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 22 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 $\psi'(x)$ 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

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

Husk at $\psi(0+) = \psi(0-) = \psi(0)$.

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

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

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?

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 $d \to \infty$?

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

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

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).

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:

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

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 $d \to \infty$?

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.

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:

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

Hvor mange løsninger finnes det for κ?
Og hva blir κ i de to grensetilfellene $d \to 0+$ og $d \to \infty$?

Kommentar: Dette regneeksemplet med to potensialbrønner viser prinsippet for det som kalles *kovalente bindinger* mellom atomene i et molekyl. Når to atomer deler et elektron, i den forstand at elektronet er i en tilstand der sannsynlighetstettheten er (omtrent) like stor for å finne det nær den ene eller den andre atomkjernen, så kan elektronet få en energi som er lavere enn den energien det kan få når det bindes til bare en av atomkjernene. Dermed kan vi vinne energi ved å slå sammen to atomer til et molekyl.

Forklaringen er at den kinetiske energien kan reduseres når bølgefunksjonen fordeles over et større volum. Litt upresist kan vi ty til Heisenbergs usikkerhetsprinsipp og si at når usikkerheten i posisjon blir større, kan usikkerheten i impuls reduseres, slik at den kinetiske energien reduseres.