Institutt for fysikk, NTNU
FY1013 Elektrisitet og magnetisme II
Høst 2005

Lynkurs i kvantemekanikk, med anvendelser i faststoff-fysikk.

Schrödingerligningen

I et system der kreftene som virker er konservative, er total energi E bevart. I klassisk mekanikk uttrykkes dette ved

$$T + U = E$$

der

$$\begin{aligned}
T &= \text{kinetisk energi} = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} \\
(\boldsymbol{p} &= m\boldsymbol{v} = \text{impuls (bevegelsesmengde)}) \\
U &= \text{potensiell energi} \\
E &= \text{total energi}
\end{aligned}$$

Overgangen til en *kvantemekanisk* beskrivelse gjøres ved at

1. impulsen $\boldsymbol{p}$ erstattes med en "operator":

   $$\boldsymbol{p} \to -i\hbar\nabla$$

   der

   $$\begin{aligned}
   i &= \sqrt{-1} \\
   \hbar &= \frac{h}{2\pi} = 1.05 \cdot 10^{-34}\ \text{Js}\ \ (\text{Planck's konstant}) \\
   \nabla &= \hat{x}\frac{\partial}{\partial x} + \hat{y}\frac{\partial}{\partial y} + \hat{z}\frac{\partial}{\partial z}
   \end{aligned}$$

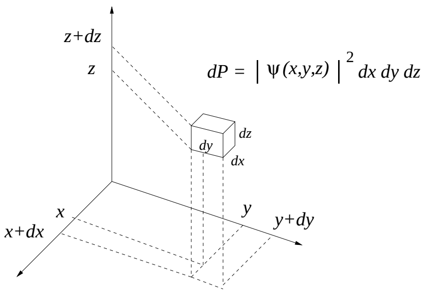
   Dermed blir også kinetisk energi en operator:

   $$T = \frac{p^2}{2m} \to -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$$

2. ligningen som beskriver energibevarelse erstattes av en differensialligning:

   $$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{r}) + U(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r}),$$

$$\psi(x) = e^{ikx}$$



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

Faste stoffer (krystaller): Energibånd. Halvledere.