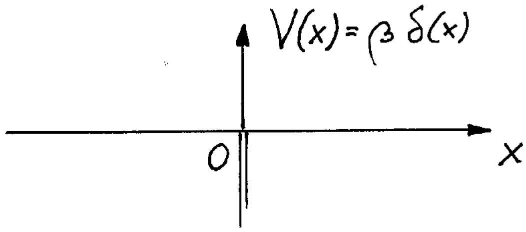
ØVING med deltafunksjoner (nr 3 i F4250)

Første del av oppgave 1 nedenfor er en påminnelse om at det er lurt å tenke over dette med dimensjonene til aktuelle størrelser. I denne oppgaven kan du ellers følge notatene (Tillegg 7). I oppgave 2 bruker vi et tilsvarende δ-funksjonspotensial til å gjennomføre en enkel spredningsberegning, og oppdager at resultatet for spredningsberegningen også kan brukes til å finne den bundne tilstanden for deltabrønnen. I oppgave 3 ser vi på to deltafunksjoner, formulerer spredningsproblemet for dette potensialet, og bruker resultatene til å finne de bundne tilstandene når en har to delta*brønner*.

Oppgave ?? – 1 **Elektron i δ-brønn**



Et elektron er bundet i en deltafunksjons-brønn

$$V(x) = \beta\delta(x), \qquad \text{med} \quad \beta = f\,\frac{\hbar^2}{m_e a_0},$$

der f (< 0) er et dimensjonsløst mål for "styrken" av brønnen.

a. ♠Bruk relasjonen $\int \delta(x)dx = 1$ til å vise at δ-funksjonen $\delta(x)$ har dimensjonen til en invers lengde,

$$[\delta(x)] = \frac{1}{[x]} = \mathrm{m}^{-1},$$

hvor $[x]$ står for dimensjonen til x. ♠Bruk så definisjonen av 1 Rydberg,

$$1\ \mathrm{Ry} = \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} = 13.605\,6923(12)\ \mathrm{eV},$$

til å vise at $V(x)$ (og dermed β) har den korrekte dimensjonen.

b. ♠Som diskutert i forelesningene, har elektronet bare én bunden tilstand i dette potensialet (som bl.a kan ses på som en overforenklet endimensjonal modell av et atom). Bruk diskontinuitetsbetingelsen

$$\psi'/\psi|_{0^+} - \psi'/\psi|_{0^-} = \frac{2m_e\beta}{\hbar^2}$$

(se Tillegg 3 og Tillegg 7) til å vise at elektronets bindingsenergi i dette potensialet er

$$E_B(= -E) = f^2\,\frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} = f^2\ \mathrm{Ry}.$$

♠Hvor stor er sannsynligheten for å finne elektronet i de klassisk forbudte områdene (i grunntilstanden)?

Oppgave ?? – 2 *Spredning* på δ-funksjonspotensialet

Vi setter igjen

$$V(x) = \beta\delta(x) \equiv f\frac{\hbar^2}{m_e a_0}\delta(x),$$

der f nå kan være enten positiv eller negativ. Dette potensialet er en forenklet modell av et potensial som er null over alt, unntatt i et tynt sjikt ved yz-planet, som altså utgjør en barriere eller en brønn. Anta at et elektron sendes vinkelrett inn mot dette sjiktet, i positiv x-retning, med energien $E = (\hbar k)^2/2m_e$. Som vi har sett i forelesningene, kan vi behandle dette spredningsproblemet vha en energiegenfunksjon, med formen $e^{ikx} + re^{-ikx}$ for $x < 0$ og te^{ikx} for $x > 0$. Her gjør vi nå en liten vri, ved å dividere med den komplekse faktoren t både på høyre og venstre side. Energiegenfunksjonen vår får da formen

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_I(x) = \psi_i(x) + \psi_r(x) & \text{for} \quad x < 0, \\ \psi_{II}(x) = \psi_t(x) & \text{for} \quad x > 0. \end{cases}$$

Her representerer

$$\psi_i(x) = \frac{1}{t}\,e^{ikx}, \qquad \psi_r(x) = b\,e^{-ikx} \quad \text{og} \quad \psi_t(x) = e^{ikx}$$

hhvis innkommende, reflektert og transmittert bølge. (Vi har satt $r/t = b$.)

a. Den generelle løsningen av den tidsuavhengige Schrödingerligningen for $x > 0$ inneholder også et ledd $D\exp(-ikx)$. ♠Hvorfor har vi droppet dette leddet i uttrykket for ψ_{II} for $x > 0$?

b. ♠Vis at forholdet mellom transmittert og innkommende strømtetthet også etter denne vrien er

$$T = |t|^2.$$

Strømtetthetene finner du vha formelen $j_x = \Re\mathrm{e}\left[\psi^* \frac{\hbar}{im}\frac{d}{dx}\psi\right]$.

c. ♠Bruk kontinuitetsbetingelsen for $\psi(x)$ og "diskontinuitetsbetingelsen" for $d\psi(x)/dx$,

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

til å vise at

$$t = \left[1 + \frac{if}{ka_0}\right]^{-1}.$$

[Hint: Eliminer koeffisienten b.]

La E_B være bindingsenergien funnet i forrige oppgave, for tilfellet $f < 0$. ♠Finn transmisjonskoeffisienten T uttrykt ved forholdet E/E_B. ♠Drøft resultatet for tilfellene (i) $E << E_B$, (ii) $E = E_B$ og (iii) $E >> E_B$, og skissér T som funksjon av E/E_B. ♠Er det rimelig å si at bindingsenergien representerer en *naturlig energiskala* når vi skal diskutere hvordan T avhenger av E (både for $f < 0$ og $f > 0$)?

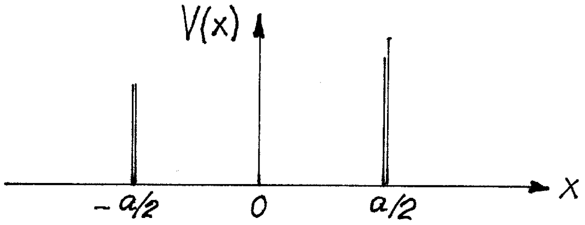
d. Et interessant poeng ved beregningen av $1/t$ er at den teknisk sett er gyldig ikke bare for positive reelle k $(= \sqrt{2m_eE/\hbar^2})$, men også når k er kompleks. Men for slike k-verdier blir den resulterende bølgefunksjonen

$$\psi = \begin{cases} \frac{1}{t}e^{ikx} + be^{-ikx} & \text{for} \quad x < 0, \\ e^{ikx} & \text{for} \quad x > 0 \end{cases}$$

ikke nødvendigvis en egenfunksjon. Men her har vi et unntak: ♠Sjekk ut at hvis $\Im\mathrm{m}(k) > 0$, så vil ψ gå mot null for $x \to \infty$, mens vi i grensen $x \to -\infty$ har at e^{-ikx} går mot null og e^{ikx} går mot uendelig. Det eneste som kan redde situasjonen og gi oss en akseptabel egenfunksjon er da at "transmisjonsamplituden" t går mot uendelig: ♠Finn den (imaginære) k-verdien som gjør t uendelig stor (dvs gir t en *pol*, som en sier i kompleksteori), finn den resulterende egenfunksjonen ψ, og overbevis deg om at denne og den tilhørende energien er de samme som ble funnet i forgående oppgave.

Moral: Poler i "transmisjonsamplituden" t svarer til bundne tilstander.

Oppgave ?? – 3 *To* δ-funksjoner



I denne oppgaven utvider vi til *to* deltafunksjoner, plassert i $x = \pm a/2$:

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{m_e a_0}\left[f_1\delta(x + a/2) + f_2\delta(x - a/2)\right].$$

Vi merker oss at dette potensialet blir symmetrisk dersom vi velger $f_1 = f_2$. For elektroner som kommer inn fra venstre kan vi skrive spredningsfunksjonen på formen

$$\psi = \begin{cases} \frac{1}{t}e^{ikx} + Be^{-ikx} & \text{for} \quad x < -a/2, \\ Ce^{ikx} + De^{-ikx} & \text{for} \quad -a/2 < x < a/2, \\ e^{ikx} & \text{for} \quad x > a/2. \end{cases}$$

Ved å bruke skjøte-betingelsene for $x = a/2$ kan en da vise at

$$C = 1 + \frac{if_2}{ka_0} \qquad \text{og} \qquad D = -\frac{if_2}{ka_0}\,e^{ika}.$$

Ved å sette disse relasjonene inn i skjøtebetingelsene for $x = -a/2$ finner en etter litt regning at

$$\frac{1}{t} = \left(1 + \frac{if_1}{ka_0}\right)\left(1 + \frac{if_2}{ka_0}\right) - \frac{f_1f_2}{(ika_0)^2}\,e^{2ika}.$$

Med denne formelen kan en studere transmisjonskoeffisienten $T = |t|^2$ som funksjon av de forskjellige parametrene. I denne oppgaven skal vi imidlertid fokusere på *bundne* tilstander:

Som vi så i forrige oppgave, er det slik at dersom $1/t$ har et nullpunkt på den positive imaginære aksen i det komplekse k-planet, dvs for $k = i\kappa$ med $\kappa > 0$, så svarer dette til en bunden tilstand med energi

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m_e}.$$

Med $k = i\kappa$ skal vi følgelig lete etter nullpunkter i uttrykket

$$\frac{1}{t} = \left(1 + \frac{f_1}{\kappa a_0}\right)\left(1 + \frac{f_2}{\kappa a_0}\right) - \frac{f_1 f_2}{(\kappa a_0)^2}\, e^{-2\kappa a}.$$

a. ♠Se først på grensen $a \to 0$, og vis vha formelen ovenfor at vi i denne grensen får én bunden tilstand, forutsatt at $f_1 + f_2 < 0$, i overensstemmelse med pkt. **d** i forrige oppgave.

b. Anta at $f_1 = -g_1$ og $f_2 = -g_2$, der g_1 og g_2 begge er positive, slik at vi har to brønner i avstand a. Anta dessuten at a er så stor at vi kan neglisjere leddet med faktoren $e^{-2\kappa a}$. ♠Vis at vi i denne tilnærmelsen får *to* bundne tilstander, med samme κ-verdier som vi har når henholdsvis brønn 1 og brønn 2 er alene. ♠Hva blir kravet til a for at dette skal være en god tilnærmelse?

c. Anta nå at $f_1 = f_2 = -g$, slik at vi har en symmetrisk dobbeltbrønn. ♠Vis ved innsetting at vi da har

$$C = 1 - \frac{g}{\kappa a_0}; \qquad D = \frac{g}{\kappa a_0}\, e^{-\kappa a}; \qquad \frac{1}{t} = \left(1 - \frac{g}{\kappa a_0}\right)^2 - \left(\frac{g}{\kappa a_0}\, e^{-\kappa a}\right)^2 = C^2 - D^2.$$

Fra formelen til høyre følger det at $1/t$ er lik null for

$$(i) \quad C = +D \qquad \text{og} \qquad (ii) \quad C = -D.$$

♠Vis at disse to betingelsene kan skrives på formen

$$(i) \quad \kappa_+ = \frac{g}{a_0}(1 + e^{-\kappa_+ a}) \qquad \text{og} \qquad (ii) \quad \kappa_- = \frac{g}{a_0}(1 - e^{-\kappa_- a}).$$

Forutsatt at løsningene κ_+ og κ_- begge er positive, har vi nå to bundne tilstander, som må ha veldefinert paritet fordi potensialet er symmetrisk. ♠Hva blir paritetene til de to egenfunksjonene ψ_+ og ψ_-? [Hint: Se på oppførselen i området mellom de to brønnene.]

d. ♠Skissér venstre side [$V_+ = \kappa$] og høyre side [$H_+ = (1 + e^{-\kappa a})g/a_0$] i betingelsen for "pluss-tilfellet" som funksjoner av κ, og påvis at betingelsen er oppfylt <u>for alle a</u>, for en κ_+ som nærmer seg g/a_0 når a blir veldig stor og $2g/a_0$ når a går mot null. [Hint: Prøv å skissere høyresiden både for en veldig stor og en veldig liten og en mellomstor a.] ♠Lag en prinsippskisse av ψ_+.

e. ♠Skissér venstresiden [$V_- = \kappa$] og høyresiden [$H_- = (1 - e^{-\kappa a})g/a_0$] for "minus-tilfellet" som funksjoner av κ. [Hint: Prøv igjen å skissere høyresiden både for en veldig stor, en veldig liten og en mellomstor a.] ♠Forklar hvorfor løsningen κ_- av denne ligningen er positiv bare dersom $a > a_0/g$. [Hint: Se på de deriverte i origo.] ♠Lag en prinsippskisse av ψ_-.

f. ♠Skissér løsningen ψ_- i grensetilfellet $\kappa_- = 0$, og utled betingelsen ovenfor ($a > a_0/g$) vha skissen og diskontinuitetsbetingelsen i $x = a/2$.