

Så, hva slags bølgeligning kan beskrive partikkelbølger?

(23)

Ser først på fri partikkel med masse m i konstant potensial $V=0$.

[Fri partikkel: $\vec{F}=0$, dvs $V=\text{konstant}$, f.eks. $V=0$]

Anta fart i pos. x -retning, $\vec{p}=m\vec{v}=mv\hat{x}=\text{impulsen}$.

Energien: $E=K=\frac{1}{2}mv^2=p^2/2m$

Ifølge de Broglie:

$$\lambda = \frac{h}{p} \Rightarrow k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi p}{h} = \frac{p}{\hbar} \quad (\hbar = \frac{h}{2\pi})$$

$$\nu = \frac{E}{h} \Rightarrow \omega = 2\pi\nu = \frac{2\pi E}{h} = \frac{E}{\hbar}$$

Med skarp (dvs veldefinert) λ og ν er det naturlig å anta en harmonisk bølgeløsning

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

En passende bølgeligning finner vi "ved inspeksjon":

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = i\hbar \cdot \left(-\frac{iE}{\hbar}\right) \cdot \Psi = E\Psi \quad (-i^2 = 1)$$

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

Etersom $E=p^2/2m$, er det naturlig å sette på bølgeligningen

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

for en fri partikkel med masse m i potensialet $V=0$.

(24)

Fra klassisk mekanikk: Valget av nullpunkt for potensialet V er uten fysisk betydning.

$\Rightarrow$ Fri partikkel i potensialet $V = V_0 = \text{konstant}$ må kunne beskrives med samme planbølge

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

Vi deriverer igjen mhp t og x for å finne en passende bølgeligning:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = E\Psi = (K+V)\Psi = \left(\frac{p^2}{2m} + V_0\right)\Psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{p^2}{2m} \Psi$$

Dermed naturlig å satse på bølgeligningen

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0\right) \Psi$$

Hvis $\vec{F} \neq 0$ er $V(x)$ [evt. $V(\vec{r})$] ikke konstant, og $\vec{p}$ er ikke lenger konstant; $d\vec{p}/dt = \vec{F} \neq 0$.

Schrödinger satset likevel på samme bølgeligning,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right] \Psi(x,t)$$

som er Schrödingerligningen, i en romlig dimensjon.

[Generalisering til 3D:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r})\right] \Psi(\vec{r},t)$$

med $\nabla^2 = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$

Tolkning av bølgefunksjonen [OS 7.1; YF 40.1] (25)

Hvis Ψ er en reell funksjon, blir venstre side i SL imaginær og høyre side reell. (Og omvendt hvis Ψ er rent imaginær.)

Dermed: Ψ må være en kompleks funksjon hvis den skal være løsning av SL.

Målbare fysiske størrelser er reelle.

Derfor kan Ψ ikke være direkte målbare.

Max Born (1926, NP1954):

$\Delta P = |\Psi(x, t)|^2 \Delta x$ = sannsynligheten for å finne partikkelen mellom x og $x + \Delta x$ ved tid t .

Dvs: $|\Psi(x, t)|^2 = \Delta P / \Delta x$ = sanns. pr lengdeenhet

Normering av sannsynlighet:

Et eller annet sted må partikkelen være, slik at

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

Borns tolkning kan begrunnes ved å sammenligne fotoner og elektroner sendt gjennom et diffraksjonsgitter. Med mange spalter N gir begge eksperimenter interferens, med høy intensitet i retninger bestemt av $d \sin \theta = n\lambda$ ($n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ d = spalteavstand, θ = avbøyingsvinkel).

(26)

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

Elektroner : $I \sim |\Psi|^2 = |\Psi_1 + \Psi_2 + \dots + \Psi_N|^2$

$\Rightarrow$ Vi kan tolke $|\vec{E}|^2$ og $|\Psi|^2$ som uttrykk for sannsynligheten for hvor hvor et gitt foton og et gitt elektron vil treffe detektoren.

Bølgepakker og uskarphet [OS 7.2; YF 40.1]

Planbølge for partikkel med helt skarp impuls p er ikke normerbar:

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

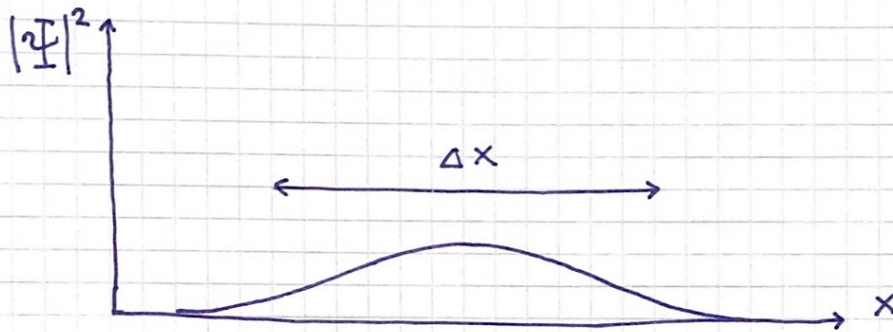
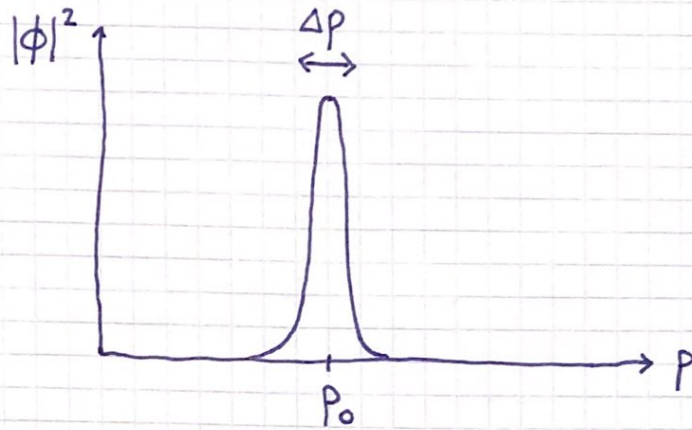
For å lokalisere partikkelen må vi lage en bølgepakke,

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

dvs en sum av plane bølger med ulike impulser, der $|\phi(p)|^2 dp$ angir sannsynligheten for at en måling av partikkelens impuls gir en verdi mellom p og $p + dp$.

(27)

Smal impulsfordeling $|\phi(p)|^2$ gir bred
romlig fordeling $|\Psi(x,t)|^2$, og omvendt:



Heisenbergs uskarphetsrelasjon:

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$