

TILLEGG 3

3. Noen endimensjonale potensialer

Dette tillegget er et supplement til avsnittene 3.1, 3.3 og 3.5 i Hemmers bok. Stoff merket med *** er ikke pensum i begynnerkursene (FY1006 og TFY4215).

3.1 Generelle egenskaper til energiegenfunksjoner

(Hemmer 3.1, B&J 3.6)

For en partikkel som beveger seg i et endimensjonalt potensial $V(x)$ er energiegenfunksjonene de akseptable løsningene av den tidsuavhengige Schrödingerligningen $\widehat{H}\psi = E\psi$:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\psi = E\psi, \quad \text{eller} \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]\psi. \quad (\text{T3.1})$$

3.1.a Energiegenfunksjoner kan velges reelle

Lokalt har denne 2.-ordens differensialligningen to uavhengige løsninger. Siden $V(x)$ og E begge er reelle, kan vi merke oss at dersom en løsning $\psi(x)$ (med energi E) av denne ligningen er kompleks, så vil både real- og imaginærdelen av denne løsningen,

$$\Re[\psi(x)] = \frac{1}{2}[\psi(x) + \psi^*(x)] \quad \text{og} \quad \Im[\psi(x)] = \frac{1}{2i}[\psi(x) - \psi^*(x)],$$

hver for seg oppfylle (T3.1), for energien E . Dette betyr at vi kan *velge* å arbeide med to uavhengige *reelle* løsninger, dersom vi ønsker det (istedenfor de komplekse løsningene $\psi(x)$ og $\psi^*(x)$). Et eksempel: For en fri partikkel ($V(x) = 0$) er

$$\psi(x) = e^{ikx}, \quad \text{med} \quad k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}$$

en løsning med energi E . Men da er også $\psi^*(x) = \exp(-ikx)$ en løsning med den samme energien. Derfor kan vi om ønskelig velge å arbeide med real- og imaginærdelene av $\psi(x)$, som er henholdsvis $\cos kx$ og $\sin kx$, jf partikkel i boks.

Å arbeide med reelle løsninger er en fordel bl.a når vi skal diskutere krumningsegenskaper (pkt. **3.1.c**).

3.1.b Kontinuitetsegenskaper [Hemmer 3.1, B&J 3.6]

(i) For et endelig potensial, $|V(x)| < \infty$, ser vi av (T3.1) at den 2.-deriverte av bølgefunksjonen er endelig overalt. Dette betyr at $d\psi/dx$ og derfor også ψ må være *kontinuerlige* for alle x :

$\frac{d\psi}{dx} \quad \text{og} \quad \psi(x) \quad \text{er kontinuerlige} \quad (\text{når} \quad |V(x)| < \infty).$

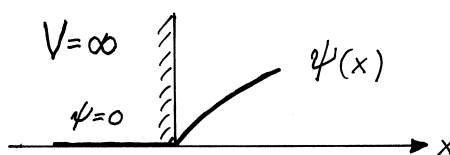
(T3.2)

Dette holder forutsatt at potensialet er endelig, og derfor også om det er diskontinuerlig, som i eksemplene



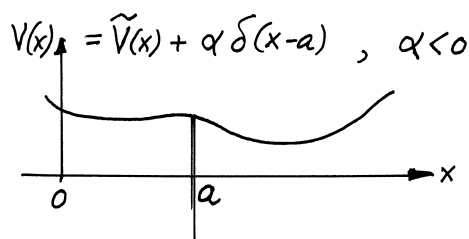
som viser modellpotensialer for en brønn, et potensialsprang og en barriere.

(ii) For et modellpotensial hvor $V(x)$ er uendelig i et område med en viss utstrekning (f.eks bak en “hard vegg”) følger det fra (T3.1) at ψ må være lik null. Her er altså klassisk mekanikk og kvantemekanikk enige: Partikkelen kan ikke trenge inn i den “harde veggen”. For et slikt potensial er bare selve bølgefunksjonen ψ kontinuerlig, mens den deriverte ψ' får et sprang. Et slikt eksempel har vi bl.a for partikkel i boks.



3.1.c Potensialer med δ -funksjonsbidrag

Vi bruker også modellpotensialer med deltafunksjonsbidrag (δ -brønner og/eller -barrierer).



Figuren viser et potensial

$$V(x) = \tilde{V}(x) + \alpha \delta(x - a) \quad (\alpha < 0),$$

der $\tilde{V}(x)$ er endelig, med en delta-brønn i tillegg, for $x = a$. Vi kan nå skrive (T3.1) på formen

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} [\tilde{V}(x) - E] \psi(x) + \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \delta(x - a) \psi(x).$$

Denne kan vi integrere over et lite intervall som inneholder delta-brønnen:

$$\int_{a-\Delta}^{a+\Delta} \frac{d^2\psi}{dx^2} dx = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{a-\Delta}^{a+\Delta} [\tilde{V}(x) - E] \psi(x) dx + \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \int_{a-\Delta}^{a+\Delta} \delta(x - a) \psi(x) dx,$$

eller

$$\psi'(a + \Delta) - \psi'(a - \Delta) = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{a-\Delta}^{a+\Delta} [\tilde{V}(x) - E] \psi(x) dx + \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi(a).$$

I grensen $\Delta \rightarrow 0$ går integralet på høyresiden mot null, slik at resultatet er

$$\psi'(a^+) - \psi'(a^-) = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi(a) \quad (\text{T3.3})$$

$$\text{når } V(x) = \tilde{V}(x) + \alpha\delta(x - a).$$

(T3.3) viser at den deriverte får et sprang i punktet $x = a$, og at størrelsen av dette spranget er proporsjonal med “styrken” (α) av δ -funksjonspotensialet, og også med verdien $\psi(a)$ av bølgefunksjonen i det aktuelle punktet. (Er bølgefunksjonen f.eks lik null i punktet $x = a$, så blir bølgefunksjonen glatt også her.) I et punkt hvor potensialet har et δ -bidrag er altså den deriverte ψ' normalt *diskontinuerlig*, mens selve bølgefunksjonen er kontinuerlig (fordi ψ' er endelig). Denne **diskontinuitetsbetingelsen** (T3.3) vil bli brukt ved behandlingen av δ -brønnen (se avsnitt 3.3).

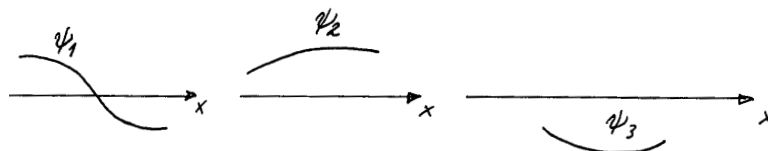
3.1.c Krumningsegenskaper. Nullpunkter [B&J s 103-114]

Ved å skrive energieigenverdligningen på formen

$$\frac{\psi''}{\psi} = -\frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] \quad (\text{T3.4})$$

ser vi at denne differensialligningen bestemmer den lokale *relative krumningen* av bølgefunksjonen, ψ''/ψ , som altså er proporsjonal med $E - V(x)$, den kinetiske energien.

(i) I **klassisk tillatte områder**, som pr definisjon er de områdene hvor $E > V(x)$, er denne relative krumningen negativ: Der hvor ψ er positiv, er ψ'' negativ og omvendt. Dette betyr at $\psi(x)$ krummer mot x -aksen:

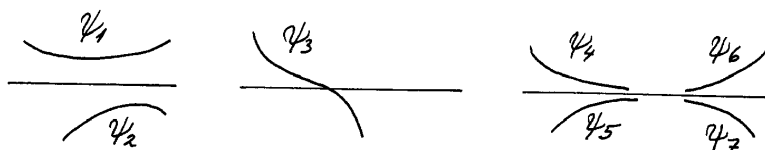


Et velkjent eksempel er egenfunksjonene $\psi_n(x) = \sqrt{2/L} \sin k_n x$ for den endimensjonale boksen. Her er

$$\frac{\psi_n''}{\psi_n} = -\frac{2m}{\hbar^2} E_n \equiv -k_n^2, \quad k_n = n \frac{\pi}{L}.$$

En relativ krumning som er konstant og negativ svarer altså til en sinusformet løsning. (Se figuren side 43 hos Hemmer.) Vi ser at jo større den kinetiske energien (her E) og dermed bølgetallet (k) er, desto raskere krummer ψ , og desto flere nullpunkter blir det plass til.

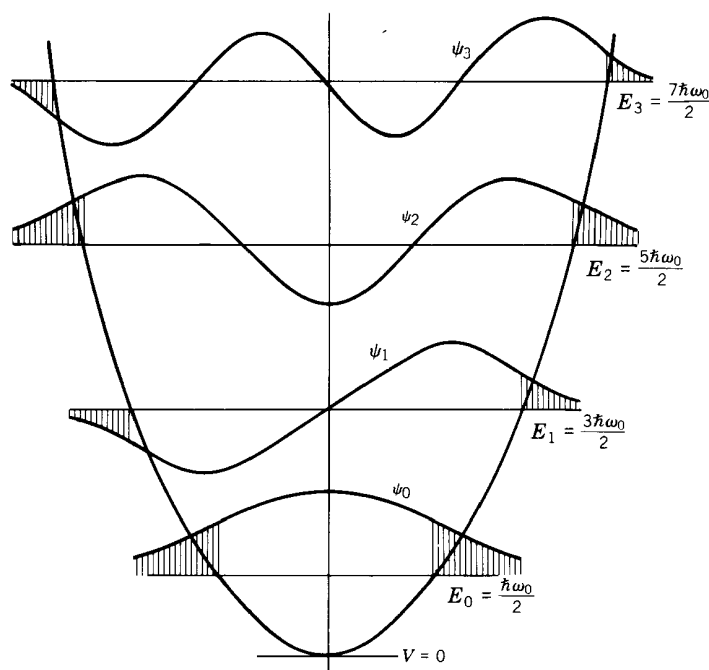
(ii) I **klassisk forbudte områder**, hvor $E - V(x)$ er negativ, er den relative krumningen positiv: Der hvor ψ er positiv, er også ψ'' positiv, osv. Egenfunksjonen ψ vil da krumme bort fra aksen.



Et sentralt eksempel er den harmoniske oscillator. For en gitt energi E_n vil partikkelen ifølge *klassisk mekanikk* oscillere mellom ytterpunkter som kalles de **klassiske vendepunktene**. De klassiske vendepunktene er generelt de punktene hvor $E_n = V(x)$, dvs der hvor “energi-linjen” skjærer potensialkurven. Kvantemekanisk kan vi si at områdene utenfor disse vendepunktene er klassisk forbudte for oscillatoren, og i disse områdene ser vi av figuren nedenfor at $\psi_n(x)$ krummer bort fra akse.

I de klassisk tillatte områdene (mellom vendepunktene) ser vi at $\psi_n(x)$ krummer mot akse (i likhet med boksløsningene), og raskere jo høyere E_n (og dermed $E_n - V(x)$) er. Også her ser vi at antallet nullpunkter øker med økende E_n . Da kan vi kanskje skjønne at

grunntilstanden i et endimensjonalt potensial er generelt fri for nullpunkter.

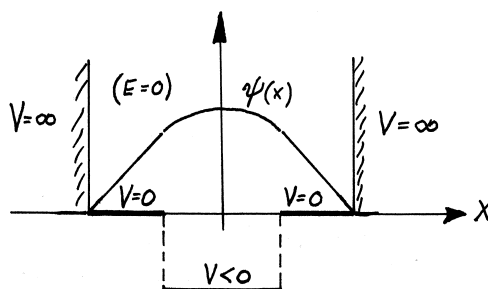


Fordi $E_n - V(x)$ her avhenger av x blir $\psi_n(x)$ ikke sinusformet i de tillatte områdene, men vi ser at den generelt får en oscillerende oppførsel. For store kvantetall (høye energier E_n) vil $E_n - V(x)$ være tilnærmet konstant lokalt (la oss si over et område av størrelsesorden “bølgelengden”). Da blir også ψ_n tilnærmet sinusformet over et slikt område. Dette illustreres indirekte av figuren side 58 i Hemmer, som riktignok gir *kvadratet* av ψ_n , for $n = 20$. (Når ψ_n er tilnærmet sinusformet lokalt, blir også $|\psi_n|^2$ det; jf relasjonen $\sin^2 kx = \frac{1}{2}(1 - \cos 2kx)$.)¹

¹Når $E - V(x)$ er tilnærmet konstant over et område av størrelsesorden “bølgelengden”, kan vi tilnærmet betrakte $k(x) \equiv \hbar^{-1} \sqrt{2m(E - V(x))}$ som et “bølgetall” for den tilnærmet sinusformede bølgefunksjonen. Dette “bølgetallet” øker med $E - V(x)$. Dette illustreres av figuren side 58 i Hemmer, hvor vi ser at “bølgelengden” ($\lambda(x) \equiv 2\pi/k(x)$) er minst nær origo, hvor den kinetiske energien er størst.

(iii) I et klassisk vendepunkt, hvor $V(x) = E$, ser vi av (T3.4) at $\psi''/\psi = 0$, dvs bølgefunksjonen har et vendepunkt også i matematisk forstand, hvor den relative krumningen skifter fortegn.²

For potensialer som er *stykkevis konstante* (se nedenfor) kan det forekomme at energiverdien er akkurat lik en slik konstant potensialverdi. Da er altså $V(x) = E$ over et område med endelig utstrekning, slik at ψ'' er lik null i dette området. Da må ψ selv være en lineær funksjon, $\psi = Ax + B$. Figuren nedenfor viser et bokspotensial med en ekstra brønn i midten, hvor vi kan forestille oss at brønnen er akkurat stor nok til at grunn-tilstanden får energien $E = 0$. Da har vi $E = V = 0$ utenfor den sentrale brønnen, og bølgefunksjonen blir lineær i disse områdene, mens den har kosinusform i brønnområdet.



3.1.d Degenerasjonsgrad [B&J s 110]

Den endimensjonale boksen og den endimensjonale harmoniske oscillatoren har **ikke-degenererte energinivåer**. Med dette mener vi at det finnes bare én energieigenfunksjon for hver energieigenverdi E_n .

Det kan vises at det samme gjelder for alle endimensjonale potensialer, for bundne tilstander:

Bundne energinivåer i endimensjonale potensialer er **ikke-degenererte**, dvs det eksisterer bare én energieigenfunksjon for hvert (diskret) energinivå. (T3.5)

Siden den endimensjonale tidsuavhengige Schrödingerligningen er av 2. orden, er antallet uavhengige egenfunksjoner for en gitt energi E maksimalt lik to, dvs **degenerasjonsgraden** er maksimalt lik 2.³ For ubundne tilstander kan vi ha degenerasjonsgrad lik 2, men det forekommer også at vi har bare én ubundet tilstand pr energi (se eksemplet nedenfor).

Bevis (ikke pensum i FY1006/TFY4215): Disse påstandene kan bevises vha et elegant matematisk resonnement: Anta at $\psi_1(x)$ og $\psi_2(x)$ er to energieigenfunksjoner med samme energi E . Vi skal nå undersøke om disse kan være lineært uavhengige. Fra den tidsuavhengige Schrödingerligningen, på formen

$$\frac{d^2\psi/dx^2}{\psi} \equiv \frac{\psi''}{\psi} = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E], \quad (\text{T3.6})$$

²For endelige potensialer ser vi av (T3.4) at ψ'' også er lik null i alle nullpunktene til $\psi(x)$. Så $\psi(x)$ har for såvidt også et vendepunkt i hvert slikt nullpunkt, men i nullpunktene skifter ikke den *relative* krumningen fortegn; jf figurene ovenfor.

³**Degenerasjonsgraden** for et gitt energinivå E er pr definisjon antallet lineært uavhengige energieigenfunksjoner for denne energien.

følger det at

$$\frac{\psi_1''}{\psi_1} = \frac{\psi_2''}{\psi_2}, \quad \text{dvs} \quad \psi_1''\psi_2 - \psi_2''\psi_1 = 0, \quad (\text{T3.7})$$

eller

$$\frac{d}{dx}(\psi_1'\psi_2 - \psi_2'\psi_1) = 0, \quad \text{dvs} \quad \psi_1'\psi_2 - \psi_2'\psi_1 = \text{konstant, (uavhengig av } x). \quad (\text{T3.8})$$

Dersom vi kan finne et punkt eller et område hvor både ψ_1 og ψ_2 er lik null, følger det at denne konstanten er lik null, og da må altså uttrykket $\psi_1'\psi_2 - \psi_2'\psi_1$ være lik null for alle x , dvs vi har at

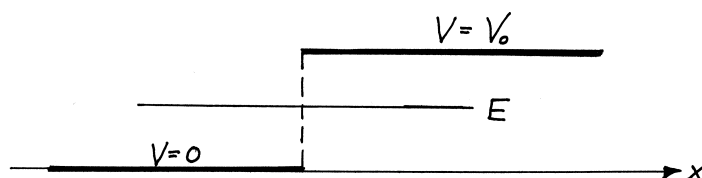
$$\frac{\psi_1'}{\psi_1} = \frac{\psi_2'}{\psi_2}.$$

Denne ligningen kan vi integrere, og vi får

$$\ln \psi_1 = \ln \psi_2 + \ln C, \quad \text{eller} \quad \psi_1 = C\psi_2, \quad (\text{T3.9})$$

dvs de to løsningene er *ikke* lineært uavhengige, men én og samme løsning, når vi ser bort fra konstanten C . Det eksisterer altså bare én energieigenfunksjon for den aktuelle energien, når vi kan finne et punkt hvor energieigenfunksjonene er nødt til å være lik null.

Det er dette som skjer bl.a for bundne tilstander i én dimensjon. For en bundet tilstand kreves det at bølgefunksjoner er kvadratisk integrerbare, dvs i en viss forstand lokalisert, slik at bølgefunksjonen må gå mot null for $x \rightarrow \pm\infty$. Da er altså konstanten ovenfor lik null, og vi har ingen degenerasjon, slik (T3.5) slår fast.

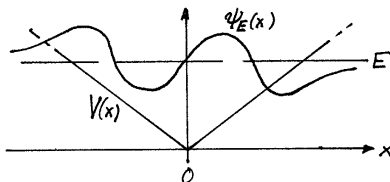


Et eksempel med bare ubundne tilstander har vi for potentialspranget i figuren. Her kan det vises at en energieigenfunksjon for en partikkel med masse m og energi E i intervallet $0 < E < V_0$ må gå som $\exp(-x\sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2})$ i området til høyre, som er klassisk forbudt når $E < V_0$. Eigenfunksjonen er da lik null i grensen $x \rightarrow \infty$. Fra beviset ovenfor følger det da at vi for hver energi E i intervallet $0 < E < V_0$ har bare én egenfunksjon, altså ingen degenerasjon. I området til venstre kan denne egenfunksjonen skrives på formen $A \exp(ikx) + B \exp(-ikx)$, der bølgetallet er $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ og $|A| = |B|$. Denne egenfunksjonen er derfor hverken lokalisert eller normerbar til 1, og beskriver altså en ubunden tilstand. (Se f.eks avsnitt 4.3 i B&J.)

For $E > V_0$ viser det seg at vi har to ubundne egenfunksjoner for hver energi, slik en finner for den frie partikkelen i én dimensjon.

Noen små oppgaver:

1.1 Vis at det klassisk tillatte området for elektronet i grunntilstanden i H-atomet er gitt ved $0 \leq r < 2a_0$, der a_0 er Bohr-radien.



1.2 Figuren viser et potensial $V(x) = k|x|$ og en prinsippskisse av en energieigenfunksjon $\psi_E(x)$ med energi E for dette potensialet.

- Hvorfor er E tredje eksiterte energinivå for dette potensialet?
- Vis at de klassiske vendepunktene for energien E ligger i $x = \pm E/k$.
- Hvorfor må eventuelle nullpunkter for en energieigenfunksjon for dette potensialet ligge mellom de klassiske vendepunktene for vedkommende energi? [Hint: Se på krumningen utenfor de klassiske vendepunktene.]
- Hvorfor har dette potensialet ingen ubundne energientilstander?

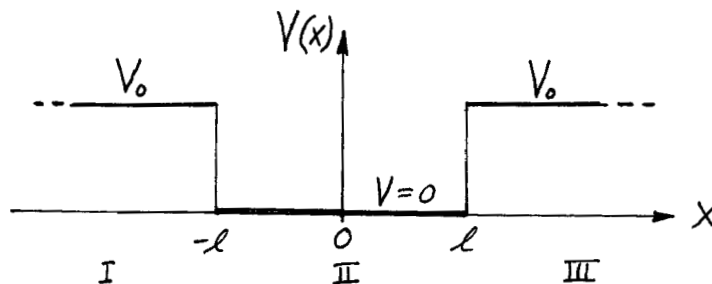
3.1.e Symmetriske potensialer [Hemmer s 71, B&J s 159]

For **symmetriske potensialer** skal vi se i kapittel 4 at det går an å finne energieigenfunksjoner (egenfunksjoner til \widehat{H}) som samtidig er symmetriske eller antisymmetriske.

For *bundne* tilstander, som svarer til ikke-degenererte energinivåer, viser det seg at energieigenfunksjonene for et symmetrisk potensial er *nødt til* å være enten symmetriske eller antisymmetriske. Velkjente eksempler er boks-tilstandene (med origo midt i boksen) og egenfunksjonene for den harmoniske oscilatoren, som alle er vekselvis symmetriske og antisymmetriske. Det samme gjelder bundne tilstander for den endelige firkantbrønnen. For dette tilfellet skal vi straks se at symmetriegenskapene hjelper til å forenkle beregningene.

I tilfeller der det finnes *to* energieigenfunksjoner for hver energi (noe som krever *ubundne* tilstander) *går det an* å finne energieigenfunksjoner med veldefinert symmetri (én symmetrisk og én antisymmetrisk egenfunksjon), men det kan også være praktisk å velge å arbeide med energieigenfunksjoner som hverken er symmetriske eller antisymmetriske (dvs som er lineærkombinasjoner av den symmetriske og den antisymmetriske løsningen). Det er f.eks aktuelt ved behandlingen av spredning mot potensial-barriere og -brønn (se avsnitt 3.6 nedenfor).

3.2 En endelig potensialbrønn [Hemmer 3.3, B&J 4.6]



Som nevnt side 44 i Hemmer, er en slik endelig **firkantbrønn** (eng.: “square well”) en brukbar modell for såkalte **kvantebrønner** eller **heterostrukturer**. Dette er lagdelte halvledere, og det enkleste eksemplet har vi når området mellom $x = -l$ og $x = +l$ representerer et lag der elektronet opplever et lavere potensial enn i nabolagene. Når vi fokuserer bare på bevegelsen på tvers av disse lagene, representerer et slikt lag en endimensjonal potensialbrønn.

3.2.a Generell løsningsstrategi for stykkevis konstante potensialer

Potensialet ovenfor er et eksempel på såkalte **stykkervis konstante potensialer**. Strategien for å finne energiefunksjoner for slike potensialer er som følger:

1. Vi betrakter de relevante *energi-områdene* hver for seg (i dette tilfellet $E > V_0$ og $0 < E < V_0$).

2. For et valgt energiområde (f.eks $E < V_0$) kan vi finne den generelle løsningen av den tidsuavhengige Schrödingerligningen $\hat{H}\psi = E\psi$ for hvert x -område (her I, II og III), uttrykt ved to ubestemte koeffisienter:⁴

(i) I klassisk *tillatte* områder, hvor $E - V > 0$, har vi da

$$\psi'' = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi \equiv -k^2\psi; \quad k \equiv \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E - V)}, \quad (\text{T3.10})$$

med generell løsning

$$\psi = A \sin kx + B \cos kx. \quad (\text{T3.11})$$

(ii) I klassisk *forbudte* områder, hvor $E < V$, har vi

$$\psi'' = \frac{2m}{\hbar^2}(V - E)\psi \equiv \kappa^2\psi; \quad \kappa \equiv \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V - E)}, \quad (\text{T3.12})$$

med generell løsning⁵

$$\psi = Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x}. \quad (\text{T3.13})$$

⁴Husk at den andreordens differensialligningen $\hat{H}\psi = E\psi$ alltid har to uavhengige løsninger, lokalt.

⁵(iii) I unntakstilfeller, hvor $E = V$ i et område, har vi $\psi'' = 0$, med generell løsning $\psi = Ax + B$.

Husk denne forskjellen: ⁶

Sinusformede (innover-krummende) løsninger i klassisk tillatte områder;
utoverkrummende eksponensial-løsninger i klassisk forbudte områder. (T3.14)

3. Siste punkt i programmet går ut på å *skjote sammen* løsningene for de forskjellige x -områdene på en slik måte at både ψ og $\psi' = d\psi/dx$ blir kontinuerlige (glatt skjøt). En må også ta hensyn til eventuelle grensebetingelser, slik at løsningen $\psi(x)$ totalt sett blir akseptabel som egenfunksjon til \widehat{H} . (Og dette programmet må vi altså gjennomføre for hvert av de relevante energiområdene, som nevnt under punkt 2.)

NB! Når ψ og ψ' begge er kontinuerlige, blir også ψ'/ψ kontinuerlig. Det er ofte praktisk å bruke kontinuiteten til ψ og ψ'/ψ , som vi skal se nedenfor. (ψ'/ψ kalles gjerne den logaritmisk deriverte, fordi det er den deriverte av $\ln \psi$.)

3.2.b Bundne og ubundne tilstander

I boka er det vist hvordan denne metoden kan brukes til å finne alle energiegenfunksjonene for en slik potensialbrønn. For $E > V_0$ finner en at energispektret er kontinuerlig, med to uavhengige egenfunksjoner for hver energi, akkurat som for en fri partikkel. I likhet med fri-partikkel-løsningene beskriver disse egenfunksjonene *ubundne* tilstander, og de er ikke kvadratisk integrerbare.

For $E < V_0$ finner en at energien er kvantisert, og en finner bare én egenfunksjon for hver av de diskrete energiene. Disse egenfunksjonene er kvadratisk integrerbare, og beskriver bundne tilstander. Energinivåene for de bundne tilstandene er altså ikke-degenererte. Dette gjelder i realiteten for bundne tilstander i alle endimensjonale potensialer.

Videre ser en i boka at egenfunksjonene er vekselvis symmetriske og antisymmetriske mhp midtpunktet av (den symmetriske) brønnen: Grunntilstanden, 2. eksiterte, 4. eksiterte osv er symmetriske, mens 1. eksiterte, 3. eksiterte osv er antisymmetriske. Dette gjelder i realiteten for alle bundne tilstander i symmetriske endimensjonale potensialer. (Se Tillegg 4, hvor disse egenskapene bevises.)

I Hemmer er det vist hvordan disse symmetriegenskapene kommer fram uansett, dersom en angriper egenverdiligningen *uten* å forutsette at løsningene har bestemte symmetrier. Symmetriegenskapene er altså en del av den informasjonen som “sitter i egenverdiligningen”. I avsnitt 3.3 nedenfor skal vi se at det samme gjelder for det harmoniske oscillatorpotensialet.

Moralen er at når vi har å gjøre med et symmetrisk potensial, så kan vi for bundne tilstander nøye oss med å lete etter symmetriske eller antisymmetriske egenfunksjoner. (Se side 71–72 i boka.)

⁶Merk at den generelle løsningen i et klassisk forbudt område også kan skrives som en lineærkombinasjon av $\sinh \kappa x$ og $\cosh \kappa x$. Av den grunn kaller vi generelt løsningstypen i et klassisk forbudt område for **hyperbolsk**. Tilsvarende kan den generelle (**trigonometriske**) løsningen i et klassisk tillatt område skrives som en lineærkombinasjon av e^{ikx} og e^{-ikx} . I eksemplet nedenfor viser det seg at (T3.11) og (T3.13) er mest praktisk.

3.2.c Randkrav og kontinuitet gir energikvantisering for bundne tilstander

Dette skal vi nå bruke til å vise en alternativ metode for å finne energi-eigenverdiene og egentilstandene for en brønn. I tråd med den generelle strategien ovenfor setter vi opp de generelle løsningene for hvert av de tre områdene I, II og III:

$$\text{I: } x < -l$$

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

$$\kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)}$$

$$\psi'/\psi = \kappa$$

$$\text{II: } -l < x < l$$

$$\psi_S = B \cos kx$$

$$\psi_A = A \sin kx$$

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}$$

$$\psi'_S/\psi_S = -k \tan kx$$

$$\psi'_A/\psi_A = k \cot kx.$$

$$\text{III: } x > l$$

$$\psi = C'e^{-\kappa x} + D'e^{\kappa x}$$

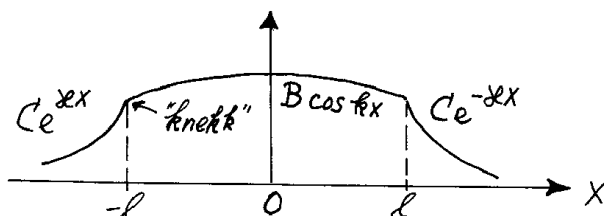
$$\psi'/\psi = -\kappa$$

Her er det flere ting å legge merke til:

(i) For det første må vi ta hensyn til følgende **randkrav**: En egenfunksjon tillates ikke å gå mot uendelig, slik $D' \exp(\kappa x)$ gjør når $x \rightarrow \infty$ og slik $D \exp(-\kappa x)$ gjør når $x \rightarrow -\infty$. Derfor må vi sette koeffisientene D og D' lik null.

(ii) For det andre er den generelle løsningen for brønn-området II egentlig $\psi = A \sin kx + B \cos kx$. Men her kan vi altså tillate oss å anta at løsningen er enten symmetrisk ($\psi_S = B \cos kx$, og $C' = C$) eller antisymmetrisk ($\psi_A = A \sin kx$ og $C' = -C$).

(iii) Men ennå er vi ikke i mål, for vi har jo ikke bestemt energien. Figuren viser hvordan en symmetrisk løsning kan se ut for en tilfeldig valgt energi.



Her har vi valgt B/C slik at ψ blir kontinuerlig for $x = \pm l$. Men som vi ser, har den resulterende funksjonen $\psi(x)$ en “knekk” for $x = \pm l$; skjøten er ikke *glatt*, slik den skal være for en egenfunksjon.

Konklusjonen er at for den valgte energien kan vi alltid få til en glatt skjøt i punktet $x = l$, men bare dersom vi også tar med en bit av funksjonen $D'e^{\kappa x}$ i område III til høyre for $x = l$. (Og tilsvarende til venstre for $x = -l$.) Men da vil løsningen $\psi(x)$ for denne energien gå mot uendelig når $x \rightarrow \pm\infty$. Slike løsninger er uakseptable fysisk, fordi de ikke er normerbare. De er heller ikke egenfunksjoner i matematisk forstand.

Moralen er at vi må prøve med større verdier for E (og dermed for bølgetallet k). Da vil kosinusen krumme *raskere* mot x -aksen, mens $C \exp(\pm\kappa x)$ vil krumme langsommere (fordi $\kappa \propto \sqrt{V_0 - E}$ blir mindre når vi øker E). Velger vi energien *for* stor, vil kosinusen krumme for mye, slik at vi får en knekk den andre veien. Det gjelder altså å finne akkurat den rette energien, slik at skjøten blir glatt.

Konklusjonen er at vi har energikvantisering for $0 < E < V_0$. Den (eventuelt de) korrekte E -verdien(e) finner vi ganske enkelt ved å bruke kontinuiteten av ψ'/ψ for (f.eks) $x = -l$. Dette gir betingelsene

$$\kappa = \begin{cases} k \tan kl & (S), \\ -k \cot kl = k \tan(kl - \frac{1}{2}\pi) & (A), \end{cases} \quad (\text{T3.15})$$

for henholdsvis det symmetriske og det antisymmetriske tilfellet. Ved å multiplisere med l på begge sider og bruke relasjonene

$$kl = \frac{l}{\hbar} \sqrt{2mE} \quad \text{og} \quad \kappa l = \frac{l}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} = \sqrt{\frac{2mV_0 l^2}{\hbar^2} - (kl)^2}$$

ser vi at betingelsene kan skrives på formen

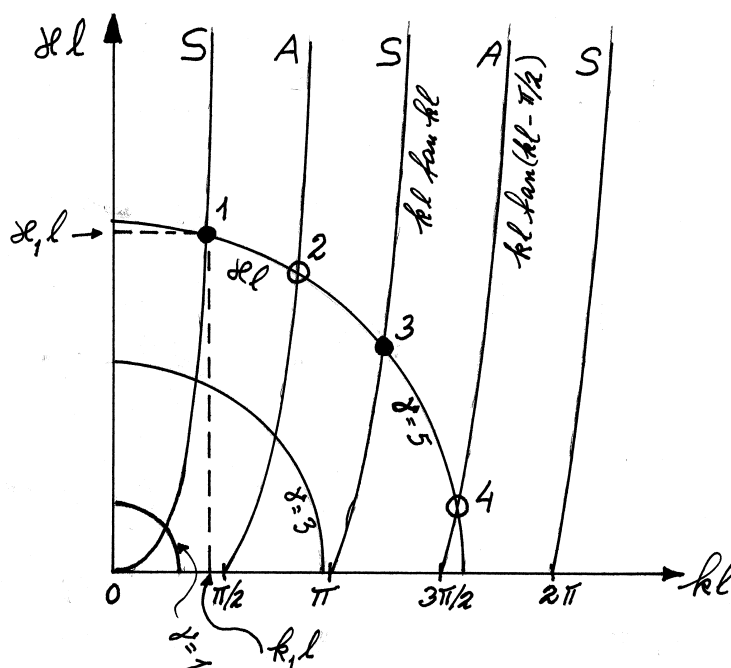
$$\kappa l = \sqrt{\frac{2mV_0 l^2}{\hbar^2} - (kl)^2} = kl \tan kl \quad (S), \quad (\text{T3.16})$$

$$\kappa l = \sqrt{\frac{2mV_0 l^2}{\hbar^2} - (kl)^2} = kl \tan(kl - \frac{1}{2}\pi) \quad (A),$$

der både høyre og venstre side er funksjoner av kl , dvs av energien E . Siden høyre og venstre side er *forskjellige* funksjoner av kl , er disse betingelsene oppfylt bare for visse verdier av kl . Disse k -verdiene kan finnes grafisk ved å bestemme skjæringspunktene mellom tangenskurvene (høyresiden) og venstresiden. Som funksjon av kl ser vi at venstresiden er en kvartsirkel med radius

$$\sqrt{\frac{2mV_0 l^2}{\hbar^2}} \equiv \gamma. \quad (\text{T3.17})$$

Denne radien (som vi har kalt γ) avhenger altså av *parametrene* i denne problemstillingen, som er massen m og brønnparametrene V_0 og l .



Figuren viser tangens-kurvene, som er uavhengige av parametrene, samt skjæringspunktene mellom disse kurvene og kvartsirkelen κl for en radius $\gamma = 5$. I dette tilfellet finner vi to symmetriske løsninger (se de fylte sirklene 1 og 3) og to antisymmetriske (se de åpne sirklene 2 og 4).

Ved å lese ut **abscissene**⁷ $k_i l$ og **ordinatene** $\kappa_i l$ til disse skjæringspunktene kan vi finne energiene og bindingsenergiene til grunntilstanden (1) og de tre eksiterte løsningene (2,3,4) som en finner for en brønn med $\gamma = 5$:⁸

$$E_i = \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m} = \frac{\hbar^2 (k_i l)^2}{2ml^2}; \quad (E_B)_i \equiv V_0 - E_i = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} = \frac{\hbar^2 (\kappa_i l)^2}{2ml^2}, \quad i = 1, 4. \quad (\text{T3.18})$$

3.2.d Diskusjon

Som vi skjønner, avhenger *antallet* bundne tilstander for en brønn av parametrene, via den dimensjonsløse størrelsen $\gamma = \sqrt{2mV_0 l^2 / \hbar^2}$. For $\gamma = 3$ ser vi at det er bare to bundne tilstander. Diagrammet forteller også at γ må være større enn $\pi/2$ for at vi skal finne mer enn én bundet tilstand. For $\gamma < \pi/2$ (f.eks $\gamma = 1$) finner vi altså bare den symmetriske grunntilstanden. Denne eksisterer til gjengjeld uansett hvor liten γ er, dvs uansett hvor smal og/eller *grunn* brønnen er.

Om vi nå ser for oss at produktet $V_0 l^2$ økes gradvis, slik at radien γ øker jevnt og trutt, så skjønner vi av figuren at det vil dukke opp et nytt skjæringspunkt for hver gang γ passerer et multiplum av $\pi/2$. Dette betyr at antallet bundne tilstander er lik $1 +$ heltallsverdien av $\gamma/(\frac{1}{2}\pi)$:

$$\text{antall bundne tilstander} = 1 + \left\lceil \frac{1}{\frac{1}{2}\pi} \sqrt{2mV_0 l^2 / \hbar^2} \right\rceil \quad (\text{T3.19})$$

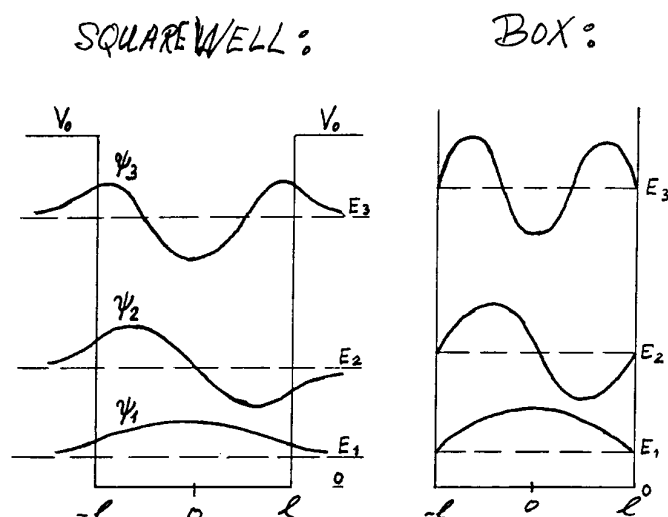
(der $[z]$ står for heltallsverdien av z , det største heltallet som er mindre enn z).

Fra figuren ovenfor skjønner vi også at når γ akkurat har passert et multiplum av $\pi/2$, så er ordinaten κl for den “ny-ankomne” tilstanden, og dermed bindingsenergien $E_B = \hbar^2 (\kappa l)^2 / (2ml^2)$, tilnærmet lik null. Moralen er at når brønnen (dvs γ) er akkurat stor nok til å gi plass til den “ny-ankomne” tilstanden, så er denne svært **løst bundet**. Dette betyr også at bølgefunksjonen avtar svært langsomt i de forbudte områdene. [$C \exp(-\kappa x)$ avtar svært langsomt for $x > l$ når κ er tilnærmet lik null.]

Figuren til venstre nedenfor gir et kvalitativt bilde av de resulterende egenfunksjonene for en brønn med plass til tre bundne tilstander.

⁷I et xy -diagram hvor x -aksen peker mot høyre og y -aksen oppover, kalles koordinatene x og y til et punkt henholdsvis **abscissen** og **ordinaten** (engelsk: abscissa and ordinate).

⁸Bindingsenergien er den energien som må tilføres partikkelen for å frigjøre den, i dette tilfellet fra brønnen, her $V_0 - E$.



I figuren til høyre viser vi til sammenligning de tre første løsningene for en boks med samme lengde (vidde) $2l$. I begge tilfellene er “energi-linjene” brukt som abscisse-akser for egenfunksjonsgrafene. Fra disse grafene kan vi hente ut ganske mye “moral”:

(i) Bokstilfellet svarer til at brønnedybden V_0 går mot uendelig. Vi ser at med den endelige dybden V_0 for brønnen vil egenfunksjonene $\psi_n(x)$ “trengte inn” i de klassisk forbudte områdene (hvor $E < V_0$). På høyre side av brønnen skjer dette i form av den “eksponentielle halen” $C \exp(-\kappa x)$. En slik inntrengning i forbudte områder er karakteristisk for alle bundne tilstander; bølgefunksjonene — og dermed sannsynlighetstetthetene — er forskjellig fra null også i områder der partikkelen ikke kan befinne seg ifølge klassisk mekanikk. I det aktuelle tilfellet ser vi at sannsynlighetstettheten i posisjonen $x = l + \frac{1}{2\kappa}$ er redusert med faktoren $1/e$ i forhold til verdien for $x = l$. Derfor kan vi godt definere lengden $1/2\kappa$ som en **inntrengningsdybde** (eng.: “penetration depth”):

$$l_{\text{p.d.}} \equiv \frac{1}{2\kappa} = \frac{\hbar}{2\sqrt{2m(V_0 - E)}} \quad (\text{inntrengningsdybde}). \quad (\text{T3.20})$$

Vi ser da at denne avtar med økende $V_0 - E$. Jo større $V_0 - E$ er, desto “mer forbudt” er det klassisk forbudte området, og desto mindre blir inntrengningsdybden.

(ii) Vi ser at denne inntrengningen gjør at bølgelengdene λ_i i det klassisk *tillatte* området blir noe større enn for boksløsningene. Bølgetallene $k_i = 2\pi/\lambda_i$ blir da tilsvarende noe mindre enn i bokstilfellet, og det samme vil gjelde for energiene, slik det er indikert i figuren ovenfor.⁹

(iii) Bortsett fra disse forskjellene ser vi at boksmodellen gir et *kvalitativt* korrekt bilde av brønnløsningene. Har vi en større brønn, som gir plass til flere løsninger, blir disse forskjellene mindre. Her må vi ellers huske på at også firkantbrønnen bare er en modell av et mer realistisk brønnpotensial (som ikke endrer seg diskontinuerlig). For et slikt potensial vil matematikken bli enda mer komplisert enn for firkantbrønnen. Men moralen som vi kan trekke ut av sammenligningen ovenfor er at en firkantbrønn vil gi en brukbar beskrivelse av egentilstandene for en mer realistisk brønn. Og mange av trekkene ved disse tilstandene

⁹Samme budskap kan hentes ut fra figuren side 11. Her er abscissen til skjæringspunktet som nevnt $k_j l$, og i figuren kan du se at $k_j l$ alltid er mindre enn j ganger $\pi/2$. Merk at det tilsvarende bølgetallet for bokstilstand nr j er gitt ved

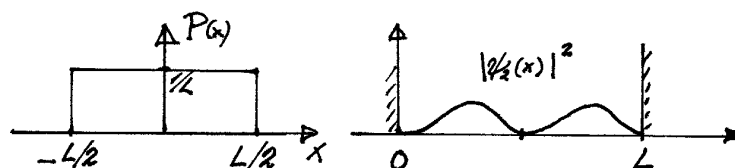
$$k_j^{\text{box}} \cdot 2l = j \cdot \pi, \quad \text{dvs.} \quad k_j^{\text{box}} l = j\pi/2.$$

beskrives også brukbart av den enda enklere boksmodellen. I all sin enkelhet er derfor bokspotensialet et svært viktig modellpotensial i anvendt kvantemekanikk.

Viktige eksempler er som nevnt heterostrukturer som brukes i elektronikk, optikk og optoelektronikk. Brønnvidden er da typisk flere nanometer, som i kvantemekanisk forstand svarer til *vide* brønner. Slike brønner kan i mange sammenhenger approksimeres med bokser.

Et annet eksempel fra faststoff-fysikk er **fritt-elektron-gass-modellen**, hvor et stykke metall betraktes som en tredimensjonal potensialbrønn hvor ledningselektronene beveger seg fritt (dvs ikke er bundet til ionene som utgjør resten av krystall-strukturen). For en slik brønn med makroskopiske dimensjoner gir boks-approksimasjonen en ypperlig tilnærming.

Noen små oppgaver:

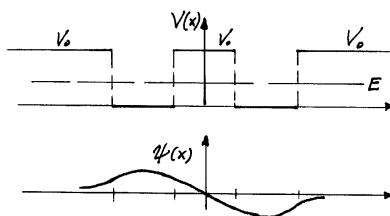


2.1 Figuren til venstre viser en sannsynlighetsfordeling $P(x)$ jevnt fordelt over intervallet $(-\frac{1}{2}L, \frac{1}{2}L)$.

a. Argumentér for at roten av det midlere kvadratiske avviket fra middelverdien $\langle \Delta x \rangle$ er større enn $\frac{1}{4}L$.

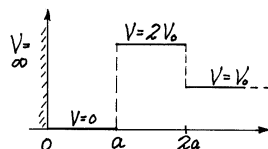
b. Vis at $\Delta x = L/\sqrt{12} \approx 0.29 L$.

c. Figuren til høyre ovenfor viser sannsynlighetstettheten $|\psi_2(x)|^2$ for energitilstanden ψ_2 for partikkel i boks. Hva er forventningsverdien $\langle x \rangle$ her? Argumentér for at Δx er større enn $\frac{1}{4}L$.



2.2 Figuren ovenfor viser et potensial $V(x)$ og en funksjon $\psi(x)$. Hvorfor kan ikke $\psi(x)$ være en energiegenfunksjon for den inntegnede energien E ? [Hint: Hva er galt med krumningen?]

2.3 Anta at brønnvidden i det symmetriske dobbeltbrønn-potensialet ovenfor er så stor at det blir plass til flere bundne tilstander (med energier mindre enn V_0). **a.** Vis at en symmetrisk egenfunksjon må ha formen $\psi = A \cosh \kappa x$ i barriereområdet i midten, og finn κ uttrykt ved E , V_0 og partikkelmassen m . **b.** Finn hvilken form en *antisymmetrisk* energiegenfunksjon må ha i det nevnte området. **c.** Finn hvilken form egenfunksjonene må ha i det klassisk forbudte området til høyre for høyre brønn, og prøv å lage prinsippsskisser som viser hvordan grunntilstanden og 1. eksiterte tilstand oppfører seg som funksjoner av x .

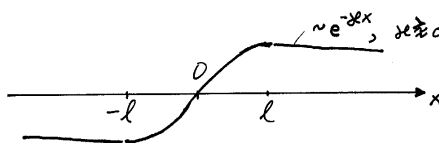


2.4 Hvorfor har potensialet i figuren ingen bundne tilstander (energieigenfunksjoner) med energi $E > V_0$? [Hint: Undersøk den generelle løsningen av den tids-uavhengige Schrödingeligningen for $x > 2a$.]

2.5 Bruk diagrammet side 11 til å svare på følgende spørsmål:

a. Selv for en uhyre liten brønn ($\gamma = \sqrt{2mV_0l^2/\hbar^2} \rightarrow 0$) har brønnen alltid én bundet tilstand. Sjekk at $E \rightarrow V_0$ og $E_B/E \rightarrow E_B/V_0 \rightarrow 0$ når $\gamma \rightarrow 0$. [Hint: E_B/E kan uttrykkes ved forholdet κ/k .]

b. Dersom vi lar “brønnstyrken” γ øke gradvis, dukker det opp en første eksiterte tilstand idet γ passerer $\frac{1}{2}\pi$. Hva kan du si om E og E_B/E for denne tilstanden når γ er bare ørlite grann større enn $\frac{1}{2}\pi$? Hva kan du si om E og E_B/E for 2. eksiterte tilstand når γ er bare ørlite grann større enn π ?



2.6 Figuren viser en energieigenfunksjon for brønnen, med oppførselen $\psi \sim e^{-\kappa x}$ for $x > l$, hvor κ er positiv, men praktisk talt lik null. Hvor stor er bindingsenergien $E_B = V_0 - E$ for denne tilstanden? Hvor stort er bølgetallet k (for løsningen i det klassisk tillatte området)? Hvor stor er brønnstyrken γ ?

2.7 Vis at inntrengningsdybden for et elektron med $E_B = V_0 - E = 1$ eV er ca 2 Ångstrøm.

3.2.e Diskusjon av energikvantisering ut fra krumningsegenskaper***¹⁰

Det er instruktivt å studere energikvantiseringen i lys av krumningsegenskapene til egenfunksjonene. Som vi var inne på i Tillegg 6 (pkt. c), bestemmer egenverdiligningen

$$\frac{\psi''}{\psi} = -\frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] \quad (\text{T3.21})$$

den relative krumningen, som en funksjon av $V(x)$ og E .

La oss tenke oss at vi bruker en datamaskin til å finne en numerisk løsning av denne ligningen for et gitt potensial $V(x)$, og for en valgt energiverdi E som vi *håper* skal gi en energieigenfunksjon.

Dersom vi oppgir funksjonsverdien ψ og den deriverte ψ' i et startpunkt x_0 , kan maskinen beregne $\psi''(x_0)$ [vha $\psi(x_0)$, E og $V(x_0)$]. Ut fra $\psi(x_0)$, $\psi'(x_0)$ og $\psi''(x_0)$ kan den da beregne funksjonsverdien og den deriverte i et nabopunkt $x_0 + \Delta x$. Feilen kan gjøres liten ved å

¹⁰Dette avsnittet er ikke pensum

velge tilstrekkelig lite inkrement Δx . Ved å gjenta denne prosessen kan maskinen finne en numerisk løsning av diff-ligningen. I diskusjonen nedenfor tenker vi oss at en slik maskin arbeider helt uten numerisk unøyaktighet.

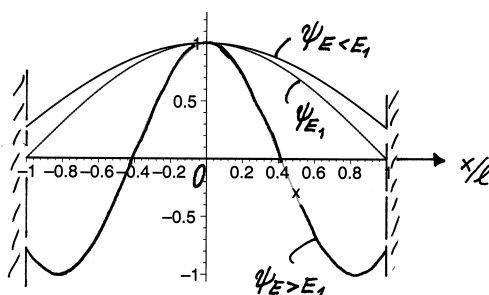
Eksempel: Partikkel i boks ($V = 0$ for $-l < x < l$, uendelig utenfor)

Vi vet at *egenfunksjoner* er symmetriske eller antisymmetriske (se B.1.f i Tillegg 6).

(i) Maskinen vil finne **symmetriske løsninger** dersom vi gir den startverdiene $\psi'(0) = 0$ (ψ flat midt i boksen) og $\psi(0) = 1$ (normeringen uten betydning for egenverdi-problemet). I tillegg må vi gi maskinen en energi E . Velger vi en av fasitverdiene for symmetriske egenfunksjoner,

$$E_n = E_1 n^2, \quad n = 1, 3, 5, \dots, \quad E_1 = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m}, \quad k_1 \cdot 2l = \pi, \quad (\text{T3.22})$$

vil maskinen reproducere den tilsvarende energiegenfunksjonen (som vi kjenner så godt). Velger vi f.eks grunntilstandsenergien E_1 , vil maskinen gi oss en cosinus-løsning $\psi_{E_1} = \cos(\pi x/2l)$ som krummer akkurat raskt nok til at den går mot null på randen, $x = \pm l$; jf figuren.¹¹

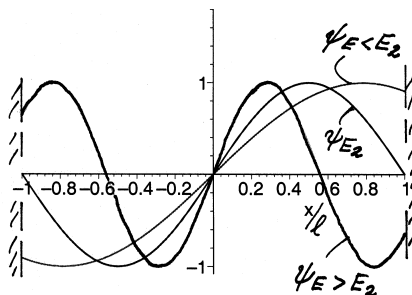


Gir vi maskinen en energi E som er *mindre* enn E_1 , vil den finne en løsning $\psi_{E < E_1}$ som krummer for lite, slik at den ikke “rekker ned” til null på randen. Vi ender da opp med $\psi_{E < E_1}(\pm l) > 0$, i strid med randkravene (kontinuiteten i $x = \pm l$), som vist i figuren. Maskinen finner altså en *løsning* for hver E mindre enn E_1 , men denne er ikke en *egenfunksjon*.

I figuren ovenfor har vi også tegnet inn en løsning $\psi_{E > E_1}$. Denne krummer raskere enn grunntilstanden (fordi $E > E_1$), men ikke raskt nok til å oppfylle randkravet, som vi ser. Ved å skissere noen grafer vil du innse at ingen av de symmetriske løsningene for $E_1 < E < E_3$ vil oppfylle randkravet. Dette illustrerer hvordan energikvantiseringen henger sammen med krumningsegenskapene og randkravene.

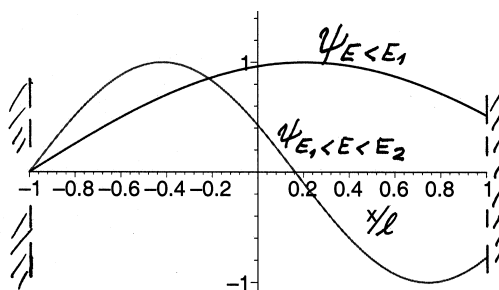
(ii) Vi kan også undersøke **antisymmetriske** løsninger, ved å gi maskinen startverdiene $\psi(0) = 0$ og $\psi'(0) = 1$. Prøver vi da med $E = E_2$, vil maskinen reproducere energiegenfunksjonen $\psi_{E_2}(x)$ for første eksiterte tilstand, som vist i figuren nedenfor. Prøver vi med E *mindre* enn E_2 , blir krumningen til løsningen $\psi_{E < E_2}(x)$ for liten til å gi en egenfunksjon (se figuren).

¹¹Med origo midt i boksen får alle symmetriske løsninger kosinus-form, mens de antisymmetriske får sinus-form.



Legg også merke til at første eksiterte tilstand ψ_{E_2} påtvinges større krumning og derfor høyere energi enn grunntilstanden fordi den har ett nullpunkt, i motsetning til grunntilstanden. (Ved tellingen av nullpunkter holder vi randen utenfor.)

(iii) Et alternativ til (i) og (ii) ovenfor er å starte fra randen til venstre, med startverdiene $\psi(-l) = 0$ og $\psi'(-l) \neq 0$. Kurvene nedenfor viser to løsninger, én med $E < E_1$, og én med $E_1 < E < E_2$.

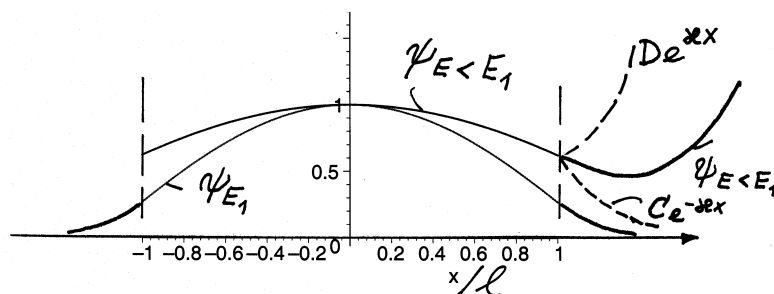


Noe av budskapet er igjen at krumningen og dermed antall nullpunkter øker med energien. Alle slike løsninger som er lik null for $x = -l$ er av typen $\psi = \sin[k(x+l)]$, der $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$. Energieigenfunksjonene oppnår vi når ψ er lik null også på randen til høyre, dvs for $k_n \cdot 2l = n\pi$. Eigenfunksjonene $\psi_n = \sin[k_n(x+l)]$ er selvsagt akkurat de samme som vi fant ovenfor. Derimot ser vi at formen til de “mislykkede” løsningene (for $E \neq E_n$ dvs $k \neq k_n$) avhenger av hva slags startpunkt vi velger. I figuren ovenfor er disse løsningene **asymmetriske** (ikke-symmetriske), mens de var hhvis symmetriske og antisymmetriske under (i) og (ii) ovenfor.

Firkantbrønnen

En tilsvarende diskusjon kan gjennomføres for firkantbrønnen. Vi kan la maskinen lete etter egenfunksjoner ved at den prøver seg for alle energier i intervallet $0 < E < V_0$.

Figuren nedenfor illustrerer hva som skjer dersom maskinen prøver seg med en energi som er lavere enn grunntilstandsenergien E_1 . Med startverdiene $\psi'(0) = 0$ og $\psi(0) = 1$ for en symmetrisk løsning (som i punkt (i) ovenfor) vil løsningen da krumme langsommere enn grunntilstanden ψ_{E_1} i det klassisk tillatte området, som vist i figuren. Denne løsningen blir derfor “flatere” enn grunntilstanden i punktene $x = \pm l$.

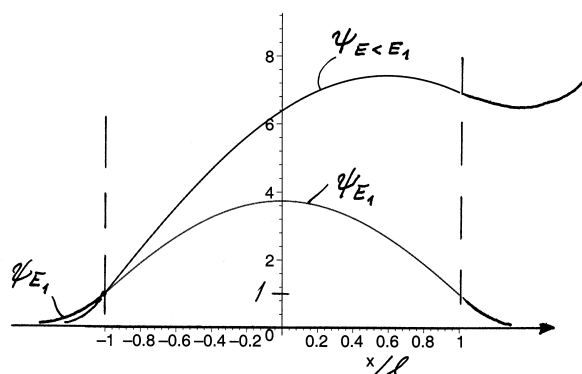


Utenfor disse punktene er den relative krumningen utover fra akse raskere enn for grunntilstanden (fordi $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2}$ er større enn κ_1). Derfor har løsningen ingen mulighet for å “lande” på x -aksen (slik grunntilstanden ψ_{E_1} gjør); den “tar av” mot uendelig, som vist i figuren.¹² For $x > l$ er nå løsningen en lineærkombinasjon av den akseptable funksjonen $C \exp(-\kappa x)$ og den uakseptable $D \exp(\kappa x)$. Derfor vil den gå mot uendelig når x går mot uendelig, og likedan for $x \rightarrow -\infty$.¹³

Et alternativ, som i punkt (iii) ovenfor, er å starte med en løsning $\psi_{E < E_1}$ som går som $C \exp(\kappa x)$ for $x < -l$. (Dvs en løsning som er akseptabel på “venstre rand”.) I figuren har vi valgt å sette denne løsningen lik 1 i punktet $x = -l$, og det samme har vi gjort for grunntilstanden ψ_{E_1} , som også er tegnet inn. I dette punktet er da vinkelkoeffisientene til de to kurvene

$$\psi'_{E < E_1}(-l) = \kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2} \quad \text{og} \quad \psi'_{E_1}(-l) = \kappa_1 = \sqrt{2m(V_0 - E_1)/\hbar^2},$$

og med $E < E_1$ ser vi at $\kappa > \kappa_1$. Idet maskinen beveger seg inn i det tillatte området fra $x = -l$ (til $x = l$), starter altså $\psi_{E < E_1}$ ut brattere enn grunntilstanden ψ_{E_1} , samtidig som den krummer langsommere mot akse enn ψ_{E_1} i hele det tillatte området. For $x > l$ krummer denne løsningen raskere utover enn ψ_{E_1} , og da er det lett å skjønne at løsningen $\psi_{E < E_1}$ ikke har noen mulighet for å “lande på x -aksen”, slik grunntilstanden gjør; den må gå mot uendelig.



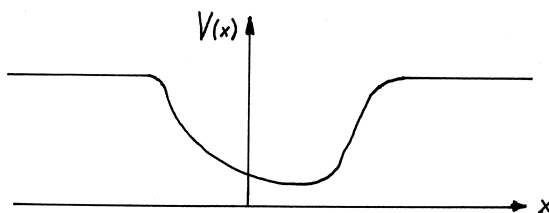
¹²Merk at maskinen ikke lager noen “knekk” på løsningen ψ . Fordi $\psi'' = (2m/\hbar^2)[V(x) - E]\psi$ er endelig, blir ψ' kontinuerlig og ψ glatt også i punktene $x = \pm l$.

¹³Fra en slik figur kan vi også skjønne hvorfor det alltid eksisterer en bundet grunntilstand, uansett hvor liten brønnen er, som nevnt side 12. For en liten brønn rekkes kosinusløsningen i det tillatte området å krumme svært lite, slik at ψ blir nesten flat for $x = \pm l$. Men uansett hvor flat kosinus er, kan vi alltid finne en energi like oppunder V_0 , slik at $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2}$ blir liten nok til å gjøre $C \exp(-\kappa x)$ like flat i skjøten for $x = l$, slik at skjøten blir glatt. Bindingsenergien $E_B = \hbar^2 \kappa^2 / 2m$ blir i slike tilfeller veldig liten, og den eksponensielle “halen” $C \exp(-\kappa x)$ trenger langt inn i det forbudte området til høyre, og tilsvarende til venstre.

For å finne en egenfunksjon i tillegg til grunntilstanden må vi altså la maskinen prøve med $E > E_1$, som gir raskere krumning i det tillatte området. Den første egenfunksjonen som da dukker opp er når energien E (og krumningen) er akkurat stor nok til å gi et nullpunkt i origo. Dette gir den første antisymmetriske løsningen.¹⁴

3.2.f Mer kompliserte potensialer

Ut fra krumningsargumentasjonen ovenfor kan vi skjønne hvorfor antall nullpunkter for energieigenfunksjonene øker med energien, ikke bare for boksen og brønnen, men også for mer realistiske brønn-potensialer.



For et slikt ikke-symmetrisk potensial vil egenfunksjonene ikke ha bestemt paritet (dvs være symmetriske eller antisymmetriske), men som ovenfor har vi at

- Energiene til de bundne tilstandene er kvantisert.
- Bølgefunksjonene til de bundne tilstandene er *lokaliserte*, i den forstand at de går raskt mot null for store avstander.
- Antallet bundne tilstander avhenger av størrelsen av brønnen.
- Energiene til egenfunksjonene øker med antall nullpunkter (noder). Grunntilstanden har ikke noe nullpunkt. Første eksiterte tilstand har ett nullpunkt, osv.
- Dersom potensialet er symmetrisk, er grunntilstanden symmetrisk, 1. eksiterte anti-symmetrisk, 2. eksiterte symmetrisk, og slik fortsetter det med alternerende pariteter.

En liten oppgave:

a. La $\psi(x)$ være en bundet energieigenfunksjon i en enkel firkantbrønn, eller i et harmonisk oscillatorpotensial. Hvorfor må alle nullpunktene til $\psi(x)$ ligge i det klassisk tillatte området? [Hint: Se på hvordan $\psi(x)$ oppfører seg i de klassisk forbudte områdene.]

b. Må nullpunktene til en energieigenfunksjon $\psi(x)$ ligge i de klassisk tillatte områdene for *alle* potensialer $V(x)$? [Hint: Tenk deg et symmetrisk potensial der origo ligger i et klassisk forbudt område.]

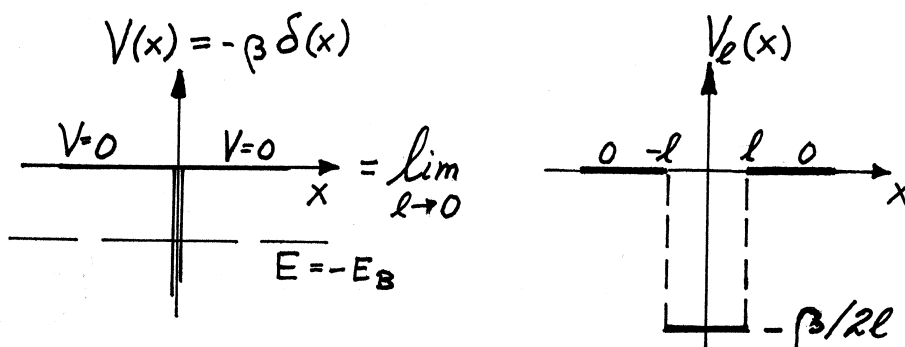
¹⁴Kriteriet for å finne en antisymmetrisk egenfunksjon er her at ψ ankommer midtpunktet $x = 0$ i brønnen med $\psi(0) = 0$ og $\psi'(0) \neq 0$. Dette krever en brønn som ikke er for liten. Kriteriet for å finne en symmetrisk egenfunksjon er at ψ ankommer $x = 0$ med $\psi(0) \neq 0$ og $\psi'(0) = 0$.

3.3 Deltafunksjons-brønn [Hemmer 3.4]

Vi skal straks se at deltafunksjons-potensialet,

$$V(x) = -\beta\delta(x), \quad (\text{T3.23})$$

er et veldig enkelt, men nokså spesielt modellpotensial. Vi kan tenke på dette potensialet som en firkantbrønn $V_l(x)$, med en vidde $2l$ og dybde $V_0 = \beta/2l$, i grensen $l \rightarrow 0$:



Her har vi valgt å sette $V = 0$ utenfor brønnen. Det viser seg nemlig at energien til den bundne tilstanden, $E = -E_B$, går mot en endelig verdi når vi lar dybden av firkantbrønnen til høyre gå mot uendelig, dvs i grensen $l \rightarrow 0$. (Og da er det selvsagt upraktisk å måle energien fra bunnen av brønnen, slik vi har gjort tidligere.)

For modellpotensialet til venstre er det veldig enkelt å løse egenverdiproblemet. Utenfor δ -brønnen, hvor $V = 0$, tar egenverdligningen formen

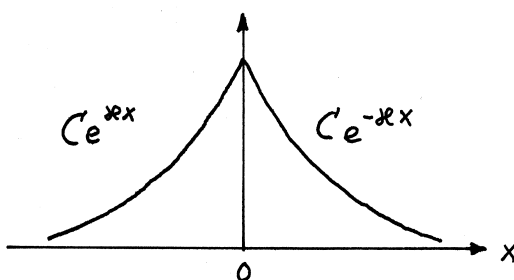
$$\psi'' = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]\psi = \frac{2m}{\hbar^2}[-E]\psi \equiv \kappa^2\psi, \quad (\text{T3.24})$$

med

$$\kappa \equiv \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(-E)} = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE_B} \quad \left(E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} = -E_B\right).$$

Denne ligningen har løsningene $e^{\kappa x}$ og $e^{-\kappa x}$. Da bare den siste er akseptabel for $x > 0$ og bare den første for $x < 0$, følger det fra kontinuitetskravet at løsningen må være symmetrisk:

$$\psi = \begin{cases} Ce^{-\kappa x} & \text{for } x > 0, \\ Ce^{\kappa x} & \text{for } x < 0. \end{cases}$$



Her bør det ikke overraske at funksjonen har en “knekk” og den deriverte et sprang for $x = 0$, for dette er nettopp hva som kreves når potensialet inneholder en deltafunksjon: Ifølge diskontinuitetsbetingelsen (T3.3) har vi (med $\alpha = -\beta$)

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = \frac{2m(-\beta)}{\hbar^2} \psi(0). \quad (\text{T3.25})$$

For en bestemt “styrke” (β) på brønnen fastlegger denne betingelsen κ til én bestemt verdi: Betingelsen (T3.25) gir

$$C(-\kappa) - C(\kappa) = -\frac{2m\beta}{\hbar^2} C, \quad \text{eller} \quad \kappa = \frac{m\beta}{\hbar^2}.$$

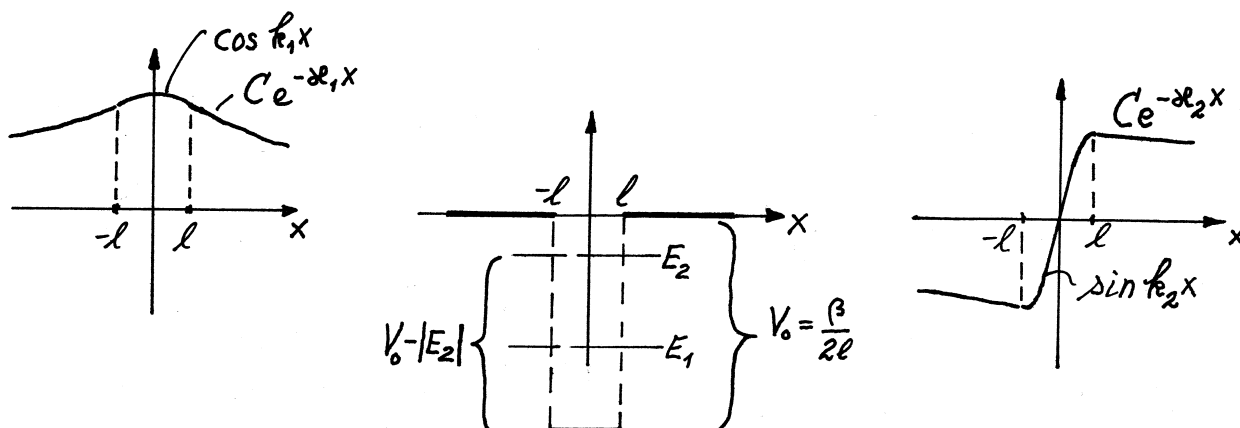
Dermed fastlegges også energien til én bestemt verdi:

$$E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} = -\frac{m\beta^2}{2\hbar^2}. \quad (\text{T3.26})$$

Deltabrønnen er altså en nokså spesiell potensialmodell: Den har én og bare én bunden tilstand (med en bindingsenergi som er proporsjonal med kvadratet av styrkeparameteren β).

Merk ellers at denne grunntilstanden er symmetrisk, som alltid for et symmetrisk potensial. Du kan også legge merke til at egenverdiligningen som vanlig ikke bestemmer normeringen. Denne fastlegges av normeringskravet, som gir $|C| = \sqrt{\kappa}$.

Hva er grunnen til at det finnes bare én bunden tilstand? Svaret finner vi ved å se på brønnen med endelig vidde $2l$ og dybde $V_0 = \beta/2l$. Når denne blir veldig dyp og smal, dvs nærmer seg δ -brønnen i grensen $l \rightarrow 0$, skjønner vi av (T3.25) at krumningen mot akse av kosinusen i brønnområdet er stor nok til å sørge for den nødvendige endringen $\psi'_1(l) - \psi'_1(-l)$ av den deriverte (se figuren til venstre).



En første eksiterte løsning ψ_2 (med energien E_2), derimot, krever mye større krumning. Som vist i figuren til høyre, må bølgetallet k_2 til løsningen $\sin k_2 x$ i brønnområdet være så stort at sinusen passerer et maksimum før $x = l$, slik at den kan gå glatt over i $Ce^{-\kappa_2 x}$ for $x > l$. Dette krever at $k_2 l$ er større enn $\pi/2$. Men her må vi huske på at k_2 er begrenset; vi har

$$k_2 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - |E_2|)} < \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mV_0},$$

slik at

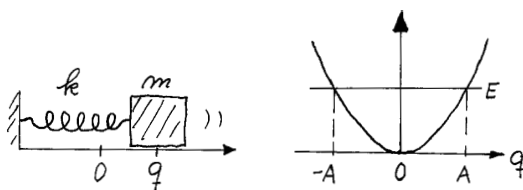
$$k_2 l < \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m \frac{\beta}{2l}} l^2 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{m\beta} l,$$

som går mot null når $l \rightarrow 0$. Følgelig overlever bare den symmetriske grunntilstanden når l blir liten nok, og når den går mot null, slik den gjør i deltafunksjonspotensialet.

3.4 Endimensjonal harmonisk oscillator

[Hemmer 3.5, Griffiths s 31, B&J s 170]

3.4.a Innledning: Den enkle harmoniske oscillatoren



Prototypen på en harmonisk oscillator er en masse m festet til en fjær med fjærkonstant k , slik at kraften er proporsjonal med utsvinget (som vi her kaller q) fra likevektsposisjonen ($q = 0$). Her har vi altså plassert origo i likevektsposisjonen, slik at kraften og potensialet er

$$F(q) = -kq \quad \text{og} \quad V(q) = \frac{1}{2}kq^2,$$

dersom vi også velger å sette $V(0)$ lik null. Ifølge klassisk mekanikk vil denne massen oscillere (svinge). Ved å sette inn prøveløsningen

$$q(t) = A' \cos \omega t + B' \sin \omega t = A \cos(\omega t - \alpha)$$

i Newtons 2. lov, $d^2q/dt^2 = F/m$, er det lett å se at vinkelfrekvensen til svingningen er

$$\omega = \sqrt{k/m}.$$

Dette betyr at vi kan erstatte fjærkonstanten k med $m\omega^2$ i den potensielle energien $V(q)$:

$$V(q) = \frac{1}{2}m\omega^2 q^2.$$

Ifølge klassisk mekanikk kan denne partikkelen ha en hvilken som helst ikke-negativ energi E . For en gitt E vil den oscillere mellom de klassiske vendepunktene $q = \pm A$ (der A er gitt ved at $E = \frac{1}{2}m\omega^2 A^2$).

I kvantemekanikk angriper vi som vanlig et slikt system vha den tidsuavhengige Schrödingerligningen, for å finne energi-egenfunksjoner og -egenverdier. Det viser seg da at oscillatoren bare har bundne tilstander, og at energien er kvantisert. Vi skal her vise hvordan alle energi-egenverdiene og de tilhørende egenfunksjonene kan finnes.

Vi starter med å skrive den tidsuavhengige Schrödingerligningen på **dimensjonsløs form**,

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + (\epsilon - x^2)\psi(x) = 0. \quad (\text{T3.27})$$

Her har vi innført de dimensjonsløse variablene x og ϵ for henholdsvis posisjonen og energien:

$$x \equiv \frac{q}{\sqrt{\hbar/m\omega}} \quad \text{og} \quad \epsilon \equiv \frac{E}{\frac{1}{2}\hbar\omega}. \quad (\text{T3.28})$$

En liten oppgave: Sjekk for all del at du klarer å skrive den tidsuavhengige Schrödingerligningen på formen (T3.27) når du innfører variablene (T3.28).

Løsningene av denne differensialligningen (dvs energieigenfunksjonene) og de tilhørende energiene (gitt ved ϵ) skal vi finne vha den såkalte **rekkeutviklingsmetoden**.

I rekkeutviklingsmetoden benytter vi oss av at en energieigenfunksjon kan uttrykkes ved en Taylor-rekke i potenser av x . Koeffisientene i denne rekken kan vi bestemme vha egenverdiligningen, dvs vha differensialligningen ovenfor.

3.4.b Illustrasjon av rekkeutviklingsmetoden

La oss illustrere hvordan dette virker for en kjent funksjon, eksponensialfunksjonen $y(x) = \exp(x)$, som har Taylor-utviklingen

$$y(x) = e^x = 1 + x + x^2/2! + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}.$$

Denne funksjonen er en løsning av differensialligningen

$$y' = y,$$

og vi kan nå prøve å løse denne med rekkeutviklingsmetoden. Vi antar da at $y(x)$ kan utvikles i en uendelig potensrekke,

$$y = \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^{s+n} = c_0 x^s + c_1 x^{s+1} + \dots$$

Her antar vi at $c_0 \neq 0$, og det gjelder bl.a å finne laveste potens, x^s , hvor vi later som om s er ukjent. Vi setter nå inn i differensialligningen ($y' - y = 0$) summen for y og det tilsvarende uttrykket for den deriverte,

$$\begin{aligned} y' &= \sum_{n=0}^{\infty} c_n (s+n) x^{s+n-1} = c_0 s x^{s-1} + \sum_{n=1}^{\infty} c_n (s+n) x^{s+n-1} \\ &= c_0 s x^{s-1} + \sum_{n=0}^{\infty} c_{n+1} (s+n+1) x^{s+n}. \end{aligned}$$

Innsetting gir ligningen

$$c_0 s x^{s-1} + \sum_{n=0}^{\infty} [(s+n+1)c_{n+1} - c_n] x^{s+n} = 0.$$

Denne ligningen er oppfylt for alle x bare dersom koeffisientene foran alle potensene av x er lik null. (Alle potensene av x er lineært uavhengige.) Siden c_0 er forskjellig fra null (per definisjon), må vi altså kreve at

- $s = 0$, som betyr at Taylor-rekka starter med $c_0 x^0 = c_0$, og at
- $c_{n+1} = \frac{c_n}{n+s+1} = \frac{c_n}{n+1}.$

Den siste sammenhengen kalles en **rekursjonsformel**, og betyr at alle koeffisientene kan uttrykkes ved c_0 :

$$c_1 = \frac{c_0}{1}, \quad c_2 = \frac{c_1}{2} = \frac{c_0}{1 \cdot 2}, \quad c_3 = \frac{c_2}{3} = \frac{c_0}{3!}, \quad \text{osv.}$$

Rekka er altså

$$y = \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n = c_0 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}.$$

Her gjenkjenner vi summen som rekkeutviklingen av $\exp(x)$.

3.4.c Rekkeutviklingsmetoden brukt på oscillatorligningen

For oscillatoren kan vi i prinsippet gå fram på samme måte. Men her husker du kanskje fra øvingene at to enkle løsninger av differensialligningen ovenfor er

$$\psi_0 = C_0 e^{-m\omega q^2/2\hbar} = C_0 e^{-x^2/2} \quad \text{og} \quad \psi_1 = C_1 q e^{-m\omega q^2/2\hbar} = C'_1 x e^{-x^2/2}.$$

Det er da fristende å prøve å “spalte av” faktoren $\exp(-x^2/2)$ for alle løsninger, ved å sette

$$\psi(x) = v(x)e^{-x^2/2},$$

i håp om at den resulterende rekka for $v(x)$ kanskje kan bli enklere, kanskje til og med endelig, som for de to løsningene ovenfor. Denne rekka finner vi ved å bruke rekkeutviklingsmetoden på differensialligningen for $v(x)$,

$$v'' - 2xv' + (\epsilon - 1)v = 0.$$

En liten oppgave: Sjekk at denne ligningen følger ved å sette inn $\psi(x) = v(x)\exp(-x^2/2)$ i differensialligningen (T3.27) for $\psi(x)$.

Vi setter nå inn de uendelige rekkene ¹⁵

$$v(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k, \quad v' = \sum_{k=1}^{\infty} k a_k x^{k-1},$$

og

$$v'' = \sum_{k=2}^{\infty} k(k-1)a_k x^{k-2} = \sum_{k=0}^{\infty} (k+2)(k+1)a_{k+2} x^k,$$

i differensialligningen for $v(x)$. Dette gir

$$\sum_{k=0}^{\infty} [(k+2)(k+1)a_{k+2} - (2k+1-\epsilon)a_k] x^k = 0.$$

Denne ligningen er oppfylt (for alle x) bare dersom alle parentesene $[\dots]$ er lik null, og gir oss **rekursjonsformelen**

$$a_{k+2} = a_k \frac{2k+1-\epsilon}{(k+1)(k+2)}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{T3.29})$$

¹⁵Her prøver vi oss med en konstant a_0 som laveste potens i Taylor-rekka for $v(x)$; jf grunntilstanden.

Ved hjelp av denne kan vi uttrykke koeffisientene a_2, a_4 osv ved a_0 , — og a_3, a_5 , osv ved a_1 . Løsningen for $v(x)$ blir dermed

$$v(x) = a_0 \left[1 + \frac{1-\epsilon}{2!} x^2 + \frac{(1-\epsilon)(5-\epsilon)}{4!} x^4 + \dots \right] + a_1 \left[x + \frac{3-\epsilon}{3!} x^3 + \frac{(3-\epsilon)(7-\epsilon)}{5!} x^5 + \dots \right],$$

hvor det er lett å skrive ned neste ledd for begge de to rekkene.

Dersom disse to (i utgangspunktet uendelige) rekkene ikke *bryter av*, ser vi av rekursjonsformelen at forholdet mellom påfølgende koeffisienter i hver av dem vil gå som

$$\frac{a_{k+2}}{a_k} \simeq \frac{2}{k}$$

for store k . Som vist side 53 i Hemmer, er dette det samme forholdet som en har i rekkeutviklingen for $x^p e^{x^2}$ der x^p er en vilkårlig potens av x . Dette betyr at $\psi(x) = v(x) e^{-x^2/2}$ for store $|x|$ vil gå som $\exp(+x^2/2)$ multiplisert med en potens av x . En slik funksjon vil gå mot uendelig i grensene $x \rightarrow \pm\infty$, noe som ikke er tillatt for en egenfunksjon. Den eneste måten å unngå denne uakseptable oppførselen på er dersom rekkene **bryter av**, slik at $v(x)$ blir et **polynom**. Når dette kravet er oppfylt, blir til gjengjeld $\psi(x) = v(x) \exp(-x^2/2)$ en normerbar funksjon. (Dette henger som vi skal se sammen med at energispektret her blir diskret.)

Da må vi altså undersøke hva som skal til for at rekkene bryter av. Vi undersøker først tilfellet hvor ϵ *ikke* er et odde heltall, dvs $\epsilon \neq 1, 3, 5, 7, \dots$. Da bryter ingen av de to rekkene av. For å unngå en divergerende løsning må vi da sette $a_0 = a_1 = 0$, som gir $v(x) \equiv 0$, slik at $\psi(x)$ blir den trivielle “nullfunksjons”-løsningen. Konklusjonen er at differensialligningen ikke har akseptable løsninger (og at \hat{H} ikke har egenfunksjoner) for $\epsilon \neq 1, 3, 5, 7, \dots$. Vi må derfor se nærmere på hva som skjer når ϵ er et odde heltall (lik 1, 3, 5, 7, osv):

For

$$\epsilon = 1, 5, 9, \dots = \underline{2n + 1} \quad (\text{med } n = 0, 2, 4, \dots),$$

ser vi at den *første* av de to rekkene bryter av (men ikke den andre). For å få en akseptabel egenfunksjon må vi da kvitte oss med den andre rekka ved å sette $a_1 = 0$. Vi legger merke til at dette gjør $v(x)$ til et polynom av grad n . For $\epsilon = 5$, f.eks, som svarer til $n = 2$, ser vi at polynomet blir av grad 2, med bare *like* potenser av x . Da blir også egenfunksjonen $\psi_n(x) = v_n(x) \exp(-x^2/2)$ en like funksjon av x (symmetrisk).

For

$$\epsilon = 3, 7, 11, \dots = \underline{2n + 1} \quad (\text{med } n = 1, 3, 5, \dots)$$

er det den *andre* rekka som bryter av, og vi må sette $a_0 = 0$. Da får vi et polynom $v(x)$ med bare *odde* potenser av x og en antisymmetrisk egenfunksjon $\psi_n(x) = v_n(x) \exp(-x^2/2)$.

I begge tilfellene er energieigenverdiene gitt ved

$$E_n = \frac{1}{2} \hbar \omega \cdot \epsilon = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{T3.30})$$

Dermed har vi funnet det lenge omtalte (ikke-degenererte) energispektret for den harmoniske oscillatoren, og vi har påvist at symmetriegenskapene for egenfunksjonene er som annonsert tidligere.

Polynomene $v_n(x)$ kan vi nå enkelt finne fra formelen ovenfor for $v(x)$, ved å sette $\epsilon = 1, 3, 5$ osv. Når vi normerer disse uttrykkene for v_n slik at den høyeste potensen blir $2^n x^n$, kalles disse funksjonene for **Hermite-polynom**, $H_n(x)$. En rekke nyttige formler for disse Hermite-polynomene finner du i avsnitt 3.5.3 i Hemmer, som også gir enkle bevis for disse formlene. Én av disse formlene er

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n^2(x) e^{-x^2} dx = 2^n n! \sqrt{\pi}.$$

Denne kan vi bruke til å vise at de *normerte* energi-egenfunksjonene, uttrykt ved posisjonsvariabelen q , er

$$\psi_n(q) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-m\omega q^2/2\hbar} H_n\left(\frac{q}{\sqrt{\hbar/m\omega}}\right), \quad (\text{T3.31})$$

hvor

$$\begin{aligned} H_0(x) &= 1, \\ H_1(x) &= 2x, \\ H_2(x) &= 4x^2 - 2, \\ H_3(x) &= 8x^3 - 12x, \\ H_4(x) &= 16x^4 - 48x^2 + 12, \quad \text{osv.} \end{aligned} \quad \left(x = q\sqrt{m\omega/\hbar}\right)$$

Noen små oppgaver:

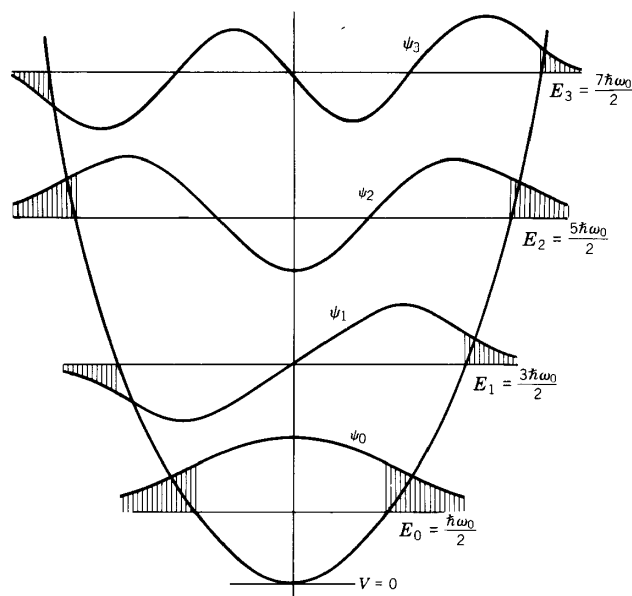
- 3.1** Vis at det neste polynomet i rekken er $H_5(x) = 32x^5 - 160x^3 + 120x$.
- 3.2** Hva er forventningsverdiene $\langle x \rangle_{\psi_n}$ for egenfunksjonene $\psi_n(x)$?
- 3.3** Hva skjer med energinivåene om vi firedobler partikkelmassen?
- 3.4** Hva skjer med energinivåene om vi øker fjærkonstanten k i potensialet $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$, dvs gjør potensialet “trangere”?
- 3.5** Det kan vises at de ikke-hermiteske operatorene

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} q + \frac{i\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega}} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(q + \frac{\hbar}{m\omega} \frac{\partial}{\partial q}\right) \quad \text{og} \quad \hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(q - \frac{\hbar}{m\omega} \frac{\partial}{\partial q}\right)$$

har egenskapene

$$\hat{a}\psi_n(q) = \sqrt{n}\psi_{n-1}(q) \quad \text{og} \quad \hat{a}^\dagger\psi_n(q) = \sqrt{n+1}\psi_{n+1}(q).$$

Kontrollér at disse virker som de skal for $n = 0$, dvs gir $\hat{a}\psi_0 = 0$ og $\hat{a}^\dagger\psi_0 = \psi_1$.



Figuren ovenfor viser de fire første egenfunksjonene. De skraverete områdene viser hvor hver egenfunksjon “trenger inn i” de respektive forbudte områdene (utenfor de klassiske vendepunktene). Legg også merke til at ψ''/ψ skifter fortegn ved vendepunktene: Mellom vendepunktene krummer egenfunksjonene *mot* x -aksen. I de forbudte områdene krummer funksjonene *bort* fra aksen. Dette er helt i tråd med egenverdiligningen

$$\psi''/\psi = x^2 - \epsilon = x^2 - 2n - 1,$$

som forteller at vendepunktene opptrer for

$$q\sqrt{m\omega/\hbar} = x = \pm\sqrt{\epsilon} = \pm\sqrt{2n+1}.$$

I Hemmers avsnitt 3.5.3 kan du som sagt lese mer om Hermite-polynomenes egenskaper. Men det som er enda viktigere er avsnitt 3.5.5, om

3.4.d Sammenligning med klassisk harmonisk oscillator

I dette avsnittet i Hemmer vil du oppdage at det er et visst slektskap mellom sannsynlighetstettheten for en energieigenfunksjon $\psi_n(q)$ og den *klassiske* sannsynlighetstettheten for en partikkel som svinger med energien E_n . Den klassiske sannsynlighetstettheten er størst nær de klassiske vendepunktene, hvor partikkelen har lavest hastighet. Den kvantemekaniske sannsynlighetstettheten oscillerer som funksjon av x , og maksimaene av disse oscillasjonene er også størst nær vendepunktene.

Men samtidig er det en vesentlig forskjell mellom den klassiske svingningen og sannsynlighetstettheten for en energiegentilstand: Den siste er stasjonær, den flytter ikke på seg, i motsetning til den svingende partikkelen som vi kan observere for en makroskopisk svingetilstand. Konklusjonen er at en klassisk makroskopisk svingning må svare til en ikke-stasjonær løsning av den tidsavhengige Schrödingerligningen. En slik løsning finner du side 59 hos Hemmer:

Anta at en harmonisk oscillator (partikkel med masse m i potensialet $V(q) = \frac{1}{2}m\omega^2 q^2$) prepareres i begynnelsestilstanden

$$\Psi(q, 0) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-m\omega(q-q_0)^2/2\hbar},$$

ved $t = 0$, altså med en bølgefunksjon med samme form som grunntilstanden, men sentrert i posisjonen q_0 istedenfor i origo. Som vi har sett i øvingssammenheng, er forventningsverdiene av impuls og posisjon i denne begynnelsestilstanden $\langle q \rangle_0 = q_0$ og $\langle p \rangle_0 = 0$. Dessuten er usikkerhetsproduktet “minimalt”:

$$\Delta q = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}, \quad \Delta p = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}, \quad \Delta q \Delta p = \frac{1}{2}\hbar.$$

Løsningen av Schrödingerligningen for $t > 0$ kan alltid skrives som en superposisjon av stasjonære tilstander for oscillatoren,

$$\Psi(q, t) = \sum_n c_n \psi_n(q) e^{-iE_n t/\hbar}.$$

Ved å sette $t = 0$ i denne utviklingsformelen ser vi (jf Tillegg 2) at koeffisienten c_n er projeksjonen av begynnelsestilstanden $\Psi(q, 0)$ på energiegentilstanden $\psi_n(q)$:

$$c_n = \langle \psi_n, \Psi(0) \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(q) \Psi(q, 0) dq.$$

Ved å regne ut disse koeffisientene og sette inn går det an å finne en eksplisitt formel for den tidsavhengige bølgefunksjonen. Denne formelen er litt ugjennomskuelig, men formelen for sannsynlighetstettheten er veldig enkel:

$$|\Psi(q, t)|^2 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-m\omega(q-q_0 \cos \omega t)^2/\hbar}.$$

Som vi ser har denne fortsatt Gauss-form, men sentrert rundt punktet $q_0 \cos \omega t$, som da blir forventningsverdien av posisjonen ved tiden t :

$$\langle q \rangle_t = q_0 \cos \omega t.$$

Dessuten er bredden hele tiden den samme, slik at usikkerheten Δq hele tiden beholder den verdien den hadde ved $t = 0$. Det viser seg at det samme gjelder usikkerheten Δp , og dermed også usikkerhetsproduktet $\Delta q \Delta p$, som forblir “minimalt” hele tiden. I denne spesielle tilstanden har vi altså en bølgepakke som oscillerer fram og tilbake i potensialet på “klassisk” manér, med konstant “bredde”. Posisjonen er riktignok ikke skarp, og det er heller ikke energien. Men om vi velger makroskopiske verdier for amplituden q_0 og/eller massen m , så finner vi at de relative usikkerhetene, $\Delta q/q_0$ og $\Delta E/\langle E \rangle$, blir neglisjerbare. I denne makroskopiske grensen er det altså overensstemmelse mellom den klassiske beskrivelsen av en slik oscillasjon og den kvantemekaniske. Vi kan altså betrakte klassisk mekanikk som et grensetilfelle av kvantemekanikk.

3.4.e Eksempler

Naturen er full av systemer som er slik at små avvik fra likevekt kan betraktes som harmoniske oscillasjoner. Som et eksempel kan vi tenke på en partikkel som beveger seg i et endimensjonalt potensial $V(q)$, med en stabil likevektsposisjon q_0 . Om vi Taylor-utvikler $V(q)$ omkring q_0 , så er den deriverte lik null i likevektsposisjonen [$V'(q_0) = 0$], slik at

$$\begin{aligned} V(q) &= V(q_0) + (q - q_0)V'(q_0) + \frac{1}{2!} (q - q_0)^2 V''(q_0) + \dots, \\ &= V(q_0) + \frac{1}{2} k (q - q_0)^2 + \dots \quad [\text{med } k \equiv V''(q_0)]. \end{aligned}$$

Som indikert i figuren nedenfor vil $V(q)$ da være tilnærmet harmonisk (parabolsk) for små utsving omkring likevektsposisjonen;¹⁶

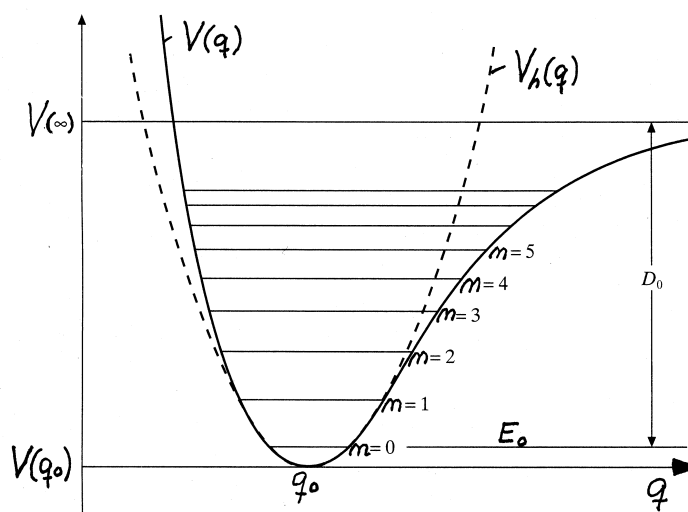
$$V(q) \approx V(q_0) + \frac{1}{2}k(q - q_0)^2 \equiv V_h(q) \quad (\text{for små } |q - q_0|).$$

I denne tilnærmelsen blir energinivåene ekvidistante,

$$E_n^h = V(q_0) + \hbar\omega(n + \frac{1}{2}), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad \omega = \sqrt{k/m} = \sqrt{V''(q_0)/m},$$

og energiegenfunksjonene er de samme som vi fant i pkt. c, bare forskjøvet til den nye likevektsposisjonen q_0 . For eksempel blir grunntilstanden i denne tilnærmelsen

$$\psi_0^h(q) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-m\omega(q-q_0)^2/2\hbar}.$$



For at den harmoniske tilnærmelsen skal være brukbar for en gitt energi E_n^h og bølgefunksjon $\psi_n^h(q)$, kreves det at $V(q)$ avviker lite fra parabelen $V_h(q)$ i det området hvor sannsynlighetstettheten $|\psi_n(q)|^2$ er vesentlig forskjellig fra null, dvs i det klassisk tillatte området mellom vendepunktene og et stykke utenfor disse; partikkelen må “oppleve” at kraften stort sett er harmonisk.

Funksjonen $V(q)$ i figuren skal egentlig forestille den potensielle energien som kan assosieres med vibrasjonsfrihetsgraden i et to-atomig molekyl. (q er da avstanden mellom de to kjernene og q_0 er likevektsavstanden.) For små og avtagende q ser vi at potensialet vokser raskere enn parabelen. Molekylet motsetter seg å bli komprimert, fordi dette “tvinger de to elektronskyene nærmere hverandre”.

For $q > q_0$ ser vi at molekylet også motsetter seg å bli “tøyd”, men potensialet øker ikke så fort med avstanden som den harmoniske tilnærmelsen tilsier. Mens den harmoniske tilnærmelsen sier at kraften øker som $|F| = dV^h/dq = m\omega^2 q$, ser vi at den virkelige kraften ganske raskt avtar, og går mot null, på en slik måte at det koster en endelig energi $D_0 = V(\infty) - E_0$ å rive molekylet i stykker (når det på forhånd er i grunntilstanden). Dette er den såkalte **dissosiasjonsenergien**.

¹⁶Vi forutsetter her at $V''(q_0) > 0$.

For de laveste n -verdiene, hvor $V(q)$ og $V_h(q)$ er nesten sammenfallende mellom vendepunktene, vil den harmoniske tilnærmelsen fungere bra, og energinivåene vil være tilnærmet ekvidistante. For høyere n , hvor det virkelige potensialet $V(q)$ er mer “romslig” enn parabellen $V_h(q)$, vil nivåene ligge tettere enn ifølge den harmoniske tilnærmelsen, slik figuren illustrerer. Dette kan vi forstå ut fra krumningsbetraktninger: Med mer plass til rådighet rekker $\psi(q)$ å “lage flere nullpunkter” (høyere n) for en gitt energi.

Avstandene mellom vibrasjonsnivåene for to-atomige gasser som f.eks O_2 er typisk av størrelsesorden $0.1 - 0.2$ eV, og mye større enn de energibeløpene ($10^{-4} - 10^{-3}$ eV) som trengs for å eksitere rotasjonsfrihetsgraden. I statistisk fysikk lærer en at sannsynligheten for å finne et molekyl eksitert (f.eks til 1. eksiterte vibrasjonsnivå) er neglisjerbar når $k_B T \ll \hbar\omega$, dvs når temperaturen T er mye lavere enn

$$\frac{\hbar\omega}{k_B} \sim \frac{0.1 \text{ eV}}{8.6 \cdot 10^{-5} \text{ eV/K}} \sim 10^3 \text{ K}.$$

Ved å måle emisjons-spektra fra varme gasser finnes én spektrallinje for hver overgang mellom nabonivåer. En har nemlig en **utvalsregel** $\Delta n = \pm 1$ for strålingsoverganger mellom vibrasjonsnivåer. Et slikt målt linjespektrum vil derfor gi beskjed om alle avstandene mellom nabonivåer. Slike spektra kompliseres i realiteten av at det samtidig skjer en endring av rotasjonstilstanden for molekylet (rotasjons-vibrasjons-kobling).

For molekyler med mer enn to atomer blir bevegelsesmønstrene mer kompliserte. De forskjellige delene av et sammensatt molekyl kan utsettes for tøyning, bøyning, vridning osv. Men slike kompliserte bevegelsesmønstre kan alle “løses opp” i såkalte **normale moder**, som svarer til et sett av uavhengige oscillatorer.

Det samme gjelder for faste stoffer, herunder krystaller. Her vil hver normal mode svare til en stående bølge med en viss bølgelengde og en viss frekvens. I de mest høyfrekvente modene (korte bølgelengder) “svinger bare et fåtall atomer i takt; i de mest lavfrekvente modene (lange bølgelengder) svinger store deler av krystallen i fase.



Longitudinale (a) og transversale (b) moder med bølgelengde $8a$ i en endimensjonal mono-atomær krystall. Pilene markerer atomenes utsving fra likevektsposisjonene.

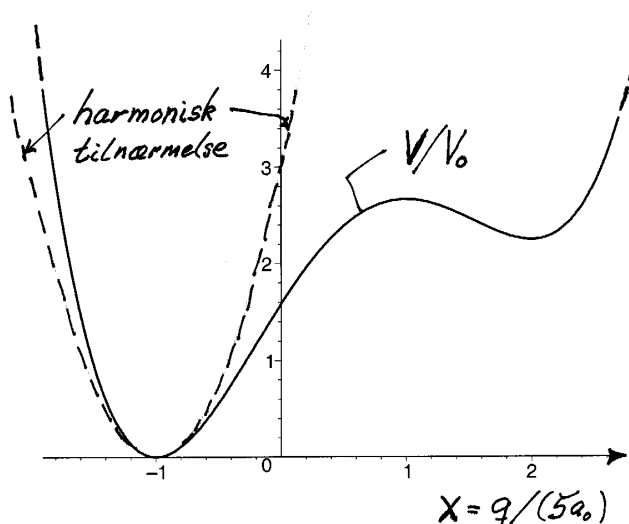
Også her er de normale modene definert slik at de kan behandles som et sett med uavhengige oscillatorer. Men nå er antallet så stort at spektrene vil være praktisk talt kontinuerlige. (Jf diskusjonen av stråling fra svarte legemer i Tillegg 1.)

I noen tilfeller, f.eks for lydbølger, kan vi behandle disse oscillasjonene klassisk. I andre tilfeller, f.eks når en krystall er nedkjølt til veldig lave temperaturer, vil kvantetallene for hver oscillator være små; kanskje er det bare noen få moder som er eksitert. Vi må da behandle systemet kvantemekanisk, og ta hensyn til at energiutveksling skjer i form av kvanta $\hbar\omega$. Lydsvingningene er altså kvantisert.

Et lignende sett av stående bølger kommer inn i bildet når vi skal se på elektromagnetiske bølger i en hulromsresonator. I noen tilfeller (f.eks i mikrobølgeovnen) kan slike bølger

behandles klassisk, der hver normal mode (stående bølge) beskrives med matematikken til en klassisk harmonisk oscillator. Men visse egenskaper ved hulromsstråling kan bare forstås ved at en behandler disse oscillasjonene kvantemekanisk, slik Planck og Einstein kom på sporet av for vel 100 år siden. Det er denne kvantiseringen av de elektromagnetiske svingemodene som leder fram til **foton-beskrivelsen** av det elektromagnetiske feltet. En mode med frekvens ω og energi $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ inneholder n fotoner med energi $\hbar\omega$ (i tillegg til “nullpunkts-energien” $\frac{1}{2}\hbar\omega$).

Tilsvarende leder kvantiseringen av krystallsvingningene fram til begrepet **fononer** (lydkvanter), som er analoge med fotonene.



En liten oppgave:

Et elektron beveger seg i potensialet

$$V(q) = V_0 \left[\frac{x^4}{4} - \frac{2x^3}{3} - \frac{x^2}{2} + 2x + \frac{19}{12} \right], \quad \text{der} \quad x \equiv \frac{q}{5a_0} \quad \text{og} \quad V_0 = \frac{6\hbar^2}{m_e a_0^2}.$$

Her er a_0 Bohr-radien, slik at $V_0 = 12 \cdot \hbar^2 / (2m_e a_0^2) = 12 \cdot 13.6 \text{ eV} = 12 \text{ Rydberg}$. Potensialet har et minimalpunkt for $x = x_0 = -1$ (dvs for $q = q_0 = -5a_0$).

- Kontrollér dette ved å regne ut dV/dq og d^2V/dq^2 i dette punktet.
- Vis at energien til grunntilstanden blir $E_0 \approx V_0/10$, dersom du bruker den “harmoniske tilnærmelsen” (se figuren).
- Tegn inn “energilinja” E_0 i diagrammet. Tror du resultatet for E_0 er rimelig nøyaktig sammenlignet med den eksakte verdien for grunntilstandsenergien for potensialet V ?

3.5 Fri partikkel. Bølgepakker

3.5.a Stasjonære tilstander for fri partikkel

I klassisk mekanikk er en fri partikkel (upåvirket av krefter) noe av det enkleste vi kan tenke oss; jf Newtons 1. lov. Kvantemekanisk, derimot, byr også den frie partikkelen på endel utfordringer, slik Griffiths påpeker s 44–50.

Vi betrakter en fri partikkel i én dimensjon, som svarer til $V(x) = 0$. I dette tilfellet er det veldig enkelt å løse den tidsuavhengige Schrödingerligningen,

$$\widehat{H} \psi(x) = E \psi(x),$$

som her tar formen

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} = -k^2 \psi, \quad \text{med} \quad k \equiv \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}.$$

Som løsninger av denne kan vi godt bruke $\sin kx$ og $\cos kx$ (som vi kjenner igjen fra behandlingen av den endimensjonale boksen, også kalt en uendelig dyp potensialbrønn), men vi skal her i stedet bruke $\exp(\pm ikx)$.

Disse løsningene kommer vi også fram til dersom vi starter med planbølgene

$$\psi_p(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{ipx/\hbar}, \quad (\text{T3.32})$$

som er egenfunksjoner til impulsoperatoren \widehat{p}_x : Siden

$$\widehat{p}_x \psi_p(x) = p \psi_p(x),$$

har vi

$$\widehat{H} \psi_p(x) = \frac{\widehat{p}_x^2}{2m} \psi_p(x) = \frac{p^2}{2m} \psi_p(x).$$

Planbølgen $\psi_p(x)$ er altså en energieigenfunksjon (for den frie partikkelen) med energi E dersom vi velger de to p -verdiene

$$p = \pm \sqrt{2mE} = \pm \hbar k.$$

Uansett hvilken av disse to framgangsmåtene vi velger, så kommer vi fram til at det eksisterer *to* ubundne energiegentilstander for hver energi $E > 0$ (degenerasjonsgrad 2). For $E = 0$ har vi bare én løsning, $\psi = (2\pi\hbar)^{-1/2} = \text{konstant}$. Energi-*spektret* er altså $E \in [0, \infty)$. Dette betyr at det fullstendige settet $\psi_p(x)$ av impulseigenfunksjoner også er egenfunksjoner til Hamilton-operatoren $\widehat{H} = \widehat{p}_x^2/2m$ for den frie partikkelen. Og det tilsvarende settet av stasjonære løsninger,

$$\Psi_p(x, t) = \psi_p(x) e^{-i(p^2/2m)t/\hbar}, \quad (E = p^2/2m),$$

(T3.33)

er også fullstendig.

3.5.b Ikke-stasjonære tilstander for fri partikkel

Siden planbølgene $\psi_p(x)$ forlanger deltafunksjons-normering (avsn 2.4.4 i Hemmer), kan ingen av de stasjonære tilstandene $\Psi_p(x, t)$ ovenfor representere en fysisk realiserbar tilstand, strengt tatt. En lokalisert (kvadratisk integrerbar) tilstand er derfor nødvendigvis ikke-stasjonær. Inspirert av diskusjonen av ikke-stasjonære tilstander i avsnitt 2.7.b i Tillegg 2 skjønner vi at bølgefunksjonen $\Psi(x, t)$ for en slik tilstand kan finnes dersom begynnelsestilstanden $\Psi(x, 0)$ spesifiseres, på følgende måte:

(i) $\Psi(x, t)$ kan alltid skrives som en superposisjon av de stasjonære løsningene $\Psi_p(x, t)$ (fordi disse som nevnt danner et fullstendig sett):

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p) \Psi_p(x, t) dp. \quad (\text{T3.34})$$

[Her spiller koeffisientfunksjonen $\phi(p)$ rollen som utviklingskoeffisient.]

(ii) Ved å sette $t = 0$ har vi

$$\Psi(x, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p) \psi_p(x) dp.$$

Dette betyr at $\phi(p)$ er projeksjonen av begynnelsestilstanden $\Psi(x, 0)$ på $\psi_p(x)$,

$$\phi(p) = \langle \psi_p, \Psi(0) \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \psi_p^*(x) \Psi(x, 0) dx,$$

og denne kan vi jo beregne når $\Psi(x, 0)$ er spesifisert.

(iii) Ved å sette $\phi(p)$ tilbake i integralet for $\Psi(x, t)$ kan vi finne ut hvordan $\Psi(x, t)$ utvikler seg som funksjon av tiden. Denne metoden skal vi bruke i en øvingsoppgave til å studere oppførselen til bølgepakker for frie partikler.¹⁷

3.5.c Fasehastighet. Dispersjon

Selv om vi lar være å spesifisere $\Psi(x, 0)$, er det mulig å undersøke endel generelle egenskaper hos fri-partikkel-bølgefunksjonen

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p) \Psi_p(x, t) dp. \quad (\text{T3.35})$$

Vi merker oss først at planbølgen $\Psi_p(x, t)$ har formen

$$e^{i(px-Et)/\hbar} = e^{i(kx-\omega t)},$$

med

$$k = \frac{p}{\hbar} \quad \text{og} \quad \omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m}. \quad (\text{T3.36})$$

¹⁷Ved å sammenligne (T3.34) med definisjonen av impulsbølgefunksjonen $\Phi(p, t)$ [se avsnitt 2.5.f i Tillegg 2],

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(p, t) \psi_p(x) dp,$$

ser vi at

$$\Phi(p, t) = \phi(p) e^{-i(p^2/2m)t/\hbar},$$

slik vi også kom fram til vha Schrödingerligningen i impulsrepresentasjonen (se eksemplet til slutt i avsnitt 2.6 i Tillegg 2). Fra (T3.34) følger det altså at sannsynlighetstettheten i impulsrommet er tidsuavhengig, gitt ved $|\phi(p)|^2$, for den frie partikkelen: Impulsegenskapene (og energiegenskapene) for en fri partikkel endrer seg ikke med tiden.

Digresjon: Elektromagnetiske bølger i vakuum

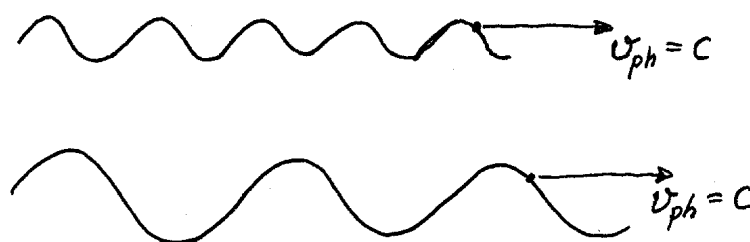
La oss gjøre en liten digresjon og for et øyeblikk betrakte elektromagnetiske bølger i vakuum ($\omega = c|\mathbf{k}|$). En monokromatisk bølge som forplanter seg i x -retningen beskrives da essensielt av den harmoniske bølgen

$$e^{i(kx - \omega t)} = e^{ik(x - ct)},$$

eller egentlig av realdelen av denne, $\cos k(x - ct)$. Bølgetoppene beveger seg med hastigheten

$$v_f = \frac{\omega}{k} = c.$$

Denne såkalte **fasehastigheten** er uavhengig av bølgetallet k ; bølger med forskjellig bølgelengde beveger seg alle med den samme (fase)hastigheten c :



Ved å superponere slike plane harmoniske bølger med forskjellige bølgelengder kan vi lage oss en **bølgepakke**,

$$f(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k) e^{i(kx - \omega t)} dk = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k) e^{ik(x - ct)} dk. \quad (\text{T3.37})$$

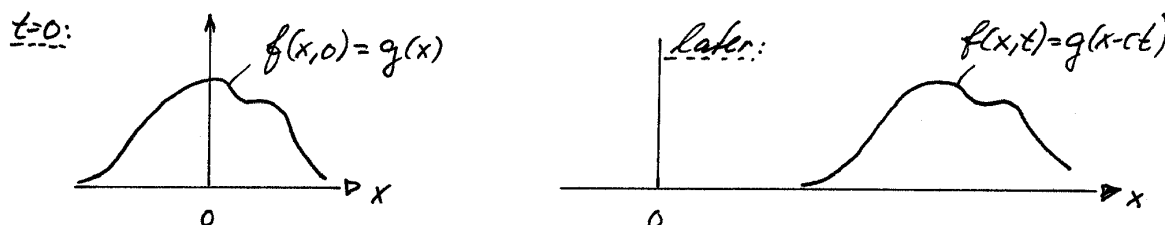
Siden hver komponentbølge i denne superposisjonen beveger seg med samme hastighet c , skjønner vi at også den resulterende *summen* (integralet) av disse komponentbølgene vil bevege seg med *uendret form*.

Dette kan også bekreftes vha formelen ovenfor. Dersom vi kaller bølgeformen for $t = 0$,

$$f(x, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k) e^{ikx} dk$$

for $g(x)$, ser vi av høyresiden i (T3.37) at

$$f(x, t) = g(x - ct) :$$



Dette illustreres av figuren, hvor diagrammet til venstre viser bølgefunksjonen ved $t = 0$. I figuren til høyre, ved tiden t , finner vi den samme bølgeformen, forskjøvet et stykke ct til høyre.

En plan elektromagnetisk bølgepuls forplanter seg altså med uendret form i vakuum. Og vi merker oss at dette kommer av at fasehastigheten $v_f = \omega/k = c$ i vakuum er uavhengig av k .

I en optisk fiber, derimot, vil fasehastigheten avhenge av bølgelengden. Hver enkelt harmonisk komponentbølge vil da forplante seg med litt forskjellig hastighet. Dette resulterer i at pulsen *endrer form* under propageringen. Om vi f.eks starter med en *skarp* puls (som svarer til et **bredt bånd** av bølgelengder), så vil pulsen spre seg utover med tiden. Dette kalles **dispersjon**, og er grunnen til at vi kaller sammenhengen

$$\omega = \omega(k)$$

for **dispersjonsrelasjonen** for det aktuelle mediet.

3.5.d Gruppehastighet

La oss nå etter denne digresjonen se hva vi kan lære fra dispersjonsrelasjonen

$$\omega = \frac{\hbar}{2m} k^2$$

for den harmoniske fri-partikkel-bølgen (de Broglie-bølgen)

$$\Psi_p(x, t) = \psi_p(x) e^{-i(p^2/2m)t/\hbar} \propto e^{i(kx - \omega t)}.$$

Vi merker oss først at fasehastigheten til denne harmoniske bølgen,

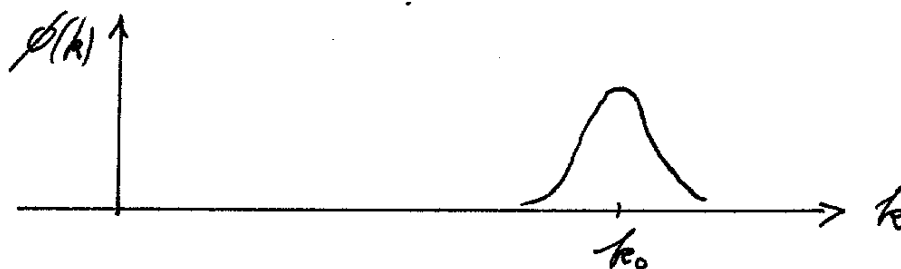
$$v_f = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m} = \frac{p}{2m},$$

kommer ut som halvparten av den klassiske hastigheten p/m . Dette gir ingen grunn til bekymring. Fasehastigheten er i likhet med selve fasen til de Broglie-bølgefunksjonen ingen observabel. Og det samme gjelder fasene til alle andre kvantemekaniske bølgefunksjoner som vi støter på. Dette er en vesentlig forskjell mellom kvantemekaniske bølgefunksjoner og klassiske bølger som f.eks en havbølge.

Vi legger også merke til at fasehastigheten avhenger sterkt av bølgetallet ($\propto k$). For å undersøke hva dette innebærer kan vi lage oss en bølgepakke

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k) e^{i(kx - \omega t)} dk, \quad \omega = \omega(k), \quad (\text{T3.38})$$

der vi tenker oss at bølgetall-fordelingen $\phi(k)$ er rimelig skarp, rundt en sentral verdi k_0 . Dette svarer til en forholdsvis skarp impulsfordeling omkring en sentral impulsverdi $p_0 = \hbar k_0$:



Vi antar altså at vidden (Δk) av denne fordelingen er forholdsvis liten. Det er da naturlig å betrakte Taylor-utviklingen av $\omega(k)$ omkring den sentrale verdien k_0 ,

$$\omega(k) = \omega(k_0) + (k - k_0) \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} + \frac{1}{2!} (k - k_0)^2 \left. \frac{d^2\omega}{dk^2} \right|_{k_0}.$$

I dette tilfellet er det ingen høyere-ordens ledd i denne utviklingen, fordi ω går som k^2 . Vi finner

$$\begin{aligned} \omega(k_0) &= \frac{\hbar}{2m} k_0^2 \equiv \omega_0, \\ \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} &= \frac{\hbar}{m} k_0 \equiv v_g, \\ \left. \frac{d^2\omega}{dk^2} \right|_{k_0} &= \frac{\hbar}{m}. \end{aligned}$$

Med denne notasjonen er den eksakte utviklingen av $\omega(k)$ omkring k_0

$$\omega(k) = \omega_0 + v_g(k - k_0) + \frac{\hbar}{2m}(k - k_0)^2. \quad (\text{T3.39})$$

Siden vi regner med en smal fordeling $\phi(k)$, vil det siste leddet være forholdsvis lite. La oss derfor droppe dette leddet og prøve med tilnærmelsen

$$\omega(k) \approx \omega_0 + v_g(k - k_0). \quad (\text{T3.40})$$

Ved å sette dette inn i integralet for $\Psi(x, t)$, og flytte faktorene som ikke avhenger av integrasjonsvariabelen k utenfor integralet, finner vi at

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &\approx \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k) e^{i(kx - [\omega_0 + v_g(k - k_0)]t)} dk \\ &= e^{-i\omega_0 t} e^{ik_0 v_g t} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k) e^{ik(x - v_g t)} dk. \end{aligned} \quad (\text{T3.41})$$

For $t = 0$ forenkler dette seg til

$$\Psi(x, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k) e^{ikx} dk \equiv g(x).$$

Inspirert av digresjonen ovenfor har vi kalt dette siste integralet for $g(x)$. Ved å sammenligne dette med det siste integralet i (T3.41) ser vi da at det sistnevnte er $g(x - v_g t) = \Psi(x - v_g t, 0)$. Uten egentlig å gjøre noe regning har vi altså funnet at tilnærmelsen $\omega \approx \omega_0 + v_g(k - k_0)$ svarer til resultatet

$$\Psi(x, t) \approx e^{-it(\omega_0 - k_0 v_g)} \Psi(x - v_g t, 0). \quad (\text{T3.42})$$

Bortsett fra fasefaktoren, som er uten betydning, ser vi at bølgepakken har samme form som for $t = 0$; den har bare beveget seg en distanse $v_g t$ i løpet av tiden t . Dette betyr at størrelsen v_g , som vi definerte som $v_g \equiv d\omega/dk|_{k_0}$, er hastigheten til bølgepakken, eller bølge-“gruppen”, som vi også kaller den. Fra dette resonnementet kan vi konkludere med

følgende regel:

En bølgepakke med en smal fordeling $\phi(k)$ av bølgetall sentrert rundt verdien k_0 vil bevege seg med **gruppeshastigheten**

$$v_g = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0}. \quad (\text{T3.43})$$

I det aktuelle tilfellet, med dispersjonsrelasjonen $\omega = \hbar k^2/2m$, finner vi at gruppeshastigheten er

$$v_g = \frac{\hbar k_0}{m}. \quad (\text{T3.44})$$

Vi merker oss at dette er den klassiske hastigheten til en partikkel med impulsen $p_0 = \hbar k_0$, som svarer til den sentrale Fourier-komponenten i bølgepakken.

Vi ser også at det å neglisjere det kvadratiske leddet i utviklingen

$$\omega(k) = \omega(k_0) + (k - k_0) \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} + \frac{1}{2!} (k - k_0)^2 \left. \frac{d^2\omega}{dk^2} \right|_{k_0}$$

er det samme som å se bort fra dispersjonen til bølgepakken. Dersom det kvadratiske leddet tas med (som i det aktuelle tilfellet svarer til å bruke den eksakte dispersjonsrelasjonen $\omega(k) = \hbar k^2/2m$), finner en at bølgepakken endrer form med tiden, samtidig som den propagerer.

Dersom en velger en smal fordeling $\phi(k)$ (liten $\Delta p_x = \hbar \Delta k$), som svarer til en lang bølgepakke (stor Δx), så tar det lang tid før dispersjonen (spredningen) av bølgepakken gjør seg gjeldende.

Insisterer en derimot på en *kort* bølgepakke i x -rommet (liten Δx), så krever dette en *bred* fordeling av bølgetall (stor $\Delta p_x = \hbar \Delta k$). Dispersjonen vil da bli mye sterkere og vil vise seg i løpet av kort tid. (Jf øving.)

Matlab-programmet “free_particle.m” gir en animasjon av bevegelsen til en bølgepakke for en fri partikkel. Her kan du se både dispersjonen og det at fasehastigheten er langsommere enn gruppeshastigheten (halvparten).

3.6 Spredning i én dimensjon

[Hemmer 3.6, B&J 4.2–4.4]

3.6.a Hva er spredning i én dimensjon?

Spredning er typisk en tredimensjonal prosess: En lysstråle som treffer et støvkorn gir spredt lys i alle retninger. Og når en flaggermus sender en lydbølge mot et insekt, vil den spredte lyden fordele seg over alle retninger. Denne retningsfordelingen av den spredte bølgen avhenger selvsagt av form og størrelse på insektet og av bølgelengden som flaggermusen bruker.

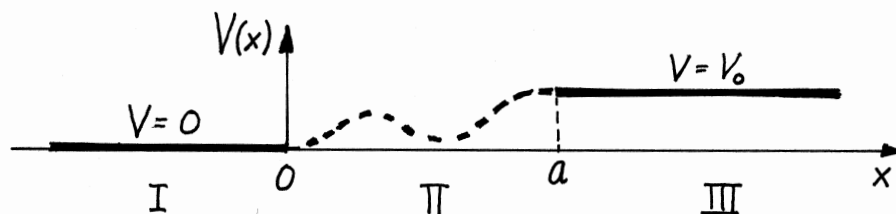
Spredning brukes til strukturundersøkelser på mange områder, av objekter med størrelse som varierer fra makroskopiske dimensjoner, via mikroskopiske, og helt ned til sub-atomære

partikler. For eksempel kan strukturen til et atom av et bestemt slag studeres ved å bombardere det med prosjektilpartikler som elektroner. Vinkelfordelingen av de spredte elektronene gir da informasjon om atomets struktur. Denne vinkelfordelingen avhenger nemlig av potensialet $V(\mathbf{r})$ som representerer vekselvirkningen mellom prosjektilpartikkelen og målpartikkelen (target), og av energien til prosjektilpartiklene.

Kvantemekanisk behandler vi slike prosesser vha en bølgefunksjon. Denne består av en planbølge som representerer de innkommende prosjektilpartiklene, og en vinkelavhengig utgående kulebølge som representerer de spredte partiklene. Bølgelengden $\lambda = h/p$ er bestemt av energien til prosjektilene. Kvadratet av den spredte bølgen gir beskjed om hvordan sannsynligheten for forskjellige spredningsvinkler fordeler seg.

Hva er spredning i én dimensjon? Som et eksempel kan vi tenke på en plan lydbølge som faller normalt inn mot en plan gipsplate. Et annet eksempel er lys som faller normalt inn mot en vindusflate. For hvert foton er det da bare to mulige retninger ut: Enten rett fram (transmisjon) eller tilbake (refleksjon). (Vi ser her bort fra muligheten for absorpsjon.) Denne prosessen kan behandles som et endimensjonalt problem, der innkommende, transmitterte og reflekterte fotoner representeres av plane bølger. Tilsvarende vil en elektronstråle som faller normalt inn mot en plan metallflate oppleve et potensial $V(x)$ som avhenger bare av én variabel. En slik prosess kan behandles ved hjelp av en bølgefunksjon som avhenger bare av x , og gir dermed en endimensjonal problemstilling.

3.6.b Spredningsberegning basert på energiegenfunksjoner



Vi starter med å ta for oss endel generelle trekk ved en spredningsprosess der partikler kommer inn fra venstre (område I i figuren, hvor $V(x) = 0$), møter et område II ($0 < x < a$) hvor potensialet er uspesifisert (og hvor kraften $F_x = dV(x)/dx$ er forskjellig fra null), og deretter enten reflekteres tilbake til område I eller transmitteres til område III ($x > a$), hvor $V(x) = V_0$, der V_0 enten er positiv, negativ eller lik null. Vi skal etter hvert ta for oss modellpotensialer som er konstante også i område II, slik at vi får å gjøre med stykkevis konstante potensialer. Men i dette avsnittet trenger vi ikke å gjøre slike antakelser.

Den enkleste måten å behandle slike spredningsprosesser på er vha energiegenfunksjoner $\psi_E(x)$, som svarer til stasjonære løsninger $\Psi_E(x, t) = \psi_E(x)e^{-iEt/\hbar}$ av Schrödingerligningen. Om vi begrenser oss til partikkelenergi E som er større enn $\max(0, V_0)$, kan vi skrive ned bølgetall og generelle løsninger av egenverdiligningen $\widehat{H}\psi_E = E\psi_E$ for områdene I og III:

$$\text{I: } x < 0$$

$$\text{II: } 0 < x < a$$

$$\text{III: } x > a$$

$$\begin{aligned}
\psi_I &= Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & \psi_{II} & \text{avhenger av} & \psi_{III} &= Ce^{ik'x} + De^{-ik'x} \\
& & \text{potensialet} & & & \\
k &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} & & & k' &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - V_0)} \\
\left(E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) & & & & \left(E = V_0 + \frac{(\hbar k')^2}{2m} \right)
\end{aligned}
\tag{T3.45}$$

Når energien E er større enn $\max(0, V_0)$, har vi to uavhengige energieigenfunksjoner for dette potensialet (degenerasjonsgrad 2), og dette gir oss en viss valgfrihet når det gjelder formen på en slik egenfunksjon. Her velger vi å sette koeffisienten D lik null. Grunnen er at det gjenværende leddet $Ce^{ik'x}$ i område III, kombinert med tidsfaktoren $e^{-iEt/\hbar}$, svarer til partikler som beveger seg mot høyre, altså transmitterte partikler med positiv gruppehastighet (jfr avsnittet ovenfor om gruppehastighet). Et ledd $De^{-ik'x}e^{-iEt/\hbar}$ ville svare til partikler med negativ gruppehastighet i område III, og det skal vi jo ikke ha i denne problemstillingen. Her er det ikke noen kraft til høyre for $x = a$, som kan få transmitterte partikler til å snu.

Når vi skyter partikler inn fra venstre (representert ved den innkommende bølgen $Ae^{ikx} \equiv \psi_i$), så vil altså noen (representert ved den transmitterte bølgen $Ce^{ik'x} \equiv \psi_t$) bli transmittert, mens andre (representert ved den reflekterte bølgen $Be^{-ikx} \equiv \psi_r$) blir reflektert. Merk at dette randkravet $D = 0$ gir oss en asymmetrisk bølgefunksjon (også om potensialet $V(x)$ skulle slumpe til å være symmetrisk).

Strømtettheter

For å finne sannsynlighetene for refleksjon og transmisjon kan vi bruke formelen

$$j(x) = \Re \left[\psi^* \frac{\hbar}{im} \frac{\partial \psi}{\partial x} \right] \tag{T3.46}$$

til å beregne strømtetthetene i områdene I og III. Det er lett å beregne den transmitterte strømtettheten $j_t = j_{III}$, siden bølgefunksjonen her er forenklet til $\psi_{III} = Ce^{ik'x}$:

$$j_t = j_{III} = \Re \left[C^* e^{-ik'x} \frac{\hbar}{im} C(ik') e^{ik'x} \right] = \underbrace{|C|^2 \frac{\hbar k'}{m}}_{= |\psi_{III}|^2 v'} \tag{T3.47}$$

(altså tetthet ganger gruppehastighet). Her kan vi med det samme merke oss at den innkommende bølgen $\psi_i = Ae^{ikx}$ og den reflekterte bølgen $\psi_r = Be^{-ikx}$ hver for seg ville gi strømtettheter på henholdsvis

$$j_i = |A|^2 \frac{\hbar k}{m} \quad \text{og} \quad j_r = |B|^2 \frac{\hbar(-k)}{m} \tag{T3.48}$$

i område I, dersom de var alene i dette området. Men siden bølgefunksjonen ψ_I i område I jo er summen av ψ_i og ψ_r , blir selve regnestykket litt mer komplisert:

$$\begin{aligned}
j_I &= \Re \left[(A^* e^{-ikx} + B^* e^{ikx}) \frac{\hbar k}{m} (Ae^{ikx} - Be^{-ikx}) \right] \\
&= |A|^2 \frac{\hbar k}{m} + |B|^2 \frac{\hbar(-k)}{m} + \Re [AB^* e^{2ikx} - A^* B e^{-2ikx}] \frac{\hbar k}{m} \\
&= j_i + j_r = j_i - |j_r|.
\end{aligned}
\tag{T3.49}$$

Her har vi brukt at

$$\Re[z - z^*] = \Re[2i\Im(z)] = 0.$$

Resultatet er altså at strømtettheten i område I er den algebraiske summen av den innkommende strømtettheten j_i (som er positiv, rettet mot høyre) og den reflekterte strømtettheten j_r (som er negativ, rettet mot venstre).

Nedenfor skal vi se at

$$j_I = j_{III}(= j_{II}), \quad (\text{T3.50})$$

og at strømtettheten generelt er uavhengig av x for en stasjonær tilstand i et endimensjonalt potensial $V(x)$, slik vi har her (uavhengig av formen på potensialet). Derfor kan (T3.49) også skrives på formen

$$j_i = |j_r| + j_I = |j_r| + j_t. \quad (\text{T3.51})$$

Denne relasjonen uttrykker at sannsynligheten er **bevart**; den innkommende strømtettheten *deler seg*, i en reflektert strømtetthet (mot venstre) og en transmitteret strømtetthet (mot høyre). Sannsynlighetene for refleksjon og transmisjon må da være hhvis

$$R = \frac{|j_r|}{j_i} \quad \text{og} \quad T = \frac{j_t}{j_i}, \quad (\text{T3.52})$$

og relasjonen

$$R + T = 1 \quad (\text{T3.53})$$

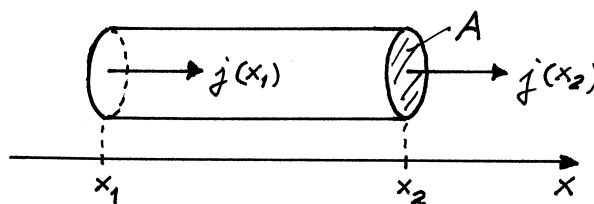
er altså et uttrykk for at sannsynligheten er bevart.

Dette indikerer at nøkkelformelen (T3.50) henger sammen med bevarelsen av sannsynlighet. Dette kan vi bekrefte ved å merke oss at for en stasjonær tilstand $\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$ i én dimensjon er sannsynlighetstettheten $\rho = |\Psi(x, t)|^2 = |\psi(x)|^2$ tidsuavhengig. Fra kontinuitetsligningen $\nabla \cdot \mathbf{j} + \partial\rho/\partial t = 0$, som her tar formen

$$\frac{\partial j}{\partial x} = -\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0,$$

følger det altså at strømtettheten $j(x)$ er x -uavhengig:

$$j(x) = \text{konstant}, \quad (\text{for stasjonær tilstand i én dimensjon}). \quad (\text{T3.54})$$



Dette kan også forstås ut fra figuren ovenfor: Fordi sannsynlighetstettheten $\rho(x)$ er tidsuavhengig kan det ikke skje noen opphopning av sannsynlighet inne i volumet mellom x_1 og x_2 . Følgelig må strømmen inn i volumet, $Aj(x_1)$, være lik strømmen ut, $Aj(x_2)$, for vilkårlige x_1 og x_2 .

For å komme videre, og finne størrelsen av

$$R = \frac{|j_r|}{j_i} = \left| \frac{B}{A} \right|^2 \quad \text{og} \quad T = \frac{j_t}{j_i} = \left| \frac{C}{A} \right|^2 \frac{k'}{k}, \quad (\text{T3.55})$$

må vi selvsagt spesifisere potensialet i område II. Når dette er kjent kan vi i prinsippet finne den generelle løsningen av $\widehat{H}\psi_E = E\psi_E$ for dette området (uttrykt ved to ubestemte koeffisienter, F og G). Ved å bruke kontinuitetsbetingelsene for ψ og ψ' for $x = 0$ og $x = a$ kan vi da bestemme forholdene B/A og C/A (og også F/A og G/A). Dette betyr at hele egenfunksjonen $\psi_E(x)$ er funnet, på en normeringskonstant (A) nær. Men denne har vi heller ikke bruk for i slike problemstillinger. Det er bare forholdene B/A og C/A som teller, og vi kan godt velge f.eks. $A = 1$.

3.6.c Bølgepakke-betraktning

Før vi går løs på konkrete eksempler kan det være instruktivt å vise hvordan en slik spredningsprosess kan forstås vha bølgepakker. En partikkel som kommer inn med noenlunde veldefinert energi kan representeres ved en bølgepakke som er en superposisjon av stasjonære løsninger av den typen vi nettopp har brukt. La oss først repetere hvordan en slik bølgepakke oppfører seg for en fri partikkel. I en øving har vi sett hvordan en stasjonær planbølgeløsning $e^{i(kx-\omega t)}$ kan brukes til å konstruere en bølgepakke

$$\Psi_R(x, t) = \int \phi(k) e^{i(kx-\omega t)} dk, \quad \omega = \hbar k^2/2m. \quad (\text{T3.56})$$

Med en passe skarp fordeling $\phi(k)$ omkring en sentral verdi k_0 , som svarer til energien $E = \hbar^2 k_0^2/2m$,



kan vi lage oss en normert bølgepakke $\Psi_R(x, t)$ som beveger seg mot høyre (R for right), med en posisjon

$$\langle x \rangle_R = \frac{\hbar k_0}{m} t,$$

slik at pakken passerer origo ved $t = 0$.

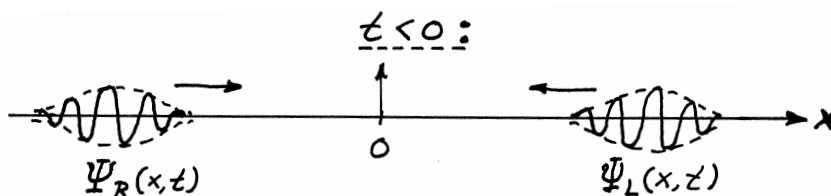
Tilsvarende kan vi bruke den stasjonære planbølgen $e^{i(-kx-\omega t)}$ til å lage en pakke

$$\Psi_L(x, t) = \int \phi(k) e^{i(-kx-\omega t)} dk, \quad (\text{T3.57})$$

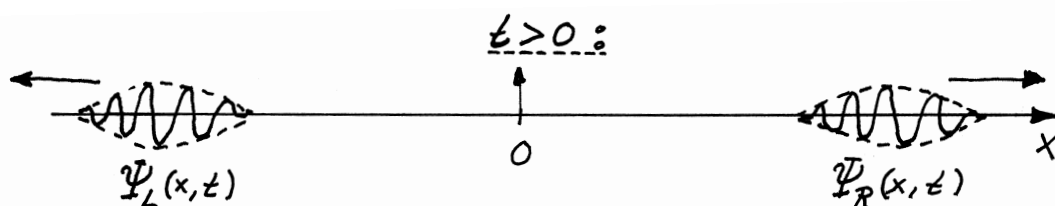
med samme $\phi(k)$ som ovenfor. Dette integralet er det samme som for $\Psi_R(x, t)$, bare med $-x$ istedenfor x . Følgelig er pakken

$$\Psi_L(x, t) = \Psi_R(-x, t) \quad (\text{T3.58})$$

ganske enkelt speilbildet av pakken $\Psi_R(x, t)$; den beveger seg mot *venstre* (L) og passerer origo ved $t = 0$. Det er viktig å legge merke til at $\Psi_R(x, t)$ er (vesentlig) forskjellig fra null bare i et forholdsvis lite område omkring $\langle x \rangle_R$, og tilsvarende for speilbildet $\Psi_L(x, t)$. Den første figuren nedenfor viser de to pakkene for $t < 0$,



og den andre viser situasjonen for $t > 0$:



Disse to pakkene er løsninger av Schrödingerligningen for en fri partikkel, og beveger seg jevnt, i tråd med Newtons 1. lov. Merk også at Schrödingerligningen “bevarer normeringen” av de to pakkene (selv om formen endrer seg noe pga dispersjon).

La oss nå vende tilbake til spredningsproblemet i avsnitt **b**, hvor vi for enkelhets skyld antar at $V_0 = 0$, slik at $V(x) = 0$ både for $x < 0$ og $x > a$. Med $A = 1$ tar den stasjonære løsningen fra **b** da formen

$$\Psi_E(x, t) = \begin{cases} e^{i(kx - \omega t)} + B e^{i(-kx - \omega t)} & \text{for } x < 0 \\ C e^{i(kx - \omega t)} & \text{for } x > a. \end{cases} \quad (\omega = E/\hbar = \hbar k^2/2m), \quad (\text{T3.59})$$

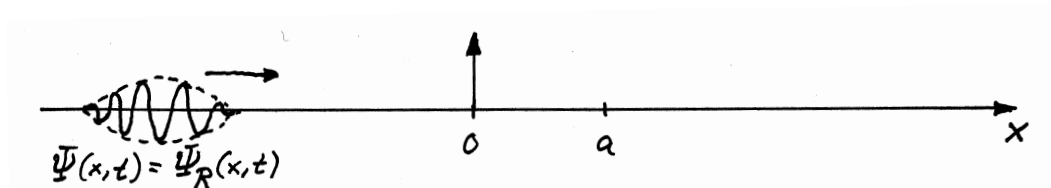
Ved å superponere slike løsninger med den samme fordelingen $\phi(k)$ som for den frie partikkelen ovenfor, finner vi en løsning av Schrödingerligningen for potensialet $V(x)$ på formen¹⁸

$$\Psi(x, t) = \int \phi(k) \Psi_E(x, t) dk = \begin{cases} \Psi_R(x, t) + B \Psi_L(x, t) & \text{for } x < 0, \\ C \Psi_R(x, t) & \text{for } x > a. \end{cases} \quad (\text{T3.60})$$

For å skjønne hvordan denne bølgefunksjonen oppfører seg ved store negative t og store positive t trenger vi bare å huske oppførselen til fri-partikkel-pakkene $\Psi_R(x, t)$ og $\Psi_L(x, t)$, samtidig som vi passer på å skille mellom positive og negative x , slik formelen ovenfor gjør.

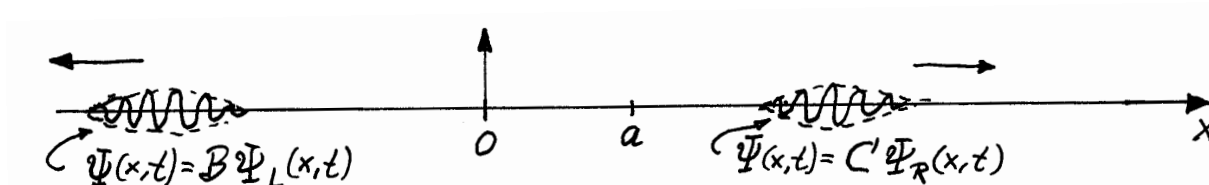
La oss først se på situasjonen for store negative t : Da husker vi at Ψ_R er forskjellig fra null bare i et område langt ute til venstre, og Ψ_L bare i et område langt ute til høyre. For $x < 0$ forteller da (T3.60) at vi har bare Ψ_R på vei innover fra venstre, mens vi for $x > a$ har ingenting. For store negative t (og store positive t) kan det vises at $\Psi(x, t)$ også er lik null i område II, for $0 < x < a$. Situasjonen er altså denne:

¹⁸I integralene som inngår i (T3.16) er koeffisientene $B/A = B$ og $C/A = C$ i realiteten energiavhengige, dvs de avhenger av integrasjonsvariabelen k . Men sammenholdt med den forholdsvis skarpe fordelingen $\phi(k)$ vil denne variasjonen være så langsom at vi kan neglisjere den, og sette $B(k) = B(k_0) \equiv B$ og $C(k) = C(k_0) \equiv C$ utenfor de respektive integralene, slik vi har gjort til høyre i (T3.60).

store negative t :

Siden Ψ_R er normert, følger det at bølgefunksjonen $\Psi(x, t)$ normert for store negative t . Følgelig er den normert for *alle* t , fordi Schrödingerligningen som sagt bevarer normeringen.

Ser vi så på situasjonen for store positive t , så husker vi at Ψ_R da har beveget seg langt ut til høyre, mens Ψ_L er like langt ute til venstre. Fra (T3.60) framgår det da at vi for $x < 0$ har bare $B\Psi_L$ på vei utover langs den negative x -aksen. For $x > 0$ har vi bare $C\Psi_R$ på vei utover mot høyre.

store positive t :

Vi kan altså konstatere at den innkommende pakken Ψ_R har *delt seg*, i en reflektert pakke $B\Psi_L(x, t)$ og en transmittert pakke $C\Psi_R(x, t)$.

Transmisjons- og refleksjons-koeffisientene er nå åpenbart gitt ved sannsynlighetsinnholdet i de to pakkene for store positive t . Transmisjonskoeffisienten er gitt ved sannsynligheten i den transmitterte pakken, dvs ved integralet

$$T = \int |\Psi(x, t)|^2 dx = |C|^2 \int |\Psi_R(x, t)|^2 dx = |C|^2, \quad (\text{T3.61})$$

som bare får bidrag fra det området for store positive x hvor den transmitterte pakken befinner seg. Tilsvarende finner vi refleksjonskoeffisienten

$$R = \int |\Psi(x, t)|^2 dx = |B|^2 \int |\Psi_L(x, t)|^2 dx = |B|^2, \quad (\text{T3.62})$$

der integralet går over pakken Ψ_L som befinner seg langt ute til venstre. Som vi ser, stemmer resultatet av denne bølgepakke-betraktningen med hva vi fant i avsnitt **b** ved å bruke energiegenfunksjonen $\psi_E(x)$ (for spesialtilfellet $k' = k$, og med $A = 1$).

Kommentarer:

(i) Mens bølgepakken *deler seg*, må hver enkelt partikkel gjøre et valg mellom transmisjon og refleksjon. Den kvantemekaniske teorien gir oss bare sannsynlighetene, bestemt av den relative størrelsen av pakkene, og kan ikke avgjøre hva som skjer med den enkelte partikkelen. Teorien gir sannsynlighetsutsagn.

(ii) Leddet De^{-ikx} , som vi fjernet fra $\psi_E(x)$ for $x > a$, ville ha gitt en pakke på vei inn fra høyre. En slik *virkning* kan ikke forårsakes av prosjektiler som sendes inn fra venstre.

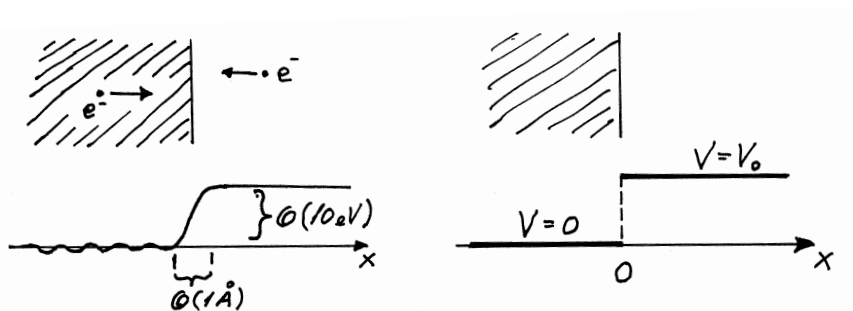
Det ville være et brudd på **årsaks-virknings-loven**, eller et **kausalitets-brudd**, som det også kalles.

(iii) For å finne hvor store R og T er må en som i **b** spesifisere $V(x)$ for område II og finne egenfunksjonen $\psi_E(x)$ for alle x , inklusive koeffisientene B og C . Når $\psi_E(x)$ er funnet for alle x , er det i prinsippet mulig å finne oppførselen til pakke-løsningen $\Psi(x, t)$ også for t omkring null, dvs oppførselen idet “delingen” skjer. Denne oppførselen er generelt komplisert.

(iv) Selv om metoden med bølgepakker gir et enkelt fysisk bilde av spredningsprosessen, ser vi at den er helt ekvivalent med den enklere metoden i avsnitt **b**. I eksemplene nedenfor bruker vi derfor metoden med energieigenfunksjoner. Vi starter med spredning mot et potensialsprang.

3.6.d Spredning mot potensialsprang

Et nærliggende eksempel er det potensialet som oppleves av et elektron på vandring inn og ut gjennom en grenseflate mellom et metall og vakuum (eller luft). Figuren til venstre viser et noenlunde realistisk potensial. Til høyre er dette erstattet med et enklere modell-potensial, et stykkevis konstant potensial, som er lett å regne på.

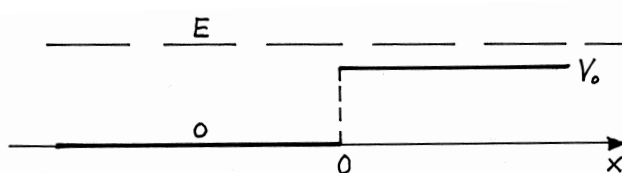


Vi betrakter først

1. Partikkel inn fra venstre, med $E > V_0$

Klassisk vil en partikkel med $E > V_0$ bli transmittert med 100% sannsynlighet. Den endrer bare hastighet, fordi den kinetiske energien blir mindre i området til høyre.

Kvantemekanisk har vi nettopp lært at oppførselen til partikkelen kan analyseres vha en energieigenfunksjon $\psi_E(x)$. I de aktuelle områdene har denne formen



$$\text{I: } x < 0$$

$$\psi_I = e^{ikx} + re^{-ikx}$$

$$\psi'_I = ik(e^{ikx} - re^{-ikx})$$

$$\text{II: } x > 0$$

$$\psi_{II} = te^{ik'x}$$

$$\psi'_{II} = ik'te^{ik'x}$$

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}$$

$$\left(E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right)$$

$$k' = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - V_0)}$$

$$\left(E = V_0 + \frac{(\hbar k')^2}{2m} \right)$$

$$j_I = j_i + j_r = 1 \cdot \frac{\hbar k}{m} + |r|^2 \cdot \frac{-\hbar k}{m}$$

$$j_{II} = j_t = |t|^2 \frac{\hbar k'}{m}$$

$$R = \frac{|j_r|}{j_i} = |r|^2$$

$$T = \frac{j_t}{j_i} = |t|^2 \frac{k'}{k}$$

Her har vi kalt koeffisientene for r og t istedenfor B og C , og brukt resultatene fra avsnitt **b** til å skrive ned uttrykk for strømtetthetene og refleksjons- og transmisjonskoeffisientene. (Merk at vi har ekskludert et ledd $De^{-ik'x}$ fra den generelle løsningen for område II, i tråd med diskusjonen i **b**).

Strategien videre er å bestemme koeffisientene r og t ved å bruke kontinuiteten av ψ og ψ' for $x = 0$. Dette gir

$$(1) \quad 1 + r = t \quad \text{og}$$

$$(2) \quad 1 - r = t \cdot \frac{k'}{k} \quad (\text{følger fra } ik - ikr = ik't).$$

Addisjon og subtraksjon av (1) og (2) gir

$$2 = t(1 + k'/k) \implies t = \frac{2k}{k + k'}$$

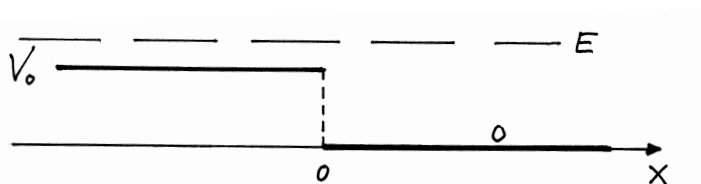
$$2r = t(1 - k'/k) \implies r = \frac{k - k'}{k + k'}.$$

Vi har altså at

$$R = |r|^2 = \left(\frac{k - k'}{k + k'} \right)^2 \quad \text{og} \quad T = |t|^2 \frac{k'}{k} = \frac{4kk'}{(k + k')^2}. \quad (\text{T3.63})$$

Her ser vi at kvantemekanikken gir en viss sannsynlighet for refleksjon ($R \neq 0$) for alle $E > V_0$, i motsetning til klassisk mekanikk. Denne beregningen viser tydelig at dette skyldes bølgenaturen til partiklene, som kommer til uttrykk i Schrödingerligningen. (Klassisk møter partikkelen riktignok en kraft rettet mot den opprinnelige bevegelsesretningen, altså en “motbakke”, men kraft ganger vei (potensialspranget) er jo mindre enn energien, og da kan ikke partikkelen snu ifølge klassisk mekanikk.)

Resiprositet



Dersom vi snur potensialet, men fortsatt lar partikkelen komme inn fra venstre, trenger vi bare å bytte k og k' i beregningen ovenfor. Dette gir akkurat samme resultater for R og T . (Dette er jo enda merkeligere enn for det opprinnelige potensialet, for nå møter jo partikkelen en “unnabakke” som svarer til en kraft langs den opprinnelige bevegelsesretningen!)

Moralen er at bølgen (og dermed også en bølgepakke) blir delvis reflektert — ikke fordi partiklene møter et område med høyere V — men fordi de opplever en brå *endring* av potensialet, med en tilsvarende endring av bølgelengden.

Det at R og T er “invariante” under dette ombyttet (av k og k') er karakteristisk for alle bølger. I optikken er det kjent som **resiprositets**-egenskapen. Du har sikkert også lagt merke til at formlene er de samme som for andre bølgetyper, f.eks for lys som faller normalt inn mot en plan grenseflate mellom to medier med forskjellige brytningsindekser. Eller en lydbølge som treffer en vegg, osv.

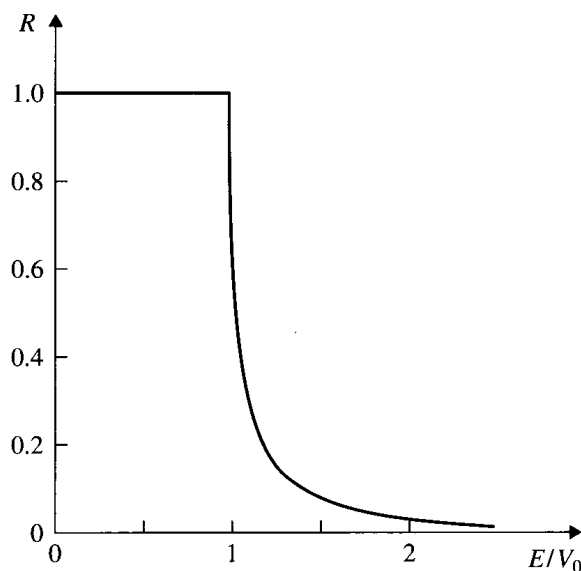
R som funksjon av E/V_0

For å vise hvordan refleksjonskoeffisienten R avhenger av E/V_0 kan vi merke oss at

$$\frac{k'}{k} = \sqrt{(E - V_0)/E} = \sqrt{1 - V_0/E}.$$

Innsatt gir dette

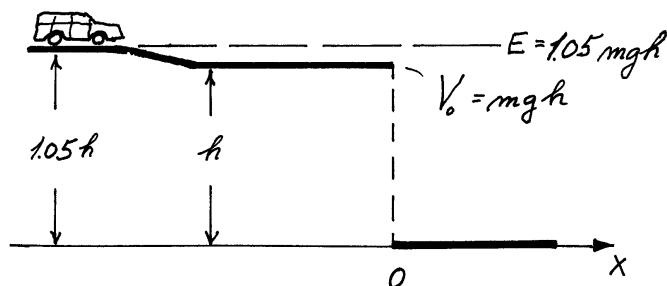
$$R = 1 - T = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - V_0/E}}{1 + \sqrt{1 - V_0/E}} \right)^2 \quad (E > V_0). \quad (\text{T3.64})$$



Dersom E bare er ørlite grann større enn V_0 , ser vi her at en får nesten 100% refleksjon, altså et kraftig avvik fra det klassiske resultatet. Men for økende E/V_0 minsker dette avviket fort, idet R avtar veldig raskt. Dette ser vi tydelig i figuren ovenfor. I denne figuren har vi også inkludert det kvantemekaniske resultatet for $E < V_0$, som viser seg å stemme med det klassiske: I punkt 2 nedenfor viser vi at alle partikler med $E < V_0$ reflekteres ($R = 1$).

Et paradoks?

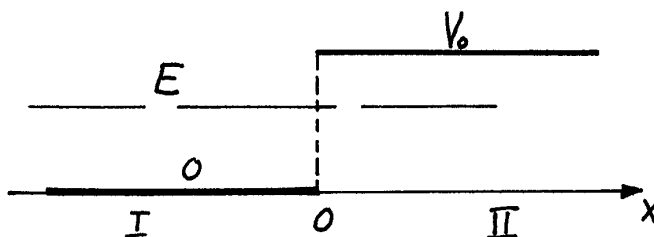
At partikler med $E > V_0$ reflekteres med en viss sannsynlighet, strider selvsagt mot vår “makroskopiske intuisjon”, særlig når partikkelen møter en “unnabakke” som i figuren ned-
erst side 45. Da kan det fortone seg som et paradoks at formelen for R er uavhengig av massen til partikkelen. Formelen skulle altså også gjelde for bilen i figuren!



Etter å ha rullet ned den første bakken med høyde $0.05h$ har bilen en kinetisk energi på $0.05mgh$ og en total energi $E = 1.05mgh$. Dette er 5% høyere enn potensialspranget ($V_0 = mgh$) som svarer til “stupet” med høyde h . Ifølge formelen for R skulle dette gi 45% sjanse for refleksjon, altså for å unngå å havne utenfor stupet. Men vi vet alle at dette kvantemekaniske resultatet gir grunn for altfor stor optimisme! I praksis seiler vi utfor!

Så hva er galt med kvantemekanikken — gjelder den ikke for makroskopiske objekter? Svaret ligger i selve modellen vi har brukt for potensialspranget. En nærmere undersøkelse viser at formelen for R er tilnærmet riktig forutsatt at potensialendringen skjer over en distanse Δx som er mye mindre enn bølgelengdene λ og λ' . Dette kan vi kanskje få til for prosesser på atomær skala, men for bilen og stupet er det fullstendig urealistisk. Bilen har en veldig liten bølgelengde $\lambda = h/p = h/mv$, og Δx for stupet vil være kjempestor i forhold til denne bølgelengden. Når potensialendringen skjer over en distanse som er mye større enn bølgelengdene λ og λ' , viser en mer nøyaktig kvantemekanisk beregning at sannsynligheten for refleksjon faktisk er svært liten, også for små partikler. Dette illustrerer at modellpotensialer må brukes med en viss forsiktighet.

2. Partikkel inn fra venstre, med $E < V_0$



$$\text{I: } x < 0$$

$$\psi_I = e^{ikx} + re^{-ikx}$$

$$\psi'_I = ik(e^{ikx} - re^{-ikx})$$

$$\text{II: } x > 0$$

$$\psi_{II} = Ce^{-\kappa x}$$

$$\psi'_{II} = -\kappa Ce^{-\kappa x}$$

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}$$

$$\left(E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right)$$

$$\kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)}$$

$$\left(E = V_0 + \frac{(\hbar\kappa)^2}{2m} \right)$$

$$j_I = j_i + j_r = 1 \cdot \frac{\hbar k}{m} + |r|^2 \cdot \frac{-\hbar k}{m} = \frac{\hbar k}{m} (1 - |r|^2)$$

$$R = \frac{|j_r|}{j_i} = |r|^2$$

Det nye her er at den generelle løsningen i område II (for $x > 0$) tar formen $\psi_{II} = Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x}$. Men her må jo koeffisienten D settes lik null, fordi energiegenfunksjonen ikke får lov å divergere (for $x \rightarrow \infty$). Derfor står vi tilbake med den eksponensielt avtagende funksjonen $Ce^{-\kappa x}$ i dette klassisk forbudte området for $x > 0$. Partiklene trenger altså et lite stykke inn i det klassisk forbudte området, men ikke langt; **inntrengningsdybden** (hvor $|\psi_{II}|^2$ er redusert med en faktor $1/e$) er

$$l_{\text{p.d.}} = \frac{1}{2\kappa}.$$

For store x ser vi at både ψ_{II} og $\rho = |\psi_{II}|^2$ går mot null. Da det ikke skjer noen opphopning av partikler noe sted for denne stasjonære tilstanden, skjønner vi at antallet som returnerer fra det forbudte området hele tiden må være like stort som antallet som trenger inn. Den totale strømtettheten må rett og slett være lik null over alt, både inne i barrieren og utenfor. En annen måte å forstå dette på er å huske på at strømtettheten for alle slike stasjonære, endimensjonale tilstander er x -uavhengig. Og siden j åpenbart er lik null for $x = \infty$, må den være lik null for alle x . Dette betyr at

$$j_I = j_i + j_r = \frac{\hbar k}{m} (1 - |r|^2) = 0,$$

dvs vi har 100 % refleksjon, akkurat som i klassisk mekanikk:

$$R = |r|^2 = 1.$$

Dette kan vi også lett vise ved regning. Kontinuiteten av ψ og ψ' gir

$$(1) \quad 1 + r = C \quad \text{og} \quad ik(1 - r) = -\kappa C, \quad \text{dvs.}$$

$$(2) \quad 1 - r = i \frac{\kappa}{k} C.$$

Ved å eliminere C finner vi at

$$r = \frac{1 - i\kappa/k}{1 + i\kappa/k}, \quad \text{dvs.} \quad |r| = 1, \quad \text{q.e.d.}$$

Det kan også være instruktivt å se på bølgefunksjonen. Siden $\psi_{II}/C = e^{-\kappa x}$ er reell, må ψ_I/C være en reell lineærkombinasjon av $\sin kx$ og $\cos kx$. Da må den kunne skrives på formen

$$\psi_I/C = A \cos(kx + \alpha) = A \cos \alpha \cos kx - A \sin \alpha \sin kx. \quad (\text{T3.65})$$

Dette kan vi vise slik: Vi har fra (1) og (2)

$$\begin{aligned}\psi_I/C &= \frac{1}{C}(e^{ikx} + re^{-ikx}) \\ &= \frac{1+r}{C} \cos kx + i\frac{1-r}{C} \sin kx \\ &= \cos kx - \frac{\kappa}{k} \sin kx.\end{aligned}$$

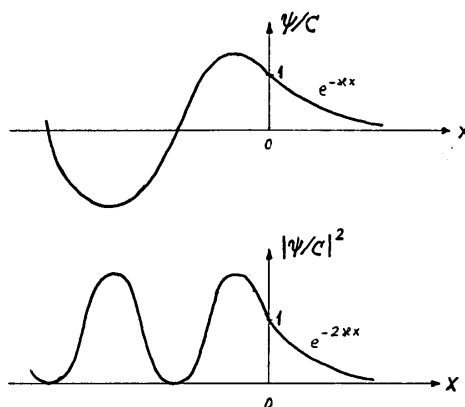
Ved å sammenligne med (T3.65) ser vi at

$$A \cos \alpha = 1, \quad \text{dvs.} \quad A = 1/\cos \alpha \quad \text{og} \quad A \sin \alpha = \tan \alpha = \kappa/k.$$

Resultatet er altså

$$\psi_{II}/C = e^{-\kappa x} \quad \text{og} \quad \psi_I/C = \frac{1}{\cos \alpha} \cos(kx + \alpha), \quad \text{der } \alpha = \arctan \kappa/k.$$

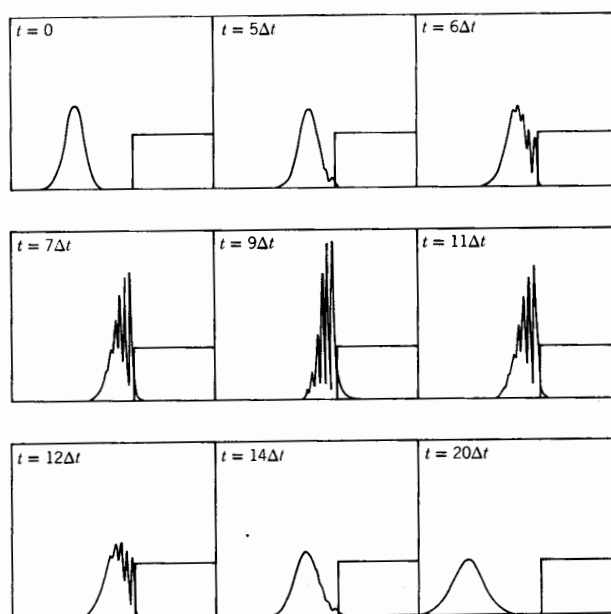
Figuren viser $\psi(x)/C$ og $|\psi(x)/C|^2$, hvor vi legger merke til at begge funksjonene er glatte (uten knekk) i skjøten ved $x = 0$.



Merk at de stående bølgene ψ og $|\psi|^2$ har sinusform i det tillatte området til venstre for potentialspranget. Merk også likheten med løsningene for den enkle firkantbrønnen. Som for brønnløsningene har vi her stasjonære maksima og minima (nullpunkter). Forskjellen ligger i at vi her ikke har noe potentialsprang til venstre, slik vi har i brønnen. Dette medfører for det første at bølgelengdene og energiene ikke blir kvantiserte (som de blir for brønnen). For det andre strekker de sinusformede løsningene seg utover til $-\infty$. Vi har altså én ubunden tilstand for hver energi i intervallet $0 < E < V_0$, slik vi har vært inne på før.

Bølgepakke-løsning

Hvordan vil en bølgepakkeløsning oppføre seg i denne problemstillingen? Figuren nedenfor, lånt fra Eisberg og Resnick, *Quantum Mechanics...*, gir et visst inntrykk.

**FIGURE 6-8**

A potential step, and the probability density $\Psi^*\Psi$ for a group wave function describing a particle incident on the step with total energy less than the step height. As time evolves, the group moves up to the step, penetrates slightly into the classically excluded region, and then is completely reflected from the step. The complications of the mathematical treatment using a group are indicated by the complications of its structure during reflection.

Før og etter refleksjonen er oppførselen slik vi ville vente, ut fra erfaringene i avsnitt c ovenfor. Men legg merke til at det i disse diagrammene er tatt hensyn til dispersjonen; den reflekterte pakken er litt mer “utsmurt” enn den innkommende.

Under selve refleksjonen, derimot, er oppførselen til denne bølgegruppen komplisert. I tillegg til inntrengningen i barrieren ser vi at pakken for $x \lesssim 0$ utvikler “spikes”, som gradvis forsvinner igjen idet pakken forlater potensialspranget.

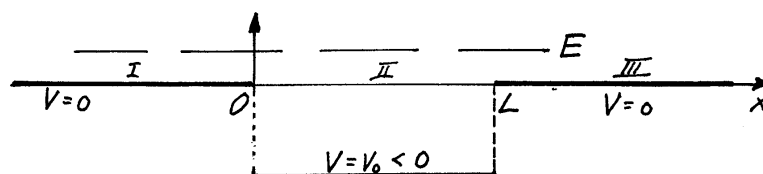
3.6.e Spredning på firkant-brønn eller firkant-barriere

(Hemmer s 61, Griffiths s 62, B&J s 150 og s 168.)

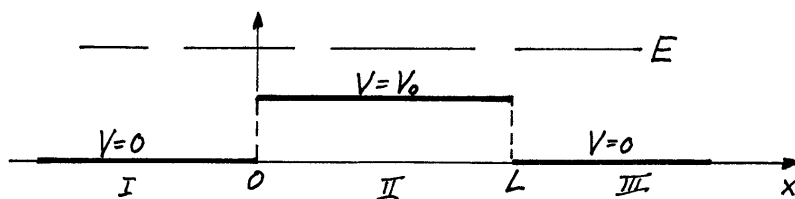
La oss se på en partikkel med energi E som kommer inn fra venstre, mot potensialet

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{for } x < 0 \text{ og } x > L, \\ V_0 & \text{for } 0 < x < L. \end{cases} \quad (\text{T3.66})$$

(i) For $V_0 < 0$ er dette spredning på en potensialbrønn:

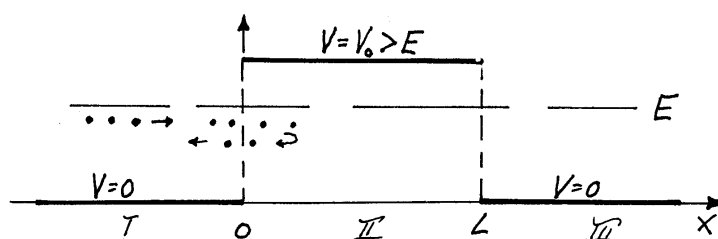


(ii) For $V_0 > 0$ er det spredning på en potensialbarriere:



Klassisk endres i begge tilfeller partikkelhastigheten i område II, hvor den kinetiske energien er $E - V_0$, men så lenge V_0 er mindre enn E har vi selvsagt fullstendig transmisjon. *Kvantemekanisk* må vi ut fra erfaringene med potensialspranget vente oss ikke-klassisk refleksjon selv om $E > V_0$, slik vi er vant med for andre bølgetyper i lignende situasjoner.

(iii) Det tredje tilfellet er når $V_0 > E$:



Kvantemekanisk skjønner vi ut fra erfaringene med potensialspranget at partiklene som kommer inn fra venstre i hvertfall vil trenge et stykke inn i barrieren. Og hvis lengden L av barrieren og differansen $V_0 - E$ ikke er for store, skjønner vi også at noen av partiklene vil trenge så langt inn at de klarer å unnsnippe ut til høyre. *Klassisk* har en partikkel med energi $E < V_0$ ingen mulighet for å passere barrieren. Den måtte i så fall “grave seg en tunnel gjennom den”. Men kvantemekanisk er det altså en viss sjanse for at det går — derfor betegnelsen **tunnel-effekt** for denne prosessen.

Vi angriper nå disse tre prosessene med den vanlige strategien, som går ut på å finne en energifunksjon for energien E med passende asymptotisk oppførsel:

I: $x < 0$ ($V = 0$)

$$\psi_I = e^{ikx} + re^{-ikx}$$

$$\psi'_I = ik(e^{ikx} - re^{-ikx})$$

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}$$

$$\left(E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right)$$

$$j_I = j_i + j_r = \frac{\hbar k}{m} (1 - |r|^2)$$

$$j_i = 1 \cdot \frac{\hbar k}{m}, \quad j_r = |r|^2 \frac{-\hbar k}{m}$$

$$R = \frac{|j_r|}{j_i} = |r|^2$$

II: $0 < x < L$ ($V = V_0$)

$$\psi_{II} = ae^{iqx} + be^{-iqx}$$

$$\psi'_{II} = iqa e^{iqx} - iqb e^{-iqx}$$

$$(\text{for } V_0 < E:) \quad q = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - V_0)}$$

$$(\text{for } V_0 > E:) \quad q = i\kappa = \frac{i}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)}$$

III: $x > L$ ($V = 0$)

$$\psi_{III} = te^{ikx}$$

$$\psi'_{III} = ikt e^{ikx}$$

$$j_t = |t|^2 \frac{\hbar k}{m}$$

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

I område I er løsningen av samme type som for potensialspranget, dvs vi har de samme uttrykkene som vi har sett før. Det samme gjelder for område III når vi setter $k' = k$, slik

at løsningen der blir $\psi_{III} = te^{ikx}$, som har den korrekte oppførselen for store x . I område II er bølgetallet som nevnt forskjellig fra k . Vi har kalt det q , som hos Hemmer. For $V_0 < 0$ (brønn-tilfellet (i)) er q større enn k . For $0 < V_0 < E$ (tilfellet (ii)) er q mindre enn k . For $V_0 > E$ (tunnelerings-tilfellet (iii)) blir q imaginær,

$$q = \frac{1}{\hbar} \sqrt{-2m(V_0 - E)} = \frac{i}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} \equiv i\kappa. \quad (\text{T3.67})$$

For det siste tilfellet kan løsningen for barriereområdet II omskrives til den velkjente formen

$$\psi_{II} = ae^{-\kappa x} + be^{\kappa x}, \quad \psi'_{II} = \kappa (-ae^{-\kappa x} + be^{\kappa x}) \quad (V_0 > E). \quad (\text{T3.68})$$

Dette viser at formelen $\psi_{II} = ae^{iqx} + be^{-iqx}$ fungerer også for $q = i\kappa$, dvs dekker alle de tre tilfellene. Dette betyr at vi kan nøye oss med én skjøte-beregning, der vi bruker den sistnevnte formelen for ψ_{II} . Resultatene for tilfellet (iii) kan vi da finne ved å sette $q = i\kappa$ i slutt-formlene for r, t, R og T . Skjøteberegningen gjør vi slik:

Kontinuiteten av ψ og ψ' for $x = 0$ gir:

$$\begin{aligned} (1) \quad 1 + r &= a + b & \text{og} & \quad ik - ikr = iqa - iqb, \quad \text{dvs.} \\ (2) \quad 1 - r &= \frac{q}{k}(a - b). \end{aligned}$$

Kontinuiteten av ψ og ψ' for $x = L$ gir:

$$\begin{aligned} (3) \quad ae^{iqL} + be^{-iqL} &= te^{ikL} & \text{og} & \quad iqa e^{iqL} - iqbe^{-iqL} = ikt e^{ikL}, \quad \text{dvs.} \\ (4) \quad ae^{iqL} - be^{-iqL} &= \frac{k}{q} t e^{ikL}. \end{aligned}$$

Ved å addere og subtrahere (3) og (4) kan vi uttrykke koeffisientene a og b ved koeffisienten t :

$$\begin{aligned} a &= \frac{q + k}{2q} t e^{ikL} e^{-iqL}, \\ b &= \frac{q - k}{2q} t e^{ikL} e^{iqL}. \end{aligned} \quad (\text{T3.69})$$

Ved å sette inn for a og b i (1) og (2) får vi da *eliminert* a og b :

$$\begin{aligned} (1) \quad 1 + r &= t e^{ikL} \left(\cos qL - i \frac{k}{q} \sin qL \right), \\ (2) \quad 1 - r &= t e^{ikL} \left(\cos qL - i \frac{q}{k} \sin qL \right). \end{aligned}$$

Addisjon av (1) og (2) gir nå

$$t = e^{-ikL} \frac{2kq}{2kq \cos qL - i(k^2 + q^2) \sin qL}, \quad (\text{T3.70})$$

og subtraksjon gir

$$r = \frac{i(q^2 - k^2) \sin qL}{2kq \cos qL - i(k^2 + q^2) \sin qL}. \quad (\text{T3.71})$$

Ved å ta absoluttkvadratene av disse finner vi de generelle formlene for refleksjons- og transmisjons-koeffisientene:

$$R = \frac{(q^2 - k^2)^2 \sin^2 qL}{4k^2 q^2 \cos^2 qL + (k^2 + q^2)^2 \sin^2 qL},$$

som også kan skrives på formen

$$R = \frac{(k^2 - q^2)^2 \sin^2 qL}{4k^2 q^2 + (k^2 - q^2)^2 \sin^2 qL}, \quad (\text{T3.72})$$

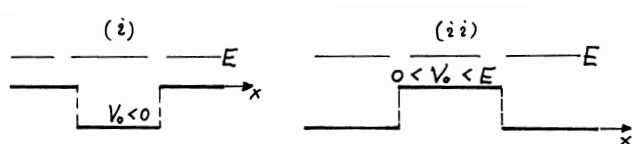
og

$$T = \frac{4k^2 q^2}{4k^2 q^2 + (k^2 - q^2)^2 \sin^2 qL}. \quad (\text{T3.73})$$

Her ser vi at $R + T = 1$.

Disse formlene er ikke så lette å gjennomskue — eller sagt på en annen måte — de inneholder mye informasjon. Og dette er ikke rart, for problemstillingen vår inneholder mange variable parametre: Lengden L og høyden V_0 av barrieren (eventuelt dybden $|V_0|$ av brønnen), i tillegg til massen m og energien E til partiklene.

Det første vi merker oss er at vi får ikke-klassisk refleksjon ($R > 0$) for nesten alle V_0 -verdier som er mindre enn E . Dette gjelder både for brønnen og barrieren:



Men dette er selvsagt ikke overraskende, etter det vi har erfart med spredning mot potensialbarriere. Det harmonerer også godt med erfaringer fra andre bølgefenomener: Fordi bølgelengden $\lambda_{II} = 2\pi/q$ er forskjellig fra bølgelengden $\lambda = 2\pi/k$ utenfor brønn- eller barriere-området må vi vente refleksjon.

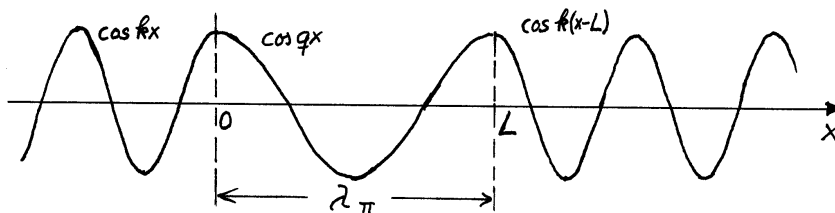
Da er det kanskje mer overraskende at det faktisk finnes unntak: Når qL er et helt multiplum av π , $qL = n\pi$ (dvs når $L = n\pi/q = n \cdot \lambda_{II}/2$ er et helt multiplum av $\lambda_{II}/2$), er $\sin qL = 0$, og vi finner at $T = 1$ — vi har *fullstendig transmisjon*; brønnen eller barrieren er da “gjennomsiktig” for partiklene. Dette er analogt med en tilsvarende effekt i optikk, og skyldes på en måte destruktiv interferens mellom refleksjonene i $x = 0$ og $x = L$. For å se hvordan dette henger sammen kan vi sette $qL = n\pi$ i (T.69–71). Dette gir

$$r = 0, \quad t = (-1)^n e^{-ikL}, \quad a = \frac{q+k}{2q} \quad \text{og} \quad b = \frac{q-k}{2q},$$

slik at energieigenfunksjonen ser slik ut:

$$\begin{aligned}\Psi_I = e^{ikx}, \quad \psi_{II} &= \frac{q+k}{2q} e^{iqx} + \frac{q-k}{2q} e^{-iqx} & \psi_{III} &= (-1)^n e^{ik(x-L)} = (-1)^n \psi_I(x-L), \\ &= \cos qx + i \frac{k}{q} \sin qx.\end{aligned}$$

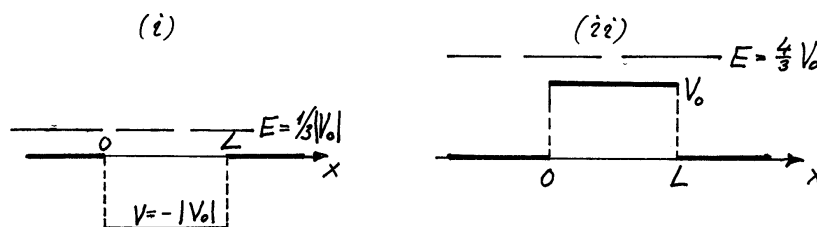
For $n = 2$ ($L = \lambda_{II}$) ser realdelen av denne bølgefunksjonen slik ut:



Dette er samme resultat som vi får om vi starter med fri-partikkel-løsningen e^{ikx} , “kutter den av” ved $x = 0$, flytter høyre del et stykke $L = \lambda_{II}$ til høyre, og setter inn ψ_{II} i mellomrommet. Den siste må da velges slik at ψ_{II} og ψ'_{II} er lik hhvis ψ_I og ψ'_I for $x = 0$, og de samme verdiene må vi også ha for $x = L$. Dette går bra fordi ψ_{II} er periodisk med bølgelengde λ_{II} . På denne måten kan vi “smugle inn en brønn eller en barriere uten at det merkes”.

En slik effekt er kjent også i tre dimensjoner, hvor atomer blir “gjennomsiktige” for elektroner med bestemte energier. Dette er kjent som **Ramsauer–Townsend-effekten**.

Mellom maksimalverdiene $T = 1$ for $qL = n\pi$ har transmisjonskoeffisienten *minima*. Som funksjon av L (med fastholdt m , E og V_0) får T en enkel periodisk oppførsel. Dette kan illustreres med to eksempler:



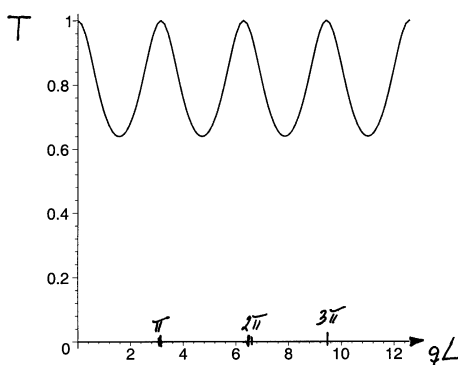
(i) Partikler med energi $E = |V_0|/3$ sendes inn mot en brønn med dybde $|V_0|$ ($V_0 = -|V_0|$). Dette gir dobbelt så stort bølgetall $q_{(i)} = \sqrt{2m(E - V_0)/\hbar^2} = \sqrt{2m \cdot 4|V_0|/3\hbar^2}$ inne i brønnen som utenfor, $k_{(i)} = \sqrt{2m \cdot |V_0|/3\hbar^2}$. Dermed blir

$$T = \frac{4k^2/q^2}{4k^2/q^2 + (k^2/q^2 - 1)^2 \sin^2 qL} = \frac{1}{1 + 9/16 \cdot \sin^2 qL}, \quad q = q_{(i)}.$$

(ii) Partikler med $E = \frac{4}{3}V_0$ sendes inn mot en barriere med høyde V_0 . Dette gir $k_{(ii)} = \sqrt{2m \cdot 4V_0/3\hbar^2}$ og $q_{(ii)} = \sqrt{2m \cdot V_0/3\hbar^2}$, dvs forholdet $q/k = 1/2$ blir omvendt. Med dette valget får T samme form som ovenfor,

$$T = \frac{4q^2/k^2}{4q^2/k^2 + (1 - q^2/k^2)^2 \sin^2 qL} = \frac{1}{1 + 9/16 \cdot \sin^2 qL}, \quad q = q_{(ii)},$$

og vi kan illustrere de to resultatene med ett diagram, med qL som abscisse:



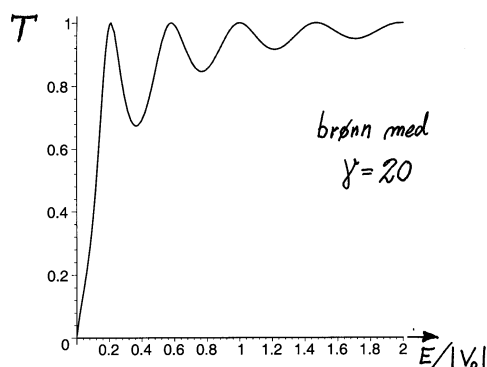
Som funksjon av energien E blir oppførselen mer komplisert, og den er også sterkt avhengig av de øvrige parametrene. Med $k^2 = 2mE/\hbar^2$ og $q^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2$ har vi

$$T = \frac{4E(E - V_0)}{4E(E - V_0) + V_0^2 \sin^2 qL}, \quad qL = \sqrt{\frac{2mL^2}{\hbar^2}(E - V_0)}. \quad (\text{T3.74})$$

(i) Som et eksempel kan vi velge en nokså “sterk” brønn, med $V_0 = -|V_0|$ og med $\sqrt{2m|V_0|L^2/\hbar^2} \equiv \gamma = 20$. (Ifølge diskusjonen i avsnittet om den endelige potensialbrønnen gir en slik brønn plass til 7 bundne tilstander.)¹⁹ Figuren nedenfor viser

$$T_{\text{brønn}} = \frac{4\frac{E}{|V_0|}\left(\frac{E}{|V_0|} + 1\right)}{4\frac{E}{|V_0|}\left(\frac{E}{|V_0|} + 1\right) + \sin^2 qL}, \quad \text{med } qL = \sqrt{\frac{2m|V_0|L^2}{\hbar^2} \frac{E - V_0}{|V_0|}} = \gamma \sqrt{\frac{E}{|V_0|} + 1}, \quad (\text{T3.75})$$

som funksjon av $E/|V_0|$:



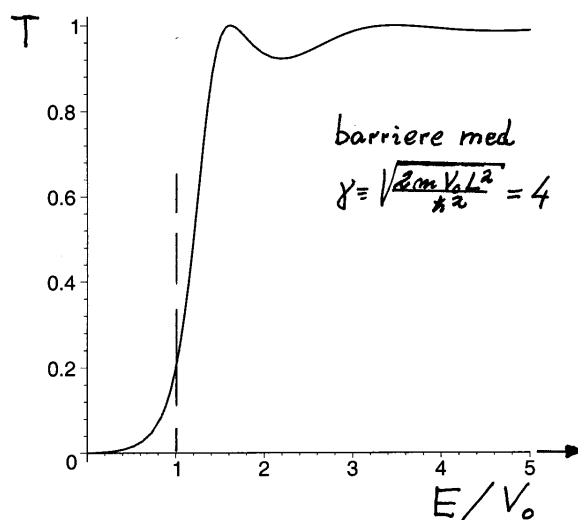
Her kan du legge merke til at T går mot null i grensen $E \rightarrow 0$. For økende E observerer vi maksimalverdiene 1 (for hver gang qL er et helt multiplum av $\lambda_{II}/2$). Omtrent midt mellom maksimalverdiene finner vi minima, og vi legger merke til at disse nærmer seg 1 for økende energier. Det er naturlig at refleksjonskoeffisienten $R = 1 - T$ på denne måten gjennomgående avtar for økende energi. (Side 169 i B&J kan du finne tilsvarende resultater for en mye sterkere brønn.)

(ii) For en barriere, med $E > V_0 > 0$, tar (T3.74) formen

$$T_{\text{barriere}} = \frac{4\frac{E}{V_0}\left(\frac{E}{V_0} - 1\right)}{4\frac{E}{V_0}\left(\frac{E}{V_0} - 1\right) + \sin^2 qL}, \quad \text{med } qL = \sqrt{\frac{2mV_0L^2}{\hbar^2} \frac{E - V_0}{V_0}} \equiv \gamma \sqrt{\frac{E}{V_0} - 1}. \quad (\text{T3.76})$$

¹⁹Merk at parameteren $\gamma = \sqrt{2m|V_0|L^2/\hbar^2}$ som vi har innført her er “dobbelte så stor” som den vi innførte i Tillegg 3, når vi setter $L = 2l$.

I figuren nedenfor svarer kurven for $E/V_0 > 1$ til resultatet for en barrierestyrke $\gamma = \sqrt{2mV_0L^2/\hbar^2} = 4$. I dette området ser vi tydelig et par maksima (=1) og et minimum mellom disse.



Dessuten legger vi merke til at T ikke går mot null når E/V_0 går mot 1 ovenfra. Vi har altså transmisjon selv om den kinetiske energien i område II går mot null. Grenseverdien kan vi finne analytisk ved å sette $E/V_0 = 1 + \epsilon$ og utvikle for små ϵ . Resultatet er

$$\lim_{E \rightarrow V_0} T = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{4\epsilon}{4\epsilon + \gamma^2\epsilon} = \frac{4}{4 + \gamma^2} \quad (= 0.2 \text{ for } \gamma = 4). \quad (\text{T3.77})$$

3.6.f Tunnel-effekten

Verdien ovenfor av T_{barriere} i grensen $E \rightarrow V_0$ henger sammen med at vi har transmisjon også for $0 < E < V_0$. Dette er tunnelering, tilfelle (iii). Og som figuren ovenfor viser går T_{barriere} glatt over i sannsynligheten T_{tunn} for tunnelering for $E = V_0$, i motsetning til den klassiske sannsynligheten, som hopper fra 1 til null. Som nevnt i diskusjonen side 52 kan vi finne T_{tunn} ved å sette

$$q = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - V_0)} = \frac{i}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} \equiv i\kappa$$

i regnestykkene ovenfor, bl.a i den generelle formelen (T3.74) for T . Med

$$\sin qL = \sin(i\kappa L) = \frac{e^{-\kappa L} - e^{\kappa L}}{2i} = i \sinh(\kappa L)$$

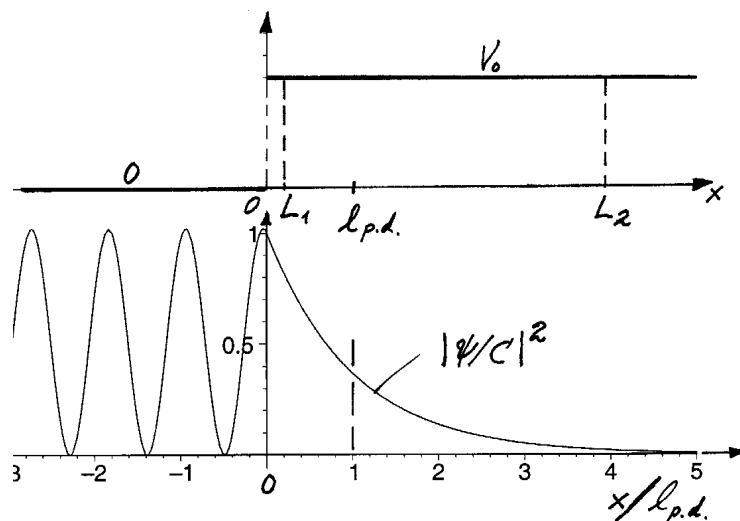
har vi fra (T3.74):

$$T_{\text{tunn}} = \frac{4 \frac{E}{V_0} (1 - \frac{E}{V_0})}{4 \frac{E}{V_0} (1 - \frac{E}{V_0}) + \sinh^2 \kappa L}, \quad \kappa L = \frac{L}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} \equiv \gamma \sqrt{1 - E/V_0}. \quad (\text{T3.78})$$

For $\gamma = \sqrt{2mV_0L^2/\hbar^2} = 4$ gir denne formelen kurvestykket for $0 < E/V_0 < 1$ i diagrammet ovenfor. Selv med denne beskjedne barrieren ($\gamma = 4$) ser vi at T_{tunn} avtar raskt med

avtagende energi (dvs etter hvert som barrieren blir mer og mer “forbudt” område) og går mot null når $E \rightarrow 0$.

Det mest sentrale aspektet ved tunnel-effekten er den måten T_{tunn} avhenger av barrierestørrelsen på. Denne avhengigheten er selvsagt innbakt i formelen ovenfor. For å skjønne bedre hva som foregår kan vi vende tilbake til potensialspranget, som svarer til en uendelig lang barriere, $L = \infty$. Figuren viser $|\psi/C|^2 = e^{-2\kappa x}$ for tilfellet $E = 0.98 V_0$, som gir ganske stor inntrengningsdybde $l_{\text{p.d.}} = 1/2\kappa$ i det forbudte området. (Abscissen i figuren er x i enheter av $l_{\text{p.d.}}$.)



Om vi “kutter” den uendelig lange barrieren ved $x = L_1 \ll l_{\text{p.d.}}$, så skjønner vi at partiklene lett vil trenge gjennom den resulterende barrieren med lengde L_1 . Vi må altså vente at transmisjonskoeffisienten er nær 100 %. Dette bekreftes av formelen for T . Når $\kappa L \ll \kappa l_{\text{p.d.}} = \frac{1}{2}$, har vi at $\sinh^2 \kappa L \approx (\kappa L)^2 \ll 1$, og vi finner at

$$T_{\text{tunn}} \approx \frac{4 \frac{E}{V_0} (1 - \frac{E}{V_0})}{4 \frac{E}{V_0} (1 - \frac{E}{V_0}) + (\kappa L)^2} \lesssim 1, \quad (\kappa L \ll 1). \quad (\text{T3.79})$$

Den motsatte ytterligheten er å kutte barrieren ved $x = L_2 \gg l_{\text{p.d.}}$. Da er $e^{-2\kappa L_2} = e^{-L_2/l_{\text{p.d.}}} \ll 1$. Ut fra figuren vil vi da naivt vente å finne en veldig liten transmisjons-sannsynlighet, av størrelsesorden $e^{-2\kappa L_2}$. Også dette bekreftes av formelen for T : For $\kappa L \gg \kappa l_{\text{p.d.}} = \frac{1}{2}$ er

$$\sinh \kappa L = \frac{e^{\kappa L} - e^{-\kappa L}}{2} \approx \frac{1}{2} e^{\kappa L}$$

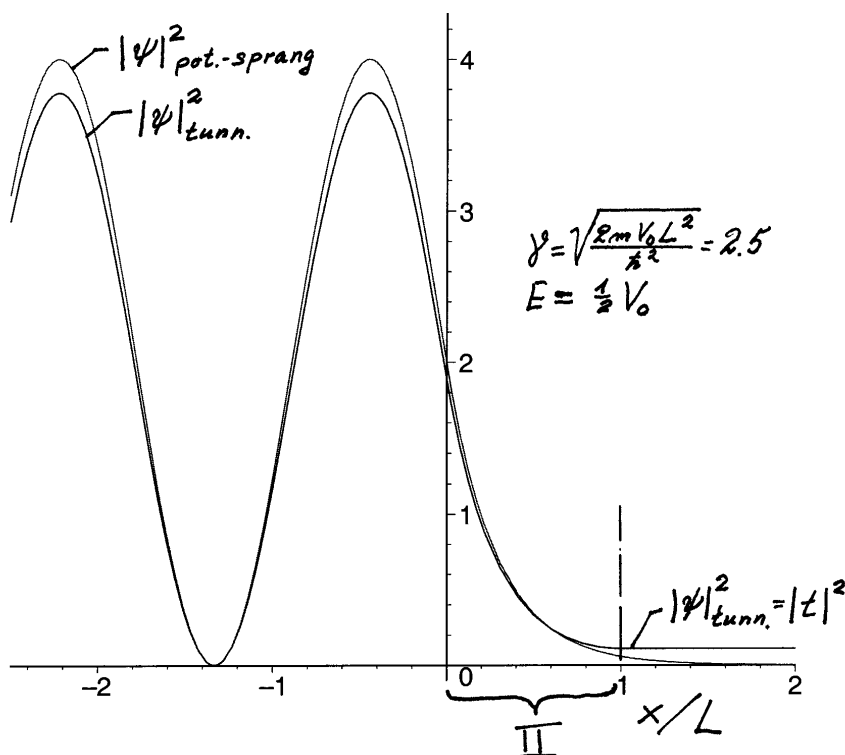
veldig stor, og (T3.78) gir ganske riktig en T som går som $e^{-2\kappa L}$:

$$T_{\text{tunn}} \approx 16 \frac{E}{V_0} (1 - \frac{E}{V_0}) e^{-2\kappa L} \ll 1, \quad \kappa L = L \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2} \gg 1. \quad (\text{T3.80})$$

Her er den langsomtvarierende prefaktoren $16 \frac{E}{V_0} (1 - \frac{E}{V_0})$ maksimalt lik 4. Denne er mye mindre viktig enn faktoren $e^{-2\kappa L}$, som viser at sannsynligheten for tunnelering er svært følsom for størrelsen av barrieren, gjennom κL .

Grunnen til at den enkle tankegangen ovenfor — basert på $|\psi|^2$ for potensialpranget — fungerer så godt, er at sannsynlighets-tettheten $|\psi|^2$ for tunneleringstilfellet i barriereområdet

$0 < x < L$ ligner sterkt på $|\psi|_{\text{pot.-sprang}}^2 = |Ce^{-\kappa x}|^2$. Dette er illustrert i figuren nedenfor, hvor vi har valgt en forholdsvis beskjeden barriere med styrke $\gamma = \sqrt{2mV_0L^2/\hbar^2} = 2.5$, og $E = \frac{1}{2}V_0$ (slik at $\kappa = k$).



For $x > L$ er $|\psi|_{\text{tunn}}^2 = |te^{ikx}|^2 = |t|^2$ konstant (flat) som vi ser. Fra denne delen av figuren kan vi altså lese ut $T_{\text{tunn}} = |t|^2$, som i dette tilfellet er ca 0.11. Den andre kurven viser $|\psi|_{\text{pot.-sprang}}^2$, også denne for $E = \frac{1}{2}V_0$. Dette er kurven med de høyeste maksimaene for $x < 0$ (fordi refleksjonskoeffisienten er 100 % for potensialspranget). For $x > 0$ har denne kurven formen $|C|^2 e^{-2\kappa x}$ og går mot null for store x . Denne er derfor *ikke* flat for $x = L$. Siden $|\psi_{II}|^2 = |ae^{-\kappa x} + be^{\kappa x}|^2$ for tunneleringstilfellet er flat for $x = L$ skjønner vi da at ψ_{II} må ha et visst innslag av den voksende funksjonen $e^{\kappa x}$. Men fordi $e^{\kappa L}$ er mye større enn $e^{-\kappa L}$ skal det ikke mye til; fra (T3.69) følger det at $|b/a| = e^{-2\kappa L}$. Dette er grunnen til at de to kurvene ligner så sterkt på hverandre i område II. Moralen er at et estimat av T basert på $|\psi|_{\text{pot.-sprang}}^2$ gir oss den viktige faktoren $e^{-2\kappa L}$; vi mister bare prefaktoren.

Mer realistiske barrierer

Hvor store barrierer er det egentlig snakk om? For å få et begrep om størrelsesordener kan vi anta at partiklene er elektroner og at V_0 er en kvart Rydberg, dvs

$$V_0 = \frac{1}{4} \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} = \frac{1}{4} \cdot 13.6 \text{ eV} \approx 3.4 \text{ eV}.$$

Dette gir

$$\gamma \equiv \sqrt{\frac{2m_e V_0 L^2}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{L^2}{4a_0^2}} = \frac{L}{2a_0}.$$

Vi oppnår i dette tilfellet en barrierestyrke på $\gamma = 2.5$ (som i figuren ovenfor) ved å velge $L = 5a_0$, der a_0 er Bohr-radien. Velger vi $E = \frac{1}{2}V_0 = 1.7$ eV, blir

$$\kappa L = L\sqrt{2m_e(V_0 - E)/\hbar^2} = \gamma/\sqrt{2},$$

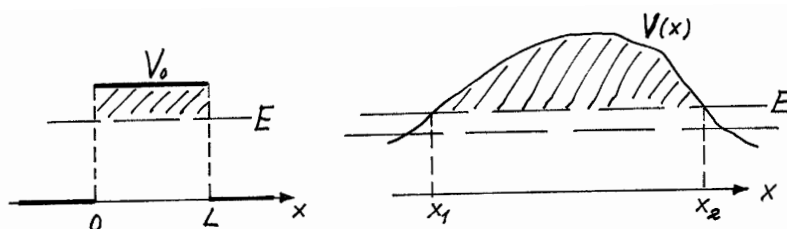
slik at inntrengningsdybden blir

$$l_{\text{p.d.}} = \frac{1}{2\kappa} = \frac{L}{\gamma\sqrt{2}} = a_0\sqrt{2}.$$

For denne barrieren fant vi en transmisjonskoeffisient på 0.11.

I praksis er barrierene gjerne mye større og T mye mindre enn i dette eksemplet. T blir da svært følsom for κL . Er f.eks. $T \sim e^{-2\kappa L} = 10^{-10}$, så vil en dobling av L gi en T av størrelsesorden 10^{-20} !

Hva gjør vi med mer realistiske barrierer, som ikke har firkantform?



Ved å ta logaritmen av transmisjonskoeffisienten (T3.80) for firkantbarrieren og bruke at $L = \int_0^L dx$ kan vi skrive denne logaritmen slik:

$$\ln T_{\text{tunn}} = \ln(\text{prefaktor}) - 2\kappa L = \ln(\text{prefaktor}) - \frac{2}{\hbar} \int_0^L \sqrt{2m(V_0 - E)} dx.$$

Det kan være fristende å spørre om formelen

$$\ln T_{\text{tunn}} = \ln(\text{prefaktor}) - \frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m[V(x) - E]} dx, \quad (\text{T3.81})$$

der vi har erstattet V_0 med $V(x)$, vil fungere for det realistiske potensialet til høyre? Svaret er faktisk ja! I kapittel 8 viser Griffiths at denne formelen er korrekt, med en prefaktor av størrelsesorden 1. (Se også 8.4 i B&J.)

Dersom denne logaritmen er et stort negativt tall, skjønner vi av figuren til høyre at logaritmen vil endre seg drastisk selv for relativt små endringer av energien E . I slike tilfeller blir tunnelerings-sannsynligheten svært følsom for energien. Dette skal vi se et par eksempler på.

3.6.g Felt-emisjon

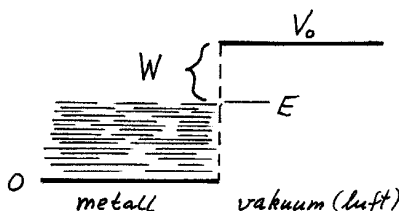
(Hemmer s 64, B&J s 420)

Tunnelerings spiller en viktig rolle i mange fysiske fenomen. Ett av disse er felt-emisjon. I et metall ved romtemperatur mangler elektronene med høyest energi noen elektronvolt for å unnsnippe fra metallet. Dette er det såkalte frigjøringsarbeidet som typisk er $W \sim 2 - 5$ eV, avhengig av hvilket metall det er, om overflaten er oksydert, osv. På vei ut av metallet møter altså elektronene et potensialsprang, og underskuddet W i kinetisk energi gjør dette til

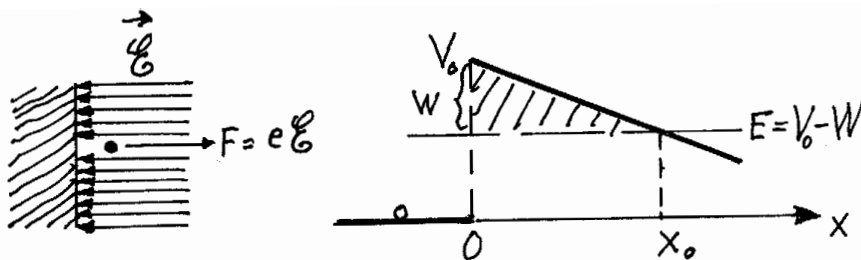
et forbudt område med $\kappa = \sqrt{2m_e(V_0 - E)/\hbar^2} \approx \sqrt{2m_e W/\hbar^2}$, og en inntrengningsdybde av størrelsesorden

$$l_{p.d.} = \frac{1}{2\kappa} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m_e W}} = \frac{1}{2} a_0 \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} \frac{1}{W}} \sim \frac{1}{2} a_0 \sqrt{\frac{13.6}{4}} \sim 0.4 \text{ Å},$$

om vi setter $W = 4 \text{ eV}$.



En måte å frigjøre elektroner på er vha bestråling med ultrafiolett lys (foto-effekt). Et alternativ er “den varme katoden”, der en får elektronene til å “fordampe” ved å varme opp metallet til en høy temperatur (jfr glødekatoden i TV-røret). Men elektroner kan også hentes ut av en “kald” katode, vha **felt-emisjon**:



Ved å utsette metallet for et sterkt elektrisk felt \mathcal{E} oppnår vi at elektronene som forsøker å trenge ut av metallet ikke lenger møter et potentialsprang med $V_0 - E = W$, men et potensial $V(x) = V_0 - e\mathcal{E}x$. Her har vi regnet med et homogent \mathcal{E} -felt. Som vist i figuren danner potensialet nå en trekantet barriere, hvor $V(x) - E = W - e\mathcal{E}x$, slik at lengden av barrieren blir

$$x_0 = \frac{W}{e\mathcal{E}}.$$

Ut fra inntrengningsdybden ovenfor skjønner vi at x_0 må gjøres veldig liten (av størrelsesorden Å) dersom transmisjonskoeffisienten skal bli *stor*. Dette ville kreve et veldig sterkt \mathcal{E} -felt, $\mathcal{E} \sim \frac{W}{ex_0} \sim 10^{11} \text{ V/m}$, av samme størrelsesorden som en finner i atomer. I praksis er en tvunget til å operere med mye svakere felter og barrierelengder som blir tilsvarende større. Dette gir svært små verdier for T , men likevel målbar emisjon.

Med antakelsen om homogent \mathcal{E} -felt og dermed en trekantet barriere, må vi vente at $\ln T$ er proporsjonal med barrierelengden x_0 , dvs omvendt proporsjonal med \mathcal{E} . Dette kan vi bekrefte vha (T3.81), som gir

$$\begin{aligned} \ln \frac{T}{\text{prefaktor}} &= -\frac{2}{\hbar} \int_0^{x_0} \sqrt{2m_e[V(x) - E]} dx = -\frac{2\sqrt{2m_e}}{\hbar} \int_0^{x_0} \sqrt{W - e\mathcal{E}x} dx \\ &= -\frac{2\sqrt{2m_e}}{\hbar} \frac{W^{3/2}}{e\mathcal{E}} \underbrace{\int_0^1 \sqrt{1-y} dy}_{2/3} \quad (y = \frac{e\mathcal{E}}{W} x) \\ &= -\frac{4\sqrt{2m_e} W^{3/2}}{3\hbar e} \frac{1}{\mathcal{E}}. \end{aligned} \quad (\text{T3.82})$$

Et typisk frigjøringsarbeid for mange metaller er $W \sim 4$ eV. Med $m_e = 0.511$ MeV/ c^2 for elektronet og $\hbar = 0.6582 \cdot 10^{-15}$ eVs, kan vi da skrive resultatet på formen

$$\ln \frac{T}{\text{prefaktor}} \approx -54.6 \left(\frac{10^9 \text{ V/m}}{\mathcal{E}} \right) \left(\frac{W}{4 \text{ eV}} \right)^{3/2}. \quad (\text{T3.83})$$

Et frigjøringsarbeid $W = 4$ eV og en feltstyrke $\mathcal{E} = 10^9$ V/m gir altså $\ln T \approx -54.6$. Her har vi droppet logaritmen til prefaktoren, som i denne sammenhengen er ubetydelig.

Her er det et poeng at selv om T blir veldig liten, så kan vi få målbare felt-emisjonsstrømmer, pga det store antallet elektroner som kolliderer med overflaten pr sekund. [I metallet har vi $\sim 10^{22}$ ledningselektroner pr cm^3 , og med kinetiske energier av størrelsesorden 5 eV beveger disse seg med en fart som er ca $1/200$ av lyshastigheten.]

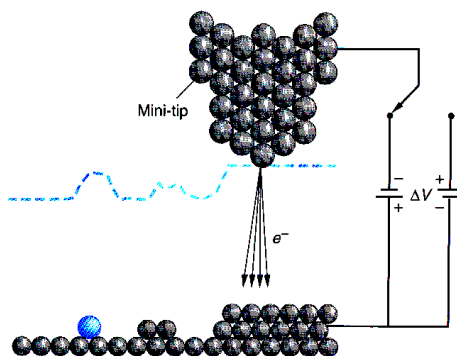
Det er også viktig å være klar over at en moderat endring av $V_0 - E$ eller av \mathcal{E} kan endre T med flere størrelsesordener.²⁰ Dersom vi f.eks reduserer \mathcal{E} fra 10^9 V/m til $\frac{1}{2} \cdot 10^9$ V/m, svarer dette til en dobling av $\ln T$, fra -54.6 til -109.2 . Transmisjons-sannsynligheten endres da fra $\sim 10^{-24}$ til $\sim 10^{-48}$!

Morale er, som vi også har understreket tidligere, at sannsynligheten T er ekstremt følsom for små endringer av lengden eller høyden av barrieren. Dette utnyttes i moderne anvendelser av felt-emisjon, bl.a i **sveipe-tunnelerings-mikroskopi** (Scanning Tunneling Microscopy, STM). I denne teknikken bruker en "rømte" elektroner til å danne seg et bilde av emitterens overflate.

3.6.h Sveipe-tunnelerings-mikroskopi (STM)

(Hemmer s 65, B&J s 153)

I STM-mikroskopet utgjøres barrieren av gapet mellom f.eks en metalloverflate (eller en annen prøve med en ledende overflate) og spissen på en nålformet probe. Ved hjelp av en sinnrik opplagring kan nålspissen bringes svært nær overflaten og beveges (sveipes) parallelt med denne. Som vist i prinsippskissen, settes det en spenning over gapet, slik at det går en svak tunneleringsstrøm. Som vi nettopp har sett vil denne være svært følsom for avstanden, og dermed for strukturen til overflaten av prøven. Det er to måter å gjøre dette på:



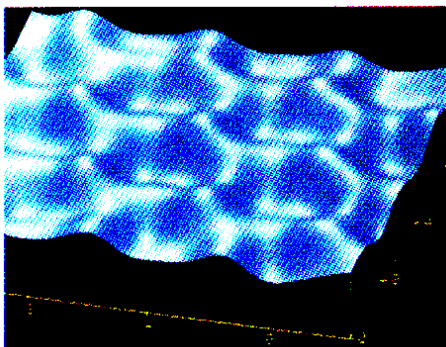
(i) I **konstant-strøm-modus** sørger en tilbakekoblingsmekanisme for å holde konstant avstand (og dermed konstant strøm). Under den sidelengs bevegelsen (sveiping) beveger nålen seg da også vertikalt; den følger "fjellene og dalene i terrenget". Ved å registrere disse vertikale bevegelsene under en systematisk sveiping langs overflaten får en avtegnet

²⁰Størrelsesordener="orders of magnitude" brukes av og til om tierpotenser.

“topografien” til overflaten — eller egentlig til elektrontettheten i overflateatomene — med en vertikal oppløsning som kan være helt ned mot 0.01 Å.

(ii) I **konstant-høyde-modus** sveiper nålen over overflaten i konstant høyde og med konstant spenning over gapet. Strømmen vil da variere med avstanden ned til “terrenget”, og gir indirekte beskjed om topografien.

Bildet nedenfor er av en grafitt-overflate,



og viser tydelig ringstrukturen i grafittlagene. Hver ring inneholder seks karbon-atomer, hvorav tre ser ut til å ligge høyere enn de tre andre. I realiteten ligger de seks *kjernene* i samme plan. De tre atomene som ser ut til å ligge lavest former bindinger med atomer fra neste lag som ligger rett under dem. Derfor forskyves de molekylære orbitalene som sørger for disse bindingene noe nedover, i forhold til orbitalene for de tre øvrige atomene som *ikke* har karbon-atomer rett under seg.²¹ Det er disse ulikhetene i elektrontetthetene som måles med denne metoden.

3.6.i α -desintegrasjon og fusjon

(Hemmer s 65, B&J s 421, Griffiths s 281)

Lenge før tunnelering ble tatt i bruk i teknologi ble det oppdaget at prosessen spiller en sentral rolle i flere viktige fenomen i naturen. Ett av disse er **α -desintegrasjon**, der tunge radioaktive kjerner desintegrerer ved å emittere α -partikler (heliumkjerner).

Det viser seg at kjerner med $Z \geq 84$ og massetall $A(=Z+N) \geq 210$ alle er mer eller mindre ustabile og desintegrerer hovedsaklig via α -emisjon. De eksperimentelle levetidene τ (og halveringstidene $\tau_{1/2}$) for slike α -emittere varierer kolossalt — fra de ekstremt ustabile som f.eks $^{212}_{84}\text{Po}$ med en levetid mindre enn et mikrosekund — og hele veien opp til nesten stabile kjerner med levetider av størrelsesorden universets alder, $\sim 10^{10}$ år, som vi finner bl.a for $^{238}_{92}\text{U}$. Dette utgjør et spenn på ca 25 tierpotenser. Det pussige er at disse levetidene er sterkt korrelert med de kinetiske energiene til de emitterte α -partiklene. Disse er størst

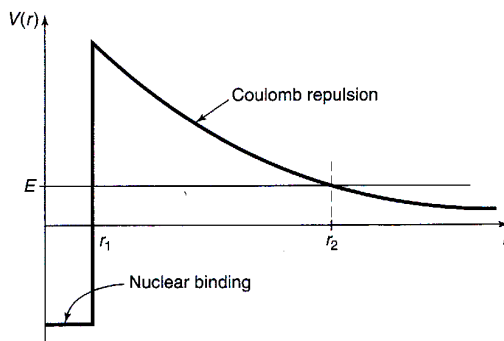
²¹Sveipe-tunnelerings-mikroskopet har en alvorlig svakhet; det krever en elektrisk ledende overflate; eventuelt må overflaten til et ikke-ledende materiale dekket med et ledende lag av atomer. Dette er et problem også for metaller som aluminium, hvor overflaten er dekket av ikke-ledende oksyder. I AFM-mikroskopet (**A**tomic **F**orce **M**icroscope) unngår en dette problemet ved å la en spiss probe av keramikk eller et halvledermateriale gli over overflaten av prøven, omtrent slik stifen på platespilleren glir langs rillene i en grammofonplate. Proben kan presses mot prøven med en svak fjærbelastning, og motkraften skyldes Pauli-prinsippet, som holder de to elektronskyene fra hverandre omtrent på samme måte som i et to-atomig molekyl. Et AFM-mikroskop kan også arbeide i **ikke-kontakt-modus**, der topografien avbildes vha en probe som holder en viss avstand fra prøven. “Avstands-kreftene” som brukes kan være van der Waals-, elektrostatiske, magnetiske eller kapillær-krefter.

for de kortlivede kjernene — opp mot 10 MeV — og minst for de nesten stabile — ned mot ca 4 MeV. Lavere kinetisk energi enn dette observerer en ikke for emitterte α -partikler.

Alt i 1928, dvs straks etter at kvantemekanikken var etablert, foreslo George Gamow (og uavhengig av ham, R.W. Gurney og E.U. Condon) at α -desintegrasjon er en tunneleringsprosess. Gamows forklaring åpenbarer seg når vi ser på potensialet $V(r)$ mellom α -partikkelen med ladning $2e$ og rest-kjernen — ofte kalt **datter-kjernen** — med ladning Ze . Når avstanden r er litt større enn radien r_1 til den tunge kjernen, er V et rent frastøtende Coulomb-potensial,

$$V(r) = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \quad (r \gtrsim r_1).$$

For $r \lesssim r_1$ modifiseres potensialet av den såkalt **sterke kraften** (kjernekraften). Dette er en tiltrekkende kraft som bl.a er ansvarlig for at protoner og nøytroner danner stabile kjerner på tross av Coulomb-frastøtningen mellom protonene. Rekkevidden av de sterke kreftene er svært kort (~ 1 fm). Dette gjør at α -partikkelen utsettes for en kraftig tiltrekkende kraft når den befinner seg like ved overflaten av kjernen ($r \approx r_1$). Resultatet er et totalt potensial som i litt stilisert form ser slik ut:



Kjerneradien r_1 kan empirisk settes til

$$r_1 \approx (1.07 \text{ fm}) \cdot A^{1/3}, \quad (\text{T3.84})$$

som gir $r_1 \sim 6 - 7$ fm for $A \sim 210$ ($Z \sim 80$). Dette betyr at “toppen av Coulomb-barrieren” ligger på anslagsvis

$$V(r_1) = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_1} \sim 30 \text{ MeV}.$$

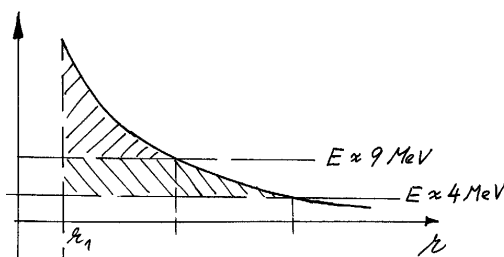
Dette er mye høyere enn energien E til de emitterte α -partiklene. Klassisk kan α -partikkelen derfor ikke slippe ut, selv om den har $E > 0$. Men kvantemekanisk har den en ørliten sjanse til å tunnelere gjennom Coulomb-barrieren hver gang den treffer overflaten av kjernen. Så dette er ikke egentlig en bunden tilstand, men hva vi kan kalle en halvstabil eller metastabil tilstand. For å danne oss en idé om hvor ofte den får sjansen til å stikke av, kan vi halv-klassisk og sterkt forenklet forestille oss at den “fyker mellom veggene” med en hastighet av størrelsesorden $\sqrt{2E/m_\alpha}$. Dette gir en kollisjonsfrekvens av størrelsesorden

$$\nu \sim \frac{v}{2r_1} \sim \frac{c}{2r_1} \sqrt{\frac{2E}{m_\alpha c^2}} \sim 10^{21} \text{ s}^{-1}.$$

Selv om overslaget er omtrentlig og resonnementet er halvklassisk, skjønner vi at transmisjonskoeffisientene T må være veldig små; ellers ville jo levetidene ($\tau = 1/(\nu T)$) bli svært korte! Dette betyr at

$$\ln T \approx -\frac{2}{\hbar} \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{2m_\alpha[V(r) - E]} dr$$

for disse Coulomb-barrierene må være store negative tall; vi har å gjøre med store og svært ugjennomtrengelige barrierer. Da kan vi også, uten å regne, slå fast at det blir stor forskjell på $\ln T$ for $E \approx 9$ MeV og $E \approx 4$ MeV, slik figuren nedenfor illustrerer. Så her ligger forklaringen på at levetidene kan variere med 25 tierpotenser.



Ut fra dette kan vi også skjønne hvorfor det ikke observeres α -radioaktivitet med $E \lesssim 4$ MeV. For α -partikler med lavere energier enn dette blir barrieren så stor at den i praksis er helt ugjennomtrengelig. Levetidene blir større enn 10^{10} år, og slike kjerner er i praksis stabile.

Disse betraktningene illustrerer også hvorfor det er så vanskelig å oppnå *fusjon* av kjerner under laboratoriebetingelser. Selv med temperaturer av størrelsesorden $1.5 \cdot 10^7$ K, som en finner i sentrum av solen, er den termiske kinetiske energien til partiklene så liten som $\frac{3}{2}k_B T \sim 1$ keV. Med slike kinetiske energier blir det svært vanskelig for to kjerner å overvinne Coulomb-barrieren, slik at de kan komme så nær hverandre at de kan fusjonere. Men den lille sjansen som tunnel-effekten gir dem er tilstrekkelig. Det er slike prosesser som holder sola i gang og gir oss muligheten for liv.