

# Forelesning 2

January 19, 2022

## 1 Schrödinger ligningen

Vi starter med å skrive opp Schrödingers berømte bevegelsesligning for en enkelt partikkel i et potensial  $V(x)$  som

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x) \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \quad (1)$$

hvor  $m$  er partikkelens masse og  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ .  $\Psi(x, t)$  er partikkelens bølgefunksjon, som vi skal se bestemmer hvordan ikke-relativistiske (altså med fart  $v \ll c$ ) partikler beveger seg. Schrödinger ligningen (S.L.) gjelder ikke i e.g. elementærpartikkel-fysikk og kan ikke egentlig beskrive fotoner, men den er fortsatt veldig nyttig og kan beskrive et utall av fenomener som atom-, molekyl-, kjærne og faststoff-fysikk.

Bølgefunksjonen er en sannsynlighetsamplitude og den bestemmer sannsynligheten for å finne partiklen ved  $x$  ved tid  $t$ . Dette er en ligning som ikke kan utledes fra klassisk mekanikk.

### 1.1 Schrödinger's ligning for en fri partikkel

Vi skal nå fokusere på en fri partikkel, altså en partikkel som ikke har noe potensial, dvs  $V(x) = 0$ . Vi har da

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

Dette er en bølgeligning på samme måte som den klassiske bølgeligningene som kommer fra e.g. Maxwell's ligninger, men Schrödinger ligningen er kompleks. Vi ser at løsninger av S.L. må være på formen

$$\Psi(x, t) = C e^{i(kx - \omega t)} \quad (3)$$

Altså elementære løsninger av S.L. for en fri partikkel er planbølger. Siden S.L. er kompleks er ikke de enkle harmoniske sinus og cosinus funksjonene løsninger (prøv å sette inn for e.g.  $\cos(kx - \omega t)$ ), og vi trenger de komplekse eksponensial funksjonene. Ved innsettelse av planbølgen i S.L. finner vi

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \hbar \omega \quad (4)$$

Vi bruker nå de Broglie's uttrykk for bevegelsesmengden  $p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k$  og at  $E = \hbar \omega$ . Som vi her antar gjelder for alle partikler, ikke bare fotoner. Vi finner da at

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad (5)$$

### 1.2 Fysikalsk tolkning av bølgefunksjonen

Siden  $\Psi(x, t)$  er en kompleks funksjon kan det ikke være noe vi kan måle direkte. Vi kaller det også sannsynlighetsamplituden til partikkelen, siden den bestemmer sannsynligheten for å måle partikkelen ved posisjon  $x$  ved tid  $t$ . Born regelen (etter den tyske fysikeren Max Born) sier at

$$|\Psi(x, t)|^2 dx = \text{sannsynligheten for å måle en partikkel mellom } x \text{ og } dx \text{ ved tid } t \quad (6)$$

Vi har altså at  $|\Psi(x, t)|^2$  er partikkelens sannsynlighetstetthet. Dvs. at hvis vi kjenner  $\Psi(x, t)$  for et elektron som beveger seg i en dimension kan bruke den til å e.g. finne sannsynligheten for å finne partikkelen mellom  $x_1$  og  $x_2$  som

$$\int_{x_1}^{x_2} |\Psi(x, t)|^2 dx \quad (7)$$

For at vi skal kunne tolke  $|\Psi(x, t)|^2$  som en sannsynlighetstetthet må vi kreve at

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1 \quad (8)$$

Vi trenger at bølgefunksjonen er **normaliserbar**, slik at vi kan tolke den probabilistisk. Fysikalsk kommer det av at partikkelen må nødvendigvis finnes et eller annet sted, og hvis vi integrerer over hele domenet (fra  $-\infty$  til  $\infty$ ) så må sannsynligheten være 1 for at vi finner partikkelen.

Vi kan alltid normalisere bølgefunksjonen med mindre sannsynlighetstetthet divergerer for  $|x| \rightarrow \infty$ , hvis dette ikke er tilfellet kaller vi bølgefunksjonene **kvadrat integrerbar**. Dette krever vi at alle fysikalske bølgefunksjoner må være.

### 1.3 Bevaring av sannsynlighet

Vi skal nå se på om en bølgefunksjon som vi normaliserer ved et tidspunkt  $t$  forblir normalisert, altså om sannsynlighetstettheten er bevart i tid.

For å se på hvordan sannsynlighetstettheten endrer seg i tid beregner vi den tidsderivate

$$\frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} = \frac{\partial \Psi \Psi^*}{\partial t} = \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \quad (9)$$

Vi har at vi kan skrive om S.L. slik at den gir oss

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x) \Psi \right) \quad (10)$$

Vi antar at  $V(x)$  er reelt og kompleks konjugerer denne ligningen

$$\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + V(x) \Psi^* \right) \quad (11)$$

Vi bruker disse to ligningene og finner

$$\frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} = i \frac{\hbar}{2m} \left( \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \Psi \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \right) \quad (12)$$

$$= \frac{\partial}{\partial x} \left[ i \frac{\hbar}{2m} \left( \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right) \right] \quad (13)$$

Vi definerer nå **sannsynlighetsstrømmen** som

$$j_x(x, t) = i \frac{\hbar}{2m} \left( \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) \quad (14)$$

Dette gir

$$\frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} + \frac{\partial j_x(x, t)}{\partial x} = 0 \quad (15)$$

Som er **kontinuitetsligningen** for sannsynlighetstettheten. Dette er ekvivalent til kontinuitetsligningen fra elektrodynamikk som sier at ladningen må være bevart. Bevaring av ladning følger fra Maxwell's ligninger på samme måte som bevaring av sannsynlighet fra Schrödinger's ligning.

Videre har vi nå at

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial j_x(x, t)}{\partial x} dx = \left[ -j_x(x, t) \right]_{-\infty}^{\infty} = 0 \quad (16)$$

hvor vi har brukt at  $\Psi \rightarrow 0$  når  $|x| \rightarrow \infty$ , som vi vet behøves for at bølgefunksjonen skal være normaliserbar.

Hvis vi ser på hvordan sannsynligheten for en partikkel innenfor et interval  $[a, b]$  endrer seg har vi

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_a^b |\Psi(x, t)|^2 dx = \left[ -j_x(x, t) \right]_a^b = -j_x(b, t) + j_x(a, t) \quad (17)$$

Vi ser i Fig. 1 et eksempel på hvordan sannsynlighetsstrømmen bestemmer endringen i sannsynlighetstetthet, og vi har fra kontinuitetsligningen at hvis sannsynlighetstettheten minker et sted, så dukker det ikke opp på et helt annet sted, men det flyter kontinuerlig mot at annet nærliggende område.

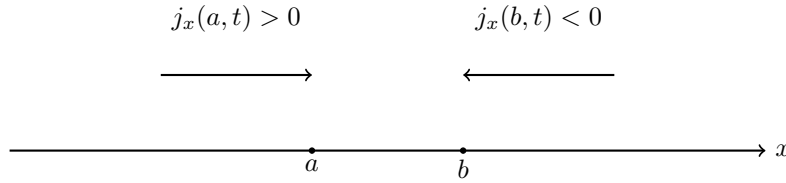


Figure 1: sannsynlighetsstrømmen inn og ut av et område  $[a, b]$  bestemmer hvordan sannsynlighetstettheten endrer seg på intervallet. Hvis e.g.  $j_x(b, t)$  er negativ flyter sannsynlighetsstrømmen inn i intervallet og det blir mer sannsynlig at partikkelen finnes der. Tilsvarende hvis  $j_x(a, t)$  er positiv, da flyter sannsynlighetsstrømmen inn i  $[a, b]$ .

## 1.4 Heisenberg's Uskarpheitsrelasjon

Hvis vi ser for oss en bølge med en enkelt bølgelengde så kan vi lett måle bølgens bølgelengde men ikke hvor bølgen er; bølgen er over alt. På den andre siden kan vi se for oss en partikkel; den er helt nøyaktig lokalisert i rommet, men vi kan ikke bestemme bølgelengden til partikkelen. Siden vi vet at bevegelsesmengden til partikkelen er gitt ved  $p = \frac{h}{\lambda}$  har vi da at bevegelsesmengden ikke kan bestemmes entydig.

Vi har sett at planbølger på formen

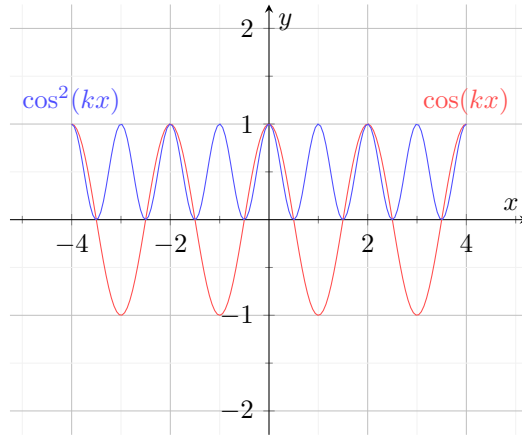
$$\Psi(x, t) = C e^{i(kx - \omega t)} \quad (18)$$

er løsninger til S.L., men vi ser fort at dette er problematisk siden vi har sagt at bare kvadrat integrerbare bølgefunksjoner er fysikalske. Vi ser at planbølger ikke er kvadrat integrerbar og ikke kan normaliseres siden de ikke går mot 0 når  $|x| \rightarrow \infty$  som vi ser i Fig. 2a. I tillegg kan vi ikke bestemme posisjonen til en planbølge siden den er overalt i rommet, og vi ønsker å kunne betrakte lokaliserte partikler.

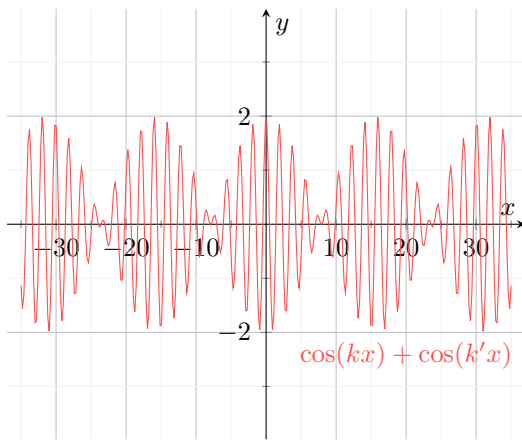
Men vi vet at S.L. er lineær og hvis vi har to løsninger av S.L. så er lineær kombinasjon av de også en løsning. Vi kan overlagre bølger og skape noe som er mer lokalisert i rommet, som vi ser antydninger til i Fig. 2. Vi har at for 4 overlagrede bølger kan vi skape en ganske lokalisert puls, men som gjentas i det uendelige. Hvis vi overlager uendelig mange bølger kan vi skape en puls som gjentas uendelig sjelden, dvs som er lokalisert rundt ett område i rommet. Siden vi trenger uendelig mange overlagrede bølger blir summen vår til et integral, og vi har

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} A(k) e^{i(kx - \omega(k)t)} dk \quad (19)$$

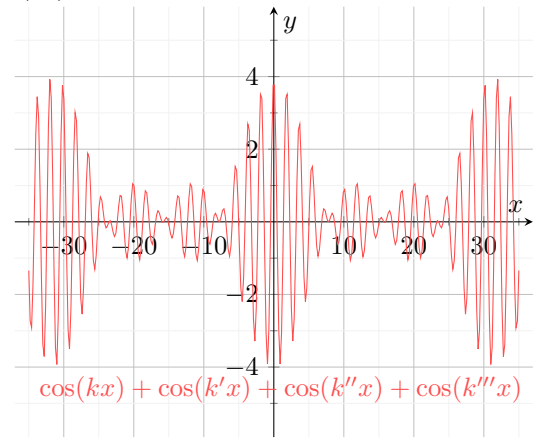
hvor vi inkluderer alle mulige bølgelengder ved at vi integrerer over  $k$ . Dette er nå noe som kan være lokalisert, gitt at  $A(k)$  er det.



(a)  $y = \cos(kx)$  og  $y' = \cos^2(kx)$



(b)  $y = \cos(kx) + \cos(k'x)$



(c)  $y = \cos(kx) + \cos(k'x) + \cos(k''x) + \cos(k'''x)$

Figure 2: Ovelagring av cosinus bølger.

Vi skal nå se på en Gaussisk bølgepakke, hvor vi lar  $A(k)$  ha formen til en Gauss-kurve, vi har da

$$A(k) = \frac{\sqrt{\sigma}}{\sqrt{2\pi}^{\frac{1}{4}}} e^{-(k-k_0)^2 \frac{\sigma^2}{2}} \quad (20)$$

hvor  $\sigma$  er bredden til Gauss-kurven og  $k_0$  bølgetallet som kurven er sentrert rundt. Vi har nå følgende bølgefunksjon

$$\Psi(x, t) = \frac{\sqrt{\sigma}}{\sqrt{2\pi}^{\frac{1}{4}}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(k-k_0)^2 \frac{\sigma^2}{2}} e^{i(kx - \omega(k)t)} dk \quad (21)$$

Dette tilfredstiller åpenbart S.L. siden vi vet at den er lineær og vi har har en sum linearkombinasjon av løsninger til S.L. (et integral, men som vi kan se på som en kontinuerlig sum).