

Sammanfattning av SH1014 Modern fysik

Yashar Honarmandi
yasharh@kth.se

20 november 2018

Sammanfattning

Detta är en sammanfattning av kursen SH1014 Modern fysik.

Innehåll

1	Speciell relativitet	1
2	Allmän relativitetsteori	6
3	Kvantmekanik	6

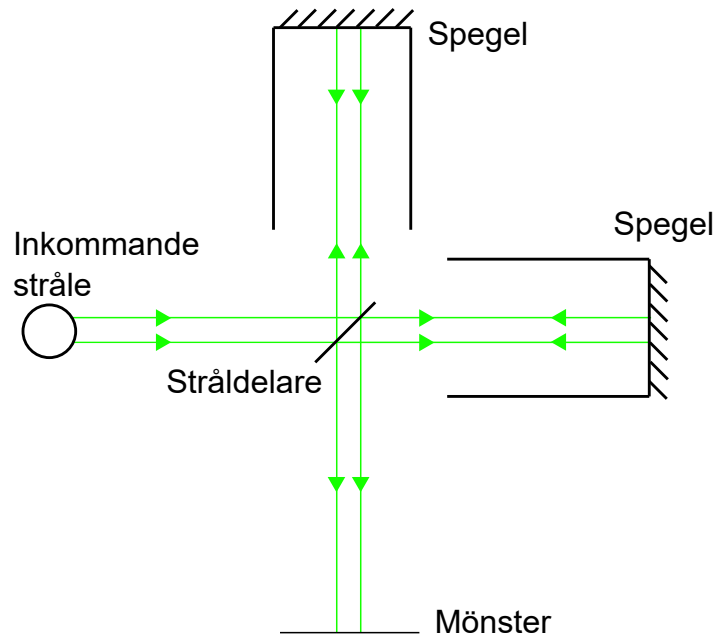
1 Speciell relativitet

Galileitransformationen Betrakta en statisk ram S och en ram S' som rör sig med konstant hastighet \mathbf{u} . Galileitransformen är den klassiska transformen av hastigheter och accelerationer mellan dessa system och ger

$$\begin{aligned}\mathbf{r} &= \mathbf{u}t + \mathbf{r}', \\ \mathbf{v} &= \mathbf{u} + \mathbf{v}', \\ \mathbf{a} &= \mathbf{a}'.\end{aligned}$$

Michelson-Morleys experiment Michelson-Morleys experiment visade att ljus omöjligt kunde propageras genom den postulerade etern.

Uppställningen som användes är (en mer avancerad variant av) Michelson-Morley-interferometern, som illustreras i figur 1.



Figur 1:

Ideen bakom experimentet var att de två "ärmarna" i uppställningen skulle röra sig med olika hastigheter relativt etern eftersom Jorden rör sig relativt Solen.

Om nu varje arm har längd L och etern rör sig med en hastighet u åt höger, tar ljuset tiden

$$\begin{aligned}t_{\text{höger}} &= \frac{L}{c+u} + \frac{L}{c-u} \\ &= L \frac{c-u+c+u}{c^2-u^2} \\ &= \frac{2cL}{c^2-u^2} \\ &= \frac{2L}{c} \frac{1}{1-\frac{u^2}{c^2}}\end{aligned}$$

att röra sig till och från stråldelaren åt höger och tiden

$$\begin{aligned}t_{\text{upp}} &= \frac{2L}{\sqrt{c^2-u^2}} \\ &= \frac{2L}{c} \frac{\sqrt{1-\frac{u^2}{c^2}}}{1-\frac{u^2}{c^2}},\end{aligned}$$

ty ljuset måste röra sig uppåt och motriktad hastigheten mot höger för att återvända till samma position i stråldelaren. Alltså borde skillnaden mellan tiden det tar för ljuset att röra sig de två vägarna ges av

$$\Delta t = \frac{2L}{c} \frac{1 - \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}{1 - \frac{v^2}{c^2}}.$$

För Michelson och Morleys fall förutspådde de att de skulle se 0.4 fransar i interferensmönstret, men de observerade < 0.01 fransar. Efter att ha upprepat sitt experiment ett halvår senare för att utesluta påverkan från Jordens position, konkluderade de med att det inte kunde finnas någon eter.

Einsteins postulat Baserad på Michelson-Morleys experiment, kom Einstein med följande postulat:

- Fysikens lagar är de samma i alla inertialsystem.
- Ljushastigheten i vakuum har samma värde c i alla inertialsystem.

Lorentztransformationen Lorentztransformationen är en transformation för att byta mellan olika referensramar. Den skiljer sig från Galileitransformationer, som inte är tillräcklig för att beskriva denna nya fysiken.

För att härleda Lorentztransformationen, betrakta två referensramar som sammanfaller vid $t = 0$ där den ena rör sig med en hastighet v i x -riktning. För att beskriva transformationen, antar vi

$$x' = k_i x_i,$$

där det summeras över alla rymdliga koordinater och tiden. Vi antar linjaritet eftersom det annars skulle kunna uppkomma accelererande rörelse i ett system utan att det är acceleration i ett annat, vilket skulle vara konstigt. Vidare antar vi att x' ej beror av andra rymdliga koordinater, men att den kan bero av origos rörelse, och antar

$$x' = k_1(x - vt).$$

Antag nu att vi skickar ut en ljuspuls från origo vid $t = 0$. Vågfrontens avstånd från origo kommer beskrivas av

$$x^2 + y^2 + z^2 = c^2 t^2, x'^2 + y'^2 + z'^2 = c^2 t'^2,$$

eftersom ljuset skall ha samma fart i båda referensramar. Vi använder nu vår ansats för att transformera den andra ekvationen tillbaka, och får

$$k_1^2 x^2 + y^2 + z^2 + k_1^2 (v^2 t^2 - 2xvt) = c^2 t'^2.$$

Om vi sätter $t = t'$, får vi nu andra termer, och transformationen misslyckades. Vi åtgärder detta vid att anta

$$t' = k_{t,1}x + k_{t,2}t.$$

Detta ger

$$k_1^2 x^2 + y^2 + z^2 + k_1^2 (v^2 t^2 - 2xvt) = c^2 (k_{t,1}^2 x^2 + k_{t,2}^2 t^2 + 2k_{t,1}k_{t,2}xt).$$

För att transformationen skall lyckas, ger detta

$$\begin{aligned} k_1^2 - c^2 k_{t,1}^2 &= 1, \\ vk_1^2 + k_{t,1}k_{t,2}c^2 &= 0, \\ c^2 k_{t,2}^2 - k_1^2 v^2 &= 0. \end{aligned}$$

Vid att införa

$$\beta = \frac{v}{c}, \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}}$$

kan lösningarna skrivas som

$$k_1 = k_{t,2} = \gamma, k_{t,1} = -\frac{\beta\gamma}{c}.$$

Lorentztransformationerna ges då av

$$x' = \gamma(x - vt), t' = \gamma\left(t - \frac{\beta}{c}x\right).$$

Den inversa Lorentztransformationen fås vid att lösa ut ekvationerna för x och t , och ges av

$$x = \gamma(x' + vt'), t = \gamma\left(t' + \frac{\beta}{c}x'\right).$$

Med de givna skalfaktorerna ser vi att för små hastigheter går detta över i Galileitransformer, medan inga hastigheter över c tillåts.

Samtidighet Betrakta två händelser som inträffar vid olika tidpunkter och positioner. Lorentztransformationen ger

$$\Delta t = \gamma(\Delta t' + \frac{\beta}{c}\Delta x').$$

Detta implicerar att om händelserna är simultana i en referensram, är de inte nödvändigtvis det i den andra.

Tidsdilation Betrakta två händelser som inträffar vid samma position i den rörliga ramen. Lorentztransformationen ger

$$\Delta t = \gamma\Delta t',$$

och det mäts en längre tidsskillnad mellan händelserna i inertialramen.

Längdkontraktion Betrakta två händelser som inträffar vid samma tidpunkt i inertialramen. Lorentztransformationen ger

$$\Delta x = \frac{1}{\gamma}\Delta x,$$

och det mäts ett kortare avstånd mellan händelserna i inertialramen.

Relativistisk Dopplereffekt Betrakta återigen två olika system, där det rörliga systemet rör sig med en vinkel θ från linjen mellan O och O' , som är parallell med x -axeln. Från O' skickas det ut ljuspulser vid t'_1 och t'_2 . Lorentztransformationerna ger att ljuset skickas ut vid tider

$$\begin{aligned} t_1 &= \gamma t'_1, \\ t_2 &= \gamma t'_2. \end{aligned}$$

Om första pulsen skickas ut vid avstånd x_1 , skickas den andra ut vid avstånd

$$x_2 = x_1 + \gamma v(t'_2 - t'_1) \cos \theta,$$

där vi har approximerat att avståndet S' rör sig normalt på x -axeln är litet. Ljuspulserna når därmed origo vid tid

$$\begin{aligned} t_{O1} &= t_1 + \frac{x_1}{c}, \\ t_{O2} &= t_2 + \frac{x_2}{c} \\ &= t_2 + \frac{x_1 + \gamma v(t'_2 - t'_1) \cos \theta}{c} \\ &= \frac{x_1}{c} + \gamma t'_2(1 + \beta \cos \theta) - \gamma t'_1 \beta \cos \theta. \end{aligned}$$

Vi inför periodtiden $\Delta t' = t'_2 - t'_1$, och får

$$\begin{aligned}\Delta t_O &= \gamma t'_2(1 + \beta \cos \theta) - \gamma t'_1(1 + \beta \cos \theta) \\ &= \gamma(1 + \beta \cos \theta)\Delta t' .\end{aligned}$$

Frekvensen för ljuspulsen ges då av

$$f_{\text{obs}} = \frac{1}{\gamma(1 + \beta \cos \theta)} f_{\text{källa}} .$$

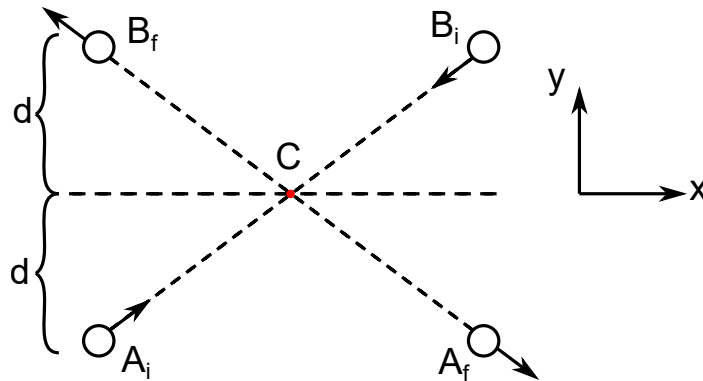
Lorentztransformation av hastigheter Vi använder differentialerna

$$\begin{aligned}dx &= \gamma(dx' + v dt'), \\ dt &= \gamma(dt' + \frac{\beta}{c} dx')\end{aligned}$$

och får hastigheterna

$$\begin{aligned}u_x &= \frac{dx}{dt} = \frac{dx' + v dt'}{dt' + \frac{\beta}{c} dx'} = \frac{u'_x + v}{1 + \frac{\beta}{c} u'_x}, \\ u_y &= \frac{u'_y}{1 + \frac{\beta}{c} u'_x}, \\ u_z &= \frac{u'_z}{1 + \frac{\beta}{c} u'_x} .\end{aligned}$$

Relativistisk rörelsemängd Betrakta studsens som illustreras i figur 2.



Figur 2: Illustration

Vi antar här att rörelsen kan vara relativistisk i x , men approximeras som klassisk i y . Om partiklerna har samma massa (och hastighet), är masscentrum statiskt i C .

Vi kan alternativt betrakta studsens i ett system som följer partikeln A i x -riktning, vilket illustreras i figur 3.

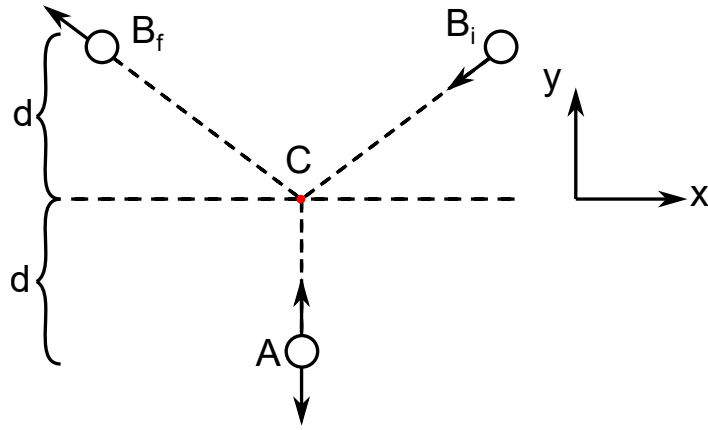
Båda system är inertialsystem, och därmed är rörelsemängden bevarad i båda system.

Vi definierar tiden t_0 som det tar för A att röra sig avståndet d upp och ned i A :s referensram. Ändringen i rörelsemängd ges då av

$$\begin{aligned}\Delta p_{A,y} &= -2m_A \frac{d}{t_0} - 2m_A \frac{d}{t_0} = -4m_A \frac{d}{t_0}, \\ \Delta p_{B,y} &= 2m_B \frac{d}{t_0} + 2m_B \frac{d}{t_0} = 4m_B \frac{d}{t_0},\end{aligned}$$

där tiden t är tiden det tar för B att röra sig upp och ned i den betraktade referensramen. Eftersom rörelsen i y -riktning är klassisk, är denna tiden t_0 i B :s referensram. Vi transformerar därmed tillbaka och får

$$\Delta p_{B,y} = 4m_B \frac{d}{\gamma t_0} .$$



Figur 3: Illustration

Fysikens lagar gäller i alla inertialsystem, vilket systemet vi betraktar är, och därmed är den totala ändringen i rörelsemängdsmoment lika med 0, vilket ger

$$m_B = \gamma m_A.$$

Eftersom rörelsen i y -riktning är klassisk, kan A :s massa nu ersättas av vilomassan m_0 , som är A :s massa mätt i sitt eget inertialsystem. Eftersom de två har samma vilomassa, ger detta

$$m = \gamma m_0.$$

Den relativistiska rörelsemängden ges därmed av

$$p = mv = \gamma m_0 v.$$

Relativistisk energi Newtons andra lag ger

$$F = \frac{d}{dt}(mv).$$

Om kraftsumman F får verka på en partikel som börjar från vilo, ges dens kinetiska energi av

$$T = \int F \cdot ds = \int \frac{d}{dt}(mv) \cdot v dt = \int v \cdot d(mv) = \int v^2 dm + mv \cdot dv.$$

Lorentztransformationen av massa ger

$$m^2 \gamma^2 = m_0^2, m^2(c^2 - v^2) = m_0^2 c^2.$$

Vid att beräkna differentialen av båda sidor får

$$2mc^2 dm - 2mv^2 dm - 2m^2 v \cdot dv = 0, c^2 m = v^2 dm + mv \cdot dv,$$

vilket insatt i integralen ger

$$T = \int c^2 dm = c^2(m - m_0) = m_0 c^2(\gamma - 1).$$

Detta kan alternativt skrivas som

$$mc^2 = T + m_0 c^2,$$

vilket tolkades som ett uttryck för totala energin som innehåller en konstant viloenergi $m_0 c^2$ (obs: Ej en potentiell energi!). Därmed ges den totala energin av

$$E = mc^2 = T + m_0 c^2.$$

Relation mellan energi och rörelsemängd Vi har nu fått

$$p^2 = \gamma^2 m_0^2 v^2, E^2 = \gamma^2 m_0^2 c^4.$$

Energin i kvadrat kan skrivas som

$$E^2 = \gamma^2 m_0^2 c^4 = \gamma^2 m_0^2 c^4 \left(\frac{1}{\gamma^2} + \beta^2 \right),$$

eftersom $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}$. Vi får vidare

$$\begin{aligned} E^2 &= m_0^2 c^4 + m_0^2 v^2 c^2 \\ &= m_0^2 c^4 + p^2 c^2. \end{aligned}$$

2 Allmän relativitetsteori

Gravitationell tidsdilatation Betrakta två observatorer i ett tyngdfält med (svag) uniform fältstyrka g som befinner sig på olika positioner med en höjdskillnad h . Då upplever observatören högre upp i fältet en tidsdilatation

$$\Delta t' = \left(1 + \frac{gh}{c^2}\right) \Delta t.$$

Om man har ett icke-uniformt tyngdfält, kan man i stället använda att för små Δh gäller att

$$\begin{aligned} \frac{\Delta t(h + \Delta h)}{\Delta t(h)} &= \left(1 + \frac{g(h)}{c^2} \Delta h\right), \\ \prod \frac{\Delta t(h_i)}{\Delta t(h_{i-1})} &= \frac{\Delta t(h)}{\Delta t(h_0)} = \left(1 + \sum \Delta h \frac{g(h_i)}{c^2}\right) \end{aligned}$$

med $h_i = h_0 + i\Delta h$, och i gränsen $\Delta h \rightarrow 0$

$$\frac{\Delta t(h)}{\Delta t(h_0)} = 1 + \int_{h_0}^h dx \frac{g(x)}{c^2}.$$

3 Kvantmekanik

Brister i klassisk fysik Redan innan kvantmekaniken formulerades, fanns det brister i det experimentella beviset för den klassiska fysiken.

Ultravioletter katastrofen Ett bevis var att den klassiska förutsägelsen av svartkroppsstrålning var

$$I(\nu, T) = \frac{2kT\nu^2}{c^2},$$

som divergerar för stora frekvenser. Observationer av svartkroppsstrålning var naturligtvis inte i närheten av detta utan gick mot 0 även för höga frekvenser.

Max Planck sägs att ha upptäckt kvantmekaniken vid att härleda intensitetsfördelningen för svartkroppsstrålning under antagandet att energinivåerna i kroppen var diskreta kvanta av $h\nu$, där h är den nu införda Plancks konstant. Han fick

$$I(\nu, T) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}.$$

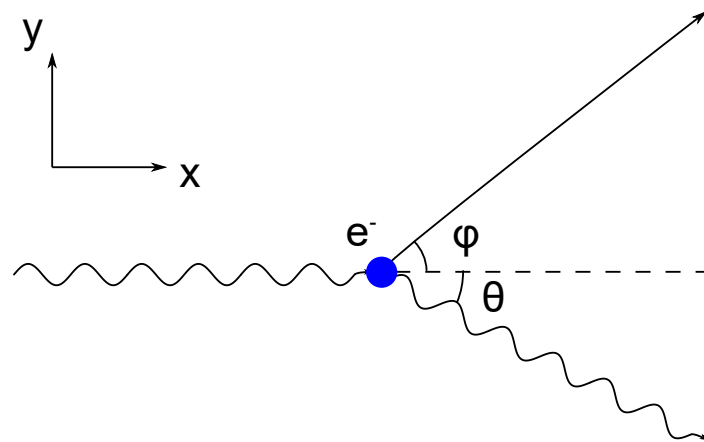
Denna går både mot 0 för höga frekvenser och beter sig som den klassiska förutsägelsen vid låga frekvenser. Einstein gissade senare att $h\nu$ var energien för partiklarna som bygger upp ljus - fotoner.

Fotoelektriska effekten Om man bestrålar metaller med elektromagnetisk strålning, frigörs elektroner (upptäckta vid det här laget) från metallet. Man kunne sätta metallet i närheten av en anod så att en spänningsskillnad mellan metallet och anoden kunde attrahera metaller till anoden. Vid att elektrisk koppla de två samman, kunde man mäta strömmen som orsakades av de frigjorda elektronerna. Det som observerades var:

- Det frigjordes bara elektroner om den inkommande strålningen hade en frekvens över en viss gränshfrekvens.
- Under denna gränshfrekvensen spelade strålningsintensiteten ingen roll.
- Över gränshfrekvensen mättes den maximala elektronenergin som $E = h\nu - W$.

Detta var svårt att förklara med klassisk fysik.

Comptonspridning Elektromagnetisk strålning kan spridas på elektroner. Klassiskt är det svårt att förklara spridningsmönstret som uppstår, eftersom elektromagnetisk strålning är vågor. Däremot kan man anta att strålningen består av fotoner med rörelsemängd och energi enligt speciell relativitetsteori och resultaten från fotoelektriska effekten, som illustrerad i figur 4.



Figur 4: Illustration av studs mellan en foton och en elektron.

Energins bevarande ger

$$h\nu + m_{e,0}c^2 = E_e + h\nu'$$

och rörelsemängdens bevarande ger

$$\begin{aligned} h\frac{\nu}{c} &= h\frac{\nu'}{c} \cos \phi + p'_e \cos \theta, \\ h\frac{\nu'}{c} \sin \phi - p'_e \sin \theta &= 0. \end{aligned}$$

Vi omformulerar förste rörelsemängdsekvationen till

$$h\frac{\nu}{c} - h\frac{\nu'}{c} \cos \phi = p'_e \cos \theta$$

och kvadrerar för att få

$$h^2 \frac{\nu^2}{c^2} - 2h^2 \frac{\nu\nu'}{c^2} \cos \phi + h^2 \frac{\nu'^2}{c^2} \cos^2 \phi = p_e'^2 \cos^2 \theta.$$

Kombinerat med kvadratet av den andra rörelsemängdsekvationen ger detta

$$h^2 \frac{\nu^2}{c^2} + h^2 \frac{\nu'^2}{c^2} - 2h^2 \frac{\nu\nu'}{c^2} \cos \phi = p_e'^2.$$

Energins bevarande ger vidare

$$E_e = h\nu - h\nu' + m_{e,0}c^2.$$

Vi kvadrerar och kombinerar med massa-energi-sambandet från speciell relativitet och får

$$\begin{aligned} h^2(\nu - \nu')^2 + 2h(\nu - \nu')m_{e,0}c^2 + m_{e,0}^2c^4 &= p_e'^2c^2 + m_{e,0}^2c^4 \\ &= h^2\nu^2 + h^2\nu'^2 - 2h^2\nu\nu' \cos \phi + m_{e,0}^2c^4, \\ (\nu - \nu')m_{e,0}c^2 &= h\nu\nu'(1 - \cos \phi). \end{aligned}$$

Vi skriver nu om till våglängd och får

$$\begin{aligned} \left(\frac{c}{\lambda} - \frac{c}{\lambda'}\right)m_{e,0}c^2 &= h\frac{c^2}{\lambda\lambda'}(1 - \cos \phi), \\ (\lambda' - \lambda)m_{e,0}c &= h(1 - \cos \phi), \\ \lambda' - \lambda &= \frac{h}{m_{e,0}c}(1 - \cos \phi), \end{aligned}$$

alternativt i termer av energi

$$E' = \frac{1}{\frac{1 - \cos \phi}{m_{e,0}c^2} + \frac{1}{E}},$$

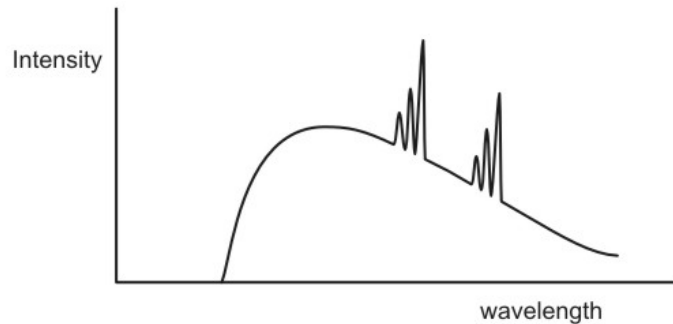
vilket stämde överens med experiment.

Röntgendiffraktion Röntgenstrålar har ganska liten våglängd. För att få diffraktion med röntgenstrålning, kan man använda plan av atomer i fasta material. Man kan visa att diffraktionsvillkoret är

$$2d \sin \theta = n\lambda,$$

där θ är infallsvinkeln för strålningen och d är avståndet mellan atomplanen.

Röntgenspektra Om ett metall bestrålas av röntgenstrålning med olika våglängder, kan man använda en diffraktionsuppställning och mäta intensiteten som funktion av utgående vinkel. Eftersom man har ett spektrum av våglängder, får man konstruktiv interferens i ett intervall av vinklar. Braggs formel implicerar att den utgående vinkeln beror av våglängden till strålningen som interfererar konstruktivt, och det erhållna spektrumet från ett sådant experiment visas i figur 5.



Figur 5: Typiskt röntgenspektrum.

Röntgenspektrumet är en superposition av ett kontinuerligt spektrum och vissa skarpa toppar. Den kontinuerliga delen kommer direkt från våglängdsspektrumet. De skarpa topparna kommer från excitationer av elektroner i metallet. När metallernas elektroner exciteras, skapas det en foton när de hoppar tillbaka till tillståndet med lägre energi, och detta orsakar intensitetstopparna.

de Broglie-våglängd Kombinationen

$$E = h\nu, p = \frac{E}{c}$$

för fotoner fick de Broglie att hypotetisera att alla partiklar har en våglängd. Vid att kombinera resultaten ovan, var de Broglies hypotes att denna våglängden ges av

$$\lambda = \frac{h}{p}.$$

Detta kan i stället omformuleras till kinetisk energi vid att visa att

$$p = \sqrt{2Tm_0 + \left(\frac{T}{c}\right)^2},$$

vilket ger

$$\begin{aligned}\lambda &= \frac{h}{\sqrt{2Tm_0 + \left(\frac{T}{c}\right)^2}} \\ &= \frac{h}{\sqrt{2Tm_0}} \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{T}{c\sqrt{2Tm_0}}\right)^2}} \\ &= \frac{h}{\sqrt{2Tm_0}} \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\sqrt{T}}{c\sqrt{2m_0}}\right)^2}} \\ &= \frac{h}{\sqrt{2Tm_0}} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{T}{2m_0c^2}}}.\end{aligned}$$

Davidsson-Germers experiment I detta experimentet besetrålades en nickelskatod normalt på sin yta med elektroner som accelererades med någon spänning, och reflekterade elektroner detekterades som funktion av vinkel ut från strålen. I detta experimentet uppmättes ett intensitetsmaximum vid en annan vinkel än 0, och med Braggs formel samsvarar detta maximumet med avståndet mellan atomplan i nickel.

Bohrs modell För att förklara väteatomens kvantiserade emissionsspektrum, postulerade Bohr att

- elektronerna kretsar i stabila banor runt kärnan.
- en övergång mellan två banor ger en foton med energi $h\nu = \Delta E$.
- elektronens integrerade rörelsemängd längs med banan kring kärnan är en heltalsmultipel av h .

Om elektronen har konstant rörelsemängd i banan, ger detta

$$2\pi r p = nh \implies v = \frac{nh}{2\pi m_e r},$$

där r är banans radius. Accelerationen i radiell riktning ger vidare

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = \frac{m_e v^2}{r}$$

eftersom atomkärnan har samma laddning som elektronen, med motsatt tecken. Enligt Bohrs postulat är de tillåtna banradierna

$$r_n = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi e^2 m_e} n^2.$$

Den totala energin ges av

$$\begin{aligned}E &= \frac{1}{2}m_e v^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \\ &= \frac{n^2 h^2}{8\pi^2 m_e r^2} - \frac{m_e e^4}{4\epsilon_0^2 h^2 n^2} \\ &= \frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^2 n^2} - \frac{m_e e^4}{4\epsilon_0^2 h^2 n^2} \\ &= -\frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2}.\end{aligned}$$

Detta stämde med vätespektret.

Osäkerhetsprincipen Partiklars vågnatur kombinerad med Fourieranalys implicerar

$$\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2\pi},$$
$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2\pi},$$

där vi har infört den reducerade Plancks konstant $\hbar = \frac{h}{2\pi}$.

Vågfunktionen Baserad på dessa resultaten infördes vågfunktionen Ψ . Det postulerades vidare att för alla dynamiska system existerar en vågfunktion som innehåller all information om systemet. Denna är kontinuerligt deriverbar.

Sannolikhet Olika experiment började visa att partiklars position har ett icke-deterministiskt element i sig. Positionen beskrivs av en täthetsfunktion, som postulerades vara $|\Psi|^2$.

Schrödingerekvationen För ett system av en partikel i en dimension som rör sig i en potential V beskrivs vågfunktionen av

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \Psi + V \Psi = i\hbar \partial_t \Psi.$$

Detta kan utvidgas för mer allmänna system till

$$\hat{H} \Psi = i\hbar \partial_t \Psi,$$

där \hat{H} är systemets Hamiltonoperator, som kommer diskuteras sedan.

Bundna tillstånd Gör ansatsen $\Psi = \psi(x)\phi(t)$. Då ger Schrödingerekvationen för en enda partikel

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \phi \partial_x^2 \psi + V \psi \phi = i\hbar \psi \partial_t \phi.$$

Detta kan separeras till

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial_x^2 \psi}{\psi} + V = i\hbar \frac{\partial_t \phi}{\phi}.$$

Om potentialen är tidsberoende, är vänstersidan bara en funktion av position och högersidan bara en funktion av tid. Därmed måste båda sidor vara lika med en konstant, som vi för tillfället kallar E .

Tidsberoendet ger

$$\partial_t \phi = -i \frac{E}{\hbar} \phi,$$
$$\phi = A e^{-i \frac{E}{\hbar} t}.$$

Om vi tittar på frekvensen, får vi

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \frac{E}{\hbar} = \frac{E}{h},$$

och vi ser att E precis motsvarar systemets energi. Vi noterar vidare att $|\phi|^2$ är tidsberoende, så denna sortens tillstånd ändrar sig inte med tiden.

Positionsberoendet ger nu

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \psi + V \psi = E \psi.$$

Alla lösningarna till denna ekvationen är egenfunktioner till operatoren $-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + V$ med egenvärde E .

Väntevärde Eftersom kvantmekaniken handlar om sannolikheter, är även konceptet väntevärde relevant. I kvantmekaniken postulerar vi att det till varje observabel q finns en operator \hat{q} , och dens väntevärde ges av

$$\langle q \rangle = \int dx \psi^* \hat{q} \psi.$$

Exempel på grundläggande operatorer är

- positionoperatorn $\hat{x} = x$.
- rörelsemängdsoperatorn $\hat{p} = -i\hbar\partial_i$.
- kinetisk energi-operatorn $\hat{T} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2$.
- potentialoperatorn $\hat{V} = V$.
- Hamiltonoperatorn $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$.

Oändlig lådpotential För att få en känsla för vilken sorts fysik som kommer ut av denna teorien, betraktar vi en partikel i en oändlig lådpotential, dvs.

$$V = \begin{cases} 0, & 0 < x < a, \\ \infty, & \text{annars.} \end{cases}$$

Detta motsvarar en låda med oändligt starka väggar. Rumdelen av Schrödingerekvationen för stationära tillstånd ger inuti lådan

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi &= E\psi, \\ \partial_x\psi &= -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi. \end{aligned}$$

Vi definierar nu

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

och får

$$\partial_x\psi = -k^2\psi.$$

Detta har lösningar

$$\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}.$$

För att få mer information, behövs randvillkor. På grund av vågfunktionens krökningsegenskaper, som framkommer av Schrödingerekvationen, måste vi ha $\psi(0) = \psi(a) = 0$. Första randvillkoret ger

$$\begin{aligned} A + B &= 0, \\ \psi &= A \sin kx. \end{aligned}$$

Andra randvillkoret ger

$$ka = n\pi.$$

Nu kan energin bestämmas enligt

$$\begin{aligned} \frac{n^2\pi^2}{a^2} &= \frac{2mE}{\hbar^2}, \\ E &= \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2}, \end{aligned}$$

och vi ser att energin kan bara anta vissa diskreta värden. Vi ser även att grunntilståndets energi är nollskild, som indikerar att ett system som beskrivs av kvantmekaniken alltid kommer ha en viss rörelse.

Slutligen ger normaliseringsvillkoret

$$\int_0^a dx |B|^2 \sin^2 kx = 1.$$

Integralen på vänstersidan är

$$|B|^2 \int_0^a dx \frac{1 - \cos 2kx}{2}.$$

Den andra termen ger inget bidrag eftersom den har period a , och detta ger

$$|B|^2 \frac{a}{2} = 1,$$

$$|B| = \sqrt{\frac{2}{a}}.$$

Observera att vi endast skriver absolutbeloppet eftersom B kan vara en komplex konstant utan att det ändrar fysiken.

Ändlig lådpotential Betrakta en partikel i en ändlig lådpotential, dvs.

$$V = \begin{cases} 0, & 0 < x < a, \\ V_0, & \text{annars.} \end{cases}$$

Detta motsvarar en låda med en viss flexibilitet i väggarna. Rumdelen av Schrödingerekvationen för stationära tillstånd ger inuti lådan

$$\partial_x^2 \psi = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi.$$

och

$$\partial_x^2 \psi = -\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \psi.$$

Vi definierar som förut

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \alpha^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}.$$

Om $E < V_0$ är lösningarna

$$\psi = \begin{cases} Ae^{\alpha x}, & x < 0, \\ Be^{ikx} + Ce^{-ikx}, & 0 < x < a, \\ De^{-\alpha x}, & a < x. \end{cases}$$

Observera att vissa termer från den matematiska lösningen inte är med, då de skulle ge lösningar som inte är normaliserbara.

För att lösa detta, behöver vi de tre villkoren som fås från att ψ är kontinuerligt deriverbar och att $|\psi|^2$ är normaliserad.

Vi ser från lösningen att en partikel kan penetrera lite in i en region där dens totala energi är negativ, det så kallade klassiskt förbjudna området. Vi kan även definiera ett penetrationsdjup

$$\delta = \frac{1}{\alpha} = \frac{\hbar^2}{\sqrt{2m(E - V_0)}}$$

som ett mått på hur långt in i den klassiskt förbjudna zonen bundna tillstånd kan penetrera.

Andra potentialer Det finns andra intressanta potential att betrakta som kan användas för att beskriva fysikaliska system. Exempel är

- det harmoniska potentialen $V = \frac{1}{2}Kx^2$, med energiegenvärden $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_0$, där $\omega_0 = \sqrt{\frac{K}{m}}$.

Bundna system Ett bundet system är ett system som är lokaliserad i rummet.

Obundna system Ett obundet system är ett system som ej är lokaliserad i rummet.

Ändlig barriär Betrakta en partikel i en ändlig lådpotential, dvs.

$$V = \begin{cases} 0, & 0 < x, \\ V_0, & \text{annars.} \end{cases}$$

Detta motsvarar en vägg med en viss flexibilitet:

Man kan definiera en transmissionskoefficient och en reflektionskoefficient lika med sannolikheten för att partiklar transmittas och reflekteras av barriären.

Tunneling Klassiskt kan en partikel inte kryssa en barriär om den har för låg energi. Kvantmekaniskt kan man beräkna en transmissionssannolikhet för tunneling.

Ett enkelt fall som illustrerar tunneling är potential som är konstant lika med 0 förutom i en region med bredd a , där potentialen är V_0 . Schrödingerekvationen ger för detta fallet

$$T \approx 16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right) e^{-2a\sqrt{2m(V_0-E)}}, E < V_0, a \gg \delta.$$

Tunneling som fenomen förklarar t.ex. α -sönderfall, mikroskopitekniken STM och varför Solen brinner (fusion möjliggörs av att olika atomer kan tunnela in i varandras kärnor).

Schrödingerekvationen i högre dimensioner I högre dimensioner utvidgas Schrödingerekvationen triviellt genom att utvidga definitionen av Hamiltonoperatoren till att verka i alla dimensioner. Även normaliseringen görs över alla dimensioner. Notera att separeringen i tid och rum är exakt likadan.

Ett enkelt exempel är för en partikel, där Hamiltonoperatoren utvidgas till

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V.$$

Väteatomen Vi vill nu beskriva ett system av en (fix) proton med en elektron i bana runt sig. I sfäriska koordinater med protonen i centrum blir Hamiltonoperatoren

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}.$$

Att ens skriva upp Schrödingerekvationen är extremt jobbigt, så vi försöker i stället att separera den. Detta ger

$$\frac{\sin^2(\theta)}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{\sin(\theta)}{\Theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} + \frac{2mr^2 \sin^2(\theta)}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) = 0.$$

Vi separerar först bort ϕ -termen, och setter den lika med en konstant som vi kallar $-m_l^2$ (som kan vara vad som helst om vi inte exkluderar komplexa tal). Vidare får man

$$\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin(\theta)\Theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) - \frac{m_l^2}{\sin^2(\theta)} + \frac{2mr^2}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) = 0$$

Nu kan vi separera igen, med separationskonstant $l(l+1)$. Vi får alltså tre ekvationer

$$\begin{aligned}\frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} &= -m_l^2, \\ \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) &= l(l+1), \\ \frac{1}{\sin(\theta)\Theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) - \frac{m_l^2}{\sin^2(\theta)} &= l(l+1).\end{aligned}$$

Vi förenklar till

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} + m_l^2 \Phi &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - l(l+1) \right) R &= 0, \\ \frac{1}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) - \left(\frac{m_l^2}{\sin^2(\theta)} + l(l+1) \right) \Theta &= 0.\end{aligned}$$

Det här är svårt att lösa, och lösningarna är så speciella att de är namngivna efter olika personer, men randvillkoren kommer att ge

$$\begin{aligned}l &= 0, 1, \dots, n-1, \\ m_l &= 0, \pm 1, \dots, \pm l.\end{aligned}$$

l kallas för bankvanttalet och m_l kallas för det magnetiska kvanttalet. Det sista kvanttalet n indikerar energin.

Det återstår nu att lösa den radiella ekvationen. Vi gör heller inte det, men de tillåtna energierna är

$$E = -\frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}.$$

Från detta kan vi definiera Bohrradien

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2}.$$