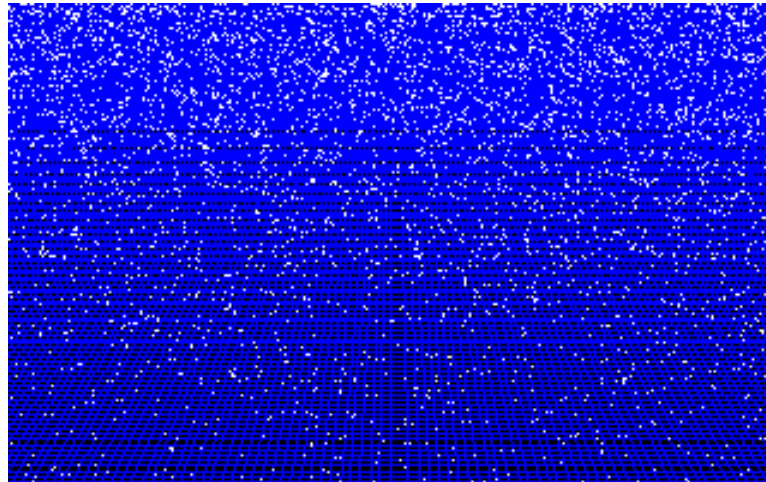


Kwantummechanica

HOVO cursus



Jo van den Brand

Lecture 2: September 29, 2016

Copyright (C) VU University Amsterdam 2016

Overzicht

- **Algemene informatie**
 - Jo van den Brand
 - Email: jo@nikhef.nl
 - 0620 539 484 / 020 592 2015
 - Nikhef, room: N3.47
- **Colleges**
 - Course information: www.nikhef.nl/~jo/kwantum
- **Boeken**
 - Dictaat
- **Zelfstudie**
 - Wiskunde: vectoren, complexe getallen, lineaire algebra
- **Response gedurende het college**

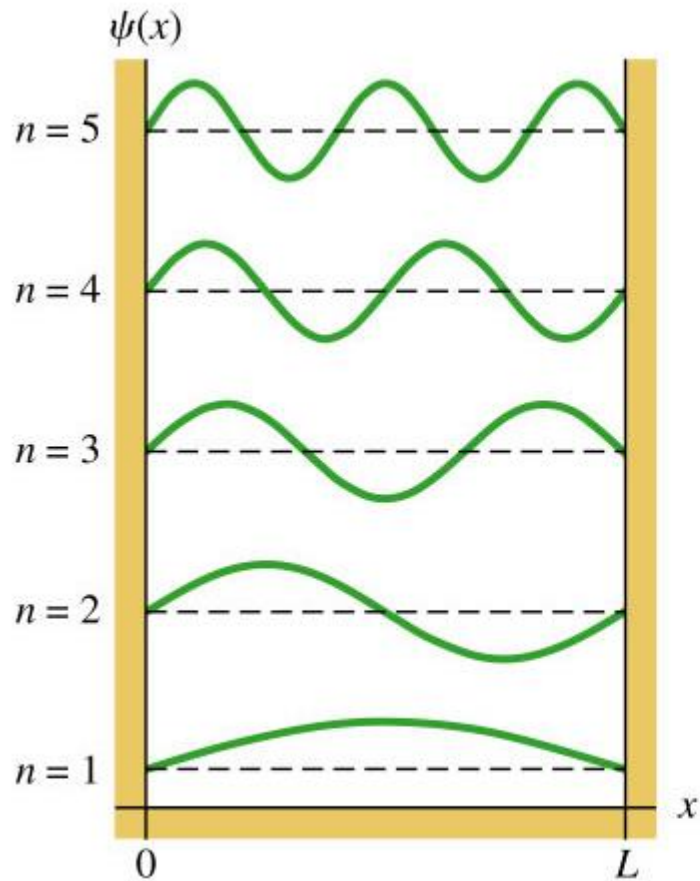
Week 2

- **Les 2: Golfkarakter van materie**
 - **Waarschijnlijkheid**
- **Les 3: Schrodinger vergelijking**
 - **1-dimensionale topics**
- **Opgaven: zie website**

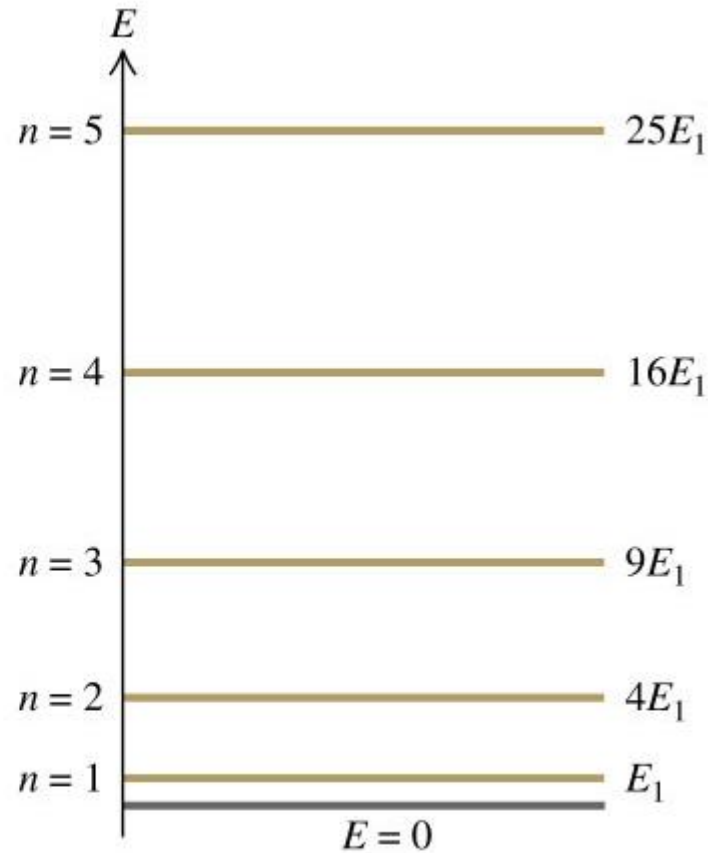
Deeltje opgesloten in een potentiaalput

Materiegolven worden beschreven door een *golffunctie*

$$E_n = n^2 \frac{h^2}{8mL^2}, \quad \text{voor } n = 1, 2, 3, \dots$$



(a)



(b)

Interpretatie van de golffunctie

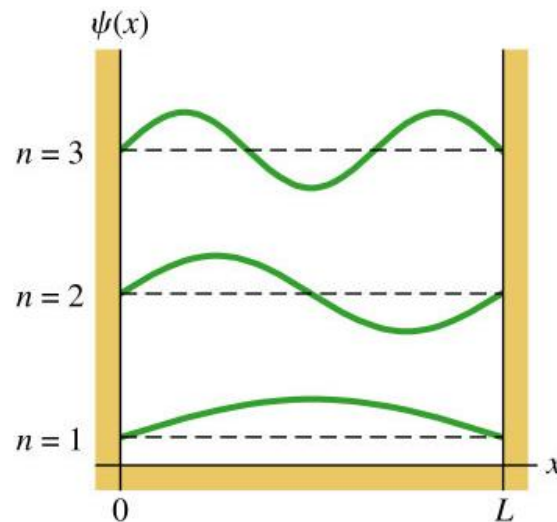
De golffunctie van een deeltje is gerelateerd aan de waarschijnlijkheidsdichtheid voor het vinden van een deeltje in een gegeven ruimtelijk interval

De kans om het deeltje aan te treffen tussen positie x en $x+dx$ bedraagt

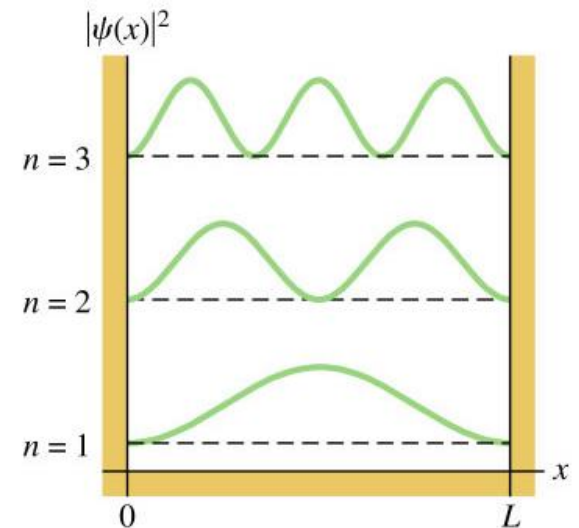
$$|\psi(x)|^2 dx$$

De kans om het deeltje ergens te vinden is gelijk aan 1. We hebben hiermee een normalisatieconditie voor de golffunctie

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$$



(a)



(b)

Waarschijnlijkheid (adapted from Griffiths)

Basisbegrippen met gebruik van notatie uit de kwantummechanica

Stel voor een kamer gevuld met 14 mensen

één persoon is 14 jaar,
één persoon is 15 jaar,
drie personen zijn 16 jaar,
twee personen zijn 22 jaar,
twee personen zijn 24 jaar,
vijf personen zijn 25 jaar.



$$N(14) = 1,$$

$$N(15) = 1,$$

$$N(16) = 3,$$

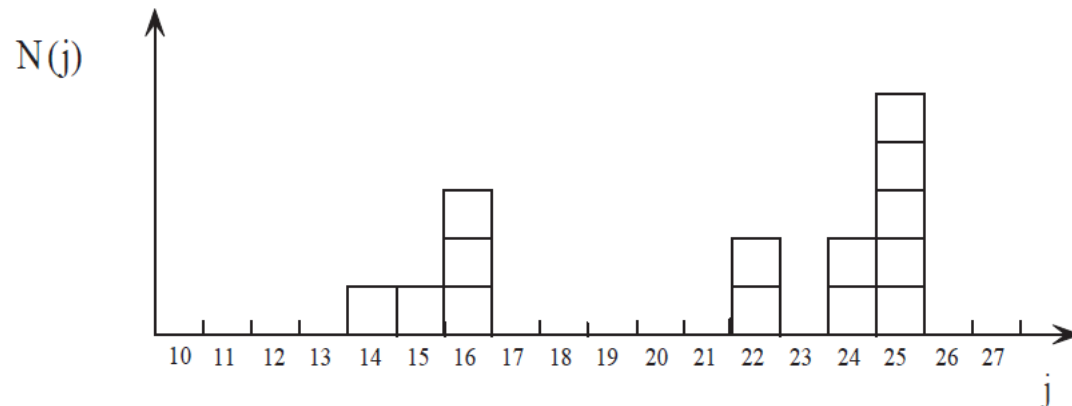
$$N(22) = 2,$$

$$N(24) = 2,$$

$$N(25) = 5,$$

Totaal aantal $N = 14$

Histogram:



$$N = \sum_{j=0}^{\infty} N(j)$$

Waarschijnlijkheid

Basisbegrippen met gebruik van notatie uit de kwantummechanica

Wat is de waarschijnlijkheid dat de leeftijd van een persoon 15 jaar is? $P(j) = \frac{N(j)}{N}$

Merk op dat $\sum_{j=1}^{\infty} P(j) = 1$

Wat is de *meest waarschijnlijke* leeftijd? $P(j)$ maximaal

Wat is de *mediane* leeftijd?

de mediaan die waarde van j waarvoor de waarschijnlijkheid om een groter resultaat te krijgen hetzelfde is als die voor een kleiner resultaat.

Wat is de *gemiddelde* leeftijd? $\frac{(14) + (15) + 3(16) + 2(22) + 2(24) + 5(25)}{14} = \frac{294}{14} = 21$



$$\langle j \rangle = \frac{\sum j N(j)}{N} = \sum_{j=0}^{\infty} j P(j)$$

We noemen dat de *verwachtingswaarde*

Wat is de *gemiddelde kwadratische* leeftijd?

Anders dan *kwadraat van gemiddelde* leeftijd?

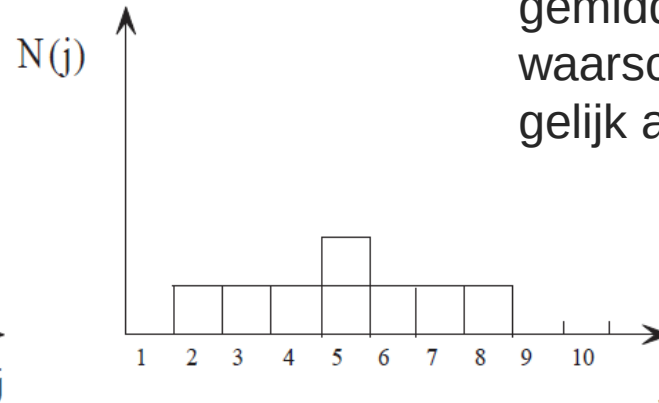
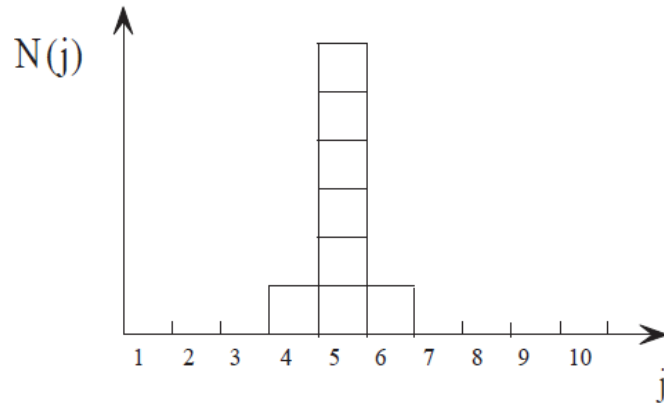
$$\langle j^2 \rangle = \sum_{j=0}^{\infty} j^2 P(j)$$

Wat is de *gemiddelde waarde voor een functie*? $\langle f(j) \rangle = \sum_{j=0}^{\infty} f(j) P(j)$

Waarschijnlijkheid

Basisbegrippen met gebruik van notatie uit de kwantummechanica

Vergelijk de volgende histogrammen:



Dezelfde mediaan, hetzelfde gemiddelde, dezelfde meest waarschijnlijke waarde, en gelijk aantal elementen

We hebben een maat voor de *spreiding* nodig

Afwijking van het gemiddelde

$$\langle \Delta j \rangle = \sum (j - \langle j \rangle) P(j)$$

Standaarddeviatie (variantie) $\sigma^2 \equiv \langle (\Delta j)^2 \rangle$

$$\begin{aligned}\sigma^2 &= \langle (\Delta j)^2 \rangle = \sum (\Delta j)^2 P(j) = \sum (j - \langle j \rangle)^2 P(j) \\ &= \sum (j^2 - 2j \langle j \rangle + \langle j \rangle^2) P(j) \\ &= \sum j^2 P(j) - 2 \langle j \rangle \sum j P(j) + \langle j \rangle^2 \sum P(j) \\ &= \langle j^2 \rangle - 2 \langle j \rangle \langle j \rangle + \langle j \rangle^2,\end{aligned}$$



$$\begin{aligned}\sigma^2 &= \langle j^2 \rangle - \langle j \rangle^2 \\ \langle j^2 \rangle &\geq \langle j \rangle^2\end{aligned}$$

Waarschijnlijkheid

Notatie met continue verdelingen

Waarschijnlijkheidsdichtheid $P_{ab} = \int_a^b \rho(x) dx$

We vinden hiermee $\int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x) dx = 1$

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x \rho(x) dx$$

$$\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \rho(x) dx$$

$$\sigma^2 \equiv \langle (\Delta x)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$$

Kwantummechanische golffuncties zijn complexe functies $\psi = e^{i(kx - \omega t)}$

 $P(x, t) = \psi^* \psi$  $\int_{-\infty}^{+\infty} P dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \psi dx = 1$

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x P dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* x \psi dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* x \psi dx = \langle \psi | x | \psi \rangle$$

Schrödingervergelijking (SV)

We beschouwen toepassingen van de Schrödingervergelijking in 1-dimensie

We gebruiken plausibiliteitsargumenten om de golfvergelijking op te stellen

Postulaten van Einstein de De Broglie

Niet-relativistisch consistent

Lineair in de golf functie: superpositie en interferentie

Harmonische golven $\Psi(x, t) = \cos(kx - \omega t) + \gamma \sin(kx - \omega t)$

Energiebehoud $T + U = E \rightarrow \frac{p^2}{2m} + V = E \rightarrow \frac{h^2}{2m\lambda^2} + V = h\nu$

Definities $p = \hbar k, k = \frac{2\pi}{\lambda}, \omega = 2\pi\nu$ en $\hbar = \frac{h}{2\pi}$

$$\begin{array}{ccc} \text{→} & \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V = \hbar\omega & \text{→} & \alpha \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi = \beta \frac{\partial \Psi}{\partial t} \end{array}$$

Invullen van de harmonische golven levert tijdsafhankelijke SV

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

Tijdsonafhankelijke Schrödingervergelijking

Door scheiding van variabelen kunnen we een oplossing vinden voor het tijdafhankelijke gedeelte van de SV

Toestandsvergelijking voldoet aan $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t) \Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}$

Beschouw een statische potentiaal $V = V(x)$

Schrijf de golf functie als een product $\Psi(x,t) = \psi(x)\phi(t)$

Scheiden van variabelen levert $\frac{1}{\psi} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + V(x)\psi \right] = C = \text{constant} = i\hbar \frac{1}{\phi} \frac{d\phi}{dt}$

Tijdafhankelijke deel $\frac{d\phi}{dt} = -\frac{iC}{\hbar} \phi$ | scheidingsconstante

$$\xrightarrow{\text{blue arrow}} \frac{d\phi}{dt} = \alpha e^{\alpha t} = \alpha \phi \xrightarrow{\text{blue arrow}} \alpha = -\frac{iC}{\hbar}$$

Dus geldt $\phi(t) = e^{-iCt/\hbar}$

Voor onze golf functies hadden we $e^{-i\omega t}$ met $\omega = 2\pi\nu$ $\xrightarrow{\text{blue arrow}} \nu = C/h$

We hebben voor de scheidingsconstante $C = E$ en vinden

$$\phi(t) = e^{-iEt/\hbar}$$

Tijdsonafhankelijke SV

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

Nulpotentiaal

We gaan de tijdonafhankelijke SV oplossen

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

Beschouw constante potentiaal $V = \text{constant}$

Dit levert
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad \longrightarrow \quad \psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

Merk op dat e^{ikx} een harmonische golf voorstelt die beweegt in positieve x-richting

Invullen levert
$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \longrightarrow \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

De energie is niet discreet en een continu spectrum is mogelijk

Merk op dat golfgetal $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ en ook $\lambda = \frac{h}{p}$. We vinden dus $p = \frac{\hbar k}{2\pi}$ en ook $p = \hbar k$

Stappotentiaal met $E < V_0$

Een vrije deeltje beweegt in de richting van een stappotentiaal. De energie E van het deeltje kan kleiner of groter zijn dan deze potentiaal

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

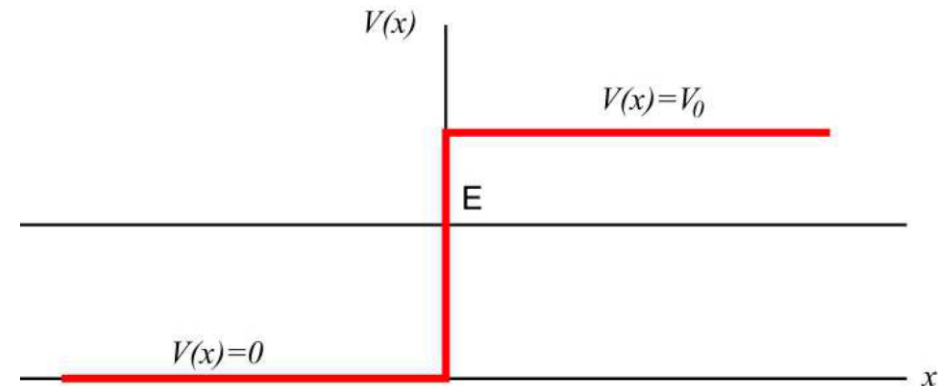
Beschouw constante potentiaal $V(x) = \text{constant} = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & x \geq 0 \end{cases}$

(a) Voor $x < 0$
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$$


$$\psi = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$
$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

(b) Voor $x \geq 0$
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0\psi = E\psi$$


$$\psi = Ce^{\cancel{k_2x}} + De^{-k_2x}$$
$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$



Stappotentiaal met $E < V_0$

Een vrije deeltje beweegt in de richting van een stappotentiaal. De energie E van het deeltje kan kleiner of groter zijn dan deze potentiaal

Kies $C = 0$ en eis continuïteit van golffunctie en afgeleide

$$D \left(e^{-k_2 x} \right)_{x=0} = A \left(e^{ik_1 x} \right)_{x=0} + B \left(e^{-ik_1 x} \right)_{x=0} \quad \longrightarrow \quad D = A + B$$

$$-k_2 D \left(e^{-k_2 x} \right)_{x=0} = ik_1 A \left(e^{ik_1 x} \right)_{x=0} - ik_1 B \left(e^{-ik_1 x} \right)_{x=0} \quad \longrightarrow \quad \frac{ik_2}{k_1} D = A - B$$

We vinden $A = \frac{D}{2} \left(1 + \frac{ik_2}{k_1} \right)$ en $B = \frac{D}{2} \left(1 - \frac{ik_2}{k_1} \right)$

De golffunctie $\psi(x) = \begin{cases} \frac{D}{2} \left(1 + \frac{ik_2}{k_1} \right) e^{ik_1 x} + \frac{D}{2} \left(1 - \frac{ik_2}{k_1} \right) e^{-ik_1 x} & x < 0 \\ D e^{-k_2 x} & x > 0 \end{cases}$ $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \psi dx = 1$ $\longrightarrow D$

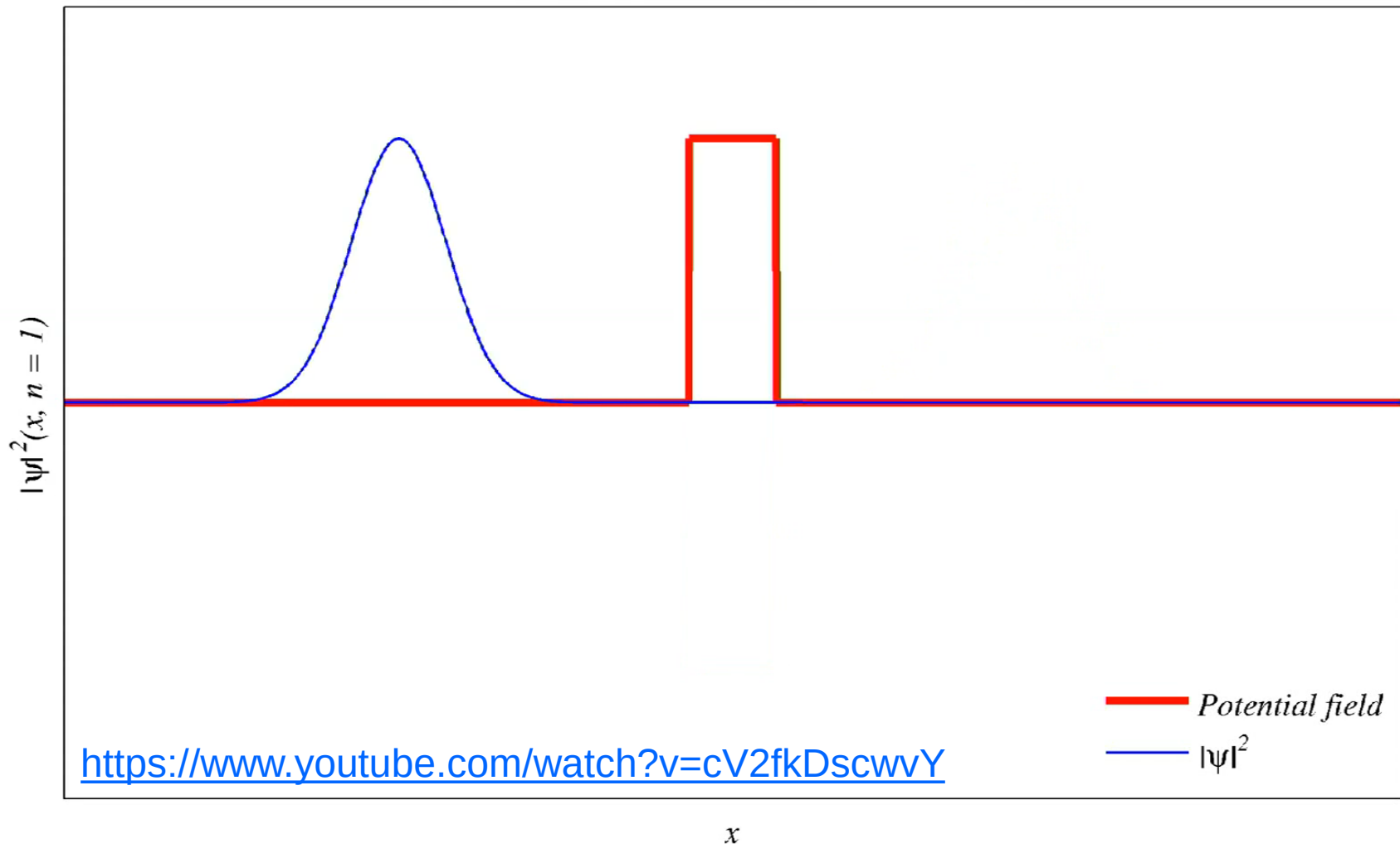
Penetratiediepte $\Delta x \equiv \frac{1}{k_2} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$

Reflectiecoëfficiënt $R = \frac{\text{gereflecteerde intensiteit}}{\text{inkomende intensiteit}} = \frac{\mathcal{B}^* \mathcal{B}}{\mathcal{A}^* \mathcal{A}} = \frac{\left(1 - \frac{ik_2}{k_1} \right)^* \left(1 - \frac{ik_2}{k_1} \right)}{\left(1 + \frac{ik_2}{k_1} \right)^* \left(1 + \frac{ik_2}{k_1} \right)} = 1$

Reflectie van een golfpakket met $E < V_0$

We kunnen een golfpakket opbouwen door superpositie van harmonische golven

Incident wavepacket's energy = $0.5 \times$ barrier height



Stappotentiaal met $E \geq V_0$

Een vrije deeltje beweegt in de richting van een stappotentiaal. De energie E van het deeltje kan kleiner of groter zijn dan deze potentiaal

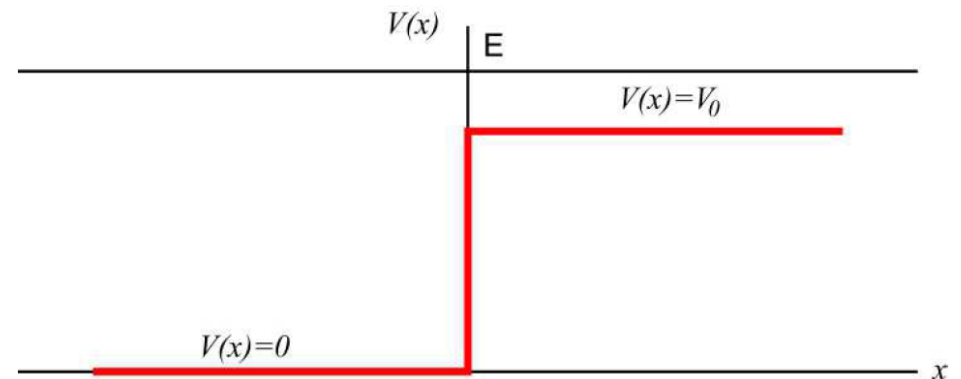
Tijdsonafhankelijke SV $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi$

Beschouw constante potentiaal $V(x) = \text{constant} = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & x \geq 0 \end{cases}$

(a) Voor $x < 0$ $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$



$$\psi = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$
$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$



(b) Voor $x \geq 0$ $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = (E - V_0)\psi$



$$\psi = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x}$$
$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

Stappotentiaal met $E \geq V_0$

Een vrije deeltje beweegt in de richting van een stappotentiaal. De energie E van het deeltje kan kleiner of groter zijn dan deze potentiaal

Kies $D = 0$ en eis continuïteit van golffunctie en afgeleide

$$A \left(e^{ik_1 x} \right)_{x=0} + B \left(e^{-ik_1 x} \right)_{x=0} = C \left(e^{ik_2 x} \right)_{x=0} \quad \longrightarrow \quad A + B = C$$

$$ik_1 A \left(e^{ik_1 x} \right)_{x=0} - ik_1 B \left(e^{-ik_1 x} \right)_{x=0} = ik_2 C \left(e^{ik_2 x} \right)_{x=0} \quad \longrightarrow \quad k_1(A - B) = k_2 C$$

We vinden $B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A$ en $C = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} A$

De golffunctie $\psi(x) = \begin{cases} A e^{ik_1 x} + A \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} e^{-ik_1 x} & x < 0 \\ A \frac{2k_1}{k_1 + k_2} e^{ik_2 x} & x > 0 \end{cases}$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \psi dx = 1 \quad \longrightarrow \quad A$$

Reflectiecoefficient $R = \frac{\mathcal{B}^* \mathcal{B}}{\mathcal{A}^* \mathcal{A}} = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^* \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right) = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2$

In de klassieke mechanica geldt $R = 0$ voor $E > V_0$

Waarschijnlijkheidsdichtheid

Waarschijnlijkheid is behouden in de tijd

Waarschijnlijkheidsdichtheid $\Psi^*\Psi$

Beschouw golffuncties $\Psi(x, t)$ en *complex geconjugeerde* $\Psi^*(x, t)$

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

Verandering in de tijd van de waarschijnlijkheidsdichtheid is dan

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^* \Psi) &= \Psi^* \frac{\partial}{\partial t} \Psi + \Psi \frac{\partial}{\partial t} \Psi^* = \Psi^* \left(-\frac{\hbar}{2im} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \right) + \Psi \left(+\frac{\hbar}{2im} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \right) \\ &= -\frac{\hbar}{2im} \left(\Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \Psi \right) \\ &= -\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\hbar}{2im} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) \right] \end{aligned}$$

We herschrijven dit als

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} j(x, t) = 0$$

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

Transmissie voor potentiaalstap met $E > V_0$

We gebruiken het concept van waarschijnlijkheidsdichtheid en flux om de transmissie uit te rekenen

Voor het gebied $x < 0$

$$j(x, t) = \frac{\hbar}{2im} (A^* e^{-ik_1 x} + B^* e^{ik_1 x}) (ik_1) (A e^{ik_1 x} - B e^{-ik_1 x}) - \frac{\hbar}{2im} (-ik_1) (A^* e^{-ik_1 x} - B^* e^{ik_1 x}) (A e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x})$$



$$j(x, t) = \frac{\hbar}{2im} ik_1 (2\mathcal{A}^* \mathcal{A} - 2\mathcal{B}^* \mathcal{B})$$

$$= j_{\text{inkomend}} + j_{\text{gereflecteerd}}$$

Voor de doorgelaten golf

$$j(x, t) = \frac{\hbar k_2}{m} \mathcal{C}^* \mathcal{C} = j_{\text{doorgelaten}}$$

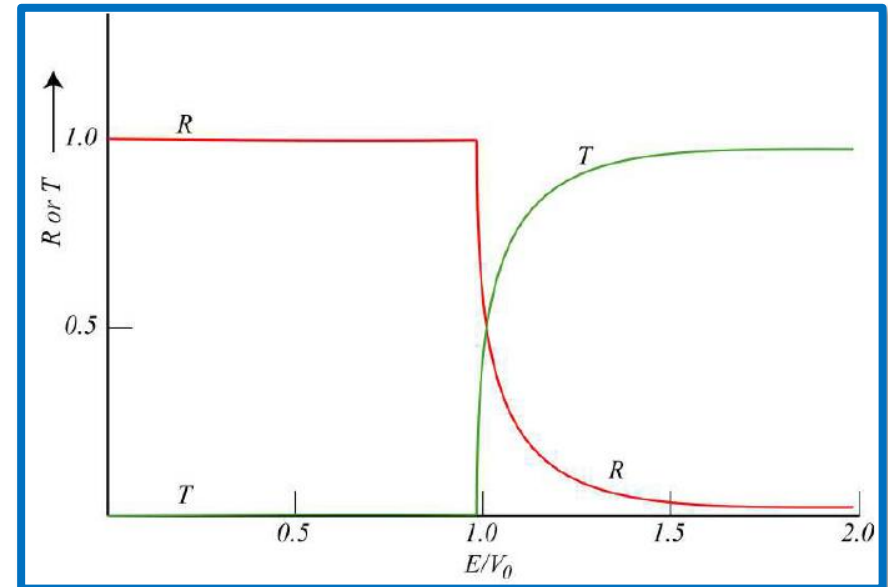
Transmissie en reflectiecoëfficiënten

$$T = \frac{j_{\text{doorgelaten}}}{j_{\text{inkomend}}} \quad \text{en} \quad R = \frac{j_{\text{gereflecteerd}}}{j_{\text{inkomend}}}$$

We vinden

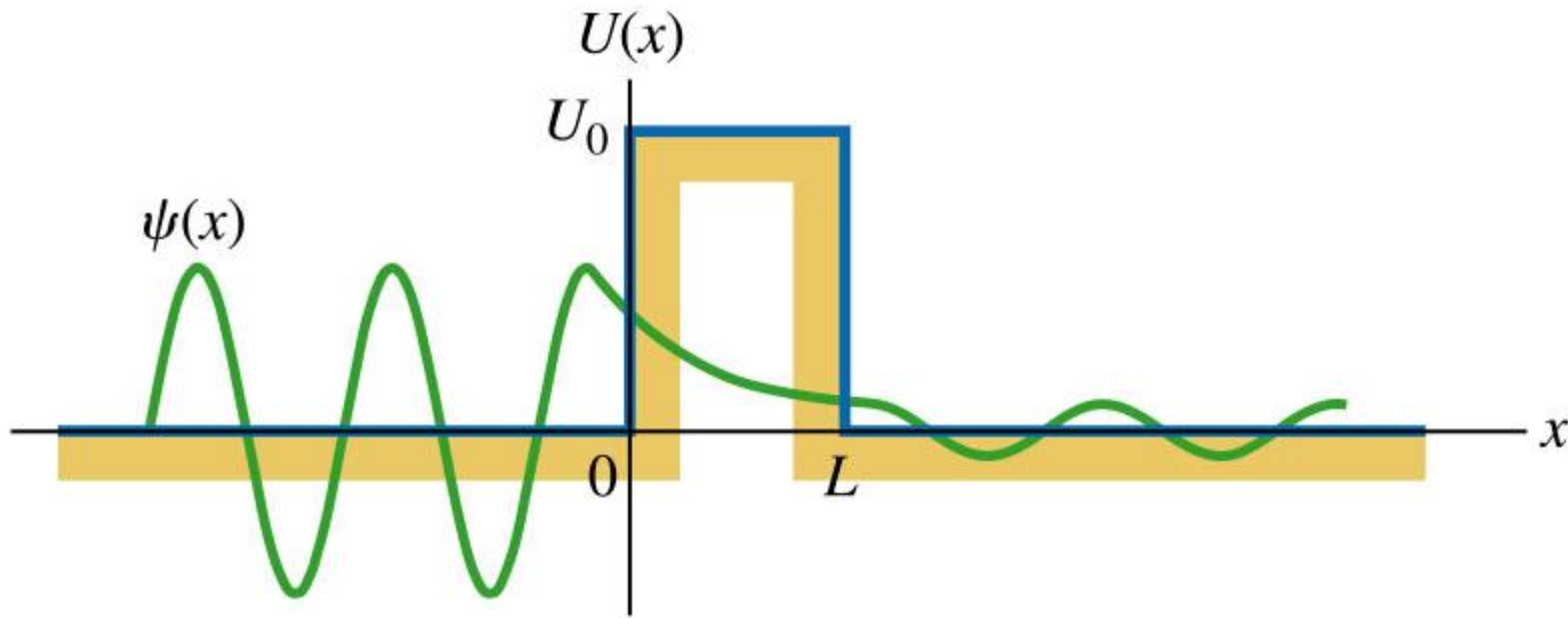
$$T = \frac{\frac{\hbar k_2}{m} \mathcal{C}^* \mathcal{C}}{\frac{\hbar k_1}{m} \mathcal{A}^* \mathcal{A}} = \frac{k_2}{k_1} \frac{(2k_1)^2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

Ook geldt $R + T = 1$



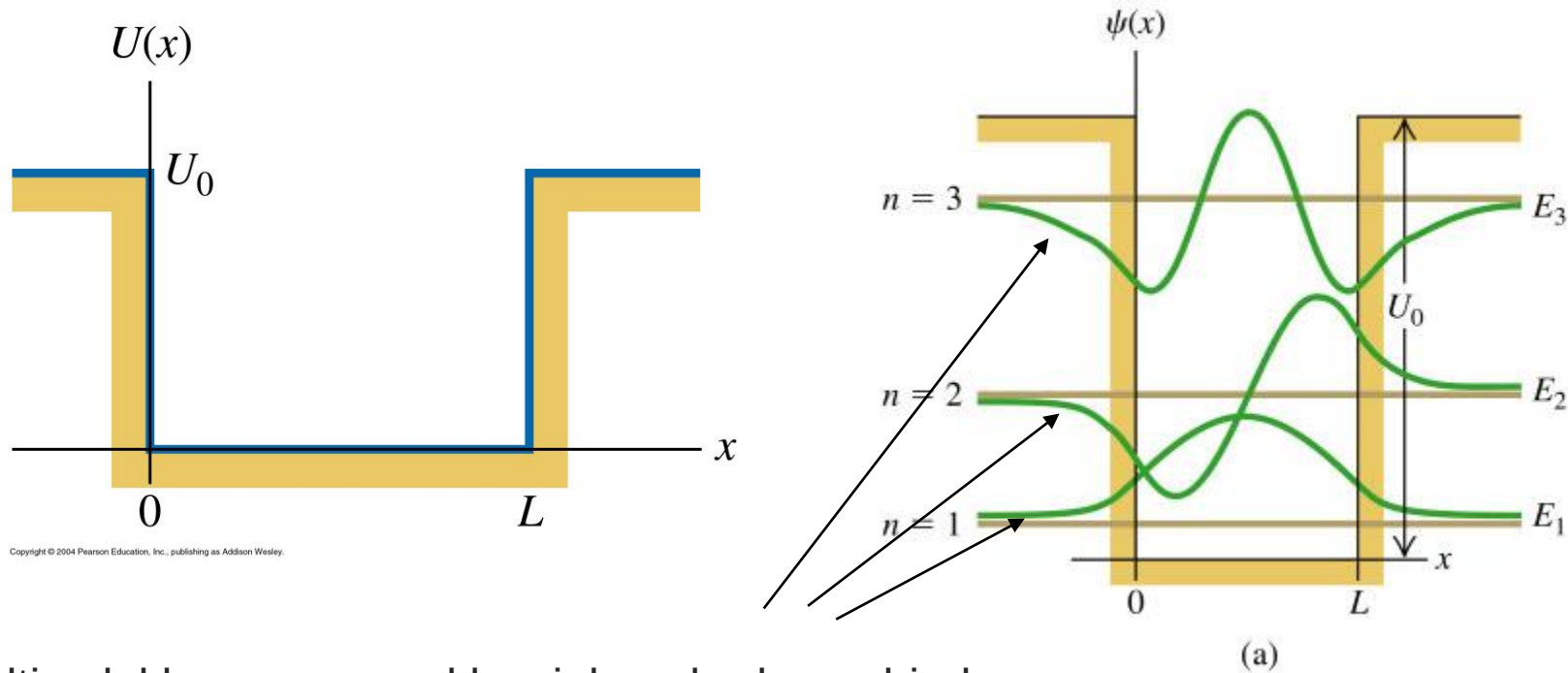
Tunneleffect

Kwantummechanisch kun je door een muur “tunnelen”. Dit verklaart onder andere het radioactieve verval van sommige atoomkernen



Deeltje opgesloten in een potentiaalput

In het dictaat behandelen we een put met oneindig hoge wanden. We kunnen echter ook de situatie voor een put met eindig hoge potential analyseren. Later bespreken we een elektron dat opgesloten is in een 3-dimensionale potentiaalput: het waterstofatoom



Deeltjes lekken naar een klassiek verboden gebied