TFY4108 Fysikk
Løysingsforslag for øving 13

Oppgåve 1.

(a) de Broglie foreslo at ein partikkel med bevegelsesmengd $p = mv$ har bølgjelengd $\lambda = h/p$. Med totalenergi $E = p^2/(2m) + U$ blir $p = \sqrt{2m(E-U)}$ så $\lambda = h/\sqrt{2m(E-U)}$. Dermed:

$$x < 0 : U = 0 \quad \Rightarrow \quad \lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE}}, \tag{1}$$

$$x > 0 : U = U_0 \quad \Rightarrow \quad \lambda = \frac{h}{\sqrt{2m(E-U_0)}}. \tag{2}$$

(b) For $x < 0$, som vi heretter vil referere til som region I, kan den tidsuavhengige Schödingerlikninga (TUSL) skrivast

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi \tag{3}$$

der $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$. Den generelle løysinga kan skrivast

$$\psi_{\mathrm{I}}(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}. \tag{4}$$

Tilsvarande, for $x > 0$, som vi refererer til som region II, er TUSL

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -q^2\psi \tag{5}$$

der $q = \sqrt{2m(E-U_0)/\hbar^2}$, slik at løysinga blir

$$\psi_{\mathrm{II}}(x) = Ce^{iqx} + De^{-iqx}. \tag{6}$$

I staden for å uttrykkje løysinga vha. eksponensialfunksjonar $e^{\pm iKx}$ som representerer høgregåande og venstregåande bølgjer (sidan $e^{\pm iKx}$ er eigenfunksjon av $\hat{p}$ med eigenverdi $p = \pm\hbar K$) kunne vi alternativt ha uttrykt løysinga vha. cos og sin-funksjonar,[1] som gjort f.eks. for partikkel-i-boks problemet. Men for problem med innkommande bølgjer der vi vil rekne ut refleksjon og transmisjon er det meir hensiktsmessig å uttrykkje løysinga ved eksponensialfunksjonar sidan det er koeffisientane som multipliserer desse som inngår i definisjonen av R og T (for eksempel er R gjeven som $R = |B/A|^2$). Ein kan også notere seg at bølgjetalet i løysingane for dei to regionane er relatert til den tilsvarande de Broglie-bølgjelengda på vanleg måte, dvs. bølgjetalet er 2π/bølgjelengda.

Sidan den potensielle energien tilfredsstiller $|U(x)| < \infty$ skal løysingane i dei forskjellige regionane skøytast slik at både ψ og $\psi' = d\psi/dx$ er kontinuerlege i overgangen mellom dei to regionane, dvs. i punktet $x = 0$:

$$\text{Kontinuitet av } \psi: \quad \psi_{\mathrm{I}}(0) = \psi_{\mathrm{II}}(0) \quad \Rightarrow \quad A + B = C + D. \tag{7}$$

$$\text{Kontinuitet av } \psi': \quad \psi'_{\mathrm{I}}(0) = \psi'_{\mathrm{II}}(0) \quad \Rightarrow \quad ik(A-B) = iq(C-D) \quad \Rightarrow \quad k(A-B) = q(C-D). \tag{8}$$

(c) Ei planbølgje kjem inn frå venstre. Den er altså høgregåande og er difor $\propto e^{+ikx}$ (her betyr $\propto$ "proporsjonal med"og skal ikkje forvekslast med den greske bokstaven α ("alfa")). Det blir då også ei reflektert bølgje ($\propto e^{-ikx}$) i region I og ei transmittert bølgje ($\propto e^{+iqx}$) i region II. Derimot blir det inga reflektert bølgje ($\propto e^{-iqx}$) i region II. Dvs. koeffisienten $D = 0$. Vi kan også sjå på koeffisienten A til den innkommande bølgja som gjeven, fordi R (og dermed også T) avheng kun av $|B/A|$, som er uavhengig av verdien av A. Vi har difor to ukjende, B og C, og to likningar, (7)-(8). Med $D = 0$ innsett blir dei

$$A + B = C \tag{9}$$

$$A - B = \frac{q}{k}C. \tag{10}$$

Dette gjev

$$A = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{q}{k}\right)C, \tag{11}$$

$$B = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{q}{k}\right)C. \tag{12}$$

Refleksjonskoeffisenten blir difor

$$R \equiv \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \left|\frac{k-q}{k+q}\right|^2 = \left(\frac{k-q}{k+q}\right)^2 = \left(\frac{\sqrt{E}-\sqrt{E-U_0}}{\sqrt{E}+\sqrt{E-U_0}}\right)^2 \tag{13}$$

Her brukte vi at $|z|^2 = z^2$ sidan $z = (k-q)/(k+q)$ er reell. Vi skal finne verdien av E som gir $R = T$. Sidan

[1] For eksempel, i region I kunne vi ha skrive løysinga som $\psi_{\mathrm{I}}(x) = \tilde{A}\cos kx + \tilde{B}\sin kx$. Relasjonane $\cos kx = (e^{ikx} + e^{-ikx})/2$ og $\sin kx = (e^{ikx} - e^{-ikx})/(2i)$ gir då samanhengen mellom dei to koeffisient-setta: $A = \tilde{A}/2 - i\tilde{B}/2$ og $B = \tilde{A}/2 + i\tilde{B}/2$.

$R+T=1$ betyr det at $R=1/2$. Dvs. vi må løyse likninga

$$\left(\frac{\sqrt{E}-\sqrt{E-U_0}}{\sqrt{E}+\sqrt{E-U_0}}\right)^2=\frac{1}{2}. \tag{14}$$

Sidan $E>U_0$ er uttrykket inne i parentesen positivt. Ved å skrive $1/2=(1/\sqrt{2})^2$ kan likninga då forenklast til

$$\frac{\sqrt{E}-\sqrt{E-U_0}}{\sqrt{E}+\sqrt{E-U_0}}=+\frac{1}{\sqrt{2}}, \tag{15}$$

som kan skrivast om til

$$\frac{1-z}{1+z}=\frac{1}{\sqrt{2}} \tag{16}$$

der $z=\sqrt{1-U_0/E}$. Multipliser med $1+z$ på begge sider for å få ei førstegradslikning, med løysing

$$z=\frac{1-1/\sqrt{2}}{1+1/\sqrt{2}}=\frac{\sqrt{2}-1}{\sqrt{2}+1} \tag{17}$$

som gjev

$$\frac{U_0}{E}=1-\left(\frac{\sqrt{2}-1}{\sqrt{2}+1}\right)^2 \quad \Rightarrow \quad \frac{E}{U_0}=\frac{1}{1-\left(\frac{\sqrt{2}-1}{\sqrt{2}+1}\right)^2}\approx 1.03. \tag{18}$$

(d) Når $E<U_0$ blir $T=0$ sidan barrieren er uendeleg lang. Dermed er $R=1-T=1$.

Dette kan sjølvsagt også visast eksplisitt. I region I tek TUSL same form som før og dermed er løysinga også av same form som før. I region II blir TUSL no

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}=+Q^2\psi \tag{19}$$

med $Q=\sqrt{2m(U_0-E)/\hbar^2}$. Dermed blir den generelle løysinga

$$\psi_{\text{II}}(x)=Fe^{-Qx}+Ge^{+Qx}. \tag{20}$$

Men det andre leddet her impliserer $|\psi(x)|^2\to\infty$ når $x\to\infty$, som er fysisk uakseptabelt. Dermed må koeffisienten $G=0$. Kontinuitetskrava blir

$$\psi_{\text{I}}(0)=\psi_{\text{II}}(0) \quad \Rightarrow \quad A+B=F, \tag{21}$$

$$\psi'_{\text{I}}(0)=\psi'_{\text{II}}(0) \quad \Rightarrow \quad ik(A-B)=-QF \tag{22}$$

som gjev

$$A = \frac{1}{2}\left(1+i\frac{Q}{k}\right)F, \tag{23}$$

$$B = \frac{1}{2}\left(1-i\frac{Q}{k}\right)F. \tag{24}$$

Dermed blir refleksjonskoeffisienten

$$R=\left|\frac{B}{A}\right|^2=\left|\frac{k-iQ}{k+iQ}\right|^2=\left(\frac{k-iQ}{k+iQ}\right)^*\left(\frac{k-iQ}{k+iQ}\right)=\frac{k+iQ}{k-iQ}\,\frac{k-iQ}{k+iQ}=1 \tag{25}$$

og transmisjonskoeffisenten $T=1-R=0$.

(e) Vi bruker (sjå tips-fila) parameteren $\delta=1/Q$ som mål på kor langt partikkelen trengjer inn i barrieren. Innsetjing gjev

$$\delta=\frac{1}{Q}=\frac{\hbar}{\sqrt{2m(U_0-E)}}=\frac{6.63\cdot 10^{-34}}{2\pi\sqrt{2\cdot 9.1\cdot 10^{-31}\cdot 2\cdot 10^{-2}(1-9/10)\cdot 1.6\cdot 10^{-19}}}\ \text{m}=4.4\ \text{nm}. \tag{26}$$

Oppgåve 2.

Sjå håndskrive LF lengre bak.

Oppgåve 3.

(a) Løysingsmetoden er basert på separasjon av variablar og er nøyaktig den same som for tilfellet $L_x = L_y = L_z$ som vart gjennomgått i forelesingane. Vi skriv

$$\psi(x,y,z) = X(x)Y(y)Z(z) \tag{27}$$

og set dette inn i TUSL. Det gir

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[YZ\frac{d^2X}{dx^2} + XZ\frac{d^2Y}{dy^2} + XY\frac{d^2Z}{dz^2}\right] = E\,XYZ. \tag{28}$$

Divisjon med XYZ gir

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{X}\frac{d^2X}{dx^2} + \frac{1}{Y}\frac{d^2Y}{dy^2} + \frac{1}{Z}\frac{d^2Z}{dz^2}\right] = E. \tag{29}$$

Høgresida er ein konstant, dvs. uavhengig av x, y, og z. Dermed må venstresida også vere ein konstant. Dermed må det første leddet på venstresida, som involverer funksjonen X og i utgangspunktet difor kunne ha vore ein funksjon av x, vere ein konstant, som vi kan kalle E_X. Likeleis må det andre leddet, som i utgangspunktet kunne ha vore ein funksjon av y, også vere ein konstant, som vi kallar E_Y. Endeleg må det tredje leddet, som i utgangspunktet kunne ha vore ein funksjon av z, også vere ein konstant, som vi kallar E_Z. Når vi også inkluderer grensebetingelsane reduserer difor det opprinnelege 3-dimensjonale problemet seg til 3 uavhengige 1-dimensjonale problem, eitt for kvar romdimensjon:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2X}{dx^2} = E_X X, \quad \text{med } X(0) = X(L_x) = 0, \tag{30}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2Y)}{dy^2} = E_Y Y, \quad \text{med } Y(0) = Y(L_y) = 0, \tag{31}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2Z}{dz^2} = E_Z Z, \quad \text{med } Z(0) = Z(L_z) = 0. \tag{32}$$

Kvart av desse 3 problema er matematisk identisk med problemet for partikkel i ein ein-dimensjonal boks. Vi kan difor ta over resultata for eigenfunksjonane og eigenverdiane frå det problemet. Vi må berre tilpasse notasjonen og bruke uavhengige kvantetal for dei 3 retningane. Dette gir då funksjonane X, Y, og Z på forma gjeven i oppgåveteksten, mens energiane er

$$E_X = E_{n_x} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n_x}{L_x}\right)^2, \tag{33}$$

$$E_Y = E_{n_y} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n_y}{L_y}\right)^2, \tag{34}$$

$$E_Z = E_{n_z} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n_z}{L_z}\right)^2. \tag{35}$$

der n_x, n_y, og n_z er positive heiltal. Totalenergien $E = E_X + E_Y + E_Z$ kan difor skrivast

$$E = E_{n_x,n_y,n_z} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left[\left(\frac{n_x}{L_x}\right)^2 + \left(\frac{n_y}{L_y}\right)^2 + \left(\frac{n_z}{L_z}\right)^2\right]. \tag{36}$$

(b) Med $L_x = L_y \equiv L$ blir energien til tilstanden med kvantetal (n_x, n_y, n_z)

$$E_{n_x,n_y,n_z} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left[\frac{n_x^2 + n_y^2}{L^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2}\right]. \tag{37}$$

Tilstanden med lågast energi har openbart alle tre kvantetala lik 1. Når ein skal identifisere tilstanden(e) med nest lågaste energi treng ein kun vurdere tilstander som har eitt av desse tre kvantetala lik 2, mens dei to andre kvantetala er framleis lik 1.

(i) $L_z > L$. Energien for ein eksitert tilstand vert lågare ved å setje $n_z = 2$ enn ved å setje n_x eller n_y lik 2. Dermed får vi éin tilstand i nest lågaste energinivå. Denne tilstanden har kvantetala $n_x = 1, n_y = 1, n_z = 2$. Eksklusjonsprinsippet seier at maksimalt 1 elektron kan vere i kvar tilstand. Dermed kan det vere 1 elektron i nest lågaste energinivå i dette tilfellet.

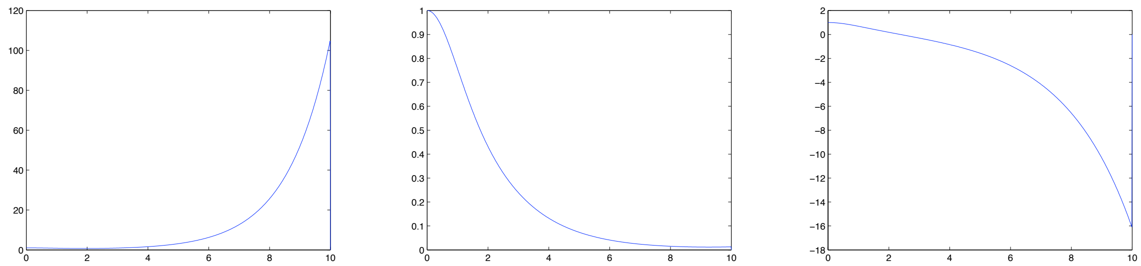
(ii) $L_z < L$. Energien for ein eksitert tilstand vert no lågast ved å setje enten n_x eller n_y lik 2, mens n_z er framleis 1. Dermed får vi to tilstander i nest lågaste energinivå. Den eine tilstanden har kvantetala $n_x = 2, n_y = 1, n_z = 1$ mens den andre tilstanden har kvantetala $n_x = 1, n_y = 2, n_z = 1$. Sidan eksklusjonsprinsippet tillet maksimalt eitt elektron i kvar tilstand, kan det altså vere 2 elektron i nest lågaste energinivå i dette tilfellet.

(I analysen over antok vi at elektronet ikkje har eit eigenspinn. Dersom eigenspinnet blir inkludert, kjem også kvantetalet $m_s = \pm 1/2$ inn. Ein tilstand er då spesifisert av 4 kvantetal: (n_x, n_y, n_z, m_s). Sidan energien er uavhengig av kvantetalet m_s som kan ta to forskjellige verdiar, vert antalet tilstander i kvart energinivå dobla i forhold til antalet i analysen over. Dermed blir svaret no 2 elektron for tilfelle (i) og 4 elektron for tilfelle (ii).)

Oppgåve 4.

(a) Sidan maksimumsverdien av $U(x)$ er 0 og minimumsverdien er $-U_0$, er U_0 høgda på potensialbrønnen. For $|x| \gtrsim L$ avtek $|U(x)|$ veldig raskt mot 0, så L er ein lengdeskala som karakteriserer breidden av brønnen.

(b) Ved å køyre Matlab-skriptet for forskjellige verdiar av e, kan ein finne at for store $|x|$ går $\psi(x)$ mot 0 for $e = e_0 \approx -0.3516$ (midtre plott under), som difor er løysinga for energien. For $e < e_0$ observerer ein at $\psi(x)$ går mot $+\infty$ for store $|x|$ (døme i venstre plott), mens for $e > e_0$ går $\psi(x)$ mot $-\infty$ (døme i høgre plott).



Figur 1: Plott av $\psi(x)$ for $e = -0.5$ (venstre plott), $e = -0.3516$ (midtre plott), og $e = -0.2$ (høgre plott).

2.

(a) Sidan ψ for grunntilstanden kun avheng av r, blir

$$\frac{\partial\psi}{\partial\phi} = \frac{\partial\psi}{\partial\theta} = 0$$

Vidare: $\frac{\partial\psi}{\partial r} = -\frac{1}{a}\psi$

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) = -\frac{1}{a}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\psi)$$

$$= -\frac{1}{a}\left(2r\psi + r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)$$

$$= -\frac{1}{a}\left(2r - \frac{r^2}{a}\right)\psi$$

$\Rightarrow$ venstre side av TUSL blir

$$\left[\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\frac{1}{a}\right)\left(\frac{2}{r}\right.}_{\left(\frac{\hbar^2}{mar} = \frac{\cancel{\hbar^2}\,\cancel{m}q^2}{\cancel{m}\,4\pi\epsilon_0\cancel{\hbar^2}r} = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right)}\left.-\frac{1}{a}\right) - \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right]\psi$$

kansellerer

$$= -\frac{\hbar^2}{2ma^2}\psi = E\psi$$

$$\Rightarrow \quad E = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{mq^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2}\right)^2$$

$$= -\frac{mq^4}{32\pi^2\hbar^2\epsilon_0^2} = -\frac{mq^4}{8\epsilon_0^2 h^2}$$

m er eigentlig den effektive massen

$$m = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}$$

m_e = elektronmassen
m_p = protonmassen

men fordi $m_e \simeq \frac{1}{2000} m_p$ kan vi ta

$m = m_e = 9.11 \cdot 10^{-31}$ kg

$q = 1.60 \cdot 10^{-19}$ C

$\epsilon_0 = 8.85 \cdot 10^{-12}$ F/m

$h = 6.63 \cdot 10^{-34}$ Js

Innsatt i E gir dette

$$E = -2.17 \cdot 10^{-18} \text{ J}$$

$$= \underline{\underline{-13.5 \text{ eV}}}$$

(b) Normering:

$$1 = \int dV\, |\psi|^2 = \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{1} d(\cos\theta) \int_0^{\infty} dr\, r^2 |C|^2 e^{-\frac{2r}{a}}$$

$$= |C|^2 \cdot 2\pi \cdot 2 \underbrace{\int_0^{\infty} dr\, r^2\, e^{-2r/a}}_{a^3/4} = |C|^2 \pi a^3$$

Vel C reell $\Rightarrow$ $C = \dfrac{1}{\sqrt{\pi a^3}}$

(c)

$$P(r) = \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{1} d(\cos\theta)\; r^2 \underbrace{|\psi|^2}_{\text{uavh. av } \phi,\theta}$$

$$= 4\pi\, r^2 |\psi|^2 = 4\pi\, r^2 C^2 e^{-2r/a}$$

$$= 4\pi r^2 \frac{1}{\pi a^3} e^{-2r/a} = \underline{\underline{\frac{4r^2}{a^3} e^{-2r/a}}}$$

(d) $$\frac{dP}{dr} = \frac{4}{a^3}\left(2r + r^2\left(\frac{-2}{a}\right)\right) e^{-2r/a}$$

$$= 0 \quad \text{for} \quad r = 0 \quad \text{og} \quad r = a$$

$$\cancel{\frac{d^2P}{dr^2} = \frac{d}{dr}\left[\frac{8r}{a^3}\left(1 - \frac{r}{a}\right) e^{-2r/a}\right]}$$

$$\frac{dP}{dr} = \frac{8r}{a^3}\left(1 - \frac{r}{a}\right) e^{-2r/a}$$

Ser at $\quad dP/dr \; > 0 \quad$ for $r < a$

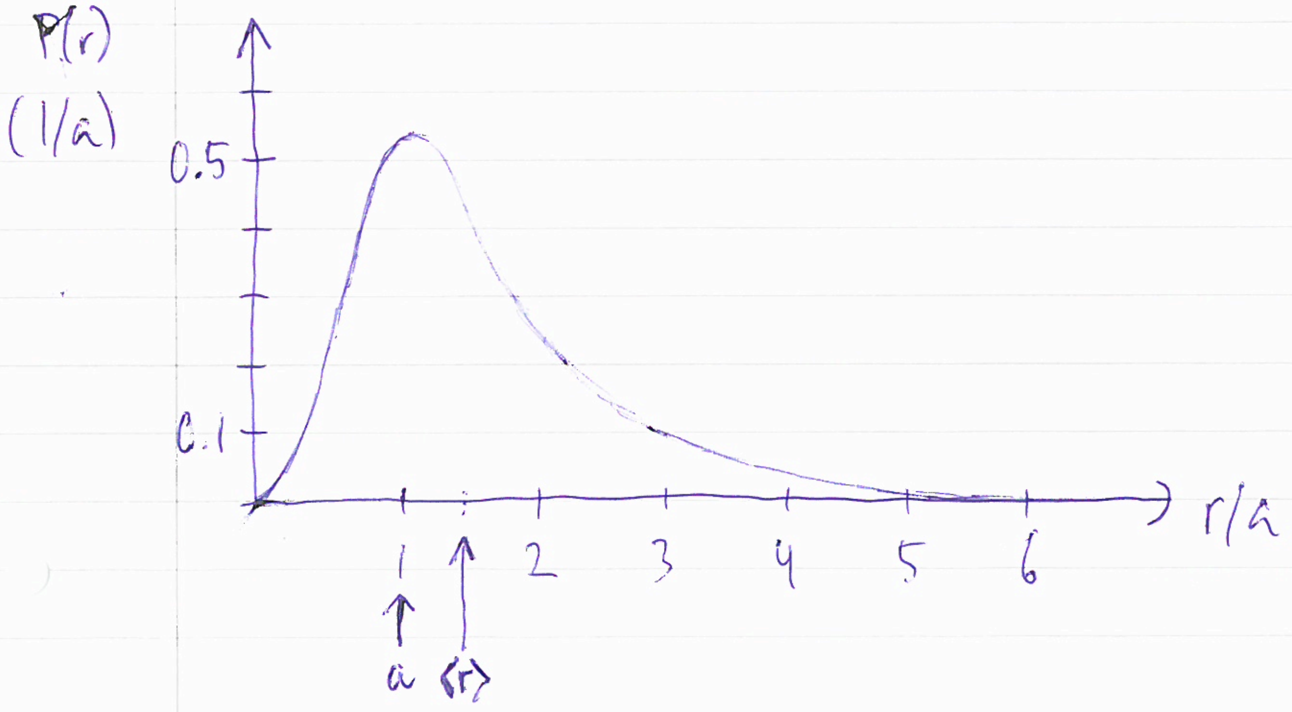
$\qquad\qquad\qquad\quad\;\; < 0 \quad$ for $r > a$

$\Rightarrow$ $r = a$ er eit maksimum for $P(r)$.

(e) $$\langle r \rangle = \int_0^\infty dr \, r \, P(r)$$

$$= \frac{4}{a^3} \underbrace{\int_0^\infty dr \, r^3 e^{-2r/a}}_{3a^4/8} = \underline{\underline{\frac{3}{2} a}}$$

(f) $$P(r) = \frac{1}{a} \, 4 \left(\frac{r}{a}\right)^2 e^{-2(r/a)}$$



(g) Sannsynlegheiten for å finne elektronet innanfor ein radius r

$$= \int_0^r dr' \, P(r') = \int_0^r dr' \, \frac{4r'^2}{a^3} e^{-2r'/a}$$

$$= \frac{4}{a^3} \int_0^r dr' \, r'^2 \, e^{-2r'/a}$$

$$= 1 - \left(1 + 2\frac{r}{a} + 2\left(\frac{r}{a}\right)^2\right) e^{-2r/a}$$

$r = a \Rightarrow$ sannsynlighet $1 - (1+2+2)\, e^{-2} \approx \underline{\underline{0.323}}$

$r = 2a \Rightarrow$ sannsynlegheit $1 - (1 + 2\cdot 2 + 2\cdot 2^2)\, e^{-2\cdot 2} \approx \underline{\underline{0.762}}$

(h) $E_n = E_1/n^2$, E_1 = grunntilstands-energien

$$E_n - E_1 = hf = \frac{hc}{\lambda}$$

$$\Rightarrow E_1\left(1/n^2 - 1\right) = \frac{hc}{\lambda}$$

$$\frac{1}{n^2} = 1 + \frac{hc}{\lambda E_1}$$

$$n = \frac{1}{\sqrt{1 + hc/(\lambda E_1)}} = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{6.63\cdot 10^{-34}\cdot 3\cdot 10^{8}}{103\cdot 10^{-9}(-13.6)\cdot 1.60\cdot 10^{-19}}}}$$

$= 2.98 \Rightarrow n = 3$