Kvantna mehanika

(Ponovitev MF1)

V 1D namesto klasičnega $x(t)$, valovna funkcija $\Psi(x, t)$

Z IC $\Psi(x, 0)$, rešimo NSE (kvantnomehanska 2NZ)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = H \Psi(x, t)$$ (časovni razvoj VF?)

↳ $H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$

Rešitev $\Psi(x, t)$ uporabimo za izračun pričakovano vrednost

- kraja $\langle x, t \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t)\, x\, \Psi(x, t)\, dx$
- gibalne količine $\langle p, t \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t)\, p\, \Psi(x, t)\, dx$

↓

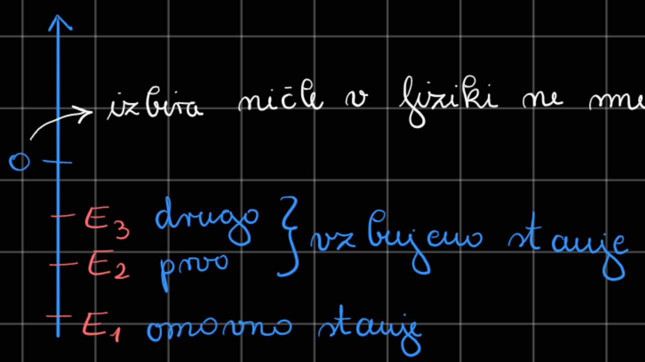
operator GK, dogovor, da ne pišemo strešice

$$p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

Z čas. razvojem lahko izračunamo vrednost VF ob času.

SSE: $H \Psi_n(x) = E_n \Psi_n(x)$ (vsak Hamiltonian ima lastne vrednosti)

Narišemo lastne vrednosti (najverjetnejše napaka, če gre lastno stanje $\to -\infty$)



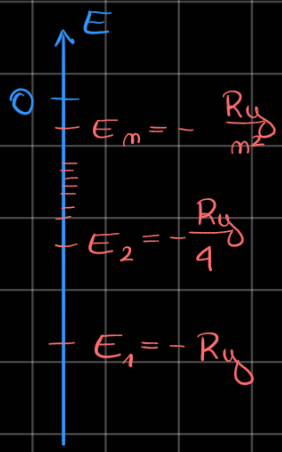
Lahko obstajajo različne rešitve za eno stanje - degenerirane rešitve

$$H\psi_n^{(1)}(x) = E_n \psi_n^{(1)}(x)$$

$$H\psi_n^{(2)}(x) = E_n \psi_n^{(2)}(x)$$

$\psi^{(1)}, \psi^{(2)}$ različni VF, ki rešita stanje n $\Rightarrow$ 2x degenerirano stanje

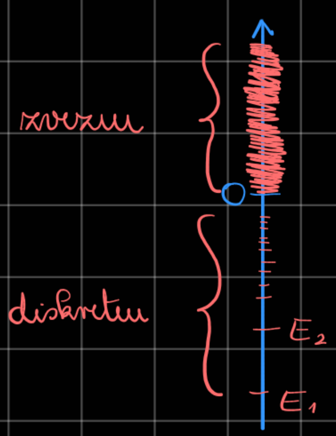
P: H-atom



$Ry = 13'6\,eV$

Zaradi spina je E_1 vodika 2x degenerirano. Zaradi KŠ n, l, m, m_s je E_2 8x degenerirano.

Zemlja s pozitivno lastno E, pobegne Soncu. Pri H-atomu so dovoljene vse pozitivne energije — zvezni spekter



spekter

Za nedegenerirano stanje obstaja neskončno VF, saj lahko množimo s skalarjem $\lambda \in \mathbb{C}$:

$$H\psi(x) = E\psi(x) \quad /\lambda$$
$$H[\lambda\psi(x)] = E[\lambda\psi(x)]$$

Problem rešimo z normalizacijo $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \Rightarrow |\lambda|^2 = 1 \Rightarrow \lambda = e^{i\alpha}$, $\alpha \in \mathbb{R}$

Torej, množenje z $e^{i\alpha}$ spremeni matematiko, fizika (in opazovanje) ostane isto.

$2\times$ degenerirano stanje : $\psi^{(1)}, \psi^{(2)}$ lin. neodv. rešitvi

$$H\psi^{(1)} = E\psi^{(1)}$$
$$H\psi^{(2)} = E\psi^{(2)}$$

za $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$: $H[\alpha\psi^{(1)} + \beta\psi^{(2)}] = \alpha \underbrace{H\psi^{(1)}}_{E\psi^{(1)}} + \beta H\psi^{(2)}$

$$= E[\alpha\psi^{(1)} + \beta\psi^{(2)}]$$

Časovni razvoj VF

IC $\psi(x,0)$ zapišemo kot lin. kombinacijo $\psi(x,0) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x)$, kjer (1)

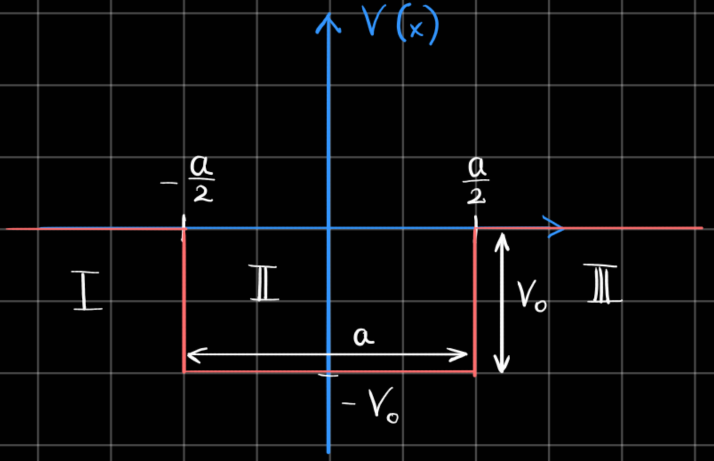
$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\psi(x,0)dx.$$

z (1) in rešitvami SSE, dobimo časovni razvoj preko enačbe

$$\psi(x,t) = \sum_n c_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}\psi_n(x)$$

① Končna potencialna jama

Izberemo $V(x)=0$ zunaj jame, in sredina jame na $x=0$. Globina jame je V_0



Vezana lastna stanja končne potencialne jame $E<0$. Rešujemo SSE

↳ SSE ⇒ totalni diferencial

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$ (LDE 2. reda ⇒ 2 rešitvi)

Reševanje razdelimo na I, II in III (glej graf jame)

Za reševanje glej zapiske starih predmetov

$$\psi_I(x) = Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x} \quad ; \quad \kappa = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad , \quad E<0$$

$$\psi_{II}(x) = Ce^{ikx} + De^{-ikx} \quad ; \quad k = \sqrt{\frac{2m(V_0+E)}{\hbar^2}}$$

$$\psi_{III}(x) = Fe^{\kappa x} + Ge^{-\kappa x}$$

Ne poznamo lastne en. E in konstant A, B, C, D, F, G

Člena $e^{\kappa x}$ v ψ_{III} in $e^{-\kappa x}$ v ψ_I zaradi eksponentnega naraščanja ne moremo normirati in jih zato črtamo.

$$\psi_I = A e^{Kx}$$
$$\psi_{II} = C e^{ikx} + D e^{ikx}$$
$$\psi_{III} = G e^{-Kx}$$

Upoštevamo BC (zveznost in zvezna odvedljivost)

$$\psi_I\left(-\frac{a}{2}\right) = \psi_{II}\left(-\frac{a}{2}\right) \qquad \psi_{II}\left(\frac{a}{2}\right) = \psi_{III}\left(\frac{a}{2}\right)$$

$$\psi_I'\left(-\frac{a}{2}\right) = \psi_{II}'\left(-\frac{a}{2}\right) \qquad \psi_{II}'\left(\frac{a}{2}\right) = \psi_{III}'\left(\frac{a}{2}\right)$$

Dobimo homogen sistem $\underset{}{\overset{?}{\underline{\text{lin.}}}}$ enačb, $M \in \mathbb{R}^{4\times 4}$

Rešitev sistema je netrivialna, ko $\det(M) = 0$. Determinanta odvisna od E.

Reševanje sistema enačb je ponavadi fuj fuj.

---

dijaško reševanje $!=$ MF1 reševanje

Predpostavimo sodo funkcijo potenciala $V(x) = V(-x)$

$$H\,\psi(x) = E\,\psi(x)\ ;\ H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

Zamenjava $x \mapsto -x$: - po predpostavki $V(x) = V(-x)$

$$-\frac{d^2}{dx^2}\psi(-x) = \frac{d^2}{dx^2}\psi(x)$$

$\Rightarrow$ sod Hamiltonian

$H\psi(-x) = E\psi(-x)$

→ E ni degeneriran, dokazujemo $\psi(-x) = e^{i\alpha}\psi(x)$ Kaj smo tu dokazovali?

$D: x \longmapsto -x: \quad \psi(x) = e^{i\alpha}\psi(-x)$
$= e^{2i\alpha}\psi(x)$

$(e^{i\alpha 2}) = 1$
$(e^{i\alpha})^2 = 1$
$e^{i\alpha} = \pm 1$

$\Rightarrow \psi(x)$ soda ali liha (glej def. sodosti, lihosti funkcije)

→ E degeneriran: zapišemo lin. komb, da imamo sodo/liho fjo.

$\psi(x) + \psi(-x)$ // soda
$\psi(x) - \psi(-x)$ // liha

Z uporabo tega izreka, $\overset{2\times}{\text{rešujemo}}$ 2x2 sistem

SOD:
$$\left.\begin{aligned} \psi_I &= Ae^{Kx} \\ \psi_{II} &= B\cos kx \\ \psi_{III} &= Ae^{-Kx} \end{aligned}\right\} \rightarrow \text{sodost}$$

$\psi_{II}\left(\frac{a}{2}\right) = \psi_{III}\left(\frac{a}{2}\right)$

$B\cos\left(k\frac{a}{2}\right) = Ae^{-K\frac{a}{2}}$ (1)

$\psi'_{II}\left(\frac{a}{2}\right) = \psi'_{III}\left(\frac{a}{2}\right)$

$-Ae^{-K\frac{a}{2}} = -kB\sin\left(k\frac{a}{2}\right)$

$Ae^{-K\frac{a}{2}} = kB\sin\left(k\frac{a}{2}\right)$ (2)

// zaradi sodosti obravnavamo samo $\frac{a}{2}$ ($-\frac{a}{2}$ je enaka)

② / ① : $K = k \, tg\left(k \frac{a}{2}\right) \Rightarrow tg\left(k \frac{a}{2}\right) = \frac{Ka}{ka}$ (3)

LIH : $\psi_I(x) = -Ae^{Kx}$

$\psi_{II}(x) = B \sin(kx)$

$\psi_{III}(x) = Ae^{-Kx}$

$\Rightarrow -ctg \frac{ka}{2} = \frac{Ka}{ka}$ (4)

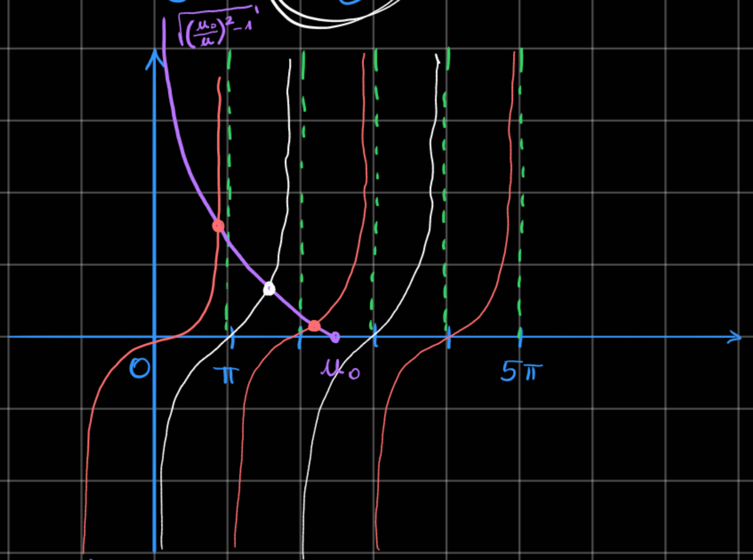
Transcendentna enačba → grafična rešitev ali v limiti

V nalogi vnaprej podana vrednost u_0, brezdimenzijski zapis $u = ka$

$(ka)^2 + (Ka)^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} a^2 = u_0^2$

(3) : $tg \frac{ka}{2} = tg \frac{u}{2} = \sqrt{\left(\frac{u_0}{u}\right)^2 - 1}$

(4) : $ctg \frac{ka}{2} = ctg \frac{u}{2} = \frac{\sqrt{u_0^2 - u^2}}{u} = \sqrt{\left(\frac{u_0}{u}\right)^2 - 1}$



u_0 naključno izbran

↱ celi del

št. vezanih stanj = $\lfloor \frac{u_0}{\pi} \rfloor + 1$

ni degeneracije ?

Vedno bo vsaj eno vezano stanje, ker sekamo vejo

Limitni primeri: 1) $u_0 \to \infty$, presečišča so potem v polih, saj gre $\sqrt{\left(\frac{u_0}{u}\right)^2-1}$ proti ∞

$u = n\pi,\ n \in \mathbb{N}$

$$\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 = \frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2} \Rightarrow E = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 - V_0$$

v neskončni potencialni jami $V_0 \to \infty$ in $a = \text{konst.}$

2) limita, kjer $V_0 \to \infty$ in $a \to 0$

$V_0 a = \lambda = \text{konst.}$, potencial je $V(x) = -\lambda\,\delta(x)$

iz def. u_0 gre proti 0

opazujemo sodi del, ker $u_0 \to 0$

$$\operatorname{tg}\frac{u}{2} = \sqrt{\left(\frac{u_0}{u}\right)^2 - 1}$$

Po def. $u \leq u_0$, nastavek $u = \overset{\substack{\text{majhen}\\ \downarrow}}{u_0 - \varepsilon}$, $\varepsilon \ll u_0$

$\downarrow$ še manjši

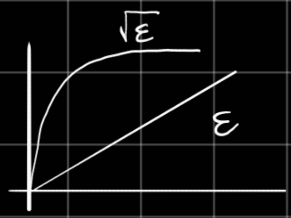
Taylorjev razvoj $\operatorname{tg}\frac{u_0-\varepsilon}{2} = \sqrt{\left(\frac{u_0}{u_0-\varepsilon}\right)^2 - 1}$

$$\Big\downarrow \text{TAY TAY} \quad = \sqrt{\left(\frac{1}{1-\frac{\varepsilon}{u_0}}\right)^2 - 1}$$

$$\frac{u_0-\varepsilon}{2} = \sqrt{\left(1+\frac{\varepsilon}{u_0}\right)^2 - 1}$$

$$= \sqrt{1 + 2\frac{\varepsilon}{u_0} - 1}$$

$$= \sqrt{2\frac{\varepsilon}{u_0}}$$



$$\sqrt{\varepsilon} \gg \varepsilon \qquad \frac{u_0 - \varepsilon}{2} \to \frac{u_0}{2}$$

$$\Rightarrow \quad \frac{u_0^3}{8} = \varepsilon$$

$$u = u_0 - \frac{u_0^3}{8}$$

$$k = \sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}} \qquad \text{in} \quad u = ka$$

$$\frac{u_0 - \left(\frac{u_0}{2}\right)^3}{a} = \sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}} \quad /^2 \cdot a^2$$

$$u_0 \underbrace{- 2\frac{u_0^4}{8}}_{} + \cancel{\left(\frac{u_0}{2}\right)^6} = a^2 \frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0)$$

ne moremo pokrajšati,

ker je to zadnji pomemben red

// definicija u_0

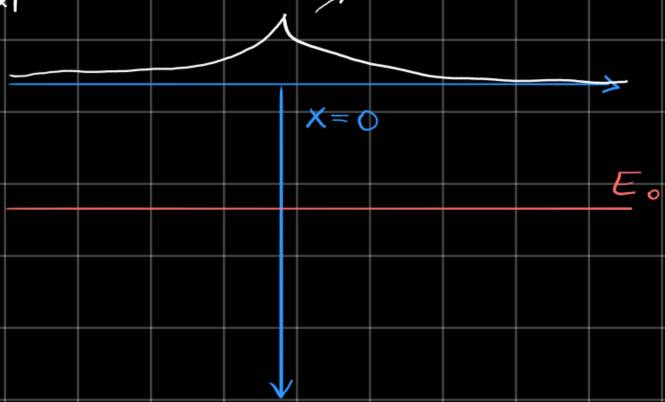
$$\cancel{\frac{2mV_0}{\hbar^2}a^2} - \frac{1}{4}\left(\frac{2m}{\hbar^2}V_0 a^2\right)^2 = a^2\frac{2m}{\hbar^2}E + \cancel{a^2\frac{2m}{\hbar^2}V_0}$$

$$E = -\frac{1}{4}\frac{2m}{\hbar^2}V_0^2 a^2$$

$$E_0 = -\frac{m}{2\hbar^2}\lambda^2$$

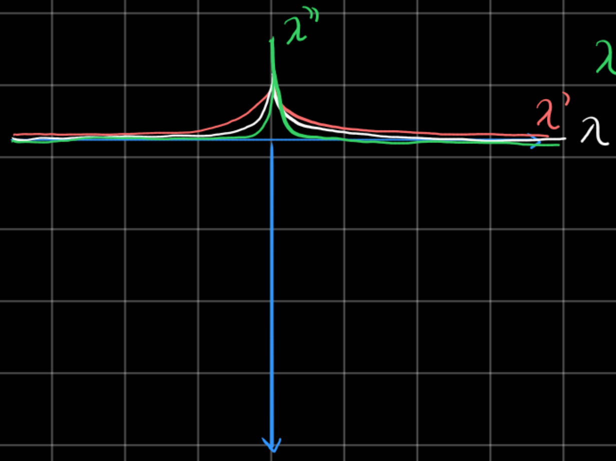
$$\psi(x) = Ae^{-k_0|x|}$$

ni zvezno odvedljiva fja za potencial δ fje



V naravi $\delta(x)$ potenciala ni, so we're OK.

$$K_0 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\,\frac{m}{2\hbar^2}\,\lambda^2} = \frac{m}{\hbar^2}\lambda$$



Konstanto A preko normalizacije:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi \, dx$$

$$= 2 \int_{-\infty}^{\infty} A^2 e^{-2K_0 x} \, dx$$

sodost

$$= 2A^2 \frac{1}{(-2K_0)} e^{-2K_0 x} \Big|_0^{\infty}$$

$$= \frac{1}{K_0} A^2 (0-1) \Rightarrow A^2 = K_0$$