Noter til KM1 på KU (Kvantemekanik 1)

af Nikolai Plambech Nielsen, LPK331. Version 1.0

Indhold

Introduktion

Fundamentale ligninger

Schrödingerligningen	$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = H\Psi$
Tidsuafhængige Schrödingerligning	$H\psi = E\psi, \quad \Psi = \psi e^{-iEt/\hbar}$
Hamiltonoperator	$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V$
Impulsoperator	$\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$
Tidsafhængighed af forventningsværdi	$\frac{d\langle Q\rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\langle[H,Q]\rangle + \left\langle\frac{\partial Q}{\partial t}\right\rangle$
Generaliseret usikkerhedsrelation	$\sigma_A\sigma_B \geq \left\lvert\frac{1}{2i}\langle[A,B]\rangle\right\rvert$
Heisenbergs usikkerhedsrelation	$\sigma_x\sigma_p \geq \hbar/2$
Kanonisk kommutator	$[x,p] = i\hbar$
Angulært moment	$[L_x,L_y] = i\hbar L_z, \quad [L_y,L_z] = i\hbar L_x, \quad [L_z,L_x] = i\hbar L_y$
Paulimatricer	$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

Fundamentale konstante

Plancks (reducerede) konstant	$\hbar = h/2\pi$	$=$	$1.05457 \cdot 10^{-34}$ J s
		$=$	$6.58212 \cdot 10^{-16}$ eV s
Plancks oprindelige konstant	h	$=$	$6.62607 \cdot 10^{-34}$ J s
		$=$	$4.13567 \cdot 10^{-15}$ eV s
Lysets hastighed	c	$=$	$2.99792 \cdot 10^{8}$ m/s
Elektronmasse	m_e	$=$	$9.10938 \cdot 10^{-31}$ kg
Protonmasse	m_p	$=$	$1.67262 \cdot 10^{-27}$ kg
Elementarladning	e	$=$	$1.60218 \cdot 10^{-19}$ C
Vakuumpermitivitet	ϵ_0	$=$	$8.85419 \cdot 10^{-12}$ C^2/ J m
Boltzmannkonstanten	k_B	$=$	$1.38065 \cdot 10^{-23}$ J/K
Elektronvolt	$1\ \mathrm{eV} = e \cdot 1\ \mathrm{V}$	$=$	$1.60218 \cdot 10^{-19}$ J

Hydrogenatomet

Finstrukturkonstanten	α	$=$	$\dfrac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}$	$=$	$1/137.036$
Bohrradius	a	$=$	$\dfrac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = \dfrac{\hbar}{\alpha m_e c}$	$=$	$5.29177 \cdot 10^{-11}$ m
Bohrenergier	E_n	$=$	$-\dfrac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2\hbar^2 n^2}$	$=$	$\dfrac{E_1}{n^2}$ $(n = 1, 2, 3, ...)$
Bindingsenergi	$-E_1$	$=$	$\dfrac{\hbar^2}{2m_e a^2} = \dfrac{\alpha^2 m_e c^2}{2}$	$=$	13.6057 eV
Grundstadie	ψ_0	$=$	$\dfrac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}$		
Rydbergformlen	$\dfrac{1}{\lambda}$	$=$	$R\left(\dfrac{1}{n_f^2} - \dfrac{1}{n_i^2}\right)$		
Rydbergkonstanten	R	$=$	$-\dfrac{E_1}{2\pi\hbar c}$	$=$	$1.09737 \cdot 10^7$ m^{-1}

Matematiske formler

Trigonometri

$$\sin(a \pm b) = \sin a \cos b \pm \cos a \sin b$$
$$\cos(a \pm b) = \cos a \cos b \mp \sin a \sin b$$

Cosinusrelationen (c er siden over for vinklen θ)

$$c^2 = a^2 + b^2 - 2ab\cos\theta$$

Integraler

$$\int x \sin ax \ \mathrm{d}x = \frac{1}{a^2}\sin ax - \frac{x}{a}\cos ax$$
$$\int x \cos ax \ \mathrm{d}x = \frac{1}{a^2}\cos ax + \frac{x}{a}\sin ax$$

Eksponentielle integraler

$$\int_0^\infty x^n e^{-x/a} \ \mathrm{d}x = n! a^{n+1}$$

Gaussiske integraler

$$\int_0^\infty x^{2n} e^{-x^2/a^2} \ \mathrm{d}x = \sqrt{\pi}\frac{(2n)!}{n!}\left(\frac{a}{2}\right)^{2n+1}$$
$$\int_0^\infty x^{2n+1} e^{-x^2/a^2} \ \mathrm{d}x = \frac{n!}{2} a^{2n+2}$$

Partiel integration (produktreglen for differentiation, baglens)

$$\int_a^b f\frac{dg}{dx} \ \mathrm{d}x = -\int_a^b \frac{df}{dx} g \ \mathrm{d}x + [fg]_a^b$$

1 Bølgefunktionen

1.1 Schrödingerligningen

I klassisk mekanik går et problem oftest ud på at finde en partikels position til alle tider t, $\mathbf{r}(t)$. Dette gøres ved at løse Newtons ligninger for passende begyndelsesbetingelser ($\mathbf{r}(0) = 0, \mathbf{v}(0) = \mathbf{k}, \mathbf{a}(0) = 1/2g\hat{\mathbf{y}}$, eller hvad det nu kan være). Når positionen kendes, kan hastigheden og accelerationen udregnes, og ud fra disse tre størrelser (samt partiklens masse), kan alle andre relevante størrelser udledes.

I kvantemekanik er historien dog lidt anderledes. Her skal partiklens *bølgefunktion* $\Psi(\mathbf{r}, t)$, og denne fås ved at løse Schrödingerligningen:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V\Psi \tag{1.1}$$

hvor $\hbar$ er Plancks (reducerede) konstant, i den imaginære enhed $i^2 = -1$, m partiklens masse og V er *potentialet* hvori partiklen befinder sig. Klassisk set, kan potentialet bruges til at udlede accelerationen (såfremt det er konservative kraftfelter, hvor rotationen er 0. Kan du huske dit MatF1?): $\mathbf{F} = -\nabla V$. Det bemærkes at bølgefunktionen generelt set er en *kompleks* funktion, i modsætning til klassisk mekanik, hvor, hvis man fik et imaginært eller komplekst udtryk, havde man uden tvivl regnet forkert.

1.2 Den statistiske fortolkning

Bølgefunktionen er dog lidt mystisk, for hvad er den *egentlig* og hvad fortæller den os om partiklen vi nu prøver at beskrive? Det mystiske ved kvantemekanikken er, at det er *ikkedeterministisk*, i modsætning til klassisk mekanik. Absolutkvadratet af bølgefunktionen beskriver nemlig *sandsynligheden* for at finde en partikel i et bestemt punkt. Dette er den tyske fysiker Max Borns *statistiske fortolkning* af bølgefunktionen. Nærmere bestemt er:

$$\int_a^b |\Psi(x,t)|^2 \, \mathrm{d}x = \begin{cases} \text{sandsynligheden for at finde partiklen} \\ \text{mellem punkterne } a \text{ og } b, \text{ til tiden } t. \end{cases} \tag{1.2}$$

Dette vil altså sige, at sandsynligheden er arealet under grafen for $|\Psi|^2$. Det bemærkes, at selvom bølgefunktionen Ψ er en kompleks funktion, da er absolutkvadratet $|\Psi|^2 = \Psi^*\Psi$ både reel og positivt, som sandsynligheder skal være (Ψ^* er bølgefunktionens kompleks konjugerede).