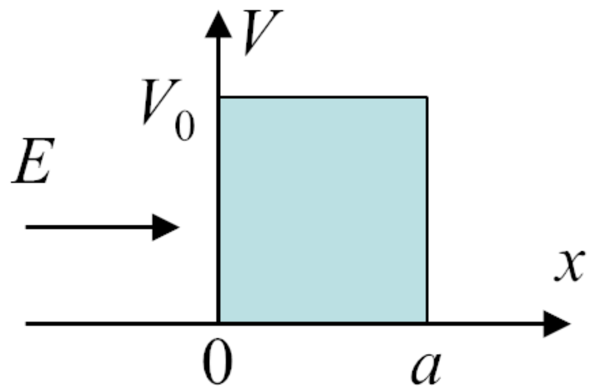
TFYA35 Molekylfysik
Föreläsning 4

Thomas Ederth
Linköpings universitet
IFM

4-1 Tunnling

Låt en våg med energi E möta en potentialbarriär från vänster:



$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & 0 < x < a \\ 0 & x > a \end{cases}$$

Klassiskt gäller:
$E < V_0$: Reflektion
$E > V_0$: Transmission

Där $V = 0$ är partikeln fri, och lösningarna ges av

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & x < 0 \\ A'e^{ikx} + B'e^{-ikx} & x > a \end{cases}$$

På båda sidor om barriären är

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Mellan $0 < x < a$, för $E < V_0$ gäller

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0\psi = E\psi \Rightarrow$$

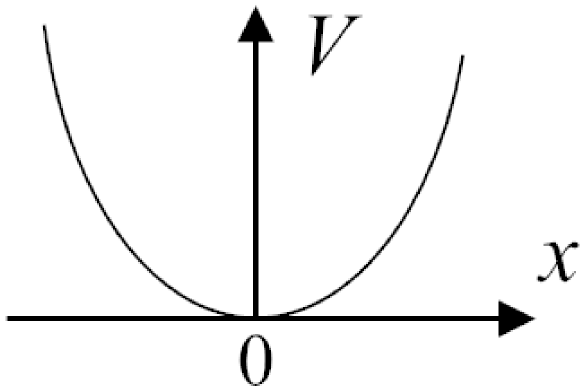
$$\Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} - K^2\psi = 0, \; K = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}$$

Allmän lösning: $\psi = Ce^{Kx} + De^{-Kx}$.
(OBS! exponenterna $\pm Kx$ är reella!)
$C = 0$ eftersom $\psi < \infty$ om $a \to \infty \;\Rightarrow$

$\psi(x) = De^{-Kx}$ inuti barriären.

4-2 Harmonisk svängning

Betrakta en partikel i en harmonisk potential:



$$V(x) = k\frac{x^2}{2} \quad ; \quad F = -\frac{dV}{dx} = -kx$$

$$\text{SE}: \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{kx^2}{2}\psi = E\psi$$

$$\text{Randvillkor}: \quad \psi \to 0 \text{ om } x \to \pm\infty$$

Lösningar:

$$\psi_\nu(x) = N_\nu \, e^{-y^2/2} \, H_\nu(y), \qquad E_\nu = \left(\nu + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \qquad \nu = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

$$y = x/\alpha$$

$$\alpha = \left(\frac{\hbar^2}{mk}\right)^{1/4}$$

$$N_\nu = \sqrt{\frac{1}{\alpha\sqrt{\pi}\, 2^\nu \, \nu!}}$$

$$H_0 = 1$$
$$H_1 = 2y$$
$$\vdots$$
$$yH_\nu = \nu H_{\nu-1} + \tfrac{1}{2}H_{\nu+1}$$

4-3 Bohrs korrespondensprincip

Bohrs korrespondensprincip: Ett kvantmekaniskt sytems egenskaper närmar sig klassiskt beteende vid höga kvanttal.

Konkret innebär detta t.ex. att sannolikhetstätheter vid höga kvanttal måste närma sig de klassiskt förväntade sannolikhetsfördelningarna.