TFY 4215 Vår 2019.

- Åpen nettside med notater, øvinger, flervalgstester etc.
- Hovedbok : PCHemmer (PCH) ; evt. DJ Griffiths (DJG)
- Utdypende stoff : Tilleggene til Ingjald Øverbø (IØ)
- Obligatorisk numerisk øving, felles med fysikkprosjekt i TMA4320
- Digital eksamen med flervalgsoppgaver 03.06.19 kl 15–19
- Med stor sannsynlighet en eller flere frivillige midtveisprøver, som kun kan telle positivt på sluttkarakteren

- Kursets innhold :

  Innledning til kvantemekanikken

  Schrödingerligningen

  Postulatene

  Eksempler og anvendelser

  Atomer og molekyler

- Studasser : Johannes Bakkelund (johanbak)

  Ane Vigre Håland (anevh)

  Martine Dyring Hansen (martindh)

  Magnus Malmquist (magnunm)

- Referansegruppe :

BFY	malinps	Malin Pettersen Seime
MLREAL	ARNEKRH	Arnkristian kramprud Hjell
MTFYMA	sofiehol	Sofie Holtestaul
MTNANO	vegahen	Vegard Hennestad

- Timeplan : Forelesning Man 10–12 R5, Ons 12–14 R7

  Øving Fre 10–12 R5

Innledning til kvantemekanikken [PCH 1 ; IØ1]

Fysikk ca 1900 :

- Newtons lover. Galileisk relativitet : $v_{AC} = v_{AB} + v_{BC}$
- Termodynamikk, Statistisk mekanikk
  [Kelvin, Boltzmann etc]
- Maxwells ligninger. Interferens, diffraksjon. Lys er bølger.
  [Maxwell, Hertz etc]
- Materie er partikler. Atomet : Elektroner med negativ ladning i jevnt fordelt positiv ladningsfordeling
  [J.J. Thomson, 1897, NP 1906]

Problemer, før og etter 1900 :

- Linjespektre

  Absorpsjon / emisjon av EM stråling med <u>karakteristiske</u> bølgelengder λ

  Eks :

  Mørke linjer i solspekteret, pga absorpsjon i atmosfæren [Fraunhofer, 1814], både solas og jordas atmosfære, og inklusive Balmer-serien i hydrogen i den synlige delen av spekteret; 410, 434, 486 og 656 nm.

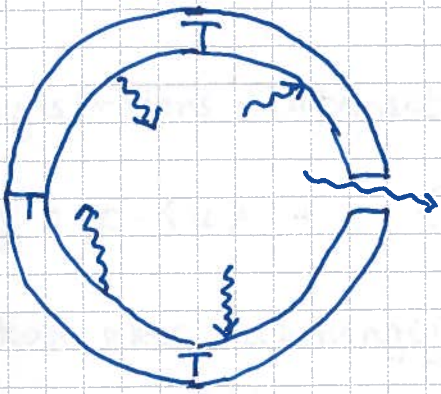
  J. Balmer, 1885 :

$$\lambda_n = B \cdot \frac{n^2}{n^2 - 4} \quad ; \quad n = 3, 4, 5, 6 \quad ; \quad B = 364.5 \text{ nm}$$

- Galileisk relativitet

Holder ikke for lys (og partikler med $v \lesssim c$).
Lysfarten i vakuum er like stor i alle inertialsystem.
[Michelson (NP 1907) og Morley, 1887]

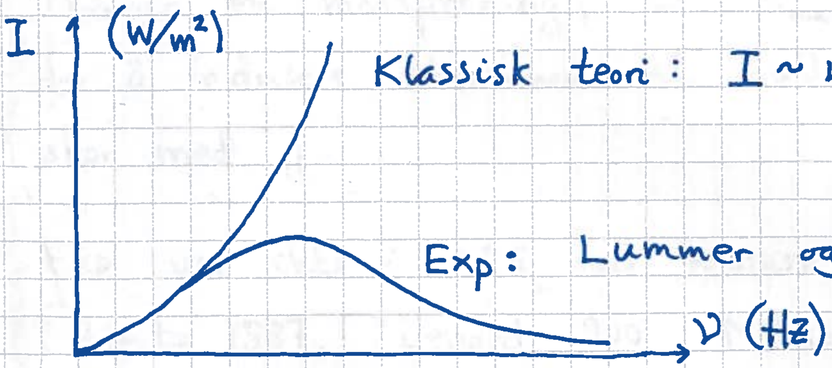
- Stråling fra svart legeme



Hul boks med liten åpning og temperatur T er tilnærmet svart legeme

$I(\nu, T)$ = utstrålt effekt pr flateenhet og frekvensenhet

$\Rightarrow$ $I(\nu,T)\,d\nu$ = utstrålt effekt pr flateenhet for frekvenser mellom ν og $\nu + d\nu$



Klassisk teori: $I \sim \nu^2$ (Rayleigh-Jeans lov)

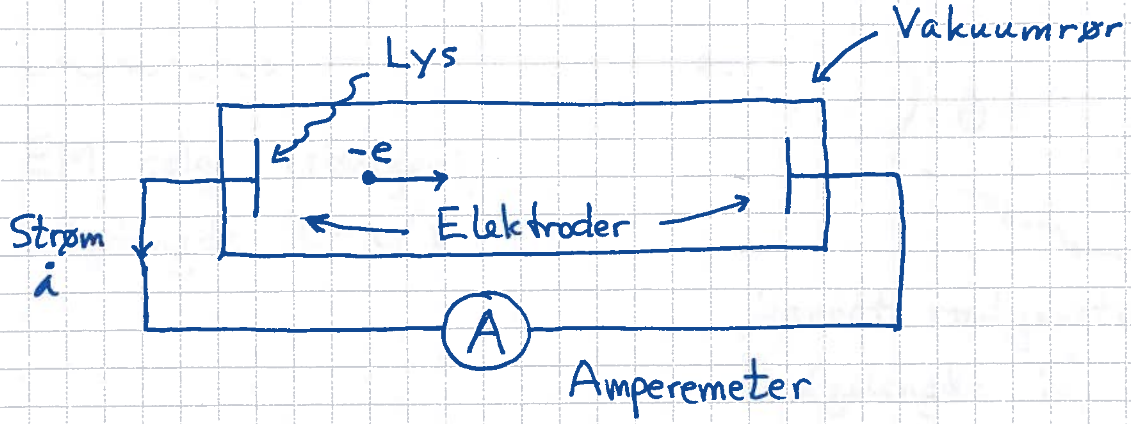
Exp: Lummer og Kurlbaum, 1898

Klassisk teori OK for lave frekvenser, men:

$$j(T) = \int_0^\infty I(\nu,T)\,d\nu = \infty$$

"ultrafiolett-katastrofen" !

- Fotoelektrisk effekt



Lysstrålens intensitet $\left(c = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}} = \text{lysfarten} \right)$

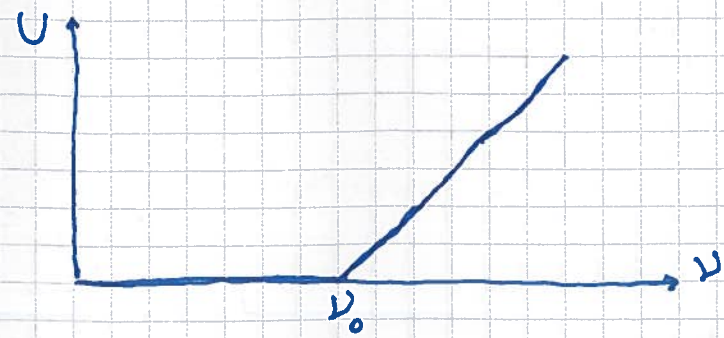
$$j = c \cdot \langle u \rangle = c \cdot \langle \tfrac{1}{2}\varepsilon_0 E^2 + \tfrac{1}{2\mu_0} B^2 \rangle = c\varepsilon_0 \langle E^2 \rangle = \tfrac{1}{2} c \varepsilon_0 E_0^2$$

kan økes uavhengig av frekvensen ν, slik at antall løsrevne elektroner og dermed strømmen i forventes uavh. av ν.

Løsrevne elektroner har en hastighetsfordeling med maks. kinetisk energi K_{max} som forventes å øke med intensiteten j. Trenger en motspenning, $U = K_{max}/e$ = terskelspenningen, for å redusere strømmen til null; forventer at U øker med j.

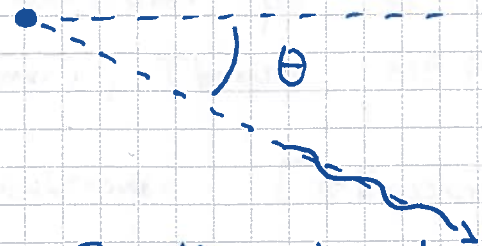
Exp. var ikke i tråd med klassisk elektromagnetisme:
[Hertz 1887, Lenard 1900, Millikan 1914 (NP 1923)]

$i = 0$ hvis $\nu < \nu_0$ = terskelfrekvensen
U øker lineært med ν når $\nu > \nu_0$



- Comptoneffekten

Tilnærmet fritt elektron (i grafitt)



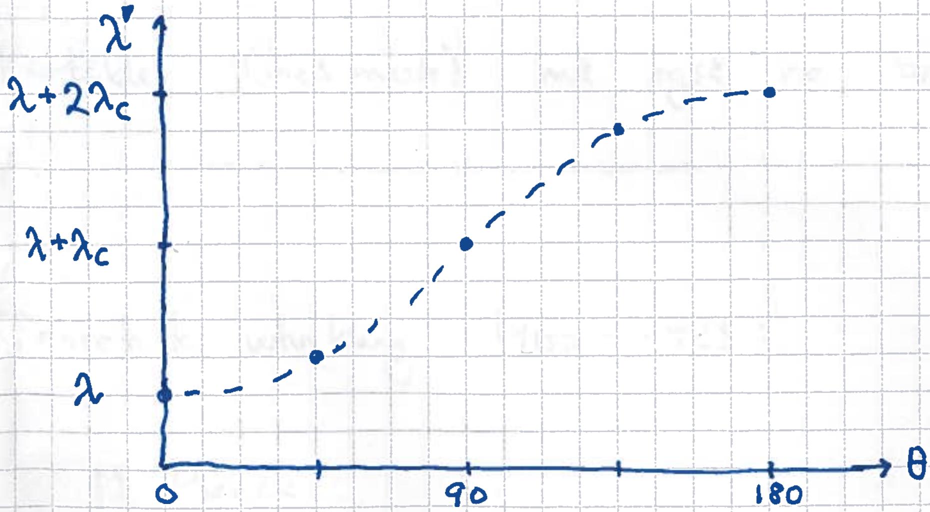
EM bølge (røntgen),
bølgelengde $\lambda = c/\nu$

Spredt røntgenstråle,
bølgelengde λ'

Med klassisk teori (Maxwells ligninger) forventes $\lambda' = \lambda$:

Elektronet settes i svingninger, med frekvens ν, av kraft $\vec{F}(t) = -e\vec{E}(t) = -e\vec{E}_0 \cos \omega t \quad (\omega = 2\pi\nu)$.
Det oscillerende elektronet sender ut EM bølge med samme frekvens ν.

Compton målte $\lambda'(\theta) \neq \lambda$ [1923; NP1927]:



$\lambda_c \approx 0.024$ Å

- Interferens med partikler

1925–28: Spredning av elektroner på Ni-overflate [Davisson (+ Germer), Thomson, NP 1937]

1961: Tospalteexp. med elektroner [Jönsson]

1989: Tospalteexp. med ett og ett elektron [Tonomura]

2003: Interferens med C_{60}-molekyler [Zeilinger et al] (Test 1)

2015: Interferens med $C_{168}H_{94}F_{152}O_8N_4S_4$-molekyler (5310 g/mol!) [Arndt et al]

Konklusjon:

Lys, dvs EM bølger, må også ha partikkelegenskaper.

Partikler (med masse) må også ha bølgeegenskaper.

Teoretisk utvikling 1900 – 1923:

M. Planck
A. Einstein
A. Compton
N. Bohr
L. de Broglie

Plancks strålingslov (Test 1)

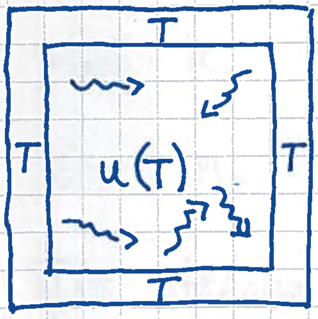
Max Plancks kvantehypotese (1900, NP 1918):

For EM stråling med frekvens ν er energien kvantisert:

$$E_n = n \cdot h\nu \quad ; \quad n = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

Samsvar med exp. med $h \approx 6.6 \cdot 10^{-34}$ Js

[Fra 20.05.2019 ; vedtatt 16.11.2018 :
$h \equiv 6.62607015 \cdot 10^{-34}$ kg m²/s ; basis for ny def. av SI-enheten kg. Platina-iridium-sylinderen i Paris pensjoneres!]



Anta metallboks med hulrom i termisk likevekt. (≈ Mikrobølgeovn!)
EM strålingsenergi $u(T)$ pr volumenhet.
Volum $V = L^3$.

Frekvensfordeling: $u(T) = \int du = \int_0^\infty d\nu \, \frac{du}{d\nu}$

$$\frac{du}{d\nu} = \frac{1}{V}\frac{dU}{d\nu} = \frac{\langle E \rangle \cdot dN}{V \cdot d\nu}$$

$\langle E \rangle$ = midlere energi pr svingemode, evt pr tilstand

dN = antall tilstander mellom ν og $\nu + d\nu$

$\frac{dN}{d\nu}$ = tilstandstettheten (= tilst. pr frekvensenhet)

Grensebetingelser for $\vec{E}$ - feltet :
$\vec{E} = 0$ inni metallveggene

$E_{\parallel}$ kontinuerlig i grenseflatene mellom metall og hulrom;
dvs med "veggflater" i $x, y, z = 0$ og L må vi ha
$E_y = E_z = 0$ i $x = 0$ og $x = L$
$E_x = E_z = 0$ i $y = 0$ og $y = L$
$E_x = E_y = 0$ i $z = 0$ og $z = L$

Oppnås med løsninger på formen

$$E_x \sim \sin(k_y L) \sin(k_z L) \cos(\omega t)$$
$$E_y \sim \sin(k_x L) \sin(k_z L) \cos(\omega t)$$
$$E_z \sim \sin(k_x L) \sin(k_y L) \cos(\omega t)$$

med $k_x = n_x \pi / L$, $k_y = n_y \pi / L$, $k_z = n_z \pi / L$

der $n_i = (0,)\ 1,\ 2,\ 3, \ldots\ldots$

Dvs stående bølger (som på svingende streng) med bølgetall

$$k = |\vec{k}| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} = \frac{\pi}{L} \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2} \, ,$$

bølgelengder

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2L}{\sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}} \, ,$$

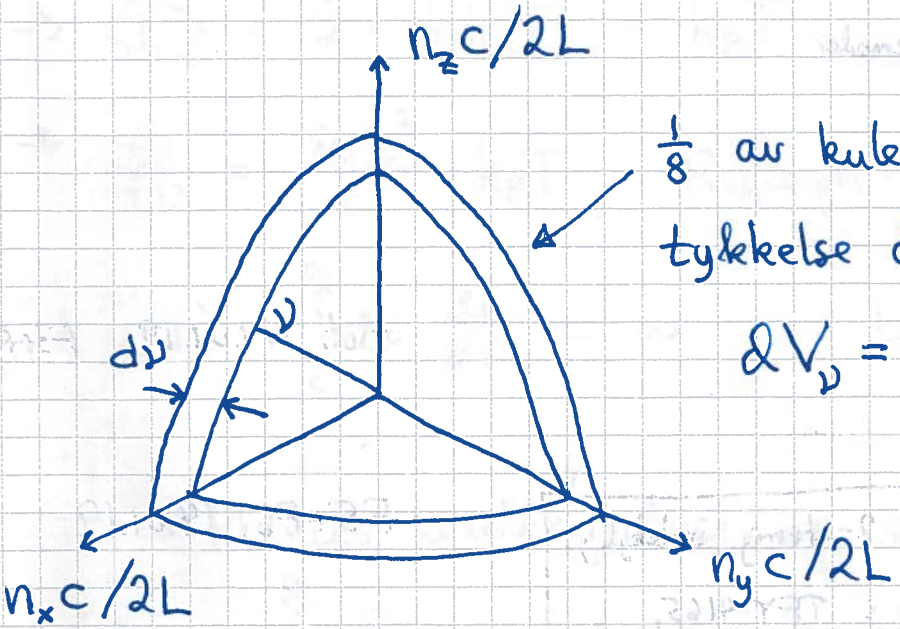
og frekvenser ("resonansfrekvenser")

$$\nu = c/\lambda = ck/2\pi = \frac{c}{2L} \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}$$

(der maksimalt én $n_i = 0$; i motsatt fall blir $\vec{E} = 0$)

NB: Dette har ingenting med kvantemekanikk å gjøre.
Men vi kan nå regne ut / skrive ned tilstandstettheten.

For hver frekvensverdi: 2 uavhengige polarisasjonsretninger for det elektriske feltet, dvs 2 tilstander pr frekvensverdi
Dermed:



$\frac{1}{8}$ av kuleskall med radius ν, tykkelse $d\nu$, og dermed volum

$$dV_\nu = \frac{1}{8} \cdot 4\pi \nu^2 \cdot d\nu = \frac{\pi}{2}\nu^2 d\nu$$

Frekvensene $\nu = \frac{c}{2L}\sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}$ tilsvarer punkter i den positive oktanten ovenfor. Hver frekvens opptar volumet $(c/2L)^3$ i dette "frekvensrommet". Med 2 tilstander for hver frekvensverdi er derfor

$$\frac{dN}{dV_\nu} = \frac{2}{(c/2L)^3} = \frac{16V}{c^3}$$

som med $dV_\nu = \frac{\pi}{2}\nu^2 d\nu$ gir tilstandstettheten

$$\frac{dN}{d\nu} = \frac{16V}{c^3} \cdot \frac{\pi}{2}\nu^2 = \frac{8\pi\nu^2 V}{c^3}$$

og dermed frekvensfordelingen

$$\frac{du}{d\nu} = \frac{\langle E \rangle}{V}\frac{dN}{d\nu} = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \cdot \langle E \rangle$$

Midlere energi pr tilstand (svingemode):

Med klassisk teori er $u = u_E + u_B = \frac{1}{2}\varepsilon_0 E^2 + \frac{1}{2\mu_0} B^2$,
dvs 2 kvadratiske bidrag til strålingsenergien, som
i følge ekvipartisjonsprinsippet bidrar med $\frac{1}{2}k_B T$ til $\langle E \rangle$

$$\Rightarrow \langle E \rangle = 2 \cdot \frac{1}{2} k_B T = k_B T$$

$$\Rightarrow \frac{du}{d\nu} = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \cdot k_B T \,,$$ Rayleigh-Jeans lov, som gir

$$u(T) = \int_0^\infty d\nu \, \frac{du}{d\nu} = \infty \quad ;$$ UV-katastrofen

Med Plancks kvantehypotese og statistisk mekanikk:

$$\langle E \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} E_n \cdot p_n \quad ; \quad E_n = nh\nu$$

$$p_n = e^{-\beta E_n}/Z \quad ; \quad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

$$Z = \sum_n e^{-\beta E_n}$$ = partisjonsfunksjonen

slik at $\sum_n p_n = 1$.

$$\Rightarrow \langle E \rangle = \frac{1}{Z} \sum_n E_n e^{-\beta E_n} = \frac{1}{Z}\left(-\frac{d}{d\beta}\right) \underbrace{\sum_n e^{-\beta E_n}}_{=Z}$$

$$= -\frac{1}{Z}\frac{dZ}{d\beta} \qquad \left(= -\frac{d \ln Z}{d\beta}\right)$$

Innfører $x = \exp(-h\nu\beta)$

$$\Rightarrow Z = \sum_{n=0}^{\infty} x^n = 1 + x + x^2 + \dots = \frac{1}{1-x}$$

$$\Rightarrow \frac{dZ}{d\beta} = \frac{dZ}{dx}\frac{dx}{d\beta} = \frac{1}{(1-x)^2}\cdot(-h\nu)\cdot x$$

$$\Rightarrow \langle E\rangle = -(1-x)\cdot\frac{(-h\nu)x}{(1-x)^2} = \frac{h\nu x}{1-x} = \frac{h\nu}{\frac{1}{x}-1} = \frac{h\nu}{e^{h\nu\beta}-1}$$

$$\Rightarrow \frac{du}{d\nu} = \frac{8\pi h\nu^3/c^3}{e^{h\nu/k_BT}-1}$$; Plancks strålingslov

Total energi pr volumenhet:

$$u(T) = \int_0^\infty d\nu \, \frac{du}{d\nu}$$

Innfør $y = h\nu/k_BT$; $\nu = \frac{k_BT}{h} y$; $d\nu = \frac{k_BT}{h} dy$

$$\Rightarrow u(T) = \int_0^\infty \frac{k_BT}{h} dy \cdot \frac{8\pi h}{c^3}\cdot\left(\frac{k_BT}{h}\right)^3\cdot\frac{y^3}{e^y-1}$$

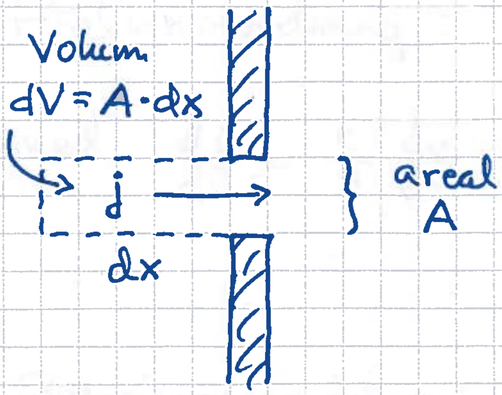
Rottmann: $\int_0^\infty \frac{y^3}{e^y-1} dy = \frac{\pi^4}{15}$

$$\Rightarrow u(T) = \alpha T^4 \quad \text{med} \quad \alpha = \frac{8\pi^5 k_B^4}{15 h^3 c^3}$$

Finner Stefan-Boltzmanns lov for utstrålt intensitet,

$$j(T) = \sigma T^4,$$

ved å slippe strålingsenergi ut av hulrommet gjennom et lite hull i veggen.



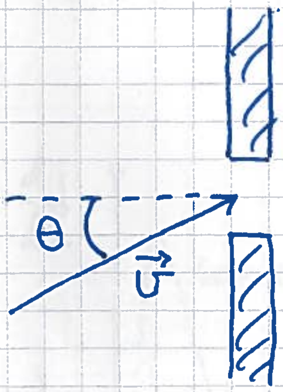
j = utstrålt effekt pr flateenhet

$$= \frac{1}{2} \left\langle \frac{dU}{A \cdot dt} \right\rangle$$

Bare halve strålingen i dV mot høyre.

$$u = \frac{dU}{dV} \Rightarrow dU = u\,dV = u\,A\,dx$$

$$\Rightarrow j = \frac{1}{2} u \left\langle \frac{dx}{dt} \right\rangle = \frac{1}{2} u \langle v_x \rangle$$



$|\vec{v}| = c$; $v_x = c \cdot \cos\theta$

$$\Rightarrow \langle v_x \rangle = \frac{\iint v_x \, d\Omega}{\iint d\Omega} = c \, \frac{\iint \cos\theta \, d\Omega}{\iint d\Omega}$$

Romvinkelelement: $d\Omega = \sin\theta \, d\theta \, d\varphi$

Int. grenser: $0 \leq \varphi \leq 2\pi$; $0 \leq \theta \leq \pi/2$

$$\Rightarrow \langle v_x \rangle = c \cdot \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi/2} d\theta \sin\theta \cos\theta \Big/ \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi/2} d\theta \sin\theta = \frac{c}{2}$$

$$\Rightarrow j(T) = \frac{c}{4} u(T) = \sigma T^4 \quad ; \quad \sigma = \frac{2\pi^5 k_B^4}{15 h^3 c^2}$$

$$\approx 5.67 \cdot 10^{-8} \, W/m^2 K^4$$

Frekvensfordeling : $j(T) = \int_0^\infty d\nu \, \frac{dj}{d\nu}$

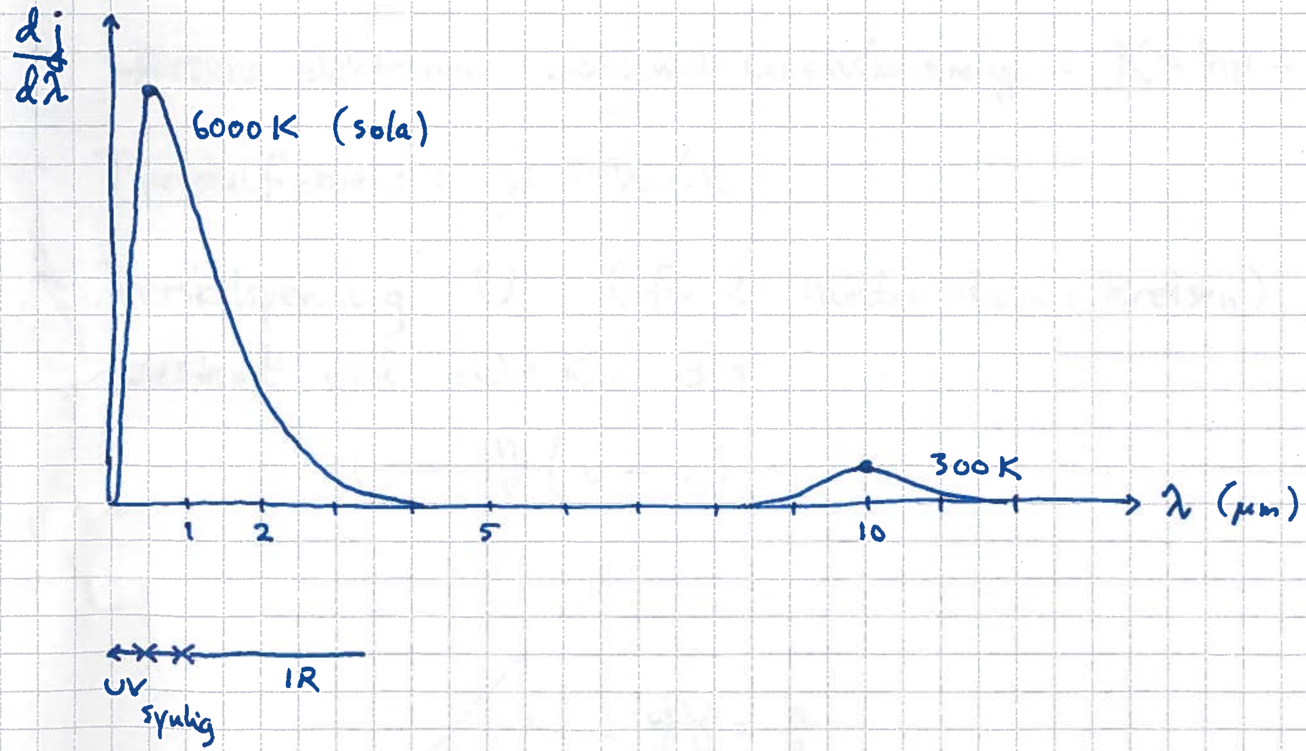
med $\frac{dj}{d\nu} = \frac{c}{4} \frac{du}{d\nu} = \frac{2\pi h \nu^3 / c^2}{e^{h\nu/k_B T} - 1}$

Bølgelengdefordeling : $j(T) = \int_0^\infty d\lambda \, \frac{dj}{d\lambda}$

(Test 1. $\nu = c/\lambda \Rightarrow d\nu = -(c/\lambda^2) d\lambda$)

Gir maksimal $dj/d\lambda$ for $\lambda \cdot T = 2898 \ \mu m \cdot K$

(Wiens forskyvningslov)



Fotoelektrisk effekt

Einstein (1905, NP 1921):

- Lysets energi er kvantisert, $E = h\nu$, med h som innført av Planck

- Elektroner i metallet absorberer hele energien $h\nu$. (Liten sannsynlighet for å absorbere to eller flere energipakker, fotoner.)

Forklarer eksperimentene:

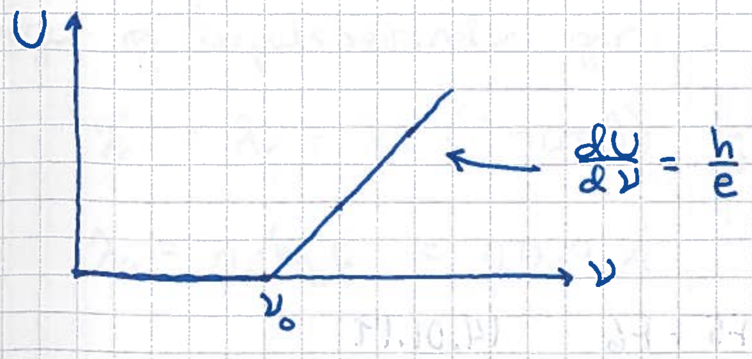
- Må ha fotonenergi $h\nu$ større enn frigjøringsarbeidet W for å rive løs elektroner

- Løsrevne elektroners maksimale kinetiske energi: $K = h\nu - W$

- Terskelfrekvens: $\nu_0 = W/h$

- Terskelspenning U (for å hindre strøm i kretsen) bestemt ved $eU = K$, dvs

$$U = \frac{h}{e}(\nu - \nu_0)$$



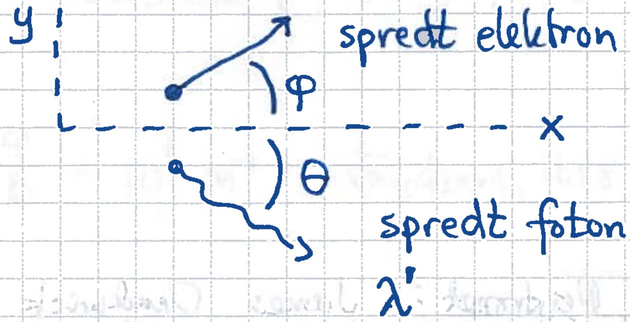
Comptoneffekten [IØ1]

A. H. Compton forklarte egne eksperimenter med bevaring av relativistisk impuls og energi i kollisjon mellom to partikler, innkommende foton og elektron i ro:

foton

elektron i ro

$E_e = m_e c^2$



$\lambda = c/\nu$

$E = h\nu$

$p = E/c = h/\lambda$

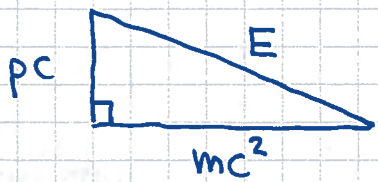
Rel. impuls: $\vec{p} = \gamma m \vec{v}$; $\gamma = (1 - v^2/c^2)^{-1/2}$

Rel. energi: $E = \gamma mc^2 = E_0 + K$

Hvileenergi: $E_0 = mc^2$

Kin. energi: $K = E - E_0 = (\gamma - 1) mc^2$ $(\approx \frac{1}{2} mv^2$ når $v \ll c)$

"Pythagoras": $E^2 = (pc)^2 + (mc^2)^2$ $(\Rightarrow E = pc$ når $m = 0)$



Energi- og impulsbevarelse gir

$$\lambda' = \lambda + \lambda_c (1 - \cos\theta) \quad ;$$

$$\lambda_c = h/m_e c \approx 0{,}024\ \text{Å}\,,$$ elektronets compton-bølgelengde

Bohr-modellen (1913, NP 1922)

Niels Bohrs utgangspunkt:

- Balmerserien for H-atomet

  $$\lambda_n = B n^2/(n^2-4) \; ; \; B \approx 364.5 \text{ nm} \; ; \; n = 3, 4, 5, 6$$

  evt.

  $$\frac{1}{\lambda_n} = R\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right) ; \quad R = \frac{4}{B} \approx 10^7 \text{ m}^{-1} \quad \text{(Rydberg, 1888)}$$

- Rutherford (1911): Tilbakespredning av noen α-partikler (He^{2+}) sendt inn mot tynn gullfolie viste at atomenes positive ladning (og masse) er samlet i en liten kjerne, mye mindre enn atomets størrelse.

- Plancks kvantehypotese og Einsteins forklaring av fotoelektrisk effekt viste at strålingsenergi er kvantisert, i enheter av $h\nu$.

Bohrs postulater:

- H-atomets elektron befinner seg i stasjonære tilstander med bestemte energier. Maxwells ligninger tilsier at elektronet (som er i akselerert bevegelse) må sende ut EM stråling og stadig miste energi. Dette må være forhindret.

- Kvantesprang. Elektronet kan endre tilstand ved å absorbere eller emittere et foton med noen bestemte energier. Balmerserien antyder at elektronets stasjonære tilstander tilsvarer energiene

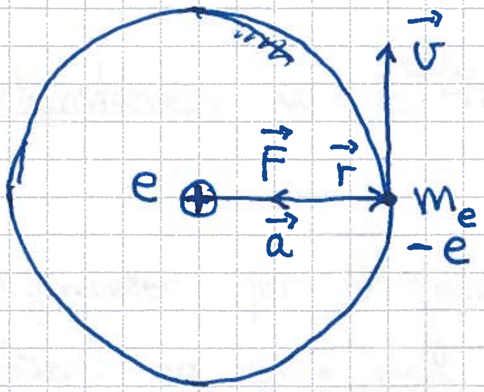
$$E_n = -hcR/n^2 \approx -13.6 \text{ eV}/n^2$$

med $n = 1$ (?), $2, 3, 4, \ldots\ldots$

siden fotonets energi er $h\nu = hc/\lambda$

Så langt er Bohrs modell riktig. De to siste antagelsene er begge feil, men gir riktige energiverdier (!):

- Elektronet går i klassiske sirkelbaner rundt kjernen.
- Elektronets dreieimpuls er kvantisert (riktig!), med mulige verdier $L = |\vec{L}| = n\hbar$; $n = 1, 2, 3, \ldots$; $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ (feil!).



N2, $F = m_e a$, med Coulombs lov, $F = e^2/4\pi\varepsilon_0 r^2$, og $a = v^2/r$ gir $v^2 = e^2/4\pi\varepsilon_0 m_e r$, kin. energi $K = m_e v^2/2 = e^2/8\pi\varepsilon_0 r$, og dermed total energi

$$E = K + V = e^2/8\pi\varepsilon_0 r - e^2/4\pi\varepsilon_0 r = -e^2/8\pi\varepsilon_0 r$$

$$L = |\vec{r} \times \vec{p}| = r m_e v = n\hbar$$

$$\Rightarrow \quad L^2 = r^2 m_e^2 \underbrace{e^2/4\pi\varepsilon_0 m_e r}_{=v^2} = n^2\hbar^2$$

$\Rightarrow$ Sirkelbaner med mulige radier

$$r_n = n^2 \cdot a_0 \qquad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

der $a_0 = 4\pi\varepsilon_0\hbar^2/m_e e^2 \approx 0.529\,\text{Å}$ = <u>Bohr-radien</u>

Mulige energiverdier:

$$E_n = -e^2/8\pi\varepsilon_0 r_n = -\frac{m_e e^4/32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}{n^2} \approx -\frac{13.6\,\text{eV}}{n^2}$$

i tråd med Balmer-formelen.

Vi ser at ikke-relativistisk regning var OK, siden $K_n = |E_n| \ll m_e c^2$ (= elektronets hvileenergi):

$$E_n = -\tfrac{1}{2}\alpha^2 m_e c^2/n^2$$

med <u>finstrukturkonstanten</u> $\alpha = e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar c \approx \frac{1}{137}$

- Riktige energinivåer for H-atomet.
- L <u>er</u> kvantisert og prop. med $\hbar$, men $L = 0$ i grunntilstanden (<u>laveste</u> energitilstand) i H-atomet.
- Fungerte dårlig for andre atomer.
- Ideen om elektronet som klassisk partikkel i baner rundt kjernen måtte forkastes.

Partikkelbølger

Louis de Broglie (1923, NP 1929):

"Hvis lys er både bølger og partikler, må massive partikler være både partikler og bølger!"

For lys gjelder: $E = h\nu$ og $E = pc$

$$\Rightarrow p = E/c = h\nu/c = h/\lambda$$

Dermed, for massive partikler med impuls p og energi E:

$$\boxed{\lambda = \frac{h}{p} \quad ; \quad \nu = \frac{E}{h}}$$ de Broglies hypotese

Termisk de Broglie bølgelengde:

For en ikke-relativistisk ideell gass av partikler med masse m er

$$\langle K_{trans} \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} = \frac{3}{2} k_B T$$

$$\Rightarrow \lambda = \frac{h}{\sqrt{\langle p^2 \rangle}} = \frac{h}{\sqrt{3mk_BT}}$$ = partiklenes termiske de Broglie bølgelengde

Schrödingerligningen [PCH 1-3; DJG 1-2; IØ 1-3]

Erwin Schrödinger [1925, NP 1933 sammen med Paul Dirac; Werner Heisenberg NP 1932] :

Hva slags bølgeligning fungerer for de Broglies partikkelbølger?

Fra klassisk mekanikk og elektromagnetisme :

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

beskriver mek. og EM bølger, med generell løsning på formen $y(x,t) = y(x \pm vt)$, og med y = utsving på streng, avvik fra likevektstrykket i luft, el. felt $\vec{E}$, magnetfelt $\vec{B}$ osv.

Eks: Harmonisk bølge $y(x,t) = A \sin(kx - \omega t)$

med $k = 2\pi/\lambda$, $\omega = 2\pi/T = 2\pi\nu$,

$v = \lambda/T = \lambda\nu = \omega/k$ (fasehastighet),

$v_g = d\omega/dk$ (gruppehastighet)

Ser på fri partikkel, og i første omgang velges potensial $V = 0$ [I QM er "potensial" og "pot. energi" det samme!] :

$\vec{p} = m\vec{v} = mv\,\hat{x}$; $p = mv$

$E = K = p^2/2m$

I følge de Broglie er partikkelens bølgeegenskaper

$\lambda = h/p \Rightarrow k = 2\pi/\lambda = 2\pi p/h = p/\hbar$

$\nu = E/h \Rightarrow \omega = 2\pi\nu = 2\pi E/h = E/\hbar$

Vi prøver en reell, harmonisk bølgefunksjon

$$\Phi(x,t) = \cos(kx - \omega t) = \cos\left(\frac{p}{\hbar}x - \frac{E}{\hbar}t\right)$$

(evt. sinus). Men den klassiske bølgeligning.

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} = v^2 \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2}$$

fungerer ikke; innsetting gir

$$-\left(\frac{E}{\hbar}\right)^2 \Phi = -v^2 \left(\frac{p}{\hbar}\right)^2 \Phi$$

som med $v = p/m$ gir $E = K = p^2/m$, mens vi som kjent skal ha $K = p^2/2m$.

Vi ser at $\partial\Phi/\partial t$ og $\partial^2\Phi/\partial x^2$ kombinert med passende konstanter kan gi $E = K$ på en side og $p^2/2m$ på den andre siden. Problemet med dette er at $\frac{\partial}{\partial t}\cos(\ldots)$ gir $\sin(\ldots)$ mens $\frac{\partial^2}{\partial x^2}\cos(\ldots)$ gir $\cos(\ldots)$.

Det som fungerer perfekt er den komplekse kombinasjonen

$$\Psi(x,t) = e^{i(px - Et)/\hbar} = \cos\left(\frac{px - Et}{\hbar}\right) + i \sin\left(\frac{px - Et}{\hbar}\right)$$

fordi

$$i\hbar\, \partial\Psi/\partial t = i\hbar \cdot \left(\frac{-iE}{\hbar}\right)\Psi = E\Psi \quad \text{og}$$

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

Vi gjør derfor som Schrödinger og satser på bølgeligningen

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

som er Schrödingerligningen (SL) for en fri partikkel med masse m, impuls $\vec{p} = p\hat{x}$ og energi $E = K = p^2/2m$ (siden vi valgte $V=0$).

Kommentarer:

- SL er den enkleste diff.lign. (men ikke den eneste) som fungerer. SL fungerer også for $V = V_0 \neq 0$, og til og med for $V \neq$ konst.

- Må ha komplekse løsninger: Reell Ψ gir reell $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$ og imaginær $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$, ikke mulig.

- Målbare fysiske størrelser er reelle. Ψ kan derfor ikke være direkte målbar.