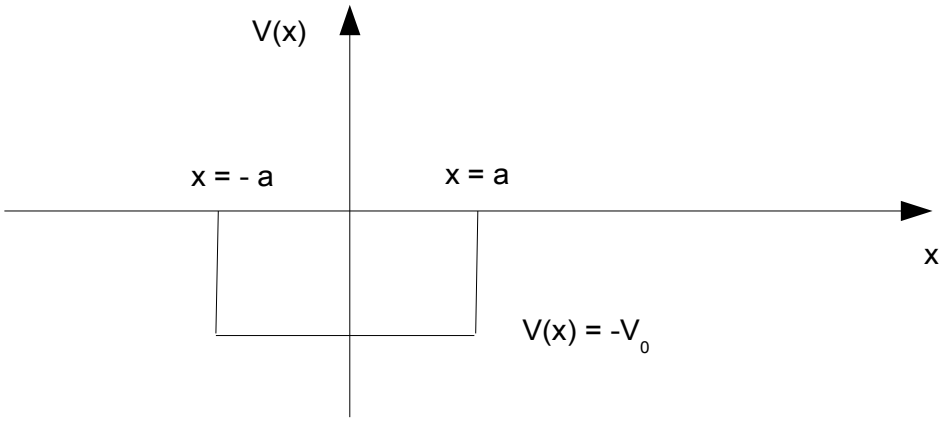
Partikel i en potentialbrønd[1]

Det minder meget om partikel i en boks, men beregninger bliver mere komplicerede, fordi potentialbrønden ikke er uendelig. Dermed bliver bliver bølgefunktionen ikke nul uden for brønden, som den er når brønden er uendelig, og dermed bliver beregningerne en smule mere komplicerede. Men lad os først få skitseret potentialet:



Potentialet V(x) kan altså skrives på formen:

$V(x) = 0$ for $x < -a$
$V(x) = -V_0$ for $-a < x < a$
$V(x) = 0$ for $x > a$

Vi indskrænker os til tilfælde, hvor energien af partiklen E ligger imellem $-V_0$ og 0
Der gælder med andre ord, at $-V_0 < E < 0$. Den samlede energi af partiklen er altså negativ. Var den samlede energi større end 0 ville den straks forlade brønden, så det er ikke så interessant et tilfælde.

Igen tager vi udgangspunkt i den stationære Schrödingerligning:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x)+V(x)\cdot\Psi(x)=E\cdot\Psi(x)$$

1) Vi ser først på løsninger i intervallet $-a < x < a$
   Vis, at den stationære schrödingerligning i dette tilfælde kan skrives på formen:
   $$\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x)=-q^2\cdot\Psi(x) \qquad \text{, hvor} \quad q^2=\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}$$

2) Begrund, at $E+V_0$ er et positivt tal i intervallet $-a < x < a$
   Man skal med andre ord vise, at $E+V_0>0$

3) Vis at følgende er en løsning til ovenstående ligning:
   $$\Psi(x)=A\cdot\cos(q\cdot x)+B\cdot\sin(q\cdot x)$$

4) Nu skal vi løse den stationære schrödingerligning i intervallet $x < -a$
   Vis, at den stationære schrödingerligning i dette tilfælde kan skrives på formen:
   $$\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x)=k^2\cdot\Psi(x) \qquad \text{, hvor} \quad k^2=-\frac{2mE}{\hbar^2}$$

1 Se f.eks. Stephen Gasiorowicz, Quantum Physics, Second Edition, John Wiley & Sons, side 89

5) Begrund, at $-\frac{2mE}{\hbar^2}>0$ i intervallet x < - a

6) Vis at følgende er en løsning til ovenstående ligning i intervallet x < - a:
$\Psi(x)=C_1\cdot e^{k\cdot x}+C_2\cdot e^{-k\cdot x}$

7) Begrund, at konstanten $C_2=0$
Benyt at $\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^2(x)dx$ skal være et endeligt tal.

8) Dermed kan den generelle løsning i intervallet x < - a skrives på formen:
$\Psi(x)=C_1\cdot e^{k\cdot x}$

9) Begrund på samme måde, at følgende er en løsning til den stationære schrödingerligning i intervallet x > a :
$\Psi(x)=C_2\cdot e^{-k\cdot x}$

10) Bølgefunktionen skal være kontinuert i $x=-a$ Benyt dette til at vise følgende:
$C_1\cdot e^{-k\cdot a}=A\cdot\cos(q\cdot a)-B\cdot\sin(q\cdot a)$

11) Bølgefunktionen skal selvfølgelig også være kontinuert i $x=a$ Benyt dette til at vise følgende:
$C_2\cdot e^{-k\cdot a}=A\cdot\cos(q\cdot a)+B\cdot\sin(q\cdot a)$

12) Den første afledede af bølgefunktionen skal også være kontinuert. Benyt dette i $x=-a$ til at vise følgende:
$k\cdot C_1\cdot e^{-k\cdot a}=q\cdot(A\cdot\sin(q\cdot a)+B\cdot\cos(q\cdot a))$

13) Den første afledede af bølgefunktionen skal også være kontinuert i $x=a$ Benyt dette til at vise:
$-k\cdot C_2\cdot e^{-k\cdot a}=-q\cdot(A\cdot\sin(q\cdot a)-B\cdot\cos(q\cdot a))$

Man kan ud fra ovenstående fire ligninger vise at $A\cdot B=0$ (Prøv at vise dette...det er lidt vanskeligt)

14) Hvorfor betyder resultatet ovenfor, at $A=0\vee B=0$

15) Lad os først se på tilfældet $A=0$
Vis, at de 4 ligninger i dette tilfælde kan reduceres til:
$k=q\cdot\tan(q\cdot a)$

16) Denne ligningerne kan desværre ikke løses analytisk. Vi skal derfor se på en grafisk løsning.
Først skal vi have omskrevet ligningen $k=q\cdot\tan(q\cdot a)$ Vis, at den kan omskrives til:
$\frac{\sqrt{\lambda-y^2}}{y}=\tan(y)$ hvor $\lambda=\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}$ og $y=q\cdot a$

17) En ligning kan løses grafisk ved at tegne grafen for begge sider af lighedstegnet.
Tegn derfor først grafen for $\tan(y)$ (Brug et graftegneprogram, som f.eks. Maple).
Af grunde, som uddybes nedenfor, er det nok at afbilde grafen for $\tan(y)$ i 1. kvadrant.
Lad f.eks. 1.-aksen går fra 0-15 og 2.-aksen fra 0-10. Bemærk, at $\tan(y)$ er periodisk med perioden π.

Vi skal nu have tegnet grafen for $\frac{\sqrt{\lambda - y^2}}{y}$. Bemærk, at λ er en positiv konstant, da vi opfatter m, V_0 og a som givne størrelser.

Bemærk at da $q > 0$ er $y = q \cdot a > 0$ og derfor er $\frac{\sqrt{\lambda - y^2}}{y} > 0$

Find et udtryk for den y-værdi, hvor $\frac{\sqrt{\lambda - y^2}}{y} = 0$

18) Tegn nu grafen for $\frac{\sqrt{\lambda - y^2}}{y}$ først for λ = 2 i samme koordinatsystem som I tegnede grafen for $\tan(y)$

Hvor mange løsninger er der til $\frac{\sqrt{\lambda - y^2}}{y} = \tan(y)$ i dette tilfælde?

Tegn nu grafen for $\frac{\sqrt{\lambda - y^2}}{y}$ for λ = 25 i samme koordinatsystem.

Hvor mange løsninger er der i dette tilfælde?

Tegn nu grafen for $\frac{\sqrt{\lambda - y^2}}{y}$ for λ = 100 i samme koordinatsystem.

Hvor mange løsninger er der i dette tilfælde?

Når man har en dyb potentialbrønd, dvs. V_0 er stor, så er λ også stor. Når potentialbrønden ikke er så dyb, så er λ lille.

19) Hvad betyder så ovenstående resultater i forhold til antallet af stationære tilstande?

20) Af grafen ses også, at der netop er en løsning i intervallet $\left[0; \frac{\pi}{2}\right[$. Desuden er der også netop en løsning i intervallet $\left[\pi; \frac{3 \cdot \pi}{2}\right[$ osv.

21) Derefter skal vi se på tilfældet $B = 0$

Vis, at de 4 ligninger i dette tilfælde kan reduceres til:

$$k = -q \cdot \cot(q \cdot a) = -q \cdot \frac{1}{\tan(q \cdot a)}$$

22) Vis på samme måde som ovenfor, at der for $B = 0$ kun er en løsning i intervallet $\left[\frac{\pi}{2}; \pi\right[$

Desuden er der også netop en løsning i intervallet $\left[\frac{3 \cdot \pi}{2}; 2 \cdot \pi\right[$

23) Lav en skitse af energiniveaudiagrammet. Det skal blot være en skitse, men det er vigtigt at afklare om der er endelig eller uendelig mange energiniveauer.

24) Skitser bølgefunktionen for grundtilstanden.

25) Skitser også bølgefunktionen for de første 3 lavest liggende exiterede tilstande.

26) Med A = 0 får man de såkaldte lige tilstande. Begrund dette med henvisning til graferne.

27) Med B = 0 får man de såkaldte ulige tilstande. Begrund dette med henvisning til graferne.