

Schrödingerligningen

(53)

Erwin Schrödinger 1925, NP 1933 delt med Paul Dirac.

Hva slags bølgeligning kan beskrive de Broglies partikkelbølger?

Ser først på fri partikkel med masse m , og potensial (= pot. energi i QM) $V=0$:

$$E = K = \frac{1}{2} m v^2 = p^2 / 2m$$

de Broglie:

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

$$f = E/h \Rightarrow \omega = 2\pi f = 2\pi E/h = E/h$$

Med skarpe (veldefinerte, presise) verdier for λ og f er det rimelig å prøve en harmonisk bølgeløsning

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

[Reelle løsninger $\sin(kx - \omega t)$ eller $\cos(kx - \omega t)$ vil vise seg å ikke fungere.]

En passende partiell difflikning finner vi nå ved inspeksjon:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = i\hbar \cdot (-iE/\hbar) \Psi = E \Psi$$

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

Dvs, bølgeligningen

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

ser lovende ut, for fri partikkel i potensial $V=0$.

Vi vet at valget av nullpunkt for V er uten fysisk (54) betydning. Da bør samme planbølge $\Psi(x,t) = \exp[i(px - Et)/\hbar]$ fungere like bra med konstant potensial $V_0 \neq 0$:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = E\Psi = (K + V_0)\Psi$$

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

Siden $K = p^2/2m$, satser vi nå på bølgeligningen

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

Dersom potensialet $V(\vec{r})$ ikke er konstant, virker det en kraft $\vec{F} = -\nabla V$ på massen (partikkelen), og impulsen $\vec{p}$ er ikke lenger skarp (konstant).

Schrödinger satset likevel på samme ligning,

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

som er Schrödingerligningen, generalisert til 3 romlige dimensjoner, og som viser seg å fungere.

Merk:

- Løsninger $\Psi(\vec{r}, t)$ må være komplekse funksjoner.
- Målbare fysiske størrelser er reelle.
- Bølgefunksjonen Ψ kan derfor ikke være direkte målbar.

Tolkning av bølgefunksjonen

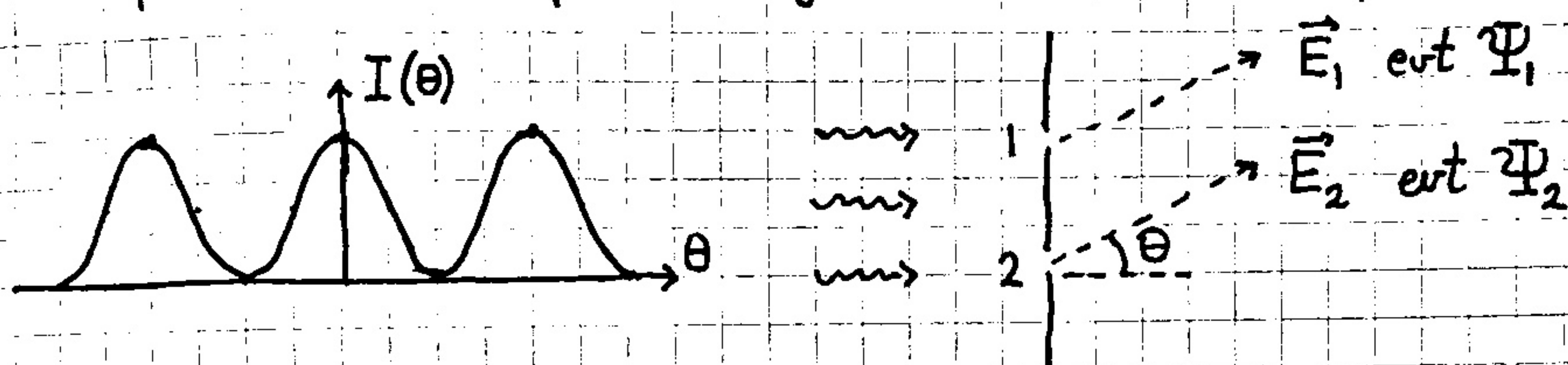
(55)

Max Born 1926, NP 1954:

$\Delta P = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \Delta V$ er sannsynligheten for å måle at partikkelens posisjon er innenfor et volum ΔV omkring $\vec{r}$ ved tidspunktet t . Dvs, $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$ er sanns. pr volumenhet, eller sanns. tettheten. En posisjonsmåling må gi en eller annen verdi, slik at

$$\int_{\text{hele rommet}} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r = 1 ; \text{ normering av sannsynlighet}$$

Begrunnelse: Dobbeltspalteforsøk med fotoner/EM-bølger eller elektroner/partikkelbølger gir i begge tilfeller et interferensmønster på en skjerm/detektor bak spaltene.



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

Med elektroner: $I \sim |\Psi|^2 = |\Psi_1 + \Psi_2|^2$

Med lav intensitet vil en og en partikkel treffe detektoren på tilsynelatende tilfeldige steder, men når mange partikler har truffet detektoren, framstår interferensmønsteret $I(\theta)$.

Dermed kan hhv $|\vec{E}|^2$ og $|\Psi|^2$ tolkes som sanns. fordelingene for hvor et foton og et elektron vil treffe detektoren.

Ref: V. Jacques et al, arxiv.org/abs/quant-ph/0610241

A. Tonomura et al, Am J Phys 57, 117 (1989)

Bølgepakker og uskarphet

Som for klassiske bølger: Skarp impuls betyr uendelig romlig utstrekning, og dermed problemer med normering av sannsynlighet:

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

Romlig lokalisering og normerbarhet oppnås med en bølgepakke:

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

dvs en sum av plane bølger med amplitude $\phi(p)dp$.

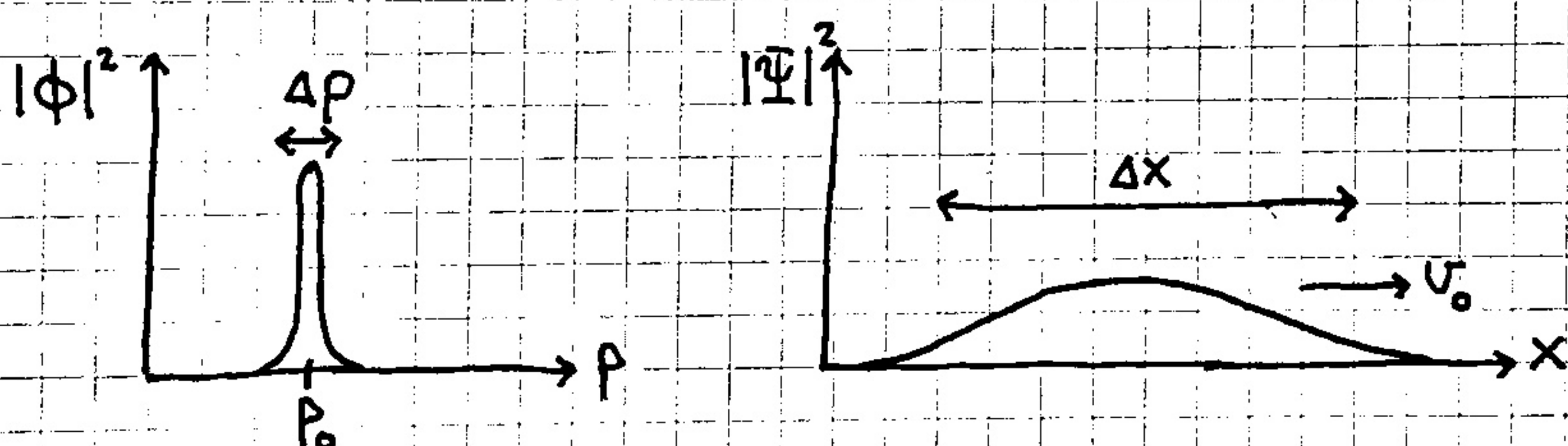
Ved $t=0$:

$$\Psi(x,0) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p) e^{ipx/\hbar} dp$$

$$\phi(p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x,0) e^{-ipx/\hbar} dx$$

TMA4130

En smal $|\phi(p)|^2$ gir en bred $|\Psi(x)|^2$, og omvendt.



Heisenbergs uskarphetsrelasjon: $\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2$

Bølgepakken $\Psi(x,t)$ beveger seg med gruppefarten:

$$v_g = (d\omega/dk)_0 = (dK/dp)_0 = p_0/m = v_0$$

mens fasefarten $v_f = \omega/k = E/p = p/2m + V/p$

ikke kan tillegges fysisk betydning. Den ikke-lineære dispersjonen resulterer i (generelt) at Δx øker med tiden.