

LØSNING ØVING 5

Løsning oppgave 5 – 1 Krumning og stykkevis konstante potensialer

a. I et område hvor V er konstant (lik V_1), og $E - V_1$ er positiv (slik at området er klassisk tillatt), har vi

$$\psi'' = \frac{2m}{\hbar^2}(V_1 - E)\psi \equiv -k^2\psi, \quad k \equiv \sqrt{2m(E - V_1)/\hbar^2}.$$

Denne har to uavhengige løsninger, $\cos kx$ og $\sin kx$ [alternativt $\exp(\pm ikx)$], og den generelle løsningen kan skrives på formen

$$\begin{aligned} \psi(x) &= A \cos kx + B \sin kx \\ &= \sqrt{A^2 + B^2} \left(\frac{A}{\sqrt{A^2 + B^2}} \cos kx + \frac{B}{\sqrt{A^2 + B^2}} \sin kx \right) \\ &\equiv A' (\cos \alpha \cos kx + \sin \alpha \sin kx), \quad \left(A' \equiv \sqrt{A^2 + B^2}, \quad \cos \alpha \equiv \frac{A}{\sqrt{A^2 + B^2}}, \quad \text{osv.} \right), \\ &= A' \cos(kx - \alpha), \end{aligned}$$

dersom vi velger å arbeide med reelle koeffisienter. Som vi har sett for den endimensjonale boksen, krummer den sinusformede løsningen “raskere” jo større bølgetallet k er, dvs jo større $K = E - V_1$ er. For den sinusformede løsningen kan vi altså bruke bølgetallet som et mål for hvor “raskt” løsningen krummer.

Kommentar: Ut fra dette kan vi også danne oss et begrep om hvor raskt ψ krummer i klassisk tillatte områder hvor $V(x)$ *ikke* er konstant, ved å skrive

$$\psi'' = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]\psi \equiv -[“k(x)”]^2\psi,$$

der

$$“k(x)” \equiv \sqrt{2m[E - V(x)]/\hbar^2}, \quad (E > V(x))$$

ikke er et bølgetall i egentlig forstand, men likevel gir et begrep om hvor tett nullpunktene ligger. Se f.eks ψ_5 side 57 i boka. Se også figuren side 58 [som viser kvadratet $(\psi_{20})^2$ av den 20. eksiterte tilstanden for den harmoniske oscilatoren.

b. For et klassisk forbudt område hvor $V(x)$ er konstant og større enn E , kan vi skrive den tidsuavhengige Schrödingerligningen på formen

$$\psi'' = \frac{2m}{\hbar^2}(V - E)\psi \equiv \kappa^2\psi, \quad \kappa \equiv \sqrt{2m(V - E)/\hbar^2}.$$

Denne har to uavhengige løsninger, $e^{\kappa x}$ og $e^{-\kappa x}$, slik at den generelle løsningen blir av eksponensiell type,

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

Denne krummer utover fra aksen, raskere jo større κ er, dvs jo større $V - E$ er, eller om vi vil: jo mer “klassisk forbudt” dette området er.

Siden potensialet er uendelig for $x \geq x_2$, skal bølgefunksjonen være lik null i dette området. For å gi en kontinuerlig egenfunksjon må da løsningen for området $x_1 < x < x_2$ oppfylle kravet

$$\psi(x_2) = C''e^{-\kappa(x-x_2)} + D''e^{\kappa(x-x_2)} \Big|_{x=x_2} = C'' + D'' = 0.$$

I dette området har vi da

$$\psi(x) = D''(e^{\kappa(x-x_2)} - e^{-\kappa(x-x_2)}) = 2D'' \sinh[\kappa(x-x_2)], \quad \text{q.e.d.}$$

Enda enklere er det å merke seg at løsningen må være en lineærkombinasjon av de to uavhengige løsningene $\sinh[\kappa(x-x_2)]$ og $\cosh[\kappa(x-x_2)]$, hvorav den siste må forkastes pga kontinuitetskravet.

c. (i) Dersom energieigenverdien E ligger lavere enn potensialverdien V_3 i området $-\infty < x < x_3$, må egenfunksjonen i dette området oppfylle

$$\psi'' = \frac{2m}{\hbar^2}[V_3 - E]\psi \equiv \kappa_3^2\psi, \quad \text{med } \kappa_3 \equiv \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V_3 - E)}.$$

Den generelle løsningen i dette området er da

$$\psi = Ce^{\kappa_3 x} + C'e^{-\kappa_3 x}.$$

Her må C' settes lik null, fordi en egenfunksjon ikke får lov å gå mot uendelig (divergere), hvilket $\exp(-\kappa_3 x)$ gjør i grensen $x \rightarrow -\infty$. Egenfunksjonen har altså i dette tilfellet formen

$$\psi = Ce^{\kappa_3 x} \quad \text{for } x < x_3.$$

Denne går eksponensielt mot null ute til venstre, er følgelig kvadratisk integrerbar, og beskriver dermed en lokalisert og **bunden** tilstand.

(ii) Er energieigenverdien *større* enn V_3 i det samme området, blir løsningen for $x < x_3$ med et tilsvarende resonnement

$$\psi = A \sin k_3 x + B \cos k_3 x, \quad \text{med } k_3 \equiv \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E - V_3)}.$$

Normeringsintegralet

$$\int_{-\infty}^{x_2} [\psi(x)]^2 dx$$

vil da divergere, og egenfunksjonen er ikke-lokalisert og beskriver følgelig en **ubunden** tilstand.

(iii) Dersom det klaffer slik at energieigenverdien er akkurat lik V_3 , har vi at $\psi'' = 0$ for $x < x_3$. Den generelle løsningen av denne er

$$\psi = Ax + B.$$

Her må vi sette $A = 0$ for å hindre at ψ divergerer i grensen $x \rightarrow -\infty$. Følgelig er $\psi = B$ hele veien for $x < x_3$. Her kan vi som nevnt anta at $B \neq 0$. Denne energieigenfunksjonen er følgelig ikke kvadratisk integrerbar, og beskriver altså en ubunden tilstand.

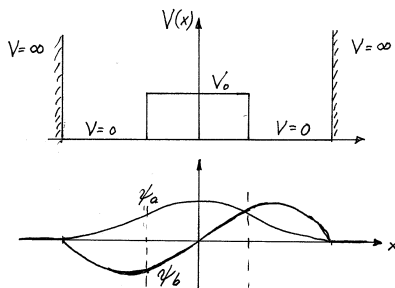
d. Da $E_1 < V_0$, har den tidsuavhengige Schrödingerligningen i barriereområdet formen

$$\psi_1'' = \frac{2m}{\hbar^2}[V_0 - E_1]\psi_1 \equiv \kappa_1^2\psi_1, \quad \text{med} \quad \kappa_1 \equiv \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - 0.67V_0)}.$$

Denne har de to uavhengige løsningene $\exp(\pm\kappa_1 x)$ (alternativt $\cosh(\kappa_1 x)$ og $\sinh(\kappa_1 x)$). En symmetrisk kombinasjon av $\exp(\kappa_1 x)$ og $\exp(-\kappa_1 x)$ har formen

$$\psi_1 = \frac{1}{2}C_1(e^{\kappa_1 x} + e^{-\kappa_1 x}) = C_1 \cosh(\kappa_1 x).$$

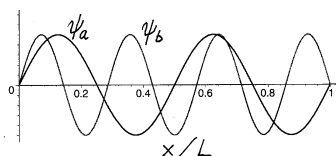
e.



ψ_b forestiller en energieigenfunksjon. I barriere-området ser vi at den krummer mot aksen. Energien E må da være høyere enn barriere-høyden V_0 . Vi ser også at krumningen er svak i dette området (forholdsvis lite bølgetall). Derfor må $E - V_0$ være forholdsvis liten, dvs E er bare litt høyere enn V_0 . I de to brønnene på begge sider av barrieren er bølgetallet større, og krumningen tilsvarende raskere. Vi merker oss ellers at løsningen er antisymmetrisk, med ett nullpunkt. Følgelig har vi å gjøre med første eksiterte tilstand. (Grunntilstanden er symmetrisk, uten nullpunkter.)

Den andre funksjonen, ψ_a , krummer som vi ser utover fra aksen nær de harde veggene, som er klassisk tillatte områder (hvor krumningen skal være *mot* aksen). Så dette er ingen energieigenfunksjon.

f.



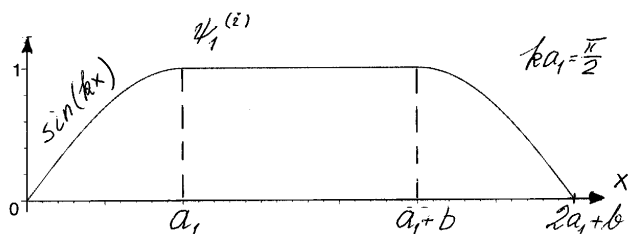
Fra de oppgitte kurvene ser vi at $\lambda_a = L/2$, mens $\lambda_b = 2L/7$. Bølgetallene er altså

$$k_a = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{4\pi}{L} \quad \text{og} \quad k_b = \frac{7\pi}{L}.$$

Fra sammenhengen $E - V_0 = \hbar^2 k^2 / 2m$ har vi da at

$$E_a - V_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \cdot 16 \quad \text{og} \quad E_b - V_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \cdot 49.$$

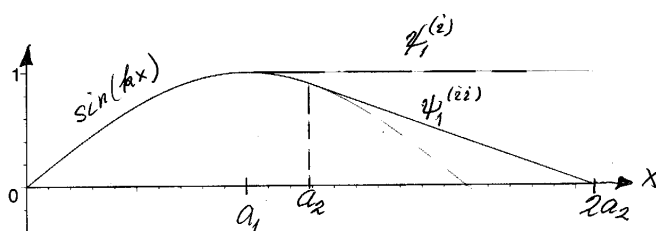
g. (i) I barriereområdet, hvor $E_1 = V(x) = V_0$, skal $\psi_1^{(i)}$ være både lineær og symmetrisk, dvs lik en konstant C (som vi godt kan sette lik 1, dersom vi ikke bryr oss om normeringen). For $0 < x < a_1$ skal bølgefunksjonen være sinusformet, med et nullpunkt for $x = 0$ og med en kontinuerlig derivert for $x = a_1$. I dette området skal vi altså ha en kvart periode av sinusen, slik at vi må ha $ka_1 = \pi/2$, der k er bølgetallet.



Vi har altså

$$\frac{1}{2}\pi = ka_1 = a_1 \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE_1} = a_1 \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mV_0} \quad \Rightarrow \quad a_1 = \frac{\hbar\pi}{\sqrt{8mV_0}}.$$

(ii) Her skal $\psi_1^{(ii)}$ være lineær for $a_2 < x < 2a_2$, og denne rette linjen skal “tangere” sinuskurven for $x = a_2$.



Da er det vel åpenbart at sinusdelen av kurven utgjør noe mer enn en kvart periode, slik at $a_2 > a_1$.

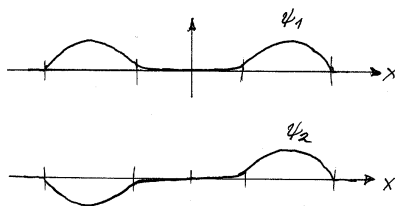
[Vi kan bestemme a_2 ved å sette $\psi_1 = \sin kx$ for $0 < x < a_2$. I dette området er da $\psi_1'/\psi_1 = k \cot kx$. For $a_2 < x < 2a_2$ kan vi sette $\psi_1 = A(x - 2a_2)$, og har da i dette området at $\psi_1'/\psi_1 = 1/(x - 2a_2)$. Kravet om kontinuitet av ψ_1'/ψ_1 gir da betingelsen

$$k \cot ka_2 = -1/a_2, \quad \text{dvs} \quad ka_2 \cot ka_2 = -1 \quad (\pi/2 < ka_2 < \pi).$$

Ved å prøve deg fram med kalkulatoren vil du finne at løsningen av denne transcendent ligningen er $ka_2 \approx 2.03$, slik at $a_2/a_1 \approx 2.03/(\frac{1}{2}\pi) \approx 1.29$.]

Løsning oppgave 5 – 2 Endimensjonal dobbelt-brønn

a.

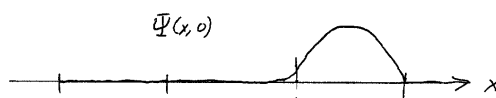


Vi merker oss at både ψ_1 og ψ_2 krummer bort fra akse i barriere-området; både E_1 og E_2 er da mindre enn barriere-høyden V_0 . I de tillatte områdene ser vi at både ψ_1 og ψ_2 er sinusformede, med tilnærmet like bølgetall. Dette betyr at $E_2 \approx E_1$. Fordi både ψ_1 og ψ_2 har små verdier i barriere-området, bidrar dette området lite til begge normeringsintegralene. I og med at de to funksjonene er henholdsvis symmetrisk og antisymmetrisk, må de da ha tilnærmet like stor sannsynlighetstetthet i de tillatte områdene. Herav skjønner vi at $\psi_2(x) \approx \psi_1(x)$ i høyre brønn, og $\psi_2(x) \approx -\psi_1(x)$ i venstre brønn.

I barriereområdet i midten må ψ_1 være en symmetrisk lineærkombinasjon av $e^{\kappa_1 x}$ og $e^{-\kappa_1 x}$, der $\kappa_1 = \sqrt{2m(V_0 - E_1)/\hbar^2}$, dvs den må gå som $A \cosh[\kappa_1 x]$. Første eksiterte tilstand ψ_2 skal tilsvarende være en antisymmetrisk lineærkombinasjon av $e^{\kappa_2 x}$ og $e^{-\kappa_2 x}$, der $\kappa_2 = \sqrt{2m(V_0 - E_2)/\hbar^2}$, dvs den må gå som $B \sinh[\kappa_2 x]$.

b. For $t = 0$ har vi da

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(x) + \psi_2(x)] \approx \begin{cases} \sqrt{2}\psi_1(x) & \text{i høyre brønn} \\ 0 & \text{i venstre brønn.} \end{cases}$$



Dette betyr selvsagt at sannsynligheten for å finne partikkelen i høyre brønn ved $t = 0$ er tilnærmet lik 1.

For $t = T/2 = \pi\hbar/(E_2 - E_1)$ er

$$e^{-i(E_2 - E_1)t/\hbar} = e^{-i\pi} = -1,$$

slik at

$$\Psi(x, T/2) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-iE_1 t/\hbar} [\psi_1(x) - \psi_2(x)],$$

der

$$\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(x) - \psi_2(x)] \approx \begin{cases} 0 & \text{i høyre brønn} \\ \sqrt{2}\psi_1(x) & \text{i venstre brønn.} \end{cases}$$

Her er partikkelen like sikkert havnet i venstre brønn. Sannsynligheten oscillerer altså fram og tilbake mellom de to brønnene, med perioden $T = 2\pi\hbar/(E_2 - E_1)$, analogt med den oscillerende sannsynligheten vi så i oppgave 13.

Det nye her er at partikkelen tydeligvis er i stand til å forsere den klassisk forbudte barrieren. Dette er et eksempel på den såkalte tunnel-effekten. Dette er en ren kvantemekanisk effekt, for klassisk ville en partikkel være dømt til å oppholde seg i én av de klassisk tillatte brønnene.

Det kan vises at energidifferansen $E_2 - E_1$ blir mindre jo høyere vi gjør barrieren. Tiden $T/2 = \pi\hbar/(E_2 - E_1)$ som partikkelen “bruker på å komme gjennom barrieren” vil altså øke jo høyere V_0 er.

c. Begynnelsestilstanden i denne problemstillingen kan vi tenke oss er preparert ved at partikkelen er plassert i høyre brønn ved $t = 0$. Ser vi nøyer på tidsforløpet mellom f.eks $t = 0$ og $t = T/2$, finner vi at bølgefunksjonen (og dermed sannsynligheten) “lekker” langsomt over fra den ene brønnen til den andre. Ved $t = T/4$ er f.eks sannsynligheten likt fordelt mellom de to brønnene, som forklart i oppgaveteksten. Dette betyr selvsagt ikke at partikkelen “deler seg”. Går vi inn og undersøker hvor partikelen er ved et gitt tidspunkt t , vil vi finne at den er enten til høyre eller til venstre. (I prinsippet er det til og med en liten sannsynlighet for å finne den i det forbudte området.) Det kan kanskje være lurt å tenke på at bølgefunksjonen beskriver oppførselen til et *ensemble* av slike systemer. Ved $t = T/2$ har alle partiklene flyttet seg til venstre brønn. Ved $t = T/4$ er omtrent halvparten til høyre og halvparten til venstre. Følger vi ett enkelt medlem av ensemblet, kan ikke kvantemekanikken forutsi når partikkelen passerer barrieren. Et halvklassisk bilde av denne prosessen er at hver partikkel fyker fram og tilbake mellom den harde veggen og barrieren, med en impuls $p = \pm \hbar k$. For hver gang den treffer barrieren er det en viss (liten) sannsynlighet for at den passerer. Denne transmisjons-sannsynligheten er mindre jo høyere barrieren er.