

Klassisk vs kvantemekanisk oscillator

[PCH 3.5.5; DFG 2.3.2; IØ 3.4.d]

$$QM: dP_n = g_n(q) dq = |\psi_n(q)|^2 dq$$

Klassisk: $dP = dt/T =$ andelen av tiden tilbrakt på intervallet $(q, q+dq)$; $T = 2\pi/\omega$; $dt = 2 \cdot dq/v$

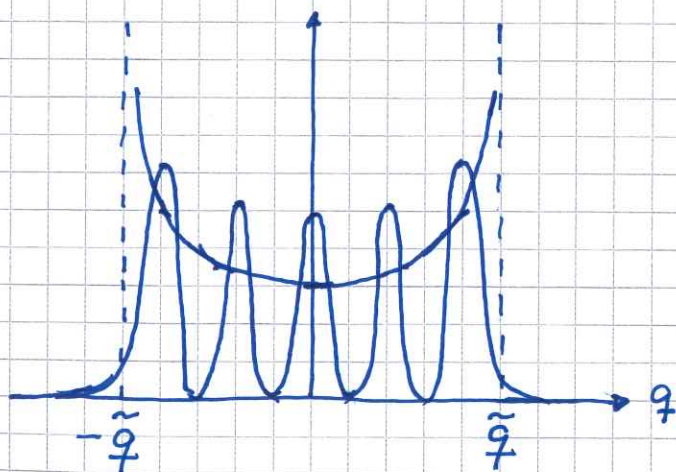
$$v = \sqrt{2K/m} = \sqrt{2(E-V)/m} = \sqrt{2E/m - \omega^2 q^2}$$

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

$$\Rightarrow g(q) = \frac{dP}{dq} = \frac{1}{\pi \sqrt{\tilde{q}^2 - q^2}}$$

Klassiske vendepunkter (der $v=0$): $q = \pm \tilde{q} = \pm \sqrt{2E/m\omega^2}$

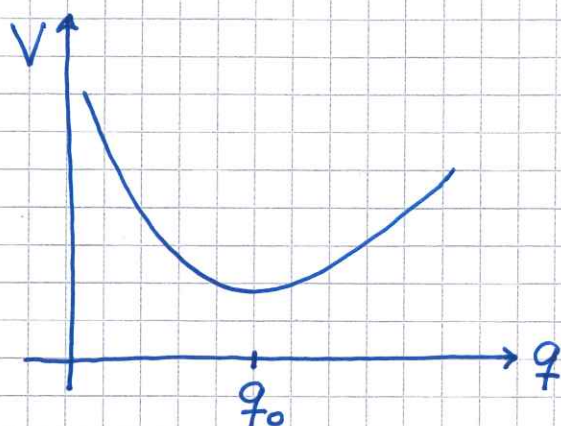
$$\text{Eks: } E = E_4 = \frac{9}{2} \hbar \omega \quad ; \quad \tilde{q} = \sqrt{9\hbar/m\omega} = 3\sqrt{\hbar/m\omega}$$



$g_n(q) = |\psi_n(q)|^2$ oscillerer mer og mer med økende n , men omhylningskurven blir mer og mer lik den klassiske $g(q)$

Anvendelser av harmonisk oscillator

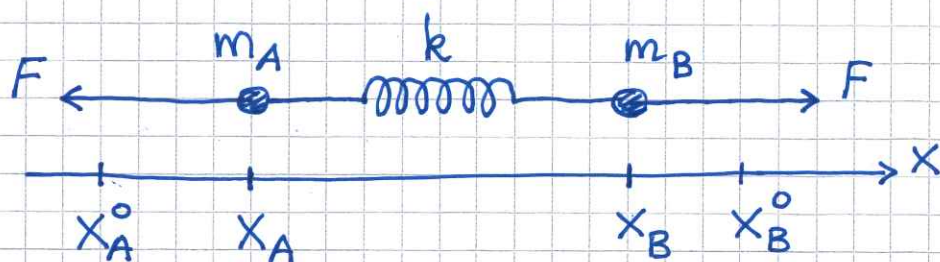
I nærheten av en stabil likevekt er potensialet tilnærmet harmonisk:



$$\begin{aligned} V(q) &= V(q_0) + (q - q_0)V'(q_0) \\ &\quad + \frac{1}{2}(q - q_0)^2 V''(q_0) + \dots \\ &\approx V(q_0) + \frac{1}{2}(q - q_0)^2 V''(q_0) \end{aligned}$$

$\Rightarrow$ Hvis små utsving omkring likevekt: Harmonisk oscillator med $k = m\omega^2 = V''(q_0)$ og energinivåer $E_n = V(q_0) + (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$; $n = 0, 1, 2, \dots$

Eks: Toatomige molekyler



$$q_0 = x_B^0 - x_A^0 = \text{bindingslengde i likevekt}$$

$$q(t) = x_B(t) - x_A(t)$$

$$F = k(q - q_0) = \text{fjærkraft}$$

$$N2: m_A \ddot{x}_A = k(q - q_0)$$

$$m_B \ddot{x}_B = -k(q - q_0)$$

$$\Rightarrow \ddot{x}_B - \ddot{x}_A = -k(q - q_0) \left(\frac{1}{m_B} + \frac{1}{m_A} \right)$$

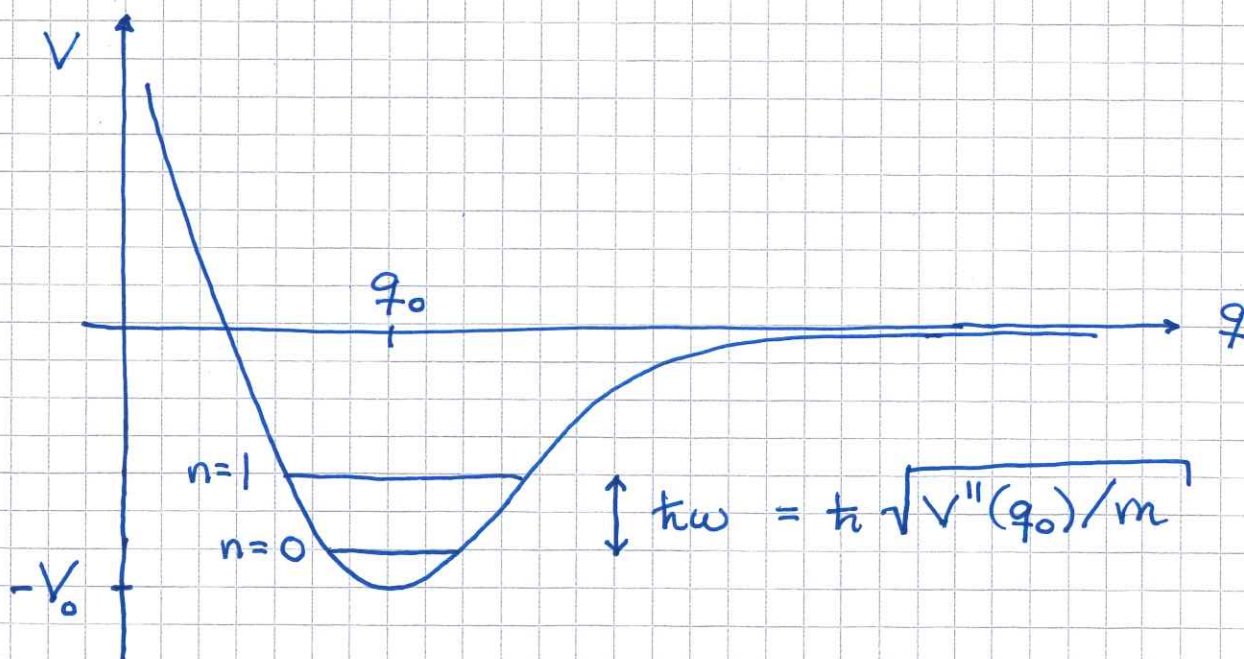
$$\Rightarrow \ddot{q} = -\frac{k}{m}(q - q_0) \quad ; \quad \frac{1}{m} = \frac{1}{m_B} + \frac{1}{m_A}$$

$$\Rightarrow m \frac{d^2}{dt^2} (q - q_0) = -k(q - q_0)$$

Dus: Harmonisk oscillator med reduisert masse

$$m = \left(\frac{1}{m_A} + \frac{1}{m_B} \right)^{-1}$$

Et realistisk potensial $V(q)$ tilsvarer en sterkt frastøtende kraft mellom atomene når $q < q_0$ og en svak tiltrekning mellom atomene når $q > q_0$:



Kan modelleres med et Morse-potensial:

$$V(q) = V_0 \{ [1 - e^{-\alpha(q-q_0)}]^2 - 1 \}$$

$$= V_0 \{ e^{-2\alpha(q-q_0)} - 2e^{-\alpha(q-q_0)} \}$$

$V(\infty) = 0$: separerte atomer (dissosiert molekyl)

$V(q_0) = -V_0$: likevekt

Nær likevekt:

$$V(q) \approx V_0 \{ [1 - 1 + \alpha(q-q_0)]^2 - 1 \}$$

$$= \alpha^2 V_0 (q-q_0)^2 - V_0$$

dvs harmonisk oscillator med fjærkonstant

$$k = 2\alpha^2 V_0$$

og kvantiserte vibrasjonsenergier

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \quad ; \quad \omega = \sqrt{k/m} = \alpha \sqrt{2V_0/m}$$

Eks: Luft (ca 78% N_2 og 21% O_2)

$$\Delta E_{vib} = \hbar\omega \approx \begin{cases} 293 \text{ meV} & \text{for } N_2 \\ 256 \text{ meV} & \text{for } O_2 \end{cases}$$

Til sammenligning er $k_B T \approx 26 \text{ meV}$ ved 300 K

Vibrasjonsbidraget til C_V i toatomig gass

Midlere vibrasjonsenergi pr molekyl ved temperatur T :

$$U_{\text{vib}} = \langle (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega \rangle = \frac{1}{2} \hbar \omega + \frac{\hbar \omega}{\exp(\hbar \omega / k_B T) - 1}$$

(der vi brukte $\langle n \hbar \omega \rangle$ fra s.10; Plancks strålingslov)

Dermed:

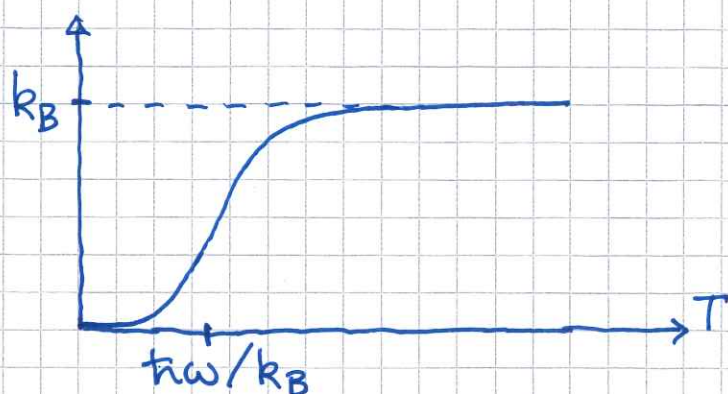
$$C_V^{\text{vib}} = \frac{dU_{\text{vib}}}{dT} = k_B \cdot \left\{ \frac{\hbar \omega / k_B T}{2 \sinh(\hbar \omega / 2 k_B T)} \right\}^2$$

$$2 \sinh x = e^x - e^{-x} \approx \begin{cases} 2x & ; x \ll 1 \\ e^x & ; x \gg 1 \end{cases}$$

$\Rightarrow C_V^{\text{vib}} \approx k_B$ når $\frac{\hbar \omega}{k_B T} \ll 1$ (høy temperatur);
i tråd med det klassiske ekvipartisjonsprinsippet, $k_B/2$
for hvert av de 2 kvadratiske leddene i
energifunksjonen $(\frac{1}{2} k q^2 + \frac{1}{2} m \dot{q}^2)$

$$C_V^{\text{vib}} \approx k_B \left(\frac{\hbar \omega}{k_B T} \right)^2 e^{-\hbar \omega / k_B T} \approx 0 \text{ når } \frac{\hbar \omega}{k_B T} \gg 1$$

(lav temperatur); vibrasjonsfrihetsgradene er nå
"frosset ut" pga at vibrasjonsenergien er kvantisert



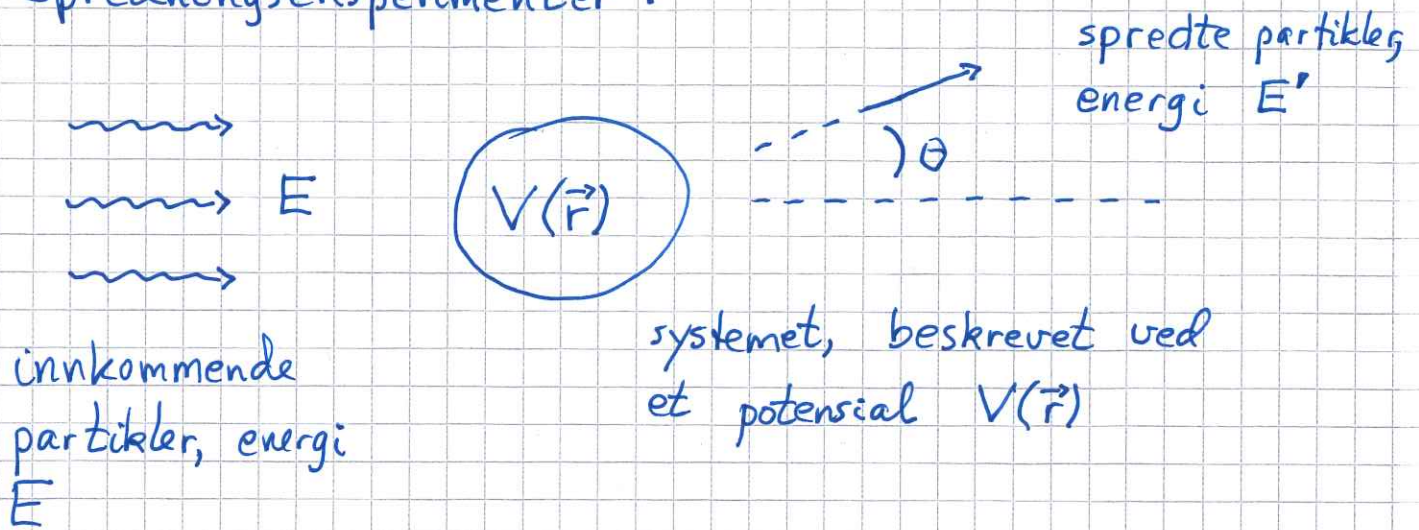
For N_2 og O_2 er $\hbar \omega / k_B$
hhv ca 3400 K og 3000 K

$$\Rightarrow C_V^{\text{vib}} \approx 0 \text{ ved } 300 \text{ K}$$

Spredning. Tunneleffekt

[PCH 3.6; DFG 2.5-2.7; IØ 3.6]

Spredningseksperimenter:



Måling av spredt intensitetsfordeling $I(\theta; E')$ gir informasjon om systemet. Eksempler på anvendelser:

- Røntgen: Fotoner med høy energi (jf. Compton-effekten)
- Ultralyd: Lydbølger med høy frekvens
- TEM: Transmisjonselektronmikroskopi
- ARPES: Vinkeloppløst fotoemisjonsspektroskopi
- SANS: Småvinkel nøytronspredning

Spredning er tema i diverse fysikkemner:

TFY 4345 Klassisk mekanikk

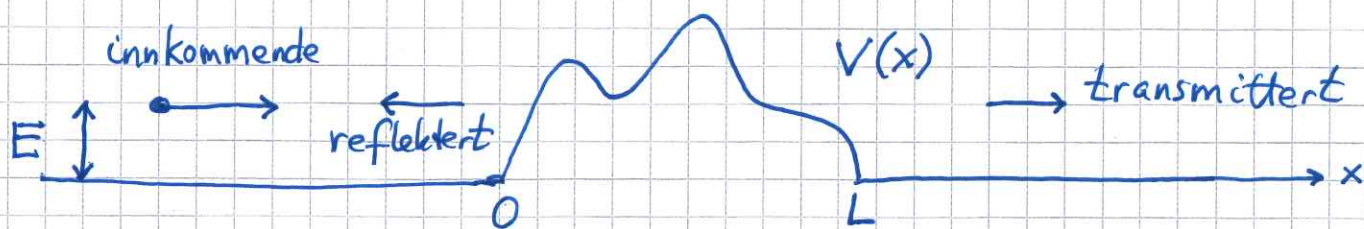
FY 2045 Krantemekanikk I

TFY 4205 — " — II

TFY 4220 Faste stoffers fysikk

TFY 4320 Fysikk i medisinsk utbildeing

Vi ser kun på det aller enkleste:
Elastisk spredning i en dimensjon.



Potensial $V(x)=0$ for $x < 0$ og $x > L$.

Antar partikkel inn fra venstre, med impuls $p = \hbar k$ og energi $E = K = p^2/2m = \hbar^2 k^2/2m$

Kun to mulige utfall:

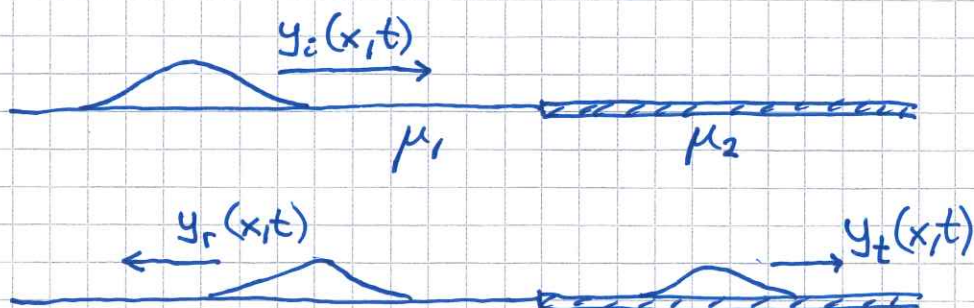
refleksjon, med sannsynlighet R
transmisjon, ——— " ——— $T = 1 - R$

$$\left. \begin{array}{ll} \text{Innkommende bølge : } \psi_i(x) = e^{ikx} \\ \text{Reflektert ——— : } \psi_r(x) = r e^{-ikx} \end{array} \right\} x < 0$$
$$\text{Transmittert ——— : } \psi_t(x) = t e^{ikx} ; x > L$$

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

Klassisk analogi (kjent fra TFY 4163) :

Transversal bølge på streng



μ = strengens masse pr lengdeenhet

Energibevarelse : Like mye energi pr tidsenhet inn som ut (for alle x og t)

$$\Rightarrow P_i = P_r + P_t \quad (P = \text{effekt})$$

$$\left. \begin{aligned} T = P_t / P_i &= \text{andel effekt transmittert} \\ R = P_r / P_i &= \text{reflektert} \end{aligned} \right\} \Rightarrow T + R = 1$$

Med plane partikkelbølger blir utgangspunktet bevaring av sannsynlighet:

$$j_i = |j_r| + j_t$$

$$j = \text{Re} \left\{ \Psi^* \frac{\hbar}{im} \Psi' \right\} \quad (\text{sanns. strøm})$$

$$\left. \begin{aligned} T = j_t / j_i &= \text{transmisjonssanns.} \\ R = |j_r| / j_i &= \text{refleksjonssanns.} \end{aligned} \right\} \Rightarrow T + R = 1$$

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

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

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

$$\text{Dermed : } R = |r|^2, \quad T = |t|^2$$

Plane bølger (inn, reflektert og transmittert) med skarp energi E betyr at vi her har en stasjonær tilstand, med tidsuavhengig ρ ; da gir kont.lign.

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

at sanns. strømmen j må være uavhengig av x .

Viser dette:

$$j(x > L) = j_t = T \cdot \frac{\hbar k}{m}$$

$$\begin{aligned} j(x < 0) &= \text{Re} \left\{ (e^{-ikx} + r^* e^{ikx}) \frac{\hbar}{im} \frac{d}{dx} (e^{ikx} + r e^{-ikx}) \right\} \\ &= \frac{\hbar k}{m} - |r|^2 \frac{\hbar k}{m} + \frac{\hbar k}{m} \text{Re} \{ r^* e^{2ikx} - r e^{-2ikx} \} \\ &= \frac{\hbar k}{m} (1 - R) + \frac{\hbar k}{m} \text{Re} \{ 2i \text{Im}(r^* e^{2ikx}) \} \\ &= \frac{\hbar k}{m} \cdot T \end{aligned}$$

Også i området $(0, L)$ der $V(x) \neq 0$ må vi ha $j = T \cdot \hbar k/m$. For å beregne j her, må vi først løse TUSL og bestemme $\Psi(x)$.

Vi skal fokusere på stykkevis konstante $V(x)$, som gir enkle uttrykk for $\Psi(x)$.

Vi skal også se hvordan slike potensialer kan realiseres med halvledere.