PODSTAWY FIZYKI - WYKŁAD 8

PODSTAWY FIZYKI KWANTOWEJ

Piotr Nieżurawski

pniez@fuw.edu.pl

Wydział Fizyki

Uniwersytet Warszawski

http://www.fuw.edu.pl/~pniez/bioinformatyka/

Fala płaska – grzbiety suną w prawo

λ – długość fali

T – okres fali

Przykład zespolonej fali płaskiej

$$\Psi(x,t) = A\exp\left(i2\pi\left(\frac{x}{\lambda} - \frac{t}{T}\right)\right)$$
$$= A\left[\cos\left(2\pi\left(\frac{x}{\lambda} - \frac{t}{T}\right)\right) + i\sin\left(2\pi\left(\frac{x}{\lambda} - \frac{t}{T}\right)\right)\right]$$

Sprawdź, czy

$$\Psi(x,t \pm T) = \Psi(x,t)$$

$$\Psi(x \pm \lambda,t) = \Psi(x,t)$$

$$|\Psi(x,t)|^2 \equiv \Psi^*\,\Psi = |A|^2$$

Foton – kwant pola elektromagnetycznego

Energia fotonu

$$E_\gamma = hf$$

$h \approx 6{,}6 \cdot 10^{-34}$ J s $\approx 4{,}1 \cdot 10^{-15}$ eV s – stała Plancka

$f = \frac{1}{T}$ – częstotliwość

Pęd fotonu

$$\begin{aligned} p_\gamma &= hf/c \\ &= \frac{h}{cT} = \frac{h}{\lambda} \end{aligned}$$

Przenieśmy opis falowy na elektron

Jak „wydobyć" λ oraz T z funkcji $\Psi(x,t)$ opisującej falę?

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i2\pi \frac{1}{T}\,\Psi$$

Ale $1/T$ to częstotliwość, więc możemy łatwo uzyskać hf. Tworzymy operator

$$\hat{E} = i\frac{h}{2\pi}\frac{\partial}{\partial t}$$

Wtedy

$$\hat{E}\Psi = hf\,\Psi$$

Podobnie poszukujemy operatora pędu:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = i2\pi \frac{1}{\lambda} \Psi$$

Pęd to h/λ, a więc tworzymy operator

$$\hat{p}_x = -i \frac{h}{2\pi} \frac{\partial}{\partial x}$$

Wtedy

$$\hat{p}_x \Psi = \frac{h}{\lambda} \Psi$$

Jak uwzględnić masę elektronu?

W mechanice klasycznej dla punktu materialnego bez oddziaływań mamy

$$E_k = \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m} = E$$

Próbujemy podobnie dla fali:

$$\hat{E}_k \Psi = \frac{\hat{p}^2}{2m} \Psi = \hat{E} \Psi$$

czyli

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

gdzie $\hbar \equiv \frac{h}{2\pi}$

Przechodzimy do 3D i dodajemy oddziaływanie

Laplasjan

$$\Delta \equiv \frac{\partial}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial y^2} + \frac{\partial}{\partial z^2}$$

E_p – energia potencjalna, na przykład dla układu elektron-proton

$$E_p = -k\frac{e^2}{r}$$

Równanie Schrödingera:

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

Interpretacja Ψ

Ψ – funkcja falowa

Ψ to pełny opis układu

O ile to możliwe, normalizujemy funkcję falową poprzez całkę po objętości:

$$\int |\Psi|^2 \mathrm{d}V = 1$$

i wtedy $|\Psi|^2$ jest ***gęstością prawdopodobieństwa*** znalezienia układu.

O wielkościach takich jak pęd, energia dowiadujemy się za pomocą operatorów, ale

to opowieść na kiedy indziej.

Atom wodoru, stan podstawowy

Równanie Schrödingera dla bezspinowego elektronu w polu nieruchomego protonu.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi - k\frac{e^2}{r}\Psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi$$

Jeśli założymy, ze Ψ opisuje stan o ustalonej energii E, czyli

$$\Psi = A\,\phi(x,y,z)\,\exp(-iEt/\hbar)$$

to otrzymujemy **stacjonarne równanie Schrödingera**, już bez czasu:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\phi - k\frac{e^2}{r}\phi = E\phi$$

Wyprawa w nieznane – czy równanie Schrödingera dla atomu wodoru spełnia

np. nieunormowana funkcja postaci

$$\Psi_1 = A \exp(-r/b)\ \exp(-iE_1 t/\hbar)$$

gdzie A, b, E_1 to na razie nieznane stałe? Otrzymujemy równanie bez czasu:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \exp(-r/b) - k\frac{e^2}{r}\exp(-r/b) = E_1 \exp(-r/b)$$

Mamy $r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$, więc:

$$\frac{\partial}{\partial x}\exp(-r/b) = -\frac{1}{b}\exp(-r/b)\frac{x}{r}$$
$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\exp(-r/b) = -\frac{1}{b}\exp(-r/b)\left(-\frac{x^2}{br^2} + \frac{1}{r} - \frac{x^2}{r^3}\right)$$

Podobnie z y oraz z. Po zsumowaniu:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\exp(-r/b)=-\frac{1}{b}\exp(-r/b)\left(-\frac{1}{b}+\frac{2}{r}\right)$$

Po wstawieniu do równania i uproszczeniu:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{b}\left(-\frac{1}{b}+\frac{2}{r}\right)-k\frac{e^2}{r}=E_1$$

Żądamy, aby równanie Schrödingera było spełnione dla każdego r. Grupujemy:

$$\left(\frac{\hbar^2}{mb}-ke^2\right)\frac{1}{r}-\frac{\hbar^2}{2mb^2}-E_1=0$$

A więc suma wyrazów zależnych od r musi = 0 oraz podobnie suma stałych = 0:

$$\frac{\hbar^2}{mb} - ke^2 = 0$$
$$-\frac{\hbar^2}{2mb^2} - E_1 = 0$$

Rozwiązujemy ten układ równań i otrzymujemy energię zaproponowanego stanu:

$$E_1 = -\frac{mk^2e^4}{2\hbar^2} \approx -13{,}6 \text{ eV}$$

Udało się – a nie było gwarancji, że założona funkcja spełni równanie.

Z ogólniejszych rozważań wynika, ze jest to stan podstawowy, czyli o najniższej możliwej energii.

Podobnie można zrobić z funkcją

$$\Psi_2 = A'(1 + ar)\exp(-r/b')$$

Uzyskalibyśmy wtedy pierwszy stan wzbudzony, $n = 2$.

Ogólnie

$$E_n = -\frac{\text{Ry}}{n^2}$$

dla $n = 1,\ 2,\ 3,\ 4$ ..., gdzie Ry $\approx 13{,}6$ eV