Inngangur að skammtafræði

Bók: Introduction to QM, Griffiths

Kaflar: 1 - 4, hluti af 5.
6, 7 og 9

Fyrirlestrar, Dæmi (heima og tímadæmi)

Hvað er skammtafræði . . . . .

Hvað er hún ekki . . .

Tilraunir 1880 – 1910

- varmarýmd efna
- Geislun svarthlutar
- Ljósröfun
- Hemlunargeislun
- Compton dreifing
- Orkuróf atóma

fyrirbæri sem ekki er hægt að lýsa með sígildri eðlisfræði

Fyrstu tilraunir til líkanagerðar bentu til þess að atóm í grund hefðu strjált orkuróf

$$E_n \sim h\nu \cdot n$$

með n sem heiltölu

Orku ljóss virtist tengjast tíðni

$$E = h\nu$$

í andstöðu við sígildu niðurstöðuna

$$E \sim \frac{\epsilon_0}{2} E^2 + \frac{1}{2\mu_0} B^2$$

↓

Planck setur fram skammta skilyrði 1900

fullbúin skammtafræði 1926 - 1928

Mismunandi jafngildar framsetningar, sleppum sögunni hér

Vel heppnuð og óhemju hagnýt lýsing eða fræði, notuð vítt og breytt um eðlis-, efna-, verkfræði

Ekki flóknari eða erfiðari en sígild eðlisfræði

Skammtafræðin er óvenjuleg m.v. sígilda eðlisfræði

Við munum leggja áherslu á að skilja eiginleika skammtakerfa

skammtafræðin, er ekki stærðfræði, en við þurfum stærðfræði t.þ.a. skilja heppilega lýsingu hennar línulega algebru

Skammtafræði er notuð til þess að skilja og reikna eiginleika fjölda mismunandi kerfa

Hún er mikil að umfangi þess vegna

Við sétt byrjum að skoða lýsingu einnar-eindar-kerfa, teygjum okkur aðeins í áttina að fjöleinda kerfum

„Öll „skólabókadæmin"
sem við glímum við
koma mjög nærri manngerðum
og náttúrulegum kerfum sem
vísindamenn eru að kljást
við um ~~þessar~~ mundir

Í sígildri aflfræði eru notaðar
hreyfijöfnur, eins og t.d.

$$\ddot{\theta} + \frac{g}{l}\sin\theta = 0$$

sem segir til um hreyfingu
einfalds sveifils

Sígild aflfræði hefur
verið rannsökuð með
almennum aðferðum sem
inn leiða

Lagrangian

$$L = T - V$$

eða Hamiltonian

$$H = T + V$$

Hreyfijöfnurnar og ýmsa
eiginleika má leiða út frá
L og H með almennum
aðferðum

Skammtafræðin er oft sett fram með L eða H.

Skammtafræði byggir því á grunni sígildrar aflfræði en inn koma ný hugtök eins og skömmtun, líkindi, virkjar, $\vec{v} \times \vec{L}$, ...

Líkindum fyrir að finna eind er lýst með bylgjufalli

$\Psi(\vec{r},t)$

tímaþróun bylgjufallsins er samkvæmt jöfnu Schrödingers

$$\boxed{i\hbar \partial_t \Psi(\vec{r},t) = H \Psi(\vec{r},t)}$$

Við þekkjum sígilda Hamilton-virkjann H, en þurfum að útbúa skammta útgáfu hans, skömmtun þ.a. niðurstöður verði í samræmi við tilraunir

Líkindin fyrir að finna eind á bilinu $[a,b]$ eru (í einni vídd)

$$\boxed{\int_a^b |\psi(x,t)|^2 dx}$$

því er $|\psi|^2 \geq 0$

og normalegt þ.a.

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

Allar stærðir í eðlisfræði má gefa vídd í M (massa) L (lengd) og T (tíma)

$$[x] \sim L \,, \quad [a] \sim L$$

$$[\hbar\omega] \sim ML^2T^{-2}$$

$$[H] \sim ML^2T^{-2}$$

og því $[\psi] \sim L^{-1/2}$

(víddargreining)

Seinna rekumst við á bylgjufall

$$\psi(x,t) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{2}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x\right) e^{-\frac{m\omega}{\hbar 2}x^2 - i\frac{3\omega t}{2}}$$

$$\left[\frac{m\omega}{\hbar}\right] \sim \frac{M\ T}{T\ M L^2} \sim L^{-2}$$

því er eðlilegt skilgreina lengd (náttúrulega lengd)

$$\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} = a \longleftarrow$$ fyrir þetta kerfi

$$\rightarrow \psi(x,t) = \left(\frac{2}{\sqrt{\pi}\,a}\right)^{1/2} \left(\frac{x}{a}\right) e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{a}\right)^2 - i\frac{3\omega t}{2}}$$

allt víddarlaust nema ↑ sem gefur ψ rétta vídd

Slík skölun er alltaf heppileg fyrir tölulega eða greinireikninga

Skoðum

$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{2}{\sqrt{\pi}\,a}\left(\frac{x}{a}\right)^2 e^{-\left(\frac{x}{a}\right)^2} \quad (\geq 0)$$

Normum

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, |\psi(x,t)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{dx}{a}\right)\left\{a|\psi(x,t)|^2\right\}$$

t.d. (GR - 3.461.3)

$$\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} du\; u^2 e^{-u^2} = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\,\frac{\sqrt{\pi}}{2} = 1$$

Meðalgildi (væntigildi) x

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \; x \, |\psi(x,t)|^2 \;=\; 0$$

því fallið er odd stætt um x=0

líklegast er að finna eindina í x=0

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \; x^2 \, |\psi(x,t)|^2 \;=\; a^2 \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{dx}{a}\right) \left(\frac{x}{a}\right)^2 \left\{ a |\psi(x,t)|^2 \right\}$$

$$= \underline{a^2 \cdot \text{hreinvíddarlaus tala}} \quad !$$

og $\langle x^2 \rangle$ tengist náttúrulega lengdarskala kerfisins

$$\langle x^2\rangle = a^2 \cdot \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} du\; u^4 e^{-u^2} = a^2 \cdot \frac{2}{\sqrt{\pi}}\,\frac{3\sqrt{\pi}}{4} = a^2\,\frac{3}{2}$$

Óvissan í staðsetningu eindarinnar er því

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2} = a\cdot\sqrt{\frac{3}{2}} \sim 1{,}2\cdot a$$