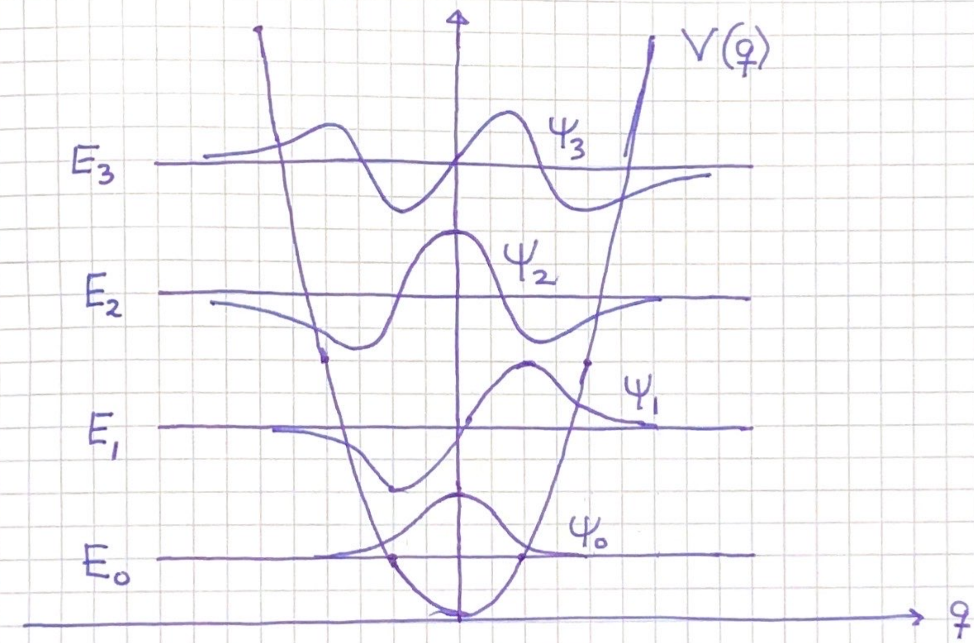
$$\psi_n(q) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \cdot \frac{e^{-m\omega q^2/2\hbar}}{\sqrt{2^n \cdot n!}} \cdot H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, q\right)$$

Hermite-polynomene:

$H_0(x) = 1$; $H_1(x) = 2x$; $H_2(x) = 4x^2-2$; $H_3(x) = 8x^3-12x$; ...

Se PCH eller Wikipedia for ulike relasjoner mellom disse, f.eks. Rodrigues' formel

$$H_n(x) = e^{x^2}\left(-\frac{d}{dx}\right)^n e^{-x^2}$$



$$E_n = \left(n+\tfrac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad ; \quad n = 0, 1, 2, 3, \ldots$$