Frjálseind

Höfum fundið bylgjufallið

$$\Psi_k(x,t) = A\exp\left\{i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)\right\}$$

$$k \in \mathbb{R}$$

bylgjufallið er ekki staðlanlegt

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \Psi_k^* \Psi_k = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx = |A|^2 \cdot \infty$$

Ástöndin sem lýst er með Ψ_k virðast ekki vera eðlisfræðileg, en þau má nota sem fallagrunn

Liðum þau saman til þess að finna bylgjupakka

Eru þá til frjálsástönd með fasta orku?

bylgjupakki: $$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk\, \phi(k)\, \exp\left[i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t\right)\right]$$

stuðull tekinn út fyrir heildi til þæginda

samfelld ástönd Ψ_k því er heildað yfir k í stað þess að summa yfir strjálar skammtatölur

Í stað liðunarstuðla kemur liðunarfall
Bylgjupakkinn er settur saman úr bylgjum með mismunandi hraða og skriðþunga

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk\, \phi(k)\, \Psi_k(x,t)$$

Ef við þekkjum bylgjupakkann í upphafi

$$\Psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk\, \phi(k)\, e^{ikx}$$

þá getum við ákvarðað $\phi(k)$ og þess vegna $\Psi(x,t)$ með notkun á Fourier greiningu

$$\boxed{f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk\, F(k)\, e^{ikx} \quad \Longleftrightarrow \quad F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, f(x)\, e^{-ikx}}$$

Andhverf fourier ummyndun Fourier ummyndun

$$\boxed{\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \Psi(x,0)\, e^{-ikx}}$$

Hraði frjálsrar eindar

tvístursambandið
$\omega(k)$ skiptir ekki máli, en er
$$\hbar\omega(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$
fyrir frjálsa eind

Athugum bylgjupakka

$$\Phi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk\, \phi(k)\, e^{i(kx-\omega t)}$$

Við veljum þröngan pakka (auðvitað alls konar pakkar til)

$\phi(k) \simeq 0$, nema þegar $k \simeq k_0$ (þannig pakki tvístrast hægar því þættir hans hafa svipaðan hraða)

$$\omega(k) \simeq \omega_0 + d_k\omega(k)\Big|_{k=k_0} \cdot (k-k_0) \quad , \quad \omega_0 = \omega(k_0)$$

$$= \omega_0 + \omega_0'(k-k_0)$$

Skiptum um breytu $k - k_0 \to s$

$$\Psi(x,t) \simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} ds\; \phi(k_0+s) \exp\left[i\left((k_0+s)x - (\omega_0 + \omega_0' s)t\right)\right]$$

og þ. $t = 0$

$$\Psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} ds\; \phi(k_0+s)\, e^{i(k_0+s)x}$$

og síðar

$$\Psi(x,t) \simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(-\omega_0 t + k_0 \omega_0' t)} \int_{-\infty}^{\infty} ds\; \phi(k_0+s)\, e^{i(k_0+s)(x-\omega_0' t)}$$

$$\simeq e^{-i(\omega_0 - k_0\omega_0')t}\, \Psi(x - \underbrace{\omega_0' t}, 0)$$

pakki sem ferðast um með ω_0'

$v_{group}(k_0) = \left.\frac{d\omega}{dk}\right|_{k=k_0}$ samanborið við $v_{phase} = \frac{\omega}{k}$

grúpuhraði fasahraði

Frjálseind $\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$ $\rightarrow$ $v_{phase} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m}$

en $\frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m}$

$\rightarrow$ $v_{classical} = v_{group} = 2\, v_{phase}$

Dirac-delta-brunnur

Könnum eiginleika brunns lýst með Dirac delta fallinu

$$V(x) = -\alpha\,\delta(x)$$

dreifing (distribution)

$$\delta(x) = \begin{cases} 0 & \text{ef } x \neq 0 \\ \infty & \text{ef } x = 0 \end{cases}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\,\delta(x) = 1$$

Hleðsludreifing punkteindar er lýst með $\delta(x)$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, f(x)\,\delta(x-a) = f(a)$$

eins munum við sjá að

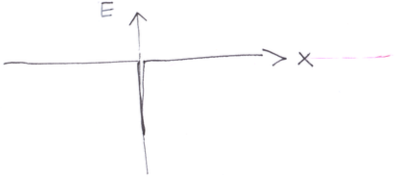
$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{ikx}$$

Fourier ummyndun af $\delta(x)$ er fastinn $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ í k-rúminu

til þess að búa til nákvæma staðsetningu í x-rúminu þarf alla bylgjuvigra k eða skriðþunga tík í skriðþunga rúminu

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

delta brunnur



$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \delta(x) = 1$$

því er víddin á δ

$$[\delta] = \frac{1}{L}$$

$\alpha\delta(x)$ hefur vídd orka

$\rightarrow$ α hefur vídd orka$\cdot L$

$$[\alpha] = \frac{ML^2}{T^2}\cdot L = \frac{ML^3}{T^2}$$

Leysum

$$H\psi = E\psi$$

eða

$$-\frac{\hbar^2}{2m} d_x^2\psi - \alpha\delta(x)\psi = E\psi$$

Fyrsta dæmið sem við stöðum þar sem búast má við samfelldu rófi dreifiástanda (scattering) og mögulega einhverjum bundnum ástöndum með strjála orku

væntanlega með $E<0$

með $E>0$

Athugum fyrst hvort til sé bundið ástand með $E<0$

$x<0$ I

$$d_x^2\psi = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = K^2\psi$$

með $K = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$

$$K\in\mathbb{R},\ K>0$$

$$\psi(x) = Ae^{-Kx} + Be^{Kx}$$

$A=0$ því annars fæst

$$\psi(x) \xrightarrow[x\to-\infty]{} \infty$$

$$\psi(x) = Be^{Kx} \quad \text{I}$$

Athugum II þ. $x>0$

$$\psi(x) = Fe^{-Kx} + Ge^{Kx}$$

nú þarf $G=0$

$$\to \psi(x) = Fe^{-Kx} \quad \text{II}$$

þessar lausnir verður að sníða saman, skeyta saman, í $x=0$

En þar þurfum við að passa sérstaklega upp á δ-fallið

Ef mættið er hjálft ~~eða~~ hefur endanleg stökk ~~eða~~ brot kvefpunkt við venjulega að

ψ og $d_x\psi$

séu samfelld

Við höfum enn ekki tekið tillit til δ-fallsins hér

Athugum

Heildum jöfnu Schrödingers frá $-\epsilon$ upp í ϵ

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx\, d_x^2\psi(x) + \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx\, V(x)\psi(x)$$

$$= \underbrace{E\int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx\, \psi(x)}$$

$\psi(x)$ er samfellt og flatarmálið $\to 0$ þegar $\epsilon \to 0$

$\downarrow$

$$\lim_{\epsilon\to 0}\left[d_x\psi(x)\Big|_{+\epsilon} - d_x\psi\Big|_{-\epsilon}\right] = \frac{2m}{\hbar^2}\lim_{\epsilon\to 0}\int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx\, V(x)\psi(x)$$

$$\underbrace{\psi'(+\epsilon) - \psi'(-\epsilon)}_{} = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\lim_{\epsilon \to 0}\int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx\, \delta(x)\psi(x) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi(0)$$

δ-mættið veldur broti í afleiðunni

$$\psi'(+\epsilon) = -FKe^{-K\epsilon} \to -FK$$

$$\psi'(-\epsilon) = BKe^{-K\epsilon} \to BK$$

ψ er samfellt í $x = 0$

$\to B = F$

$$\to -BK - BK = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} B$$

$$\to \quad 2K = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \quad \to K = \frac{m\alpha}{\hbar^2}$$

$K = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$ $\qquad$ $K = \frac{m\alpha}{\hbar^2}$

$\longrightarrow E = -\frac{\hbar^2 K^2}{2m} = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$ $\qquad$ Eitt bundið ástand

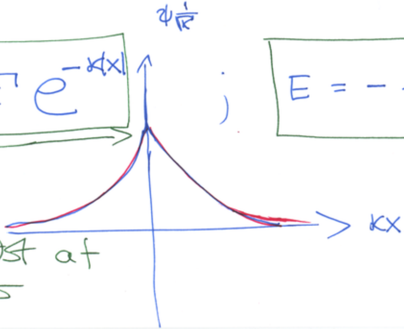
Stöðlum bylgjufallið

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, |\psi(x)|^2 = 2|B|^2 \int_0^{\infty} e^{-2Kx}\, dx = \frac{|B|^2}{K} = 1$$

$B = \sqrt{K}$

náttúrulegur lengdarskali K^{-1}

$$\boxed{\psi(x) = \sqrt{K}\, e^{-K|x|}} \; ; \quad \boxed{E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}} \; , \quad K = \frac{m\alpha}{\hbar^2}$$



stærð brotsins ákvarðast af styrk δ-mættisins