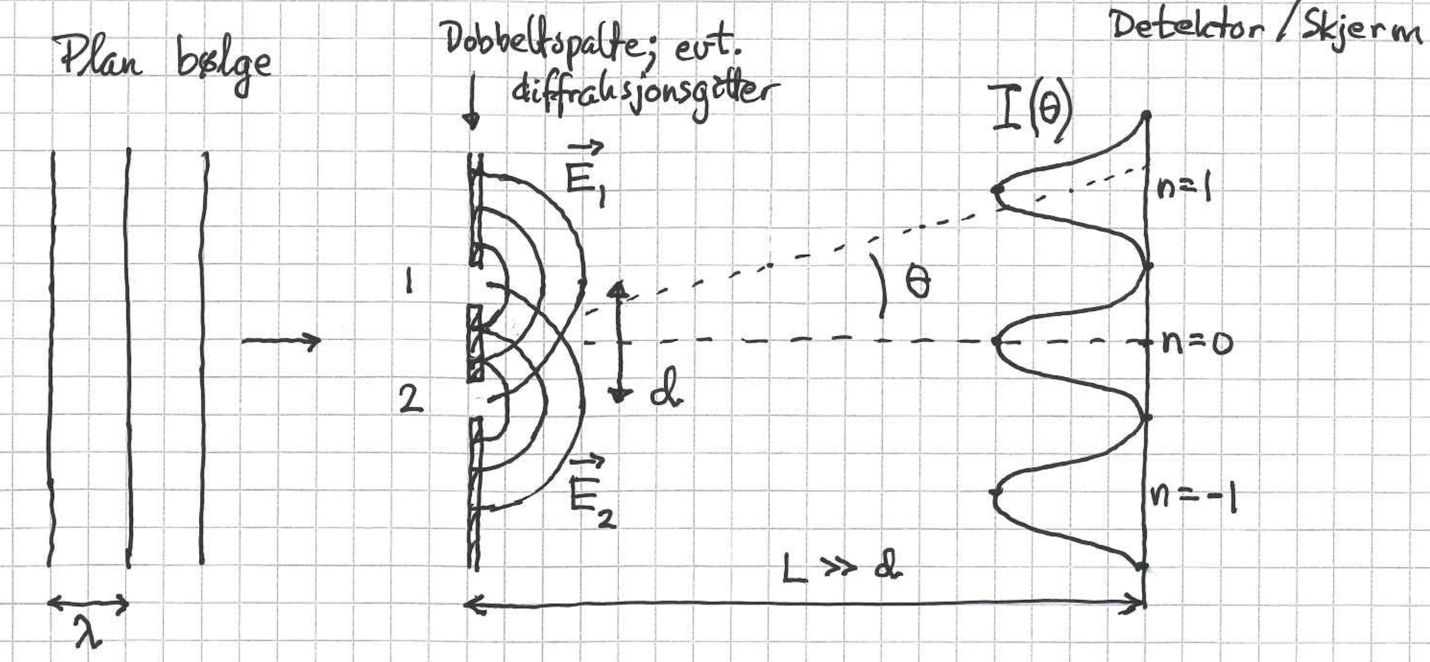
Analogi med EM bølger / fotoner:



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

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

Konstruktiv interferens når veilengdeforskjellen $d \sin\theta = n \cdot \lambda$:

$$\vec{E}_2 \approx \vec{E}_1 \quad ; \quad I \sim 4E_1^2$$

Destruktiv interferens når $d \sin\theta = (n + 1/2)\lambda$:

$$\vec{E}_2 \approx -\vec{E}_1 \quad ; \quad I \approx 0$$

Hvis ett og ett foton sendes inn mot dobbeltspalten, får vi tilfeldige treffpunkter på skjermen; etter mange fotontreff avtegnes interferensmønsteret $I(\theta)$.

Tolkning: $|\vec{E}(\vec{r}, t)|^2$ representerer sannsynlighetsfordelingen for hvor (og når) et gitt foton vil treffe på skjermen.

Tilsvarende exp. med massive partikler gir tilsvarende interferensresultater. Da er det naturlig å fastslå at $|\Psi(\vec{r},t)|^2$ repr. sanns. fordelingen for hvor (og når) en gitt partikkel vil treffe på skjermen. Et treff i pos. $\vec{r}$ ved tid t er en måling av partikkelens posisjon ved tid t.

Bølgepakker

Et problem med en plan bølge, med skarp impuls p, er at den ikke er normerbar (på "normalt" vis):

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

Hvis vi ønsker å lokalisere en fri partikkel til et avgrenset område, må vi tillate et visst slingringsmonn i impulsen p (og dermed energien E). Dette får vi til med en bølgepakke,

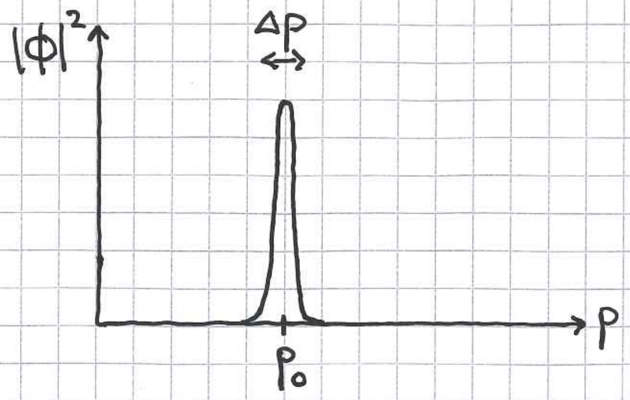
$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p)\, e^{i(px-Et)/\hbar}\, dp$$

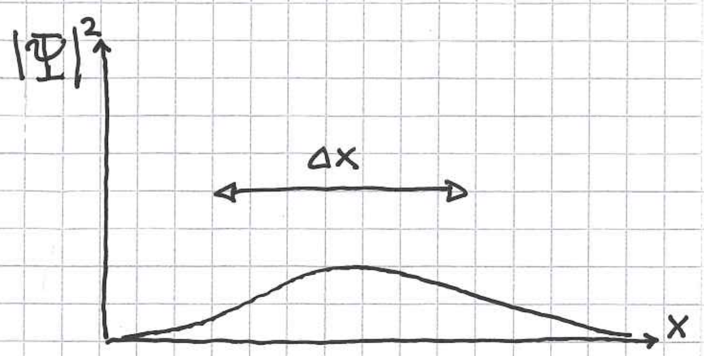
dvs en sum av plane bølger med ulike impulser, der $\phi(p)$ repr. andelen av $\Psi(x,t)$ med impuls p, og $|\phi(p)|^2$ repr. sannsynlighetstettheten i impulsrommet.

Vi ser at $\Psi(x,0)$ er fouriertransformen av $\phi(p)$, og omvendt.

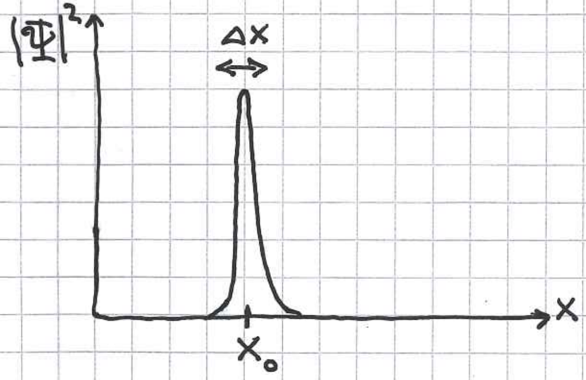
Smal $\Phi(p)$ gir bred $\Psi(x,0)$, og omvendt.

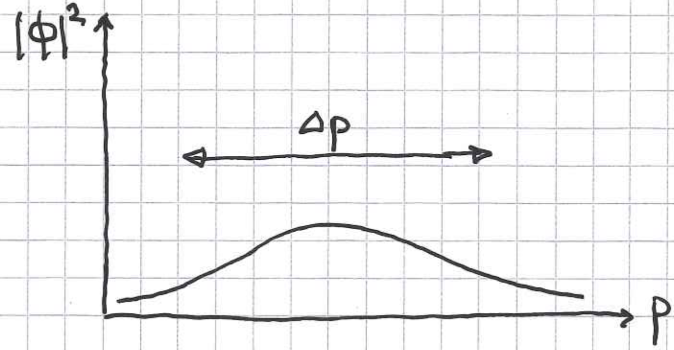
Partikkel med forholdsvis veldefinert impuls:





Med veldefinert posisjon (ved f.eks. $t=0$):





Senere skal vi vise at vi alltid har

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

Heisenbergs uskarphetsrelasjon

Operator. Egenfunksjon. Egenverdi

Hvis en operator $\hat{A}$ virker på funksjonen $f(x)$, og resultatet blir samme funksjon $f(x)$ ganget med en konstant A, dvs

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

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

Eksempler:

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

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

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

  $\Rightarrow e^{ipx/\hbar}$ er en egenfunk. til $\frac{\partial}{\partial x}$, med egenverdi $\frac{ip}{\hbar}$

- $\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} e^{ipx/\hbar} = p\, e^{ipx/\hbar}$

  $\Rightarrow e^{ipx/\hbar}$ er egenf. til $\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$ med egenv. p

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

dvs: planbølgen som beskriver fri partikkel med impuls p er egenf. til oper. $\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$ med egenv. p

Da velger vi å kalle dette en impulsoperator:

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

For fri partikkel og $V = 0$:

$$E(p) = K(p) = \frac{p^2}{2m}$$

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

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

som også har planbølger som egenfunksjoner;

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

med nettopp kin. energi $K = p^2/2m$ som egenverdi.

Kaller da $\hat{K} = \hat{p}^2/2m = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ oper. for kin. energi.
Med $V = 0$ er dette også oper. for total energi.

Terminologi:
I klassisk mekanikk kalles energifunksjonen gjerne Hamiltonfunksjonen.

I kvantemek. kalles energioper. dermed <u>Hamiltonoperatoren</u>, $\hat{H}$.

Fri partikkel, $V = 0$, i 1D: $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$

I 3D; med $\vec{\hat{p}} = \frac{\hbar}{i}\nabla$: $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$

Fri partikkel med $V = V_0 \neq 0$ $(\vec{F} = -\nabla V = 0)$:

$$E = K + V = \frac{p^2}{2m} + V_0$$

Planbølgen $e^{i(px - Et)/\hbar}$ er egenf. til $\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + V_0$ med egenv. $E = p^2/2m + V_0$; dvs triviell endring, som forventet; nullpunkt for V velges fritt.

Med $V = V(x)$ (evt. $V(\vec{r})$ i 3D) er $\vec{F} \neq 0$ og $\vec{p}$ er ikke lenger skarp (veldefinert).

Schrödinger satset på samme diff. ligning, som viste seg å fungere.

SL i 1D:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) = \hat{H}\Psi(x,t)$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

SL i 3D:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r},t) = \hat{H}\Psi(\vec{r},t)$$

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

Stasjonære tilstander og tidsuavhengig Schrödingerligning

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

I TFY4215 ser vi kun på systemer der V er tidsuavhengig. Da har SL produktløsninger,

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

[Ψ : \Psi
ψ : \psi]

som etter innsetting og divisjon med Ψ gir

$$\frac{i\hbar\, \partial T/\partial t}{T} = \frac{\hat{H}\psi}{\psi} = E = \text{konstant}$$

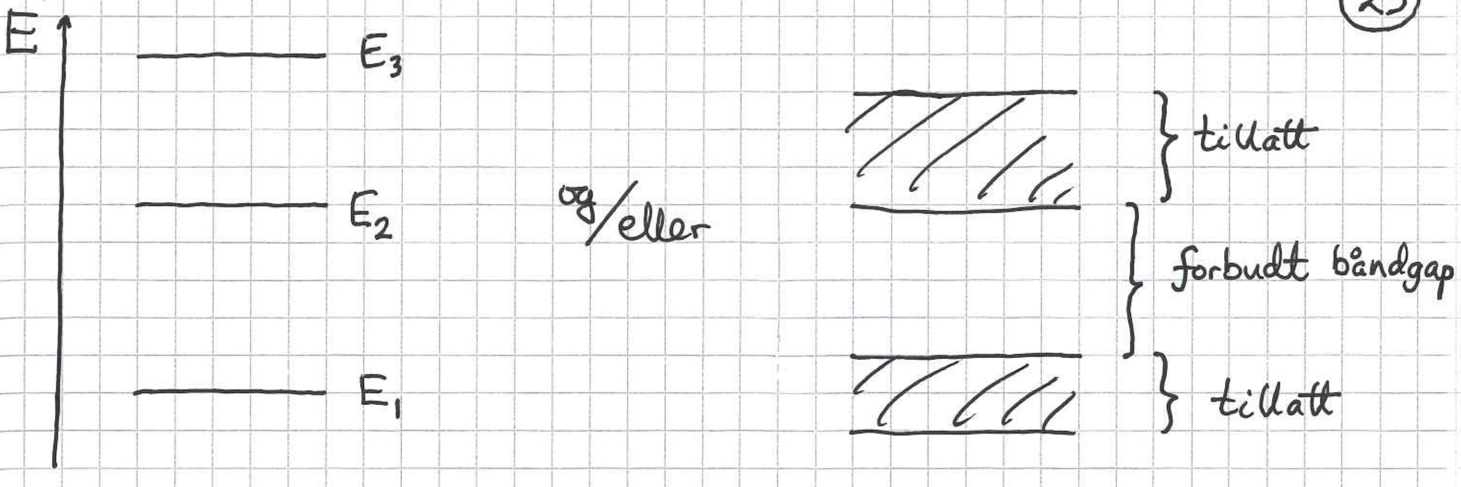
dvs $dT/T = E\,dt/i\hbar \quad \Rightarrow \quad \boxed{T(t) = e^{-iEt/\hbar}}$

og $\boxed{\hat{H}\psi = E\psi}$ som er TUSL (i 1D)

Da er $\Psi(x,t) = \psi(x) \cdot \exp(-iEt/\hbar)$ en stasjonær tilstand der sanns.tettheten $|\Psi|^2 = |\psi(x)|^2$ er uavhengig av tiden t.

Siden $\hat{H}$ er operator for partikkelens totale energi, tolker vi de tilhørende egenverdiene E som partikkelens mulige (tillatte) energier, og egenfunksjonene ψ som partikkelens mulige (tillatte) tilstander; mer presist den romlige delen av den totale tilstanden $\Psi(x,t)$.

TUSL kan generelt ha diskrete egenverdier $E_1, E_2, E_3, \ldots$ (endelig eller uendelig mange), og/eller et eller flere kontinuerlige energiintervaller (energibånd) der alle verdier av E er tillatt.



diskret spektrum — kontinuerlige energibånd

SL og TUSL er <u>lineære</u> ligninger. <u>Generell</u> løsning er da en vilkårlig lineærkombinasjon av stasjonære løsninger:

$$\Psi(x,t) = \sum_n c_n \psi_n(x)\, e^{-iE_n t/\hbar} + \int c_E\, \psi_E(x)\, e^{-iEt/\hbar}\, dE$$

Hvis to eller flere ulike E-verdier bidrar, er $|\Psi|^2$ ikke lenger tidsuavhengig; da er $\Psi(x,t)$ ikke stasjonær.