# Notat til FY1004 Kvantemekanikk, høst/vår 2006/2007

## 1 En partikkel i en dimensjon

### 1.1 Den stasjonære Schrödingerligningen

Hamiltonoperatoren for en partikkel med masse $m$, i en dimensjon, er

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V \; . \tag{1}$$

Andrederivasjonsoperatoren $\mathrm{d}^2/\mathrm{d}x^2$ deriverer en bølgefunksjon $\psi$ to ganger,

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\,\psi = \psi'' \; , \tag{2}$$

og $V = V(x)$ er den potensielle energien (potensialet, i vanlig upresis språkbruk) i posisjonen $x$. Når vi tolker $V$ som en lineær operator, så betyr det at den tilordner til enhver bølgefunksjon $\psi$ en ny bølgefunksjon $\phi = V\psi$ definert ved at $\phi(x) = V(x)\,\psi(x)$ for alle $x$.

Den stasjonære Schrödingerligningen $H\psi = E\psi$, der $\psi$ er en bølgefunksjon og $E$ et tall (med dimensjon energi), er egenverdiligningen for operatoren $H$. Når den er oppfylt, så kalles $\psi$ en egentilstand for $H$ med egenverdi $E$, og $E$ er energien i tilstanden $\psi$. I egenverdiligningen er det også et krav til bølgefunksjonen $\psi$ at den enten skal være kvadratisk integrerbar (også kalt normerbar), dvs. at

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\; |\psi(x)|^2 < \infty \; , \tag{3}$$

eller i hvert fall ikke vokse eksponensielt hverken når $x \to \infty$ eller når $x \to -\infty$.

Ligningen $H\psi = E\psi$ er en andreordens ordinær differensialligning,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\psi''(x) + V(x)\,\psi(x) = E\,\psi(x) \; , \tag{4}$$

som kan omskrives slik:

$$\psi''(x) = \frac{2m}{\hbar^2}\,(V(x) - E)\,\psi(x) \; . \tag{5}$$

Da ser vi at en løsning $\psi(x)$ oppfører seg forskjellig alt etter om $V(x) < E$ eller $V(x) > E$.

I et område der $V(x) < E$, vil $\psi''(x) < 0$ når $\psi(x) > 0$ og $\psi''(x) > 0$ når $\psi(x) < 0$. Det gir en løsning $\psi(x)$ som oscillerer omkring 0, avhengig av $E$ og av hvordan $V(x)$ varierer med $x$.

I et område der $V(x) > E$, derimot, vil $\psi''(x) > 0$ når $\psi(x) > 0$ og $\psi''(x) < 0$ når $\psi(x) < 0$. Igjen avhengig av verdien av $E$ og av hvordan $V(x)$ varierer med $x$, gir det stort sett en løsning $\psi(x)$ som enten vokser eller avtar eksponensielt.

Det siste impliserer at vi ikke kan ha $V(x) > E$ for alle $x$. I så fall ville nemlig $\psi(x)$ vokse eksponensielt i minst en av de to grensene $x \to \pm\infty$, og en slik bølgefunksjon er uakseptabel.

*Hvis den potensielle energien $V(x)$ har en nedre grense $V_0$, hvis altså $V_0 \leq V(x)$ for alle $x$, så er $V_0$ også en nedre grense for energien $E$.*

### 1.2 Hvis $V(x)$ er diskontinuerlig

Den stasjonære Schrödingerligningen forutsetter at bølgefunksjonen $\psi$ er to ganger deriverbar. En deriverbar funksjon er kontinuerlig, og derfor må både $\psi$ og $\psi'$ være kontinuerlige. Ligning (5) viser dermed at hvis potensialet $V(x)$ er en kontinuerlig funksjon av $x$, så eksisterer $\psi''$ og er kontinuerlig.

Anta nå at funksjonen $V(x)$ er diskontinuerlig i et punkt $x = x_0$. Ligning (5) viser at da er $\psi''(x)$ diskontinuerlig i $x = x_0$, unntatt hvis $\psi(x_0) = 0$. Vi kan lære noe om bølgefunksjonen $\psi$ ved å integrere ligning (5) fra $x_1$ til $x_2$, med $x_1 < x_0 < x_2$. Vi får at

$$\psi'(x_2) - \psi'(x_1) = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{x_1}^{x_2} \mathrm{d}x \, (V(x) - E)\, \psi(x) \; . \tag{6}$$

Lar vi $x_1 \to x_0^-$ og $x_2 \to x_0^+$, så ser vi av denne ligningen at da vil $\psi'(x_2) - \psi'(x_1) \to 0$. Altså er $\psi'(x)$ kontinuerlig i $x_0$, og følgelig er også $\psi(x)$ kontinuerlig i $x_0$.

I et punkt $x_0$ der $V(x)$ er diskontinuerlig, kan vi ikke oppfylle den stasjonære Schrödingerligningen som en andreordens differensialligning, ettersom $\psi''(x_0)$ er udefinert (ikke har noen entydig verdi), stadig med unntak av spesialtilfellet $\psi(x_0) = 0$. I et slikt punkt oppfyller vi Schrödingerligningen ved å kreve at $\psi$ og $\psi'$ begge skal være kontinuerlige.

De to kontinuitetskravene til $\psi$ og $\psi'$ impliserer at den såkalte *logaritmiske deriverte*

$$\frac{\psi'}{\psi} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \ln \psi \tag{7}$$

er kontinuerlig. Noen ganger får vi all den informasjonen vi trenger, ut av dette ene kravet. Merk at det gir god mening å snakke om logaritmen av $\psi$ selv om $\psi$ skulle være negativ, eller til og med kompleks. Logaritmen av et kompleks tall $z \neq 0$ er et kompleks tall $w = \ln z$ slik at $\mathrm{e}^w = z$, og når $z \neq 0$ finnes det alltid en løsning for $w$. Faktisk finnes det uendelig mange løsninger, for når $w$ er en løsning, er $w + 2n\pi\mathrm{i}$ med heltallig $n$ en løsning, ettersom $\mathrm{e}^{2n\pi\mathrm{i}} = 1$.

### 1.3 Paritet

Paritetsoperatoren $P$ defineres ved at

$$[P\psi](x) = \psi(-x) \; . \tag{8}$$

Det vil si: Gitt en bølgefunksjon $\psi$, er $\phi = P\psi$ en ny bølgefunksjon definert ved at $\phi(x) = \psi(-x)$ for alle $x$. Det er opplagt at

$$P^2 = I = \text{identitetsoperatoren} \; . \tag{9}$$

For å gjøre helt klart hva vi snakker om: Identitetsoperatoren $I$ er definert ved at $I\psi = \psi$ for alle $\psi$. At $P^2 = I$, betyr at $P^2\psi = I\psi = \psi$ for alle $\psi$. Med $P^2$ menes operatoren $P$ brukt to ganger: $P^2\psi = P(P\psi)$. Hvis vi skriver $\psi_1 = P^2\psi$, så betyr det at $\psi_1 = P\psi_2$ der $\psi_2 = P\psi$. At $\psi_2 = P\psi$, betyr at $\psi_2(x) = \psi(-x)$ for alle $x$, og at $\psi_1 = P\psi_2$, betyr at $\psi_1(x) = \psi_2(-x) = \psi(-(-x)) = \psi(x)$ for alle $x$. Men at $\psi_1(x) = \psi(x)$ for alle $x$, betyr pr. definisjon at $\psi_1$ og $\psi$ er samme funksjon, at $\psi_1 = \psi$, altså $P^2\psi = \psi$. Siden dette gjelder for alle $\psi$, er $P^2 = I$.

Fordi $P^2 = I$, må en egenverdi $\eta$ for operatoren $P$ oppfylle ligningen $\eta^2 = 1$, slik at $\eta = 1$ eller $\eta = -1$. Egenverdiligningen

$$P\psi = \eta\psi \tag{10}$$

impliserer nemlig at

$$\psi = P^2\psi = P(P\psi) = P(\eta\psi) = \eta(P\psi) = \eta(\eta\psi) = \eta^2\psi \ . \tag{11}$$

Eller for å si det samme på en mer omstendelig måte: $\psi(x) = \eta^2\psi(x)$ for alle $x$. En egenfunksjon for $P$, eller for en hvilken som helst operator, kan ikke være identisk lik null, vi kan altså ikke ha at $\psi(x) = 0$ for alle $x$. Følgelig må $\eta^2 = 1$ og $\eta = \pm 1$.

I mellomregningen i ligning (11) brukte vi at operatoren $P$ er lineær, slik at $P(\eta\psi) = \eta(P\psi)$. At $P$ er lineær, betyr pr. definisjon at

$$P(a\psi_1 + b\psi_2) = aP\psi_1 + bP\psi_2 \tag{12}$$

for to vilkårlige funksjoner $\psi_1$ og $\psi_2$ og to vilkårlige komplekse konstanter $a$ og $b$.

For å gjøre helt klart igjen hva vi snakker om, la oss bevise grundig at $P$ er lineær. La $\psi_3 = a\psi_1 + b\psi_2$, $\psi_4 = P\psi_3$, $\psi_5 = P\psi_1$, $\psi_6 = P\psi_2$ og $\psi_7 = aP\psi_1 + bP\psi_2 = a\psi_5 + b\psi_6$. Vi skal vise at $\psi_4 = \psi_7$, dvs. at $\psi_4(x) = \psi_7(x)$ for alle $x$. For alle $x$ gjelder at $\psi_3(x) = a\psi_1(x) + b\psi_2(x)$, og at

$$\psi_4(x) = \psi_3(-x) = a\psi_1(-x) + b\psi_2(-x) \ . \tag{13}$$

Videre gjelder for alle $x$ at

$$\psi_7(x) = a\psi_5(x) + b\psi_6(x) = a\psi_1(-x) + b\psi_2(-x) \ . \tag{14}$$

Dermed har vi vist at $\psi_4 = \psi_7$, med andre ord at $P$ er en lineær operator.

Egenverdien $\eta$ i egenverdiligningen $P\psi = \eta\psi$ kaller vi *pariteten* til bølgefunksjonen $\psi$. Hvis $\eta = 1$, så er funksjonen symmetrisk: $\psi(-x) = \psi(x)$ for alle $x$. Hvis $\eta = -1$, så er funksjonen antisymmetrisk: $\psi(-x) = -\psi(x)$ for alle $x$.

En vilkårlig bølgefunksjon kan alltid skrives som en sum $\psi = \psi_s + \psi_a$, der $\psi_s$ er symmetrisk, $P\psi_s = \psi_s$, og $\psi_a$ er antisymmetrisk, $P\psi_a = -\psi_a$. Vi har i så fall at

$$P\psi = P\psi_s + P\psi_a = \psi_s - \psi_a \ . \tag{15}$$

Ligningene $\psi = \psi_s + \psi_a$ og $P\psi = \psi_s - \psi_a$ har entydige løsninger for $\psi_s$ og $\psi_a$,

$$\psi_s = \frac{1}{2}\,(\psi + P\psi) \ , \qquad \psi_a = \frac{1}{2}\,(\psi - P\psi) \ . \tag{16}$$

Som igjen betyr at

$$\psi_s(x) = \frac{1}{2}\,(\psi(x) + \psi(-x)) \ , \qquad \psi_a(x) = \frac{1}{2}\,(\psi(x) - \psi(-x)) \ , \tag{17}$$

for alle $x$. Kontroll på at $\psi_s$ er symmetrisk:

$$P\psi_s = \frac{1}{2}\,(P\psi + P^2\psi) = \frac{1}{2}\,(P\psi + \psi) = \psi_s \ , \tag{18}$$

og at $\psi_a$ er antisymmetrisk:

$$P\psi_a = \frac{1}{2}\,(P\psi - P^2\psi) = \frac{1}{2}\,(P\psi - \psi) = -\psi_a \ . \tag{19}$$

### 1.4 Symmetrisk potensial

Anta at potensialet (det vil si: den potensielle energien) er refleksjonssymmetrisk om $x = 0$, det vil si at $V(x) = V(-x)$ for alle $x$. Da kommuterer Hamiltonoperatoren $H$ med paritetsoperatoren $P$, vi skriver at $HP = PH$.

La oss gå gjennom beviset i detalj. At $HP = PH$, betyr pr. definisjon at $HP\psi = PH\psi$ for enhver bølgefunksjon $\psi$. La $\psi_1 = HP\psi$, det betyr at $\psi_1 = H\psi_2$ der $\psi_2 = P\psi$. At $\psi_2 = P\psi$, betyr at for alle $x$ er $\psi_2(x) = \psi(-x)$. At

$$\psi_1 = H\psi_2 = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V\right)\psi_2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\psi_2'' + V\psi_2 \ , \tag{20}$$

betyr at for alle $x$ er

$$\psi_1(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\psi_2''(x) + V(x)\,\psi_2(x) \ . \tag{21}$$

Siden $\psi_2(x) = \psi(-x)$, er $\psi_2'(x) = -\psi'(-x)$ og $\psi_2''(x) = \psi''(-x)$, følgelig er

$$\psi_1(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\psi''(-x) + V(x)\,\psi(-x) \ . \tag{22}$$

La videre $\psi_3 = PH\psi$, det betyr at $\psi_3 = P\psi_4$ der $\psi_4 = H\psi$. At $\psi_4 = H\psi$, betyr at for alle $x$ er

$$\psi_4(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\psi''(x) + V(x)\,\psi(x) \ . \tag{23}$$

At $\psi_3 = P\psi_4$ betyr nå at for alle $x$ er

$$\psi_3(x) = \psi_4(-x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\psi''(-x) + V(-x)\,\psi(-x) \ . \tag{24}$$

Alt i alt: ligningen $HP = PH$ betyr at $\psi_1 = HP\psi = PH\psi = \psi_3$ for alle $\psi$, og det betyr igjen at $\psi_1(x) = \psi_3(x)$ for alle $\psi$ og alle $x$. Ved å sammmenligne ligningene (22) og (24) ser vi at det er tilfelle hvis og bare hvis $V(x) = V(-x)$ for alle $x$.

### 1.5 Samtidige egentilstander for kommuterende operatorer

Når $HP = PH$, når altså Hamiltonoperatoren $H$ kommuterer med paritetsoperatoren $P$, har det den viktige konsekvensen at vi kan begrense oss til å lete etter løsninger av egenverdiligningen $H\psi = E\psi$ der $\psi$ samtidig er en egenfunksjon for $P$, altså der $\psi$ er enten symmetrisk eller antisymmetrisk.

Dette er et eksempel på et generelt matematisk teorem:

> *Hvis to Hermiteske operatorer $A$ og $B$ kommuterer, altså hvis $AB = BA$, så har de et fullstendig sett av felles egenfunksjoner.*

Vi har foreløpig ikke definert hva som menes med Hermiteske operatorer, eller med fullstendige sett av egenfunksjoner. Men det spiller ikke så stor rolle her, vi kan behandle spesialtilfellet $HP = PH$ uten den kunnskapen. Her er et bevis for at vi kjenner alle egenfunksjonene til $H$ når vi kjenner alle de symmetriske og antisymmetriske egenfunksjonene.

Anta at egenverdiligningen $H\psi = E\psi$ er oppfylt, og at $HP = PH$. Definer $\psi_1 = P\psi$, da er $\psi$ og $\psi_1$ begge egenfunksjoner for $H$ med samme egenverdi $E$. Bevis:

$$H\psi_1 = HP\psi = PH\psi = P(H\psi) = P(E\psi) = EP\psi = E\psi_1 \; . \tag{25}$$

Nå finnes tre muligheter. Hvis $\psi$ er symmetrisk, $P\psi = \psi$, eller antisymmetrisk, $P\psi = -\psi$, så er $\psi_1 = P\psi = \pm\psi$ den samme egenfunksjonen som $\psi$, for vi bryr oss ikke om minustegn eller andre konstante faktorer når vi sammenligner egenfunksjoner.

Den tredje muligheten er at $\psi$ hverken er symmetrisk eller antisymmetrisk. Da kan vi lage både en symmetrisk bølgefunksjon $\psi_s = \psi + \psi_1 = \psi + P\psi$ og en antisymmetrisk bølgefunksjon $\psi_a = \psi - \psi_1 = \psi - P\psi$ som begge er egenfunksjoner for $H$ med egenverdien $E$:

$$H(\psi \pm \psi_1) = H\psi \pm H\psi_1 = E\psi \pm E\psi_1 = E(\psi \pm \psi_1) \; . \tag{26}$$

Alle de tre mulighetene gir oss egenfunksjoner for $H$ som har en bestemt paritet, $+1$ eller $-1$, det vil si, de er enten symmetriske eller antisymmetriske. I det tredje tilfellet har vi et degenerert energinivå, det vil si at vi har mer enn en egentilstand med en gitt energi $E$, og dessuten har vi egenfunksjoner $\psi = \psi_s + \psi_a$ og $\psi_1 = P\psi = \psi_s - \psi_a$ som hverken er symmetriske eller antisymmetriske.

## 2 Endimensjonalt kassepotensial

Her vil vi løse den stasjonære Schrödingerligningen $H\psi = E\psi$ med

$$V(x) = \begin{cases} U & \text{for} \quad -a < x < a \; , \\ 0 & \text{ellers} \; . \end{cases} \tag{27}$$

Vi antar i første omgang at $U < 0$.

Vi argumenterte ovenfor med at vi ikke kan ha at $E < V(x)$ for alle $x$. Vi kan altså ikke ha $E < U < 0$. Grensetilfellet $E = U < 0$ kan vi også utelukke, det ville også gi at $\psi$ vokser eksponensielt i minst en av de to grensene $x \to \pm\infty$. (Oppgave: vis det!)

Her ser vi på tilfellet $U < E < 0$, og vi definerer $\kappa > 0$ og $k > 0$ slik at

$$E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} = U + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \; . \tag{28}$$

Det siste likhetstegnet her gir den ene av de to ligningene vi trenger for å beregne de to ukjente $\kappa$ og $k$, nemlig

$$\kappa^2 + k^2 = -\frac{2mU}{\hbar^2} = \frac{2m|U|}{\hbar^2} \; . \tag{29}$$

Tilstander med negativ energi, $E < 0$, i et potensial $V(x)$ som er null i begge grensene $x \to \pm\infty$, er *bundne tilstander*. Bølgefunksjonen må gå eksponensielt mot null for $x \to \pm\infty$ (vi kan ikke tillate at den vokser eksponensielt), og da kan partikkelen aldri bevege seg svært langt bort. Klassisk sett gjelder det en enda strengere begrensning: i følge klassisk fysikk kan partikkelen aldri bevege seg inn i et område med $V(x) > E$.

For $-a \leq x \leq a$ er, i følge Schrödingerligningen,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\psi''(x) + U\psi(x) = E\psi(x) \; . \tag{30}$$

Vi setter inn

$$E = U + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \ , \tag{31}$$

og får ligningen

$$\psi''(x) = -k^2 \psi(x) \ . \tag{32}$$

Den generelle løsningen av denne ligningen er

$$\begin{aligned} \psi(x) &= A\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + B\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \ , \\ \psi'(x) &= \mathrm{i}kA\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} - \mathrm{i}kB\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \ . \end{aligned} \tag{33}$$

Her er $A$ og $B$ komplekse integrasjonskonstanter, det skal ganske riktig være to av dem for en andreordens ordinær differensialligning som denne.

For $x > a$ er, i følge Schrödingerligningen,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\psi''(x) = E\psi(x) \ . \tag{34}$$

Sett inn

$$E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} \ , \tag{35}$$

det gir at

$$\psi''(x) = \kappa^2 \psi(x) \ . \tag{36}$$

Den generelle løsningen er

$$\psi(x) = C\,\mathrm{e}^{\kappa x} + D\,\mathrm{e}^{-\kappa x} \ , \tag{37}$$

igjen med to komplekse integrasjonskonstanter $C$ og $D$. Den eneste akseptable løsningen, som ikke går for raskt mot uendelig når $x \to +\infty$, er

$$\psi(x) = D\,\mathrm{e}^{-\kappa x} \ . \tag{38}$$

Tilfellet $x < -a$ trenger vi ikke behandle særskilt, fordi vi nå utnytter at potensialet er symmetrisk om $x = 0$, at $V(-x) = V(x)$, og begrenser oss til å lete etter egenfunksjoner til $H$ som er enten symmetriske eller antisymmetriske.

Bare punktet $x = a$, der $V(x)$ er diskontiuerlig, står igjen. Som vi argumenterte ovenfor, må vi kreve at $\psi$ og $\psi'$ skal være kontinuerlige funksjoner i $x = \pm a$. Det er nok å kreve at den logaritmiske deriverte av $\psi$,

$$\frac{\psi'(x)}{\psi(x)} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\,\ln \psi(x) \ , \tag{39}$$

skal være kontinuerlig.

### 2.1 Symmetrisk bølgefunksjon, $P\psi = \psi$

I dette tilfellet er $\psi(-x) = \psi(x)$, for alle $x$. Derivasjon gir at $-\psi'(-x) = \psi'(x)$, og når vi setter inn $x = 0$, får vi at $-\psi'(0) = \psi'(0)$, dvs. $\psi'(0) = 0$.

Vi begrenser oss følgelig til området $x \geq 0$, og krever at $\psi'(0) = 0$. Ligning (33) gir da for $0 \leq x \leq a$ at

$$\psi(x) = 2A\cos(kx) \ . \tag{40}$$

For $x \geq a$ er $\psi(x) = D\,\mathrm{e}^{-\kappa x}$. Kontinuitet av $\psi'/\psi$ for $x = a$ gir ligningen

$$-\frac{k\sin(ka)}{\cos(ka)} = -\kappa \ . \tag{41}$$

Siden vi antok at $k > 0$ og $\kappa > 0$, må $\sin(ka)$ og $\cos(ka)$ ha samme fortegn.

De to ligningene (29) og (41) kan nå løses for de to ukjente $\kappa$ og $k$. Vi kan bruke ligning (41) til å sette inn for $\kappa$ i ligning (29), det gir at

$$k^2\left(\frac{\sin^2(ka)}{\cos^2(ka)} + 1\right) = \frac{2m|U|}{\hbar^2} \ , \tag{42}$$

og etter en enkel omforming,

$$k^2 = \frac{2m|U|}{\hbar^2}\cos^2(ka) \ . \tag{43}$$

Vi trekker ut kvadratroten, og får ligningen

$$\beta u = |\cos u| \ , \tag{44}$$

etter at vi innfører de dimensjonsløse størrelsene $u = ka$ og

$$\beta = \frac{\hbar}{\sqrt{2m|U|}\,a} \ . \tag{45}$$

Parameteren $\beta$ karakteriserer potensialbrønnen. Hvis $u$ er en løsning av ligning (44), og dessuten $\cos u$ og $\sin u$ har samme fortegn, så gir det en tilstand med energi

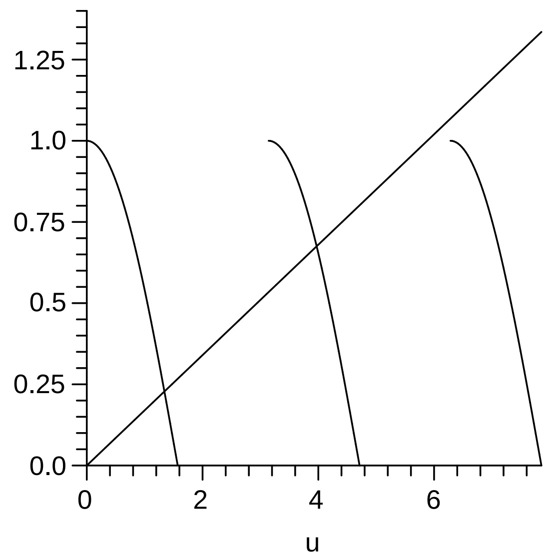
$$E = U + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = U + \frac{\hbar^2 u^2}{2ma^2} \ . \tag{46}$$

Figur 1 viser hvordan ligning (44) kan løses grafisk. Løsningene er skjæringspunktene mellom den rette linjen $\beta u$ og kurven $|\cos u|$, i intervallene der $\sin u$ og $\cos u$ har samme fortegn, nemlig for $u$ mellom $n\pi$ og $(n+\frac{1}{2})\pi$ der $n = 0, 1, 2, \ldots$.

Figuren viser at det alltid finnes minst en løsning for $u$ mellom 0 og $\pi/2$.

> *En endimesjonal potensialbrønn har alltid minst en bunden tilstand med symmetrisk bølgefunksjon.*

Figuren viser også at for $\beta > 1/\pi$ finnes det nøyaktig en bunden tilstand med symmetrisk bølgefunksjon. For $1/\pi > \beta > 1/(2\pi)$ finnes det nøyaktig to bundne tilstander med symmetrisk bølgefunksjon. Og så videre. Det kommer inn en ny løsning hver gang vi passerer




Figur 1: Grafisk løsning av ligningen $\beta u = |\cos u|$ når $\beta = 0{,}17$, med tilleggskravet at $\cos u$ og $\sin u$ har samme fortegn.

en grensverdi $\beta = j/\pi$ med $j = 1, 2, 3, \ldots$. Men hva skjer akkurat i grensetilfellet $\beta = j/\pi$, eksisterer den nye bundne tilstanden da? Svaret er nei, etter et litt grundigere resonnement.

La oss se nærmere for eksempel på grensetilfellet

$$\beta = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(-U)}\,a} = \frac{1}{\pi} \; . \tag{47}$$

Den nye løsningen som da oppstår, er $u = ka = \pi$, som gir

$$E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} = U + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = U + \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} = 0 \; , \tag{48}$$

og altså $\kappa = 0$. Bølgefunksjonen for $-a \le x \le a$ er

$$\psi(x) = 2A\cos(kx) = 2A\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) , \tag{49}$$

som gir at

$$\psi(a) = 2A\cos\pi = -2A \; , \qquad \psi'(a) = -\frac{2A\sin\pi}{a} = 0 \; . \tag{50}$$

For $x > a$ har vi Schrödingerligningen

$$\psi''(x) = \kappa^2\psi(x) = 0 \; . \tag{51}$$

Når $\kappa = 0$, er ikke de to ekponensialfunksjonene $\psi(x) = \mathrm{e}^{\pm\kappa x}$ uavhengige lenger, men vi kjenner godt den generelle løsningen for $\psi$, som er

$$\psi(x) = C + Dx \; , \tag{52}$$

med konstanter $C$ og $D$. Den gir at

$$\psi(a) = C + Da \ , \qquad \psi'(a) = D \ . \tag{53}$$

Kontinuiteten av $\psi$ og $\psi'$ i $x = a$ krever at $D = 0$ og $C = -2A$. Dette gir for så vidt en akseptabel bølgefunksjon, men den går ikke mot null for $|x| \to \infty$, og beskriver følgelig ikke en bunden tilstand.

### 2.2 Antisymmetrisk bølgefunksjon, $P\psi = -\psi$

I dette tilfellet er $\psi(-x) = -\psi(x)$, for alle $x$. Når vi setter inn $x = 0$, får vi at $\psi(0) = -\psi(0)$, dvs. $\psi(0) = 0$.

Vi ser på området $x \geq 0$, og krever at $\psi(0) = 0$. Ligning (33) gir for $0 \leq x \leq a$ at

$$\psi(x) = 2\mathrm{i}A \sin(kx) \ . \tag{54}$$

For $x \geq a$ er $\psi(x) = D\,\mathrm{e}^{-\kappa x}$, og kontinuitet av $\psi'/\psi$ for $x = a$ gir ligningen

$$\frac{k\cos(ka)}{\sin(ka)} = -\kappa \ . \tag{55}$$

Siden vi antok at $k > 0$ og $\kappa > 0$, må $\sin(ka)$ og $\cos(ka)$ ha motsatt fortegn. Vi kan bruke ligning (55) til å sette inn for $\kappa$ i ligning (29), det gir at

$$k^2 \left( \frac{\cos^2(ka)}{\sin^2(ka)} + 1 \right) = \frac{2m|U|}{\hbar^2} \ , \tag{56}$$

og etter en enkel omforming,

$$k^2 = \frac{2m|U|}{\hbar^2} \sin^2(ka) \ . \tag{57}$$

Vi trekker ut kvadratroten, og får ligningen

$$\beta u = |\sin u| \ , \tag{58}$$

etter at vi innfører de dimensjonsløse størrelsene $u = ka$ og $\beta$, som før. Hvis $u$ er en løsning av ligning (58), og dessuten $\cos u$ og $\sin u$ har motsatt fortegn, så gir det igjen en tilstand med energi

$$E = U + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = U + \frac{\hbar^2 u^2}{2ma^2} \ . \tag{59}$$

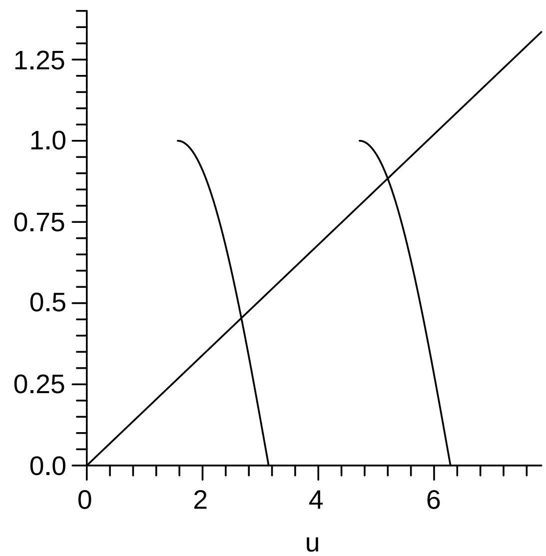
Figur 2 viser hvordan ligning (58) kan løses grafisk. Løsningene er skjæringspunktene mellom den rette linjen $\beta u$ og kurven $|\sin u|$, i intervallene der $\sin(ka)$ og $\cos(ka)$ har motsatt fortegn, nemlig for $u$ mellom $(n + \frac{1}{2})\pi$ og $(n + 1)\pi$ der $n = 0, 1, 2, \ldots$. Betingelsen for at det finnes minst en bunden tilstand med antisymmetrisk bølgefunksjon, er at $\beta < 2/\pi$.

Figur 3 er figurene 1 og 2 sammen. Annethvert skjæringspunkt i denne figuren gir symmetriske bølgefunksjoner, og annethvert gir antisymmetriske bølgefunksjoner.

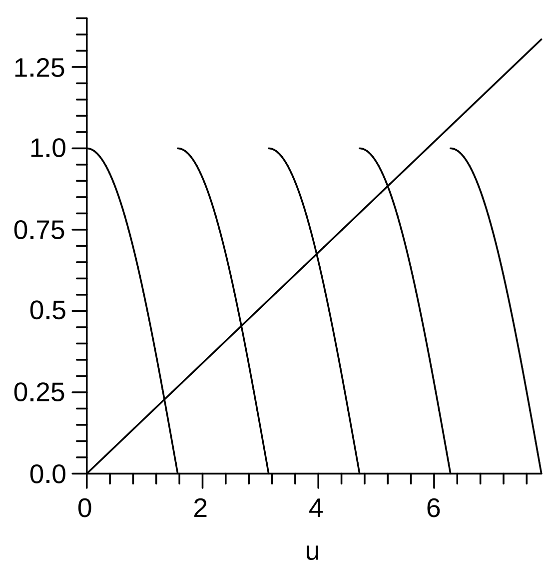
I grensen når vi gjør potensialbrønnen uendelig dyp, altså lar $U \to -\infty$ (med $a$ konstant), vil $\beta \to 0$, og vi får uendelig mange løsninger

$$u_n = k_n a = \frac{n\pi}{2} \ , \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \ . \tag{60}$$

Annenhver løsning gir symmetriske og antisymmetriske bølgefunksjoner.




Figur 2: Grafisk løsning av ligningen $\beta u = |\sin u|$ når $\beta = 0{,}17$, med tilleggskravet at $\cos u$ og $\sin u$ har motsatt fortegn.




Figur 3: Figurene 1 og 2 slått sammen til en figur, som viser samtidig løsningene med symmetrisk og antisymmetrisk bølgefunksjon.

### 2.3 Kommentarer til eksempel 6.8 og 6.9 i boka

I disse avsnittene i læreboka behandles et eksempel med et elektron i en potensialbrønn med dybde (høyde) $|U| = 100$ eV og bredde $L = 2a = 0{,}200$ nm. Det gir, i følge boka, at

$$\frac{\hbar}{\sqrt{2m|U|}} = 0{,}0195 \text{ nm} . \tag{61}$$

I vår notasjon er da

$$\beta = \frac{\hbar}{\sqrt{2m|U|}\,a} = \frac{0{,}0195 \text{ nm}}{0{,}100 \text{ nm}} = 0{,}195 . \tag{62}$$

Antallet bundne tilstander er fire, to symmetriske og to antisymmetriske, idet

$$\beta\,\frac{3\pi}{2} = 0{,}92 < 1 , \qquad \beta\,\frac{4\pi}{2} = 1{,}23 > 1 . \tag{63}$$

Sammenlign med figur 3, der $\beta = 0{,}17$ og det også finnes fire bundne tilstander.

Grunntilstanden har energi

$$E = -|U| + \frac{\hbar^2 u^2}{2ma^2} , \tag{64}$$

der $u$ mellom 0 og $\pi/2$ er løsning av ligningen

$$f(u) \equiv \beta u - \cos u = 0 . \tag{65}$$

Denne ligningen er lett å løse numerisk, f.eks. med følgende metode, som kalles Newton–Raphson-metoden. Hvis vi har en tilnærmet løsning $u_n$, løser vi den tilnærmete ligningen

$$f(u) \approx f(u_n) + f'(u_n)\,(u - u_n) = 0 \tag{66}$$

for $u$, det gir neste approksimasjon,

$$u_{n+1} = u_n - \frac{f(u_n)}{f'(u_n)} = u_n - \frac{\beta u_n - \cos u_n}{\beta + \sin u_n} . \tag{67}$$

Starter vi for eksempel med $u_0 = \pi/2 = 1{,}57\ldots$ og itererer to-tre ganger, får vi løsningen $u = 1{,}312$, som gir

$$E = -|U| + 6{,}560 \text{ eV} . \tag{68}$$

Den verdien på 6,52 eV som påstås i læreboka å være eksakt, er altså ikke helt eksakt likevel.

Verre er at den tilnærmingsmetoden som presenteres i eksempel 6.8, er lite verdt, fordi den uansett aldri kan gi det eksakte svaret. Metoden bygger på ligning (28),

$$E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} = U + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} . \tag{69}$$

Innenfor brønnen, for $-a \le x \le a$, er bølgefunksjonen enten en cosinusfunksjon,

$$\psi(x) = A\,\cos(kx) , \tag{70}$$

dersom den er symmetrisk, eller en sinusfunksjon,

$$\psi(x) = B \sin(kx) \ , \tag{71}$$

dersom den er antisymmetrisk. Til høyre for brønnen, for $x \geq a$, er bølgefunksjonen en avtagende eksponensialfunksjon,

$$\psi(x) = C \, \mathrm{e}^{-\kappa x} \ . \tag{72}$$

Her er $A$, $B$ og $C$ konstanter. Så langt er det ikke gjort noen tilnærminger.

Den ganske spesielle metoden som presenteres i læreboka, går ut på å innføre en størrelse $\delta$, kalt inntrengningsdybde og definert som

$$\delta = \frac{1}{\kappa} = \frac{\hbar}{\sqrt{-2mE}} \ . \tag{73}$$

Istedenfor den eksakte kontinuitetsbetingelsen i $x = a$, ligning (41) for en symmetrisk bølgefunksjon, eller ligning (55) for en antisymmetrisk bølgefunksjon, innføres så den nokså vilkårlige tilnærmingen at vi skal ha

$$\cos(k(a + \delta)) = 0 \tag{74}$$

for en symmetrisk bølgefunksjon, eller

$$\sin(k(a + \delta)) = 0 \tag{75}$$

for en antisymmetrisk bølgefunksjon. Logikken er den at bølgefunksjonen innenfor brønnen, $\cos(kx)$ eller $\sin(kx)$, har et nullpunkt like utenfor brønnen, i $x + \epsilon$, der $\epsilon$ er liten og positiv, men ukjent. Så brukes inntrengningsdybden $\delta$ som en tilnærming for $\epsilon$.

Det bør ikke overraske noen at disse oppdiktede ligningene for $\kappa$ og $k$ gir verdier som er bare tilnærmede løsninger av kontinuitetsbetingelsen i $x = a$, ligning (41) eller ligning (55).

Konklusjon: Glem hele metoden! Bruk heller den eksakte metoden, som ikke er mer komplisert.