

Uppgifter kvantmekanik del I och II

1. För en fri elektron är $V(x) = 0$.

a. Visa att $\psi(x) = Ce^{ikx}$ är en möjlig lösning om $k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}$ (C är en reell konstant).

Lösningsskiss: Sätt in $\psi(x) = Ce^{ikx}$ och $V(x) = 0$ i Schrödingerekvationen. Genom att använda $k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}$ så blir höger- och vänsterleden i Schrödingerekvationen lika.

b. Det är svårt att rita $\psi(x)$ eftersom den är komplex. Skissera därför realdelen $\text{Re}(\psi)$ som funktion av x . Markera våglängden λ i figuren.

Lösningsskiss: $\psi(x) = Ce^{ikx} = C(\cos(kx) + i\sin(kx))$. Därmed blir $\text{Re}(\psi) = C\cos(kx)$. Här ska man alltså skissera en cosinusfunktion. Våglängden markeras som avståndet mellan två närliggande maxima.

c. Bekräfta att våglängden λ ges av k enligt sambandet $\lambda = 2\pi/k$.

Lösningsskiss: För cosinus gäller $\cos(t) = \cos(t + 2\pi n)$ dvs cosinus är periodisk med 2π . För våglängden gäller $\cos(kx) = \cos(k(x + \lambda))$. Därmed måste gälla att $k\lambda = 2\pi$.

d. Använd de Broglie-sambandet för att räkna ut den kinetiska energin $\frac{mv^2}{2}$ för en partikel med våglängd λ . Visa att denna energi är samma som energin E i uppg. 1a.

Lösningsskiss: Kinetiska energin kan skrivas $\frac{mv^2}{2} = \frac{(mv)^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}$. Med hjälp av de Broglie-sambandet $p = \frac{h}{\lambda}$ kan kinetiska energin skrivas $E_{kin} = \frac{h^2}{2m\lambda^2}$. Sambandet mellan k och λ i uppgift 1c samt definitionen av $\hbar$ ger $E_{kin} = \frac{h^2}{2m\lambda^2} = \frac{k^2\hbar^2}{2m(2\pi)^2} = \frac{k^2\hbar^2}{2m}$ vilket är samma som E i uppg. 1a.

2. Antag nu en konstant potential $V(x) = V_0$ med $V_0 > E$, dvs potentialen är högre än partikelns energi.

a. Visa att nu är $\psi(x) = Ce^{-\kappa x}$ en möjlig lösning om $\kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}$.

Lösningsskiss: Sätt in $\psi(x) = Ce^{-\kappa x}$ och $V(x) = V_0$ i Schrödingerekvationen. Genom att använda $\kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}$ så blir höger- och vänsterleden i Schrödingerekvationen lika.

b. Hur ser $\psi(x)$ ut? Gör en kvalitativ skiss.

Lösningsskiss: $\psi(x) = Ce^{-\kappa x}$ är en exponentiellt avklingande funktion som har värdet C vid $x=0$ och som asymptotiskt närmar sig noll när x växer.

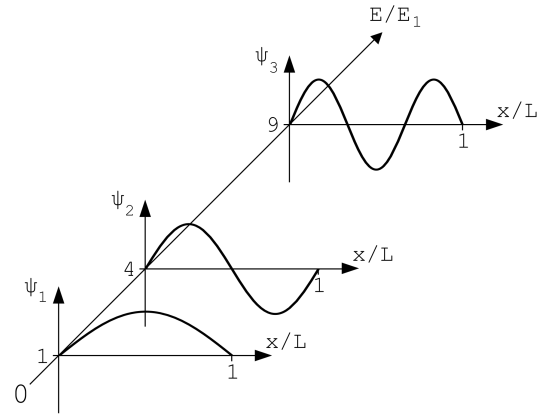
3. Betrakta en kvantbrunn med bredd a .

a. Vilka k gör så att $\psi(x) = A \sin kx$ blir noll i $x=a$?

Lösningsskiss: Sinusfunktionen är noll när argumentet är ett helt antal π . Vågfunktionen $\psi(x) = A \sin kx$ blir alltså noll i punkten $x=a$ om $ka = \pi n$, dvs för $k = \frac{\pi}{a}n$

b. Skissera vågfunktionerna för de tre lägsta tillstånden.

Inspiration från Wikipedia:



Uppgift 4 löses med hjälp av antingen dator eller mobiltelefon

Alternativ med dator

4. Ladda ner och kör Java-programmet

<https://phet.colorado.edu/en/simulation/legacy/bound-states>

a) Börja med en potentialbrunn – Välj fliken One Well (längst upp) och studera potentialen Square. Växla mellan sannolikhetstäthet och vågfunktion, välj olika tillstånd genom att klicka på dem.

- Jämför vågfunktionerna för grundtillstånd och exciterade tillstånd med de som du skisserade i uppg. 3b. Räkna antalet noder.

- Ser du tunnling, dvs att vågfunktionen "läcker ut" utanför brunnen?

- Ändra bredden på brunnen? Vad händer?

b)

- Ställ nu in så att potentiabrunnen är 0,5 nm bred och 10 eV djup. Räkna antalet bundna tillstånd och skriv upp deras energier.

- Byt därefter till fliken Two Wells (Molecular Bonding). Ställ in så att även dessa brunnar är 0,5 nm breda och 10 eV djupa. Räkna antalet bundna tillstånd och skriv upp deras energier. Notera hur energinivåerna är grupperade i förhållande till energierna du fick för en ensam brunn.

- Byt slutligen till fliken Many Wells (Bandstructure). Även dessa brunnar ska vara 0,5 nm breda och 10 eV djupa. Räkna återigen antalet bundna tillstånd och skriv upp deras energier. Notera hur energinivåerna är grupperade.

Med brunnarna som modeller för atomer har vi här sett uppkomsten av energibanden i exempelvis halvledare. Notera att banden blir bredare ("högre" i figuren) för de exciterade tillstånden. Detta beror på större växelverkan mellan de individuella brunnarna pga att exciterade tillstånd tunnlar mer, dvs vågfunktionerna "läcker ut" mer.

Alternativ med mobiltelefon

4. Använd appen Physics to Go! Part 1.

a) Testa några av potentialerna som finns.

- Räkna antal noder i vågfunktionen för grundtillstånd och exciterade tillstånd.
- Ser du tunnling?
- Kan du ändra bredden på "square well"? Vad händer?

b) Välj "user defined" bland potentialerna och mata in följande för att titta på en, två och tre potentialbrunnar.

$$5*(-\text{step}(x+1)+\text{step}(x-1))$$

$$5*(-\text{step}(x+1)+\text{step}(x-1)-\text{step}(x-1.5)+\text{step}(x-3.5))$$

$$5*(-\text{step}(x+1)+\text{step}(x-1)-\text{step}(x-1.5)+\text{step}(x-3.5) -\text{step}(x+3.5)+\text{step}(x+1.5))$$

Räkna antalet bundna tillstånd för de tre fallen och skriv upp energierna.

Eftersom potentialen i brunnarna är negativ och potentialen utanför/mellan brunnarna är noll så är de bundna tillstånden de tillstånd som har en energi som är negativ.

Exempel: För den första potentialen (en brunn) finns det endast två bundna tillstånd. Se nedan. Energierna är -4,283 respektive -2,263. Markeras även av ett vitt streck.

