TFYA35 Molekylfysik
Föreläsning 3

Thomas Ederth
Linköpings universitet
IFM

3-1 Heisenbergs osäkerhetsrelation

”Det är omöjligt att med godtycklig precision bestämma både en partikels position och rörelsemängd.”

$$\Delta p \Delta x \geq \hbar/2$$

Osäkerheterna Δ är väldefinierade (rms-värden, ”root mean squared”), t.ex.:

$$\Delta p = \sqrt{< p^2 > - < p >^2}$$
$$\Delta x = \sqrt{< x^2 > - < x >^2}$$

3-1 Heisenbergs osäkerhetsrelation (forts.)

Osäkerhetsrelationen gäller för varje par av komplementära (icke-kommuterande) variabler, d.v.s. sådana att

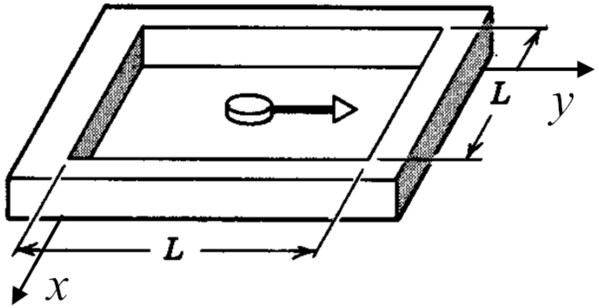
$$\hat{\Omega}_1\hat{\Omega}_2\psi \neq \hat{\Omega}_2\hat{\Omega}_1\psi$$

$[E, t]$ och $[p_x, x]$ är komplementära, men *inte* t.ex. $[p_x, y]$.

Kommutatorn till operatorerna $\hat{\Omega}_1$ och $\hat{\Omega}_2$ ges av

$$[\hat{\Omega}_1, \hat{\Omega}_2] = \hat{\Omega}_1\hat{\Omega}_2 - \hat{\Omega}_2\hat{\Omega}_1$$

3-2 Tvådimensionell (2D) rörelse: Partikel i kvadratisk låda



$V(x,y) = 0 \ : \ 0 \le x \le L, 0 \le y \le L$
$V(x,y) \to \infty \ : \ x < 0, x > L \ ; \ y < 0, y > L$
Schrödingerekvationen blir:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2}\right)\psi = E\psi$$

Rörelserna i x- och y-led är oberoende i detta system, så att
$\hat{H} = \hat{T}_x(x) + \hat{T}_y(y)$. Ansätt därför $\psi(x,y) = X(x)Y(y)$, och $E = E_x + E_y$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{d^2}{dx^2}XY + \frac{d^2}{dy^2}XY\right] = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[Y\frac{d^2X}{dx^2} + X\frac{d^2Y}{dy^2}\right] = E\ XY \quad \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \ \Big/ \begin{array}{c}\text{dividera}\\ \text{med } XY\end{array} \Big/ \ \Rightarrow \ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{X}\frac{d^2X}{dx^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{Y}\frac{d^2Y}{dy^2} = E$$

3-2 Tvådimensionell (2D) rörelse: Partikel i kvadratisk låda (forts.)

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}X = E_x X \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}Y = E_y Y \end{cases}$$

Lösningar:

$$\begin{cases} X_n = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{n\pi x}{L},\ \ E_x = \frac{h^2 n^2}{8mL^2}, n = 1, 2, 3, ... \\ Y_n = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{m\pi y}{L},\ \ E_y = \frac{h^2 m^2}{8mL^2}, m = 1, 2, 3, ... \end{cases}$$

$$\psi_{n,m}(x, y) = \frac{2}{L}\sin\frac{n\pi x}{L}\sin\frac{m\pi y}{L},\ \ E_{n,m} = (n^2 + m^2)\frac{h^2}{8mL^2}$$

Tillstånden $\psi_{1,2}$ och $\psi_{2,1}$ motsvarar olika vågfunktioner som har samma energi $\Rightarrow$ *degeneration*!