6. DINAMIKA KVANTNIH SISTEMOV

Cilji: Kako opišemo (preprosle) kvantne sisteme in njihovo dinamiko?

- Spoznati Schrödingerjevo enačbo
- Dinamika dvonivojskih sistemov
- Prosti delec in delec v potencialni jami

Klasična dinamika je opisana z Newtnovim zakonom $\vec{F} = m \cdot \ddot{\vec{x}}$

stanje: $\{\vec{x}, \dot{\vec{x}}\}$

Kvantna dinamika je opisana s Schrödingerjevo enačbo (1926)

$$i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\psi\rangle \qquad \hat{H} \text{... Hamiltonski operator}$$

Lastnosti Hamiltonskega operatorja

→ $\hat{H} = \hat{H}^\dagger$ je hermitski operator

→ Ustreza celotni energiji sistema (kin. + potencialna) in lastne vrednosti so energije, ki jih lahko dobimo ob meritvi celotne energije sistema.

→ Najnižja energija se imenuje energija osnovnega stanja in pripadajoče stanje osnovno stanje. To je ekvivalent ravnovesnemu stanju v klasični fiziki.

→ Stanja pri višji energiji imenujemo vzbujena stanja

→ Množica vseh stanj je energijski spekter, ki je lahko ali diskreten ali zvezen.

za lastno stanje $H|i\rangle = E_i|i\rangle$ dinamika $|\psi\rangle = e^{-i\omega t}|i\rangle$

$$i\hbar\frac{\partial|\psi\rangle}{\partial t} = i\hbar(-i\omega)\, e^{-i\omega t}|i\rangle = H|i\rangle e^{-i\omega t} = E_i e^{-i\omega t}|i\rangle$$

$$\omega = \frac{E_i}{\hbar} \qquad |\psi\rangle = e^{-i\frac{E_i t}{\hbar}}|i\rangle.$$

$|\psi\rangle = e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}}|1\rangle$, ker globalna faza ni pomembna, je stanje vedno enako. Zato mu rečemo tudi stacionarno stanje.

Formalna rešitev Schrodingerjeve enačbe $|\psi(t)\rangle = e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}}|\psi(t=0)\rangle$

ali

$|\psi(t)\rangle = U(t,0)\,|\psi(t=0)\rangle$

Kaj pomeni eksponent operatorja? Definiran preko Taylorjevega razvoja $e^{-i\hat{H}t/\hbar} = 1 - i\frac{\hat{H}t}{\hbar} + \frac{1}{2!}\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right)^2 + \dots$

Matematično je propagacija Schröd. enačbe sistem navadnih dif. enačb in formalna rešitev $|\psi(t)\rangle = e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}}|\psi(t=0)\rangle$ operacije neskončne operatorske vrste na vektor $|\psi(t=0)\rangle$

Primer: Dvo-nivojski sistem
$$\left.\begin{aligned} H|\psi_1\rangle &= E_1|\psi_1\rangle \\ H|\psi_2\rangle &= E_2|\psi_2\rangle \end{aligned}\right\}\text{ dve lastni stanji}$$

kakšna je evolucija superpozicije ob času $t=0$

$|\psi\rangle = \alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle \to |\psi(t)\rangle$

relativna faza se spreminja

$$U(t)|\psi\rangle = e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}}\left(\alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle\right) = \alpha e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}}|\psi_1\rangle + \beta e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}}|\psi_2\rangle$$

$$P_1 = \left|\alpha e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}}\right|^2 = |\alpha|^2,\quad P_2 = |\beta|^2;\quad E = \langle\psi(t)|\hat{H}|\psi(t)\rangle = |\alpha|^2 E_1 + |\beta|^2 E_2$$

$$e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}}|\psi_1\rangle = \left[1 - i\frac{\hat{H}t}{\hbar} + \frac{1}{2!}\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right)^2 + \dots\right]|\psi_1\rangle = \underbrace{\left(1 - \frac{iE_1 t}{\hbar} + \frac{1}{2!}\left(-\frac{iE_1 t}{\hbar}\right)^2 + \dots\right)}_{\hat{H}|\psi_1\rangle = E_1|\psi_1\rangle}|\psi_1\rangle$$

$$= e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar}}|\psi_1\rangle$$

6.1 Dinamika dvonivojskega sistema (Spin v magnetnem polju)

Uporaba: Jedrska magnetna resonanca (NMR) in elektronska paramagnetna resonanca

klasični magnetni moment v mag. polju $V = -\vec{\mu}\cdot\vec{B}$

kvantni

$$\hat{H} = -\hat{\vec{\mu}}\,\vec{B} = \mu_B \frac{g_s}{\hbar}\,\vec{\Gamma}\,\vec{B} = \frac{\mu_B g_s}{2}\,\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{B}$$

$\hat{\vec{\mu}} = \frac{\mu_B g_s}{\hbar}\hat{\vec{\Gamma}}$; $\hat{\vec{\Gamma}}$ ... vrtilna količina

$\vec{\Gamma} = \frac{\hbar}{2}\hat{\vec{\sigma}}$; $\hat{\vec{\sigma}}$ ... vektor Paullijevih matrik

če $g_s \approx 2$

$$H = \mu_B\left[B_x\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix} + B_y\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix} + B_z\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\right] = \mu_B\begin{bmatrix}B_z & B_x - iB_y\\ B_x + iB_y & B_z\end{bmatrix}$$

$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9.27\cdot 10^{-24}\,\frac{J}{T}$ Bohrov magneton

$g_s = 2.\underbrace{002319}$ giromagnetni faktor

razlika od 2 je anomalni magnetni dipolni moment

$\mu_B \cdot B_z$ ima enote energije in tako zapišemo $\frac{\hbar\omega_0}{2} = \frac{g_s}{2}\mu_B B$

Primer: Magnetno polje v z-smeri ali Zeemanov pojav

$$\hat{H} = \mu_B B\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} = \frac{\hbar\omega_0}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$$

$$\hat{H}\,|\uparrow\rangle = \underbrace{\frac{\hbar\omega_0}{2}}_{E_+}|\uparrow\rangle \quad ; \quad \hat{H}\,|\downarrow\rangle = \underbrace{-\frac{\hbar\omega_0}{2}}_{E_-}|\downarrow\rangle$$

Razcep stanj v mag. polju imenujemo Zeemanov pojav in $\frac{\hbar\omega_0}{2}$ Zeemanova energija (ali Larmorjeva)

Dinamika poljubnega stanja na Blochovi sferi:

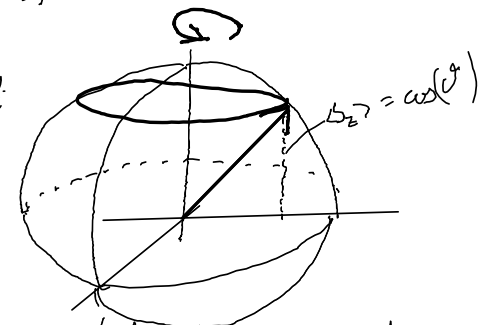
$$|\psi(0)\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{-i\frac{\varphi}{2}}|\uparrow\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{+i\frac{\varphi}{2}}|\downarrow\rangle$$ (pomnoženo z globalno fazo $e^{-i\frac{\varphi}{2}}$)

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}}\,|\psi(0)\rangle = \cos\left(\frac{\vartheta}{2}\right) e^{-\frac{i\varphi}{2}}\, e^{-i\frac{\hbar\omega_0 t}{\hbar}}\,|\uparrow\rangle +$$

$$\sin\left(\frac{\vartheta}{2}\right) e^{\frac{i\varphi}{2}}\, e^{i\frac{\hbar\omega_0 t}{\hbar}}\,|\downarrow\rangle =$$

$$= \cos\left(\frac{\vartheta}{2}\right) e^{-i\left(\omega_0 t + \frac{\varphi}{2}\right)}\,|\uparrow\rangle + \sin\left(\frac{\vartheta}{2}\right) e^{i\left(\omega_0 t + \frac{\varphi}{2}\right)}\,|\downarrow\rangle$$

Kroženje po konstantni "geografski širini" s hitrostjo $\varphi = \varphi_0 + \omega_0 t$ po Blochovi sferi. = Larmorjeva precesija.



Podobno kot klasični delec, tudi spin precesira v magnetnem polju.

Kemijski premik: frekvenca precesije je odvisna od kemijskega okolja spina v jedru, omogoča določiti strukturo molekul. Znana uporaba v medicini.

Pričakovane vrednosti

$$\langle\psi(t)|\sigma_z|\psi(t)\rangle = \langle\psi(t)|\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}|\psi(t)\rangle =$$

$$\left(\cos\frac{\vartheta}{2}\, e^{i(\varphi+\omega_0 t)/2},\ \sin\left(\frac{\vartheta}{2}\right) e^{-i(\varphi+\omega_0 t)/2}\right)\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\left(\frac{\vartheta}{2}\right) e^{-i(\varphi+\omega_0 t)/2}\\ \sin\left(\frac{\vartheta}{2}\right) e^{+i(\varphi+\omega_0 t)/2}\end{pmatrix} =$$

$$= \cos^2\left(\frac{\vartheta}{2}\right) - \sin^2\left(\frac{\vartheta}{2}\right) = \cos(\vartheta)$$

$$\langle\psi(t)|\sigma_x|\psi(t)\rangle = (\ldots,\ldots)\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\ldots\\ \ldots\end{pmatrix} = 2\sin\left(\frac{\vartheta}{2}\right)\cos\left(\frac{\vartheta}{2}\right)\left[\frac{e^{i(\varphi+\omega_0 t)} + e^{-i(\varphi+\omega_0 t)}}{2}\right] =$$

$$= \sin(\vartheta)\cos(\varphi + \omega_0 t)$$

D.N.:

$$\langle\psi(t)|\sigma_y|\psi(t)\rangle = \sin(\vartheta)\sin(\omega_0 t + \varphi)$$

Pričakovane vrednosti $\langle S_x \rangle, \langle S_y \rangle, \langle S_z \rangle$ se obnašajo kot komponente klasične vrtilne količine, ki precesira.

6.2 Valovna narava snovi in Schrödingerjeva enačba

De Broglie ('24 doktorat, '29 Nobelova): delci snovi se obnašajo kot valovi, tako kot velja za fotone. Razširitev Planckove zveze: $\boxed{16^{20}}$

$\lambda = \frac{h}{p}$ $\quad$ p... gibalna količina

$p = \hbar \cdot k$ $\quad$ $\hbar = \frac{h}{2\pi} \sim 10^{-34}$ Js ... Reducirana Planckova konstanta

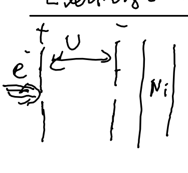
$\nu = \frac{E}{h}$ in $E = \hbar \omega$

Hipoteza dualnosti delec-val za vse delce

] De Broglie-jev doktorat: komisija zbegana. Einstein: OK! Nobelova '29

<u>Eksperiment</u> Davisson - Germer ('23-'27): Streljanje e^- na kristal niklja, da enak vzorec kot sipanje Röntgenskih žarkov. Valovna narava e^-. Ideja je bila vzeti sipanje na površju niklja zaradi hrapavosti. Zgodila se je "nesreča", zato ga kristal še enkrat segreta in se je pretvoril v monokristal.
Davidsson se na svojem <u>drugem poročnem potovanju</u> (!) udeleži predavanja Max Borna, ki pojasni teoretično sliko.
Nobelova '37 skupaj z G. Thompson, ki je neodvisno opravil enak eksperiment.

<u>Elektronski mikroskop</u>: $E_{kin} = \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow p = \sqrt{2mE_{kin}}$



(U=50V)

$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE_{kin}}}$

$h = 6.6 \cdot 10^{-34}$ Js

$m_e = 9.1 \cdot 10^{-31}$ kg

$E_{kin} = eU = 1.5 \cdot 10^{-19}$ As $\cdot$ 50 V

$\Rightarrow \lambda \sim 1.7 \cdot 10^{-10}$ m $= 0.17$ nm

Atomske razdalje

Makroskopski delci: drobec prahu premera 1 µm,
masa $\sim 10^{-15}$ kg
$v \sim 1 \frac{mm}{s}$

$$\lambda = \frac{6.6 \cdot 10^{-34}}{10^{-15} \cdot 10^{-3}} \sim 0.66 \cdot 10^{-7} \text{ nm}$$

↑ veliko manj kot velikost atoma in popolnoma zanemarljivo.

Podobno kot v optiki lahko zanemarimo valovne lastnosti svetlobe, ko je λ veliko manjša od razdalj L, ki jih merimo. Žarki tako ustrezajo trajektorijam.

6.2.1) Valovna funkcija

De Broglie zavrže koncept delca in trajektorije. Stanje opišemo z vektorjem $|\psi\rangle$ v Hilbertovem prostoru oz. z valovno funkcijo $\psi(\vec{r}, t)$ (Hilbertov prostor funkcij).

$|\psi(\vec{r}, t)|^2$ je verjetnostna amplituda, da ga najdemo v prostoru V ob času t $\qquad P(\vec{r}) = \int dV\, |\psi(\vec{r}, t)|^2$

$|\psi(\vec{r}, t)|^2$ je verjetnostna gostota.

Dinamiko opisuje Schrödingerjeva enačba

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi \qquad \text{v 1D.}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right] \psi + V(x,y)\psi \qquad \text{v 2D}$$

Linearna enačba zato velja načelo superpozicije $\psi = \alpha \psi_1 + \beta \psi_2$,

Podobna valovni enačbi $\qquad \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$

kompleksna vs. realna, Drugi vs. prvi odvod v času.

<u>Normalizacija</u> $\langle\psi|\psi\rangle = \int dV\, |\psi(r,t)|^2 = 1$

integral po celem prostoru. Če nas zanima verjetnost za pod prostor, omejimo integral.

<u>Skalarni produkt</u> : $(\varphi, \psi) = \langle\varphi|\psi\rangle = \int d\vec{r}\, \varphi^*(\vec{r},t)\, \psi(\vec{r},t)$

<u>Operator</u> : Slika iz prostora funkcij v prostor funkcij tudi v ∞-dim Hilbertovem prostoru.

- položaj : $\hat{X}\, \psi(x,y,z,t) = x\, \psi(x,y,z,t)$
- odvod po x : $\hat{D}_x\, \psi(x,y,z,t) = \frac{\partial}{\partial x} \psi(x,y,z,t)$
- Hamiltonski operator : $\hat{H} = -\frac{\hbar}{2m} \partial_x^2 + V(\hat{x})$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$$

- Produkt operatorjev $\hat{A}\hat{B}\, \psi(\vec{r}) = \hat{A}\left[\hat{B}\psi(r)\right]$
- komutator : $[\hat{A},\hat{B}]_- = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$

$$[\hat{X}, \hat{D}_x] = \left[x \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} x\right] \psi(x,t) = x \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}\left(x\psi(x)\right) =$$

$$= \cancel{x \frac{\partial \psi}{\partial x}} - \psi(x) - \cancel{x \frac{\partial \psi}{\partial x}} = (-1)\, \psi(x)$$

$$[\hat{X}, \hat{D}_x] = -1$$

6.2.2) Prosti delec : delec na katerega ne deluje sila $V(x) = 0$,

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

Nastavek : $\psi(x,t) = A\, e^{i(kx - \omega t)}$

$$i\hbar\, (-i\omega)\, \cancel{A\, e^{i(kx-\omega t)}} = -\frac{\hbar^2}{2m} (ik)^2\, \cancel{A\, e^{i(kx-\omega t)}}$$

$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$; $p = \hbar k$, $E = \hbar\omega$ $\Rightarrow$ $E = \frac{p^2}{2m}$, kar je enako kot klasična kinetična energija.

operator gibalne količine

$$\frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Rightarrow \qquad \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\hat{p}|\psi\rangle = A e^{i(kx-\omega t)} (-i\hbar i k) = \hbar k |\psi\rangle = p|\psi\rangle$$

$\hat{p}$ ↑ operator; p ↑ število

Verjetnost, da najdemo delec

$|\psi(x,t)|^2 = |A|^2$ rešitev, kjer je verjetnost, da najdemo delec enaka povsem prostoru. Delec popolnoma delokaliziran.

Vsi e imajo enako gibalno količino, kakšen je tok delcev?

$$I = \frac{\#\text{ delcev}}{\text{enoto časa}} \qquad j = \frac{I}{S} = \frac{N \cdot a}{t \cdot S \cdot a} = v \cdot \rho \quad \left[\frac{1}{m^2 s}\right]$$

v ... hitrost
ρ ... gostota

Gostota toka (Brez dokaza) $\hat{j}_x = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x}\right)$ in za ravni val dobimo

$$\psi^*(x,t)\, \hat{j}_x\, \psi(x,t) = |A|^2 \frac{\hbar}{2mi}\left(e^{-i(kx-\omega t)}\, ik\, e^{i(kx-\omega t)} - e^{i(kx-\omega t)}(-ik)\, e^{-i(kx-\omega t)}\right) =$$

$$= \frac{|A|^2 \hbar k}{m} = \frac{|A|^2 p_x}{m} = |A|^2 \cdot v \quad \left[j = \rho \cdot v\right]$$

klasično

V splošnem rešitev $\psi = A e^{i(kx-\omega t)} + B e^{-i(kx-\omega t)}$ in $j = v(|A|^2 - |B|^2)$

Gibanje v desno — Gibanje v levo

6.2.3) Delec v potencialu

<u>konstantni potencial</u> $V(x) = -e_0 \phi$, kjer je ϕ električni potencial

$F = \frac{\partial V}{\partial x} = 0$ ni sile.

<u>Stacionarna Schroedingerjeva enačba</u>

Nastavek: $\psi(x,t) = \varphi(x)\Theta(t)$ Separacija spremenljivk

$$i\hbar \varphi(x) \frac{\partial \Theta}{\partial t} = \Theta(t)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi(x)\right] + \Theta(t) V(x) \varphi(x) \Big/ \psi(x,t)$$

$$\underbrace{i\hbar \frac{1}{\Theta}\frac{\partial \Theta}{\partial t}}_{\text{konstanta}} = \underbrace{\frac{1}{\varphi(x)}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi(x)\right] + V(x)}_{\text{konstanta}}$$

Nastavek $\Theta(t) = A e^{-i\omega t} \Rightarrow \frac{d\Theta}{dt}\frac{1}{\Theta} = -i\omega \frac{\cancel{A e^{-i\omega t}}}{\cancel{A e^{-i\omega t}}} = -i\omega$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi(x) + V(x)\varphi(x) = \hbar\omega\varphi(x)$$ Stacionarna Schrödingerjeva enačba

$\psi(x,t) = \varphi(x) \cdot e^{-i\omega t}$ je rešitev Schrödingerjeve enačbe, če je $\varphi(x)$ rešitev stacionarne SE.

$$\underbrace{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]}\varphi(x) = E\varphi(x)$$ Problem lastnih vrednosti

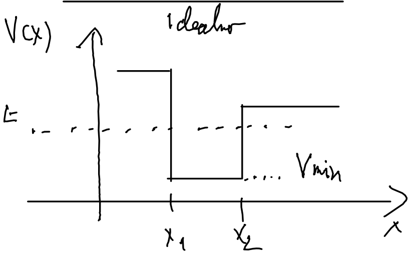
$$\hat{H}\varphi(x) = E\varphi(x)$$

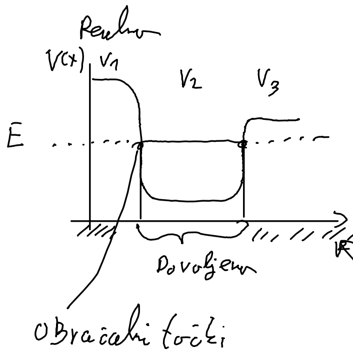
Energije so lastne vrednosti operatorja $\hat{H}$, to je Hamiltonski operator.
(Hamiltonka ali Hamiltonian)

Kvantizacija energije in razlog zakaj so spektri atomov diskretni.
Linearna kombinacija stacionarnih stanj je rešitev Schrödingerjeve enačbe, a niso stacionarne rešitev.

Potencialna jama

Idealno





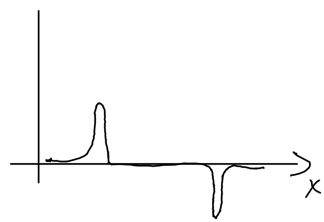
Klasično prepovedano območje

Potencial se spremeni hitro v bližini točk x_1 in x_2.

Klasična analogija

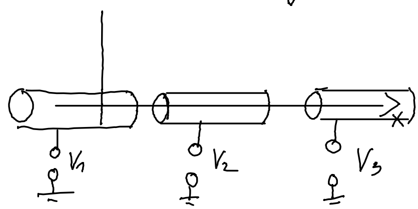
$F = -\frac{\partial V}{\partial x}$.

$F = -\frac{\partial V}{\partial x}$



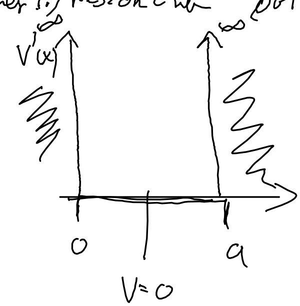
Sila deluje le na mejah med deli potenciala. Kratek čas močna sila.

Realizacija: nabit delec v cevi, katerih segmenti so priključeni na različne napetosti



- Pri fiksni energiji se klasični delec nahaja le v območju, kjer je $E < V(x)$, ker je kinetična energija $E_k = E - V \geq 0$.
- klasični delec ima poljubno energijo $E_{kin} = \frac{mv^2}{2}$ v tem intervalu
- V kvantni mehaniki ima delec diskretne energije, ker se obnaša kot valovanje in dobimo interferenco med vpadnim in odbitim valovanjem. Kot pri struni so možne le določene valovne dolžine. Diskreten spekter energij

Primer 1.) Neskončna potencialna jama



klasično: enaka verjetnost, da najdemo delec kjerkoli v jami, saj je hitrost konstantna. Razen spremembe predznaka pri trku s steno.

kvantno $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$ Robni pogoji: $\psi(0)=\psi(a)=0$.

$\psi = A\sin(kx)$

$+\frac{\hbar^2}{2m}\cancel{A\sin(kx)}\,k^2 = E\,\cancel{A\sin(kx)}$ $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\cdot m}$

Robni pogoji $ka = n\pi$, $k\cdot 0 = 0$ $\Rightarrow k_n = \frac{n\pi}{a}, n=1,2,\dots; E = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 n^2$

n ... kvantno število

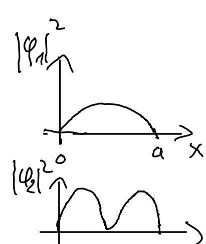
Normalizacija:

$$1 = \int_0^a |\psi|^2 dx = A^2\int_0^a \sin^2(kx)\,dx \underset{z=kx}{=} \frac{A^2}{k}\int_0^{ka}\sin^2(z)\,dz = \frac{A^2}{k}\int_0^{ka}\left(\frac{1-\cos(z)}{2}\right)dz =$$

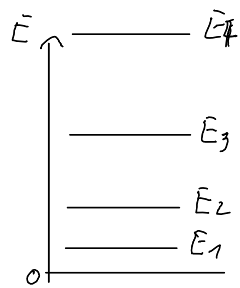
$= \frac{A^2 a}{2}$ $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$

n=1 $\psi_1 = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)$ $E_1 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2$

n=2 $\psi_2 = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)$ $E_2 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2$



1 dodatna ničla



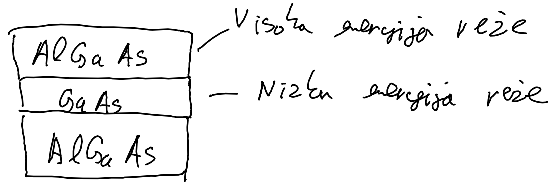
Spekter stanj je kvadratično odvisen od n.

Najnižja energija ni enaka V=0 zaradi načela nedoločenosti.
Manjši a → večja energija.

Pomembno: Diskretne energije so značilne za vezane sisteme v kvantni mehaniki.

Realizacija:

a) Heterostrukture

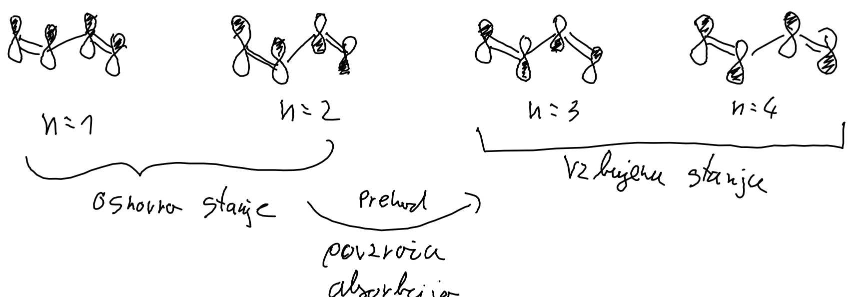


Ujetje e^- v GaAs pasu.

b) Spekter molekule butadien $CH_2=CH-CH=CH_2$

e^- v t.i. π-konjugirani vezi se v (približno) gibljejo med dvema skrajnima deloma molekule z dolžino $a=0.416\,nm$.

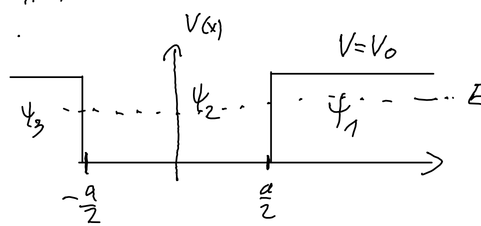
Alternacija enojnih in dvojnih vezi.



$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = \frac{1239.8\,eV\,nm}{\lambda(nm)}$ Energija svetlobe

$E_3 - E_2 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}(3^2-2^2) = 10{,}8\,eV \leftrightarrow 114\,nm.$ V resnici 217 nm

Primer: končna potencialna jama



Znotraj: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = E\psi$ $\quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$

Zunaj: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = (E-V)$ $\quad \kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}$

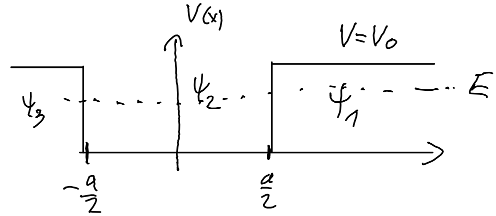
če $\psi'' + k^2\psi = 0$

in $\psi'' - \kappa^2\psi = 0$

$\psi_2 = A\sin(kx) + B\cos(kx)$

$\psi_1 = Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x}$

Primer 2) končna potencialna jama $(E < V_0)$



Znotraj: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = E\psi$ $\qquad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$

Zunaj: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = (E-V)$ $\qquad \varkappa = \sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}$

če $\psi'' + k^2\psi = 0$

in $\psi'' - \varkappa^2 = 0$

$\psi_2 = A\sin(kx) + B\cos(kx)$

$\psi = Ce^{-\varkappa x} + De^{\varkappa x}$

- Simetrija na zrcaljenje čez $x=0$ $\Rightarrow$ $\psi_3(x) = \pm\psi_1(-x)$

- Robni pogoji $\psi(x\to\infty) = 0$

$\psi(x=\frac{a}{2}^+) = \psi(x=\frac{a}{2}^-)$ zvezna

$\left.\frac{\partial\psi}{\partial x}\right|_{x=\frac{a}{2}^+} = \left.\frac{\partial\psi}{\partial x}\right|_{x=\frac{a}{2}^-}$ zvezno odvedljiva

Zakaj takšni robni pogoji? $\qquad j = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\frac{d\psi}{dx} - \psi\frac{d\psi^*}{dx}\right)$

a) če $\psi_{desno} \neq \psi_{levo}$ $\qquad \frac{d\psi}{dx} = \lim_{\Delta x\to 0}\frac{\psi_{desno} - \psi_{levo}}{\Delta x} = \infty$

Neskončen tok ne teče $\Rightarrow \psi_{desno} = \psi_{levo}$

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

$$\underbrace{(E-V)\int_{x^-}^{x^+}\psi\,dx}_{=0,\ \text{če } V(x) \text{ končen}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\int\frac{d^2\psi}{dx^2}dx = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\psi'_{desno} - \psi'_{levo}\right] \Rightarrow 0$$

Izjema: ∞ potencialne jame

Simetrija problema na zrcaljenje čez $x=0$.
Samo sode in lihe rešitve. Osnovno stanje je ~~sodo~~.
Pravilo palca: več kot je vozlov, večja je energija.

Sode rešitve : $A=0$

R. p. : 1) $\psi_2\left(\frac{a}{2}\right)=\psi_1\left(\frac{a}{2}\right)$ $\quad B\cos\left(\frac{ka}{2}\right)=Ce^{-\frac{\varkappa a}{2}}$

2) $\psi'\left(\frac{a}{2}\right)=\psi_1'\left(\frac{a}{2}\right)$ $\quad -B\sin\left(\frac{ka}{2}\right)\cdot k=Ce^{-\frac{\varkappa a}{2}}(-\varkappa)$

$\frac{2)}{1)}$: $\quad k\tan\left(\frac{ka}{2}\right)=+\varkappa \quad / \cdot \frac{a}{2}$

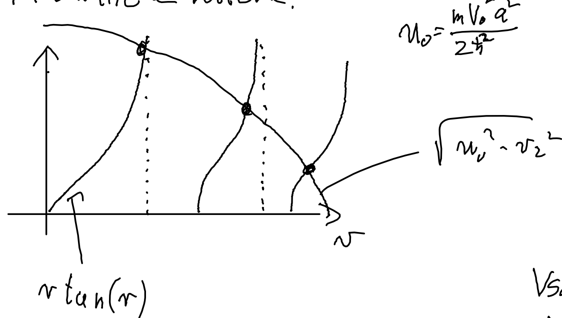
$\frac{ka}{2}\tan\left(\frac{ka}{2}\right)=\frac{\varkappa a}{2}$; $\quad v=\frac{ka}{2}$, $\quad u=\frac{\varkappa a}{2}$

$$u_0=\frac{mV_0^2a^2}{2\hbar^2}$$

$$u^2=\frac{\varkappa^2a^2}{4}=\frac{2m(V_0-E)}{4\hbar^2}a^2=$$
$$=u_0^2-v^2$$

$$\underline{\underline{v\tan(v)=\sqrt{u_0^2-v^2}}}$$

Ni analitične rešitve.



Izrazi energijo :

$$v=\frac{ka}{2}=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}\frac{a^2}{4}}$$

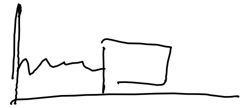
$$E=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{v}{a}\right)^2$$

To je enačba za energijo
Vsaj ena rešitev obstaja.
(Glej mathematica)

Delec ima verjetnost ($\neq 0$), da se nahaja v klasično prepovedanem območju.

Primer 3) Harmonični oscilator

kvantna analogija nihala na vzmeti



$$m\ddot{x} = -kx \qquad x = x_0\cos(\omega_0 t)$$

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

Potencial: $\frac{dV}{dx} = -F = kx$

$$V = \frac{kx^2}{2} = \frac{1}{2} m\omega_0^2 x^2$$

$$W_{pot} = \frac{1}{2} m\omega_0^2 x^2$$

$$W_{kin} = \frac{m\cdot\dot{x}^2}{2}$$

$$W_{kin} + W_{pot} = \frac{1}{2} m\omega_0^2 x_0^2$$

Amplituda in odmik imata poljubno in zvezno vrednost.

Schrödingerjeva enačba

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega_0^2 x^2\psi = E\psi \qquad \xi = \sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}}\, x$$

$$x = \xi\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{m\omega_0}{\hbar}\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + \frac{1}{2} m\omega_0^2\frac{\hbar}{m\omega_0}\xi^2\psi = E\psi$$

$$-\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + \xi^2\psi = \varepsilon\psi \qquad \varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega_0}$$

Brezdimenzijska oblika

Velike razdalje $\xi \gg 1$: $-\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + \xi^2\psi = 0$

(zanemarimo $\varepsilon\psi$)

nastavek: $\psi = e^{-\frac{\xi^2}{2}} \qquad \psi' = e^{-\frac{\xi^2}{2}}(-\xi)$

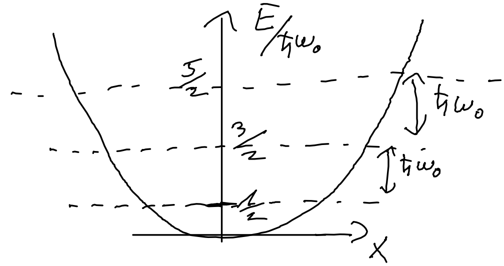
$$\psi'' = e^{-\frac{\xi^2}{2}}\xi^2 - e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

$$\psi'' - \xi^2\psi + \varepsilon\psi = \cancel{e^{-\frac{\xi^2}{2}}\xi^2} - e^{-\frac{\xi^2}{2}} - \cancel{\xi^2 e^{-\frac{\xi^2}{2}}} + \varepsilon e^{-\frac{\xi^2}{2}} = -e^{-\frac{\xi^2}{2}} + \varepsilon e^{-\frac{\xi^2}{2}} = 0$$

$$\varepsilon = 1 \Rightarrow E = \frac{\hbar\omega_0}{2}$$

Splošna rešitev (brez dokaza)

$E_n = \hbar\omega_0\left(n+\frac{1}{2}\right)$ Energija najnižjega stanja ni enaka nič.



Lastna stanja

$\psi_n = A\, e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi)$; kjer so $H(\xi)$ Hermitski polinomi

$H_0(\xi)=1$; $H_1(\xi)=2\xi$; $H_2(\xi)=4\xi^2-2$, ...

] Mathematica notebook

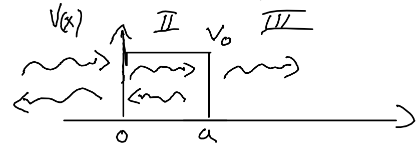
Lastnosti rešitev: - Potencial je simetričen na zrcaljenje $x\to -x$. Rešitve so zato ali sode ali lihe. To je splošna trditev in spomnijo simetrij sistema lahko dobimo pomemben vpogled v rešitve KM problemov.

- rešitve so realne (ne kompleksne). Velja splošno za vezana stanja
- osnovno stanje je "razmazano" okoli $x=0$ in ima neničelno energijo $E=\frac{\hbar\omega_0}{2}$ ("gibanje okoli ničle" ang. "zero-point motion")
- Katere prehode lahko vzbudimo s svetlobo?

Pogoj $\int \psi_2^*(\vec{x})\,\vec{x}\,\psi_1(\vec{x})\,d\vec{x}\neq 0$; ker $\vec{x}\to-\vec{x}$ je lih, pomeni, da ψ_1 ali ψ_2 morata biti lih/sod ali sod/lih.

Primer 4) Potencialna plast in tuneliranje

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



$$V_i(x) = \begin{cases} 0; & x<0 \text{ ali } x>a \\ V_0; & 0<x<a \end{cases}$$

I in III:

$$-\frac{d^2\psi}{dx^2} = +\frac{2mE}{\hbar^2}\psi \qquad k_0^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$-\frac{d^2\psi}{dx^2} = k^2\psi$$

II:

$$-\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}\psi \qquad k_1^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}$$

2 primera:
$E>V_0 \Rightarrow k_1$ je realen
$E<V_0 \Rightarrow k_1$ je imaginaren

Nastavek:

I) $\psi_L(x) = A_r e^{ik_0x} + A_L e^{-ik_0x}$

II) $\psi_c(x) = B_r e^{ik_1x} + B_L e^{-ik_1x}$

III) $\psi_R(x) = C e^{ik_0x}$

Robni pogoji:

$\psi_L(0) = \psi_c(0)$ $\qquad A_r + A_L = B_r + B_L$

$\psi_L'(0) = \psi_c'(0)$ $\qquad ik_0(A_r - A_L) = ik_1(B_r - B_L)$

$\psi_c(a) = \psi_R(a)$ $\qquad B_r e^{ik_1a} + B_L e^{-ik_1a} = C e^{ik_0a}$

$\psi_c'(a) = \psi_R'(a)$ $\qquad ik_1(B_r e^{ik_1a} - B_L e^{-ik_1a}) = ik_0 C e^{ik_0a}$

Analiza: $A_r = 1$ (merimo verjetnost glede na vpadni tok)
$A_L = r$ (refleksija); $C_r = t$ (transmisija)

Če rešimo sistem linearnih enačb

$$t = \frac{4k_0k_1\, e^{-ia(k_0-k_1)}}{(k_0^2+k_1^2)^2 - e^{i2ak_1}(k_0-k_1)^2}$$

$$r = \frac{(k_0^2-k_1^2)\sin(k_1 a)}{2ik_0k_1\cos(k_1a) + (k_0^2+k_1^2)\sin(k_1 a)}$$

Interpretacija:

~ klasično: če $E < V_0$ $r=1;\ t=0$ vedno se odbijejo

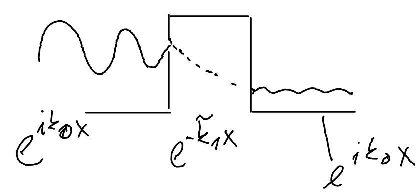
$E > V_0$ $r=0;\ t=1$.

~ kvantno $E < V_0$ $k_1 = i\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}} = i\tilde{k}_1$

$$T = |t|^2 = \frac{1}{1+\frac{V_0^2\sinh^2(\tilde{k}_1 a)}{4E(V_0-E)}}$$

- končna verjetnost za tuneliranje preko barier

Kvantno tuneliranje



- če bariera zelo velika je verjetnost za tuneliranje majhna

~ primeri: tunelski mikroskop (STM; Nobelova '86), radioaktivni razpad, elektronika (tunelska dioda), vesolje kot nestabilno kvantno stanje

$\underline{E > V_0}$:

$$T = |t|^2 = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2 \sin^2(k_1 a)}{4E(E - V_0)}}$$

- Odboj $R = 1 - T$ je ničeln

- Uporaba: antirefleksni premazi v optiki