Løsning til øving 23 for FY1004, våren 2008

Diracs δ-funksjon kan defineres ved at $\delta(x) = 0$ for $x \neq 0$, og

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

Vi vil bruke δ-funksjonen som et potensial for en partikkel i en dimensjon. Vi setter

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

der W er en positiv konstant, i Hamiltonoperatoren

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

I øving 19 så vi på δ-funksjonspotensialet som resultatet av en grenseovergang der et kassepotensial gjøres smalere og samtidig dypere, slik at integralet av potensialet holdes konstant lik $-W$. Her vil vi løse direkte den tidsuavhengige Schrödinger-ligningen

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - W\delta(x)\right)\psi(x) = E\,\psi(x) \; .$$

For å finne virkningen av δ-funksjonspotensialet, integrerer vi denne ligningen fra $-\epsilon$ til ϵ, der ϵ er en liten positiv konstant. Det gir ligningen

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\psi'(\epsilon) - \psi'(-\epsilon)\right) - W\psi(0) = E\int_{-\epsilon}^{\epsilon} \mathrm{d}x \; \psi(x) \; .$$

Vi lar ϵ være positiv og gå mot null. Den deriverte $\psi'(x)$ kan ha to ulike grenseverdier når x går mot null, alt etter om x nærmer seg null fra den positive eller negative siden. Vi skriver

$$\psi'(0+) = \lim_{\epsilon\to 0+} \psi'(\epsilon) \qquad \psi'(0-) = \lim_{\epsilon\to 0+} \psi'(-\epsilon) \; .$$

Grenseovergangen $\epsilon \to 0+$ gir ligningen

$$\psi'(0+) - \psi'(0-) = -\frac{2mW}{\hbar^2}\,\psi(0) \; .$$

Den sier at $\psi'(x)$ er diskontinuerlig i $x = 0$, og diskontinuiteten er $-(2mW/\hbar^2)\,\psi(0)$.

En mulighet her er at $\psi(0) = 0$. I så fall er $\psi'(x)$ kontinuerlig i $x = 0$, og δ-funksjonspotensialet har ingen virkning i det hele tatt: bølgefunksjonen er nøyaktig den samme som den ville være uten dette potensialet.

Hvis derimot $\psi(0) \neq 0$, så er $\psi'(x)$ virkelig diskontinuerlig i $x = 0$. Men $\psi(x)$ er fremdeles kontinuerlig i $x = 0$, fordi

$$\psi(\epsilon) - \psi(-\epsilon) = \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \mathrm{d}x \; \psi'(x) \underset{\epsilon\to 0}{\longrightarrow} 0 \; .$$

Det betyr at den logaritmiske deriverte

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

er diskontinuerlig i $x = 0$, slik at

$$\frac{\psi'(0+)}{\psi(0+)} - \frac{\psi'(0-)}{\psi(0-)} = -\frac{2mW}{\hbar^2} \; . \tag{1}$$

Vi ser nå på en bunden tilstand $\psi(x)$, som har energi $E < 0$, og definerer $\kappa > 0$ ved at

$$E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} \; .$$

a) Vis at $\psi(x) = A\,\mathrm{e}^{\kappa x}$ for $x < 0$ og $\psi(x) = B\,\mathrm{e}^{-\kappa x}$ for $x > 0$, der A og B er konstanter.
Hvorfor må $A = B$?
Vis at vi må ha

$$\kappa = \frac{mW}{\hbar^2}\ .$$

For alle $x \neq 0$ ser den tidsuavhengige Schrödinger-ligningen ut som følger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\psi''(x) = E\,\psi(x)\ ,$$

og med $E = -\hbar^2\kappa^2/(2m)$ gir det ligningen

$$\psi''(x) = \kappa^2\psi(x)\ .$$

Den generelle løsningen, uten hensyn til randkravene for $x \to \pm\infty$, er

$$\psi(x) = A\,\mathrm{e}^{\kappa x} + B\,\mathrm{e}^{-\kappa x}\ ,$$

med vilkårlige konstanter A og B. For $x < 0$ er det bare eksponensialfunksjonen $\mathrm{e}^{\kappa x}$ som er akseptabel, det vil si: som ikke divergerer eksponensielt i grensen $x \to -\infty$. For $x > 0$ er bare $\mathrm{e}^{-\kappa x}$ akseptabel. Altså må $\psi(x) = A\,\mathrm{e}^{\kappa x}$ for $x < 0$, og $\psi(x) = B\,\mathrm{e}^{-\kappa x}$ for $x > 0$. Da er $\psi(0-) = A$ og $\psi(0+) = B$, og for at $\psi(x)$ skal være kontinuerlig i $x = 0$, må $A = B$.

Diskontinuitetskravet i $x = 0$ til den logaritmiske deriverte, ligning (1), gir så at

$$-2\kappa = -\frac{2mW}{\hbar^2}\ , \qquad \text{følgelig} \qquad \kappa = \frac{mW}{\hbar^2}\ .$$

b) Dermed har vi funnet en bunden tilstand i potensialet $V(x) = -W\,\delta(x)$.
Hva er energien, og hva er pariteten, til denne tilstanden?
Finnes det flere bundne tilstander?

Energien er

$$E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{mW}{\hbar^2}\right)^2 = -\frac{mW^2}{2\hbar^2}\ .$$

Bølgefunksjonen er

$$\psi(x) = \begin{cases} A\,\mathrm{e}^{\kappa x} & \text{for} \quad x \leq 0\ , \\ A\,\mathrm{e}^{-\kappa x} & \text{for} \quad x \geq 0\ . \end{cases}$$

Den er symmetrisk, $\psi(-x) = \psi(x)$. Med andre ord: den har positiv paritet.

Utledningen vår her gir helt entydig denne ene bundne tilstanden, og viser at det ikke finnes andre bundne tilstander.

Det ble ikke spurt om hva konstanten A skal være for at tilstanden skal være normert, men vi kan jo undersøke saken. Vi skal ha at

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ |\psi(x)|^2 = 2\int_0^{\infty} \mathrm{d}x\ |A|^2\,\mathrm{e}^{-2\kappa x} = \frac{|A|^2}{\kappa}\ ,$$

så vi må velge $A = \sqrt{\kappa}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}$ med en vilkårlig reell fase α. Siden vi har fritt valg, velger vi naturligvis $\alpha = 0$.

c) I resten av oppgaven tar vi for oss et potensial med to δ-funksjonsbrønner, en i $x = -d$ og en i $x = d$, der $d > 0$:

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

Hvor mange bundne tilstander finnes det, og hvilke energier har de, i de to grensetilfellene $d \to 0+$ og $d \to \infty$?

Setter vi $d = 0$, så får vi tilbake en enkelt δ-funksjonsbrønn, $V(x) = -2W\,\delta(x)$, og da vet vi fra før at det finnes en eneste bunden tilstand, som har positiv paritet og energi

$$E = -\frac{m(2W)^2}{2\hbar^2} = -\frac{2mW^2}{\hbar^2} \; .$$

I grensetilfellet $d \to \infty$ har vi to uavhengige δ-funksjonsbrønner, og da venter vi å finne to bundne tilstander: en bunden tilstand for hver brønn.

Mer presist venter vi å finne to tilstander med energi

$$E \approx -\frac{mW^2}{2\hbar^2} \; ,$$

der partikkelen er lokalisert nær den ene eller den andre av de to brønnene.

I tillegg finnes det da tilstander som er superposisjoner av de to lokaliserte tilstandene. I en slik superponert tilstand er partikkelen ikke lokalisert på ett sted, den finnes så å si samtidig på to steder i stor avstand fra hverandre.

Når vi løser problemet (se nedenfor), så vil vi finne to energiegentilstander som har bestemt paritet, den ene har positiv og den andre negativ paritet, og som har *nesten* samme energi. Grunntilstanden (med lavest energi) har positiv paritet.

I en tilstand som har bestemt paritet, er det like stor sannsynlighet for å finne partikkelen nær den ene som den andre brønnen. Partikkelen er da så å si ≪maksimalt ikke-lokalisert≫.

d) Dette potensialet, med to δ-funksjonsbrønner, er symmetrisk om $x = 0$,

$$V(-x) = -W\,\delta(-x+d) - W\,\delta(-x-d) = -W\,\delta(x-d) - W\,\delta(x+d) = V(x) \; ,$$

fordi δ-funksjonen er symmetrisk, $\delta(-x) = \delta(x)$. Når potensialet er symmetrisk, kan vi som vanlig begrense oss til å lete etter energiegenfunksjoner som er enten symmetriske eller antisymmetriske.

Vis at hvis ψ er en energiegenfunksjon (en løsning av den tidsuavhengige Schrödinger-ligningen) med positiv (like) paritet, og med energi $E = -\hbar^2\kappa^2/(2m)$, der $\kappa > 0$, så er

$$\psi(x) = \begin{cases} A\,\mathrm{e}^{\kappa x} & \text{for} \quad x \le -d \; , \\ B\cosh(\kappa x) & \text{for} \quad -d \le x \le d \; , \\ C\,\mathrm{e}^{-\kappa x} & \text{for} \quad x \ge d \; , \end{cases}$$

der A, B og C er konstanter.

Merk at hverken A, B eller C kan være lik null (for ellers ville $\psi(x) = 0$ identisk).

Når $x \ne -d$ og $x \ne d$, så gjelder på samme måte som ovenfor, under punkt a), at

$$\psi(x) = a\,\mathrm{e}^{\kappa x} + b\,\mathrm{e}^{-\kappa x} \; ,$$

med konstanter a og b. For $x < -d$ må vi sette $b = 0$, slik at $\psi(x) = A\,\mathrm{e}^{\kappa x}$ med en konstant A, for å unngå eksponensiell divergens i grensen $x \to -\infty$. For $x > d$ må vi sette $a = 0$, slik at $\psi(x) = C\,\mathrm{e}^{-\kappa x}$ med en konstant C. For $-d < x < d$ må vi sette $a = b$ for å få $\psi(-x) = \psi(x)$, det gir da $\psi(x) = B\cosh(\kappa x)$ med en konstant B.

Kravene til at $\psi(x)$ skal være kontinuerlig i $x = \pm d$ fikserer $B = A\,\mathrm{e}^{-\kappa d}/\cosh(\kappa d)$ og $C = A$ (det siste følger enda mer direkte av at ψ skal ha like paritet, at $\psi(-x) = \psi(x)$). Disse relasjonene får vi ikke bruk for, vi bare nevner dem i forbifarten.

Det som vi derimot får bruk for her, er den logaritmiske deriverte,

$$\frac{\psi'(x)}{\psi(x)} = \begin{cases} \kappa & \text{for} \quad x < -d\ , \\ \kappa\tanh(\kappa x) & \text{for} \quad -d < x < d\ , \\ -\kappa & \text{for} \quad x < d\ . \end{cases}$$

e) For hver av de to δ-funksjonsbrønnene må det gjelde en ligning tilsvarende til ligning (1). For eksempel gjelder i $x = d$ at

$$\frac{\psi'(d+)}{\psi(d+)} - \frac{\psi'(d-)}{\psi(d-)} = -\frac{2mW}{\hbar^2}\ . \tag{2}$$

Vis at det gir en ligning for κ som kan skrives slik:

$$\kappa = \frac{mW}{\hbar^2}\left(1 + \mathrm{e}^{-2\kappa d}\right)\ .$$

Hvor mange løsninger finnes det for κ? Tegn gjerne en figur for å begrunne svaret.

Hva blir κ i de to grensetilfellene $d \to 0+$ og $d \to \infty$?

Diskontinuitetskravet i $x = d$ til den logaritmiske deriverte, ligning (2), gir at

$$-\kappa - \kappa\tanh(\kappa d) = -\frac{2mW}{\hbar^2}\ .$$

Vi har at

$$\kappa + \kappa\tanh(\kappa d) = \kappa + \kappa\,\frac{\mathrm{e}^{\kappa d} - \mathrm{e}^{-\kappa d}}{\mathrm{e}^{\kappa d} + \mathrm{e}^{-\kappa d}} = \frac{2\kappa\,\mathrm{e}^{\kappa d}}{\mathrm{e}^{\kappa d} + \mathrm{e}^{-\kappa d}} = \frac{2\kappa}{1 + \mathrm{e}^{-2\kappa d}}\ .$$

Ligningen som skal løses for κ blir da

$$\kappa = \frac{mW}{\hbar^2}\left(1 + \mathrm{e}^{-2\kappa d}\right)\ ,$$

som også kan skrives slik, for eksempel:

$$\gamma u = 1 + \mathrm{e}^{-u}\ , \tag{3}$$

når vi definerer $u = 2\kappa d$ og

$$\gamma = \frac{\hbar^2}{2mWd}\ .$$

En grafisk framstilling av venstre og høyre side av ligning (3) som funksjoner av u viser at når γ er en positiv konstant, så finnes det alltid nøyaktig en løsning for u. Se figur 1.

I grensen $d \to 0+$ vil $\gamma \to \infty$, og da ser vi av figuren at $\gamma u \to 2$ for den verdien av u som oppfyller ligningen. Det betyr at

$$\kappa = \frac{u}{2d} = \frac{\gamma u}{2\gamma d} \to \frac{2}{2\gamma d} = \frac{2mW}{\hbar^2}\ , \quad \text{som gir energien} \quad E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} = -\frac{2mW^2}{\hbar^2}\ .$$

I grensen $d \to \infty$ vil $\gamma \to 0$, og da ser vi av figuren at $\gamma u \to 1$. Det betyr at

$$\kappa = \frac{u}{2d} = \frac{\gamma u}{2\gamma d} \to \frac{1}{2\gamma d} = \frac{mW}{\hbar^2} \;, \quad \text{som gir energien} \quad E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} = -\frac{mW^2}{2\hbar^2} \;.$$

Disse grenseverdiene for energien er de samme som vi resonnerte oss fram til under punkt c).

f) Vis at hvis ϕ er en energiegenfunksjon med negativ (odde) paritet, og med energi $E = -\hbar^2\kappa^2/(2m)$, der $\kappa > 0$, så er

$$\phi(x) = \begin{cases} A' \, \mathrm{e}^{\kappa x} & \text{for} \quad x \le -d \;, \\ B' \sinh(\kappa x) & \text{for} \quad -d \le x \le d \;, \\ C' \, \mathrm{e}^{-\kappa x} & \text{for} \quad x \ge d \;, \end{cases}$$

der A', B' og C' er konstanter.

Beviset her er en nesten ordrett gjentagelse av beviset under punkt d). Den vesentlige forskjellen er at når bølgefunksjonen skal ha negativ paritet, må vi erstatte cosinus hyperbolicus med sinus hyperbolicus. Den logaritmiske deriverte blir da

$$\frac{\phi'(x)}{\phi(x)} = \begin{cases} \kappa & \text{for} \quad x < -d \;, \\ \kappa \coth(\kappa x) & \text{for} \quad -d < x < d \;, \\ -\kappa & \text{for} \quad x < d \;. \end{cases}$$

g) For bølgefunksjonen ϕ fra punkt f) må det gjelde en ligning tilsvarende til ligning (2). Bruk den til å utlede følgende ligning for κ:

$$\kappa = \frac{mW}{\hbar^2} \left(1 - \mathrm{e}^{-2\kappa d}\right) \;.$$

Hvor mange løsninger finnes det for κ?

Og hva blir κ i de to grensetilfellene $d \to 0+$ og $d \to \infty$?

Diskontinuitetskravet i $x = d$ til den logaritmiske deriverte, ligning (2), gir her at

$$-\kappa - \kappa \coth(\kappa d) = -\frac{2mW}{\hbar^2} \;.$$

Vi har at

$$\kappa + \kappa \coth(\kappa d) = \kappa + \kappa \, \frac{\mathrm{e}^{\kappa d} + \mathrm{e}^{-\kappa d}}{\mathrm{e}^{\kappa d} - \mathrm{e}^{-\kappa d}} = \frac{2\kappa \, \mathrm{e}^{\kappa d}}{\mathrm{e}^{\kappa d} - \mathrm{e}^{-\kappa d}} = \frac{2\kappa}{1 - \mathrm{e}^{-2\kappa d}} \;.$$

Ligningen som skal løses for κ blir da

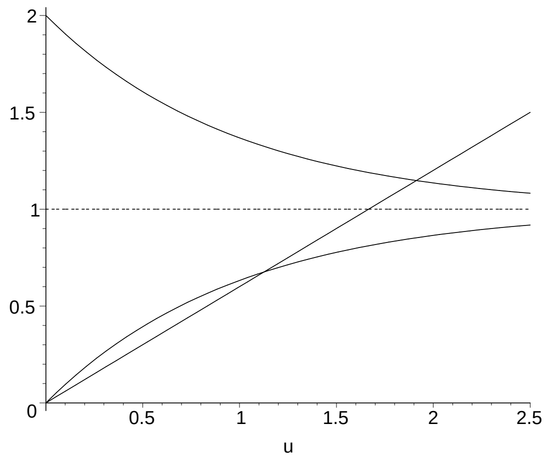
$$\kappa = \frac{mW}{\hbar^2} \left(1 - \mathrm{e}^{-2\kappa d}\right) \;,$$

som også kan skrives slik, med $u = 2\kappa d$ og $\gamma = \hbar^2/(2mWd)$, som før:

$$\gamma u = 1 - \mathrm{e}^{-u} \;. \tag{4}$$

En løsning av denne ligningen er alltid $u = 0$, men det gir ingen bunden tilstand. Det gir nemlig at $\kappa = u/(2d) = 0$, og $\phi(x) = 0$ for alle x fordi $\phi(x) = B' \sinh(kx) = 0$ for $-d < x < d$.

Bare løsninger med $u > 0$ gir bundne tilstander. En grafisk framstilling av venstre og høyre side av ligning (4) viser at for $\gamma \ge 1$ finnes det ingen løsning med $u > 0$, og altså ingen bunden tilstand med odde paritet. For $\gamma < 1$ finnes det nøyaktig en løsning med $u > 0$, og altså nøyaktig en bunden tilstand med odde paritet. Se figur 1.



Figur 1: Grafisk løsning av ligningene (3) og (4). Figuren viser den rette linjen γu med $\gamma = 0.6$, sammen med funksjonene $1 + \mathrm{e}^{-u}$ og $1 - \mathrm{e}^{-u}$. Den konstante verdien 1 er også markert.

Her er en mer utførlig kommentar til figuren. Løsningen av ligning (3) er skjæringspunktet mellom linjen γu og kurven $1+\mathrm{e}^{-u}$. For enhver positiv verdi av γ finnes det nøyaktig en løsning. For den løsningen er alltid $1 < \gamma u < 2$, slik at $\gamma u \to 2$ når $\gamma \to \infty$ og $\gamma u \to 1$ når $\gamma \to 0$.

Løsningen av ligning (4) er skjæringspunktet mellom linjen γu og kurven $1 - \mathrm{e}^{-u}$. Skjæringspunktet $u = 0$ ser vi bort fra, det gir ingen bunden tilstand. Den deriverte av $1 - \mathrm{e}^{-u}$ i $u = 0$ er lik 1, derfor må $\gamma < 1$ for at det skal finnes en løsning. For enhver $\gamma < 1$ finnes det nøyaktig en løsning. For den løsningen er $0 < \gamma u < 1$, slik at $\gamma u \to 0$ når $\gamma \to 1$ og $\gamma u \to 1$ når $\gamma \to 0$.

Siden

$$\gamma u = \frac{\hbar^2}{2mWd}\, 2\kappa d = \frac{\hbar^2 \kappa}{mW} \ ,$$

kan vi skrive energien som

$$E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} = -\frac{mW^2}{2\hbar^2}\, (\gamma u)^2 \ .$$

Da ser vi at $\gamma u = 1$ gir samme energi som for den bundne tilstanden i potensialet $V(x) = -W\delta(x)$, mens $\gamma u > 1$ gir en lavere energi og $\gamma u < 1$ gir en høyere energi.

For å oppsummere: Den bundne tilstanden med positiv paritet i dobbeltbrønnen har alltid lavere energi enn den bundne tilstanden i enkeltbrønnen, og energien er lavere jo nærmere hverandre de to brønnene er. Det gir faktisk en tiltrekningskraft mellom de to brønnene på grunn av partikkelen i den bundne tilstanden.

Den bundne tilstanden med negativ paritet i dobbeltbrønnen eksisterer bare når avstanden mellom brønnene er større enn $2d_1$, der d_1 den verdien av d som gir $\gamma = \hbar^2/(2mWd) = 1$, altså

$$d_1 = \frac{\hbar^2}{2mW} \ .$$

Når denne tilstanden eksisterer, har den alltid høyere energi enn den bundne tilstanden i enkeltbrønnen, og energien er lavere jo større avstanden mellom de to brønnene er.