

Kvantfysikens principer, II

I dag: Schrödingerekvationen! (1926)

Först: Bindning (kap. 10)

Feynman ger allmänna formuler
för energierna E_I, E_{II} , (användbara för asymmetrisk
diatom-molekyl)
kommer från lösningen av $p(\lambda) = 0$

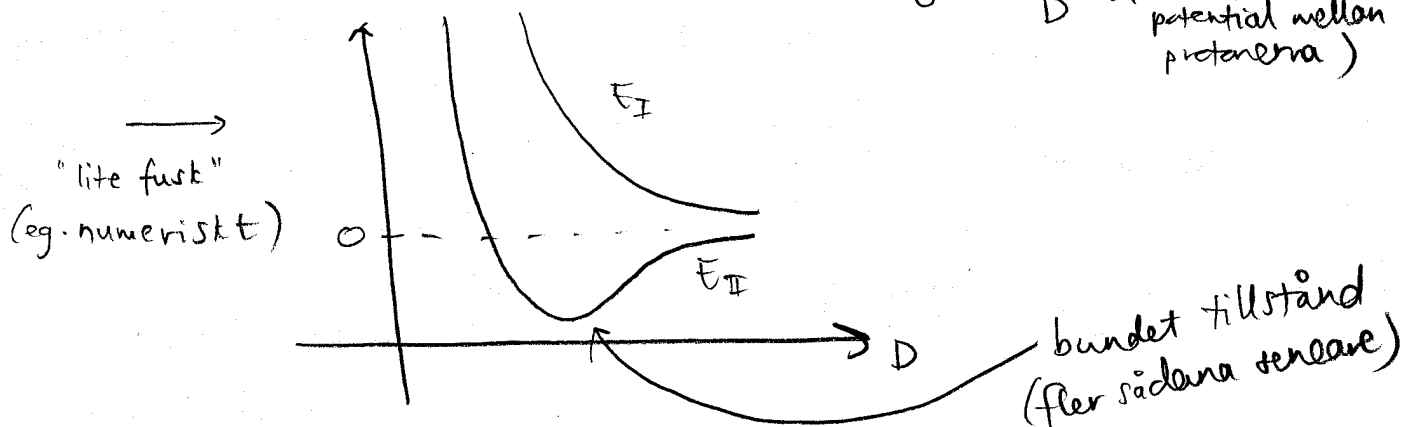
För H_2^+ : gamla vanliga $E_{\pm} = E_0 \pm A$,
 $E_{\pm} = E_0 - A$ för tillstånden $|I\rangle, |II\rangle$

Ta med att E_0, A beror på avståndet, och
studera $|I\rangle$ och $|II\rangle$ i H_2^+ : $|I\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |2\rangle)$



Vet från tidigare: inte stationära tillstånd. $\begin{pmatrix} +A \\ -A \end{pmatrix}$
Men nu ta med avståndet: $A \sim e^{-D} \rightarrow$

$E_0 \sim \frac{1}{D} \rightarrow$ (elektrostatisk
potential mellan
protonerna)



"en-elektron-bindning" i kemi

Kvantkemi!

Läs exemplet om asymmetriska
diatom-molekyler jämv: s. 10-4 till 10-5

Poäng: om $(H_{11} - H_{22}) > A^2$, utveckla formelerna $E_{\pm}$

$\Rightarrow E_{+} - E_{-}$ liten $\Rightarrow$ svag bindning

Rumsberoende tillstånd

Har sett $C_1(t) = \langle 1 | \psi(t) \rangle$

amplituden att $|\psi(t)\rangle$ skall vara i tillstånd $|1\rangle$.

Men om vi har $|x\rangle$ istället för $|1\rangle$?

x kan vara 1,1 eller 1,2 eller 1,3 (eller mitt emellan)

$\Rightarrow \infty$ antal $C_{1,1}(t)$, $C_{1,2}(t)$, $C_{1,3}(t)$...

Men det är så vi bygger upp en funktion;

ett ∞ antal värden för ett ∞ antal punkter

För enkelhets skull, vänta med tidsberoendet
(betrakta $t=0$: $|\psi(0)\rangle = |\psi\rangle$)

Funktion $C(x) = \langle x | \psi \rangle$ för alla tillstånd $|\psi\rangle$

Vanligare: $\psi(x) = \langle x | \psi \rangle$ Ex: $\psi(x) \propto e^{ikx}$
 $= e^{i\frac{p}{\hbar}x}$



Varning: helt olika saker

$\psi(x)$ vanlig (komplex) funktion

$|\psi\rangle$ abstrakt tillstånd

$\psi(x)$ = vågfunktionen (komplex!)

$$P(x) = ? \quad |y(x)|^2 \quad ?$$

Samma problem som i spridningsexp.: $P(x)=0$ för något exakt ("oändligt tunt") x .

$$\text{Lösning: } P(x, \Delta x) = |y(x)|^2 \Delta x$$

$$\text{Tidigare: } \langle f | y \rangle = \sum_{\text{alla } x} \langle f | x \rangle \overset{\substack{\uparrow \\ \text{densitet!}}}{\langle x | y \rangle}$$

$$\text{Nu: } \langle f | y \rangle = \int \langle f | x \rangle \langle x | y \rangle dx$$

$$= \int f^*(x) y(x) dx$$

$\uparrow$ jfr D_i^* kontra C_i

Osäkerhetsrelationen och vågfunktioner

$$\text{Kan också studera } P(p, \Delta p) = |y(p)|^2 \frac{\Delta p}{2\pi\hbar}$$

$$\text{Om } y(x) = e^{i\frac{p}{\hbar}x} = \langle x | p \rangle \quad \begin{matrix} \text{konvention} \\ (p \text{ given konstant}) \end{matrix}$$

$$\text{så måste } \phi(p) = \langle p | x \rangle = \langle x | p \rangle^* = e^{-i\frac{x}{\hbar} \cdot p} \quad (x \text{ given konstant})$$

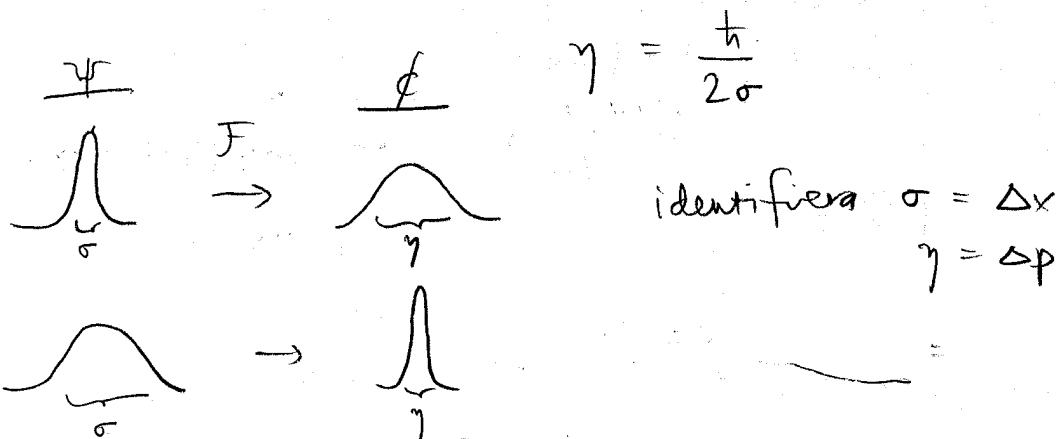
I allmänhet:

$$\phi(p) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\frac{p}{\hbar}x} y(x) dx$$

Fouriertransform
"Tre alternativ att representera
samma sak"

Matte: ✓
Fourier transform av normalfördelning är normalfördelning

Ex $\psi(x) = K e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}} \Rightarrow \phi(p) \propto e^{-\frac{p^2}{4\eta^2}}$



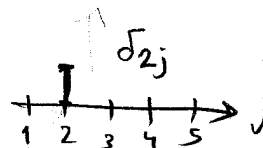
$$\Rightarrow \Delta x \Delta p = \sigma \eta = \sigma \cdot \frac{\hbar}{2\sigma} = \frac{\hbar}{2}$$

Konceptfråga: Vad är sant?

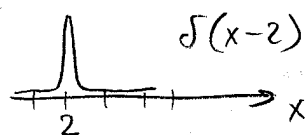
- 14
4
1
- (A) Om vi försöker minska obst. i x , ökar vi obst. i p . (R)
 - (B) Vågfunktioner är normalfördelningar
 - (C) Vi har stegpat in $\hbar$ i beräkningen från början, det kan inte ut av sig självt. (R)

Nomenig: generalisera

$$\langle i | j \rangle = \delta_{ij}$$



till $\langle x | y \rangle = \delta(x-y)$

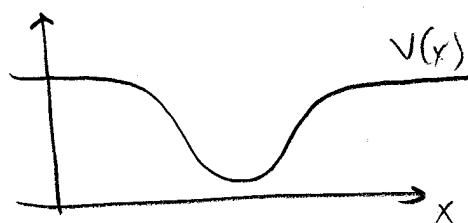


(Feynman s. 16-10)

Kvantisering

Hur kan en kontinuerlig ekvation ge kvantiserade (stegvisa, diskreta) energier och "elektronskal"? (jfr. uppg. 3 - P7)

Tag potentiell energi $V(x)$
(kan vara elektrostatisk i väteatomen)



"potentialgrop"

t.ex



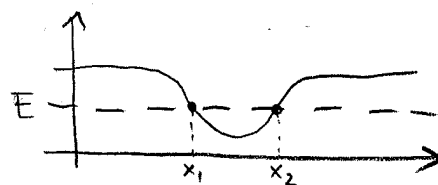
Pröva $\psi(x) = a(x) e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$

↑ vet att det fungerar för $a(x) = 1$

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

partikelns energi E

Two fall



$$E < V \Rightarrow a'' \propto a$$

($x < x_1$ eller $x > x_2$)

t.ex $f(x) = e^{ax}$, $f''(x) = a^2 e^{ax}$

"lutar bort från x-axeln"

$$E > V \Rightarrow a'' \propto -a$$

(x mellan x_1 och x_2)

t.ex $f(x) = \sin(ax)$

$$f''(x) = -a^2 \sin(ax)$$

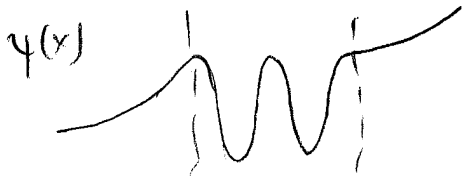
Leta bundna tillstånd

"Pussla ihop" (tänk: lös ekv. numeriskt)

↑
mycket viktigt i tillämpningar

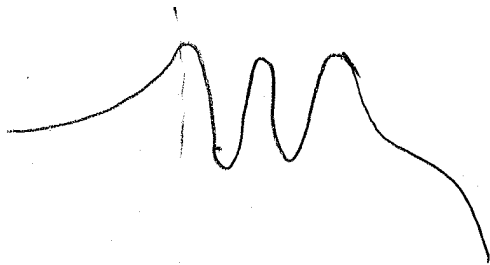


↑ punkter där $V(x) = E$



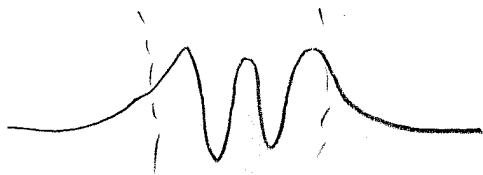
inte bunden: påträffas oftast utanför gropen!
(dessutom: inte normaliserbar...)

prova igen: ("shooting") ändra E !



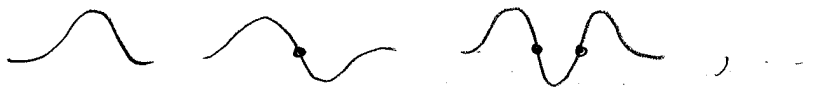
inte bunden

hitta rätt:



bunden partikel!
bara för vissa E

Olika möjligheter: hur många oscillationer i mitten?



$\Rightarrow E_0, E_1, E_2, \dots$ kvantiserade (stegvisa) värden!

Kvantmekaniskt får partikeln vara i $x < x_1, x > x_2$, som är "klassiskt förbjudet". $\Rightarrow$ TUNNLING (nästa förel.)