# Nerelativistična kvantna mehanika v 1D

## Schrödingerjeva enačba

Vse v 1D, smer $x$, vse nerelativistično, potencialna en. $V(x)$, sila $F=-\frac{dV}{dx}$
V klasični mehaniki bi radi $x(0), \dot{x}(0) \rightarrow x(t), t>0$
V kvantni mehaniki pa bi radi našli valovno funkcijo $\Psi(x,t)$ in potem napovedali verjetnost za detekcijo delca

$\Rightarrow$ Potrebujemo „gibalno enačbo", ki je očitno parcialna dif. enačba, ker mora vsebovati odvod po $t$ in $x$

Valovna enačba (npr. za valovanje na vrvici $u=u(x,t)$)

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

Hočemo linearnost ($u_1, u_2$ rešitvi $\Rightarrow u_1+u_2$ rešitev, splošneje: $\sum_k a_k u_k$ rešitev)
Načelo superpozicije bi radi obdržali, sicer za naše „snovne valove" ne bomo dobili IF pojavov

Kasneje pokažemo: enačba za $\Psi(x,t)$ bo morala biti 1. reda v časovnem odvodu

Še enkrat: prej smo napovedali eksaktne $x(t)$. Zdaj: $\Psi(x,t)$ in bomo lahko napovedali npr. samo

$$P(a \leq X_{delec} \leq b) = \int_a^b |\Psi(x,t)|^2 dx \quad \text{ob času } t.$$

Najprej samo prosti delci ($V=0$, $F=-dV/dx=0$)
Lokaliziran prost delec opišimo kot

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} A(k) \cdot e^{i(kx-\omega t)} dk$$

smo predpostavili...

Od valovnih paketov vemo: $E=\hbar\omega = \frac{p^2}{2m} \overset{p=\hbar k}{=} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \rightarrow \omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$ Disperzijska relacija za delec z maso $m$

Torej $\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{A(k)}_{\text{Forma tega ni bistvena}} \cdot e^{i[kx-(\frac{\hbar}{2m})k^2 t]} dk$

Vidimo:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \int_{-\infty}^{\infty} A(k) \cdot (ik)^2 e^{i[kx-\dots]} dk$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \int_{-\infty}^{\infty} A(k) \left(-i\frac{\hbar}{2m}\right) k^2 e^{i[kx-\dots]} dk$$

$\Rightarrow$ Količini $\left(\frac{i\hbar}{2m}\right)\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}$ in $\frac{\partial\Psi}{\partial t}$ sta identični!

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

Odvod 1. reda po $t$ in odvod 2. reda po $x$ $\Leftrightarrow$ disperzijska relacija $\omega \propto k^2$

To Schrödingerjevo enačbo (ki še ne vsebuje potenciala) bi lahko pojmovali kot „delovanje" dveh diferencialnih operatorjev na $\Psi$:

$$\underbrace{p^2}_{\text{iz klas. meh., „številka"}} \rightarrow -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad \text{in} \quad \underbrace{E}_{\text{„številka"}} \rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

Ta dif. operatorja delujeta na $\Psi(x,t)$ in pomenita reprezentacijsko „pravilo" za količini $p^2$ in $E$

NB Nismo *strogo* izpeljali (se je ne da), je pa konsistentna z vsemi našimi zahtevami in željami (in še mnogimi, ki jih še ne poznamo)
Jasno, da v Newtonovem režimu in pri $v \to c$ ne bo dobra.

Radi bi vključili še potenciale: $E = \frac{p^2}{2m} + V$

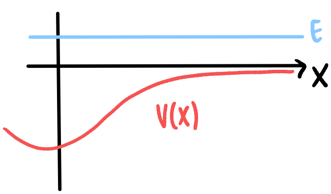
Uporabimo kar „monokromatsko" VF, $\Psi(x,t) = A\cdot e^{i(kx-\omega t)}$

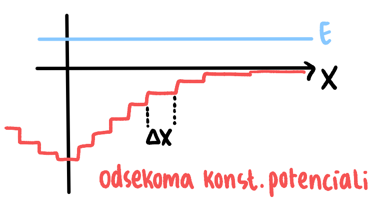
$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V = \hbar\omega \leftarrow \text{vedno celotna en.}$$

$\Rightarrow$ $\Psi(x,t)$ mora zadoščati dif. enačbi:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) + \underset{\substack{\uparrow \\ \text{za zdaj konst.} - dV/dx = 0}}{V}\cdot\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)$$

Če hočemo $V \neq$ konst.:



E ves čas konst. in $E=\hbar\omega$
k je na vsaki stopnički drugačen, i.e. $E=V_0+\frac{\hbar^2k_0^2}{2m}=V_1+\frac{\hbar^2k_1^2}{2m}=\dots$

→ To „stopničavost" poženemo v limito $\Delta x\to 0$, torej za poljuben $V(x)$:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+V(x)\cdot\Psi=i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}} \quad \text{oz.} \quad \boxed{\hat{H}\Psi=i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}}$$

Časovno odvisna (nestacionarna) Schrödingerjeva enačba (NSE)

$\hat{H}=\hat{T}+\hat{V}$ — strešica = operator „deluje na"

Hamiltonov operator (celotne energije) „Hamiltonka", „Hamiltonian"

$$\hat{T}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

$\hat{V}=V(x)$ ... za zdaj samo multiplikativen

Opomba: Vemo, da so $\cos(kx-\omega t)$, $\sin(kx-\omega t)$, $e^{i(kx-\omega t)}$, ... možne rešitve običajne (klasične) valovne enačbe

↳ Ker so v njej 2. odvodi po x in t!

Toda za Schrödingerjevo enačbo, ki je 1. reda v časovnem odvodu $\sin(\dots)$ in $\cos(\dots)$ nista dobra:
že to nam pove, da mora biti časovna odvisnost $\Psi(x,t)$ kompleksna:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \ !$$

Zgled: $e^{i(kx-\omega t)}$ in $e^{i(-kx-\omega t)}$ sta rešitvi NSE za prost delec, torej mora biti tudi njuna linearna kombinacija rešitev NSE:

npr. $\Psi(x,t)=\frac{A}{2}\left[e^{i(kx-\omega t)}+e^{i(-kx-\omega t)}\right]=A\cdot\cos(kx)\cdot e^{-i\omega t}$

Ali to res zadosti NSE?

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V\right)A\cdot\cos(kx)e^{-i\omega t}=\underline{\left(\frac{\hbar^2}{2m}k^2+V\right)A\cdot\cancel{\cos(kx)\cdot e^{-i\omega t}}}$$

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\underline{\hbar\omega A\,\cancel{\cos kx\, e^{-i\omega t}}}$$

Torej Schrödingerjeva enačba velja, če $\frac{\hbar^2k^2}{2m}+V=\hbar\omega=E$ ✓

S tem smo začeli

# Verjetnostna interpretacija $\Psi(x,t)$

"gibalno" enačbo imamo → kaj pa vemo o značaju njene rešitve, $\Psi$? Kako iz $\Psi$ dobimo informacijo o verjetnosti za detekcijo delca?

Schrödinger: je že sam $\Psi$ tolmačil kot fizikalni "val" oz. reprezentacijo

Born: $\Psi$ samo matematičen objekt (=valovna funkcija), edina opazljiva reč pa je $|\Psi|^2$.

Osnovni argument $\Psi(x,t) \in \mathbb{C}$ (nujno! – zaradi $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$)

$|\Psi|^2 = \Psi^* \Psi$

Vrnimo se k poskusu na dveh režah:

$$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2 \quad ; \quad \Psi_1 = |\Psi_1| \cdot e^{i\phi_1} \quad \text{in} \quad \Psi_2 = |\Psi_2| \cdot e^{i\phi_2}$$

Verjetnost za detekcijo na zaslonu:

$$|\Psi|^2 = (\Psi_1^* + \Psi_2^*)(\Psi_1 + \Psi_2) = |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 + \Psi_2^* \Psi_1 + \Psi_2 \Psi_1^* =$$

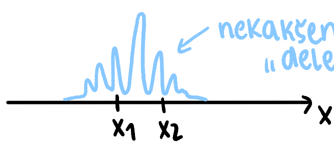
$$= |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 + \underbrace{2|\Psi_1||\Psi_2| \cdot \cos(\phi_1 - \phi_2)}_{\text{IF člen}}$$

Fazi odvisni od tega, kje opazujemo sliko

Za poljuben delec: $\rho(x,t) = |\Psi(x,t)|^2$

↳ verjetnost, da ga zaznamo med $x_1$ in $x_2$, je

$$\int_{x_1}^{x_2} |\Psi(x,t)|^2 dx$$




in dogovorimo se, da $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = 1$ ob vsakem $t$.

delec zagotovo najdemo na $\mathbb{R}$ (NSE je linearna v $\Psi$, zato je tudi $a \cdot \Psi$ OK)

Ker imamo v splošnem časovno odvisno $\rho(x,t)$, se lahko vprašamo po **TOKU VERJETNOSTI**.

Oglejmo si, kakšnim enačbam zadoščata $\Psi$ in $\Psi^*$ $(V=0)$:

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

$|\Psi|^2$ pri nekem $x$ seveda v splošnem lahko odvisna od $t$:
zato uvedemo količino, s katero predstavimo tok verjetnosti – kako verjetnost "teče" na nekem intervalu, nekaj je pride noter, nekaj je gre ven... :

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

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\Psi) = \Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t} + \frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\cdot\Psi = \Psi^*\left(-\frac{\hbar}{2im}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}\right) + \left(\frac{\hbar}{2im}\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\right)\Psi =$$

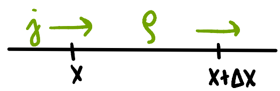
$$= -\frac{\hbar}{2im}\left(\Psi^*\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\Psi\right) =$$

$$= -\frac{\partial}{\partial x}\Bigg[\underbrace{\frac{\hbar}{2im}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\Psi\right)}_{\text{Gostota verjetnostnega toka } j(x,t)}\Bigg]$$

*To pride iz KF iz kontinuitetne enačbe.

Gostota verjetnostnega toka $j(x,t)$
(Probbability current density)

$$\Rightarrow \boxed{\frac{\partial}{\partial t}\rho(x,t) + \frac{\partial}{\partial x}j(x,t) = 0}$$




**Ohranitveni zakon za verjetnost**:
Časovno spremembo verjetnosti kompenzira sprememba fluksa prek lokalnega območja

To zdaj gledamo na nekem končnem intervalčku:

$$(*)\quad \frac{\partial}{\partial t}\int_{x_1}^{x_2}\rho(x,t)\,dx = \int_{x_1}^{x_2}\frac{\partial}{\partial t}\rho(x,t)\,dx = -\int_{x_1}^{x_2}\frac{\partial}{\partial x}j(x,t)\,dx = j(x_1,t) - j(x_2,t)$$

Važen je NETO tok

Ohranitveni zakon velja tudi za neproste delce, $V \neq 0$, biti mora $V = V^*$ $(V \in \mathbb{R})$

SUBTILNA POANTA: Rekli smo $\int_{-\infty}^{\infty}|\Psi(x,t)|^2 dx \overset{(*)}{=} 1$.

Kako smo lahko to naredili, če je leva stran odvisna od $t$?

(*) prepišimo v obliko:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_{x_1}^{x_2}\Psi^*\Psi\,dx = -\frac{\hbar}{2im}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\Psi\right)\Bigg|_{x_1}^{x_2}$$

Na katerem koli končnem intervalu $\Delta x = x_2 - x_1$ je lahko verjetnost za detekcijo odvisna od $t$, saj desna stran te enačbe v splošnem $\neq 0$. Toda (*) zadeva $(-\infty,\infty)$ = celotno def. območje $\Psi$ $\Rightarrow$ za ta odgovor sta relevantni limiti $x_1 \to -\infty$, $x_2 \to \infty$.

$\Rightarrow$ VF mora biti smiselno lokalizirana:

$$\left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\Psi\right)\Bigg|_{x_1}^{x_2} \rightarrow 0 \quad \text{ko gre} \quad \begin{matrix} x_1 \rightarrow -\infty \\ x_2 \rightarrow \infty \end{matrix}$$

Potem bo normalizacija neodvisna od časa, v $\infty$ bodo funkcije in njinovi odvodi padali proti 0.

## Spremenljive VF

- $\Psi$ zvezna, ker verjetnost za detekcijo $|\Psi|^2 \Delta x$ ne sme nezvezno "skakati" od ene točke do druge
- Ker Schrödingerjeva enačba vsebuje $\Psi''$, mora biti zvezen tudi $\Psi'$
  Izjema: Ko $V \rightarrow \infty$, je lahko $\Psi'$ nezvezen ($\Psi$ pa še vedno zvezna)

## Stacionarna stanja

Najprej moramo narediti separacijo krajevnih in časovnih koordinat – ključno za rešitev Schrödingerjeve enačbe in neposredno pripelje do pojma stacion. stanj.

Rešitve iščemo s produktnim nastavkom (ansatz), produktna valovna fun.:

$$\Psi(x,t) = \psi(x) \cdot f(t)$$

vstavimo v schröd. enačbo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\psi}{dx^2} \cdot f + V\psi f = i\hbar \psi \frac{df}{dt} \quad /: f\psi$$

Običajni odvodi so OK, ker imamo funkcije enega argumenta

$$\underbrace{\frac{-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi}{\psi}}_{\text{odvisna samo od } x} = \underbrace{\frac{i\hbar \frac{df}{dt}}{f}}_{\text{odvisna samo od } t} \equiv \lambda \quad \text{separacijska konstanta}$$

Če lahko ločimo enačbo, da je ena stran odvisna le od $x$ in druga le od $t$, je to možno le, če sta obe strani hkrati enaki neki konstanti.

$\Rightarrow$

(1) $$i\hbar \frac{df}{dt} = \lambda f$$

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

Ta mora biti odvisen samo od $x$, sicer separacija ne deluje

Rešitev (1): $f(t) = e^{-i\lambda t/\hbar} = \cos \frac{\lambda}{\hbar} t - i \sin \frac{\lambda}{\hbar} t$ (Ali še * multiplikativna konstanta)

$\omega$ $\omega$

Planck