Løsning til øving 22 for FY1004, våren 2008

Hamiltonoperatoren for en partikkel i en dimensjon, i et potensial $V(x)$, er

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\ .$$

m er massen til partikkelen og x er posisjonen. Her vil vi først ta for oss et ≪kassepotensial≫

$$V(x) = \begin{cases} -U & \text{for} \quad -a < x < a\ , \\ 0 & \text{for} \quad x < -a \quad \text{eller} \quad x > a\ , \end{cases}$$

der $a > 0$ og $U > 0$ er konstanter.

Vi ser på de bundne tilstandene i dette potensialet, altså de løsningene av den tidsuavhengige Schrödinger-ligningen

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\right)\psi(x) = E\,\psi(x)$$

som har energi $E < 0$. Vi definerer to størrelser κ og k, begge med dimensjon invers lengde, ved at

$$E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} = -U + \frac{\hbar^2k^2}{2m}\ .$$

I følge denne definisjonen er

$$\kappa^2 + k^2 = \frac{2mU}{\hbar^2} = \text{konstant}\ .$$

a) Når vi løser den tidsuavhengige Schrödinger-ligningen, kan vi begrense oss til å lete etter løsninger som har bestemt paritet, det vil si at bølgefunksjonen $\psi(x)$ er enten like, $\psi(-x) = \psi(x)$, eller odde, $\psi(-x) = -\psi(x)$. Begrunn dette.

Resonnementet er gjennomgått ganske grundig i et vedlagt notat.

b) Vis at hvis ψ er en energiegenfunksjon (en løsning av den tidsuavhengige Schrödinger-ligningen) med like paritet, så er

$$\psi(x) = \begin{cases} A\cos(kx) & \text{for} \quad 0 \le x \le a\ , \\ B\,\mathrm{e}^{-\kappa x} & \text{for} \quad x \ge a\ , \end{cases}$$

der A og B er konstanter. Både $\psi(x)$ og den deriverte $\psi'(x)$ må være kontinuerlige i $x = a$. Derfor må den logaritmiske deriverte

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\ln\psi(x) = \frac{\psi'(x)}{\psi(x)}$$

være kontinuerlig i $x = a$. Vis at det er ekvivalent med at

$$|\cos(ka)| = \frac{\hbar}{a\sqrt{2mU}}\,ka \qquad \text{og} \qquad \tan(ka) > 0\ .$$

Skisser hvordan denne ligningen kan løses grafisk for den ukjente $u = ka$.

Den grafiske løsningsmetoden viser at det alltid vil finnes minst en løsning for u. Det vil si at det alltid finnes minst en bunden tilstand med like paritet i en slik potensialbrønn.

Koeffisienten $\hbar/(a\sqrt{2mU})$ bestemmer hvor mange løsninger det finnes.

Hva er betingelsen for at det finnes mer enn en løsning?

En grafisk metode gjennomgås også i notatet.

Betingelsen for mer enn en løsning med like paritet er at

$$\frac{\hbar}{a\sqrt{2mU}} < \frac{1}{\pi}\ .$$

c) Vis at hvis ψ er en energiegenfunksjon med odde paritet, så er

$$\psi(x) = \begin{cases} C\sin(kx) & \text{for} \quad 0 \leq x \leq a\ , \\ D\,\mathrm{e}^{-\kappa x} & \text{for} \quad x \geq a\ , \end{cases}$$

der C og D er konstanter. Igjen må den logaritmiske deriverte være kontinuerlig i $x = a$. Vis at det er ekvivalent med at

$$|\sin(ka)| = \frac{\hbar}{a\sqrt{2mU}}\, ka \qquad \text{og} \qquad \tan(ka) < 0\ .$$

Skisser hvordan denne ligningen kan løses grafisk for den ukjente $u = ka$.

Hvilken betingelse må koeffisienten $\hbar/(a\sqrt{2mU})$ oppfylle for at det skal finnes minst en løsning?

Se det samme notatet igjen. Betingelsen for minst en løsning med odde paritet er at

$$\frac{\hbar}{a\sqrt{2mU}} < \frac{2}{\pi}\ .$$

d) Nå vil vi gjøre potensialbrønnen stadig smalere, og samtidig dypere, på en slik måte at integralet holdes konstant,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\; V(x) = -2aU = \text{konstant} = -W < 0\ .$$

I grensen $a \to 0$ får vi da en potensialbrønn som er en Dirac δ-funksjon,

$$V(x) = -W\,\delta(x)\ .$$

Definisjonen på Diracs δ-funksjon (som ikke er en funksjon i vanlig forstand!) er at

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\; f(x)\,\delta(x) = f(0)$$

for en vilkårlig kontinuerlig funksjon $f(x)$. Spesielt får vi, med den konstante funksjonen $f(x) = 1$, at

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\; \delta(x) = 1\ .$$

Vis at når $a \to 0$ og $U \to \infty$ på en slik måte at $aU = W/2$ er konstant, så vil

$$\frac{\hbar}{a\sqrt{2mU}} \to \infty\ .$$

Hva betyr dette resultatet for antallet bundne tilstander i en potensialbrønn som er en Dirac δ-funksjon?

Siden $W = 2aU = 2a\,|U|$ skal holdes konstant mens $a \to 0$ og $|U| \to \infty$, så har vi at

$$\frac{\hbar}{a\sqrt{2mU}} = \frac{\hbar}{\sqrt{mW}}\,\frac{1}{\sqrt{a}} = \frac{\hbar}{\sqrt{mW^2}}\,\sqrt{2|U|} \to \infty\ .$$

Når $\hbar/(a\sqrt{2mU})$ er stor, men endelig, har potensialbrønnen nøyaktig en bunden tilstand med positiv paritet, og ingen med negativ paritet.

Spørsmålet er hva som skjer med denne tilstanden i grensen når potensialbrønnen blir smalere og dypere og går over til å bli en δ-funksjonsbrønn. Hvis vi kan vise at den tilhørende energiegenverdien går mot en endelig negativ verdi, så sannsynliggjør det at δ-funksjonsbrønnen har nøyaktig en bunden tilstand med positiv paritet, og ingen med negativ paritet. Se neste punkt!

Merk at når $\hbar/(a\sqrt{2mU}) \to \infty$, så fjerner vi oss mer og mer fra det parameterområdet for en endelig brønn der det finnes mer enn en bunden tilstand. Derfor er det rimelig å tro at δ-funksjonsbrønnen ikke har flere enn den ene bundne tilstanden.

e) Når vi lar $a \to 0$, som ovenfor, så finnes det i hvert fall en bunden tilstand så lenge $a > 0$. Vis at energien E_0 for denne tilstanden går mot en grenseverdi når $a \to 0$:

$$E_0 = \frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} = -U + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \to -\frac{mW^2}{2\hbar^2} \ .$$

Hint: Ligningen for variabelen $u = ka$ kan skrives slik (husk at $W = 2aU$):

$$u = \frac{a\sqrt{2mU}}{\hbar}\,|\cos u| = \frac{\sqrt{amW}}{\hbar}\,|\cos u| \ .$$

Siden $|\cos u| \leq 1$, ser vi at når $a \to 0$ vil $u \to 0$. Altså kan vi rekkeutvikle cosinus-funksjonen og skrive ligningen slik:

$$u = \frac{\sqrt{amW}}{\hbar}\left(1 - \frac{u^2}{2}\right) . \tag{1}$$

Dette er en andregradsligning for u som kan løses eksakt, men den enkleste metoden for å løse den, er å iterere. Anta som en nullte ordens tilnærming at $u = 0$, sett det inn på høyresiden i ligning (1) og finn dermed en bedre verdi for u, som i sin tur kan settes inn på høyresiden i ligningen og gi en enda bedre verdi for u.

Enda bedre verdier kunne vi kanskje finne ved å iterere flere ganger, men det er ikke nødvendig. Det gir heller ingen mening å løse denne ligningen mer nøyaktig, uten at vi tar med flere ledd i rekkeutviklingen av $\cos u$.

Legg forøvrig merke til at vi kan kvadrere ligning (1) og bruke at $u \approx 0$, slik at vi får den enklere ligningen

$$u^2 = \frac{amW}{\hbar^2}\,(1 - u^2) \ .$$

Den siste ligningen har løsningen

$$u^2 = \frac{amW}{\hbar^2 + amW} \ .$$

Det gir energien

$$\begin{aligned} E &= -U + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = -U + \frac{\hbar^2 u^2}{2ma^2} = -\frac{W}{2a} + \frac{\hbar^2 amW}{2ma^2(\hbar^2 + amW)} \\ &= \frac{W}{2a}\left(-1 + \frac{\hbar^2}{\hbar^2 + amW}\right) = -\frac{W}{2a}\,\frac{amW}{\hbar^2 + amW} = -\frac{mW^2}{2}\,\frac{1}{\hbar^2 + amW} \ . \end{aligned}$$

I grensen $a \to 0$ går den mot den endelige negative verdien

$$E_0 = -\frac{mW^2}{2\hbar^2} \ .$$