Curs 3

Ecuația lui Schrödinger

- se bazează pe comportamentul dual undă - corpuscul introdus de de Broglie.

ptr o undă:

$$E = \hbar\omega.$$

ptr o particulă liberă.

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

Considerăm mișcarea unidimensională pe axa Ox.

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{p^2}{2m\hbar} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m}.$$

k - vect. de undă

Introducem $\boxed{\Psi(x,t) \text{ - funcția de undă}}$ care ne descrie comportamentul particulei.

$$\boxed{\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int A(k)\cdot e^{i(kx-\omega\cdot t)}\,dk} = \int \frac{A(p)}{\hbar}\cdot e^{i(px-Et)/\hbar}\cdot dp$$

$$i\hbar\,\partial_t \Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int dk\, A(k)\cdot \boxed{\hbar\omega\cdot}\, e^{i(kx-\omega t)}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 \Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\cdot\int dk\, A(k) \boxed{\frac{\hbar^2 k^2}{2m}}\cdot e^{i(kx-\omega t)}.$$

dar $\boxed{\underbrace{\hbar\omega}_{\text{energia undei}} = \underbrace{\frac{\hbar^2 k^2}{2m}}_{\text{energia particulei}}}$ - dacă validăm rel. de Broglie

$\Downarrow$

$$\boxed{i\hbar\,\partial_t \Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 \Psi(x,t)}$$

= ecuația lui Schrödinger ptr o particulă liberă.

Ecuația lui Schrödinger se poate obține formal asociind energiei și impulsului operatori matematici.

$$\begin{cases} E \to i\hbar \partial_t = i\hbar \dfrac{\partial}{\partial t} \\ p \to \dfrac{\hbar}{i}\partial_x = \dfrac{\hbar}{i}\dfrac{\partial}{\partial x}. \end{cases} \qquad p^2 = -\hbar^2 \partial_x^2 = -\hbar^2 \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2}.$$

Operatorii acționează asupra funcției de undă.

Particulă liberă (mișcare unidimensională)

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad \Big| \ \Psi(x,t)$$

$$E \cdot \Psi(x,t) = \frac{p^2}{2m}\Psi(x,t)$$

$E \to i\hbar\partial_t$ ↓ ↓ $p \to \frac{\hbar}{i}\partial_x$

$$i\hbar\partial_t \Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\cdot \partial_x^2 \Psi(x,t)$$

Particulă într-un potențial

operatorul de poziție lasă $\Psi(x,t)$ nemodificată

$$\boxed{x \to x}$$

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad \Big| \ \Psi(x,t)$$

$$E\,\Psi(x,t) = \frac{p^2}{2m}\cdot\Psi(x,t) + V(x)\cdot\Psi(x,t)$$

↓

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

↳ ec. Schrödinger ptr o particulă într-un potențial $V(x)$.

Operatorii:

$$\begin{cases} E \to i\hbar\partial_t \\ p \to \dfrac{\hbar}{i}\partial_x \\ x \to x \end{cases}$$

Operatorul Hamiltonian:

- ptr particulă liberă $\quad H = \dfrac{p^2}{2m} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2$

- ptr particulă în pot $\quad H = \dfrac{p^2}{2m} + V(x) = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V(x)$

$$E = H \quad | \Psi(x,t)$$

$i\hbar \partial_t \downarrow$

$$\boxed{i\hbar \partial_t \Psi(x,t) = H \cdot \Psi(x,t)}$$ - ec. lui Schrödinger ptr un sistem cuantic descris de Hamiltonianul H.

↳ ec. Schrödinger cea mai generală.

Interpretarea fizică a funcției de undă

- fct de undă are o intrepretare statistică.

$P(x,t)$ - probabilitatea de a găsi particula la poziția x la momentul t

$$\boxed{P(x,t) = |\Psi(x,t)|^2} = \Psi(x,t) \cdot \Psi^*(x,t)$$ - mărime reală și pozitivă

Ptr ca $P(x,t)$ să reprezinte o probabilitate

$$0 \le P(x,t) \le 1. \quad \text{și} \quad \int dx\, P(x,t) = 1$$

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = 1}$$ - condiția de normare a funcției de undă.

O funcție de undă fizică trebuie să satisfacă întotdeauna condiția de normare.

Curentul de probabilitate

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

$$\frac{d}{dt} \int \Psi(x,t) \cdot \Psi^*(x,t)\, dx = 0.$$

$$\frac{d}{dt} \int |\Psi(x,t)|^2 dx = \int \left[\partial_t \Psi(x,t) \cdot \Psi^*(x,t) + \Psi(x,t)\, \partial_t \Psi^*(x,t)\right] dx$$

ptr o particulă ce se mișcă în $V(x)$

$$\frac{\psi^*}{i\hbar}\,\Big|\quad i\hbar\,\partial_t \psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\partial_x^2 \psi(x,t) + V(x)\,\psi(x,t)\quad\Big|^*$$

$$\frac{\psi}{(-i\hbar)}\,\Big|\quad -i\hbar\,\partial_t \psi^*(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\partial_x^2 \psi^*(x,t) + V(x)\,\psi^*(x,t)$$

$$\psi^*(x,t)\cdot\partial_t \psi(x,t) = -\frac{\hbar}{2mi}\cdot\psi^*\cdot\partial_x^2\psi + \frac{1}{i\hbar}\,\cancel{\psi^* V\cdot\psi}$$

$$\psi(x,t)\,\partial_t \psi^*(x,t) = \frac{\hbar}{2mi}\,\psi\cdot\partial_x^2\psi^* - \frac{1}{i\hbar}\,\cancel{\psi\cdot V\psi^*}$$

+

$$\psi^*\partial_t\psi + \psi\partial_t\psi^* = -\frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\,\partial_x^2\psi - \psi\partial_x^2\psi^*\right).$$

$$\frac{d}{dt}\int P(x,t)\,dx = \int -\frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\partial_x^2\psi - \psi\,\partial_x^2\psi^*\right)dx$$

$$= \frac{\hbar}{2mi}\cdot\int\frac{\partial}{\partial x}\left(\psi\cdot\partial_x\psi^* - \psi^*\partial_x\psi\right)dx$$

$$= \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi\,\partial_x\psi^* - \psi^*\partial_x\psi\right)\Big|_{-\infty}^{\infty}$$

$$= 0.$$

$$\Rightarrow \boxed{\lim_{x\to\infty}\psi(x,t) = 0\ !}$$

o funcție de undă care satisface condiția de normare se anulează la ∞.

$$\boxed{S(x,t) = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*(x,t)\,\partial_x\psi(x,t) - \psi(x,t)\cdot\partial_x\psi^*(x,t)\right)}$$

– curent de probabilitate.

$$\boxed{\frac{d}{dt} P(x,t) + \frac{\partial}{\partial x} S(x,t) = 0.}$$

ec. de continuitate pentru densitatea de probabilitate.

electrostatică

$\partial_t \rho + \nabla \vec{j} = 0$

densitatea de sarcină

curentul de sarcină

$P(x,t)$ - densitate de probabilitate

$$P(x,t) = |\Psi(x,t)|^2$$

Generalizarea la mișcarea tridimensională.

$$E = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + V(\vec{r})$$

$\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$ - impuls

$\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$ - vector de undă.

$$\vec{p} = \hbar \cdot \vec{k}$$

$$\vec{p} = (p_x, p_y, p_z) = p_x \vec{i} + p_y \vec{j} + p_z \vec{k}$$
$$= \frac{\hbar}{i} \partial_x \bar{i} + \frac{\hbar}{i} \partial_y \bar{j} + \frac{\hbar}{i} \partial_z \bar{k}$$
$$= \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \qquad \vec{\nabla} = (\partial_x, \partial_y, \partial_z)$$

$$\boxed{\begin{cases} \vec{p} \to \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \\ E \to i\hbar \partial_t \\ \vec{r} \to \vec{r} \end{cases}}$$ - operatorii în cazul mișcării 3D.

$$i\hbar \partial_t \Psi(\bar{r}, t) = H \cdot \Psi(\bar{r}, t) \qquad H = \frac{\bar{p}^2}{2m} + V(\bar{r})$$

$$\boxed{i\hbar \partial_t \Psi(\bar{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\bar{r}, t) + V(\bar{r}) \Psi(\bar{r}, t)}$$

ec. Schrödinger ptr o particulă într-un potențial $V(\bar{r})$.

În 3D: $P(\bar{r}, t) = |\Psi(\bar{r}, t)|^2.$

Condiția de normare ptr funcția de undă este:

$$\int d\vec{r}\, |\psi(\bar{r},t)|^2 = 1.$$

Curentul de probabilitate:

$$S(\bar{r},t) = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*(\bar{r},t)\,\nabla\psi(\bar{r},t) - \psi(\bar{r},t)\,\nabla\psi^*(\bar{r},t)\right)$$

Ecuația de continuitate: $\frac{d}{dt}P(\bar{r},t) + \nabla S(\bar{r},t) = 0$

Probleme:

① O antenă cu puterea de 45 kW emite unde radio cu frecvența de 4 MHz.

Câți fotoni sunt emiși pe sec. de antenă?

$P = 45\,kW \Rightarrow E = P \cdot t$

Într-o sec. $E = 45\,kW \cdot 1s = 45\,kJ = 45 \cdot 10^3\,J.$

E_0 - energia unui foton $E_0 = h\nu$; $\nu = 4 \cdot 10^6\,Hz.$

$$E = n \cdot E_0 \Rightarrow n = \frac{E}{E_0}$$

$$n = \frac{P \cdot t}{h\nu} = \frac{45 \cdot 10^3\,\cancel{J}}{6{,}62 \cdot 10^{-34}\,\cancel{J \cdot s} \cdot 4 \cdot 10^6\,\frac{1}{\cancel{s}}}$$

$$n = \frac{45 \cdot 10^3 \cdot 10^{34} \cdot 10^{-6}}{26{,}4} = 1{,}6 \cdot 10^{31}$$

$$\boxed{n \simeq 1{,}6 \cdot 10^{31}}$$

② O particulă este descrisă de funcția de undă $\psi(x) = A \cdot \frac{1}{1+x^2}$. unde A reprezintă const. de normare.

a) Să se determine A, folosind condiția de normare a fct de undă.

b) Să se det. amplitudinea pachetului de unde $\phi(k)$

Condiția de normare a fct de undă este:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = 1 \qquad \psi(x) = A \cdot \frac{1}{1+x^2}$$

$$|\psi(x)|^2 = A^2 \cdot \frac{1}{(1+x^2)^2}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} A^2 \cdot \frac{1}{(1+x^2)^2} dx = 1 \qquad A^2 \cdot \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{(1+x^2)^2} dx}_{I} = 1.$$

$$A^2 \cdot I = 1 \Rightarrow \boxed{A = \frac{1}{\sqrt{I}}}$$

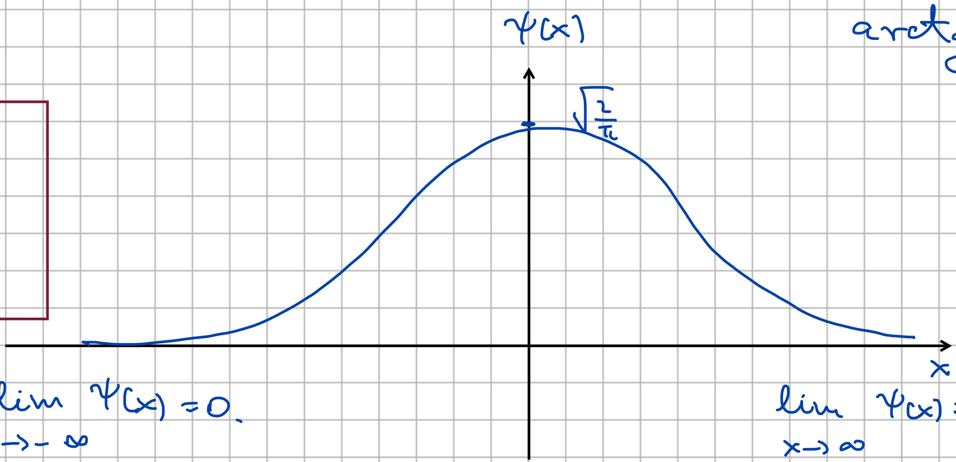
$$\int \frac{1}{(1+x^2)^2} dx = \frac{1}{2}\left(\frac{x}{1+x^2} + \operatorname{arctg} x\right)$$

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{(1+x^2)^2} dx = \frac{\pi}{2}$$

$$\int \frac{x'}{(1+x^2)^2} dx = \frac{1}{2}\left(\frac{x}{(1+x^2)} + \underbrace{\int \frac{1}{1+x^2}}_{\operatorname{arctg} x}\right)$$

$$\boxed{A = \sqrt{\frac{2}{\pi}}}$$

$$\boxed{\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot \frac{1}{1+x^2}}$$



$$\lim_{x \to -\infty} \psi(x) = 0. \qquad \lim_{x \to \infty} \psi(x) = 0$$

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

b) $\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{1+x^2}$

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \int \psi(x) \cdot e^{ikx} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{1+x^2} \cdot e^{ikx} dx$$

$$\boxed{\phi(k) = \frac{1}{\pi} \cdot e^{-|k|}}$$