Schrödingerligningen

[PCH 1–3 ; DJG 1–2 ; IØ 1–3]

E. Schrödinger 1925, NP 1933 (delt med P. Dirac)

Hva slags <u>bølgeligning</u> kan beskrive de Broglies partikkelbølger ?

Først: Repetisjon av grunnleggende klassisk bølgefysikk.

Bølgeligningen

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{1}{v_f^2}\frac{\partial^2 y}{\partial t^2} \qquad \left[3D: \nabla^2 y = \frac{1}{v_f^2}\frac{\partial^2 y}{\partial t^2} \right]$$

beskriver mekaniske og E.M. bølger, med
y = utsving på streng, tetthet eller trykk i fluid, elektrisk felt $\vec{E}$, magnetfelt $\vec{B}$ etc,

Generell løsning er på formen

$$y(x,t) = y(x \pm v_f t)$$

Spesielt viktig er <u>harmoniske</u> løsninger

$$y(x,t) = A \sin(kx - \omega t) \quad \text{eller} \quad A\cos(kx - \omega t)$$

Evt. med kompleks representasjon (ikke nødvendig, men ofte hensiktsmessig)

$$y(x,t) = A\, e^{i(kx - \omega t)}$$

$$e^{i\alpha} = \cos\alpha + i \sin\alpha \quad ; \quad i = \sqrt{-1}$$

Bølgestørrelser og relasjoner:

A = amplitude

$k = 2\pi/\lambda$ = bølgetall

$\omega = 2\pi/T$ = vinkelfrekvens (T = periode)

$\nu = \omega/2\pi$ = frekvens

$v_f = \lambda/T = \lambda\nu = \omega/k$ = fasehastighet

$v_g = d\omega/dk$ = gruppehastighet

Starter med (ikke-relativistisk; $v \ll c$) fri partikkel med masse m i konstant potensial $V = 0$.
Bruker mest mulig 1D framstilling; generaliserer til 3D her og der.

$$E = K = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$$

Ifølge de Broglie:

$$\lambda = \frac{h}{p} \Rightarrow k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi p}{h} = \frac{p}{\hbar}$$

$$\nu = \frac{E}{h} \Rightarrow \omega = 2\pi\nu = \frac{2\pi E}{h} = \frac{E}{\hbar}$$

Med "skarp" (veldefinert) bølgelengde og frekvens prøver vi en harmonisk bølgeløsning

$$\Psi(x,t) = e^{i(kx-\omega t)} = e^{i(px-Et)/\hbar}$$

Vi finner en passende bølgeligning (diff. ligning) nærmest ved inspeksjon:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = i\hbar\cdot(-iE)/\hbar\cdot e^{i(px-Et)/\hbar} = E\,\Psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = -\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\left(\frac{ip}{\hbar}\right)^2\cdot e^{i(px-Et)/\hbar} = \frac{p^2}{2m}\Psi$$

Dvs: Naturlig å satse på bølgeligningen

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$$

for fri partikkel med masse m i potensial $V = 0$.

Vi vet fra klassisk mekanikk at valget av nullpunkt for potensialet er uten fysisk betydning.

En fri partikkel i potensialet $V = V_0$ = konstant bør da kunne beskrives med samme planbølge

$$\Psi(x,t) = e^{i(px-Et)/\hbar}$$

Vi deriverer:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = E\Psi = (K+V)\Psi = \left(\frac{p^2}{2m} + V_0\right)\Psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{p^2}{2m}\Psi$$

Dermed satser vi på bølgeligningen

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0\right)\Psi$$

Dersom $\vec{F} = -\nabla V \neq 0$, dvs $V(\vec{r}) \neq$ konstant, er $\vec{p}$ ikke lenger konstant ("skarp").
Schrödinger satset likevel på samme ligning,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\right]\Psi(\vec{r},t)$$

som er Schrödingerligningen. Viser seg å fungere!

Vi noterer at Ψ <u>må</u> være kompleks! Målbare fysiske størrelser er <u>reelle</u>. Bølgefunksjonen Ψ kan ikke være direkte målbar!

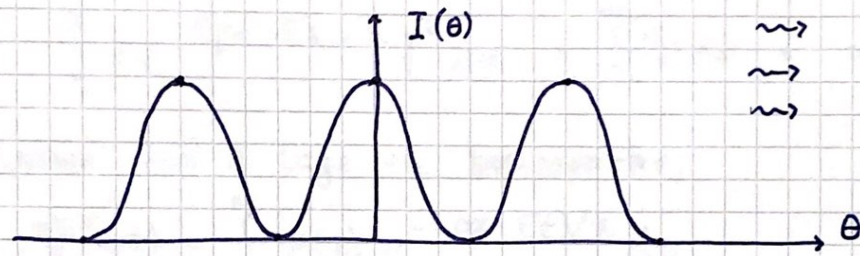
Tolkning av bølgefunksjonen [PCH 1.7; IØ 1.6]

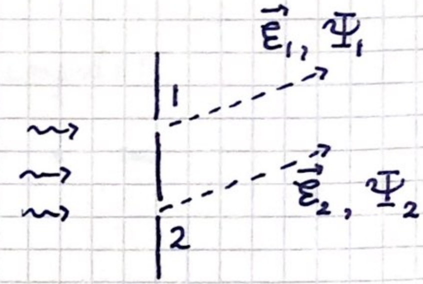
Vi tenker oss to lignende eksperimenter:

EM bølger (fotoner) sendes mot dobbeltspalte (evt diffraksjons-gitter)

Elektroner ——— " ——— —— " ——

Begge eksperimenter resulterer i et interferensmønster på en detektor bak spaltene:





Med fotoner: $I \sim |\vec{\mathcal{E}}|^2 = |\vec{\mathcal{E}}_1 + \vec{\mathcal{E}}_2|^2$

Med elektroner: $I \sim |\Psi|^2 = |\Psi_1 + \Psi_2|^2$

Selv med lav innkommende intensitet, dvs ett foton eller ett elektron om gangen, oppnås interferens, når mange partikler har truffet detektoren.

Vi tolker derfor $|\vec{\mathcal{E}}|^2$ og $|\Psi|^2$ som sannsynlighetsfordelingene for hvor hhv et gitt foton og et gitt elektron vil treffe detektoren.

Max Born (1926, NP 1954):

$dP = |\Psi(x,t)|^2 dx$ = sanns. for å måle partikkelens posisjon mellom x og $x + dx$ ved tid t

$$\frac{dP}{dx} = |\Psi(x,t)|^2 = \text{sanns. pr lengdeenhet}$$

Normering: $\int dP = 1 \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = 1$

[3D: $\int |\Psi(\vec{r},t)|^2 d^3r = 1$]

Bølgepakker og uskarphet [PCH 1.6 ; DJG 2.4]

Problem med partikkel med skarp impuls:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |e^{i(px-Et)/\hbar}|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} 1 \cdot dx = \infty$$

Løses ved å lage en bølgepakke,

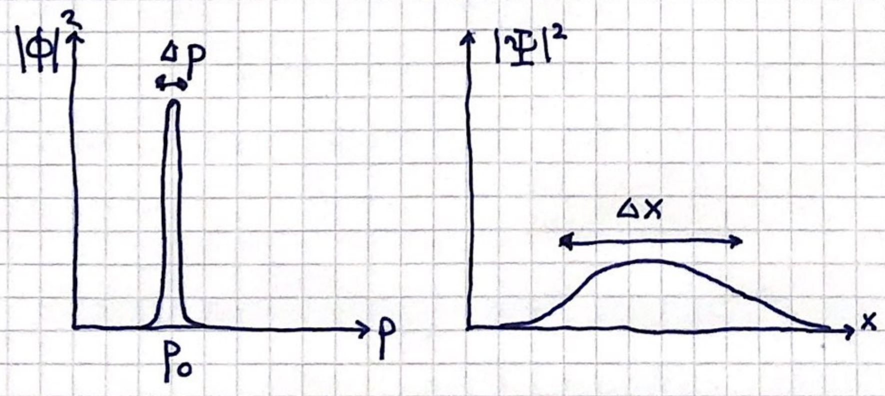
$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p)\, e^{i(px-Et)/\hbar} dp$$

dvs en sum av plane bølger med amplitude $\phi(p)dp$.

Ved $t=0$:

$$\left.\begin{aligned} \Psi(x,0) &= \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p)\, e^{ipx/\hbar} dp \\ \phi(p) &= \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x,0)\, e^{-ipx/\hbar} dx \end{aligned}\right\} \text{Fouriertransformasjoner TMA4120}$$

Smal $|\phi(p)|^2 \Rightarrow$ Bred $|\Psi(x,0)|^2$ og omvendt



Heisenbergs uskarphetsrelasjon: $\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2$

Operatorer, egenfunksjoner og egenverdier

[PCH 2.4 ; DJG 3.2 ; IØ 1.7]

$$\underbrace{\hat{A}}_{\text{Operator}} \; f(x) \;=\; \underbrace{A}_{\text{Egenverdi; konstant, uavhengig av } x} \; f(x)$$

Egenfunksjon: $f(x)$

Eks: Siden $\frac{\partial}{\partial x} \sin kx = k \cos kx$, er $\sin kx$ ikke en egenfunksjon til operatoren $\partial/\partial x$.

Impulsoperator:

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} e^{i(px - Et)/\hbar} = p\, e^{i(px-Et)/\hbar}$$

Dvs, planbølgen $e^{i(px-Et)/\hbar}$ som beskriver en fri partikkel med impuls p, er egenf. til oper. $(\hbar/i)\partial/\partial x$, med egenv. p. Dermed rimelig å kalle dette en impulsoperator,

$$\boxed{\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}}$$

$$\frac{\hbar}{i} \nabla e^{i(\vec{p}\cdot\vec{r} - Et)/\hbar} = \vec{p}\, e^{i(\vec{p}\cdot\vec{r} - Et)/\hbar}$$

$$\boxed{\hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i} \nabla}$$

Operator for kinetisk energi:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}e^{i(px-Et)/\hbar} = \frac{p^2}{2m}e^{i(px-Et)/\hbar}$$

Samme plane bølge er egenf. til oper. $(-\hbar^2/2m)(\partial^2/\partial x^2)$, med egenv. $p^2/2m = K$. Dermed rimelig å si at

$$\boxed{\hat{K} = \hat{p}^2/2m = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}}$$

er oper. for kinetisk energi.

3D: $\boxed{\hat{K} = \hat{\vec{p}}^2/2m = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2}$

Operator for total energi:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0\right)e^{i(px-Et)/\hbar} = \left(\frac{p^2}{2m} + V_0\right)e^{i(px-Et)/\hbar}$$

Dermed blir $\hat{K} + V_0$ en $\underbrace{\text{oper.}}_{}$ for energien $E = K + V_0$, for en fri partikkel i konstant potensial V_0.

Med $V(x) \neq$ konstant er planbølge ikke egenf. til $\hat{K} + V(x)$; andre typer funksjoner vil være egenf. Oper. for total energi kalles tradisjonelt Hamiltonoperatoren, $\hat{H}$. Dvs, $\hat{H} = \hat{K} + V(x)$ evt. $\hat{H} = \hat{K} + V(\vec{r})$ i 3D. Schrödingerlign. blir nå:

$$\boxed{i\hbar\,\partial\Psi/\partial t = \hat{H}\Psi} \qquad \text{SL}$$

med $\Psi(x,t)$ i 1D og $\Psi(\vec{r},t)$ i 3D.