

7. Täielik Schrödingeri võrrand (ajast sõltuv)

20

Täielik Schrödingeri võrrand on:

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

kus:

- $\psi = \psi(x, t)$ on lainefunktsioon, mis sõltub nii asukohast x kui ka ajast t ,
- $\hat{H}$ on Hamiltoni operaator (koguenenergia operaator).

Seisev lahend

Et leida **seisev lahend**, oletame, et lainefunktsioon on eraldatav ruumiliseks ja ajalise sõltuvusega osaks:

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

kus:

- $\phi(x)$ on **ajast sõltumatu** osa,
- $e^{-iEt/\hbar}$ kirjeldab **ajalist arengut** energiaga E .

Asetades selle täielikku Schrödingeri võrrandisse, saame:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\phi(x) e^{-iEt/\hbar}) = \hat{H} \phi(x) e^{-iEt/\hbar}$$

Kuna $e^{-iEt/\hbar}$ ajatuletis on $-E/\hbar$, saame:

$$-E \phi(x) e^{-iEt/\hbar} = \hat{H} \phi(x) e^{-iEt/\hbar}$$

Jagades välja $e^{-iEt/\hbar}$, jääb järgi:

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

See on ajast sõltumatu Schrödingeri võrrand:

$$\hat{H}\phi = E\phi$$

mis määrab lainefunktsioonid $\phi(x)$ ja nende vastavad energiataseemed E .

Erinevus lahendite vahel

- Ajast sõltuv Schrödingeri võrrand kirjeldab igasugust kvantolekut, sealhulgas energianivoode superpositsioone.
- Ajast sõltumatu Schrödingeri võrrand leiab erilised energianivooga seotud olekud, kus lainefunktsiooni tõenäosusjaotus ei muutu ajas.
- Puhas seisev olek areneb ajas ainult faasiteguriga $e^{-iEt/\hbar}$, mis ei mõjuta mõõdetavaid suursusi, näiteks tõenäosusjaotust $|\psi(x, t)|^2$.

13. Kineetilise energia operaatori hermiitilisus

Kineetilise energia operaator kvantmehaanikas on määratud kui:

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$$

5
kus on
vahevalemid?

Hermiitilisuse tõestamiseks peame näitama, et iga kahe lainefunktsiooni $\psi(x)$ ja $\phi(x)$ korral kehtib:

$$\langle \phi | \hat{T} \psi \rangle = \langle \hat{T} \phi | \psi \rangle$$

Skalaarpalgi definitsiooni kasutades saame:

$$\int \phi^*(x) \hat{T} \psi(x) dx = \int (\hat{T} \phi(x))^* \psi(x) dx$$

Asendades $\hat{T}\psi(x)$:

$$\int \phi^*(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) \right) dx$$

Ositi integreerides ja eeldades, et lainefunktsioonid kaduvad lõpmatuses (piirtingimused), saame:

$$\int \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi(x) \right)^* \psi(x) dx$$

mis on täpselt $\langle \hat{T} \phi | \psi \rangle$.

Seega on kineetilise energia operaator hermiitiline.

19. Kvantarvu positiivsete ja negatiivsete väärtuste füüsikaline tõlgendus ühemõõtmelises perioodilises liikumises

Ühemõõtmelises perioodilises liikumises vaba osakese lainefunktsioonid on kujul:

20

$$\psi_n(x) = e^{ik_n x}$$

kus lainvektor k_n on seotud kvantarvuga n :

$$k_n = \frac{2\pi n}{L}$$

kus L on perioodi pikkus.

- Kui $n > 0$, siis osake liigub **paremale**.
- Kui $n < 0$, siis osake liigub **vasakule**.

26. 5 sama küsimus (vt. 13)

Heisenbergi määramatuse printsiibi tuletamine põhineb lainepaketi ja Fourier' teisenduse kontseptsioonidel. Siin on samm-sammuline tuletus:

1. Lainepaketi määramatus:

- Lainepakett, mis kirjeldab osakese kvantolekut, on funktsioon $\psi(x)$, mis sõltub asukohast x .
- Lainepaketi Fourier' teisendus $\phi(p)$ annab lainepaketi impulsi ruumis.

2. Fourier' teisendus:

- Fourier' teisenduse ja selle pöördteisenduse vahel kehtib seos: $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p) e^{ipx/\hbar} dp$
 $\phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-ipx/\hbar} dx$

3. Määramatuse seos:

- Asukoha ja impulsi määramatuse vahel kehtib seos: $\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$
- Selle seose tuletamiseks kasutame Cauchy-Schwarz'i ebavõrdsust, mis kvantmehaanika kontekstis väljendub järgmiselt: $(\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx) (\int_{-\infty}^{\infty} |p\phi(p)|^2 dp) \geq |\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) p\phi(p) dx|^2$

4. Lõplik tuletus:

- Kasutades ülaltoodud ebavõrdsust ja lainepaketi omadusi, saame tuletada määramatuse printsiibi: $\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$

33.

20

1. Schrödingeri võrrand:

- Alustame ühe-dimensionaalsest Schrödingeri võrrandist: $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x)$
- Kui $x < 0$, siis $U(x) = 0$ ja kui $x > 0$, siis $U(x) = U_0$.

2. Lahendused piirkondades:

- Piirkonnas $x < 0$ on lahendus kujul: $\psi(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$ kus $k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$.
- Piirkonnas $x > 0$ on lahendus kujul: $\psi(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x}$ kus $k_2 = \sqrt{\frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}}$.

3. Piiritingimused:

- Jätkusuutlikkuse ja pidevuse tingimused annavad: $\psi(0^-) = \psi(0^+) \quad \frac{d\psi(0^-)}{dx} = \frac{d\psi(0^+)}{dx}$

4. Peegeldunud voog:

- Peegeldunud voog j_R on seotud peegeldunud laine amplituudiga B : $j_R = \frac{\hbar k_1 |B|^2}{m}$

Seega, kui $k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$, saame peegeldunud osakeste voo: $j_R = \frac{\hbar k_1 |B|^2}{m}$