



# Anvendelser af den kvantemekaniske bølgemekanik

FY529, projekt nr. 2

Skrevet af: Simon Holst Traberg-Larsen; Søren Emil Wegner Petersen  
d. 24. marts 2013

Resumé el. kort beskrivelse af journal/opgave/rapport.

## Indholdsfortegnelse

<b>1</b>	<b>Pertubationsregning .....</b>	<b>3</b>
1.1	Indledende pertubationsregning .....	3
1.2	Numerisk pertubationsregning .....	3
<b>2</b>	<b>Dobbeltbrønde og multibrønde .....</b>	<b>4</b>
2.1	Analytisk behandling af multibrønde .....	4
2.2	Numeriske resultater for multibrønde .....	9
<b>3</b>	<b>Transfermatrix-metoden.....</b>	<b>10</b>
3.1	Transfermatrix for specifikke potentialer .....	10
3.2	Numeriske resultater ved brug af transfermatrix-metoden.....	17
<b>4</b>	<b>Periodiske potentialer.....</b>	<b>18</b>
<b>5</b>	<b>Appendiks.....</b>	<b>19</b>

# 1 Pertubationsregning

## 1.1 Indledende pertubationsregning

## 1.2 Numerisk pertubationsregning

## 2 Dobbeltbrønde og multibrønde

### 2.1 Analytisk behandling af multibrønde

Nu kan man betragte følgende dobbeltbrønd, der består af to tæt placerede rektangulære brønde

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{for } |x| \leq \Delta x \text{ og } |x| > 1 \\ 0 & \text{ellers} \end{cases} \quad 2.1$$

Tidligere kunne vi anvende pertubationsregning for stationære tilstande med forskellige energier. Når tilstandene nærmer sig hinandens energier så vi, at nævneren i energikorrektionen bliver meget stor ( $\varepsilon_k \rightarrow \varepsilon_m$  så  $E^2 \rightarrow \infty$ ).

Det antages, at to eller flere tilstande er (næsten) degenererede, så der kan defineres følgende orthonormale basis

$$\langle \psi_a | \psi_b \rangle = \delta_{ab} \quad 2.2$$

Der gælder for hver af tilstandene  $\psi_a$  og  $\psi_b$ , at

$$\mathcal{H}_0 \psi_a^{(0)} = E^{(0)} \psi_a \quad \text{og} \quad \mathcal{H}_0 \psi_b^{(0)} = E^{(0)} \psi_b \quad 2.3$$

samt at enhver bølgefunktion  $\psi^{(0)}$  kan udtrykkes som den lineare kombination af de to

$$\psi^{(0)} = \alpha \psi_a + \beta \psi_b \quad 2.4$$

Da Hamiltonoperatoren  $\mathcal{H}_0$  er lineær kan det skrives, at

$$\mathcal{H}_0(\alpha \psi_a + \beta \psi_b) = \alpha E^{(0)} \psi_a + \beta E^{(0)} \psi_b = E^{(0)} \psi \quad 2.5$$

Tidligere benyttede vi, at den totale Hamiltonoperator også indeholder et bidrag fra pertubationen, nemlig

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \lambda \mathcal{H}' = \mathcal{H}_0 + \lambda \mathcal{V} \quad 2.6$$

hvor  $\lambda$  er en hjælpeparameter. Det samme gør sig gældende for bølgefunktionerne og energierne

$$\psi = \psi^{(0)} + \lambda \psi^{(1)} \quad \text{og} \quad E = E^{(0)} + \lambda E^{(1)} \quad 2.7$$

Dermed får man ifølge den generelle udgave af ligning 2.3

$$(\mathcal{H}_0 + \lambda \mathcal{H}')(\psi^{(0)} + \lambda \psi^{(1)}) = (E^{(0)} + \lambda E^{(1)})(\psi^{(0)} + \lambda \psi^{(1)}) \quad 2.8$$

Ved at kigge på led af første orden mht.  $\lambda$  fås

$$\mathcal{H}' \psi^{(0)} + \mathcal{H}_0 \psi^{(1)} = E^{(1)} \psi^{(0)} + E^{(0)} \psi^{(1)} \quad 2.9$$

Når der efterfølgende multipliceres med  $\psi_a$  og der anvendes Dirac-notation, så

$$\langle \psi_a | \mathcal{H}' | \psi^{(0)} \rangle + \langle \psi_a | \mathcal{H}_0 | \psi^{(1)} \rangle = E^{(1)} \langle \psi_a | \psi^{(0)} \rangle + E^{(0)} \langle \psi_a | \psi^{(1)} \rangle \quad 2.10$$

Når  $\mathcal{H}_0$  i det andet led fra venstre virker på  $\psi_a$  til venstre, og når ligning 2.4 benyttes fås der sammenlagt, at

$$\langle \psi_a | \mathcal{V} | \alpha \psi_a + \beta \psi_b \rangle = E^{(1)} \langle \psi_a | \alpha \psi_a + \beta \psi_b \rangle \quad 2.11$$

eller

$$\alpha \langle \psi_a | \mathcal{V} | \psi_a \rangle + \beta \langle \psi_a | \mathcal{V} | \psi_b \rangle = E^{(1)} \alpha \quad 2.12$$

Når  $\mathcal{V}_{aa}$  betegner middelværdien af perturbationen for  $\psi_a$  og tilsvarende for  $\mathcal{V}_{ab}$  kan det sammenfattes til

$$\alpha \mathcal{V}_{aa} + \beta \mathcal{V}_{ab} = E^{(1)} \alpha \quad 2.13$$

Hvis samme procedure gentages, blot hvor der multipliceres med  $\psi_b$  i ligning 2.9 fås tilsvarende

$$\alpha \mathcal{V}_{ba} + \beta \mathcal{V}_{bb} = E^{(1)} \beta \quad 2.14$$

Ligning 2.13 og 2.14 kan på matrixform udtrykkes som

$$\begin{bmatrix} \mathcal{V}_{aa} & \mathcal{V}_{ab} \\ \mathcal{V}_{ba} & \mathcal{V}_{bb} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = E^{(1)} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} \quad 2.15$$

som umiskendeligt ligner en egenverdiligning. Det ses altså, at førsteordens energikorrektionen er egenværdien til pertubationsmatricen. Egenværdierne kan bestemmes meget nemt, hvis det antages at  $\mathcal{V}_{ab} = \mathcal{V}_{ba} = 0$ , så

$$\begin{bmatrix} \mathcal{V}_{aa} & 0 \\ 0 & \mathcal{V}_{bb} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = E^{(1)} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} \quad 2.16$$

hvilket medfører, at  $E^{(1)} = \begin{cases} \mathcal{V}_{aa} \\ \mathcal{V}_{bb} \end{cases}$ . En anden konsekvens af denne antagelse er, at hvis de to "blandede" perturbationer skal være lig med 0 må det gælde, at

$$\mathcal{V}_{ab} = \underbrace{\langle \psi_a | \mathcal{V} | \psi_b \rangle}_{\substack{\text{lige} & \text{lige} & \text{ulige}}} = 0 \quad 2.17$$

sådan at de to forskellige tilstande har forskellige paritet. I dobbeltbrønden kan man nu betragte to tilstande: grundtilstanden og den første exciterede, se Figur 2.1. Hvis man sætter sin symmetriakse til  $x = 0$  kan man meget belejligt definere bølgefunktionerne i hhv. venstre (L) og højre (R) brønd.

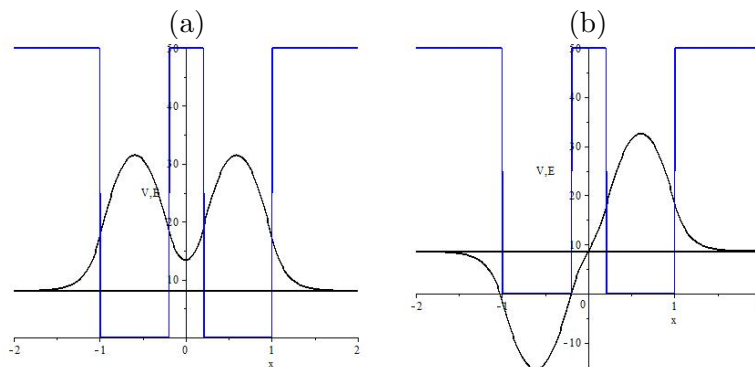
$$\psi_L = \cap = \psi_R \quad 2.18$$

hvor  $\cap$  indikerer bølgefunktionens geometri. Herefter kan man udtrykke hhv. de lige (g) og ulige (u) bølgefunktioner som

$$\psi_g = \psi_L + \psi_R \quad 2.19$$

og

$$\psi_u = \psi_L - \psi_R \quad 2.20$$



Figur 2.1: (a) Grundtilstanden i en dobbeltbrønd og (b) første exciterede tilstand.

Det er væsentligt at undersøge det indre produkt mellem de lige og ulige bølgefunktioner, så

$$\langle \psi_g | \psi_u \rangle = \langle \psi_L + \psi_R | \psi_L - \psi_R \rangle \quad 2.21$$

↓

$$\langle \psi_g | \psi_u \rangle = 1 + 1 + \langle \psi_L | \psi_R \rangle + \langle \psi_R | \psi_L \rangle \quad 2.22$$

↓

$$\langle \psi_g | \psi_u \rangle = 2 + 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_L(r) \psi_R(r) dr \quad \text{reelle } \psi \quad 2.23$$

hvor man også definerer overlapsintegralet,  $S = \int \psi_L(r) \psi_R(r) dr$ . Heraf får man også, at de lige og ulige bølgefunktioner, som følge af symmetrien, kan udtrykkes

$$\psi_g = \frac{1}{\sqrt{2(1+s)}} \quad \text{og} \quad \psi_u = \frac{1}{\sqrt{2(1-s)}} \quad 2.24$$

Det viser sig, vha. degenereret pertubationsregning, at energierne for de to laveste stationære tilstande i dobbeltbrønden kan udtrykkes ved

$$\epsilon_{\pm} = \epsilon_0 + \frac{\langle \psi_L | \mathcal{V}_R - \mathcal{V}_0 | \psi_L \rangle}{1 \pm S} \pm \frac{\langle \psi_L | \mathcal{V}_R - \mathcal{V}_0 | \psi_R \rangle}{1 \pm S} \quad 2.25$$

hvor  $\epsilon_0$  er grundtilstandsenergien for en enkelt isoleret brønd. Hvis  $\Delta x$  betegner separationen mellem de to enkelte brønde, ses det, at når  $\Delta x$  stiger fra  $0 \rightarrow \infty$  bliver pertubationen bredere. Dette betyder at overlapsintegralet, som repræsenterer højre og venstre bølgefunktioners "haler" går imod 0:

$$\lim_{\Delta x \rightarrow \infty} S = 0 \tag{2.26}$$

Samtidigt ses det i ligning 2.25, at det midterste led på højresiden hurtigt går imod 0, når  $\Delta x \rightarrow \infty$ , fordi tælleren udelukkende omhandler den del bølgefunktionen i venstre brønd, der befinder sig i det højre potentiale. Til sammenligning omhandler det sidste led på højresiden en kombination af højre og venstre bølgefunktion i det højre potentiale. Det må være en rimelig antagelse, at førstnævnte søger imod 0 hurtigere end sidstnævnte. Derfor kan energiudtrykket approksimeres til

$$\epsilon_{\pm} = \epsilon_0 \pm v' \tag{2.27}$$

hvor  $v' = \langle \psi_L | \mathcal{V}_R - \mathcal{V}_0 | \psi_R \rangle$ . Energierne udtrykt ved ligning 2.27 kan også formuleres som egenværdierne til matricen  $\mathcal{H}$

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} \epsilon_0 & v' \\ v' & \epsilon_0 \end{bmatrix} \tag{2.28}$$

Dette kan nemt vises ved at bestemme egenværdierne til  $\mathcal{H}$ :

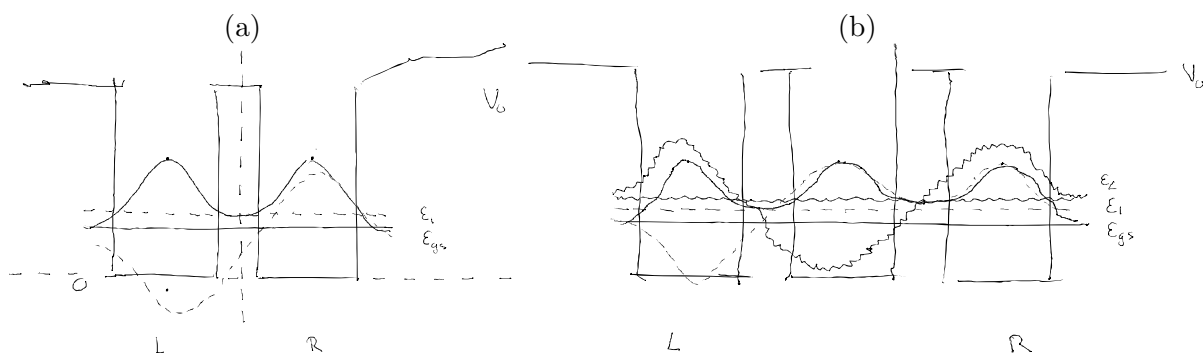
$$\det(\mathcal{H} - \epsilon_{\pm} I) = \det \begin{pmatrix} \epsilon_0 - \epsilon_{\pm} & v' \\ v' & \epsilon_0 - \epsilon_{\pm} \end{pmatrix} = 0 \tag{2.29}$$

↓

$$(\epsilon_0 - \epsilon_{\pm})^2 - v'^2 = 0 \tag{2.30}$$

↓

$$\epsilon_{\pm} = \epsilon_0 \pm v' \tag{2.31}$$



Figur 2.2: Skitse af hhv. (a) dobbeltbrønd med to mulige kombinationer af grundtilstanden og (b) trippelbrønden med tre mulige kombinationer af grundtilstanden.

På Figur 2.2 er der skitseret hhv. en dobbeltbrønd og trippelbrønd, hvor det ses, at antal mulige kombinationer af stationære tilstande, der tager brug af grundtilstandens form er lig med antal af brønde. Dvs. for en dobbeltbrønd kan der laves to kombinationer mens en trippelbrønd har tre unikke kombinationer. På trods af, at energierne ligger tæt på grundtilstandens har de exciterede tilstande stadigvæk større energier – bl.a. fordi de har flere nulpunkter (hvilket tidligere har vist sig at være proportional med energien) og fordi vi så i ligning 2.31, at de exciterede tilstandes energier er summen af grundtilstandsenergien og

en positiv størrelse  $v'$ . Den samme argumentation gør sig gældende for både 4, 5, 6... forbundne brønde, som vil have hhv. 4, 5, 6... unikke kombinationer af grundtilstanden samt 4, 5, 6... tætliggende energier.

I et tilfælde med tre forbundne brønde, som vist på Figur 2.2 (b), kan metodikken fra ligning 2.28 (matrixformen) genbruges. Først laves der følgende definitioner. Tidligere repræsenterede  $v'$  middelperturbationen i den højre brønd fra både  $\psi_L$  og  $\psi_R$ . Nu kan den omformuleres til at gælde i en mere generel sammenhæng, nemlig når man har en perturbation i en vilkårlig brønd, hvortil der virker én bølgefunktion fra samme brønd samt en anden bølgefunktion, der befinder sig i en tilstødende brønd (separeret af nøjagtig én væg).

Dermed kan  $v''$  repræsentere en perturbation i en brønd sammen med en bølgefunktion fra samme brønd og en anden bølgefunktion, der befinder sig ikke én men **to** vægge væk. Man kan fortsætte denne skrivemåde for  $v'''$ ,  $v''''$  etc. I situationen med tre brønde kan man navngive brøndene  $L$  (left),  $M$  (middle) og  $R$  (right). Således eksisterer der en  $v'$  mellem brønd  $L$  og  $M$  samt  $M$  og  $R$  (disse relationer virker også den anden vej, fx  $M$  og  $L$ ). Der eksisterer en  $v''$  mellem  $L$  og  $R$ , da disse brønde af adskilte af to vægge. Det er vigtigt at indse, at  $v'$  for  $L$  og  $M$  er den samme som for  $M$  og  $R$ , altså

$$v'_{LM} = v'_{MR} \tag{2.32}$$

og

$$v'_{LM} = v'_{ML} \text{ etc.} \tag{2.33}$$

$\mathcal{H}$ -matricen kan nu skrives på følgende måde (for tre brønde):

$$\mathcal{H}_{(3)} = \begin{bmatrix} \epsilon_0 & v' & v'' \\ v' & \epsilon_0 & v' \\ v'' & v' & \epsilon_0 \end{bmatrix} \tag{2.34}$$

Det er væsentligt at bemærke matricens symmetri, da denne er gældende også for større antal forbundne brønde. Egenværdierne til matricen i ligning 2.34 findes ved

$$\det(\mathcal{H}_{(3)} - e_{\pm}I) = \begin{vmatrix} \epsilon_0 - \epsilon_{\pm} & v' & v'' \\ v' & \epsilon_0 - \epsilon_{\pm} & v' \\ v'' & v' & \epsilon_0 - \epsilon_{\pm} \end{vmatrix} = 0 \tag{2.35}$$

↓

$$\begin{aligned} (\epsilon_0 - \epsilon_{\pm})((\epsilon_0 - \epsilon_{\pm})^2 - v'^2) - v'((\epsilon_0 - \epsilon_{\pm})v' - v'v'') \\ + v''(v'^2 - (\epsilon_0 - \epsilon_{\pm})v'') = 0 \end{aligned} \tag{2.36}$$

Ligesom tidligere kan man nu bruge den argumentation, at når  $\Delta x \rightarrow \infty$  vil  $v''$  gå hurtigere imod 0 end  $v'$ , eftersom der er en mindre interaktion mellem bølgefunktioner, der er længere væk fra hinanden (deres "haler" har lavere værdier end tilsvarende for  $v'$ ). Derfor reducerer ligning 2.36 til



$$(\epsilon_0 - \epsilon_{\pm})^2 - 2v'^2 = 0 \quad 2.37$$

så

$$\epsilon_{\pm} = \epsilon_0 \pm \sqrt{2}v' \quad 2.38$$

Indsæt for 4 brønde hér.

## 2.2 Numeriske resultater for multibrønde

## 3 Transfermatrix-metoden

### 3.1 Transfermatrix for specifikke potentialer

Den kvantemekaniske tilstandsvektor som funktion af position  $x$  er defineret ved

$$X(x) = \begin{pmatrix} \psi(x) \\ \psi'(x) \end{pmatrix} \quad 3.1$$

Transfermatrixen relaterer tilstandsvektoren  $X(x)$  i et "slutpunkt"  $x$  til tilstandsvektoren  $X(x_0)$  i et "startpunkt"  $x_0$

$$X(x) = T(x, x_0, \epsilon)X(x_0) \quad 3.2$$

hvor  $T(x, x_0, \epsilon)$  er transfermatrixen, som afhænger af energien  $\epsilon$  og potentialet  $v(x)$  imellem de to punkter, men er uafhængig af initialtilstanden. En vigtig egenskab ved transfermatrixen er dens opdelelighed

$$T(x_3, x_1, \epsilon) = T(x_3, x_2, \epsilon)T(x_2, x_1, \epsilon) \quad 3.3$$

Transfermatrixen kan bestemmes ved to beregninger. Man lader først  $X(x_0) = (1, 0)$  så man kan beregne  $X(x)$ , hvilket udgør transfermatrixens første kolonne, idet

$$\begin{pmatrix} \psi(x) \\ \psi'(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11}(x, x_0, \epsilon) \\ T_{21}(x, x_0, \epsilon) \end{pmatrix} \quad 3.4$$

Derefter kan det tilsvarende gøres når man sætter  $X(x_0) = (0, 1)$ , så man får den anden kolonne af transfermatrixen. Proceduren kan først eftervises på et endeligt steppotentiale, hvor der analyseres infinitesimalt fra den ene side af steppet til den anden. Se Figur 3.1. Eftersom bølgefunktionen altid er kontinuert kan der først skrives

$$\psi(0^-) = \psi(0^+) \quad 3.5$$

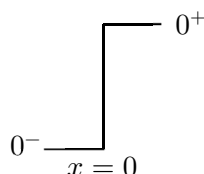
og medmindre at der er tale om en uendelig brønd er den første afledte også kontinuert

$$\psi'(0^-) = \psi'(0^+) \quad 3.6$$

I dette tilfælde er initial- og sluttilstandsvektoren altså identiske

$$X(0^-) = X(0^+) \quad 3.7$$

således at transfermatrixen er identitetsmatrixen,  $T(0^-, 0^+, \epsilon) = I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ .



Figur 3.1: Et endeligt steppotentiale, hvor der kigges infinitesimalt til begge sider fra  $x = 0$ .

Transfermatricen for et konstant potentiale  $v_0$  kan ikke bestemmes med samme slags ræsonnement. Her er det nødvendigt først at løse den dimensionsløse SE

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi = (E - V)\psi = \kappa^2 \psi \quad , \kappa = \sqrt{(E - V)}. \quad 3.8$$

Den generelle løsning kan skrives på formen  $\psi(x) = A \cos \kappa x + B \sin \kappa x$ . Først sættes initialtilstanden til  $X(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ , så

$$\begin{pmatrix} \psi(0) \\ \psi'(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A \cos(\kappa \cdot 0) \\ B \kappa \cos(\kappa \cdot 0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad 3.9$$

↓

$$A = 1 \quad \text{og} \quad B = 0 \quad 3.10$$

og

$$T(x, x_0, \epsilon) = \begin{pmatrix} \cos \kappa x & T_{12} \\ -\kappa \sin \kappa x & T_{22} \end{pmatrix} \quad 3.11$$

Når initialtilstanden i stedet sættes til at være ulige,  $X(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  fås

$$\begin{pmatrix} \psi(0) \\ \psi'(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A \cos(\kappa \cdot 0) \\ B \kappa \cos(\kappa \cdot 0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad 3.12$$

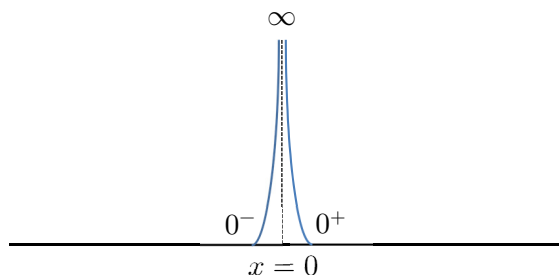
↓

$$A = 0 \quad \text{og} \quad B = \frac{1}{\kappa} \quad 3.13$$

og der haves totalt for transfermatricen

$$T(x, x_0, \epsilon) = \begin{pmatrix} \cos \kappa x & \frac{1}{\kappa} \sin \kappa x \\ -\kappa \sin \kappa x & \cos \kappa x \end{pmatrix} \quad 3.14$$

For et deltapotentiale,  $v(x) = v_0 \delta(x)$ , kan man igen analysere infinitesimalt hen over  $x = 0$ . Se



Figur 3.2: Deltapotentiale, hvor der kigges infinitesimalt til siderne fra  $x = 0$ .

Bølgefunktionen er altid kontinuert, så  $\psi(0^+) = \psi(0^-)$ . Den første afledte er imidlertid ikke kontinuert i dette tilfælde. I det forrige projekt viste vi, at

$$\left. \frac{d\psi(x)}{dx} \right|_{0^+} - \left. \frac{d\psi(x)}{dx} \right|_{0^-} = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{0^-}^{0^+} v(x)\psi(x) dx \neq 0 \quad 3.15$$

Når potentialet  $v(x) = v_0\delta(x)$  indsættes fås det, at

$$\psi'(0^+) = \frac{2mv_0}{\hbar^2} \psi(0) + \psi'(0^-) = k\psi(0^-) + \psi'(0^-) \quad 3.16$$

så det kan skrives, at

$$\begin{pmatrix} \psi(0^+) \\ \psi'(0^+) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ k & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi(0^-) \\ \psi'(0^-) \end{pmatrix} \quad 3.17$$

Hermed kan transfermatricen direkte aflæses til

$$T(x, x_0, \epsilon) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ k & 1 \end{pmatrix} \quad 3.18$$

hvor  $k = \frac{2mv_0}{\hbar^2}$ . Det er nu interessant at undersøge, hvorledes transfermatricen ser ud for en potentialebarriere med forskriften

$$v(x) = \begin{cases} v_0 & \text{for } 0 \leq x \leq a \\ 0 & \text{ellers} \end{cases} \quad 3.19$$

Barrieren kan tænkes som værende en tredelt konstruktion bestående af en stepfunktion i hver ende og et konstant potentiale imellem. Se Figur 3.3. Med denne tankegang og ved at udnytte egenskaben i ligning 3.3 kan transfermatricen for barrierepotentialet bestemmes.



Figur 3.3: Potentialbarriere bestående af to stepfunktioner og et konstant potentiale.

$$T(a^+, 0^-, \epsilon) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \kappa x & \frac{1}{\kappa} \sin \kappa x \\ -\kappa \sin \kappa x & \cos \kappa x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad 3.20$$

↓

$$T(a^+, 0^-, \epsilon) = \begin{pmatrix} \cos \kappa x & 0 \\ 0 & \cos \kappa x \end{pmatrix} \quad 3.21$$

Det er af væsentlig betydning, at undersøge hvorvidt en indkommende plan bølge vil reflekteres af og/eller transmitteres igennem en potentialelevæg. Til det formål betragtes den tidsafhængige Schrödingerligning

$$i\hbar \frac{\partial \psi(r, t)}{\partial t} = \mathcal{H} \psi(r, t) \quad 3.22$$

Den fysiske fortolkning af bølgefunktionen er partikeltætheden  $\rho$  og kan skrives

$$\rho(r, t) = |\psi|^2 = \psi^*(r, t) \psi(r, t) \quad 3.23$$

hvor \* betegner den komplekst konjugerede. Hvis Schrödingerligningen i ligning 3.22 skal udtrykkes ved  $\rho$  får man, at

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = \psi i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} + \psi^* i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad 3.24$$

eller

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = \psi^* \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + V(r) \right) \psi(r, t) - \psi \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + V(r) \right) \psi^*(r, t) \quad 3.25$$

Potentialet  $V(r)$  reducerer til 0, så

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} - \psi \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial r^2} \right) \quad 3.26$$

↓

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\hbar}{i} \frac{1}{2m} \frac{\partial}{\partial r} \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial r} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial r} \right) \quad 3.27$$

↓

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r} J(r, t) = 0 \quad , \quad J(r, t) = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{2m} \frac{\partial}{\partial r} \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial r} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial r} \right) \quad 3.28$$

Ligning 3.28 er på samme form som bevarelsesligningen (kontinuitetsligningen), som dermed antyder at sandsynlighedstætheden  $\rho$  opfører sig som en inkompressibel væske.  $J$  betegner i dette tilfælde en flux af partikler. Fluxen kan omformuleres når man anvender impulsoperatoren  $\hat{p}$

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial r} = \hat{p} \psi \quad 3.29$$

således at man får

$$J(r, t) = \frac{1}{2m} (\psi^* \hat{p} \psi + (\psi^* \hat{p} \psi)^*) \quad 3.30$$

Hér er der også benyttet, at  $\psi(-\frac{\hbar}{i}) \frac{\partial \psi^*}{\partial r} = (\psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial r})^*$ . Når en mængde partikler sendes ind imod en potentialevæg med impuls  $p$  sker det som plane bølger, altså

$$\psi(r, t) = A e^{i(kr - \omega t)} \quad 3.31$$

Heraf fås det straks (ligning 3.29) at  $p\psi = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial r} = \frac{\hbar}{i} ik A e^{i(kr - \omega t)} = \hbar k \psi$ , sådan at

$$p = \hbar k \quad 3.32$$

Dermed kan fluxen  $J$  udtrykkes

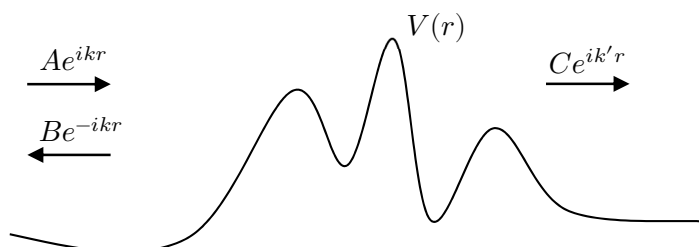
$$J(r, t) = \frac{1}{2m} (\hbar k \psi^* \psi + (\hbar k \psi^* \psi)^*) \quad 3.33$$

eller

$$J(r, t) = \frac{\hbar k}{m} |A|^2 \quad 3.34$$

Dette resultat fortæller noget vigtigt, nemlig at  $\rho(r, t) = |A|^2$ , hvilket også betyder, at  $\rho$  er uafhængig af både position  $r$  og tid  $t$ . Denne kendsgerning medfører så, at  $J$  er uafhængig af positionen  $r$ , dvs. at fluxen er konstant. Nu kan der betragtes følgende tilfælde.

En indkommende planbølge  $Ae^{ikr}$  er incident på en potentialevæg. Når bølgen rammer væggen kan der enten ske refleksion  $Be^{-ikr}$  eller transmission  $Ce^{ik'r}$



Figur 3.4: En incident planbølge  $A$  interagerer med en potentialevæg, hvilket kan resultere i refleksion  $B$  og/eller transmission  $C$ .

Da der er 'bevarelse' i dette system gælder der, at

$$J_{tv} = k|A|^2 - k|B|^2 = k'|C|^2 = J_{th} \quad 3.35$$

hvor  $tv$  og  $th$  betegner hhv. "til venstre" og "til højre" for potentialevæggen. Refleksionen  $R$  og transmissionen  $T$  defineres nu således

$$R = \frac{|B|^2 k}{|A|^2 k}, \quad T = \frac{|C|^2 k'}{|A|^2 k} \quad 3.36$$

$R$  og  $T$  er relateret på følgende måde:  $1 = R + T$ . Det er nu belejligt at gøre brug af transfermatricen, sådan at

$$\begin{pmatrix} C \\ ik'C \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} A + B \\ ik(A - B) \end{pmatrix} \quad 3.37$$

Transfermatrixen er tidligere blevet bestemt for et steppotentiale, et konstant potentiale og et deltapotentiale. For steppotentialet fandt vi  $T = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ , så

$$C = A + B \quad 3.38$$

og

$$ik'C = ik(A - B) \quad 3.39$$

Når udtrykket for  $C$  i ligning 3.38 substitueres i 3.39 fås

$$A + B = k/k'(A - B) \quad 3.40$$

og vha. lidt simpel aritmetik kan  $B$  udtrykkes ved  $A$  på følgende måde:

$$B = \frac{A(k' - k)}{k' + k} \quad \text{og} \quad |B|^2 = |A|^2 \frac{|k' - k|^2}{|k' + k|^2} \quad 3.41$$

Refleksionen  $R$  kan så, vha. ligning 3.36, bestemmes til

$$R = \frac{|A|^2 |k' - k|^2}{|A|^2 |k' + k|^2} = \frac{|k' - k|^2}{|k' + k|^2} \quad 3.42$$

$k$  og  $k'$  kan forstås som værende udtryk for energierne. Hvis man f.eks. sætter  $k' = k$  så er refleksionen  $R = 0 \Rightarrow T = 1$ . Dette er ækvivalent med et potentiale  $V$  på 0 eller at bølgefunktionen har energier  $\epsilon \gg V$ . Når man i stedet antager, at bølgefunktionen har energier  $\epsilon < V$  haves der generelt imaginære  $k'$  eftersom  $k' \propto \sqrt{\epsilon - V}$ . Derfor sætter vi nu  $k' = i\kappa$  så der kan skrives, at

$$R_{\epsilon < V} = \frac{|i\kappa - k|^2}{|i\kappa + k|^2} = 1 \quad 3.43$$

hvilket er ensbetydende med at transmissionen  $T = 0$ . Noget tilsvarende kan findes for et deltapotentiale med transfermatrix  $T = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \kappa & 1 \end{pmatrix}$ . Fra ligning 3.37 får man to ligninger med tre ubekendte:

$$C = A + B \quad 3.44$$

og

$$ik'C = \kappa(A + B) + ik(A - B) \quad 3.45$$

Når ligning 3.44 substitueres i ligning 3.45 kan der isoleres på  $A$  så man får, at

$$A = B \frac{\kappa - ik - ik'}{\kappa + ik - ik'} \quad \text{og} \quad |A|^2 = |B|^2 \quad 3.46$$

Konklusionen er altså, at der kun sker refleksion i tilfældet med et deltapotentiale.

Indsæt 5f\* hér!



## 3.2 Numeriske resultater ved brug af transfermatrix-metoden

## 4 Periodiske potentialer

## 5 Appendiks