# LØSNING ØVING ?? (nr 3 i F4250)

## Løsning oppgave ?? – 1 Elektron i $\delta$-brønn

**a.** ♠Siden integralet $\int \delta(x)dx = 1$ er dimensjonsløst, følger det at også integranden må være det, dvs

$$[\delta(x)] \cdot [dx] = 1, \qquad \text{slik at} \quad [\delta(x)] = \frac{1}{[dx]} = \frac{1}{[x]} = \mathrm{m}^{-1}.$$

(Mer generelt er $[\delta(a)] = 1/[a]$.)

♠Med dimensjonen til $\beta$ gitt ved

$$[\beta] = [f\frac{\hbar^2}{m_e a_0}] = [\,a_0\frac{\hbar^2}{m_e a_0^2}] = \mathrm{eVm}$$

ser vi videre at potensialet har den korrekte dimensjonen:

$$[V(x)] = [\beta] \cdot [\delta(x)] = \mathrm{eVm} \cdot \mathrm{m}^{-1} = \mathrm{eV}, \quad \text{q.e.d.}$$

Dette viser at uttrykket vårt for $\beta$ har korrekt dimensjon.

**b.** ♠For $x \neq 0$ er den tidsuavhengige Schrödingerligningen for det aktuelle potensialet

$$\psi'' = \frac{2m_e}{\hbar^2}[V(x) - E]\psi = -\frac{2m_e E}{\hbar^2}\,\psi \equiv \kappa^2\psi \qquad (E < 0),$$

med

$$\kappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m_e(-E)} = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m_e E_B}, \qquad \text{og} \qquad E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m_e}.$$

For $x > 0$ er den akseptable løsningen $C\exp(-\kappa x)$. For $x < 0$ har vi tilsvarende $\psi = C'\exp(\kappa x)$, der vi må ha $C' = C$ for å få en kontinuerlig $\psi$. Vi kan nå sette

$$\psi'/\psi|_{0^+} = -\kappa \qquad \text{og} \qquad \psi'/\psi|_{0^-} = \kappa$$

inn i diskontinuitetsbetingelsen, som gir

$$-\kappa - \kappa = \frac{2m_e\beta}{\hbar^2} = \frac{2f}{a_0}, \qquad \text{dvs} \quad \kappa = -f/a_0.$$

Dette gir en bindingsenergi (for den eneste bundne tilstanden i $\delta$-brønnen) på

$$E_B = -E = \frac{\hbar^2\kappa^2}{2m_e} = f^2\,\frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} = f^2\,\cdot 13.6\ \mathrm{eV}.$$

♠I denne tilstanden er alle $x \neq 0$ klassisk forbudte posisjoner. Sannsynligheten for å finne elektronet i et klassisk forbudt område er derfor lik 1.

## Løsning oppgave ?? – 2 *Spredning* på $\delta$-funksjonspotensialet

**a.** ♠Fra diskusjonen av bølgepakker i forelesningene skjønner vi at leddet $\psi_t = \exp(ikx)$ (for $x > 0$) svarer til en transmittert bølge (og en transmittert strømtetthet $j_t = |C|^2\hbar k/m$). Et ledd $D\exp(-ikx)$ for $x > 0$ ville svare til partikler som kommer inn fra høyre, og det skal vi jo ikke ha i denne spredningsprosessen. Det er altså et *randkrav* at vi bare har en transmittert bølge for $x > 0$.

**b.** ♠Den transmitterte strømtettheten er

$$j_t = \Re e[\psi_t^* \frac{\hbar}{im_e} \frac{d\psi_t}{dx}] = \Re e[e^{-ikx} \frac{\hbar}{im_e} ik\, e^{ikx}] = \frac{\hbar k}{m_e}.$$

Den innkommende er tilsvarende

$$j_i = \Re e[\frac{1}{t^*} e^{-ikx} \frac{\hbar}{im_e} ik \, \frac{1}{t}\, e^{ikx}] = \frac{1}{|t|^2} \frac{\hbar k}{m_e}.$$

Dermed blir sannsynligheten for transmisjon (transmisjonskoeffisienten) som før lik absolutt-kvadratet av "transmisjonsamplituden" $t$:

$$T = \frac{j_t}{j_i} = |t|^2.$$

**c.** ♠Med $\psi$ lik $\frac{1}{t}e^{ikx} + be^{-ikx}$ for $x < 0$ og lik $e^{ikx}$ for $x > 0$ gir kontinuiteten i origo betingelsen

$$1/t \, + b = 1, \qquad \text{dvs} \quad b = 1 - 1/t.$$

Dette kan vi bruke til å eliminere $b$ fra diskontinuitetsbetingelsen for $\psi'$, som er

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = ik - ik(1/t - b) = \frac{2m\beta}{\hbar^2} \cdot 1 = \frac{2f}{a_0}.$$

Resultatet er

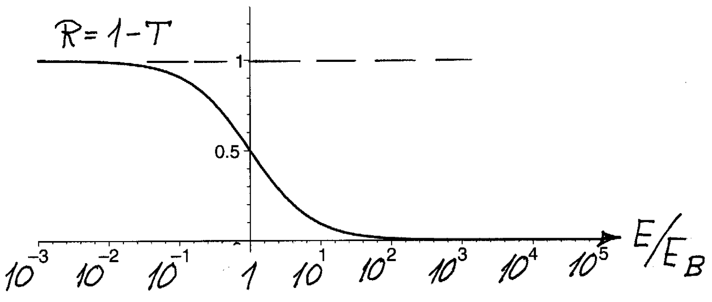
$$\boxed{\frac{1}{t} = 1 + \frac{if}{ka_0},} \quad \text{q.e.d.}$$

♠Sannsynligheten for transmisjon er altså

$$T = |t|^2 = \frac{1}{1 + f^2 \frac{\hbar^2}{2m_e E a_0^2}} = \frac{1}{1 + E_B/E},$$

der $E_B = f^2\hbar^2/(2m_e a_0^2)$ er bindingsenergien funnet i forrige oppgave (for negativ $f$).

♠(i) For $E << E_B$ ser vi at $T \approx E/E_B << 1$ (og $R = 1 - T \approx 1$). (ii) For $E = E_B$ ser vi at $T = 1/2$. (iii) For $E >> E_B$ ser vi at $T \approx 1$ (og $R = 1 - T << 1$).




Diagrammet viser at endringen fra $T << 1$ til $T \approx 1$ skjer grovt sett for $0.1\, E_B \lesssim E \lesssim 10\, E_B$. Derfor kan vi si at bindingsenergien $E_B$ "setter skalaen" når vi skal diskutere energiavhengigheten til transmisjonskoeffisienten $T$ og refleksjonskoeffisienten $R = 1 - T$.

**d.** ♠Forutsatt at $\Im\mathrm{m}(k) > 0$ vil

$$\lim_{x\to\infty} e^{ikx} = 0, \qquad \text{og} \qquad \lim_{x\to-\infty} e^{-ikx} = 0,$$

mens $|\exp(ikx)|$ går mot uendelig i grensen $x \to -\infty$. For å unngå det siste problemet må vi derfor i tillegg kreve at $t$ er uendelig. Det siste er oppfylt for

$$k = -if/a_0 \equiv i\kappa \qquad (\text{med } \kappa = -f/a_0).$$

For at begge disse kravene skal være oppfylt, må vi ha $f < 0$. Da sitter vi med en bølgefunksjon på formen

$$\psi = \begin{cases} e^{ikx} = e^{-\kappa x} & \text{for} \quad x > 0 \\ be^{-ikx} = e^{\kappa x} & \text{for} \quad x < 0. \end{cases}$$

Energien til denne tilstanden kommer ut som

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m_e} = -f^2\frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2}.$$

Dette er nøyaktig samme resultateter som vi fant i forrige oppgave.

Moralen er at når vi gjennomfører spredningsberegningen, så får vi med på kjøpet at "transmisjonsamplituden" $t$ (for $f < 0$, dvs med en $\delta$-brønn) har en pol på den positive imaginære "$k$-aksen", dvs for $k = i\kappa$. Med denne imaginære $k$-verdien får vi altså med på kjøpet den ene bundne tilstanden for dette systemet. Merk at for $f > 0$ ($\delta$-*barriere*) havner polen i $t$ på den *negative* imaginære $k$-aksen, og da har vi ingen bunden tilstand.

## Løsning oppgave ?? – 3 *To* $\delta$-funksjoner

**a.** ♠I grensen $a \to 0$ finner vi at

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

Denne er lik null for

$$\kappa = -\frac{f_1 + f_2}{a_0}.$$

Dersom $f_1 + f_2$ er negativ, slik at $\kappa$ blir positiv, har vi altså én bunden tilstand. Dette stemmer opplagt med oppgave 2.d. For $a \to 0$ flyter jo de to deltafunksjonene sammen til én, med samlet "styrke" $f_1 + f_2$.

**b.** ♠Dersom $a$ er så stor at $e^{-2\kappa a}$ kan settes lik null, blir betingelsen for å få bundne tilstander

$$\frac{1}{t} \approx \left(1 - \frac{g_1}{\kappa a_0}\right)\left(1 - \frac{g_2}{\kappa a_0}\right) = 0.$$

Denne har de to løsningene

$$\kappa_1 = \frac{g_1}{a_0} \qquad \text{og} \qquad \kappa_2 = \frac{g_2}{a_0},$$

som ganske riktig er $\kappa$-verdiene vi ville få med hhvis én brønn med "styrke" $g_1$ i $x = -a/2$ eller én med styrke $g_2$ i $x = a/2$.

♠Forutsetningene for at dette skal være en god tilnærmelse er at

$$\kappa_i a \gg 1, \qquad \text{dvs} \quad a \gg \frac{1}{\kappa_i} = \frac{a_0}{g_i}, \quad i = 1,2.$$

Under denne forutsetningen får vi med god tilnærmelsee "én-brønn-løsninger" $\psi_1$ og $\psi_2$ sentrert rundt hver sin deltabrønn (viser det seg). Merk at disse kravene til $a$ blir "mildere" dersom begge brønnene er sterke. Moralen er at når brønnene ligger langt fra hverandre, så kan vi for hver av dem neglisjere den andre.

**c.** ♠Med $f_1 = f_2 = -g$ og $k = i\kappa$ har vi fra formlene ovenfor at

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

♠Betingelsene $C = \pm D$ gir

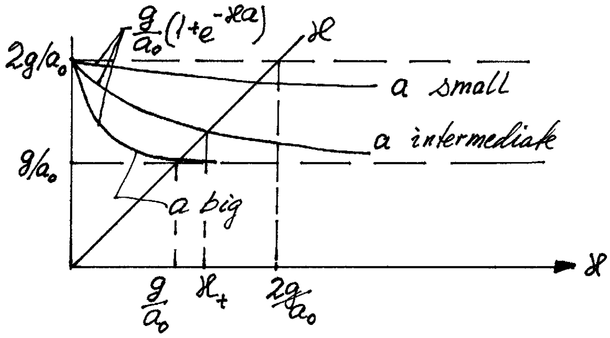
$$1 - \frac{g}{\kappa a_0} = \pm\frac{g}{\kappa a_0} e^{-\kappa a}, \quad \text{dvs} \quad (i) \quad \kappa_+ = \frac{g}{a_0}(1 + e^{-\kappa_+ a}) \qquad \text{og} \qquad (ii) \quad \kappa_- = \frac{g}{a_0}(1 - e^{-\kappa_- a}).$$

♠I området mellom brønnene har egenfunksjonene formen

$$\psi = Ce^{ikx} + De^{-ikx} = Ce^{-\kappa x} + De^{-\kappa x}.$$

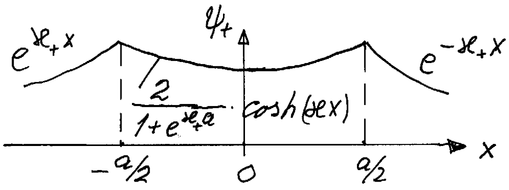
Egenfunksjonen $\psi_+$ har derfor (med $C = D$) positiv paritet, mens $\psi_-$ (om den eksisterer) har negativ paritet.

**d.** ♠Figuren viser venstresiden $[V_+ = \kappa]$ og høyresiden $[H_+ = (1 + e^{-\kappa a})g/a_0]$ i betingelsen for den symmetriske løsningen, som funksjoner av $\kappa$, for tre verdier av $a$: en liten, en mellomstor og en stor.

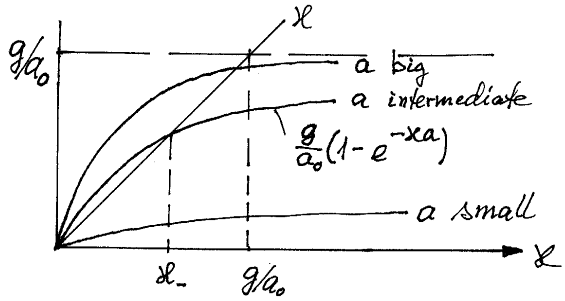



Fra denne skissen skjønner vi at løsningen $\kappa_+$ nærmer seg $g/a_0$ når $a \to \infty$. $[\kappa = g/a_0$ er resultatet for en enkeltbrønn med styrke $g$.] Vi ser også at $\kappa_+$ går mot $2g/a_0$ når $a \to 0$, som jo svarer til en enkeltbrønn med styrke $2g$. Vi får altså én symmetrisk bunden tilstand $\psi_+$ for alle $0 \le a < \infty$ og $g > 0$.

♠Skissen viser viser hvordan den symmetriske løsningen ser ut, i prinsippet:



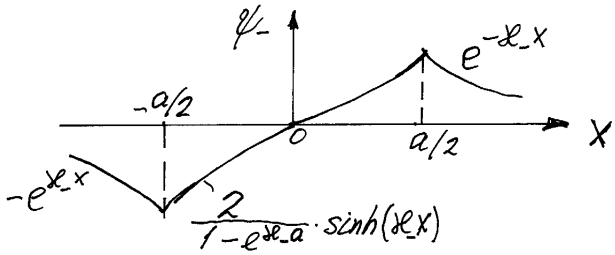
**e.** ♠Figuren viser venstresiden [$V_- = \kappa$] og høyresiden [$H_- = (1 - e^{-\kappa a})g/a_0$] i betingelsen for "minuus-tilfellet" (som eventuelt skal gi en antisymmetrisk løsning), som funksjoner av $\kappa$, for tre verdier av $a$: en liten, en mellomstor og en stor.



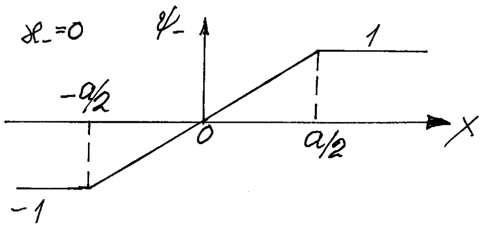

♠Fra denne skissen skjønner vi at når $a$ blir veldig stor, så finner vi en løsning $\kappa_-$ like oppunder enkeltbrønn-resultatet $g/a_0$ og dermed en bunden antisymmetrisk energiegenfunksjon $\psi_-$. Når vi lar $a$ minke, minker $\kappa_-$ og dermed bindingsenergien for denne løsningen. Det som må til for at vi skal få en løsning $\kappa_- > 0$ er åpenbart at den deriverte av høyresiden er større enn den deriverte av venstresiden i origo, altså at

$$ag/a_0 > 1, \qquad \text{dvs} \quad a > \frac{a_0}{g}, \quad \text{q.e.d.}$$

♠Prinsippskissen av den antisymmetriske løsningen er som følger:




**f.** ♠I grensetilfellet er $\kappa_- = 0$ og $E_- = 0$, slik at $\psi_-$ blir lineær og konstant for $|x| > a/2$ og lineær for $|x| < a/2$, med ett nullpunkt.




Denne tilstanden er ikke bunden. Fra figuren ser vi at

$$\frac{\psi_-'}{\psi_-}|_{a/2-} = \frac{2}{a}.$$

Diskontinuitetsbetingelsen i $x = a/2$ gir da

$$0 - 2/a = -2g/a_0, \quad \text{dvs} \quad a = \frac{a_0}{g}.$$

For at vi skal få en *bunden* tilstand $\psi_-$ må $a$ være *større* enn $a_0/g$.