Klassisk vs QM oscillator

[PCH 3.5.5 ; DJG 2.3.2 ; IØ 3.4.d]

QM: $dP_n = |\psi_n(q)|^2 \, dq$

Klassisk: dP = andel av tiden tilbrakt på $(q, q+dq)$

$$= dt/T = (2 \cdot dq/v) / (2\pi/\omega)$$

$$= (\omega / v\pi) \, dq$$

$$q = q_0 \cos \omega t \, ; \quad v = |\dot{q}| = \omega q_0 \, |\sin \omega t|$$

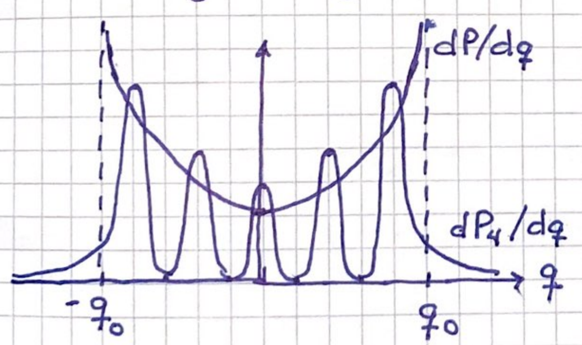
$$= \omega q_0 \sqrt{1 - \cos^2 \omega t}$$

$$= \omega \sqrt{q_0^2 - q^2}$$

$$\Rightarrow dP = \frac{dq}{\pi \sqrt{q_0^2 - q^2}}$$

For små verdier av n er det få likhetstrekk mellom dP_n/dq i QM og dP/dq klassisk.

For store n oscillerer dP_n/dq ca n ganger på det klassisk tillatte området $(-q_0, q_0)$, men omhylningskurven ligner mye på den klassiske dP/dq.



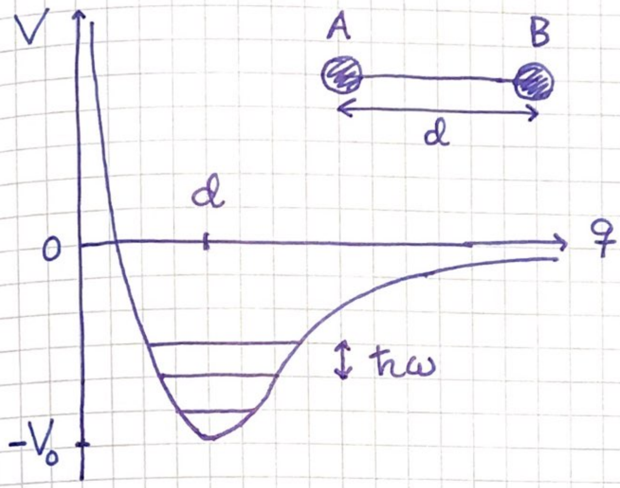
Klassiske vendepunkter:

$v = 0$, $K = 0$, $E = V(\pm q_0) = \frac{1}{2} m\omega^2 q_0^2$

Hvis $E = E_4 = (4 + 1/2)\hbar\omega = \frac{9}{2}\hbar\omega$ blir $q_0 = 3\sqrt{\hbar/m\omega}$

Toatomige molekyler og Morsepotensialet

Realistisk potensial $V(q)$ for toatomig molekyl:



- Sterk frastøtende kraft $(F = -dV/dq)$ når $q < d$
- Tiltrekkende kraft når $q > d$
- Dissosiert molekyl når $q \gg d$ (separate atomer)

Kan modelleres med Morsepotensialet

$$V(q) = V_0 \left\{ \left[1 - e^{-\alpha(q-d)}\right]^2 - 1 \right\}$$

der

$$V(\infty) = 0 \quad \text{og} \quad V(d) = -V_0 \quad (\text{likevekt})$$

Nær likevekt:

$$V(q) \approx V_0 \left\{ \left[1 - 1 + \alpha(q-d)\right]^2 - 1 \right\}$$

$$= -V_0 + \alpha^2 V_0 (q-d)^2$$

dvs harmonisk oscillator med fjærkonstant

$$k = \mu\omega^2 = 2\alpha^2 V_0 \quad ; \quad \frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_A} + \frac{1}{m_B}$$

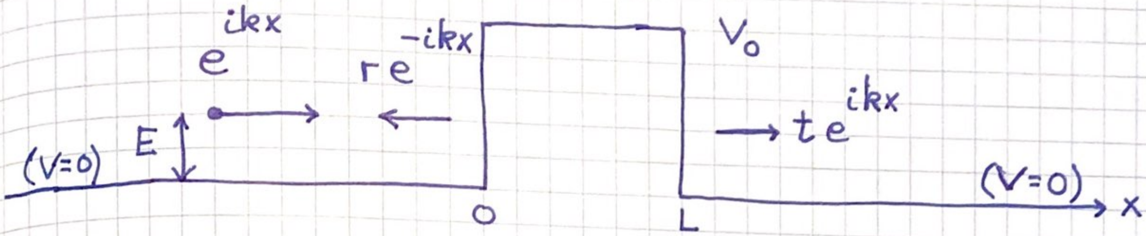
og kvantiserte vibrasjonsenerginivåer

$$E_n = -V_0 + (n + \tfrac{1}{2})\hbar\omega \quad ; \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

Dissosiasjonsenergien blir

$$V_0 - \tfrac{1}{2}\hbar\omega$$

Tunneleffekt [PCH 3.6; DJG 2.5–2.7; IØ 3.6]



Potensialbarriere V_0 på $0<x<L$ kan realiseres med f.eks. et lag med $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ mellom GaAs. Potensialprofilen $V(x)$ tilsvarer da bunnen av ledningsbåndet i de to halvledermaterialene.

Antar partikkel (elektron) med skarp impuls $p=\hbar k$ inn fra venstre, energi $E = K = \hbar^2 k^2/2m$:

$$\psi_i(x) = e^{ikx} \qquad (x<0)$$

Bare to mulige utfall: Refleksjon, med sanns. R, og transmisjon (tunnelering hvis $E<V_0$), med sanns. $T = 1-R$, slik at $R+T=1$.

Reflektert bølge: $\psi_r(x) = r\cdot e^{-ikx} \qquad (x<0)$

Transmittert bølge: $\psi_t(x) = t\cdot e^{ikx} \qquad (x>L)$

I barriereområdet $0<x<L$:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x} & ; \; E<V_0 \; ; \; \kappa = \sqrt{2m(V_0-E)}/\hbar \\ ae^{iqx} + be^{-iqx} & ; \; E>V_0 \; ; \; q = \sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar \end{cases}$$

Krav om kontinuerlige ψ og $d\psi/dx$ i $x=0$ og $x=L$ gir 4 ligninger som fastlegger A, B, r og t for $E<V_0$ og a, b, r og t for $E>V_0$.

[Se Notater 2016 s. 63–64 for detaljer.]

Vi må ha: $j_i = |j_r| + j_t$

Dvs. sanns.strøm inn j_i må tilsvare summen av reflektert og transmittert sanns.strøm, hhv $|j_r|$ og j_t.

Har generelt:
$$j = \mathrm{Re}\left\{ \psi^* \frac{\hbar}{im} \frac{d}{dx} \psi \right\}$$

Dermed:

$$j_i = \mathrm{Re}\left\{ e^{-ikx} \frac{\hbar}{im} ik\, e^{ikx} \right\} = \frac{\hbar k}{m}$$

$$j_r = \mathrm{Re}\left\{ r^* e^{ikx} \frac{\hbar}{im} (-ik)\, r\, e^{-ikx} \right\} = -|r|^2 \frac{\hbar k}{m}$$

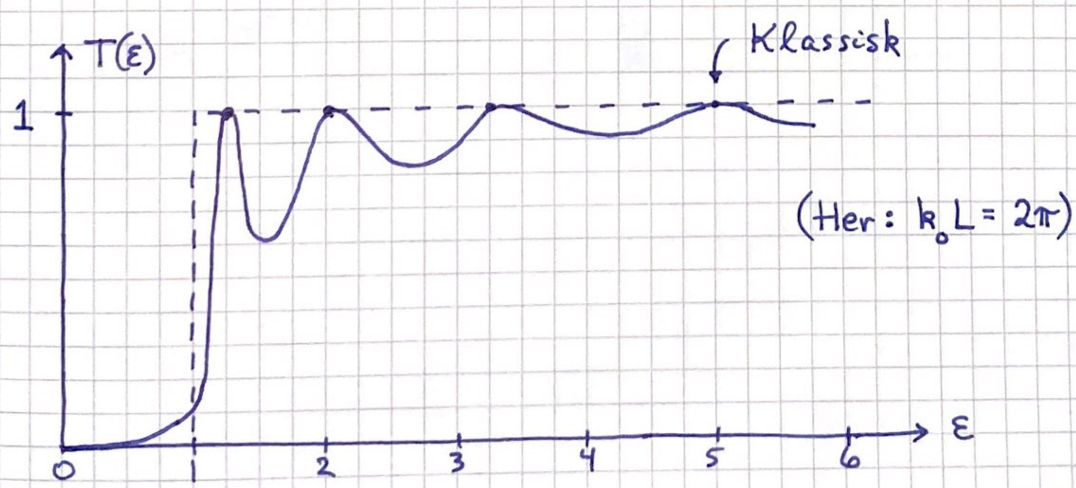
$$j_t = \mathrm{Re}\left\{ t^* e^{-ikx} \frac{\hbar}{im} ik\, t\, e^{ikx} \right\} = |t|^2 \frac{\hbar k}{m}$$

Dvs, $|r|^2$ og $|t|^2$ er hhv andel reflektert og andel transmittert sannsynlighet, slik at

$$R = |r|^2, \quad T = |t|^2, \quad R + T = 1$$

Med vår "firkantbarriere", med $\varepsilon = \frac{E}{V_0}$ og $k_0 = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}$:

$$T = \begin{cases} \left[1 + \dfrac{\sinh^2 (k_0 L \sqrt{1-\varepsilon})}{4\varepsilon(1-\varepsilon)} \right]^{-1} & ; \quad \varepsilon < 1 \\ \left[1 + \dfrac{\sin^2 (k_0 L \sqrt{\varepsilon - 1})}{4\varepsilon(\varepsilon - 1)} \right]^{-1} & ; \quad \varepsilon > 1 \end{cases}$$

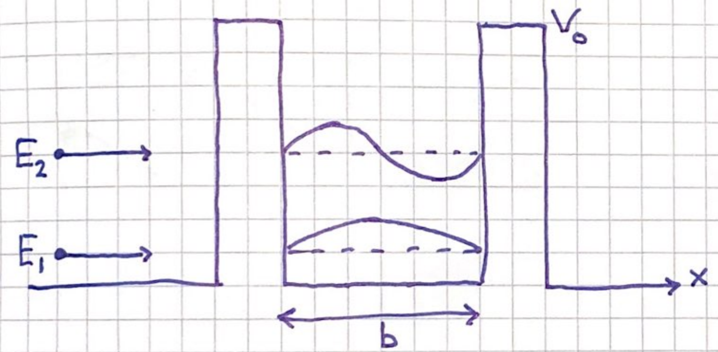


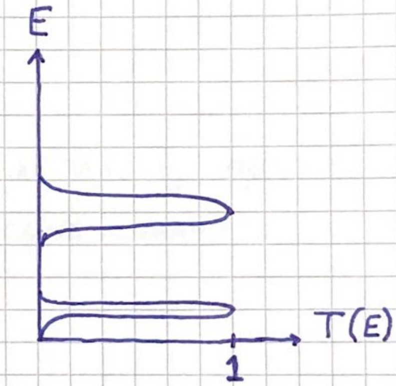
Merknader:

- Tunnelering: $T > 0$ for $E < V_0$. (Og $R > 0$ for $E > V_0$)
- Hvis $E \ll V_0$ og $k_0 L \gg 1$ er $\sinh\left(k_0 L \sqrt{1-\varepsilon}\right) \approx \frac{1}{2} e^{k_0 L} \gg 1$

  $\Rightarrow T \approx 16\varepsilon \cdot \exp(-2k_0 L) \ll 1$
- $T = 1$ når $\sin\left(k_0 L \sqrt{\varepsilon - 1}\right) = 0$, dvs $k_0 L \sqrt{\varepsilon - 1} = n\pi$ og dermed $E - V_0 = K = n^2 \pi^2 \hbar^2 / 2mL^2$, som er energinivåene for partikkel i boks, der vi har stående bølger med bølgelengder $\lambda_n = 2L/n$ $(n = 1, 2, 3, \ldots)$.

Resonant tunnelering:

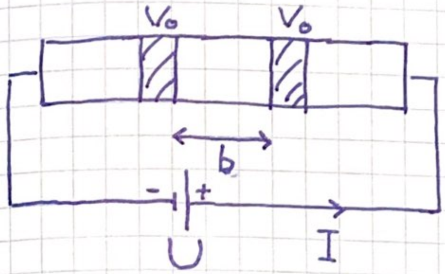


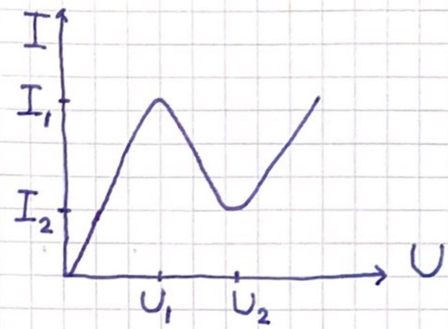


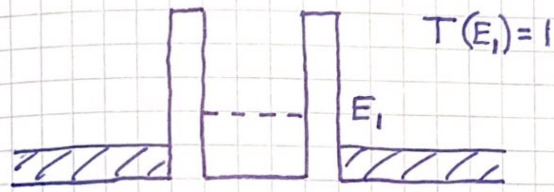
Resonans og stående bølger mellom barrierene gir $T = 1$ når

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mb^2} \quad ; \quad \lambda_n = \frac{2b}{n} \quad ; \quad n = 1, 2, \ldots$$

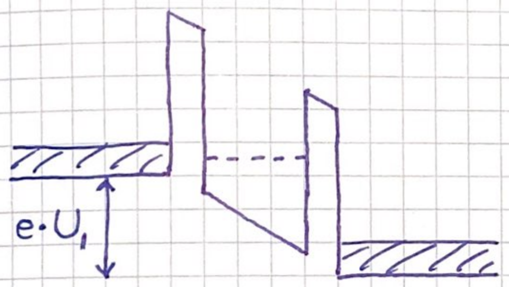
Eksperimentelt :



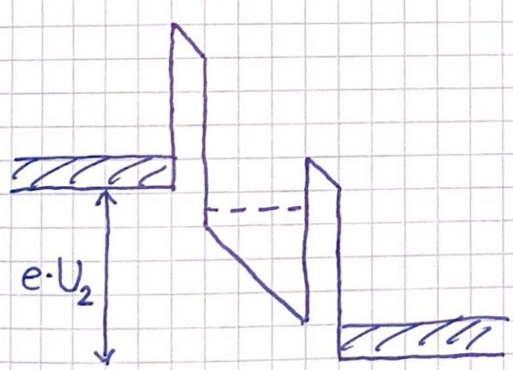




$U = 0, \quad I = 0$



$U = U_1$
Stor strøm I_1 pga resonant tunnelering

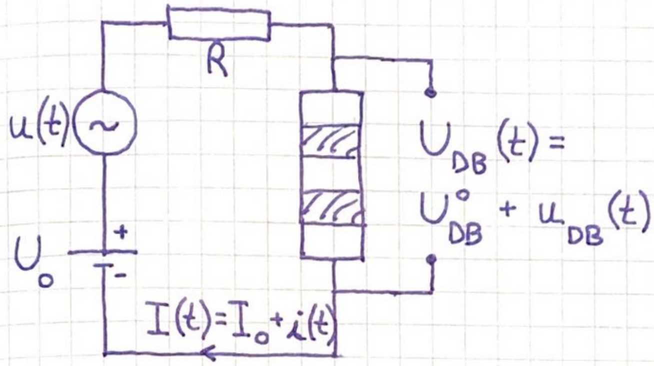


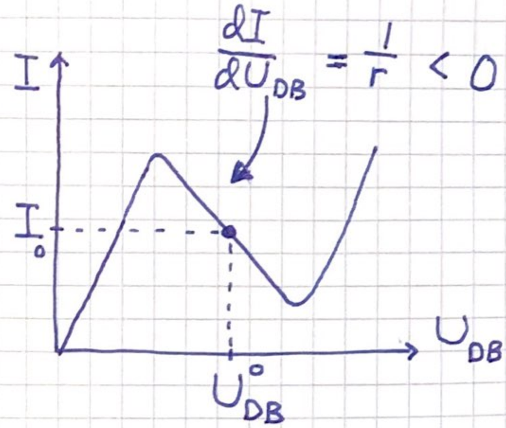
$U = U_2$
Mindre strøm I_2

Negativ differensiell resistans for spenning mellom U_1 og U_2 :

$$r = dU/dI < 0$$

Anvendelse : AC forsterker





Med $u(t) = 0$: $\quad U_0 = RI_0 + U_{DB}^{\circ}$

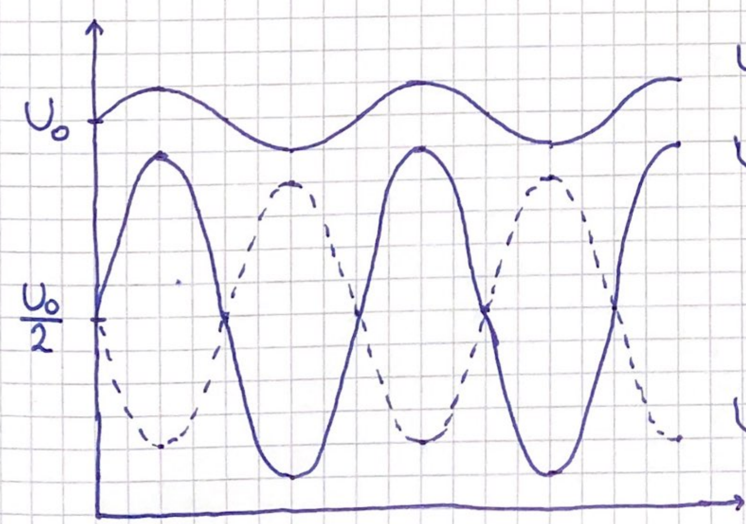
Med $u(t) = u_0 \sin \omega t \quad (u_0 \ll U_0)$:

$$
\begin{aligned}
u_0 \sin \omega t &= u_{DB}(t) + R\,i(t) \\
&= r\,i(t) + R\,i(t) = (r+R)\,i(t)
\end{aligned}
$$

$$\Rightarrow i(t) = \frac{u_0}{r+R} \sin \omega t \quad ; \quad u_{DB}(t) = \frac{u_0 r}{r+R} \sin \omega t$$

Med $R \lesssim |r|$ blir AC-signalet $u_{DB}(t)$ en forsterket utgave av det påtrykte AC-signalet $u(t)$.

Eks: $R = \frac{4}{5}|r|$, og f.eks. $U_{DB}^{\circ} = RI_0 = \frac{1}{2}U_0$



$U(t) = U_0 + u_0 \sin \omega t$

$U_{DB}(t) = U_{DB}^{\circ} + 5u_0 \sin \omega t$

$U_R(t) = RI_0 - 4u_0 \sin \omega t$