NTNU
Fakultet for Naturvitskap og Teknologi
Institutt for Fysikk

Samandrag TFY 4215/FY1006 Innføring i kvantemekanikk Vår 2014

Faglærar: Professor Jens O. Andersen
Institutt for Fysikk, NTNU
Telefon: 73593131

May 22, 2014

Her er eit samandrag av det eg har forelese våren 2014. Dersom ein kan dette pluss alle mellomrekningane, står ein godt rusta til eksamen 26. mai. Hugs også å bli godt kjend med Rottmann. Det er ei fin lita bok.

Kapittel 1

Historisk oversikt: Stoda på slutten av 1800-talet:

(1) Newtons mekanikk og gravitasjonsteori hadde vore etablert i meir enn 200 år.

(2) Lys har bølgjenatur kjend frå eksperimenta til Young.

(3) Elektriske og magnetiske fenomen blir kopla saman i Maxwells teori for elektromagnetisme.

Det viser seg imidlertid at

(1) Newtons teori er ei grense for spesiell relativitetsteori for små hastigheiter.

(2) Einsteins generelle relativitetsteori erstattar Newtons gravitasjonsteori når gravistasjonsfeltet er sterkt.

(3) Oppdaginga av atomet og linjespekret for hydrogen.

Den vitskapelege revolusjonen skjer gjennom

(1) Planck formulerer strålingslova si for svarte lekam. Antar at energien til oscillatorane i veggen er kvantisert.

(2) Einstein forklarer fotoelektrisk effekt ved å anta at lys (og anna elektromagnetisk stråling) er diskrete energikvant, der $E = h\nu$.

(3) Comptons eksperiment med lysspreiing kan ikkje forklarast ved klassisk elektromagnetisme.

(4) Bohrs atommodell. Ideen om stasjonære tilstandar og ideen om kvantesprang. Kvantisering av dreieimpuls og energi. Forklaring på linjespekret til hydrogen.

(5) de Broglies hypotese om at partiklar har bølgjenatur med bølgjelengde

$$\lambda = \frac{h}{p} . \tag{1}$$

(6) Eksperiment med lys og elektron som blir sendt mot ei dobbeltspalte viser at dei har både partikkel - og bølgjenatur.

(7) Innføring av ein såkalla bølgjefunksjon ψ, der $|\psi|^2$ kan tolkast som ei sannsynlegheitsfordeling som kan forklare intensitetsfordelinga i eksperimenta.

(8) Schrödingerlikninga som ei bølgjelikning for materiebølgjer.

(9) Sannsynlegheitstolkninga i kvantemekanikk gjer at ein må gje opp ideen om determinisme - vi kan berre uttale oss om sannsynlegheiten for at "noko" skjer.

Kvantemekanikk som aksiomatisk teori blir etablert i løpet av 1920-åra og representer det store vitskaplege paradigmeskiftet på 1900-talet.

Kapittel 2

Partikkel i boks: Eigenverdiar og eigenfunksjonar. Randkrav og energikvantisering. Normering av bølgjefunksjonen, sannsynlegheitstettheit, ortogonalitet og val av fase. Forventningsverdiar til x og symmetrieigenskapar.

Grunnprinsippa: Dei fire kvantemekaniske postulata

(1) Til ein fysisk observabel F svarer ein hermitesk operator $\hat{F}$ i eit abstrakt Hilbertrom.

(2) Tilstanden til eit system er fullstending spesifisert ved bølgjefunksjonen $\Psi(\mathbf{r},t)$ Tidsutviklinga til $\Psi(\mathbf{r},t)$ er gjeve ved Schrödingers tidsavhengige likning

$$\hat{H}\Psi(\mathbf{r},t) \;=\; i\hbar\frac{\partial\Psi(\mathbf{r},t)}{\partial t}\ . \tag{2}$$

(3) Ensembleteori og forventningsverdiar for observabel F når systemet er i tilstanden Ψ:

$$\langle F\rangle_\Psi \;=\; \int \Psi^*\hat{F}\Psi d\tau\ . \tag{3}$$

Her er integrasjonsområdet og målet $d\tau$ heilt generelt og vil avhenge av kva system vi studerer.

(4) Måleteoretisk postulat som seier at dei einaste moglege verdiane ved ei måling av observabelen F er eigenverdiane til operatoren $\hat{F}$. Umiddelbart etter måling er systemet i ein eigentilstand med den målte verdien f (kollaps av bølgjefunksjonen).

Stasjonære tilstandar: Vi kan prøve å løyse den tidsavhenginge Schrödingerlikninga ved separasjon av variable ved å skrive $\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$. Dette gjev den tidsuavhenginge Schrödingerlikninga

$$\hat{H}\psi \;=\; E\psi\ . \tag{4}$$

Sannsynlegheitfordelinga $|\Psi(x,t)|^2 = |\psi(x)|^2$ er uavhengig av tida og kallast difor ein stasjonær tilstand. Superposisjonsprinsippet av stasjonære tilstandar og tidsavhengige bølgjefunksjonar (og sannsaynlegheitsfordelingar).

Adjungerte og hermiteske operatorar: Adjungert operator $\hat{F}^\dagger$ definert ved

$$\int(\hat{F}\Psi_1)^*\Psi d\tau \;\equiv\; \int \Psi_1^*\hat{F}^\dagger\Psi d\tau. \tag{5}$$

Vidare er $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$. Hermitesk: $\hat{F} = \hat{F}^\dagger$. Alle operatorar $\hat{F}$ i kvantemekanikk er hermiteske som er ekvivalent med at $\hat{F}$ har reelle eigenverdiar.

Kvantisering: I koordinatrepresentasjonen av kvantemekanikk blir observablane $\mathbf{r}$ og $\mathbf{p}$ blir erstatta med operatorane $\hat{\mathbf{r}}$ og $\hat{\mathbf{p}}$ ved substitusjonen

$$\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} \tag{6}$$

$$\mathbf{p} \rightarrow -i\hbar\nabla \; . \tag{7}$$

Ein kan konstruere andre operatorar frå desse.

Kommutator: Kommutatoren mellom to operatorar $\hat{A}$ og $\hat{B}$ er definert ved $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$. Reknereglar:

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} \; , \tag{8}$$

og linearitet. Viktige kommutatorar:

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij} \; , \tag{9}$$

$$\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] = i\hbar\hat{L}_z \qquad \text{(syklisk permutasjon)} \tag{10}$$

$$\left[\hat{L}_i, \hat{\mathbf{L}}^2\right] = 0 \; , \tag{11}$$

der $i, j = 1, 2, 3$ eller x, y, z.

Spektret til ein operator: Spektret til ein operator kan vere diskret (t.d. partikkel i boks), kontinuerleg (t.d. fri partikkel) eller blanda (t.d. hydrogenatom).

δ-funksjonen: Definisjon som grensa til ein δ-sekvens. Eigenskapar og reknereglar, t.d.

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x) = f(0) \; . \tag{12}$$

Integralrepresentasjon:

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx/\hbar}\, dp \; . \tag{13}$$

Planbølgjer $\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$ kan berre δ-funksjonsnormerast

$$\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-iqx/\hbar} e^{ipx/\hbar}\, dx = \delta(p-q) \; . \tag{14}$$

Fullstendig sett av eigenfunksjonar: Ein hermitesk operator $\hat{F}$ på eit Hilbertrom har eit fullstendig sett av eigenfunksjonar $\{\psi_n\}_n$. Dersom to eigenfunksjonar har forskjellig eigenverdi er dei ortogonale. Ein vilkårleg funksjon på dette rommet kan utviklast i desse:

$$\psi(x) = \sum_n c_n \psi_n , \tag{15}$$

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p) e^{ipx/\hbar} \, dp , \tag{16}$$

der $c_n = \int \psi_n^*(x)\psi(x) d\tau$ eller i det kontinuerlege tilfellet den Fouriertransformerte $\phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-ipx/\hbar} \, dx$. $P_n = |c_n|^2$ er sannsynlegheiten for å måle verdien f_n til operatoren $\hat{F}$. Fullstendigheitrelasjon

$$\sum_n \psi_n^*(x')\psi_n(x) \, dx = \delta(x - x') . \tag{17}$$

Bølgjefunksjonar som vektorar: Bølgjefunksjonar kan ein tenkje seg som vektorar i eit abstrakt Hilbertrom av kvadratisk integrerbare funksjonar. Skalarproduktet mellom slike er

$$\langle \psi_1, \psi_2 \rangle = \int \psi_1^* \psi_2 \, d\tau , \tag{18}$$

der integrasjonsområdet er avhengig av problemet. Normen til vektoren ψ er da $||\psi|| = \sqrt{\langle \psi, \psi \rangle}$.

Impulsrommet: Bølgjefunksjon i impulsrommet

$$\Phi(p, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar} \Psi(x, t) \, dx . \tag{19}$$

$|\Phi(p, t)|^2$ er sannsynlegheitsfordelinga for impulsen p. I impulsrepresentasjonen av kvantemekanikk blir observablane x og p_x blir erstatta med operatorane $\hat{x}$ og $\hat{p}_x$ via substitusjonen

$$x \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial p_x} , \tag{20}$$

$$p \rightarrow p , \tag{21}$$

og tilsvarande for dei andre komponentane.

Forventningsverdiar og usikkerheit:

$$\langle F \rangle_\Psi = \int \Psi^*(x) \hat{F} \hat{\Psi}(x) \, d\tau , \tag{22}$$

$$\langle F^2 \rangle_\Psi = \int \Psi^*(x) \hat{F}^2 \hat{\Psi}(x) \, d\tau . \tag{23}$$

Usikkerheit $(\Delta F)^2 = \langle F^2 \rangle - (\langle F \rangle)^2$. Skarp tyder $\Delta F = 0$ og dette er implis-erer at Ψ er ein eigentilstand til $\hat{F}$.

Kapittel 3

Ein kan alltid bruke reelle eigenfunksjonar i ein dimensjon. Kontinuitetseigenskapar til bølgjefunksjonen $\psi(x)$:

> (1) For eit endeleg potensial $|V(x)| < \infty$ er $\psi(x)$ glatt, det vil seie $\psi(x)$ og $\psi'(x)$ er kontinuerlege.
>
> (2) Viss potensialet er singulært vil $\psi(x)$ vere kontinuerleg, men ha ein knekk. Altså er $\psi'(x)$ diskontinuerleg. Døme: deltafunksjonspotensial.

Relativ krumning:

$$\frac{\psi''(x)}{\psi(x)} = -\frac{2m}{\hbar^2}\left[E - V(x)\right] . \tag{24}$$

Forteiknet til den relative krumninga er gjeve ved forteiknet på $E - V(x)$. Altså om området er klassisk forbode eller ikkje. Klassisk vendepunkt eller venderadius $E = V(x)$ eller $E = V(r)$. Viss $E = V(x)$ i eit endeleg område er er $\psi(x)$ lineær i dette området.

Bundne tilstandar i ein dimensjon er *ikkje-degenererte* (Dette gjeld viss det finst ein x^* slik at $\psi(x^*) = 0$).

Bølgjefunksjonane til $\hat{H}$ i symmetriske potensial i ein dimensjon kan veljast like eller odde funksjonar av x, det vil seie eigenfunksjonar til paritetsoperatoren $\hat{\mathcal{P}}$, sjå kapittel 4.

Endeleg potensialbrønn: Løysing av Schrödingerlikninga i dei ulike områda. Skjøting av bølgjefunksjonen i overgangen. Randkrav og kontinuitet gjev energikvantisering. Grafisk løysing for energien. Talet på bundne tilstandar avheng av djupna på potensialet:

$$\text{Antal bundne tilstandar} = 1 + \left[\frac{1}{\frac{1}{2}\pi}\sqrt{2mV_0 l^2/\hbar^2}\,.\right] , \tag{25}$$

der V_0 er høgda på potensialet og l er breidda.

δ-funksjonspotensial: *Ein* bunden tilstand med negativ energi. Knekk i bølgjefunksjon pga singulært potensial.

Harmonisk oscillator: Eksempel på harmonisk approksimasjon i naturen: Gittervibrasjonar, vibrasjonar i toatomige molekyl. Hamiltonoperator:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 . \tag{26}$$

Dimensjonslaus Schrödingerlikning

$$\frac{d^2\psi(q)}{dq^2} + (\epsilon - q^2)\psi(q) \;=\; 0\;, \tag{27}$$

der $q = x\sqrt{\hbar/m\omega}$ er dimensjonslaus og $\epsilon = E/(\frac{1}{2}\hbar\omega)$. Potensrekkjemetoden for å finne eigenfunksjonane. Rekursjonsformel for koeffisientane a_n. Rekkja må bryte av for å ha normerbar bølgjefunksjon. Spektrum:

$$E_n \;=\; \hbar\omega\left(\frac{1}{2} + n\right)\;, \tag{28}$$

der $n = 0, 1, 2...$ Ortonormerte eigenfunksjonar:

$$\psi_n(x) \;=\; \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{1}{2}m\omega x^2/\hbar} H_n(\sqrt{\hbar/m\omega}x)\;, \tag{29}$$

der $H_n(x)$ er Hermitepolynom av grad n. $H_n(-x) = (-1)^n H_n(x)$. Genererande funksjon for Hermitepolynoma

$$\sum_{n=0}^{\infty} H_n(x)\frac{s^n}{n!} \;=\; e^{-s^2+2xs}\;. \tag{30}$$

Ymse relasjonar mellom $H_n(x)$ og dei deriverte $H_n'(x)$.

Fri partikkel og bølgjepakker: Ein fri partikkel kan beskrivast ved ei planbølgje som er eigenfunksjon til $\hat{p}$ og $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ med eigenverdi p og $p^2/2m$ og er på forma

$$\psi_p(x) \;=\; \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}\;. \tag{31}$$

Ei bølgjepakke er ei overlagring av slike:

$$\Psi(x,t) \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p)\Psi_p(x,t)\,dp\;, \tag{32}$$

der $\Psi_p(x,t) = \psi_p(x)e^{-i(p^2/2m)t\hbar}$.

Spreiingsteori: Spreiing av partiklar på eit potensial ved å sende inn planbølgjer eller bølgjepakker mot eit potensial $V(x)$. Løyse Schrödingerlikninga i dei ulike områda med konstant potensial. Skjøting av ψ og ψ' i overgangen mellom slike (glatt ψ). Sannsynlegheitsstraum

$$\mathbf{j} \;=\; \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*\right)\;. \tag{33}$$

Kontinuitetslikning

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla\cdot\mathbf{j} \;=\; 0\;, \tag{34}$$

der $\rho = |\psi|^2$. Refleksjons og transimisjonskoeffisient:

$$R = |r|^2 , \tag{35}$$
$$T = |t|^2 , \tag{36}$$

der r og t er amplituden for utgåande og reflektert bølgje. Bevaring av sannsynlegheit $R+T=1$. Klassisk versus kvantemekanisk oppførsel. Kvantetunnellering og radioaktivitet.

Kapittel 4

$[\hat{F},\hat{G}] = 0$ er ekvivalent med at $\hat{F}$ og $\hat{G}$ har eit simultant sett av eigenfunksjonar ψ_{f_n,g_n}, der f_n og g_n er eigenverdiane til $\hat{F}$ og $\hat{G}$. Observablane F og G er da kompatible og kan vere skarpe samtidig. Generalisert usikkerheitsrelasjon

$$\Delta F \Delta G \geq \frac{1}{2}|\langle[\hat{F},\hat{G}]\rangle| . \tag{37}$$

Spesialtilfelle $\Delta x \Delta p \geq \frac{1}{2}\hbar$.

Paritetsoperator $\hat{\mathcal{P}}$ er rominversjon med verknad $\mathbf{r} \to -\mathbf{r}$

$$\hat{\mathcal{P}}\psi(\mathbf{r}) \to \psi(-\mathbf{r}) , \tag{38}$$
$$\hat{\mathcal{P}}\hat{H}(\mathbf{r}) \to \hat{H}(-\mathbf{r}) . \tag{39}$$

Eigenverdiar til $\hat{\mathcal{P}}$ er $p = \pm 1$. Tidsutvikling av forventningsverdiar:

$$\frac{d}{dt}\langle F\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle[\hat{H},\hat{F}]\rangle + \left\langle \frac{\partial F}{\partial t} \right\rangle . \tag{40}$$

Ehrenfests teorem som gjev samanhengen mellom forventningsverdiane $\langle\mathbf{r}\rangle$ og $\langle\mathbf{p}\rangle$ og Newtons bevegelseslikning. Ehrenfests teorem:

$$\frac{d}{dt}\langle\mathbf{r}\rangle = \frac{\langle\mathbf{p}\rangle}{m} , \tag{41}$$
$$\frac{d}{dt}\langle\mathbf{p}\rangle = -\langle\nabla V(\mathbf{r})\rangle , \tag{42}$$

der m er massen til ein partikkel som bevegar seg i potensialet $V(\mathbf{r})$.

Kapittel 5

Bevegelse i kulesymmetriske potensial $V(r)$. Hamiltonoperatoren i kulekoordinatar:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right] + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2mr^2} + V(r) \; . \tag{43}$$

$\hat{\mathbf{L}}^2$ of $\hat{L}_z$ i kulekoordinatar:

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = -\hbar^2\left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] \; , \tag{44}$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi} \; . \tag{45}$$

$[\hat{H}, \hat{\mathbf{L}}^2] = [\hat{H}, \hat{L}_z] = 0$. Felles eigenfunksjonar på forma $\psi(r,\theta,\phi) = R(r)Y(\theta,\phi)$. Eigenverdilikningar for $\hat{\mathbf{L}}^2$ of $\hat{L}_z$:

$$\hat{\mathbf{L}}^2 Y_{lm}(\theta,\phi) = \hbar^2 l(l+1)Y_{lm}(\theta,\phi) \; , \tag{46}$$

$$\hat{L}_z Y_{lm}(\theta,\phi) = \hbar m Y_{lm}(\theta,\phi) \; , \tag{47}$$

der $Y_{lm}(\theta,\phi)$ er kulefunksjonane og der $l = 0, 1, 2, 3...$ og $m = 0, \pm 1, ... \pm l$. Kulefunksjonane $Y_{lm}(\theta,\phi) = \Theta_{lm}(\theta)e^{im\phi}$ utgjer eit fullstendig funksjonssett på kula. $Y_{lm}(\theta,\phi) \to (-1)^l Y_{lm}(\theta,\phi)$ under paritet $\mathbf{r} \to -\mathbf{r}$. Differensiallikning for $\Theta_{lm}(\theta) = P_l^m(x)$ med $x = \cos\theta$

$$\left[(1-x^2)\frac{d^2}{dx^2} - 2x\frac{d}{dx} + l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2}\right] P_l^m(x) = 0 \; . \tag{48}$$

Løysing for $m = 0$ ved hjelp av potensrekkjemetoden. Rodrigues' formel for Legendre-polynoma

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{dx^l}(x^2-1)^l \; , \tag{49}$$

der $P_l(x) \equiv \Theta_{l0}(x)$. Legendre-polynoma er polynom av grad n og med paritet $(-1)^n$. Assosierte Legendre-polynom kan ein få frå $P_l(x)$:

$$P_l^{|m|}(x) = \left(1-x^2\right)^{\frac{m}{2}}\frac{d^m}{dx^m}P_l(x) \; . \tag{50}$$

Her er $m = 0, \pm 1... \pm l$.

Radiallikning for $R(r)$ i kulesymmetrisk potensial

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \left\{\frac{2m}{\hbar^2}\left[E - V(r)\right] - \frac{l(l+1)}{r^2}\right\} R(r) = 0 \tag{51}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(r)}{dr^2} + V_{\text{eff}}(r)u(r) = Eu(r) \; , \tag{52}$$

med $V_{\text{eff}} = V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}$ og $u(r) = rR(r)$. Det andre leddet i $V_{\text{eff}}(r)$ kallast *sentrifugalleddet* og tilsvarer effektivt ei kraft $\sim -\frac{1}{r^3}$ vekk frå origo. Ein har i tillegg

(1) For $l = 0$ er $V_{\text{eff}} = V(r)$ og potensialet blir grunnare for aukande l. Ein ventar difor at grunntilstanden har $l = 0$ sidan dette gjev djupast brønn.

(2) For potensial $V(r)$ slik at $V(r) \to 0$ når $r \to \infty$ har bundne tilstandar $E < 0$.

(3) For store r går $u \sim e^{-Kr}$, der $K = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$.

(4) For potensial som er mindre singulære enn er $\frac{1}{r^2}$ er $u_l(r) \sim r^{l+1}$ for små r. Dette gjeld for alle l.

Radiallikninga for $v(\rho)$ i Coulombpotensialet er

$$v'' - v' + \frac{\lambda}{\rho}v - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \quad = \quad 0\ . \tag{53}$$

der $\rho = r\sqrt{-8mE/\hbar^2}$ er dimensjonslaus og $u(\rho) = e^{-\rho/2}v(\rho)$. Potensrekkjemetoden for å løyse radiallikninga for Coulombpotensialet:

$$v(\rho) \quad = \quad \sum_{n=0}^{\infty} a_n \rho^{l+n+1}\ . \tag{54}$$

Rekursjonsformel for a_n

$$a_n \quad = \quad a_{n-1}\frac{n+l-\lambda}{n(n+2l+1)}\ . \tag{55}$$

Rekkja må bryte av og dette gjev spektret

$$E_n \quad = \quad -\frac{1}{2}(Z\alpha)^2\frac{mc^2}{n^2}\ , \tag{56}$$

der Z er ladninga til kjerna, α er finstrukturkonstanten og $n = n_r + l + 1$ er *hovudkvantetalet*. For Coulombpotensialet er energien berre avhengig av summen av l og n_r. Dette impliserer at degenerasjonsgraden er lik n^2. For andre kulesymmetriske potensial vil energien vere avhengig av l og n_r separat. Då er degenerasjonsgraden lik $2l+1$. Spektroskopisk notasjon $l = 0$ er s-tilstandar, $l = 1$ er p-tilstandar, $l = 2$ er d-tilstandar osb.