Kvantna mehanika 1

→ 1 delec, nerelativistično ; še ne bomo delali interakcij
→ formalni zapis (operatorji vektorji), simetrije (vrtilna, gibalna...),
sipanje (zvok, svetloba ...
→ teorija perturbacij
→ statistike malo
→ "izpeljava" Schrödingerjeve enačbe kot je to naredil Feynman
↳ štarta iz klasične mehanike

Zgodovina

1900
1905 → začetki kvantne mehanike } Einstein
1913 → Bohr ! spektralne črte... }
1925 → **Heisenberg**
1926 → Schrödinger
1927 → **Pauli**
1928 → Dirac → relativistična posplošitev za 1 delec

⋮

→ Feynman → "Kvantne mehanike se ne da izpeljat.
Pa tut razumet se ne da."
Ampak v smislu, da ne razumemo zakaj svet funkcionira, kot funkcionira... zakaj e⁻ tunelira...

Izpeljava Schrödingerjeve enačbe (kot je on to naredil)

★ Delec z gibalno količino p "ima" valovno dolžino λ
zveza:
$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{\hbar}$$
↳ to je eksperimentalno dejstvo

★ Delec z energijo E "ima" $\omega = 2\pi\nu$. (ν – frekvenca)
zveza:
$$\omega = \frac{E}{\hbar}$$

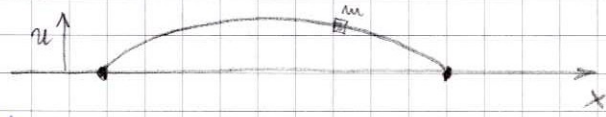
★ Delcu se da pripisati ravni val $\sim \cos(kx - \omega t)$

Debye se je usajal in rekel → če je delec valovanje, kje je valovna enačba?
In Schrödinger je dobil to v razmislek.

Valovna enačba:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$$ → to pride iz Newtonove enačbe: $\sum F = m\ddot{u}$

struna



rešitev:

$$u = A\cos(kx - \omega t)$$

$$k^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \Rightarrow \omega = ck \Rightarrow \frac{E}{\hbar} = c\frac{p}{\hbar} \not\Rightarrow$$ ne pelje do zveze $E = \frac{p^2}{2m}$

→ Taka valovna enačba ne pelje v pravo smer.

Difuzijska enačba.

$$D\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{\partial T}{\partial t}$$ za $T = T_0\cos(kx - \omega t)$

→ to sploh ni rešitev enačbe.
Sploh ne da enačba valovanje!

Zakaj bi pa difuzijska enačba vseeno znala bit fajn. Je, D je lahko kompleksen? ojojoj.

"Oni so se odkar so prišla kompleksna št, bali da bodo prišla v fiziko."

→ ker maš probleme z merjenjem takih količin

$D \in \mathbb{C}$! naj bo $u = e^{i(kx - \omega t)}$

gremo s tem v enačbo

→ $$+Dk^2 = +i\omega$$

Kakšen mora biti D, da bo $E = \frac{p^2}{2m}$?
→ $= \hbar\omega$

→ $$D \cdot \frac{p^2}{\hbar^2} = i\frac{E}{\hbar}$$

$$-iD\frac{p^2\hbar}{\hbar^2} = E = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow D = \frac{i\hbar}{2m}$$

$$\boxed{-i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}}$$

→ Ampak potem je tudi v ψ-ju kompleksnost...

Kaj pa začetni pogoji?...
→ $\psi(x,0)$ → samo en pogoj

Kaj je novega? $\Rightarrow$ v enačbi imamo i, ψ je tudi kompleksen

Vprašanje se postavi: kaj je ψ?
ψ je nemerljiv, ne da se ga meriti. Da pa se meriti verjetnostno gostoto.

v 1D: ob času t

$\hookrightarrow \Delta P \Rightarrow$ verjetnost, da je ob času t delec med a in b

$$\Delta P = \int_a^b \underbrace{|\psi(x,t)|^2}_{\text{gostota verjetnosti } \rho(x,t)} dx$$

$$dp = \rho\, dx$$

$\nearrow$ Maxwellove enačbe so linearne. Ta enačba je tudi.

Kakšni so delci, ki jih opišemo s to enačbo? So to delci, ki izginjejo, nastajejo?
Mi bomo delali z e^-, in sicer s takim, ki ne izgine ali nastane! Ker Schrödingerjeva enačba je kul za delec, ki ne razpade / ne gremo do takih energij!.
Za nas je torej e^- trdost in neuničljiv.

$\hookrightarrow$ Torej:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x,t)\, dx = 1$$

$\hookrightarrow$ Torej $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx \Rightarrow \psi$ mora biti integrabilna v kvadratu

v 3D:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi \quad \text{in} \quad P = \iiint \rho(\vec{r},t)\, dV = 1$$

★ Poglejmo delec v praznem prostoru / brez potenciala: $V = 0$

$\vec{F} = -\nabla V = 0 \Rightarrow \vec{a} = 0 \Rightarrow v = \text{konst.}$ $\rightarrow$ To je klasično. Ampak to mora tudi tu veljati.

$\rightarrow \frac{1}{2}mv^2$ je klasična energija tega delca.

$\hookrightarrow$ Kako najdemo ψ za delec, ki ima točno določeno energijo?

$$E = \frac{1}{2}mv^2 \Rightarrow E = \frac{p^2}{2m} \quad \text{in} \quad p = \hbar k = \frac{\hbar 2\pi}{\lambda}$$

Poskusimo z: $A \cdot e^{i(kx-\omega t)}$

damo v enačbo:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{i(kx-\omega t)} = \hbar\omega e^{i(kx-\omega t)} = \frac{-\hbar^2}{2m}(-k^2)\, e^{i(kx-\omega t)}$$

$\hookrightarrow E = \frac{p^2}{2m} \rightarrow$ je gl. Res je. Reši enačbo.

še tole: $\int_a^b |\psi|^2 dx = \int_a^b |A|^2 dx = 1 \Rightarrow |A|^2 = \frac{1}{b-a}$

težava, če pošljemo $b \to \infty$, $a \to -\infty$

Dobimo $|A|^2 \sim 0$. Tak ψ brej NI dober!!!

Spomnimo se ∞ strune:

$u = f(x-ct) + g(x+ct)$

v levo in v desno premikajoče se zadeve

$\hookrightarrow$ f in g sta karkoli

"Karkoli taliko govoriš. Katšne koli neumnosti govoriš, vse se sliši."

$\hookrightarrow$ Poskusimo:

Naj bo karkoli, ampak, da bomo lahko normirali:

Takole:

$$\psi(x,t) = \sum_k A_k e^{i(kx-\omega_k t)}$$

preide v Fourierov integral

$$\Rightarrow \psi(x,t) = \int \phi(k) e^{i(kx-\omega_k t)} dk \quad ; \text{kjer: } \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

To se pa da normirati.

da bodo posamezni rešitve enačbe

Preverimo, da reši enačbo:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) = \int \phi(k)\, \hbar\omega_k\, e^{i(kx-\omega_k t)} dk = \int \phi(k) \frac{\hbar^2 k^2}{2m} e^{i(kx-\omega_k t)} dk$$

je res enako. Ker smo tako naštimali.

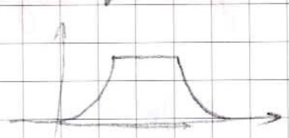
↗ veljati pa mora $\int_{-\infty}^{\infty}|\psi|^2dx=1$

Spomnimo se analize /Parsevalova enačba/.

↳ poznamo ψ, kakšen je ϕ.

Takole je:

ob času $t=0$ v prostor postavimo delec z neko $\psi(x,0)$.



Poiščimo najprej ϕ za to funkcijo.

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

↳ razvijemo ψ po e^{-ikx}

Preverimo: $$\int_{-\infty}^{\infty}|\psi|^2dx=1=\int\psi^*(x,t)\psi(x,t)\,dx=$$

$$=\int dx\Big(\underbrace{\int\phi^*(k_1)\,e^{-i(k_1x-\omega_1t)}dk_1}_{\psi^*}\Big)\Big(\underbrace{\int\phi(k_2)\,e^{i(k_2x-\omega_2t)}dk_2}_{\psi}\Big)=$$

$$=\iint\Big(\phi^*(k_1)\phi(k_2)\Big(\int_{-\infty}^{\infty}e^{i(k_2-k_1)x}dx\Big)\underbrace{e^{i(\omega_1-\omega_2)t}}_{=\,e^{i(k_1^2-k_2^2)t}}\Big)dk_1\,dk_2$$

↳ ko je $k_1=k_2$, je to 1

intermezzo:

$$\psi(x)=\int\phi(k)\,e^{ikx}\,dk$$ → časa ne pišemo, da je manj dela

$$=\frac{1}{2\pi}\iint\underbrace{\psi(x')\,e^{-ikx'}dx'}_{\phi(k)}\;e^{ikx}\,dk$$

$$=\int\psi(x')\,f(x')\,dx' \qquad f(x')=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}e^{ik(x-x')}dk=\delta(x'-x)$$

↳ "Ta funkcija se ne sme pojaviti na matematični tabli, se kar tresejo".

→ torej: $$\int_{-\infty}^{\infty}e^{i(k_2-k_1)x}dx=2\pi\,\delta(k_1-k_2)$$

torej: $$\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty}|\psi|^2dx}_{1}=2\pi\int|\phi(k)|^2dk$$ → Parseval

Če se spomnemo na začetek: Želimo delec z določeno energijo. In videli bomo, da lahko dosežemo, da ima energijo tam nekje, ampak vedno bo razmazano → nedoločenost