

Total bølge som streffer skjermen: $\vec{E} = \vec{E}_1 + \vec{E}_2$

Intensitet på skjermen: $I \sim |\vec{E}|^2 = |\vec{E}_1 + \vec{E}_2|^2$

Veilengdeforskjell: $d \sin \theta$

↳ Konstruktiv interferens når $d \sin \theta = n\lambda$: $\vec{E}_2 \approx \vec{E}_1$, $I \sim 4E_1^2$

Destruktiv " " " $d \sin \theta = (n+1/2)\lambda$: $\vec{E}_2 \approx -\vec{E}_1$, $I \approx 0$

Men lyset har både bølge- og partikkelnatur:

Hvis ett og ett foton sendes mot dobbeltspalten, fås tilsynelatende tilfeldige treff på skjermen. Etter mange fotontreff avtegnes interferensmønsteret $I(\theta)$.

Dvs: $I(\theta)$ tilsvarer sannsynlighetsfordelingen for hvor de ulike fotonene vil treffe skjermen.

Tilsvarende resultater oppnås med elektroner, se

Tomomura et al, Am J Phys 57, 117 (1989),

og andre partikler.

Bølgepakker

En planbølge med veldefinert (skarp) impuls p ,

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

er ikke normerbar (i "værlig forstand"):

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} 1 \cdot dx = \infty$$

[Samme problem med klassiske harmoniske bølger:

En ren sinusbølge, $\sin(kx - \omega t)$, har uendelig utstrekning.]

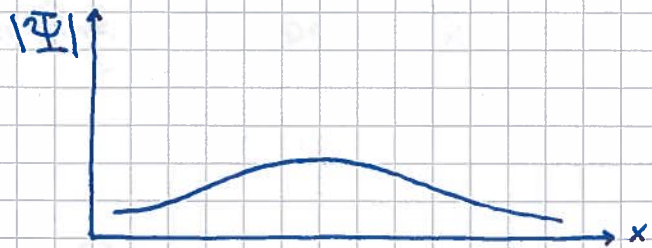
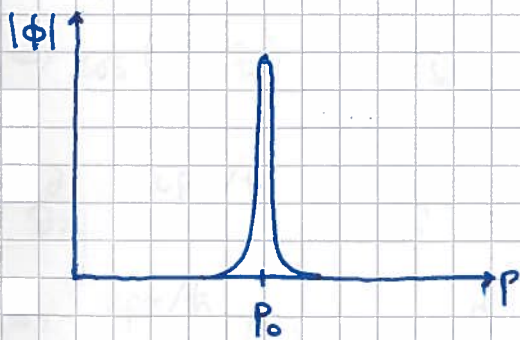
Men vi kan lokalisere partikkelen (og normere sannsynligheten) ved å beskrive den med en sum av planbølger med ulike impulser, dvs en bølgepakke:

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

der $\phi(p)$ tilsvarende andelen av $\Psi(x,t)$ med impuls p , og

$|\phi(p)|^2$ blir en sannsynlighetsdensitet i "impulsrommet".

Smal $\phi(p) \Rightarrow$ Bred $\Psi(x)$, og omvendt:



Vi merker oss at $\Psi(x,0)$ er fouriertransformen av $\phi(p)$.

Vi skal senere se at

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2,$$

som er Heisenbergs uskarphetsrelasjon.

Operator. Egenfunksjon. Egenverdi

Hvis en operator virker på en funksjon $f(x)$ og gir tilbake samme $f(x)$ ganger en konstant, dvs

$$\hat{A} f(x) = A f(x)$$

\uparrow operator (med hatt) \uparrow konstant (uten hatt)

da er $f(x)$ en egenfunksjon til operatoren \hat{A} , med tilhørende egenverdi A .

Eksempler :

$$\bullet \frac{\partial}{\partial x} \cos(px/\hbar) = -\frac{p}{\hbar} \sin(px/\hbar)$$

$\Rightarrow \cos(px/\hbar)$ er ikke egenfunkt. til oper. $\frac{\partial}{\partial x}$

$$\bullet \frac{\partial}{\partial x} e^{ipx/\hbar} = \frac{ip}{\hbar} e^{ipx/\hbar}$$

$\Rightarrow e^{ipx/\hbar}$ er egenfunkt. til $\frac{\partial}{\partial x}$, med egenv. ip/\hbar

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

\Rightarrow planbølgen $e^{i(px-Et)/\hbar}$, som beskriver fri partikkel med impuls p , er egenfunkt. til oper.

$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$, med egenv. lik p

⇒ Vi kaller $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ en impulsoperator,

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

Og vi kaller ligningen

$$\hat{p} \Psi = p \Psi$$

en egenverdligning.

For fri partikkel, med $V = 0$:

$$E(p) = p^2/2m$$

⇒ Vi prøver oper.

$$\frac{1}{2m} \hat{p}^2 = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2},$$

som gir egenverdligningen

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

Dermed naturlig å kalle $\hat{p}^2/2m = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ en energioperator, eller mer presist en oper. for kin. energi.

Viktig å bruke betegnelsen Hamiltonfunksjonen H for energien (energifunksjonen) i klassisk mekanikk.

Tilsvarende kaller vi oper. for energi i QM

Hamiltonoperatoren \hat{H} .

For fri partikkel, med $V=0$:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

Hvis $V = V_0 \neq 0$: Frenløst fri partikkel ($\vec{F} = 0$),

med energi $E = K + V = p^2/2m + V_0$

$\Rightarrow e^{i(px - Et)/\hbar}$ egenfunkt. til $\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + V_0$

med egenv. $E = p^2/2m + V_0$

Dvs: Triviell endring; nullpunkt for V velges fritt.

Hva med $V \neq \text{konst.}$ slik at $\vec{F} = -\nabla V \neq 0$?

Eks: $V(r) = -e^2/4\pi\epsilon_0 r \Rightarrow \vec{F} = -\hat{r}e^2/4\pi\epsilon_0 r^2$

Ikke lenger veldefinert \vec{p} ...

Men Schrödinger satset på samme ligning, dvs

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi ; \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)} \quad \text{SL i 1D}$$

som viser seg å fungere.

Generalisering til 3D:

$$p \rightarrow \vec{p} ; \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \rightarrow \hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i} \nabla ; V(x) \rightarrow V(\vec{r})$$

$$\text{og } \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r})$$

Stasjonære tilstander og tidsuavhengig Schrödingerligning

[PCH 2.3 ; D3G 2.1 ; IØ 1.7.b, 2.1.a, 2.7.a]

TUSL

Svært ofte er potensialet $V(x)$ tidsuavhengig. Da skal vi vise at SL har løsninger på formen

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

Dette er et eksempel på en stasjonær tilstand, dvs en tilstand med tidsuavhengig sannsynlighetsfordeling $|\Psi|^2$.

Beris:

SL har løsninger på produktform når \hat{H} er uavh. av t :

$$\Psi(x,t) = \psi(x) \cdot T(t)$$

Setter inn; og dividerer med Ψ :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi$$

$$\Rightarrow \frac{i\hbar \psi(x) \partial T / \partial t}{\psi(x) \cdot T} = \frac{T(t) \hat{H} \psi}{\psi \cdot T(t)}$$

$$\Rightarrow \underbrace{\frac{i\hbar \partial T / \partial t}{T}}_{\text{kun avh. av } t} = \underbrace{\frac{\hat{H} \psi}{\psi}}_{\text{kun avh. av } x}$$

\Rightarrow Begge sider av lign. er en og samme konstant E

Løser for $T(t)$:

$$\frac{dT}{T} = \frac{E dt}{i\hbar} \Rightarrow T(t) = \text{konst.} \cdot e^{-iEt/\hbar}$$

Lign. for $\Psi(x)$:

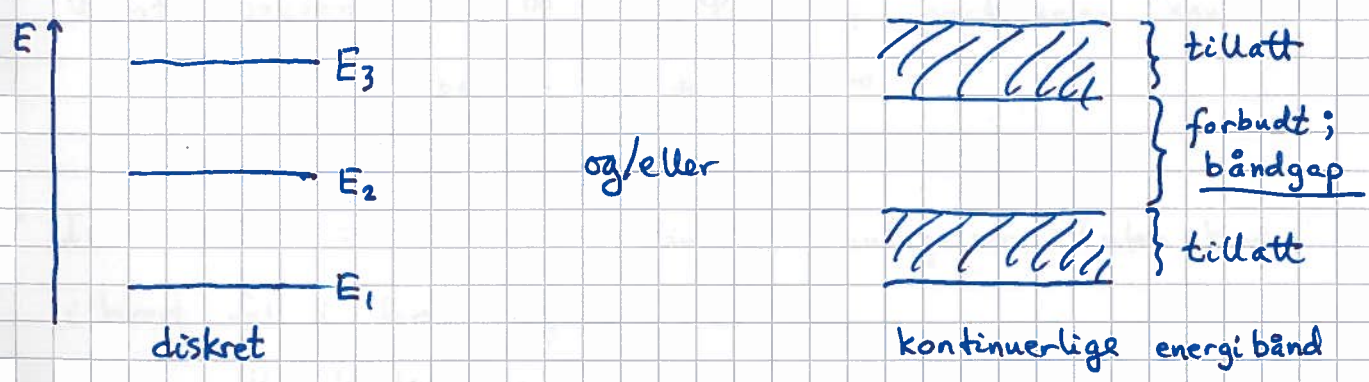
$\hat{H}\Psi(x) = E\Psi(x)$ TUSL i 1D

Den fullstendige løsningen : $\Psi(x,t) = \Psi(x) e^{-iEt/\hbar}$
som er stasjonær, da $|\Psi|^2 = |\Psi|^2$, dvs uavh. av t.

Vi ser at TUSL er en egenverdligning, med \hat{H} = operator for energien

=> Naturlig å tolke egenverdiene E som systemets mulige energier og ~~de~~ egenfunksjonene Ψ som systemets mulige tilstander (dvs den romlige delen).

TUSL har generelt diskrete egenverdier E_1, E_2, \dots (endelig eller uendelig mange) og/eller kontinuerlige intervaller, såkalte energi bånd, der alle verdier av E er mulig:



SL og TUSL er lineære ligninger. En vilkårlig lineær komb. av stasjonære løsninger er da en generell løsning av SL :

$\Psi(x,t) = \sum_n c_n \Psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$ (+ integral over eventuelle energi bånd)

som med ulike E_n i summen gir en tidsavh. $|\Psi|^2$, dvs ikke stasjonær.

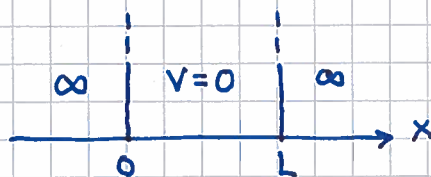
Partikkel i boks (1D)

(28)

[PCH 3.2; DFG 2.2; IØ 2.1]

Ser på partikkel, masse m , i potensialet

$$V(x) = \begin{cases} 0 & ; 0 < x < L \\ \infty & ; x < 0, x > L \end{cases}$$



Klassisk: $E = K = \frac{1}{2}mv^2$, alle $E \geq 0$ tillatt.

Partikkelen farer fram og tilbake mellom to harde vegger, med fart $v = \sqrt{2E/m}$.

Kvantemekanisk: SL har løsningene

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

der $\psi(x)$ og E er hhv egenfunksjoner og egenverdier til

$$\hat{H} = \hat{K} + V = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x),$$

dus

$$\hat{H} \psi(x) = E \psi(x)$$

- Utenfor boksen: $V = \infty \Rightarrow \psi = 0$; partikkelen kan ikke finne seg der $V = \infty$

- Inni boksen: $V = 0$. Rimelige antagelser (uten bevis, i hvert fall i første omgang) er:

ψ kontinuerlig overalt

$$E \geq 0$$

Da er $\psi(0) = \psi(L) = 0$.

Kan da ikke ha $E = 0$, i såfall er $\psi'' = 0$, med

løsning $\psi(x) = Ax + B$, som ikke kan oppfylle både

$\psi(0) = 0$ og $\psi(L) = 0$. Følgelig: $E > 0$; partikkelen

kan ikke ligge i ro inne i boksen!

Generell løsning inni boksen, med $E > 0$:

(29)

$$\psi'' + k^2 \psi = 0 \quad ; \quad k = \sqrt{2mE}/\hbar$$

$$\Rightarrow \psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$$

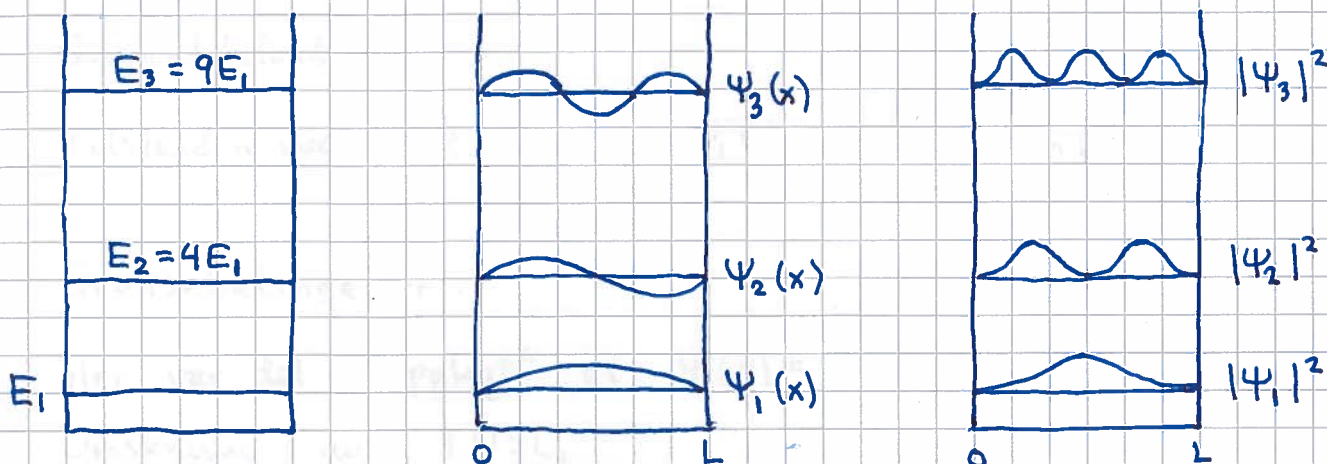
$$\psi(0) = B = 0$$

$$\Rightarrow \psi(x) = A \sin kx$$

$$\psi(L) = A \sin kL = 0 \quad ; \quad \text{gir kvantisering av energien:}$$

$$k_n \cdot L = n\pi \Rightarrow E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \cdot n^2 \quad ; \quad n=1,2,3,\dots$$

$$\psi_n(x) = A \sin \frac{n\pi x}{L}$$



Normering: Må ha $\int_0^L |\psi_n(x)|^2 dx = 1$ (for hver n)

Integranden oscillerer n hele perioder på $[0, L]$, med middelværdi $|A|^2/2$. Dermed er

$$\frac{1}{2} |A|^2 \cdot L = 1 \quad \Rightarrow \quad |A| = \sqrt{\frac{2}{L}} e^{i\beta}$$

med vilkårlig reell β . Den fysiske størrelsen $|\psi_n|^2$ er uavh. av $\beta \Rightarrow$ Vi velger $\beta = 0$.

$$\Rightarrow \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}$$

(Klassisk analogi: stående bølger på streng)

Merknader:

• Symmetri:

$V(x)$ er symmetrisk om $x = \frac{L}{2}$. Vi har da symmetriske ($n=1, 3, 5, \dots$) og antisymmetriske ($n=2, 4, 6, \dots$) tilstander, slik at $|\Psi_n|^2$ blir symmetrisk for alle n , som ventet

• Nullpunkter:

Vi ser at $\Psi_n(x)$ har $n-1$ nullpunkter (foruten $x=0$ og $x=L$). Dette gjelder generelt for bundne tilstander, dvs når $E_n < V(x \rightarrow \pm\infty)$.

• Grunntilstand:

Tilstanden med lavest energi; $\Psi_1(x)$; $E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$

• Grensebetingelser:

Her var det "opplegt" at $\Psi(0) = \Psi(L) = 0$.

Omskning av TUSL,

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

gir grunnlag for noen generelle observasjoner:

→ Overalt der V er endelig må også Ψ'' være endelig. Da må både Ψ og Ψ' være kontinuerte funksjoner. Hvis Ψ' er diskontinuerlig et sted, vil $|\Psi''| \rightarrow \infty$ der.

→ Omvendt: Der V gjør et uendelig sprang gjør Ψ'' det samme. Da må Ψ' være diskontinuerlig der. (Vi ser at Ψ'_n er diskontinuerlig i $x=0$ og $x=L$ for vår "boks".)

→ Ψ er kontinuerlig overalt, også der $|V| \rightarrow \infty$.

Diskontinuerlig Ψ ville bety at sannsynlighets tettheten $|\Psi|^2$ var diskontinuerlig, som er urimelig. (Et mer overbevisende argument: Start med et endelig potensialsprang V_0 , og ta grensen $V_0 \rightarrow \infty$ til slutt. Da vil resultatet bli kontinuerlig Ψ .)

- Krumning av Ψ :

Klassisk er selvsagt $E > V$ overalt. Da er $\Psi''/\Psi < 0$, og Ψ krummer mot x -aksen. Vi kaller dette et klassisk tillatt område.

Områder med $E < V$ er klassisk forbudt, men kvantemekanisk tillatt (med mindre $V = \infty$). Da er $\Psi''/\Psi > 0$, og Ψ krummer bort fra x -aksen.

- Ortogonalitet :

Ortonormert vektorsett $\{\vec{V}_i\}$ når $\vec{V}_i \cdot \vec{V}_j = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & ; i=j \\ 0 & ; i \neq j \end{cases}$

Ortonormert funksjonssett $\{\Psi_n\}$ når

$$\langle \Psi_n, \Psi_k \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^*(x) \Psi_k(x) dx = \delta_{nk}$$

Brukes f.eks. $\sin \alpha \cdot \sin \beta = \frac{1}{2} [\cos(\alpha - \beta) - \cos(\alpha + \beta)]$ f.eks for

partikkel i boks $\langle \Psi_n, \Psi_k \rangle = \delta_{nk}$, dvs ortonormerte egenfunksjoner.

Gjelder ganske generelt ; mer om det senere.

(Se evt PCH 2.2, 2.4.)