

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 $(q, q+dq)$; $T = 2\pi/\omega$; $dt = 2 \cdot dq/v$

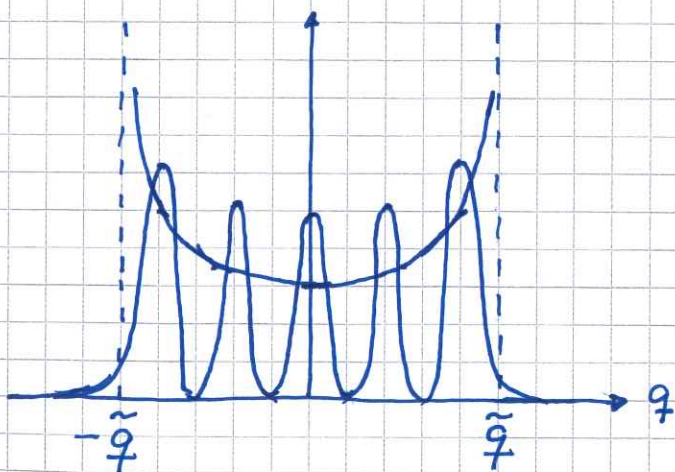
$$v = \sqrt{2K/m} = \sqrt{2(E-V)/m} = \sqrt{2E/m - \omega^2 q^2}$$

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

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

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

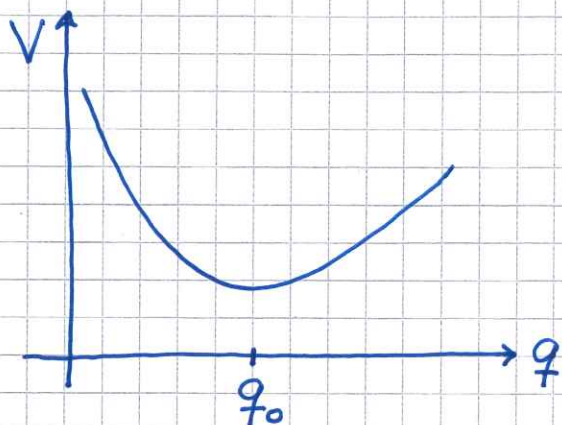
Eks: $E = E_4 = \frac{9}{2} \hbar\omega$; $\tilde{q} = \sqrt{9\hbar/m\omega} = 3\sqrt{\hbar/m\omega}$



$g_n(q) = |\Psi_n(q)|^2$ 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 :



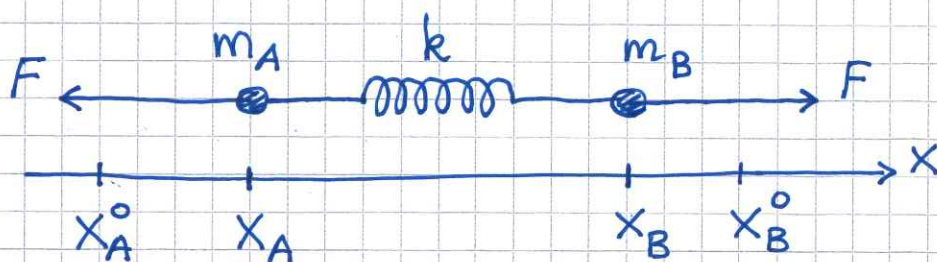
$$V(q) = V(q_0) + (q - q_0)V'(q_0) + \frac{1}{2}(q - q_0)^2 V''(q_0) + \dots$$

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

⇒ Hvis små utsving omkring likevekt : Harmonisk oscillator med $k = m\omega^2 = V''(q_0)$ og energinivåer

$$E_n = V(q_0) + (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \quad ; \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Eks : Toatomige molekyler



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

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

$$F = k(q - q_0) = \text{fjærkraft}$$

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

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

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

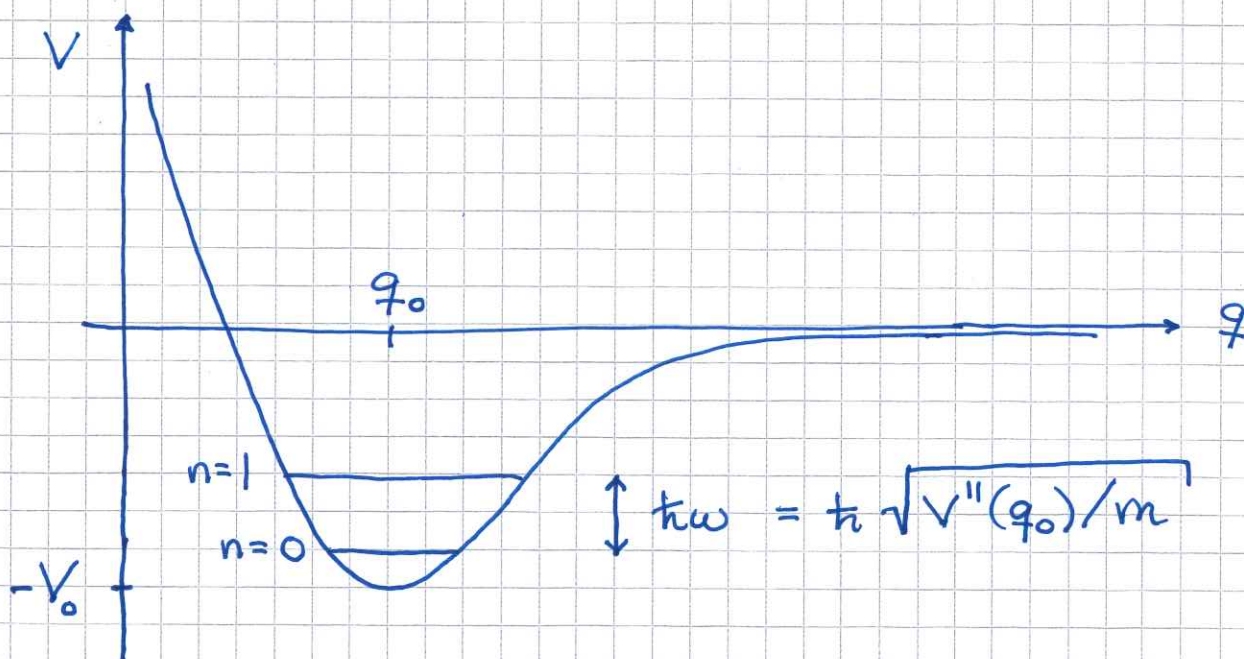
$$\Rightarrow \ddot{q} = -\frac{k}{m}(q - q_0) \quad ; \quad \frac{1}{m} = \frac{1}{m_B} + \frac{1}{m_A}$$

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

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:

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

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

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

$V(q_0) = -V_0$: likevekt

Nær likevekt:

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

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

dus harmonisk oscillator med fjærkonstant

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

og kvantiserte vibrasjonsenergier

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

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

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

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 :

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

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

Dermed:

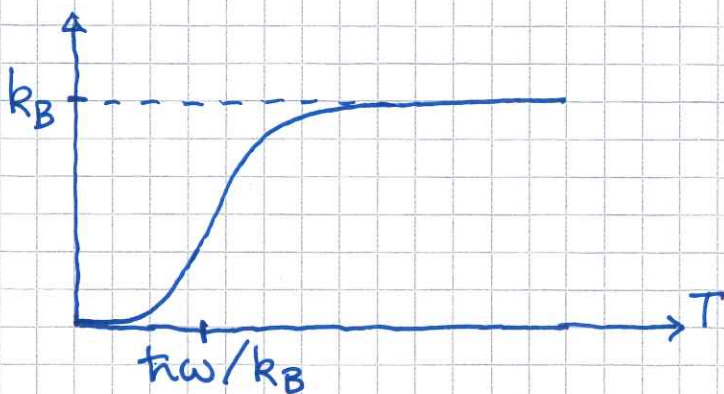
$$C_V^{vib} = \frac{dU_{vib}}{dT} = k_B \cdot \left\{ \frac{h\nu/k_B T}{2 \sinh(h\nu/2k_B T)} \right\}^2$$

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

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

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

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



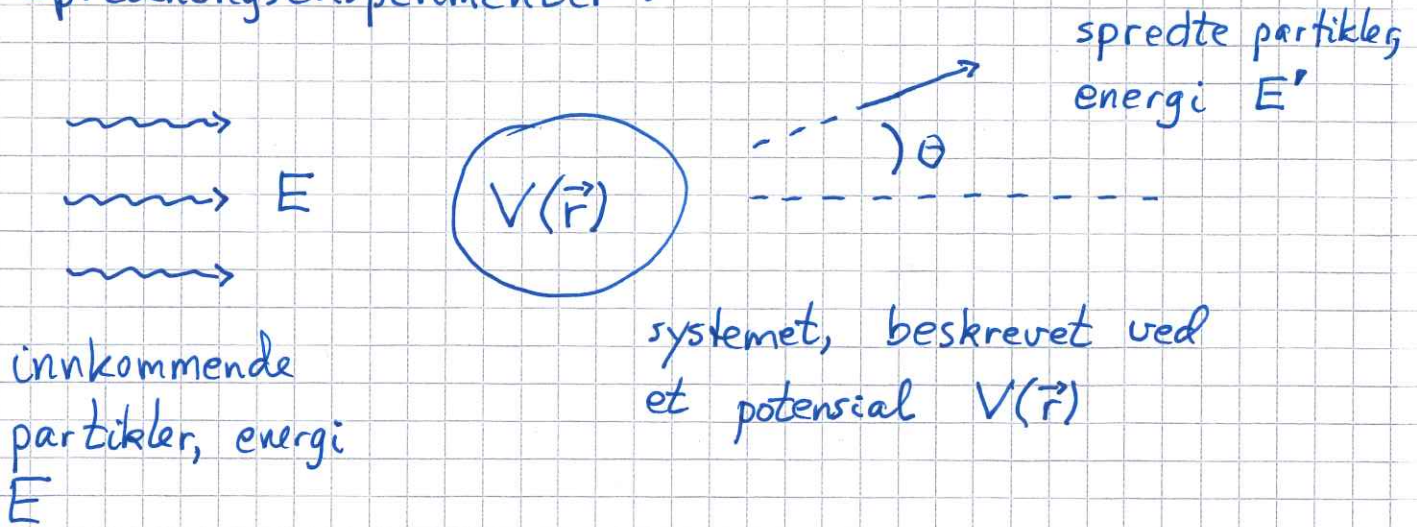
For N_2 og O_2 er $h\nu/k_B$
hvor ca 3400 K og 3000 K

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

Spredning. Tunneleffekt

[PCH 3.6; DFG 2.5-2.7; IØ 3.6]

Spredningeksperimenter:



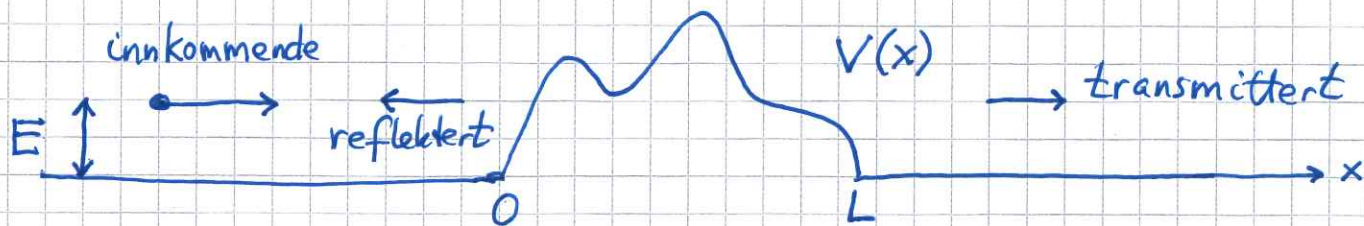
Måling av spredt intensitetsfordeling $I(\theta; E')$ gir informasjon om systemet. Eksempler på anvendelser:

- 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 utbiling

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:

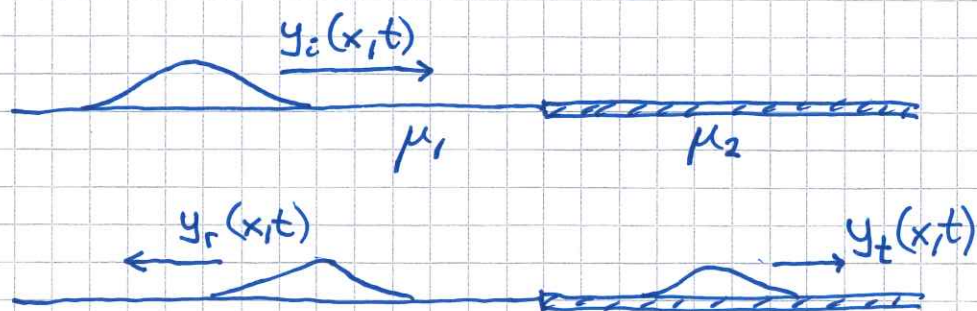
refleksjon, med sannsynlighet R
 transmisjon, ——— " ——— $T = 1 - R$

Innkommende bølge: $\Psi_i(x) = e^{ikx}$
 Reflektert — " —: $\Psi_r(x) = r e^{-ikx}$
 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 (lært 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)

⇒ P_i = P_r + P_t (P = effekt)

T = P_t/P_i = andel effekt transmittert }
R = P_r/P_i = — " — reflektert } ⇒ T+R=1

Med plane partikkelbølger blir utgangspunktet bevaring av sannsynlighet:

j_i = |j_r| + j_t

j = Re { Ψ* (ħ/im) Ψ' } (sanns. strøm)

T = j_t/j_i = transmisjons sanns. }
R = |j_r|/j_i = refleksjons sanns. } ⇒ T+R=1

j_i = Re { e^{-ikx} (ħ/im) ik e^{ikx} } = (ħk/m)

j_r = Re { r* e^{ikx} (ħ/im) (-ik) r e^{-ikx} } = -|r|² (ħk/m)

j_t = Re { t* e^{-ikx} (ħ/im) ik t e^{ikx} } = |t|² (ħk/m)

Dermed : R = |r|² , 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:

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

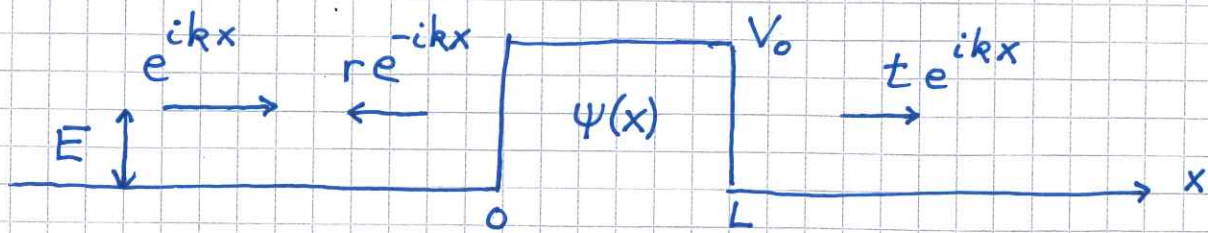
$$\begin{aligned} j(x < 0) &= \text{Re} \left\{ (e^{-ikx} + r^* e^{ikx}) \frac{\hbar}{im} \frac{d}{dx} (e^{ikx} + r e^{-ikx}) \right\} \\ &= \frac{\hbar k}{m} - |r|^2 \frac{\hbar k}{m} + \frac{\hbar k}{m} \text{Re} \{ r^* e^{2ikx} - r e^{-2ikx} \} \\ &= \frac{\hbar k}{m} (1 - R) + \frac{\hbar k}{m} \text{Re}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

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.

Eks 1: Firkantbarriere



$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{\kappa x} + B e^{-\kappa x} & ; E < V_0 \\ a e^{iqx} + b e^{-iqx} & ; E > V_0 \end{cases}$$

$$\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar \quad ; \quad q = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$$

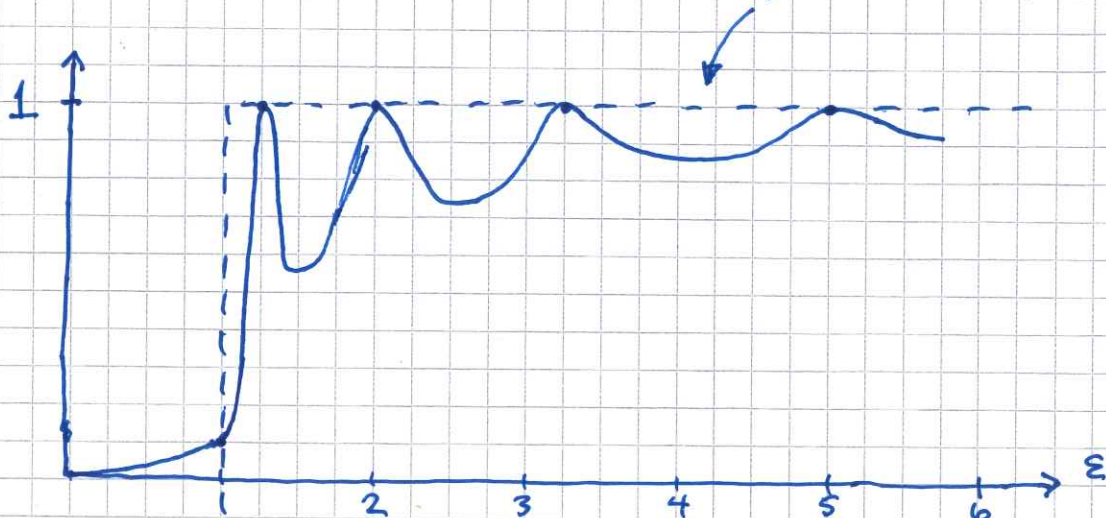
Kontinuerlig ψ og ψ' i $x=0$ og $x=L$ gir 4 ligninger som fastlegger A, B, r, t for $E < V_0$ og a, b, r, t for $E > V_0$. (Se Notater 2016, s. 63-64 for detaljer.)

Resultat, med $k_0 = \sqrt{2mV_0}/\hbar$ og $\epsilon = E/V_0$:

$$T = |t|^2 = \begin{cases} \left[1 + \frac{\sinh^2(k_0 L \sqrt{1-\epsilon})}{4\epsilon(1-\epsilon)} \right]^{-1} & ; \epsilon < 1 \\ \left[1 + \frac{\sin^2(k_0 L \sqrt{\epsilon-1})}{4\epsilon(\epsilon-1)} \right]^{-1} & ; \epsilon > 1 \end{cases}$$

Med f.eks. $k_0 L = 2\pi$:

Klassisk: $T = \Theta(\epsilon - 1)$



- Tunneleffekt : $T > 0$ for $E < V_0$
(Dessuten : $R > 0$ for $E > V_0$)
- Forenklet uttrykk for T når $E \ll V_0$ og $k_0 L \gg 1$:
Da er $\sinh(k_0 L \sqrt{V_0 - E}) \approx \frac{1}{2} \exp(k_0 L) \gg 1$ slik at
$$T \approx 16 \epsilon \cdot \exp(-2k_0 L) \ll 1$$

Dvs, T avtar eksponentielt med barrierens høyde og bredde
- $T=1$ når $\sin(k_0 L \sqrt{E - V_0}) = 0$, dvs $k_0 L \sqrt{E - V_0} = n\pi$,
dvs $E - V_0 = n^2 \pi^2 / k_0^2 L^2$, dvs $E - V_0 = K = n^2 \pi^2 \hbar^2 / 2mL^2$,
dvs det samme som for partikkel i boks, dvs stående bølger i barrierområdet, med bølglengder $\lambda_n = 2L/n$ ($n=1, 2, 3, \dots$). Kan på sett og vis tolkes som konstruktiv interferens mellom "klassiske baner" der partikkelen reflekteres ved $x=0$ og $x=L$:

