

Partikelrörelse i potentialfält

Mån Lr6

Partikel med massan m rör sig under inverkan av konservativt kraftfält $F(r)$. Detta kan beskrivas genom en potential $V(r)$:

$$F(r) = -\nabla V(r)$$

Tidsinvarians $\rightarrow$ bevarad storhet (energi)

$$E = \underbrace{\frac{p \cdot p}{2m}}_{\text{kinetisk}} + \underbrace{V(r)}_{\text{potentiell}}$$

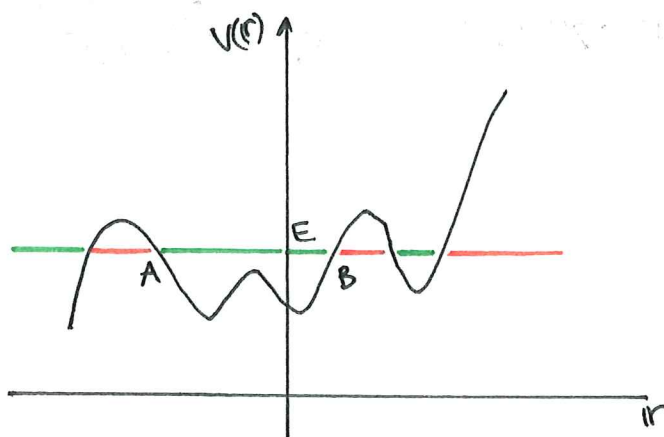
varje specifik lösning till rörelsekv.

$$\begin{cases} p = m \cdot \dot{r} \\ \dot{p} = -\nabla V(r) \end{cases}$$

karaktäriseras av sitt energivärde E .

Givet E så finns det områden i rummet där

$$\begin{cases} V(r) < E & \text{klassiskt tillåtet område} \\ V(r) > E & \text{klassiskt förbjudet} \end{cases}$$



— - tillåtet
— - förbjudet

part. rör sig fram och tillbaka mellan de klassiska vändlagarna i tex A och B

1 kvantfysiken:

Tillståndsrummet $\mathcal{H} = \{L^2\text{-funktioner } \psi \text{ av läget } \mathbf{r}\}$

Inre produkt $\langle \psi | \psi' \rangle = \int_{\text{rummet}} d^3\mathbf{r} \overline{\psi(\mathbf{r})} \psi'(\mathbf{r})$

Operatörer för läge och rörelsemängd:

$$\begin{cases} \hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r} & \text{multiplikation} \\ \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla & \text{derivering} \end{cases}$$

Hamilton operatören (god gissning)

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{p}} + V(\mathbf{r})$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r})$$

Laplace operatören $\nabla \cdot \nabla = \text{div} \cdot \text{grad}$

Tidsbero. Schrödingerekv. $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi$

$\rho(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 =$ sannlikhetstäthet för att finna partikeln.

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = -\frac{i\hbar}{2m} \cdot (\overline{\psi(\mathbf{r}, t)} \nabla \psi(\mathbf{r}, t) - \psi(\mathbf{r}, t) \nabla \overline{\psi(\mathbf{r}, t)})$$

reell
sannlikhets
-ström

Övning: Visa att SE $\Rightarrow$ kontinuitetsekv.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0$$

Hur löser man SE?

Dela upp tillståndet Ψ som en summa av egentillstånd till $\hat{H}$ med olika egenvärden E_n

tänkbara resultat vid en mätning av partikelenergi

Vi vill också lösa egenvärdesproblemet

$$\hat{H}\Psi_n = E_n\Psi_n$$

egentillstånd
med nummer n egenvärden

svår PDE även om vi har tur och känner till värdet på E !

Ibland möjligt med numeriska metoder....

Enklare problem: I en rumsdimension får vi en viss ODE:

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(r) \right] \Psi(r) = E \Psi(x)$$

Antag att energivärdet E är känt.

Ekv. är linjär i ψ

↳ Den har två linjärt oberoende lösningar

Hur ser två linjärt oberoende lösningar ut kvalitativt?

I klassiskt tillåtet område $V(x) < E$:

$$\psi_{\pm}(x) \sim \exp\left(\pm i \int^x dx' \sqrt{(E - V(x')) \frac{2m}{\hbar^2}}\right)$$

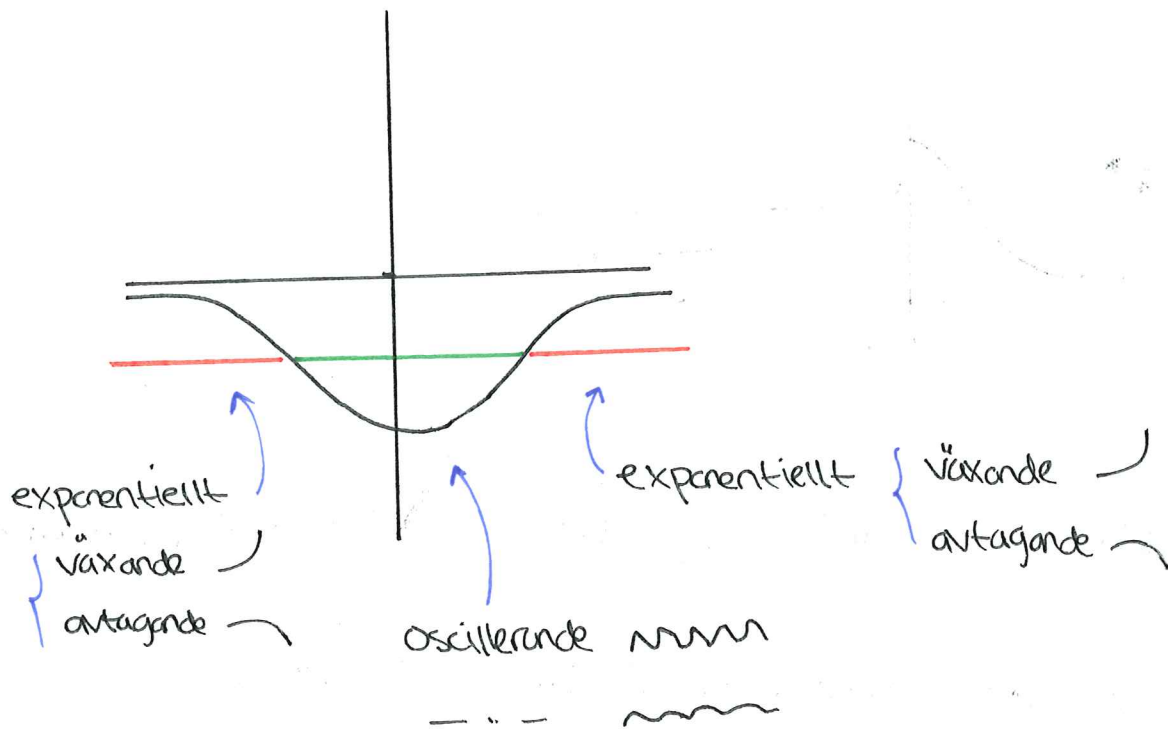
oscillerande
funktioner

I klassiskt förbjudet område $V(x) > E$

$$\psi_{\pm}(x) \sim \exp\left(\pm \int^x dx' \sqrt{(V(x') - E) \frac{2m}{\hbar^2}}\right)$$

exponentiellt
växande/avtagande
som fkn av läget.

Bundna tillstånd i en potentialamplitud.



För att
$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 < \infty$$

↳ så måste ψ vara exponentiellt avtagande åt vänster i det vänstra området.

↳ Denna lösning "övergår" i en viss linjärkombination av de två oscillerande lösningarna i mittenområdet.

↳ Denna lösning "övergår" i en viss linjärkombination av växande och avtagande lösning i det högra området.

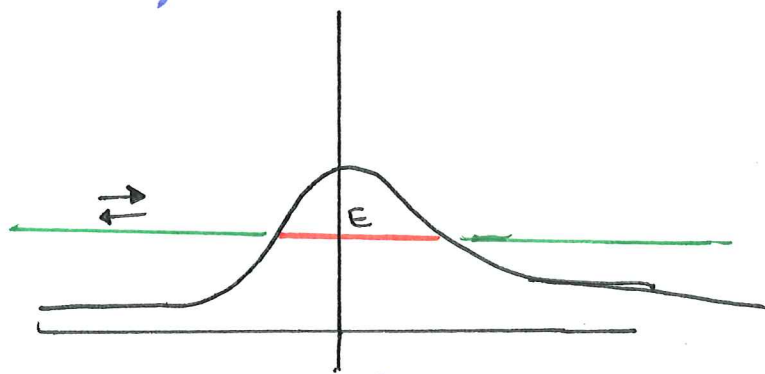
I allmänhet blir lösningen alltså ej normerbar (ej L^2).

Men för vissa speciella värden på E (som är de ~~korrekta~~ korrekta energivärdena) blir vågfunktionerna normerbara.

(endast exponentiellt avtagande fram till höger).

Spektrum av sådana E -värden är diskret!

Spridning mot potentialbarriär



$$\exp(\pm ikx)$$

$$\exp(\pm \kappa x)$$

$$\exp(\pm ikx)$$

{ visst värde på k och κ }

↳ Välj den rent högergående lösningen till höger

↳ Denna lösning är linjärkomb. av växande och avtagande i mitten

↳ Denna lösning är linjärkomb. av vänstergående och högergående i vänstra området.

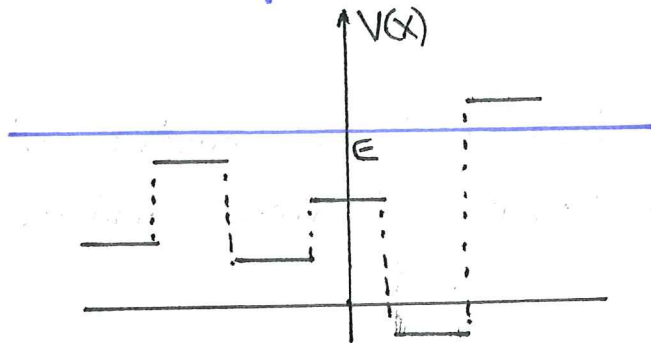
Fysikalisk tolkning: en ström av partiklar sänds in från vänster. En del reflekteras tillbaka åt vänster. En del tunnlar igenom barriären och transmittteras åt höger.

{ Obs! ψ är inte L^2
skicka hellre in ett L^2
vågpaket med en viss
spridning ΔE i energi }

Sannolikhet för transmission:

$$P_T \sim \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int \underbrace{dx \sqrt{2m(V(x)-E)}}_{\text{förbjudet område}}\right)$$

Styckvis konst. potentialer



Om $V > E$ är konst. i ett område så är de linjärt oberoende lösningarna

$$\Psi_{\pm}(x) = \exp\left(\pm \frac{1}{\hbar} \kappa x\right) \quad \text{med} \quad \kappa = \sqrt{2m(V-E)}$$

om $V < E$ får vi istället

$$\Psi_{\pm}(x) = \exp\left(\pm \frac{i}{\hbar} p x\right) \quad \text{med} \quad p = \sqrt{2m(E-V)}$$

Kolla själv att dessa lösn.
löser SE i resp. område!

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{klassisk r.m. i detta område} \\ \frac{p^2}{2m} + V = E \quad \text{tot. energi} \end{array} \right\}$$

Nu gäller det att lösa SE för alla $-\infty < x < \infty$

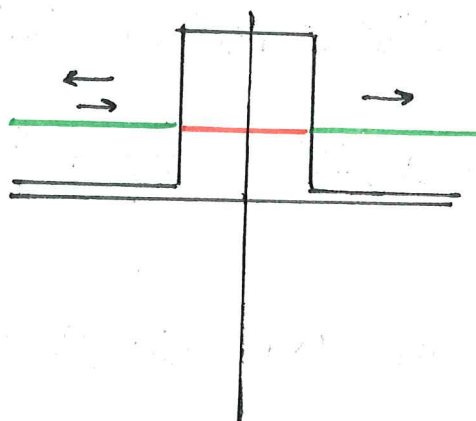
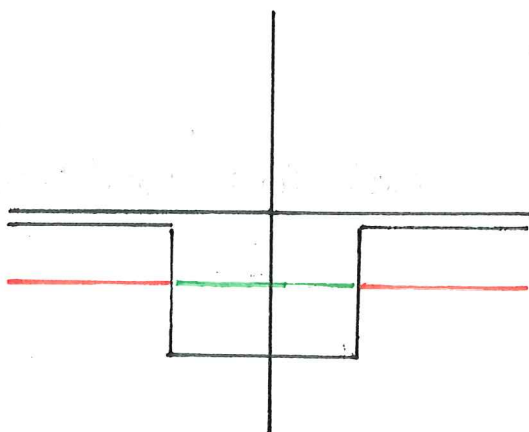
skarva ihop linjärkombinationer av lösn. även så att

→ $\psi(x)$ är kontinuerlig i varje skarv.

→ $\frac{\partial \psi(x)}{\partial x}$ — " —

Givet en viss linjärkombination i ett område så bestämmer dessa vilket lösningen i nästa område.

Potentialer



Välj E s.a. lösningen
blir normaliserbar både till
vänster och höger

Finn konkreta uttryck
för reflektion och
transmissions sannolikheterna