

Kvantfysikens principer

24/11
& 4/12

- Schrödingerekvationen, (SE) och lägesberoende
- Från ammoniakmolekylens $|1\rangle, |2\rangle$ till $|x\rangle$

Ditacformation som dykt upp förut:

eftersom $\langle i|\psi\rangle$ är ett (komplex) tal kan vi flytta det framför eller bakom $|i\rangle$

utveckling av $|\psi\rangle$ i bas tillstånd $|i\rangle$:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_i c_i |i\rangle = \sum_i \langle i|\psi\rangle |i\rangle \\ &= \sum_i |i\rangle \langle i|\psi\rangle \end{aligned}$$

amplitud att $|\psi\rangle$ övergår i $|i\rangle$

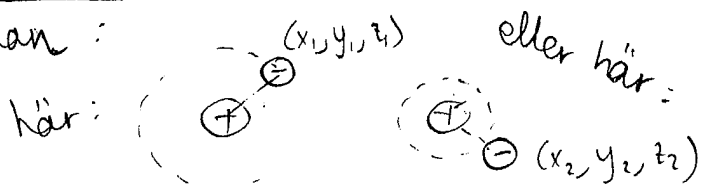
amplituden att $|\psi\rangle$ övergår i $|\phi\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle \phi|\psi\rangle &= \langle \phi| \left(\sum_i |i\rangle \langle i|\psi\rangle \right) \\ &= \sum_i \langle \phi|i\rangle \langle i|\psi\rangle \quad (*) \end{aligned}$$

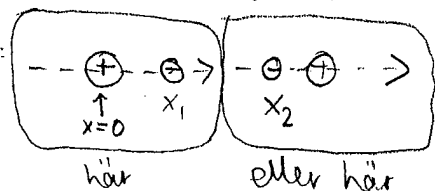
används på nästa sida

Förut: två bas tillstånd $|1\rangle$ och $|2\rangle$
ett tidsberoende tillstånd $|\psi(t)\rangle$
som växlar mellan $|1\rangle$ och $|2\rangle$
(eller $|I\rangle$ och $|II\rangle$)

Nu: väteatomen! Elektronen kan vara på
många olika platser i rummet relativt
atomkärnan:



förenkling: 1 koordinat x:



①

$\overset{\text{elektronen}}{\downarrow}$ $\overset{\text{elektronens l ge}}{\downarrow}$
 amplituden att $|\psi\rangle$ skall vara i just ett visst x :
 (t.ex. $x = 1 \text{ nm}$) v rt $\langle i|\psi\rangle$ blir $\langle x|\psi\rangle$

Men det finns o ndligt m nga x ! (0,1 nm, 0,12 nm, ...)

Inga problem: en regel som associerar ett tal till ett annat tal f r o ndligt m nga tal  r ... en funktion!

V GSTUNKTIONEN: $\boxed{\psi(x) = \langle x|\psi\rangle}$ ( lla x)

(*) (f rra sidan) blir en integral:

$$\begin{aligned}
 \langle \phi|\psi\rangle &= \int_{\text{ lla } x} dx \langle \phi|x\rangle \langle x|\psi\rangle \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \phi^*(x) \psi(x)
 \end{aligned}$$

i symmetri borde vi ha

$$\begin{aligned}
 \langle \psi|\psi\rangle &= 1, \text{ dvs. } \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x) \psi(x) = 1 \\
 &\Rightarrow \underline{\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 = 1}
 \end{aligned}$$

Det h r betyder bara att sannlikhetsf theten (sannolikhet per nanometer)  r normerad s  att sannolikheten att elektronen skall vara n gonstans  r 100%. Verkar ju bra.

$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 = 1$ kallas "normeringsvillkor"

Nu S.E. !

Feynman: lång derivering — läs men behåller inte förstå detaljerna

Formelavledningen:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x) \psi$$

"ansatz"

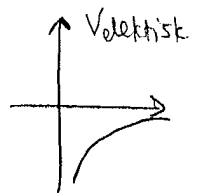
$$\psi(x, t) = \phi(x) e^{-i \frac{Et}{\hbar}}$$

$$\boxed{\frac{d^2 \phi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E) \phi(x)}$$

Tidsoberoende
SE

Förenklingar: (så vi kan lösa ekvationen för hand och inte bara med dator)

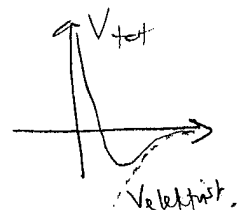
egentligen: $V_{el} = -\frac{k \cdot e^2}{r}$ i 3 dimensioner (kap. 19)
 elektrisk potential



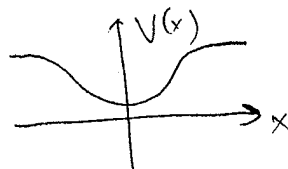
Enhets-notis:
 $V = -k \frac{e^2}{r}$ i SI-
 enheter. Eftersom
 $1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$, $e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$,
 får man V i eV om
 man knappar in
 $V_{eV} = -k \cdot \frac{e}{r}$ på
 miniräknaren.

+ "L-repulsion"

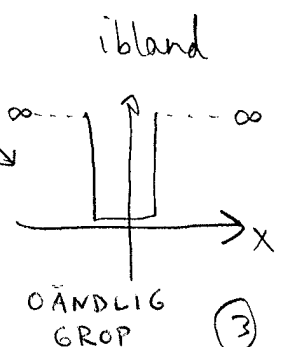
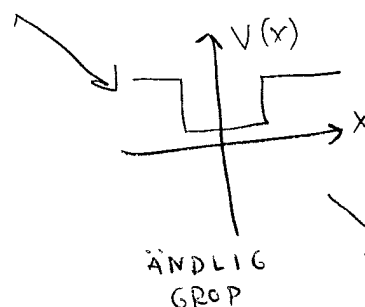
(måste öka rotation
 för att komma närmare
 om L konstant) 19-11



i 1 dim:
 approximera
 med



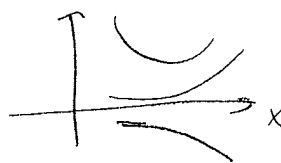
"potentialgröp"



a)

om $V(x_0) > E$:

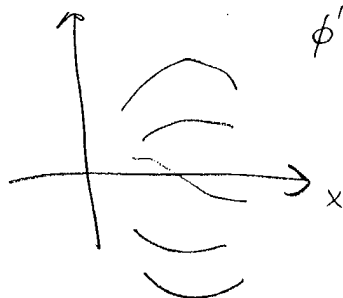
S. E. säger att $\phi''(x)$ positiv om ϕ är det



böjs "bort från x-axeln"

b)

om $V(x_0) < E$:

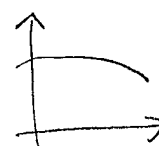


$\phi''(x)$ negativ om ϕ är positiv
"böjs mot axeln"

Kan hög : andraderivatan $f''(x)$ av en funktion $f(x)$ är "krökningen"



noll krökning



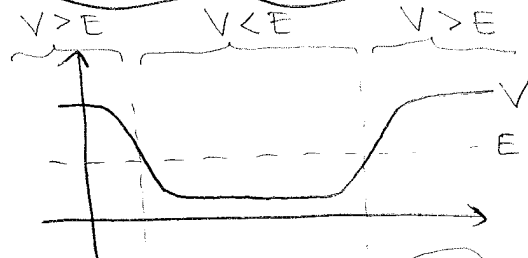
negativ krökning



positiv krökning

Exempel på grafisk konstruktion av lösning till tidsberoende S.E. :

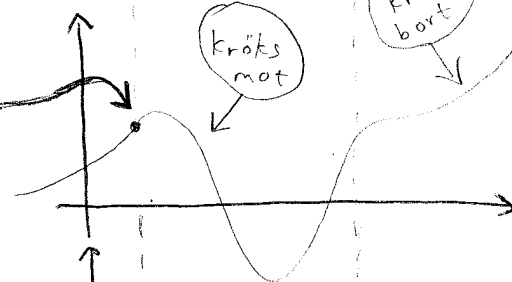
givet :



inte bitvis konstant!
("realistisk", inte förenklad)

försök 1

börja här, t.ex. skissa åt vänster och åt höger



försök 2



ej normaliserbar!
Prova lite annan derivata i "börja-hör"-punkten.

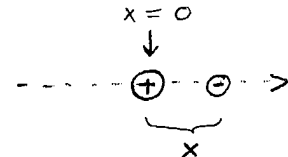
Ne fungerade det :

$$\phi(-\infty) = 0$$

$$\phi(+\infty) = 0$$

(4)

Kvantfysikens principer

Förra gången: vågfunktionen för e^- 

$$\psi(x,t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \phi(x)$$

där $\phi(x)$ uppfyller tidsberoende Schrödingerekv. (S.E)

$$\phi''(x) = \frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E) \phi(x)$$

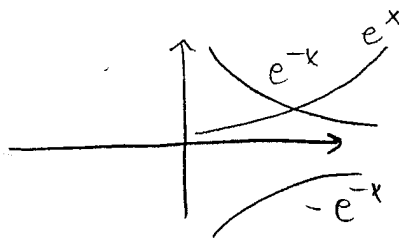
Hur löser man en sådan här differentialekvation?
Antag en viss form av lösning och
bestäm konstanter genom att steppa in
antagandet i ekvationen.

antag
konstant
i ngt intervall

T.ex.: vilken funktion uppfyller $f''(x) = a f(x)$
för någon konstant a ? Antag $a > 0$.

Ja, $f(x) = e^{kx}$ där $k^2 = a$.

$$(f'(x) = k e^{kx}, f''(x) = k^2 e^{kx} = a f(x))$$

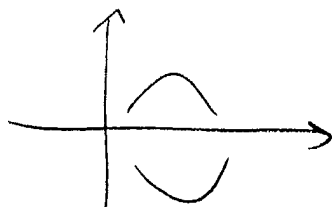


krökning bort
från x-axeln

eller $f''(x) = -a f(x)$

vilket uppfylls av t.ex. $f(x) = \sin kx$

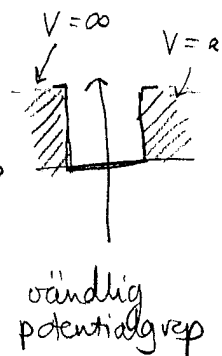
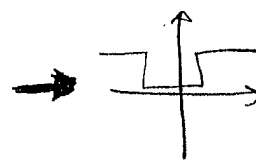
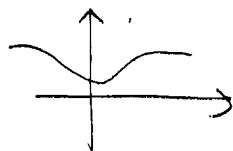
$$(f'(x) = k \cos kx, f''(x) = -k^2 \sin kx)$$



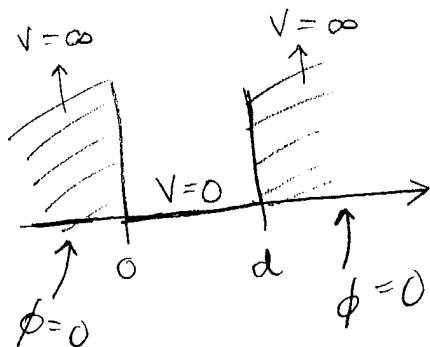
krökning mot
x-axeln

thorin förenkling:

Typisk potential $V(x)$



Oändlig potentialgräp



i $x < 0, x > d$ ("i väggen")
måste vågfunktionen
vara exakt noll: $\phi = 0$.
(om man vill vara noggranna, sätt e^{-Kx}
och ta $K \rightarrow \infty$)

i x mellan 0 och d : allmän lösning
 $\phi(x) = a \sin kx + b \cos kx$ (*)

Stappa in i ekv. (uppg. 16-P3)

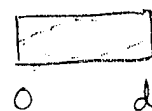
$$\Rightarrow k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (\text{för här är } V=0)$$

"Randvillkor" $\begin{cases} \phi(0) = 0 \\ \phi(d) = 0 \end{cases}$

jfr. gitarrsträng



orgelpipa



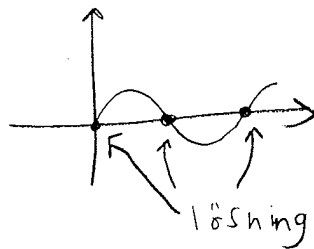
Stappa in: (*) $\begin{cases} a \cdot 0 + b \cdot 1 = 0 \\ a \sin kd + b \cos kd = 0 \end{cases}$

$$\Rightarrow \begin{cases} b = 0 \\ a \sin kd = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} b = 0 \\ \sin kd = 0 \end{cases}$$

↑
om $a = 0$ också
så är $\phi = 0$ överallt
- ointressant

Lös $\sin kd = 0$

$$\boxed{kd = n\pi}$$



där $n = 1, 2, 3, \dots$ (notera fysikaliskt $k > 0, d > 0$)

men $E = \frac{1}{2}mv^2 + V \underset{V=0}{=} \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}m\left(\frac{p}{m}\right)^2 = \frac{p^2}{2m}$

och $p = \hbar k$, så $E = \frac{(\hbar k)^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

och $kd = n\pi \Rightarrow k = \frac{n\pi}{d}$

därför har vi till sist $E = \frac{\hbar^2 \left(\frac{n\pi}{d}\right)^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2md}$

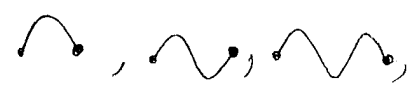
Lösning: $\phi = a \sin kx$ där $k = \frac{n\pi}{d} = \frac{\pi}{d}, \frac{2\pi}{d}, \frac{3\pi}{d}, \dots$

Energi: $E = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2md}$ (jfr. $|I\rangle, |II\rangle, |III\rangle$: bestämd energi)

Vi ser att det kvantiserade vågtalet $k = \frac{n\pi}{d}$ resulterar i kvantiserade energier.

Man brukar beteckna dem med index n :

$$k_n = \frac{n\pi}{d}, \quad \phi_n = a_n \sin k_n x, \quad E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2md}$$

se bilder i kompendiet: ,
(uppg. 16-P3)

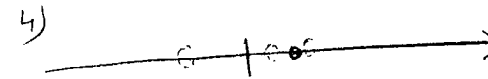
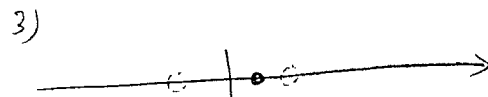
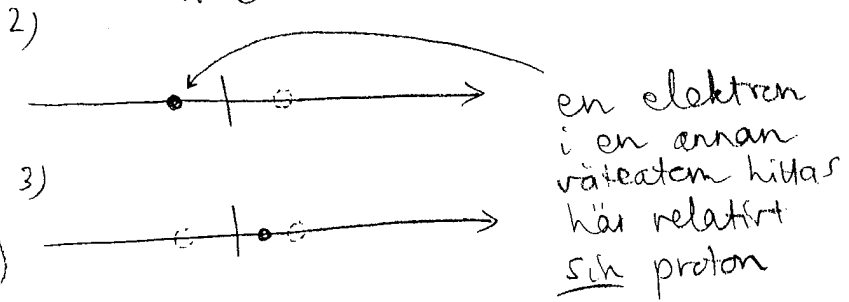
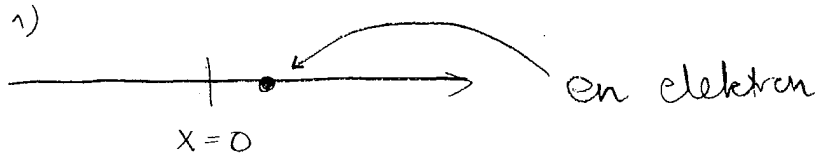
Normeringsvillkor $\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 = 1$ (jfr. förra gången)

bestämmer konstanten a_n

$P = |\psi(x)|^2$ ger sannolikhetstätheten att hitta elektronen i läge x .

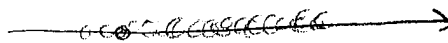
Varje enskild mätning ger ett visst läge x (i praktiken: ett visst intervall)

Mätning:



osv

⋮



gör graf:
(histogram)



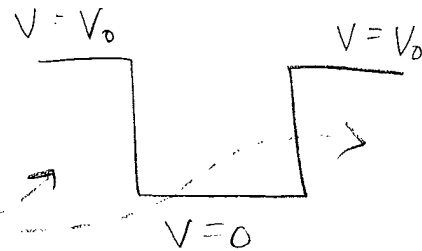
Precis som i dubbelspaltexperimentet är det den här grafen vi skall jämföra med det vi räknade ut för sannolikhetstätheten P .

De riktiga vågfunktionerna i riktiga väteatomen är mer komplicerade.

För det första är "väggarna" som håller fast elektronen inte oändliga.

Kvanttunneling

Ändlig potential-grop:



ej oändlig nu

fortfarande antar vi
bitvis konstant, inte

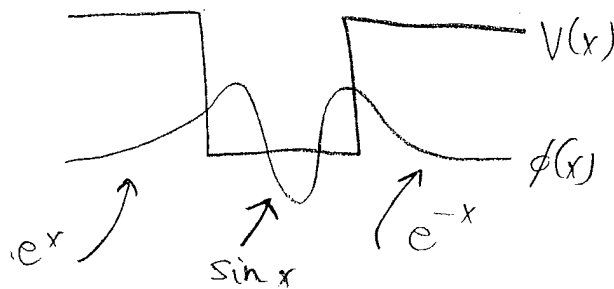


"i väggen" $E < V_0$

$$\psi(x) = a e^{kx} + b e^{-kx}$$

(jfr. formel-
samlingen
s. 72 i Komp.)

Pussla ihop:



jfr. grafisk lösning
några sidor tillbaka.
Här är det exakt, men
gäller bara för bitvis
konstant $V(x)$. Grafisk
gäller för
alla $V(x)$.

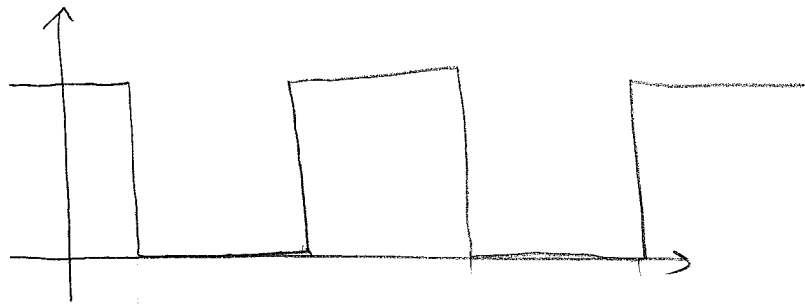
Det finns sannolikhet $P = |\psi(x)|^2$ att
träffa på elektronen inne i väggen!

Speciellt intressant om det finns en
till grop (jfr. Java-länk)

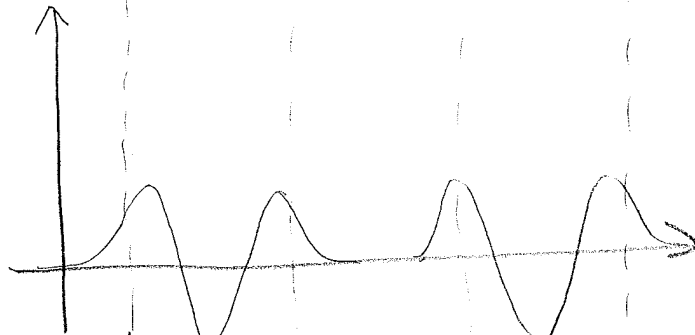
Man kan bilda superpositioner av vågfunktionerna som har egenskaper mer i stil med $|1\rangle$ och $|2\rangle$ än $|I\rangle$ och $|II\rangle$.

Om vi har två gropar finns t.ex. följande lösningar:

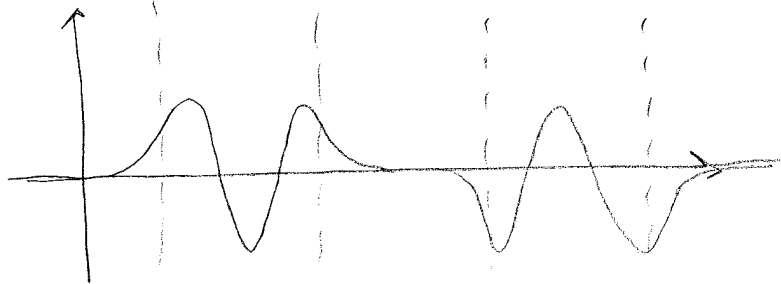
ÖVNING:
konstruera själv
grafisk lösning
för ψ_5, ψ_6 .



stationär
(P tidsberoende)



ψ_5



ψ_6

— II —

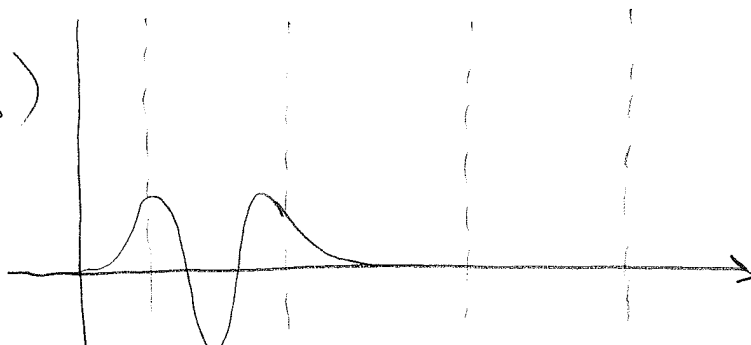
lika här

upp och ner här

lägg ihop:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_5 + \psi_6)$$

↑
normering



elektronen är mest
i grop 1.

kan "släcka ut"
vågfunktionen
i grop 2!

Delta "är som
 $|1\rangle$ i NH_3 .