

TFYA35 Molekylfysik
Föreläsning 2 – Bilder

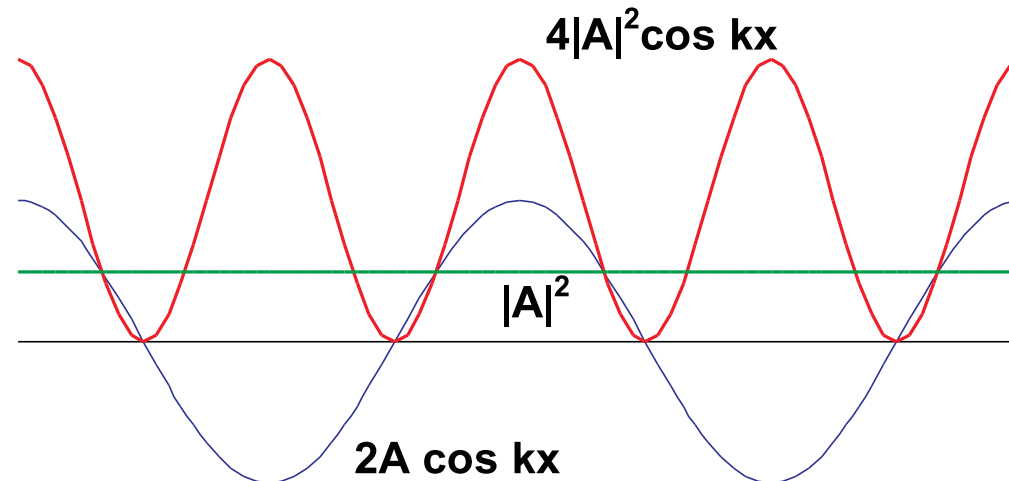
Thomas Ederth
Linköpings universitet
IFM

Lösningar till SE för en fri partikel

För en fri partikel ($V(x) = 0$) på x -axeln är SE:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = E\psi$$

Den allmänna lösningen $\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$, $E = \frac{k^2 \hbar^2}{2m}$ beskriver två plana vågor, med vågvektorer $+k$ respektive $-k$.



Bestäm rörelsemängden för partikeln för olika fall!

Egenvärden till \hat{p}_x för $B = 0$ (analogt för $A = 0$):

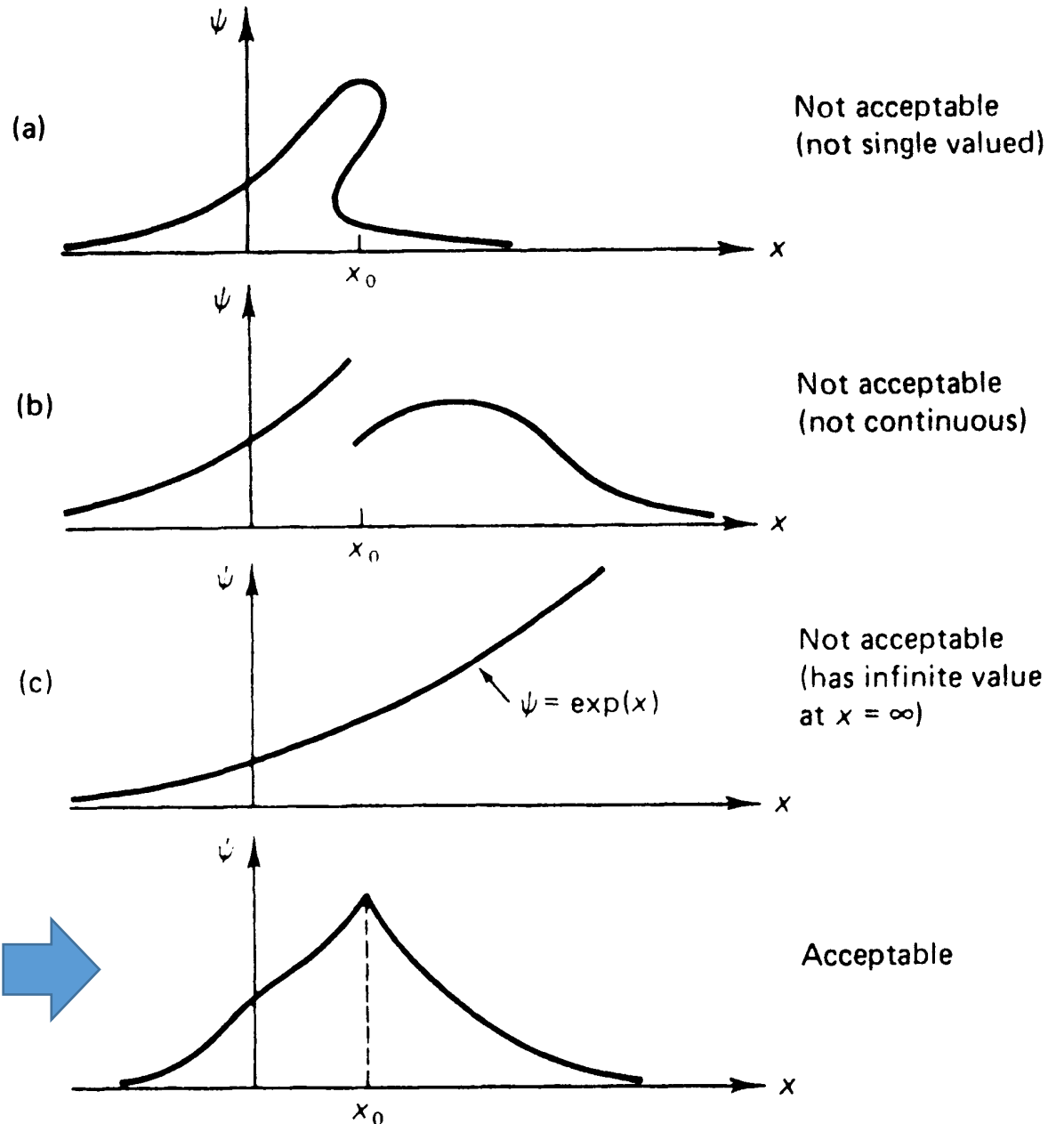
$$\hat{p}_x \psi_A = -i\hbar \frac{d}{dx} A e^{ikx} = -i\hbar (ik) A e^{ikx} = \hbar k \psi_A$$

Egenvärde till fallet $A = B$ saknas:

$$\hat{p}_x \psi_{AA} = -i\hbar \frac{d}{dx} 2A \cos kx = i\hbar k 2A \sin kx \neq \text{Konstant} \cdot \psi_{AA}$$

	ψ	$ \psi ^2$	Egenvärde till \hat{p}_x
$B = 0$	$A e^{ikx}$	$ A ^2$	$\hbar k$
$A = 0$	$B e^{-ikx}$	$ B ^2$	$-\hbar k$
$A = B$	$2A \cos kx$	$4 A ^2 \cos^2 kx$???

Oacceptabla vågfunktioner



Acceptabel på så sätt att den är envärd, kontinuerlig och ändlig (alltså normerbar), men ψ' är inte kontinuerlig, så SE är inte enkelt lösbar (måste lösas separat på olika intervall).



Krökning och kinetisk energi

$$\text{SE: } -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi + V(x)\psi = E\psi$$

