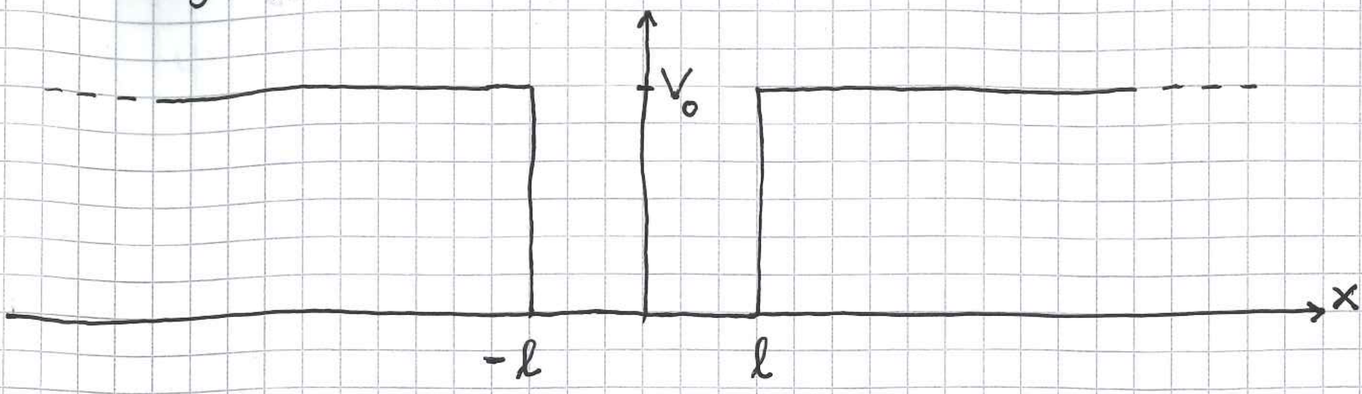
Endelig potensialbrønn [PCH 3.3; DJG 2.6; IØ 3.2]



$V(x) = 0$ for $|x| < \ell$; $V(x) = V_0$ for $|x| \geq \ell$

TUSL : $(-\hbar^2/2m)\,\psi''(x) = -(V(x)-E)\,\psi(x)$

$$\Rightarrow \quad \psi''(x) = \begin{cases} -k^2\psi(x) & ; \ |x| < \ell \quad ; \quad k^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2} \\ \kappa^2\psi(x) & ; \ |x| \geq \ell \quad ; \quad \kappa^2 = \dfrac{2m(V_0-E)}{\hbar^2} \end{cases}$$

Bundne tilstander, $E < V_0$:

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

(siden vi må ha $|\psi| \to 0$ når $|x| \to \infty$)

Kontinuerlige ψ og ψ' i $x = \pm\ell$ samt normering av ψ gir 5 lign. som fastlegger A, B, C, D og energien E.

Symmetrisk $V(x)$, her mhp $x=0$, gir symm. $|\psi|^2$ og dermed symm. og antisymm. $\psi(x)$, dvs vi må ha $D\cos kx$ (symm.) og $C\sin kx$ (antisymm.) hver for seg.

Symmetriske $\psi(x)$:

Kont. ψ og ψ' i $x = -\ell$ gir (x = ℓ gir det samme!)

$$A e^{-\varkappa \ell} = D \cos(-k\ell) = D \cos k\ell \qquad (1)$$

$$A \varkappa e^{-\varkappa \ell} = -k D \sin(-k\ell) = k D \sin k\ell \qquad (2)$$

(2)/(1) $\Rightarrow$ $\underline{\varkappa = k \tan k\ell}$

Antisymmetriske $\psi(x)$:

$$A e^{-\varkappa \ell} = C \sin(-k\ell) = -C \sin k\ell \qquad (3)$$

$$A \varkappa e^{-\varkappa \ell} = k C \cos(-k\ell) = k C \cos k\ell \qquad (4)$$

(3)/(4) $\Rightarrow$ $\underline{\varkappa^{-1} = -k^{-1} \tan k\ell}$

Dvs: Tillatte energier for bundne tilstander er gitt ved

$$\tan k\ell = \tan \frac{\sqrt{2mE}\,\ell}{\hbar} = \begin{cases} \dfrac{\varkappa}{k} = \sqrt{\dfrac{V_0 - E}{E}} & ; \text{ symm. } \psi \\[2ex] -\dfrac{k}{\varkappa} = -\sqrt{\dfrac{E}{V_0 - E}} & ; \text{ antisymm. } \psi \end{cases}$$

$V_0 \to \infty$ må tilsvare partikkel i boks:

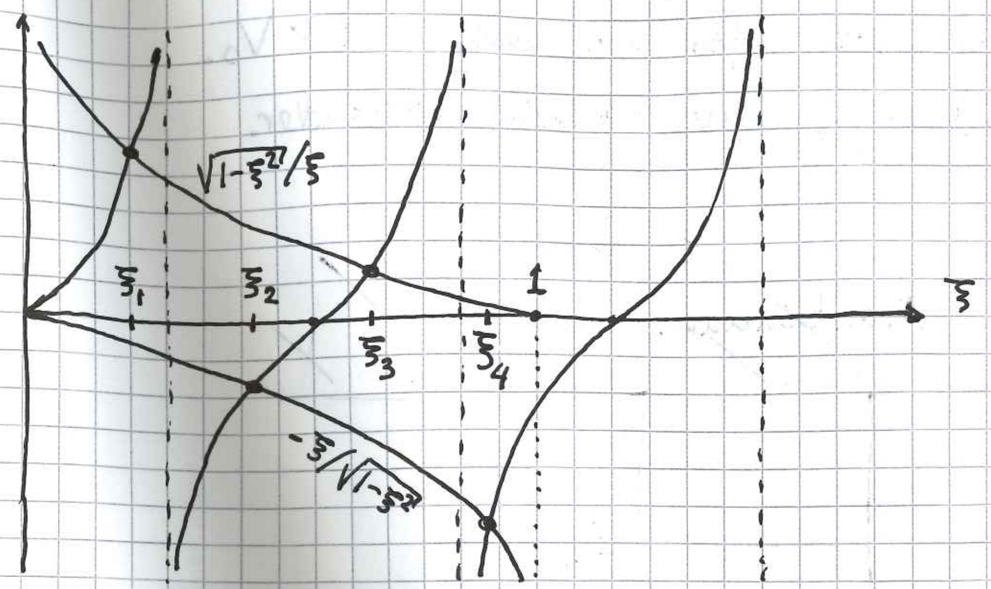
$$\tan \frac{\sqrt{2mE}\,\ell}{\hbar} = \begin{cases} \infty & (S) \\ 0 & (AS) \end{cases} \Rightarrow \frac{\sqrt{2mE}\,\ell}{\hbar} = \begin{cases} \pi/2,\ 3\pi/2, \ldots & (S) \\ \pi,\ 2\pi, \ldots & (AS) \end{cases}$$

$$\Rightarrow E_n = \frac{\hbar^2}{2m\ell^2} \cdot \left(\frac{n\pi}{2}\right)^2 \overset{L=2\ell}{=\!=} \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \qquad (n = 1, 2, 3, \ldots) \qquad \text{OK!!}$$

Tillatte E for bundne tilst. beregnes numerisk i Num. øv. nr 2.
Her gjør vi det grafisk.

Med $\xi = \sqrt{E/V_0}$ $(0 < \xi < 1)$ og $k_0 = \sqrt{2mV_0}/\hbar$: (47)

$$\tan(\xi \cdot k_0 \ell) = \begin{cases} \sqrt{1-\xi^2}/\xi & \text{(S)} \\ -\xi/\sqrt{1-\xi^2} & \text{(AS)} \end{cases}$$



Her:
4 bundne
tilstander

- Minst en bundet tilstand; $\sqrt{1-\xi^2}/\xi$ må krysse $\tan(\xi \cdot k_0 \ell)$ minst en gang.
- Dypere og bredere brønn gir flere bundne tilst.; da forskyves asymptotene til $\tan(\xi k_0 \ell)$ mot venstre.
- Hvis $(N-1)\pi/2 < k_0\ell < N\pi/2$ har vi N bundne tilst.
  Da er
  $$N < \frac{2}{\pi} k_0 \ell + 1 < N+1$$
  dvs
  $$N = 1 + \text{heltallsverdien av } 2\sqrt{2mV_0}\,\ell/\pi\hbar$$
- Vi ser at $|\psi|^2 > 0$ for $|x| > \ell$ selv om $E < V_0$; partikkelen kan befinne seg i det klassisk forbudte området!
  $\psi(x) \sim e^{-\varkappa |x|}$, med inntrengningsdybde $\varkappa^{-1} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$,
  dvs $|\psi(\ell + \varkappa^{-1})/\psi(\ell)| = 1/e$

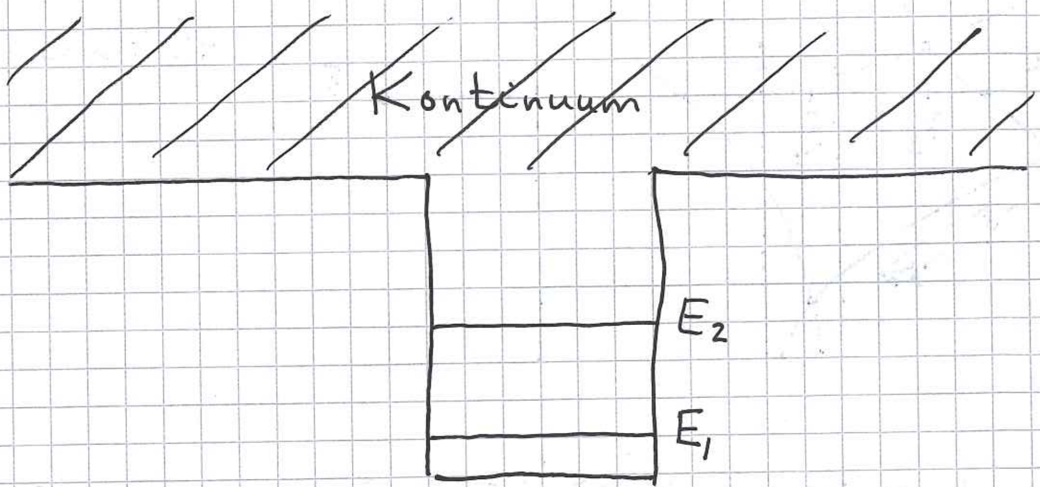
Ubundne tilstander, $E > V_0$:

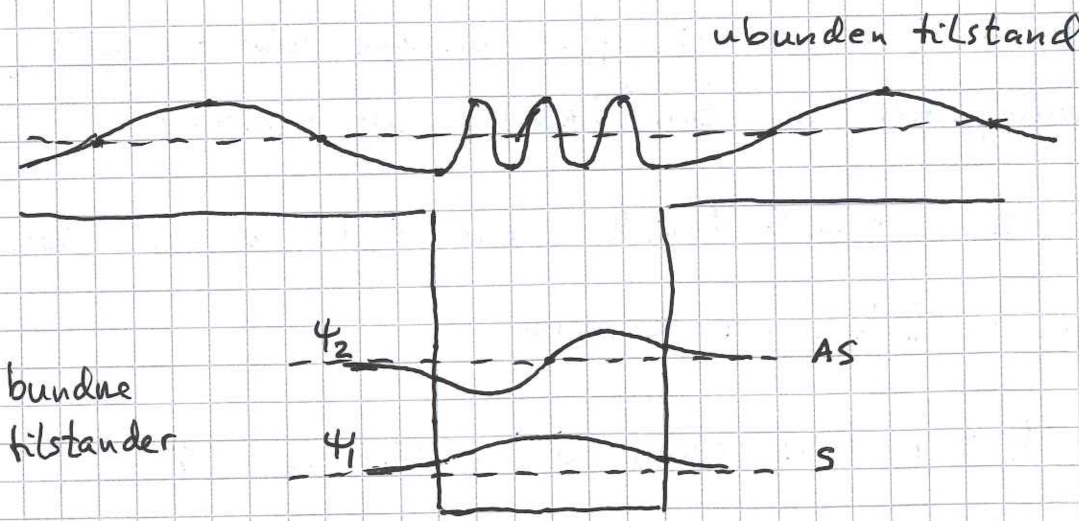
For $|x| > \ell$ har TUSL nå løsninger på formen

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

som kan matches (med ψ og ψ' kont. i $x = \pm \ell$) med $C \sin kx$ og $D \cos kx$ for alle mulige $E > V_0$.

Vi har et kontinuum av ubundne tilstander.





Diracs deltafunksjon

[PCH 3.4, App. B ; DJG 2.5 ; IØ 3.3, 2.4.f]

Trenger ofte å beskrive størrelser som er sterkt lokalisert i rom eller tid, f. eks:

Massetetthet for punktmasse
Ladningstetthet for punktladning
Krefter i kortvarige kollisjoner
Dyp og smal potensialbrønn

Diracs deltafunksjon $\delta(x)$ er da nyttig. Defineres slik:

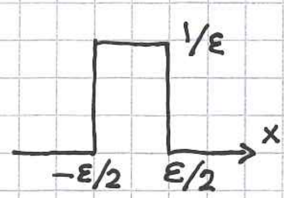
$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,\delta(x)\,dx = f(0)}$$

$f(x)$ kontinuerlig i $x=0$

- Hvis $f(x)=1$, er $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)\,dx = 1$
- Siden $\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,\delta(x)\,dx$ bare avhenger av $f(0)$,

  må vi ha $\delta(x) = 0$ når $x \neq 0$
- Da må vi ha $\delta(0) = \infty$, for med endelig verdi på $\delta(0)$ blir $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)\,dx = 0$
- Altså er $\delta(x)$ ikke en ordinær funksjon, men $\delta(x)$ kan representeres med ordinære funksjoner

Eks 1: $\delta_\varepsilon(x) = \begin{cases} 1/\varepsilon & ; \ |x| \leq \varepsilon/2 \\ 0 & ; \ |x| > \varepsilon/2 \end{cases}$



$$\left.\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \to 0} \delta_\varepsilon(x) &= \begin{cases} \infty & ; \ x = 0 \\ 0 & ; \ x \neq 0 \end{cases} \\ \int_{-\infty}^{\infty} \delta_\varepsilon(x)\,dx &= \frac{1}{\varepsilon} \cdot \varepsilon = 1 \end{aligned}\right\} \Rightarrow \quad \delta(x) = \lim_{\varepsilon \to 0} \delta_\varepsilon(x)$$

Eks 2: $\delta_\varepsilon(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-1/\varepsilon}^{1/\varepsilon} e^{ikx}\,dk = \frac{\sin(x/\varepsilon)}{\pi x}$

$$\lim_{\substack{x \to 0 \\ \varepsilon \to 0}} \frac{\sin(x/\varepsilon)}{\pi x} = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{x/\varepsilon}{\pi x} = \infty$$

Funksjonen $\frac{\sin(x/\varepsilon)}{\pi x}$ oscillerer med periode $2\pi\varepsilon$, og dermed "uendelig raskt" i grensen $\varepsilon \to 0$, <u>unntatt</u> i $x = 0$.

Dermed:

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin(x/\varepsilon)}{\pi x} \cdot f(x)\,dx = f(0) \cdot \lim_{\varepsilon \to 0} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin(x/\varepsilon)}{\pi x}\,dx}_{= 1 \ ; \ \text{uavhengig av } \varepsilon} = f(0)$$

Og dermed:

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon \to 0} \delta_\varepsilon(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx}\,dk$$

dvs en Fourier-representasjon av $\delta(x)$

Noen flere nyttige egenskaper:

- $$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)\,dx \;\underset{dx=-dy}{\overset{y=-x}{=\!=\!=}}\; \int_{\infty}^{-\infty} \delta(-y)(-dy) = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(-y)\,dy = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(-x)\,dx$$

$$\Rightarrow \boxed{\delta(-x) = \delta(x)}$$ og dermed: $$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{\pm ikx}\,dk$$

- $$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,\delta(ax)\,dx \;\underset{dx=dy/a}{\overset{y=ax}{=\!=\!=}}\; \int_{-\infty}^{\infty} f\left(\tfrac{y}{a}\right)\delta(y)\,\frac{dy}{a} = \frac{f(0)}{a}\;;\; \text{når } a>0$$

Hvis $a<0$: $$\int_{\infty}^{-\infty} f\left(\tfrac{y}{a}\right)\delta(y)\,\frac{dy}{a} = -\frac{f(0)}{a} = \frac{f(0)}{|a|}$$

Dermed: $$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,\delta(ax)\,dx = f(0)/|a|$$

$$\Rightarrow \boxed{\delta(ax) = \frac{\delta(x)}{|a|}}$$

- Def. av $\delta(\vec{r})$ i flere dimensjoner, f.eks 3D:

$$\int f(\vec{r})\,\delta(\vec{r})\,d^3r = f(0)$$

$\Rightarrow \delta(\vec{r}) = \infty$ når $x=y=z=0$; $\delta(\vec{r}) = 0$ ellers

$$\Rightarrow \boxed{\delta(\vec{r}) = \delta(x)\cdot\delta(y)\cdot\delta(z)}$$

- Enheter: $\int \delta(x)\,dx = 1 \Rightarrow [\delta(x)] = \frac{1}{[x]}$

$$\int \delta(\vec{r})\,d^3r = 1 \Rightarrow [\delta(\vec{r})] = \frac{1}{[d^3r]}$$

$$[\delta(ax)] = \frac{1}{[a\cdot x]}$$

Eks 1: Hva er ladningstetthet ρ for punktladning q i posisjon $\vec{a}$?

Løsn: $\rho(\vec{r}) = q \cdot \delta(\vec{r}-\vec{a})$; $[\rho] = C/m^3$; OK

Eks 2: Hva er kraften $\vec{F}$ fra en vegg på en ball som treffer veggen ved tidspunktet t_0, og som får en impulsendring $\Delta\vec{p}$ i det kortvarige støtet ?

Løsn: $\vec{F}(t) = \Delta\vec{p} \cdot \delta(t-t_0)$; $[F] = kg\,\frac{m}{s} \cdot \frac{1}{s} = N$; OK

δ-funksjonsnormering

Eks 2 side 50 viser nå hvordan vi kan normere plane bølger $\psi_p(x) = C\,e^{ipx/\hbar}$, dvs egenfunksjoner til $\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_p^*(x)\,\psi_{p'}(x)\,dx = |C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p'-p)x/\hbar}\,dx$$

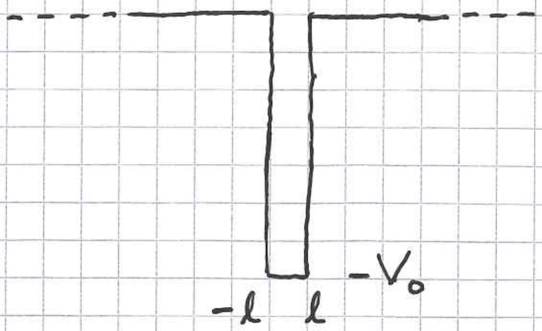
$$= |C|^2\,\hbar \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p'-p)\,y}\,dy$$

$$= |C|^2\hbar \cdot 2\pi\,\delta(p'-p)$$

$\Rightarrow$ Med $C = (2\pi\hbar)^{-1/2}$, dvs $\psi_p(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2}\exp(ipx/\hbar)$, har vi δ-funksjonsnormering i den kontinuerlige delen av spekteret (dvs frie partikler) :

$$\langle \psi_p, \psi_{p'} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_p^*(x)\,\psi_{p'}(x)\,dx = \delta(p'-p) = \delta(p-p')$$

Deltafunksjonsbrønn



$V_0 \to \infty$

$\ell \to 0$

$\beta = 2 V_0 \ell$ endelig

$V(x) = -\beta\, \delta(x)$

Bundet tilstand, $E < 0$:

For $x \neq 0$ er $V(x) = 0$

$\Rightarrow \psi'' - \kappa^2 \psi = 0 \; ; \quad \kappa^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{2m|E|}{\hbar^2}$

$$\Rightarrow \psi(x) = \begin{cases} C\, e^{-\kappa x} & ; \; x > 0 \\ C\, e^{\kappa x} & ; \; x < 0 \end{cases} \quad ; \quad \psi(0) = C$$

Finner κ, og dermed E, ved å integrere TUSL fra $-\varepsilon$ til ε og la $\varepsilon \to 0$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + V(x)\psi = E\psi$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dx}\psi' = \frac{2m}{\hbar^2} V(x)\psi - \frac{2m}{\hbar^2} E\psi$$

$$\Rightarrow \lim_{\varepsilon \to 0} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{d}{dx}\psi'(x)\,dx = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{2m(-\beta)}{\hbar^2} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \delta(x)\psi(x)\,dx + 0$$

$$\Rightarrow \psi'(0^+) - \psi'(0^-) = -\frac{2m\beta}{\hbar^2}\psi(0)$$

$$\Rightarrow -\kappa C - \kappa C = -\frac{2m\beta}{\hbar^2} C$$

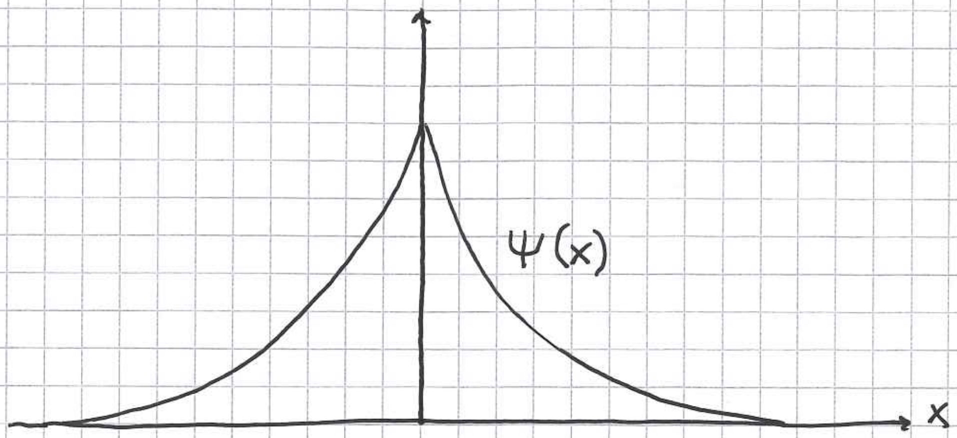
$$\Rightarrow \kappa = m\beta/\hbar^2 \quad \Rightarrow \quad E = -\hbar^2\kappa^2/2m = -m\beta^2/2\hbar^2$$

dvs <u>en</u> bundet tilstand i en δ-brønn

Normering:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = |C|^2 \cdot 2 \int_0^{\infty} e^{-2\varkappa x} dx = |C|^2/\varkappa$$

$$\Rightarrow \quad \psi(x) = \frac{\sqrt{m\beta}}{\hbar} e^{-m\beta|x|/\hbar^2}$$



Som for endelig potensialbrønn har vi også her et kontinuerlig spektrum av ubundne tilstander med $E > 0$: