

Föreläsning 7, Fysik B för D2

Thomas Nilsson

November 17, 1997

24 Vågfunktioner

Vi såg tidigare att partiklar har vågstruktur med en våglängd som bestäms av de Broglie-våglängden $\lambda = h/p$. Antag att vi känner partikelns rörelsemängd godtyckligt bra, då har vi enligt Heisenbergs relation ingen som helst kunskap om var partikeln befinner sig i rummet. I en dimension kan vi då definiera partikelns **vågfunktion** som

$$\psi(x) = A \sin\left(\frac{2\pi x}{\lambda}\right) = A \sin(kx) \quad (1)$$

där k är partikelns **vågta**l och A en konstant.

Vågfunktionen kan anta negativa och komplexa värden, men det man mäter är $|\psi|^2$ som är **sannolikhetsdensiteten** hos vågfunktionen. I en dimension får vi då:

$$P(x)dx = |\psi|^2 dx$$

Om vågfunktionen är **normaliserad** måste sannolikheten för att hitta partikeln någonstans vara 1:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = 1 \quad (2)$$

Sannolikheten för att hitta partikeln i ett givet intervall $[a, b]$ är då:

$$P_{ab} = \int_a^b |\psi|^2 dx$$

Vågfunktionen är aldrig direkt mätbar, men om vi känner en partikels vågfunktion, kan vi beräkna mätbara storheter som rörelsemängd och energi. För att tex. beräkna en partikels **väntevärde** i position, medelvärde av x som fås genom många mätningar, används:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x |\psi|^2 dx$$

På samma sätt kan vi ta fram väntevärdet för en godtycklig funktion $f(x)$.

25 Schrödingerekvationen

Liksom Maxwells ekvationer beskriver elektromagnetiska vågor, beskriver Schrödingerekvationen de Broglie vågor. Vi har den generella vågekvationen i en dimension:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} \quad (3)$$

Om vi antar att partikelns energi E är konstant, så gäller att $E = hf$ för de Broglie frekvensen. Då frekvensen är konstant så kan vi separera $\psi(x, t)$ i en tidsberoende och en positionsberoende del:

$$\psi(x, t) = \psi(x) \cos(\omega t) \quad (4)$$

i analogi med stående vågor. Om vi nu sätter in (4) i (3) fås:

$$\cos(\omega t) \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\left(\frac{\omega^2}{v^2}\right) \psi \cos(\omega t) \quad (5)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\left(\frac{\omega^2}{v^2}\right) \psi \quad (6)$$

Vi har att $\omega = 2\pi f = 2\pi v/\lambda$ och att $p = h/\lambda$ för de Broglie vågor, vilket ger:

$$\frac{\omega^2}{v^2} = \left(\frac{2\pi v}{\lambda v}\right)^2 = \frac{4\pi^2}{h^2} p^2 = \frac{p^2}{\hbar^2} \quad (7)$$

För den totala energin, summan av kinetisk och potentiell energi, har vi:

$$E = K + U = \frac{mv^2}{2} + U = \frac{(mv)^2}{2m} + U = \frac{p^2}{2m} + U$$

Vilket kan skrivas som:

$$p^2 = 2m(E - U)$$

Vi sätter in i (7) vilket ger:

$$\frac{\omega^2}{v^2} = \frac{p^2}{\hbar^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)$$

detta i (6) ger:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi \quad (8)$$

Detta är den endimensionella **tidsberoende Schrödingerekvationen** som beskriver ett stationärt tillstånd hos ett system. Vi har här använt vågrörelseargument för att komma fram till denna, det är inte en härledning i ordets rätta bemärkelse. Om vi känner till potentiella energin $U(x)$ så är det i varje fall teoretiskt möjligt att lösa Schrödingerekvationen. $U(x)$ är ofta en diskontinuerlig funktion vilket gör att vi får olika lösningar för olika regioner. $\psi(x)$ måste emellertid vara en kontinuerlig funktion, vilket begränsar de tillåtna lösningarna. Dessutom måste $\psi(x)$ uppfylla normaliseringsvillkoret (2), vilket innebär att $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \psi(x) = 0$. Dessutom ska $\frac{\partial \psi}{\partial x^2}$ vara kontinuerlig där $U(x)$ är ändlig.

26 Partikel i låda

Vi kan föreställa oss en partikel som är instängd i en endimensionell lådpotential med bredden L och oändligt höga väggar vid $x \leq 0$ och $x \geq L$. För $0 < x < L$ kan vi sätta $U(x) = 0$. För de regioner som är utanför lådan måste vi ha $\psi = 0$. Inuti lådan gäller:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi = -k^2 \psi \quad (9)$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (10)$$

Denna differentialekvation har lösningen:

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$$

Vi har dessutom randvillkoren $\psi(0) = 0$ och $\psi(L) = 0$. Det ger att $B = 0$ och $kL = n\pi$, där n är ett heltal. (10) ger då:

$$kL = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} L = n\pi$$

De tillåtna energierna fås genom att lösa ut E :

$$E_n = \frac{(n\pi\hbar)^2}{L^2 2m} = \left(\frac{\hbar^2}{8mL^2}\right) n^2, n = 1, 2, 3, \dots \quad (11)$$

De tillåtna vågfunktionerna blir då:

$$\psi_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad (12)$$

Enligt (2) ska vi ha:

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx \\ &= \int_0^L A^2 \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx \\ &= A^2 \left[\frac{L}{2\pi n} \left(\frac{n\pi}{L} x - \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right) \cos\left(\frac{n\pi}{L} x\right) \right) \right]_0^L \\ &= A^2 \frac{L}{2\pi n} (n\pi - \sin(n\pi)) = A^2 \frac{L}{2} = 1 \end{aligned}$$

vilket ger

$$A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

Vi kan alltså se från (11) att energierna är kvantiserade, och att vi aldrig kan nå $E = 0$ även då potentialen har detta värde. Detta är den så kallade **nollpunktsenergin** som nämndes i termodynamikdelen, vi kan aldrig ha energin noll ens vid absoluta nollpunkten.

27 Partikel i låda med ändligt höga väggar

Om vi nu istället tänker oss en partikel med energin E i en lådpotential där väggarna har en ändlig höjd $U > E$ utanför regionen $-a/2 < x < a/2$ så visar det sig att vi har en viss sannolikhet att träffa på partikeln även i de klassiskt förbjudna områdena $x < -a/2$ och $x > a/2$. Vi kan dela in x-axeln i tre regioner (se fig. 1) och lösa Schrödingerekvationen i var och en av dessa.

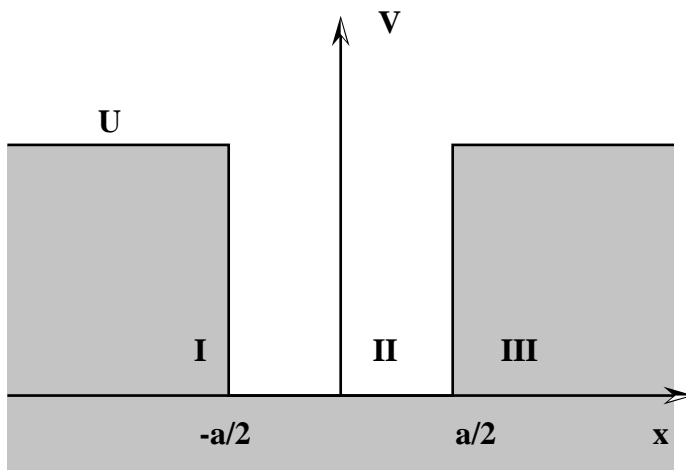


Figure 1: Lådpotential med ändligt höga väggar

Region I Här kan vi skriva Schrödingerekvationen som

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{2m(U - E)}{\hbar^2} \psi \quad (13)$$

Vi hade att $U > E$, så konstanten på höger sida är positiv. Vi kan därför uttrycka (13) som

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = k_I^2 \psi \quad (14)$$

med

$$k_I = \sqrt{\frac{2m(U - E)}{\hbar^2}} \quad (15)$$

Den generella lösningen till denna ekvation är

$$\psi = Ae^{k_I x} + Be^{-k_I x} \quad (16)$$

Men då $x \rightarrow -\infty$ måste lösningen vara begränsad, alltså är $B = 0$, och

$$\psi_I(x) = Ae^{k_I x} \quad (17)$$

Region II Här får vi samma ekvation 9 som tidigare för oändligt höga väggar, men randvillkoren är annorlunda. Den generella lösningen är:

$$\psi_{II}(x) = F \sin(k_{II}x) + G \cos(k_{II}x) \quad (18)$$

med

$$k_{II} = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (19)$$

Region III Här får vi samma lösning som i I, men här måste lösningen vara begränsad då $x \rightarrow \infty$, alltså är $A = 0$ och

$$\psi_{III}(x) = B e^{-k_I x} \quad (20)$$

Som tidigare nämnts måste vågfunktionen och dess derivata vara kontinuerliga vid diskontinuiteter hos potentialen (då den är ändlig). Vi har alltså ett antal villkor enligt:

$$\psi_I(-a/2) = \psi_{II}(-a/2) \quad (21)$$

$$\frac{d\psi_I}{dx}(-a/2) = \frac{d\psi_{II}}{dx}(-a/2) \quad (22)$$

$$\psi_{II}(a/2) = \psi_{III}(a/2) \quad (23)$$

$$\frac{d\psi_{II}}{dx}(a/2) = \frac{d\psi_{III}}{dx}(a/2) \quad (24)$$

Vi får då:

$$A e^{-k_I \frac{a}{2}} = F \sin(k_{II} \frac{-a}{2}) + G \cos(k_{II} \frac{-a}{2}) \quad (25)$$

$$= -F \sin(k_{II} \frac{a}{2}) + G \cos(k_{II} \frac{a}{2})$$

$$k_I A e^{-k_I \frac{a}{2}} = k_{II} [F \cos(k_{II} \frac{-a}{2}) - G \sin(k_{II} \frac{-a}{2})] \quad (26)$$

$$= k_{II} (F \cos(k_{II} \frac{a}{2}) + G \sin(k_{II} \frac{a}{2}))$$

$$B e^{-k_I \frac{a}{2}} = F \sin(k_{II} \frac{a}{2}) + G \cos(k_{II} \frac{a}{2}) \quad (27)$$

$$-k_I B e^{-k_I \frac{a}{2}} = k_{II} [F \cos(k_{II} \frac{a}{2}) + G \sin(k_{II} \frac{a}{2})] \quad (28)$$

Vi ser från fig. 1 att vi har en fullständig symmetri kring $x = 0$. Detta gör att vi kan säga att $|\psi(x)|^2 = |\psi(-x)|^2$, och att $\psi(x) = \pm \psi(-x)$. Vi har alltså två grupper av lösningar, symmetriska och antisymmetriska. För de symmetriska gäller att $F = 0$ då sinus är en antisymmetrisk funktion medan cosinus är en symmetrisk. Då vi sätter $F = 0$ och dividerar (27) med (26) får vi:

$$k_I = k_{II} \tan\left(\frac{k_{II} a}{2}\right) \quad (29)$$

För de antisymmetriska gäller på motsvarande sätt genom division av (28) med (27) med $G = 0$:

$$-k_I = k_{II} \cot\left(\frac{k_{II} a}{2}\right) \quad (30)$$

Dessa ekvationer kan inte lösas analytiskt, vi måste ta till numeriska metoder. Vi kan skriva om (29) och (30) med hjälp av:

$$\alpha = \frac{k_I I a}{2} \quad (31)$$

$$P = \sqrt{\frac{mUa^2}{2\hbar^2}} \quad (32)$$

och (19)) och får då

$$\alpha \tan \alpha = \sqrt{P^2 - \alpha^2} \quad (33)$$

$$-\alpha \cot \alpha = \sqrt{P^2 - \alpha^2} \quad (34)$$

(Detta kan enkelt verifieras genom att sätta in (31) och (32) i (34) och använda (15) och (15).) Vi kan lösa detta grafiskt, då $\sqrt{P^2 - \alpha^2}$ beskriver en cirkel, se fig. 2.

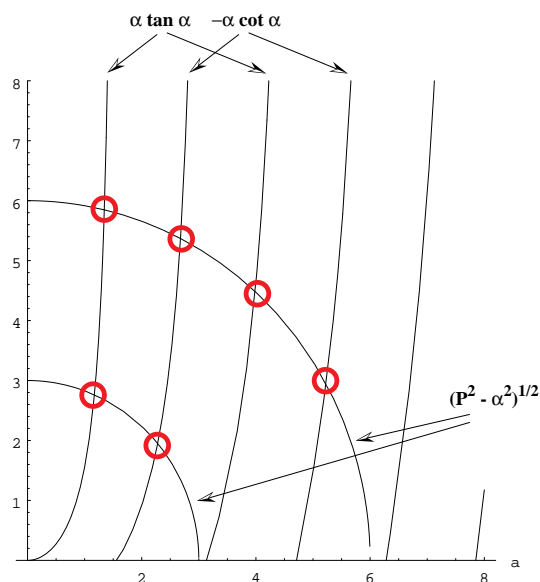


Figure 2: Lösningar till (33) och (34) för $P = 3$ och $P = 6$.

Vi ser att eftersom P är en direkt funktion av U så kommer vi att få fler bundna tillstånd ju djupare potentialgropen är. Med en oändlig potential hade vi oändligt antal tillstånd. De tre första bundna tillstånden visas i fig. 41.18.

28 Tunning

Vi såg i fallet med en lådpotential med ändligt djup att vi hade en penetration i de klassiskt förbjudna områdena. En intressant effekt kallad **tunning** kan uppnås om vi har en potentialbarriär med en ändlig bredd vars höjd överstiger partikelns energi. Se fig. 41.19. En inkommande partikel med en sinusformad vågfunktion kommer att transmittas med en given sannolikhet T och reflekteras med sannolikheten R , dessa kan beräknas på liknande sätt som de tillåtna

tillstånden i en ändligt hög lådpotential, med skarvning av vågfunktionen vid potentialstegen. Approximativt har vi, om $T \ll 1$,

$$T \simeq e^{-2KL}$$

där

$$K = \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}$$

Tunnling förekommer i ett flertal sammanhang, Serway tar upp tunneldioder, Josephsontunnling (kan användas som spänningsnormal) och α -sönderfall. **Scanning tunneling microscope (STM)** är en mycket användbar tillämpning av tunneleffekten. Här låter man en spets som är upphängd i piezoelektriska kristaller befinna sig mycket nära en yta av ett ledande material. Genom det exponentiella avståndsberoendet av tunnelströmmen är den mycket starkt beroende av hur långt från provet som spetsen befinner sig. Genom att röra spetsen över provet och hålla tunnelströmmen konstant kan man få en "bild" av ytan och urskilja enskilda atomer. **Binnig** och **Rohrer** (tillsammans med **Ruska** för elektronmikroskopet) fick nobelpriset för STM 1986.

29 Harmoniska oscillatoren

För en vanlig linjär fjäderkraft gäller

$$F = -kx$$

där x är avvikelser från ekvilibrium vid $x = 0$. För en klassisk fjädervibration med vinkelfrekvensen $\omega = \sqrt{k/m}$ gäller då för den potentiella energin:

$$U = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

och om svängningens maximala amplitud är A ger det oss (i vändlägena har systemet bara potentiell och ingen kinetisk energi):

$$E = K + U = \frac{1}{2}kA^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 A^2$$

Vi sätter in detta i Schrödingerekvationen:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\left[\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right) - \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2 x^2\right]\psi$$

Denna ekvation har lösningar som är av formen polynom multiplicerat med en faktor e^{-Cx^2} , den första lösningen är:

$$\psi = Be^{-(m\omega/2\hbar)x^2}$$

Det visar sig att de tillåtna lösningarna är kvantiserade med ekvidistanta energinivåer, enligt:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, n = 0, 1, 2, \dots$$

Många fysikaliska problem kan uttryckas med hjälp av harmoniska oscillatorn, tex. molekylvibrationer.