Kvantfysik F0047T

Simon Johnsson

Luleå – HT20

Från och med lektion 6!!!

1 Potential som elastisk potentiell energi

I klassisk mekanik är elastisk potentiell energi $\frac{1}{2}kx^2$ men inte riktigt i QM.

Går att lösa på två sätt:

1. Algebraisk metod
2. Analytisk metod

1.1 Algebraisk metod

Tar ut algebraiskt med hjälp av TOSE stegoperatorerna $\hat{a}_+$ och $\hat{a}_-$. Stegoperatorerna är ej kommutativa så vi kan inte bara byta plats på dem.

Vi kan ta fram en kommutator för lägesoperatorn och rörelsemängdsoperatorn $[\hat{x}, \hat{p}]$:
Vi använder oss av en testfunktion $f(x)$ för att kunna evaluera Stegoperatorerna.

$$[\hat{x}, \hat{p}]f(x) = (\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})f(x) = -i\hbar\left(x\frac{d}{dx}f(x) - \frac{d}{dx}(xf(x))\right) =$$
$$-i\hbar\left[x\frac{d}{dx}f(x) - \frac{dx}{dx}f(x) - x\frac{d}{dx}f(x)\right] = i\hbar f(x)$$

$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ kallas "canonical commutation relation"/"Osäkerhets sammbandet"

Detta resultat appliceras på stegoperatorerna:

$$\hat{a}_-\hat{a_+} = \frac{1}{2\hbar m\omega}[\hat{p}^2 + (m\omega\hat{x})^2] - \frac{i}{2\hbar}[\bar{x}, \bar{p}]$$

$$\hat{a}_-\hat{a_+} = \frac{1}{\hbar\omega}\hat{H} - \frac{i}{2\hbar}(i\hbar) = \frac{1}{\hbar\omega}\bar{H} + \frac{1}{2}$$

$$\hat{H} = \hbar(\hat{a}_-\hat{a}_+ - \frac{1}{2})$$

Jämföra med att byta plats på stegoperatorerna:

$$\hat{a}_+\hat{a}_- = \frac{1}{\hbar\omega}\bar{H} - \frac{1}{2}$$

$$\hat{H} = \hbar(\hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2})$$

Vilker leder till att vi kan skriva hamiltonoperatorn $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}_\mp\hat{a}_\pm \mp \frac{1}{2})$

Sätter in uttrycket i SE:

$$\hbar\omega(\hat{a}_\mp\hat{a}_\pm \mp \frac{1}{2})\Psi = E\Psi$$

Om vågfunktionen Ψ är en egenfunktion med egenvärde E, vad är $\hat{a}_\pm\Psi$?
Från SE för harmonisk oscillator: $\hat{H}\hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2} = \hbar\omega(\hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2})\hat{a}_+\Psi$

$$\hat{H}(\hat{a}_+, \Psi) = \hbar\omega(\hat{a}_+\hat{a}_-\hat{a}_+ + \frac{1}{2}\hat{a}_+)\Psi = \hbar\omega\hat{a}_+(\hat{a}_-\hat{a}_+ + \frac{1}{2})\Psi$$

För att kommutatorn $[\hat{a}_-, \hat{a}_+]$ ska vara kommutativt så måste den vara lika med 1 detta leder till:

$$\hat{H}(\hat{a}_+\Psi) = \hbar\omega\hat{a}_+(1 + \hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2})\Phi = \hat{a}_+(\hat{H} + \hbar\omega)\Psi = \hat{a}_+(E + \hbar\omega)\Psi$$

Mellantermen är en konstant och kommutativ med de andra termerna:

$$\hat{H}(\hat{a}_+\Psi) = (E + \hbar\omega)\hat{a}_+\Psi$$

Detta betyder att om $\hat{H}\Psi = E\Psi$ så är $\hat{a}_+\Psi$ en egenfunktion med egenvärde $E + \hbar\omega$.
På samma sätt så ger det att $\hat{a}_-$ är en egenfunktion med egenvärde $E - \hbar\omega$.

$$\hat{H}(\hat{a}_-\Psi) = (E - \hbar\omega)\hat{a}_-\Psi$$

Detta gör så att om man multiplicerar vågfunktionen med steg-upp-operatorn $\hat{a}_+$ så ökar energin med $\hbar\omega$ för varje gång man gör det. Och på samma sätt för steg-ner-operatorn men denna kan inte gå oändligt långt ner utan det finns ett stopp nedåt på E_0.
OBS: $\hat{a}_\pm\Psi$ behöver inte vara normerade även om Ψ är det.
Vi tar lägsta energinivån E_0, om vi applicerar $\hat{a}_-$: $\hat{a}_-\Psi_0 = 0$

I SE:

$$\frac{d}{dx}\Psi_0 + \frac{m\omega}{\hbar}x\Psi_0 = 0$$

Om man integrerar detta får man:

$$\ln \Psi_0 = -\frac{m\omega}{\hbar}\frac{x^2}{2} + c$$

vilket kan skrivas om till:

$$\Psi_0 = Ae^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

För allmänn lösning så behöver vi först normera Ψ_0

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |A|^2 e^{-(m\omega x^2)/\hbar} dx = A^2\sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}}$$

$$A = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}$$

Vilket ger:

$$\Psi_0 = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

Detta är stationära tillståndet för harmoniska oscillatorn för lägsta energi.

Hur ser E_0 ut?
Från SE: Beräkna energi för Ψ_0:

$$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2}) = \frac{1}{2}\hbar\omega\Psi_0 = E_0\Psi_0$$

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

Ψ_0, E_0 är grundtillståndet vilket gör att de resterande är exiterade tillstånd och kan beskrivas med hjälp av att kliva uppåt med $\hat{a}_+$:

Energi för exiterade tillstånd:

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$$

vågfunktionen för exiterade tillstånd:

$$\Psi_n(x) = A_n(\hat{a}_+)^n\Phi_0(x)$$

Där n är större eller lika med 0.
Den generella bågfunktionen skulle då bli:

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n\Psi_n(x,t)$$

Titta själv på sida 45-46 och räkna på det!

1.2 Analytisk metod

OBS: *Denna metod kan användas till många andra potentialer så den är mer generell än den algebraiska metoden*

Lösning till SE:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\Psi=E\Psi$$

Föra över till dimensionsfri *(multiplicerar med $\frac{2}{\hbar\omega}$)*:

$$-\frac{d^2\Psi}{d\zeta^2}+\zeta^2\Psi=K\Psi$$

Löser vi SE så får vi $K->0$ och $\zeta->\infty$ vilket ger:

$$\Psi(\zeta)=Ae^{-\frac{\zeta^2}{2}}+Be^{\frac{\zeta^2}{2}}$$

Här är första termen normerbar men inte andra då om $\zeta->\infty$ så går hela termen mot ∞.

$$\Psi(\zeta)=h(\zeta)e^{-\frac{\zeta^2}{2}} \qquad \text{Fysikaliska Lösningen}$$

Detta är fortfarande en exakt lösning.

Hur ser SE ut nu?

$$\frac{d^2\Psi}{d\zeta^2}+(K-\zeta^2)\Psi=0$$

Vilket när man beräknat dubbelderivatan kan skrivas som:

$$\frac{d^2h(\zeta)}{d\zeta^2}-2\zeta\frac{dh(\zeta)}{d\zeta}+(K-1)h(\zeta)=0$$

- För små ζ ansätts en <u>potensserie</u>: $h(\zeta)=\sum_{m=0}^{\infty}a_m\zeta^m$
  Detta ger SE:

  $$\sum_{m=0}^{\infty}a_{m+2}(m+2)(m+1)\zeta^m-2\sum_{m=0}^{\infty}a_m m\zeta^m+(K-1)\sum_{m=0}^{\infty}a_m\zeta^m=0$$

  Potenser för $\zeta^m \Rightarrow a_{m+2}(m+2)(m+1)+(K-1-2m)a_m=0$

  Hur ser serien ut?

  - För stora **m** skulle serien vara propotionerlig med $\zeta^2e^{\zeta^2}$ vilken inte är normerbar. D.v.s. att serien måste ha ett högsta m-värde.

  $$(m+2)(m+1)a_{m+2}=(2m+1-K)a_m$$

  Om $K=2n+1$ då stannar serien ($K=\frac{2E}{\hbar\omega}$) vilket gör $\frac{2E}{\hbar\omega}=(2n+1)$ vilket ger:

  $$E=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega$$

  Och detta är samma ekvation som i den algebraiska lösningen.

$h(\zeta)$ kallas för **Hermite polynom** $H(\zeta)$
SE *(med $H(\zeta)$)*:

$$\frac{d^2H_n(\zeta)}{d\zeta^2} - 2\zeta\frac{dH_n(\zeta)}{d\zeta} + 2nH_n(\zeta) = 0$$

Där $\Psi_n(x)$ bestämms utav:

$$\Psi_n(x) = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}H_n(\zeta)e^{-\frac{\zeta^2}{2}}$$

2 Potential $V(x) = 0 \Rightarrow$ den fria partikeln

SE: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2} = E\Psi$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{E2m}{\hbar^2}\Psi = 0$$

Partikeln kan ha alla energier ($E > 0$).
Lösningen:

$$\Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

Allmänna lösningen:

$$\Psi(x,t) = Ae^{ikx}e^{-i\frac{E}{\hbar}t} + Be^{-ikx}e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

Med $\frac{E2m}{\hbar^2} = k^2 \quad \Rightarrow \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

$$\pm ikx - i\frac{\hbar k^2}{2m}t = \pm ik\big(s \mp \frac{\hbar k}{2m}t\big)$$

$$\Psi(x,t) = Ae^{ik\left(x - \frac{\hbar k}{2m}t\right)} + Be^{-ik\left(x + \frac{\hbar k}{2m}t\right)}$$

Där första termen är en våg som går åt höger och andra en våg som går åt vänster.
Skriver vi $\Psi(x,t)$ mer kompakt:

$$\Psi_k(x,t) = Ae^{i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)}$$

Där $k = \pm\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

Vågnummer: $k = \frac{2\pi}{\lambda}$
Våglängd: $\lambda = \frac{2\pi}{|k|}$
Våghastighet:

$$V_{quantum} = \frac{\hbar|k|}{2m} = \sqrt{\frac{E}{2m}}$$

$$V_{classic} = \sqrt{\frac{2E}{m}}$$

1. $V_{quantum} = \frac{V_{classic}}{2}$
2. **Normering?**
   $\Psi(x,t) = Ae^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t)}$ går ej att normera. **Fri partikel kan ej beskrivas med stationärt tillstånd!**

Bygg ett **vågpaket**:

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\phi(k)e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t)}dk$$

Denna är normerbar!
Om $\Psi(x,0)$ känd $rightarrow \phi(k)$ [Plauchelet's theorem]:

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x,0) e^{-ikx} dx$$

alla $\omega(k)$:

- Taylor expansion ($k_0 \rightarrow \omega(k) \approx \omega_0 + \omega_0'(k - k_0)$)
- variabel $\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{i(kx - \omega t)} dk$$

3 Potential barriär *(potential step)*

Potetnialen $V(x)$ består utav en stegfunktion så att den går mot oändligheten åt ena hållet med värdet 0 och sedan ett värde V_0 åt andra hållet.

$$V(x) = V_0 H(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ V_0, & x > 0 \end{cases}$$

$H(x)$ är heaviside funktionen.

FALL I: Om $V = 0$, $x < 0$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + k^2\Psi, \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$$

Egenfunktion:

$$\Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

Om vågen kommer från vänster så kommer en reflekterande tillbaka
FALL II: Om $V = V_0$, $x > 0$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + q^2\Psi, \quad q^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)$$

Egenfunktion:

$$\Psi(x) = Ce^{iqx}$$

Här blir det ingen reflekterad våg.

- vågfunktionen $\Psi(x)$ är kontinuerlig
- $\frac{d\Psi}{dx}$ är kontinuerlig (Om V är ändlig)

Vid randen mellan de två olika lösningarna matchar vi de två vågekvationerna.
Vid $x = 0$

$$Ae^{ik0} + Be^{-ik0} = Ce^{iq0} \Longrightarrow A + B = C$$

För stationära tillstånd i 1D: **Probability current density** *(se problem 1.14)*:
FALL I

$$j = \frac{\hbar}{2im}(\Psi^* \frac{d\Psi}{dx} - \frac{d\Psi^*}{dx}\Psi) = \frac{\hbar}{2im}\Big((A^* e^{-ikx} + B^* e^{ikx})(Ae^{ikx} - Be^{-ikx}) - (-A^* ike^{-ikx} + B^* ike^{ikx})(Ae^{ikx} - Be$$

$$j = \frac{\hbar k}{2m}(|A|^2 - |B|^2)$$

FALL II

$$\Psi(x) = Ce^{iqx}$$

$$j = \frac{\hbar q}{m}|C|^2$$

Strömmen i (**I, II**) ska vara lika vid $x = 0$:

$$j_I = j_{II}$$

Derivatan är kontinuerlig vid $x = 0$

$$\left(\frac{d\Psi}{dx}\right)_I = Aike^{ikx} - Bike^{-ikx}$$

$$\left(\frac{d\Psi}{dx}\right)_{II} = Ciqe^{ikx}$$

DEF: Reflexionskoefficient

$$R = \frac{\frac{\hbar k}{m}|B|^2}{\frac{\hbar k}{m}|A|^2} = \frac{|B|^2}{|A|^2}$$

DEF: Transmissionskoefficient

$$T = \frac{q|C|^2}{k|A|^2}$$

Uttrycka koeficienterna i endast k och q:

$$R = \frac{(k-q)^2}{(k+q)^2}$$

$$T = \frac{4kq}{(k+q)^2}$$

Beskrivet med energi och potential:

$$R = \frac{(1 - \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}})^2}{(1 + \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}})^2}$$

$$T = \frac{4\sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}}{(1 + \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}})^2}$$

4 Potential barriär

En potential barriär är en fyrkantspuls.

$$V(x) = V_0(H(x+a) - H(x-a))$$

Man kan dela upp det i tre fall, innan, i och efter barriären.

FALL II i barriären:

$$\kappa^2 = \frac{-2m(E - V_0)}{\hbar^2}$$

Lösningen: $\Psi_{II} = Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x}$

FALL I $\Psi_I = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$

FALL III $\Psi_{III} = Ee^{ikx}$

T ges utav:

$$|T|^2 = \frac{2k\kappa}{(k^2 + \kappa^2)^2 \sinh^2(2\kappa a) + (2k\kappa)^2}$$

Detta kallas *Tunneling*

Kapitell 3: Formalism

I kvant: **vågfunktioner** och **operatorer**. En vågfunktion är normerad då:

$$\int \Psi^* \Psi = 1, \quad |\Psi|^2 \; - \text{ kvadratiskt integererbara}$$

$\Rightarrow$ möjliga vågfunktioner finns i ett **Hilbert rum**.

Den **inre produkten** (skalärprodukten): **DEF:**

$$\int_a^b f^*(x) g(x) dx =< f|g >$$

$$\int g^* f = (\int f^* g)^* \Longrightarrow < g|f >=< f|g >^*$$

Om $< f_m|f_n >= \int f_m^* f_n dx = \delta_{mn}$ så är de ortogonala och normerbara.
$\{f_n\}$: ortonormalt set.

Vidare så utgör alla mängder $\mathbf{f_n}$ ett fullständigt set, vilket innebär att en funktion i Hilbert rummet kan skrivas på följande sätt:

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n f_n(x)$$

om $< f_m|f_n >= \delta_{mn}$ så är $c_n =< f_n|f >$ *(Fourier)*

Operatorer Hermitiska

Alla operatorer i kvant är **Hermitiska**

$$< Q >= \int \Psi^* \hat{Q} \Psi dx =< \Psi|\hat{Q}\Psi >$$

En mätning ger **reella** resultat.

$$< Q >=< Q >^*$$

$$< \Psi|\hat{Q}\Psi >=< \hat{Q}^*\Psi|\Psi >=< \hat{Q}\Psi|\Psi >=< \hat{Q}\Psi|\Psi >^*, \quad \text{För alla } \Psi$$

$$\Longrightarrow \text{så för alla operatorer gäller } < f|\hat{Q}f >=< \hat{Q}f|f >, \quad \text{För alla } f(x)$$

Mot en observerbar storhet $\rightarrow$ motsvarar en operator '

$$< f|\hat{Q}g >=< \hat{Q}f|g >, \quad \text{Hermitisk operator } \hat{Q}$$

$$< f|\hat{Q}g >=< \hat{Q}^+ f|g >, \quad \text{Hermitisk konjugat}$$

Här i kvant är $\hat{Q} = \hat{Q}^+$ för Hermitiska ekvationer.

Egentillstånd

Om Ψ är egentillstånd till $\hat{Q}$ med egenvärde q: $\hat{Q}\Psi = q\Psi$
T.ex: $\hat{H}\Psi = E\Psi$ (TOSE).

σ - Standardavvikelsen

$$\Rightarrow \sigma^2 =< (Q- < Q >)^2 >=< \Psi|(Q- < Q >)^2|\Psi >= Q^2 - 2Q < Q > + < Q >^2 =$$

$$=< (Q- < Q >)\Psi|(Q- < Q >)\Psi >= 0$$

- Uppsättningen av **egenvärdena** till en operator kallas för **spektrat**.
- Om 2 olika **egenfunktioner** har samma **egenvärden** så kallas de **degenererat**
- Det är inte säkert att dessa 2 **egenfunktionerna** är ortogonala men man kan använda **Gram-Schmidt** för att göra dem det. *se problem A4 i Appendix)*

Egenfunktioner

Spektrum:

- Disktet *(Harmonisk oscillator, partikel i ∞ låda)*
- Kontinuerlig *Fri partikel*

Disktet: Diskreta egenvärden och egentillstånden är normerbara

Kontinurelig: Egenfunktionen går inte att normera *t.ex.* $e^{ikx} \to \infty$

- Partikel i icke ∞ låda har både diskret och kontinuerligt spektra.

Diskret spektrum:

1. Egenvärden är **reella**

$$\hat{Q}f = qf, \quad \textbf{Diskreta}, \ \hat{Q} \text{ Hermitisk}$$

2. Olika egenvärden $\Rightarrow$ Egenfunktionerna ortogonala

$$\hat{Q}f = qf \quad \text{och} \quad \hat{Q}g = q'g, \ \text{där } \hat{Q} \text{ Hermitisk}$$

$$< f|\hat{Q}g >=< \hat{Q}f|g >$$

då $q' \neq q \Rightarrow < f|g >= 0$ *(Ortogonala)*

Kontinuerligt spektrum: *(egenfunktion ej normerbar)*
(Se exempel 3.2)

$$f_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{px}{\hbar}}$$

där $< f_{p'}|f_p >= \delta_{mn}(p - p')$ och $p \in \mathbb{R}$

(GÅ IGENOM EXEMPEL 3.8) (Kan skippa 3.6.3)