

Løsningsforslag
FYS2140 Hjemmeeksamen – Vår 2015

12. mars 2015

Det er i alt mulig (på en god dag) å få 20 poeng på denne hjemmeeksamen. Noen av oppgavene skal løses numerisk. Kompendiet om programmering, samt eksemplene på hjemmesiden, kan her være nyttige.

Oppgave

I denne oppgaven skal vi se på tunnelering. Dette er et fenomen med mange praktiske anvendelser, spesielt i moderne teknologi, men her skal vi se litt mer abstrakt på problemet.

Vi ser først på en fri partikkel som begynner i en tilstand gitt ved bølgepakken

$$\Psi(x, 0) = Ae^{-(x-x_0)^2/4a^2} e^{ilx}, \quad (1)$$

hvor A er en normeringskonstant, og x_0 , a og l er tre reelle parametre.

a) Finn A . [1 poeng]

Svar: Vi bruker normeringsbetingelsen

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, 0)|^2 dx = 1. \quad (2)$$

Integralet gir

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, 0)|^2 dx &= \int_{-\infty}^{\infty} |A|^2 e^{-(x-x_0)^2/2a^2} dx \\ &= |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} \sqrt{2}ady \\ &= |A|^2 \sqrt{\pi} \sqrt{2}a = |A|^2 \sqrt{2\pi}a, \end{aligned} \quad (3)$$

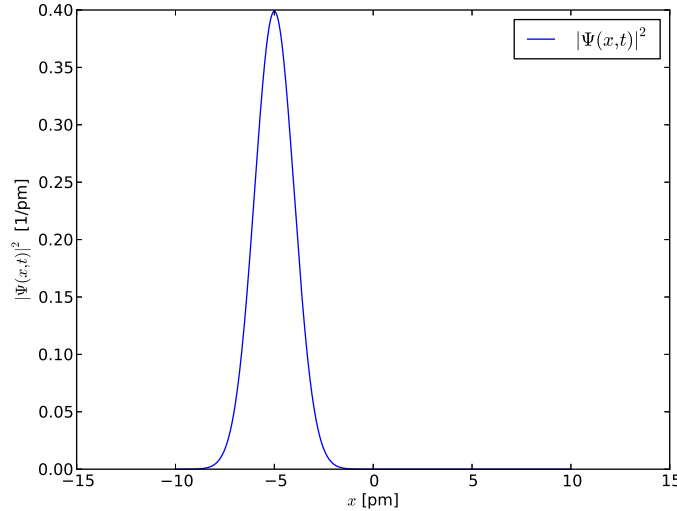
hvor vi har brukt variabelbyttet $y = (x - x_0)/\sqrt{2}a$. Når vi velger en reell og positiv A så får vi

$$A = \left(\frac{1}{2\pi a^2} \right)^{1/4}. \quad (4)$$

b) Lag et plott av sannsynlighetstettheten til denne tilstanden. Husk enheter på aksene. Velg konstanter selv, men vi anbefaller lengder på picometernivå. Hva forteller de tre konstantene oss? *Hint:* For å forstå betydningen av l kan det lønne seg å finne $\langle p \rangle$ for denne tilstanden. [2.5 poeng]

Svar: Vi velger oss konstantene $x_0 = -5.0$ pm og $a = 1.0$ pm. Sannsynlighetstettheten er absoluttverdikvadratet av bølgefunksjonen:

$$|\Psi(x, 0)|^2 = \left(\frac{1}{2\pi a^2} \right)^{1/2} e^{-(x-x_0)^2/2a^2}, \quad (5)$$



Figur 1: Sannsynlighetstettheten for (1) med $x_0 = -5.0$ pm og $a = 1.0$ pm.

og er plottet i figur 1 ved hjelp av skriptet `hjemmeeksamen1.py`.

Ved å forsøke forskjellige verdier for x_0 og a ser man raskt at disse sier hvor midtpunktet til initialtilstanden ligger (x_0), og hvor bred den er (a). Imidlertid forsvinner l i sannsynlighetstettheten. Vi følger hintet og finner $\langle p \rangle$ for $\Psi(x, 0)$:

$$\begin{aligned}
 \langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, 0) \hat{p} \Psi(x, 0) dx \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, 0) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(x, 0) dx \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, 0) \left(-i\hbar \frac{2(x - x_0)}{4a^2} - i\hbar l \right) \Psi(x, 0) dx \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, 0) \left(-i\hbar \frac{(x - x_0)}{2a^2} + \hbar l \right) \Psi(x, 0) dx \\
 &= -\frac{i\hbar}{2a^2} \int_{-\infty}^{\infty} (x - x_0) |\Psi(x, 0)|^2 dx + \hbar l \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, 0)|^2 dx \\
 &= \hbar l,
 \end{aligned} \tag{6}$$

hvor vi har brukt at det første integralet er null fordi det er antisymmetrisk om x_0 , og det andre er én fordi det er normeringsintegralet. Dette betyr at l gir størrelsen på bevegelsesmengden til partikelen/tilstanden.

c) Denne bølgepakken har ikke en skarpt bestemt energi, men vis at for-

ventningsverdien kan skrives som

$$\langle E \rangle = \frac{\hbar^2(l^2 + 1/4a^2)}{2m}. \quad (7)$$

[1.5 poeng]

Svar: For en fri partikkel er energien rent kinetisk, $E = K = p^2/2m$, som gir

$$\langle E \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m}. \quad (8)$$

Vi har videre at

$$\begin{aligned} \langle p^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, 0) \hat{p}^2 \Psi(x, 0) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, 0) \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \Psi(x, 0) dx \\ &= -\hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, 0) \frac{\partial}{\partial x} \left(-\frac{(x-x_0)}{2a^2} + il \right) \Psi(x, 0) dx \\ &= -\hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, 0) \left(-\frac{1}{2a^2} + \left(-\frac{(x-x_0)}{2a^2} + il \right)^2 \right) \Psi(x, 0) dx \\ &= -\hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, 0) \left(\frac{(x-x_0)^2}{4a^4} - l^2 - \frac{1}{2a^2} \right) \Psi(x, 0) dx \\ &= -\frac{\hbar^2}{4a^4} \int_{-\infty}^{\infty} (x-x_0)^2 \left(\frac{1}{2\pi a^2} \right)^{1/2} e^{-(x-x_0)^2/2a^2} dx + \hbar^2 \left(l^2 + \frac{1}{2a^2} \right) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2a^4} \left(\frac{1}{2\pi a^2} \right)^{1/2} \int_0^{\infty} y^2 e^{-y^2/2a^2} dy + \hbar^2 \left(l^2 + \frac{1}{2a^2} \right) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2a^4} \left(\frac{1}{2\pi a^2} \right)^{1/2} \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2a^2} \right)^{-3/2} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) + \hbar^2 \left(l^2 + \frac{1}{2a^2} \right) \\ &= -\frac{\hbar^2}{4a^2} + \hbar^2 \left(l^2 + \frac{1}{2a^2} \right) = \hbar^2 l^2 + \frac{\hbar^2}{4a^2} = \hbar^2 \left(l^2 + \frac{1}{4a^2} \right), \quad (9) \end{aligned}$$

hvor vi igjen har brukt at integrander av typen $(x-x_0)|\Psi(x, 0)|^2$ er antisymmetriske om x_0 og substitusjonen $y = x - x_0$. Dette gir en forventningsverdi for energien på

$$\langle E \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} = \frac{\hbar^2(l^2 + 1/4a^2)}{2m}. \quad (10)$$

d) Gitt (boks)potensialet

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & 0 \leq x \leq L \\ 0 & \text{ellers} \end{cases}, \quad (11)$$

hvor $V_0 > 0$, finn (analytisk) sannsynligheten for transmisjon som funksjon av energien for en fri-partikkel planbølgeløsning $\psi(x) = Ae^{ikx}$ med energi $E < V_0$, som kommer inn fra venstre. Tegn en figur som klart viser de forskjellige områdene i potensialet, og de innkommende og utgående bølgene som er relevante. [3 poeng]

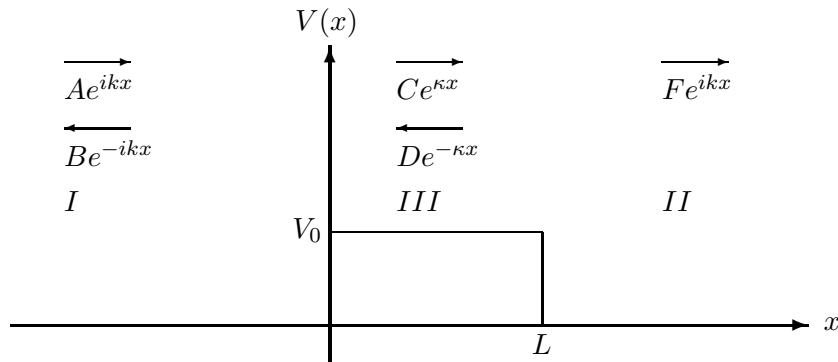
Svar: Figur 2 viser de tre områdene for potensialet (I, II og III), de innkommende og utgående planbølgene, og løsningene inne i boksen. Merk at vi ikke har noen innkommende bølge fra høyre da denne ikke kan ha noen fysisk tolkning i dette problemet. Schrödingerligningen utenfor boksen (fri partikkel) er

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = -k^2\psi, \quad (12)$$

med $k \equiv \sqrt{2mE}/\hbar$, og inne i boksen

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}\psi = \kappa^2\psi, \quad (13)$$

med $\kappa \equiv \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$, når $0 < E < V_0$.



Figur 2: Skisse av potensialet gitt i (11).

Schrödingerligningen har da de følgende løsningene i de tre områdene

$$\psi_I(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad (14)$$

$$\psi_{II}(x) = Fe^{ikx}, \quad (15)$$

$$\psi_{III}(x) = Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x}. \quad (16)$$

Transmisjonssannsynligheten T er gitt som forholdet mellom absoluttverdikvadratet av utgående (mot høyre) amplitude F og innkommende (fra venstre) amplitude A ,

$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2}. \quad (17)$$

Vi bruker kravet til kontinuitet for bølgefunksjonen, og den deriverte av bølgefunksjonen, i overgangen mellom de tre områdene ($x = 0$ og $x = L$), for å finne forholdet mellom amplitudene A , B , C , D og F . Dette gir det følgende ligningssettet

$$A + B = C + D, \quad (18)$$

$$Ce^{\kappa L} + De^{-\kappa L} = Fe^{ikL}, \quad (19)$$

$$ikA - ikB = \kappa C - \kappa D, \quad (20)$$

$$\kappa Ce^{\kappa L} - \kappa De^{-\kappa L} = ikFe^{ikL}. \quad (21)$$

For å løse dette for A og F må vi eliminere C og D som vi ikke er interessert i. Vi begynner med å ta $ik(18)+(20)$ og $ik(18)-(20)$ som gir

$$2ikA = (ik + \kappa)C + (ik - \kappa)D, \quad (22)$$

$$2ikB = (ik - \kappa)C + (ik + \kappa)D. \quad (23)$$

Deretter finner vi $\kappa(19)+(21)$ og $\kappa(19)-(21)$

$$2\kappa Ce^{\kappa L} = (\kappa + ik)Fe^{ikL}, \quad (24)$$

$$2\kappa De^{-\kappa L} = (\kappa - ik)Fe^{ikL}. \quad (25)$$

Innsatt i (22) får vi

$$2ikA = \frac{(\kappa + ik)^2}{2\kappa} Fe^{(ik-\kappa)L} - \frac{(\kappa - ik)^2}{2\kappa} Fe^{(ik+\kappa)L}. \quad (26)$$

Vi har nå det forholdet mellom A og F som vi trenger, og resten er ren pynting på resultatet.

$$\begin{aligned} A &= \frac{1}{4ik\kappa} \left[(\kappa + ik)^2 e^{(ik-\kappa)L} - (\kappa - ik)^2 e^{(ik+\kappa)L} \right] F \\ &= \frac{1}{4ik\kappa} \left[(\kappa + ik)^2 e^{-\kappa L} - (\kappa - ik)^2 e^{\kappa L} \right] e^{ikL} F \\ &= \frac{1}{4ik\kappa} \left[(\kappa^2 + 2ik\kappa - k^2) e^{-\kappa L} - (\kappa^2 - 2ik\kappa - k^2) e^{\kappa L} \right] e^{ikL} F \\ &= \frac{1}{4ik\kappa} \left[2ik\kappa (e^{-\kappa L} + e^{\kappa L}) - (\kappa^2 - k^2) (e^{\kappa L} - e^{-\kappa L}) \right] e^{ikL} F \\ &= \frac{1}{4ik\kappa} \left[4ik\kappa \cosh \kappa L - 2(\kappa^2 - k^2) \sinh \kappa L \right] e^{ikL} F \\ &= \left[\cosh \kappa L - \frac{(\kappa^2 - k^2)}{2ik\kappa} \sinh \kappa L \right] e^{ikL} F, \end{aligned} \quad (27)$$

hvor vi har brukt (fra Rottmann) at $2 \cosh x = e^x + e^{-x}$ og $2 \sinh x = e^x - e^{-x}$. Da er transmisjonssannsynligheten

$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{1}{\left| \cosh \kappa L - \frac{(\kappa^2 - k^2)}{2ik\kappa} \sinh \kappa L \right|^2}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{\cosh^2 \kappa L + \frac{(\kappa^2 - k^2)^2}{(2k\kappa)^2} \sinh^2 \kappa L} \\
&= \frac{1}{1 + \sinh^2 \kappa L + \frac{(\kappa^2 - k^2)^2}{4k^2 \kappa^2} \sinh^2 \kappa L} \\
&= \frac{1}{1 + \frac{(\kappa^2 - k^2)^2 + 4k^2 \kappa^2}{4k^2 \kappa^2} \sinh^2 \kappa L} \\
&= \frac{1}{1 + \frac{(\kappa^2 + k^2)^2}{4k^2 \kappa^2} \sinh^2 \kappa L}, \tag{28}
\end{aligned}$$

hvor vi har brukt at $\cosh^2 x - \sinh^2 x = 1$.

Det som står igjen er å skrive om T til en funksjon av energien E . Vi bruker definisjonene for k og κ som gir

$$\kappa^2 + k^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{2mV_0}{\hbar^2}, \tag{29}$$

og

$$\kappa^2 k^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{4m^2(V_0 - E)E}{\hbar^4}, \tag{30}$$

slik at

$$\frac{(\kappa^2 + k^2)^2}{4k^2 \kappa^2} = \frac{\left(\frac{2mV_0}{\hbar^2}\right)^2}{4\frac{4m^2(V_0 - E)E}{\hbar^4}} = \frac{V_0^2}{4(V_0 - E)E}. \tag{31}$$

Vi får da (endelig) at

$$T(E) = \left[1 + \frac{V_0^2}{4(V_0 - E)E} \sinh^2 \left(\frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} L \right) \right]^{-1}. \tag{32}$$

- e) Bruk potensialet i oppgave **d**) med verdiene $V_0 = 1 \text{ MeV}$ og $L = 0.25 \text{ pm}$. Se på et elektron med masse $m = 0.511 \text{ MeV}/c^2$ som kommer inn fra venstre, nå med initialtilstand gitt ved (1). Gjør en numerisk simulering med hjelp av Schrödingerligningen av hva som skjer dersom du starter elektronet med $x_0 = -5.0 \text{ pm}$, $a = 1.0 \text{ pm}$ og $l = 2.0 \text{ pm}^{-1}$. Ut i fra denne simuleringen, gi en kort beskrivelse av hva som skjer med bølgefunksjonen til elektronet når den treffer potensialhindringen. Snakk med din lokale datamaskin. [2 poeng]

Svar: Et forslag til numerisk løsning finnes i `hjemmeeksamen2.py`. Vi observerer at bølgepakken beveger seg mot potensialet, mens den sprer seg litt utover og faller. Når den treffer potensialet går en mindre del av den igjennom (transmitteres), mens en del blir igjen, delt opp i mange mindre topper, som til slutt samler seg og går tilbake mot venstre (reflekteres). Til slutt er det en mindre bølgepakke på vei mot høyre, og en større på vei tilbake til venstre.

- f) Hvordan kan man finne sannsynligheten for transmisjon numerisk for situasjonen i oppgave e)? [1.0 poeng]

Svar: Sannsynligheten for at partikkelen befinner seg i et intervall ved tiden t er integralet av $|\Psi(x, t)|^2$ over intervallet. Sannsynligheten for transmisjon burde da være sannsynligheten for å finne partikkelen til høyre for potensialet etter kollisjonen. Denne kan vi finne ved numerisk integrasjon.

- g) Finn *numerisk* sannsynligheten for transmisjon av bølgepakken i (1) som funksjon av energien, og sammenlign med svaret i oppgave d). Det holder om du regner ut transmisjonssannsynligheten for en håndfull verdier av energien. *Hint:* Bølgepakken vi sender inn har ikke en skarpt bestemt energi, så bruk $\langle E \rangle$ for energien. [2 poeng]

Svar: I figur 3 viser vi transmisjonssannsynligheten fra oppgave d) plottet sammen med numeriske verdier fra simuleringen for seks verdier av energien. Utregningen av de numeriske verdiene er gjort med `hjemmeeksamen2.py`, hvor vi bruker at energien er gitt fra c) som

$$\langle E \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} = \frac{\hbar^2(l^2 + 1/4a^2)}{2m}. \quad (33)$$

Plottet er laget med `hjemmeeksamen3.py`. For det analytiske resultatet plottet vi bare for $E < 1 \text{ MeV}$ da vi i utledningen antok at $E < V_0$.

Vi ser at resultatene med de to metodene er ganske like. Det at vi bruker en mer realistisk bølgepakke med spredning i energi i stedet for planbølger med skarp energi har relativt liten effekt, men effekten ser ut til å vokse litt med energien. For veldig små verdier for l , hvor energien til bølgepakken går mot en konstant verdi $\hbar^2/4a^2m$, får vi også et avvik. Det numerisk resultatet har en fordel at det ikke begrenser seg til $E < V_0$.

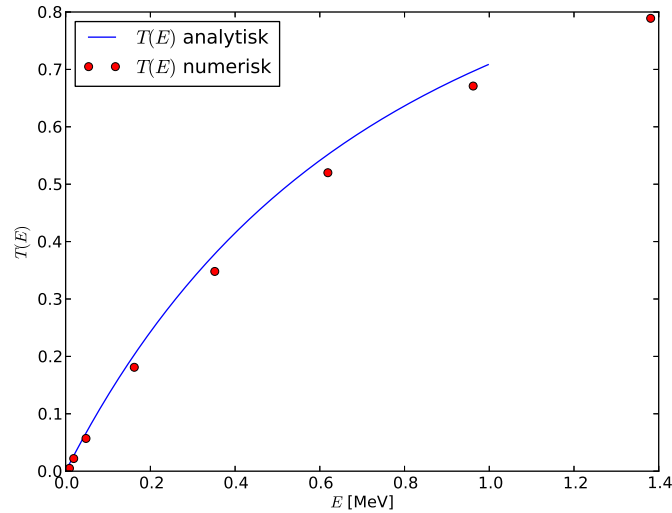
Til nå har vi regnet med Schrödingerligningen, som gir en ikke-relativistisk kvantemekanisk beskrivelse. Vi skal her se på relativistiske korreksjoner til denne. Vi tar utgangspunkt i Einsteins forhold mellom energi og bevegelsesmengde

$$E^2 = p^2c^2 + m^2c^4, \quad (34)$$

hvor p her er den relativistiske bevegelsesmengden.

- h) Vis at energien kan skrives som

$$E \simeq E_0 + \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3c^2}, \quad (35)$$



Figur 3: Transmisjonssannsynlighet $T(E)$ som funksjon av energien E .

der $E_0 = mc^2$ er hvileenergien, dersom $p^2c^2 \ll m^2c^4$. [1 poeng]

Svar: Vi kan skrive uttrykket for energi som

$$E = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} = mc^2 \sqrt{1 + \frac{p^2c^2}{m^2c^4}}. \quad (36)$$

Rekkeutviklingen av $(1+x)^{1/2}$ for $x < 1$ er, f.eks. fra Rottmann,

$$(1+x)^{1/2} = 1 + \frac{1}{2}x - \frac{1}{8}x^2 + \frac{1}{16}x^3 + \dots \quad (37)$$

Med $x = p^2c^2/m^2c^4$ gir dette

$$\begin{aligned} E &= mc^2 \left(1 + \frac{p^2c^2}{2m^2c^4} - \frac{p^4c^4}{8m^4c^8} + \dots \right) \\ &\simeq mc^2 \left(1 + \frac{p^2c^2}{2m^2c^4} - \frac{p^4c^4}{8m^4c^8} \right), \end{aligned} \quad (38)$$

når vi ignorerer høyere ordens ledd fordi $p^2c^2 \ll m^2c^4$, eller $x \ll 1$. Altså er

$$E \simeq E_0 + \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3c^2}. \quad (39)$$

- i) På forelesning har vi diskutert hvordan man kan rettferdiggjøre Schrödingerligningen for en fri partikkel hvor $V = 0$. Argumenter med utgangspunkt i uttrykket (35) hvorfor det følgende utgjør en rimelig relativistisk korleksjon til Schrödingerligningen

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{\hbar^4}{8m^3 c^2} \frac{\partial^4 \Psi}{\partial x^4} + E_0 \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}, \quad (40)$$

og vis at den har den samme fri-partikkel planbølgeløsningen som Schrödingerligningen

$$\Psi(x, t) = e^{i(kx - \omega t)}. \quad (41)$$

[2 poeng]

Svar: I (35) har vi et uttrykk for energien til en fri partikkel. Dersom denne skal være oppfylt av en bølgeligning må vi følge samme oppskrift som Schrödinger og bytte ut de observable i energiligningen med de tilhørende operatorene:

$$E \rightarrow \hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad p \rightarrow \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \quad (42)$$

Her er det den relativistiske bevegelsesmengden vi bytter ut med \hat{p} .¹

Med

$$\hat{p}^2 = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}, \quad (43)$$

og

$$\hat{p}^4 = \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) = \hbar^4 \frac{\partial^4}{\partial x^4}, \quad (44)$$

så gir dette differensialligningen i (40).

Vi kan vise at denne er oppfylt for planbølgeløsningen $\Psi(x, t) = e^{i(kx - \omega t)}$.

Vi finner første de deriverte:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = ik \frac{\partial \Psi}{\partial x} = (ik)^2 \Psi = -k^2 \Psi, \quad \frac{\partial^4 \Psi}{\partial x^4} = (ik)^4 \Psi = k^4 \Psi, \quad (45)$$

og

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i\omega \Psi, \quad (46)$$

slik at venstre side gir

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{\hbar^4}{8m^3 c^2} \frac{\partial^4 \Psi}{\partial x^4} + E_0 \Psi \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} (-k^2) \Psi - \frac{\hbar^4}{8m^3 c^2} k^4 \Psi + E_0 \Psi \end{aligned}$$

¹Vi kan se på vår vanlige Schrödingerligning som en første tilnærming til en relativistisk energiligning, hvor vi bare beholder de to første leddene i (35).

$$\begin{aligned}
&= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Psi - \frac{\hbar^4 k^4}{8m^3 c^2} \Psi + E_0 \Psi \\
&= \frac{p^2}{2m} \Psi - \frac{p^4}{8m^3 c^2} \Psi + E_0 \Psi,
\end{aligned} \tag{47}$$

mens høyre side er

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = i\hbar(-i\omega)\Psi = \hbar\omega\Psi = E\Psi, \tag{48}$$

hvor vi har brukt de Broglies uttrykk for energi og bevegelsesmengde. Løsningen $\Psi(x, t) = e^{i(kx - \omega t)}$ oppfyller altså den nye bølgefunksjonen nettopp når energiuttrykket (35) gjelder.

- j) Finn gruppehastigheten v_g til en fri partikkel som beskrives av differensialligningen i i). Sammenlign mv_g med den relativistiske bevegelsesmengden p . Hvordan vil du tolke v_g her? [2 Poeng]

Svar: Gruppehastigheten v_g er gitt som den deriverte av vinkelfrekvensen ω med hensyn på bølgetallet k , $v_g = d\omega/dk$. Vi begynner med å skrive om uttrykket for energien ved hjelp av de Broglies relasjoner $E = \hbar\omega$ og $p = \hbar k$ for å finne vinkelfrekvensen:

$$\hbar\omega = E_0 + \frac{(\hbar k)^2}{2m} - \frac{(\hbar k)^4}{8m^3 c^2}. \tag{49}$$

Dette gir en gruppehastighet på

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} - \frac{(\hbar k)^3}{2m^3 c^2}. \tag{50}$$

Vi kan bytte tilbake til bevegelsesmengden igjen og får

$$v_g = \frac{p}{m} - \frac{p^3}{2m^3 c^2}. \tag{51}$$

Da kan vi skrive mv_g som

$$mv_g = p - \frac{p^3}{2m^2 c^2}. \tag{52}$$

Til sammenligning så kan relativistisk bevegelsesmengde $p = \gamma mv$, med $\gamma = (1 - v^2/c^2)^{-1/2}$, skrives som en rekkeutvikling i hastigheten v :

$$\begin{aligned}
p &= \gamma mv = mv \left(1 + \frac{v^2}{2c^2} + \dots \right) \\
&\simeq mv + \frac{mv^3}{2c^2} \\
&= mv + \frac{m^3 v^3}{2m^2 c^2},
\end{aligned} \tag{53}$$

hvor vi har sløyet ledd av formen v^4/c^4 og høyere potenser. Når vi sammenligner (52) og (53) så kan v_g fortsatt tolkes som hastigheten til partikkelen fordi forskjellen mellom $p^3/2m^2c^2$ og $m^3v^3/2m^2c^2$ vil være liten i grensen $p^2c^2 \ll m^2c^4$.

- k) Bruk differensialligningen (40) til å finne (numerisk) transmisjonssannsynligheten, som funksjon av energien, til en partikkel beskrevet av initialbetingelsen (1) som møter potensialet i (11). Hvilke energier er det rimelig å anta at denne beskrivelsen er god for? Sammenlign med transmisjonssannsynligheten fra deloppgave d) og g). [2 poeng]

Svar: Den nye differensialligningen har ledd med fjerdederiverte. For å implementere dette numerisk trenger vi sentraldifferansen for den fjerdederiverte, som er

$$\frac{d^4 f}{dx^4} \simeq \frac{f(x+2\Delta x) - 4f(x+\Delta x) + 6f(x) - 4f(x-\Delta x) + f(x-2\Delta x)}{\Delta x^4}. \quad (54)$$

Denne kan brukes direkte i Crank-Nicolsons metode, som er implementert i eksempelfilene til programmeringskompendiet, ved å definere en sparse matrise D_3 som utfører derivasjonen. Dette er gjort i `hjemmeeksamen4.py`. Merk at vi godt kan ignorere leddet med hvileenergi i denne simuleringen. Som vi var innom i Oblig 4 så kan et konstant bidrag til potensialet absorberes i en fasefaktor som avhenger av tiden.

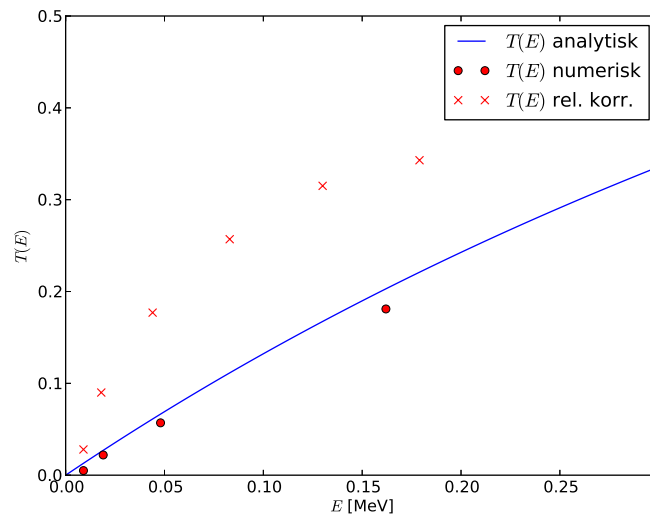
For å sammenligne energiene mellom de tre modellene så må vi egentlig finne forventningsverdien for energien i den relativistiske tilnærmingen. Litt integralregning viser at

$$\langle E \rangle = \frac{\hbar^2(l^2 + 1/4a^2)}{2m} - \frac{\hbar^4(l^4 + 3l^2/2a^2 + 3/16a^4)}{8m^3c^6}. \quad (55)$$

Vi har likevel ikke trukket poeng her for besvarelser som ikke tar hensyn til dette.

Fordi rekkeutviklingen for den relativistiske energien bare gir mening for $p^2c^2/m^2c^4 < 1$, og høyere ordens ledd blir ubetydelige når $pc/mc^2 \ll 1$, så må vi forvente at beskrivelsen bryter sammen når pc nærmer seg hvileenergien til elektronet som er 0.511 MeV. Siden forventningsverdien for bevegelsesmengden til bølgepakken var $\langle p \rangle = \hbar l$, så må vi anta at denne korreksjonen bare er god når $l \ll 2.5$.

Vi sammenligner resultatene fra denne simuleringen med tidligere deloppgaver i figur 4. Vi ser at den relativistiske beskrivelsen gir betydelig større transmisjonssannsynligheter opp mot $E \simeq 0.15$ MeV hvor $l \sim 2$, men her begynner modellen med den relativistiske korreksjonen uansett å bryte sammen.



Figur 4: Transmisjonssannsynlighet $T(E)$ som funksjon av energien E .

Dette resultatet er overraskende, all den tid relativistiske korreksjoner burde være små, med mindre man er svært nær lyshastigheten. Denne relativistiske effekten er kjent som Kleins paradoks etter den svenske fysikeren Oskar Klein.² Det er imidlertid vanskelig å lage et så sterkt og bratt potensiale som vi har brukt i denne oppgaven i virkeligheten, men Kleins paradoks har stor betydning i dagens forskning på egenskapene til grafen. Vi vil til slutt også påpeke at den korreksjonen vi har tatt med bare er en av flere man finner dersom man tar utgangspunkt i den relativistiske Dirac ligningen for kvantemekanikk.

²Se for eksempel http://en.wikipedia.org/wiki/Klein_paradox.