

Interferens med partikler

(21)

Louis de Broglie (1892-1987):

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

(1923/24 ; NP 1929)

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

$$\Rightarrow p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$$

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

$$\boxed{\lambda = \frac{h}{p}, \quad \nu = \frac{E}{h}}$$

de Broglies
hypotese

For en ikke-relativistisk ideel gass av atomer eller molekyler har vi

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

$$\Rightarrow \lambda = \frac{h}{\sqrt{3mk_B T}} = \text{partiklens termiske de Broglie bølgelengde}$$

Noen exp. som viser partiklers bølgeegenskaper :

Davisson & Germer 1927 : Diffraksjon av elektroner mot Ni-krystall.

[Davisson, G. P. Thomson NP 1937]

C. Jönsson. 1961 : Dobbeltspalteforsøk med elektroner.

Tonomura et al 1989 : Interferensmønster selv med ett og ett elektron mot dobbeltspalte.

Zeilinger et al 2003 : Interferens med ett og ett C_{60} -molekyl mot diffraksjonsgitter.

Arndt et al 2015 : Interferens med $C_{168}H_{94}F_{152}O_8N_4S_4$ - molekyler.

Schrödingerligningen [YF40]

(23)

Erwin Schrödinger (1925 ; NP1933 med Paul Dirac ; Werner Heisenberg fikk NP i 1932):

"Hva slags bølgeligning kan fungere for de Broglies partikkelbølger?"

Vi rekapitulerer fra mekanikk og elmag:
Bølgelign. som beskriver mekaniske og EM bølger er

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 y}{\partial t^2}$$

evt, i 3D,

$$\nabla^2 y = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} ; \quad \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

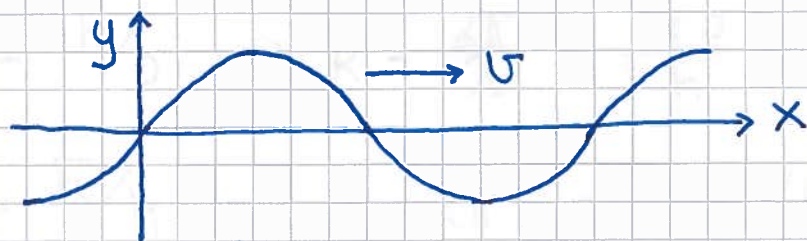
med løsninger på formen

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

Her kan y være: utsving på en streng, avvik fra likevektstrykket i luft, elektrisk felt $\vec{E}$, magnetfelt $\vec{B}$ osv.

Eks: Harmonisk bølge

$$y(x,t) = A \sin(kx - \omega t)$$



$k = 2\pi/\lambda$ = bølgetallet ; λ = bølgelengden

$\omega = 2\pi/T = 2\pi\nu$ = vinkelfrekvensen ; T = perioden

$v = \lambda/T = \lambda\nu = \omega/k$ = fasehastigheten

$v_g = d\omega/dk$ = gruppehastigheten

Vi ser på enkleste mulige eksempel :

Fri partikkel med veldefinert fart i x-retning.

$$\vec{v} = v \hat{x}$$

$$\vec{p} = m\vec{v} = mv \hat{x} = \text{impuls}$$

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

(der vi har valgt pot. energi $V=0$)

I følge de Broglie har partikkelen bølgeegenskaper:

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

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

Så vi prøver å beskrive partikkelbølgen med bølgefunksjonen

$$\Phi(x, t) = \cos\left(\frac{p}{\hbar}x - \frac{E}{\hbar}t\right) ; \text{ evt sinus.}$$

Kan vi finne en noenlunde enkel bølgeligning som har slike løsninger, og som samtidig er konsistent med at $E = p^2/2m$?

Derivasjon (husk kjerneregel!) 2 ganger mhp x og 1 gang mhp t "trekker ut" hhv faktorer prop. med p^2 og E og går nesten bra. Men:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Phi = -\left(\frac{p}{\hbar}\right)^2 \cos\left(\frac{px}{\hbar} - \frac{Et}{\hbar}\right)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \Phi = \left(\frac{E}{\hbar}\right) \sin\left(\frac{px}{\hbar} - \frac{Et}{\hbar}\right)$$

Forsøk på å kombinere disse til en ligning på formen

(26)

$$(p^2/2m - E) \cdot (\text{en funksjon av } x \text{ og } t) = 0$$

lykkes ikke. Men vi vet at derivasjon av exp-funksjonen gir samme funksjon tilbake. Kombinasjonen

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

bør derfor gå bedre.

Dette er Eulers formel, og vi kaller gjerne funksjonen $\exp[i(px - Et)/\hbar]$ for en plan bølge.

Her er $i = \sqrt{-1}$, slik at $i^2 = -1$.

Se notatet "Matematikk: Komplekse tall".

Vi prøver med bølgefunksjonen

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

som gir

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

slik at

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) = \frac{p^2}{2m} \Psi(x, t)$$

Videre er

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar} \Psi$$

slik at

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

Husk at vi her har antatt en fri partikkel og valgt $V=0$, slik at $E=K=p^2/2m$.

Da kan vi skrive $E\Psi = \frac{p^2}{2m} \Psi$, eller

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t)} \quad \begin{matrix} \text{SL i} \\ \text{1D} \end{matrix}$$

som er selveste Schrödingerligningen, for en fri partikkel i én dimensjon (1D).

Merknader:

- SL er den enkøste diff. ligning som oppfylles av plane de Broglie-bølger for en ikke-relativistisk (dvs $v \ll c$, slik at $K = p^2/2m$) fri partikkel.
- SL viser seg å fungere i praksis, også for $V = \text{konstant} \neq 0$, og til og med for $V \neq \text{konstant}$, dvs $V(x)$, evt $V(\vec{r})$ i 3D.
- Vi må ha komplekse løsninger av SL.
 Reell Ψ gir reell "høyreside" $(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2})$
 og imaginær "venstreside" $(i\hbar \partial \Psi / \partial t)$,
 og det er ikke mulig.
- Målbare fysiske størrelser er reelle.
 Dermed kan bølgefunksjonen Ψ
ikke være en direkte målbar størrelse.

Tolkning av bølgefunksjonen:

(29)

Max Born (1926, NP 1954) foreslo en statistisk tolkning,

$dP = |\Psi(x,t)|^2 dx$ = sannsynligheten for å finne partikkelen (som beskrives av Ψ) mellom x og $x+dx$ dersom dens posisjon måles ved tidspunktet t

Da blir $|\Psi(x,t)|^2 = dP/dx$, dvs sannsynligheten pr lengdeenhet, eller sannsynlighetstettheten.

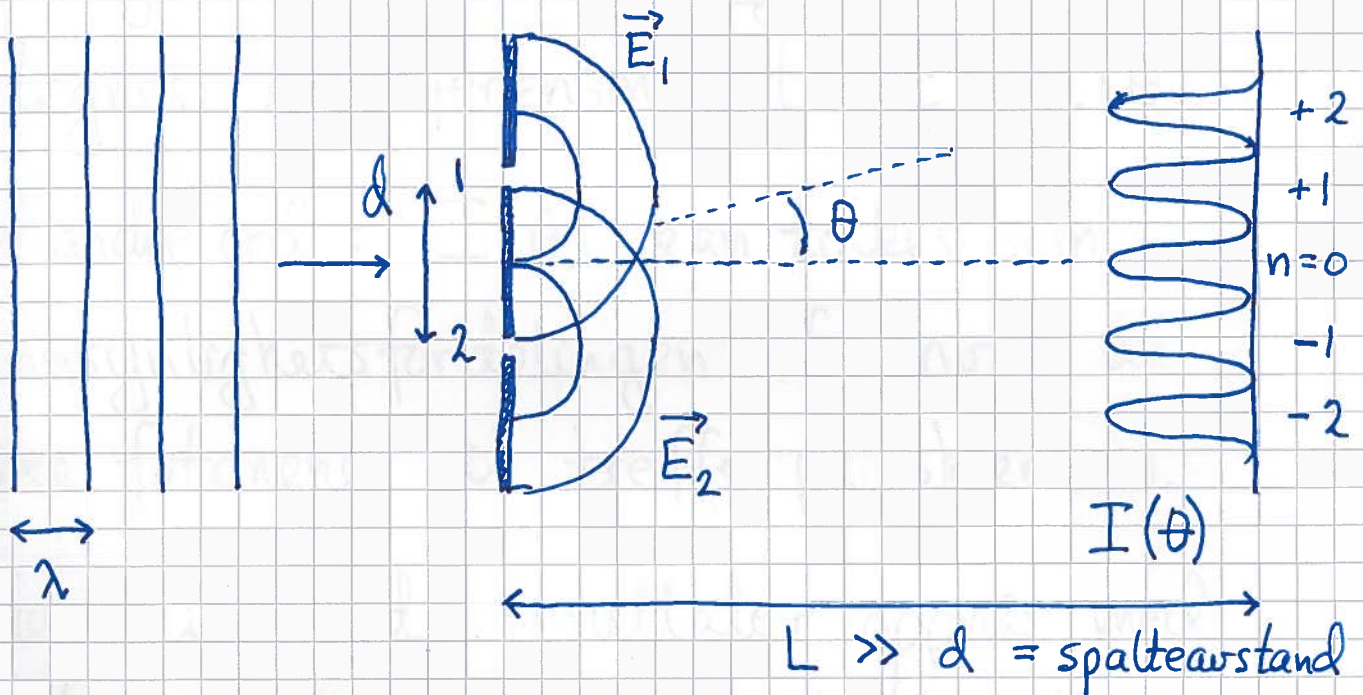
Normering av sannsynlighet:

Et eller annet sted må partikkelen være, til enhver tid, slik at $\int dP = 1$. Dvs

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

Begrunnelse for en slik tolkning av Ψ : (30)

Ser på plan EM-bølge inn mot vegg med to smale åpne spalter (T. Young 1801).



Total bølge som treffer 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, til skjerm fra 1 og 2:

$$\Delta r = d \sin \theta$$

$\Rightarrow$ Konstruktiv interferens når $d \sin \theta = n\lambda$;

da er $\vec{E}_2 \approx (+1)\vec{E}_1$ og $I \sim 4E_1^2$

Destruktiv interferens når $d \sin \theta = (n + \frac{1}{2})\lambda$;

da er $\vec{E}_2 \approx -\vec{E}_1$ og $I \approx 0$

Men lys er også partikler (fotoner): (31)

Hvis ett og ett foton sendes mot dobbeltspalten, får vi tilsynelatende tilfeldige treffsteder på skjermen. Etter mange fotoner avtegnes interferensmønsteret $I(\theta)$.

Med andre ord: $I(\theta)$ kan tolkes som sannsynlighetsfordelingen for hvor de ulike fotonene vil treffe på skjermen.

Siden tilsvarende resultater oppnås med elektroner inn mot en dobbeltspalte

(jf. Tonomura et al, Am J. Phys 57, 117 (1989)), blir det naturlig å tolke $|\Psi(x,t)|^2$ som en sannsynlighetsfordeling for hvor en vil finne elektronet ved tidspunkt t .

Bølgepakker:

Planbølge med veldefinert ("skarp")

impuls p , $\Psi(x,t) = \exp[i(px - Et)/\hbar]$,
er ikke normerbar, fordi

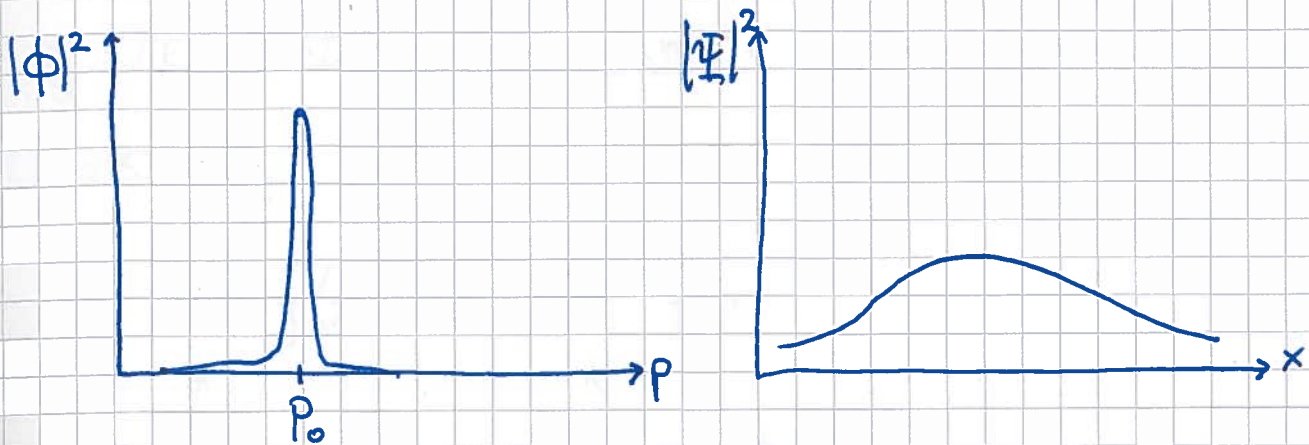
$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} 1 \cdot dx = \infty$$

Vi kan "lokalisere" partikkelen, og normere sannsynligheten, ved å beskrive partikkelen med en sum av planbølger med ulike impulser, dvs en bølgepakke:

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

Her tolker vi $\phi(p)$ som andelen av $\Psi(x,t)$ som har impuls p , slik at $|\phi(p)|^2 dp$ blir sannsynligheten for at en måling av partikkelens impuls vil gi resultat mellom p og $p+dp$.

Dersom $|\phi(p)|^2$ er smal, vil $|\Psi(x,t)|^2$ (33)
være bred, og omvendt. F.eks slik:



Hvis Δp og Δx er hhv "uskarpheten"
i partikkelens impuls og posisjon,
skal vi senere se at vi alltid har

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

som er Heisenbergs uskarphetsrelasjon.

Operator. Egenfunksjon. Egenverdi

Hvis en operator virker på en funksjon $f(x)$, og resultatet blir samme $f(x)$ ganget med en konstant, dvs

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

$\uparrow$ operator $\uparrow$ konstant

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

Eks:

- $\frac{\partial}{\partial x} \cos(px/\hbar) = -(p/\hbar) \sin(px/\hbar)$
 $\Rightarrow \cos(px/\hbar)$ er ikke egenf. til oper. $\partial/\partial x$
- $\frac{\partial}{\partial x} \exp(ipx/\hbar) = (ip/\hbar) \exp(ipx/\hbar)$
 $\Rightarrow \exp(ipx/\hbar)$ er egenf. til $\partial/\partial x$,
 med egenv. $ip/\hbar$
- $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \exp(ipx/\hbar) = p \exp(ipx/\hbar)$
 $\Rightarrow \exp(ipx/\hbar)$ er egenf. til $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ med egenv. p

$\Rightarrow$ 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.

Og vi ser at $\exp(ipx/\hbar)$, og dermed også den plane bølge.

$$\Psi(x,t) = \exp(ipx/\hbar - iEt/\hbar)$$

er egenfunksjon til $\hat{p}$ med egenverdi p .

La oss ta for oss energien, først for en fri partikkel med $V=0$, slik at

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

Det er da rimelig å kalle operatoren

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

en energioperator, mer presist en oper. for kin. energi.

I klassisk mekanikk kalles energien, eller funksjonen som beskriver energien, gjerne Hamiltonfunksjonen H .

I QM (kr.mek.) kaller vi derfor oper. for energi Hamiltonoperatoren $\hat{H}$.

For fri partikkel, med $V=0$: $\hat{H} = \hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$

Fri part., med $V=V_0 \neq 0$:

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

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{V} = \hat{K} + V \quad (\hat{V} = V)$$

$$= \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + V = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0$$

Hva med $V \neq \text{konst.}$? Dvs $F = -\frac{dV}{dx} \neq 0$?

Schrödinger satset på samme ligning, dvs

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

som er SL i 1D, og som fungerer!

$$[3D: \hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i} \nabla ; V(x) \rightarrow V(\vec{r}) ; \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r})]$$