Kvantmekanik

-

Föreläsning 1

Gillis Carlsson
gillis.carlsson@matfys.lth.se

Föreläsningarna i kvantmekanik

LP1

- V1): Repetition av kvant-nano kursen. Sid 5-84
- V2 :
- V3 : Formalism (I). Sid 109-124, 128-131, 185-189
- V3 : Formalism (II). Sid 109-124, 128-131, 185-189
- V4 : Approximativa beräkningsmetoder. Sid. 135-146
- V4 : Sfärisk symmetri. Sid 151-160
- V4 : Väteatomen och störningsräkning i He. Sid. 163-173
- V5 :
- V6 :
- V7 : Harmonisk oscillator och Atomkärnans struktur
- V7 : Sammanfattning och genomgång av ex-tenta

V9: Kvantmekanik tentamen

LP2

Dagens föreläsning

Repetition, sid 1-84 i *kvantvärldens fenomen*

Repetition: Kap 1

Viktiga saker från kapitel 1, *Partiklar och vågor*

- Våg-partikel dualism för ljus och massiva partiklar
- de Broglies relation mellan rörelsemängd och våglängd
- Postulat
- Heisenbergs obestämbarhets relationer

Våg-partikel dualism för ljus

- Vågmodellen för ljus förklarar många optiska fenomen
- Men ljus kan också uppföra sig som partiklar,
  Ex. Fotoelektriska effekten
- Ljuspartiklarna kallas Fotoner och har energi $E = \hbar\omega$
- Vinkelfrekvens: $\omega = 2\pi\nu$
- Frekvens: $\nu = \frac{c}{\lambda}$

Våg-partikel dualism för massiva partiklar

- I klassisk mekanik beskrivs partiklars uppförande med en partikel model !
- Typisk partikelgenskap: lokaliserad och förutsägbar position
- Men partiklar kan också uppföra sig som vågor,
  Ex. interferensfenomen
- de Broglie våglängden λ för en partikel med rörelsemängd p defineras enligt $\lambda = h/p$

Viktiga samband för Fotoner och massiva partiklar

Fotoner

Energi: $E = \hbar\omega = h\nu$

Vågvektor: $\vec{k}$ där $|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$

Rörelsemängd: $\vec{p} = \hbar\vec{k}$

$|\vec{p}| = \hbar|\vec{k}| = \hbar\frac{2\pi}{\lambda} = \frac{h}{\lambda}$

ger Våglängd: $\lambda = \frac{h}{|\vec{p}|}$

Partiklar

Energi: $E = m_0 c^2 + \frac{m_0 \vec{v}^2}{2}$

Rörelsemängd: $\vec{p} = m\vec{v}$

Våglängd: $\lambda = \frac{h}{|\vec{p}|}$

$\omega = 2\pi\nu$

$\hbar = \frac{h}{2\pi}$

Definitioner

Vågfunktionen: $\Psi\left(\vec{r}, t\right)$

Sannolikhetstäthet: $\rho\left(\vec{r}, t\right) = \left|\Psi\left(\vec{r}, t\right)\right|^2$

Normering:

$\int_{-\infty}^{\infty} \rho\left(x, t\right) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left|\Psi\left(\vec{r}, t\right)\right|^2 dx = 1$

Sannolikhetstolkning:

$P\left(x_1 < x < x_2\right) = \int_{x_1}^{x_2} \rho\left(x, t\right) dx$

Superponering: $\Psi = \Psi_1 + \Psi_2$

$\rho = |\Psi|^2 = |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 + \Psi_1^* \Psi_2 + \Psi_1 \Psi_2^*$

Heisenbergs obestämbarhetsrelationer

- Vågfunktionen beskriver en sannolikhetsfördelning och det går inte att skriva en vågfunktion där både position och rörelsemängd har givna värden
- Sambandet mellan utbredningen av vågfunktionens sannolikhetsfördelning i x och p anges av Heisenbergs obestämbarhetsrelation:

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2 \tag{1}$$

- Motsvarande fördelning finns också i E och t

$$\Delta E \cdot \Delta t > \hbar/2 \tag{2}$$

Repetition: Kap 2

Viktiga saker från kapitel 2, *Schrödingerekvationen*

- Schrödingerekvationen
- Potentiel energi

Schrödingerekvationen

- Tidsberoende Schrödingerekvationen:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi \tag{3}$$

  beskriver hur vågfunktioner ändras med tiden
- Vågfunktionerna kan beskriva tex elektroner som tunnlar genom en barriär eller en alpha partikel som tunnlar ut från en atomkärna
- I kvantnano kursen löstes S.E. för en partikel i en dimension bla för styckvis konstanta potentialer

Potentialer

- I kvantmekaniken används ofta inga krafter utan istället bara potentialfunktioner
- Givet en potentialfunktion beskriver Schrödingerekvationen hur partiklar rör sig

Samband mellan kraft och potential:

Kraft: $\vec{F} = -\nabla V$

Klassiska uttrycket för totala energin är summan av kinetisk och potentiell energi:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

Repetition: Kap 3

Viktiga saker från kapitel 3, *Stationära strömmar - reflektion,transmission och tunneleffekt*

- Tidsoberoende Schrödingerekvationen
- Planvågor

Tidsoberoende Schrödingerekvationen I

Tidsberoende SE:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \Psi + V\Psi$$

Om en vågfunktion kan faktoriseras:

$$\Psi(x,t) = \phi(x)e^{-iEt/\hbar} = \phi(x)e^{-i\omega t}$$

där $\phi(x)$ uppfyller tidsoberoende Schrödingerekvationen:

$$E\phi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \phi + V\phi$$

säger man att partiklarna är i ett stationärt tillstånd, ty

$$|\Psi(\vec{r},t)|^2 = |\Psi(\vec{r})|^2$$

Tidsoberoende Schrödingerekvationen II

- Bl.a. alla bundna tillstånd är stationära
- Generallt löser man tidsoberoende S.E. (andra ordningens ordinär differentialekvation) numeriskt för en given potential V(x)
- För speciella potentialer, t.ex. de styckvis konstanta och den harmoniska oscillatorn $V(x) = cx^2$, kan den tidsoberoende S.E. lösas analytiskt
- I kvantnano kursen löstes SE för endimensionella problem med enkla potentialer
- I denna kursen blir det 3 dimensioner och bla Coulomb potentialen

Tidsoberoende S.E. med konstant potential

Om $V = V_0$=konst. fås tidsoberoende SE:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi}{dx^2} + V_0\phi = E\phi$$

om $E > V_0$ (fria partiklar) får man

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} + k^2\phi = 0$$

med Vågtalet: $k = \sqrt{2m(E - V_0)/\hbar^2}$

Lösningarna kallas planvågor:

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

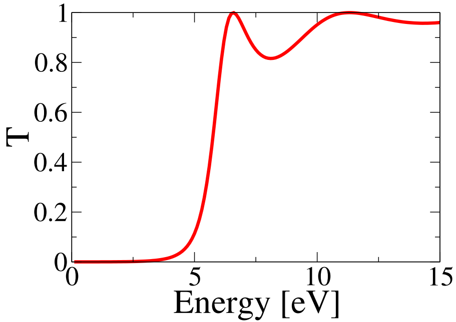
Reflektion och transmission, tunnling

- För planvågor definierar man (i analogi med optiken) reflektion R och transmission T vid ett potentialsprång enligt (se sid. 52 i boken för beteckningar)

$$R = \frac{|S_{refl}|^2}{|S_{in}|^2}, T = \frac{|S_{trans}|^2}{|S_{in}|^2} \tag{4}$$

- Vid transmission över ändliga potentialgropar uppstår interferensfenomen
- Tunnling är ett exempel på ett kvantmekaniskt fenomen som saknar motsvarighet i klassisk fysik och har konsekvenser inom vitt skilda områden t.ex:
    - $\alpha-$sönderfall
    - Sveptunnelmikroskop (STM)

Tunnling genom potentialbarriär



Tunnling genom potentialbarriär med:
bredd=0.5 nm
höjd=5 eV

Repetition: Kap 4

Viktiga saker från kapitel 4, *Bundna tillstånd*

- Bundna tillstånd
- Kvantbrunnar med oändligt och ändligt höga väggar
- Ljusutsändning

Bundna tillstånd

- En partikel som befinner sig i en 'potentialgrop', dvs som har en totalenergi lägre än omkringliggande potentialer, är bunden
- För att beskriva bundna (stationära) tillstånd i en dimension används den tidsoberoende S.E.

$$-\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2\phi(x)}{\partial x^2} + V(x)\phi(x) = E\phi(x) \tag{5}$$

- S.E. (ovan) har då diskreta energivärden E_n med tillhörande vågfunktioner $\phi_n(x)$ som lösningar för en given potential $V(x)$

Oändlig- och ändlig kvantbrunn

- oändligt djup kvantbrunn
- ändligt djup kvantbrunn
- Pauli principen

Visas på tavlan

Ljusutsändning

- Ljus (fotoner) kan utsändas när en partikel deexciteras från ett högre bundet energitillstånd E_i (initialtillstånd) till ett lägre E_f (finaltillstånd)
- Fotonens energi blir $E = E_i - E_f = \hbar\omega$, så att våglängden (färgen!) kan beräknas enligt $\lambda = 2\pi c/\omega$ (där c är ljusfarten)
- För endimensionella kvantbrunnar gäller urvalsregeln att initialtillståndet och finaltillståndet skall ha olika paritet (olika urvalsregler fås för olika experimentella villkor)

Problem att öva på härnest

För F-studenter

- Ohlen, kap. 1: 4,5,8 och 11
- Ohlen, kap. 4: 1,2,9 och 11

Hemsida: live@lund

För N-studenter

- Hilbert spaces: 1-15

Hemsida: www.matfys.lth.se/education/FMFF15/