

Forelesning 2

January 17, 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 partikkelenmasse og $\hbar = \frac{h}{2\pi}$. $\Psi(x, t)$ er partikkelenes 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

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

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

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

Siden S.L. er kompleks er ikke de enkle harmoniske sinus og cosinus funksjonene løsninger (prøv å sette inn $f(x) = \cos(kx - \omega t)$), og vi trenger de komplekse eksponentielle funksjonene. Ved innsettelse finner vi da

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

Vi bruker nå de Broglie's uttrykk for bevegelsesmengden $p = \frac{\hbar}{\lambda} = \hbar k$ 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 Fysikalisk tolkning av bølgefunksjonen

Siden $\Psi(x, t)$ er en kompleks funksjon kan det ikke være noe vi kan måle direkte. Vi kaller det også sannsynlighetsampliduen 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 partikkelen sannsynlighetstetthet. Dvs. at hvis vi kjenner $\Psi(x, t)$ for et elektron som beveger seg i en dimensjon kan bruke den til å e.g. finne sannsynligheten for å sannsynligheten for finne det 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 ∞) så må sannsynligheten være 1 for at vi finner partikkelen.

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

1.3 Bevaring av sannsynlighet

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

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

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

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

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

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

Vi definerer nå **sannsynligetsstrømmen** som

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

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 partikkelen 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.

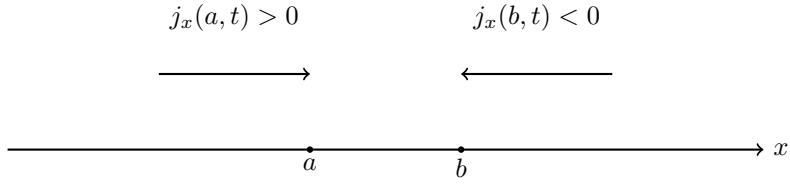


Figure 1: *sannsynlighetsstrømmen inn og ut av et område $[a, b]$ bestemmer hvordan sannsynlighetstettheten endrer seg på intervallet. Hvis e.g. $j_x(b, t)$ er negativ flyter sannsynlighetstrømmen inn i intervallet og det blir mer sannsynlig at partikkelen finnes der. Tilsvarende hvis $j_x(a, t)$ er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

1.4 Heisenberg's Uskaphetsrelasjon

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 partikkelen; 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

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

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 integrerbare og ikke kan normaliseres siden de ikke går mot 0 når $|x| \rightarrow \infty$. 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.

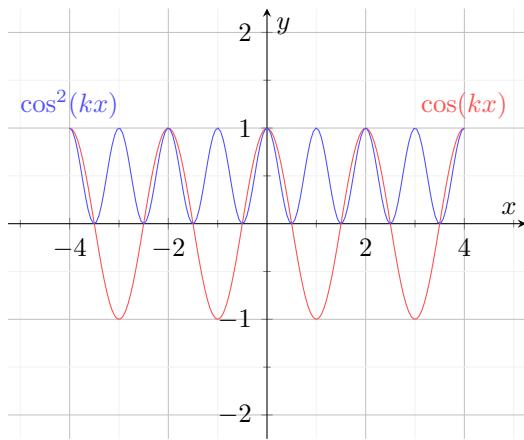


Figure 2: $y = \cos(kx)$ og $y' = \cos^2(kx)$

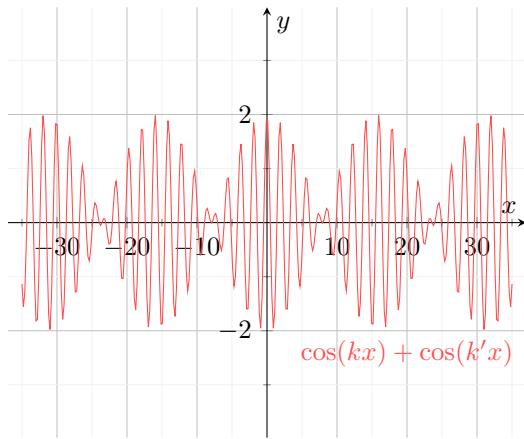


Figure 3: $y = \cos(kx) + \cos(k'x)$

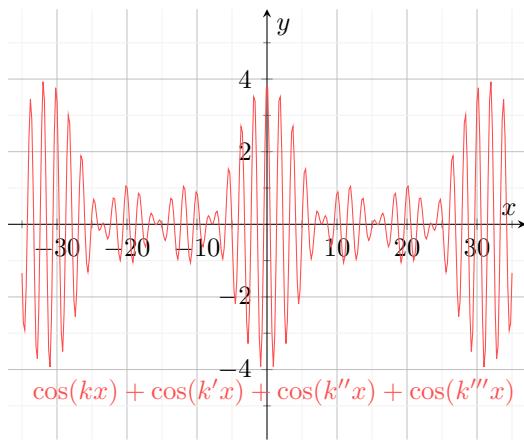


Figure 4: $y = \cos(kx) + \cos(k'x) + \cos(k''x) + \cos(k'''x)$

Figure 5: Ovelagring av cosinus bølger.