Schrödinger ekvationen

Central ekv. inom kvantfysik, som Erwin Schrödinger i 1926 'upptäckte'.

Olika varianter: tidsberoende (TBSE), tidsoberoende (TOSE).
Vi tittar på varianten i en dimension, som beskriver läget av partikeln (och rörelse): ersätter Newtons ekv.

Tillstånd: $|\psi(t)\rangle$ beskriver systemet vid tiden t.
$|\psi(t)\rangle$ kan uttryckas i olika baser, beroende på vad vi vill mäta.

Ett mätvärde ⟷ bastillstånd

Ex: $s=1$: $|+\rangle; |0\rangle; |-\rangle$
NH_3: $|1\rangle; |2\rangle$ ell $|I\rangle; |II\rangle$.

Diskreta bastillstånd:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_i c_i(t)\,|i\rangle$$

$P_i(t) = |c_i(t)|^2$; sannolikhet att vara i tillstånd $|i\rangle$ vid tid t.

Så: $\sum_i P_i(t) = \sum_i |c_i(t)|^2 = 1$ ~~m~~ normering!

* $\langle i|j\rangle = \delta_{i,j}$
* $\sum_i |i\rangle\langle i| = \mathbb{1}$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_i |i\rangle \underbrace{\langle i|\psi(t)\rangle}_{c_i(t)}$$

Om vi vill veta läget x av en partikel:
x tar kontinuerliga värden!

Bastillstånd: $|x\rangle$: bestämmer läge i rummet. ∞ många bastillstånd!

Coef. $c_i(t)$ blir kont. function $\psi(x,t) = c_x(t)$

Vi har kontinuerliga bas tillstånd!
Summor blir integraler!

Så: $\mathbb{1} = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, |x\rangle\langle x|$, $|\psi(t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, |x\rangle \underbrace{\langle x|\psi(t)\rangle}_{\psi(x,t)}$

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

Vi måste ändra sannolikhets tolkningen lite grann
Chans att hitta en partikel ~~plats~~ precis vid x är noll (~~[illegible]~~ oändlig många punkter)

$P(x,t) = 0$, så $P(x,t) \neq |\psi(x,t)|^2$.

Vi kan räkna ut slh ~~[illegible]~~ att hitta ~~[illegible]~~ partikeln i en intervall

$P(a \leq x \leq b, t) = \int_a^b dx\, |\psi(x,t)|^2$, med $\int_{-\infty}^{\infty} dx\, |\psi(x,t)|^2 = 1$ (Normering).

Litet intervall Δx:
$$P(x' \leq x \leq x' + \Delta x) = \int_{x'}^{x'+\Delta x} dx\, |\psi(x,t)|^2 \approx |\psi(x',t)|^2 \Delta x$$

$|\psi(x,t)|^2$ är prop. med sannolikheten att hitta partikeln i ett litet intervall kring x (sannolikhetsdensitet).

$\psi(x,t)$ (slh): amplitudes densitet

Generalisering av $\mathbb{1} = \sum_i |i\rangle\langle i|$ blev

$$\mathbb{1} = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, |x\rangle\langle x| .$$

Vad blir $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$?

Knepig! Diskret: $c_i(t) = \langle i|\psi(t)\rangle = \langle i|\mathbb{1}|\psi(t)\rangle$

$$= \sum_j \langle i|j\rangle\langle j|\psi(t)\rangle = \sum_j \langle i|j\rangle c_j(t)$$

Ger rätt svar med $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$!

Kontinuerlig: $\psi(x',t) = \langle x'|\mathbb{1}|\psi(t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \langle x'|x\rangle \underbrace{\langle x|\psi(t)\rangle}_{\psi(x,t)}$

Så: $\psi(x',t) = \int_{-\infty}^{\infty} \langle x'|x\rangle \psi(x,t)\, dx$

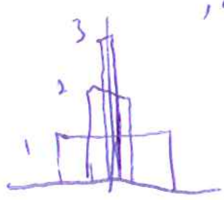
Vänsterled beror bara på ~~x~~ hur $\psi(x,t)$ ser ut i x', så vi borde ha $\langle x'|x\rangle = 0$ om $x \neq x'$

Men om $\langle x'|x\rangle = 1$ för $x = x'$, då är integralen noll, $\langle x'|x\rangle$ måste vara oändlig i $x = x'$: så $\langle x'|x\rangle$ är ingen funktion, utan en fördelning:

$\langle x|x'\rangle = \delta(x-x')$: Diracs 'deltafunktion', med def:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-x') f(x)\, dx = f(x') .$$

Ex: $\delta_n(x) = \begin{cases} 0 & x < -\frac{1}{2n} \\ n & -\frac{1}{2n} < x < \frac{1}{2n} \\ 0 & x > \frac{1}{2n} \end{cases}$, $\delta(x) = \lim_{n\to\infty} \delta_n(x)$



Schrödinger ekv:

Tids utveckling diskret: $i\hbar \frac{d}{dt} c_i(t) = \sum_j H_{ij} c_j(t)$

eller: $i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle$

I en dimension, om vi vill veta läget av en partikel:

TBSE $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) = \underbrace{H(x)}_{\text{Energi/Hamilton operator.}} \psi(x,t) = \Big(\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}}_{\text{kin. energi}} + \underset{\text{pot. energi}}{V(x)} \Big)\psi(x,t)$

Formen av $H(x)$! går inte att herleda?

TBSE ger oss $\psi(x,t)$ om vi vet H.

Newton $F = m\frac{d^2x(t)}{dt^2}$ ger oss $x(t)$ om vi vet F

Kan man lösa TBSE, då vet man hur systemet beter sig!

Ofta vill vi veta energin av systemet, så vi behöver stationära tillstånd, med tids oberoende sannolikheter:

$\psi_E(x,t) = e^{-i/\hbar\, Et} \phi_E(x)$, med TBSE får vi:

$\cancel{i\hbar} \cancel{(-i)}/\cancel{\hbar}\, E\, e^{-i/\hbar\, Et} \phi_E(x) = e^{-iEt/\hbar} H(x)\, \phi_E(x)$, eller

$H(x)\phi_E(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)\phi_E(x) = E\,\phi_E(x)$

Tids oberoende SE, med E ~~[illegible]~~ energi av systemet.

Om vi löser TOS E får vi $\phi_E(x)$, och

$$\Psi_E(x,t) = e^{-iEt/\hbar}\,\phi_E(x).$$

En lös är: $\Psi_E(x,t)$, så en godtycklig tillstånd kan

vi skriva som

$$\Psi(x,t) = \sum_E c_E \Psi_E(x,t) = \sum_E c_E\, e^{-iEt/\hbar}\,\phi_E(x)$$

summer över alla möjliga energi värden!

Ex

Vi tittar på det enklaste fallet, $V(x)$ är konstant, V_0.

Då: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\phi(x) + V_0\phi(x) = E\,\phi(x)$, eller

$$\frac{d^2}{dx^2}\phi(x) = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\,\phi(x)$$

Lösning beror på tecknet av $V_0 - E$.

Om $V_0 - E > 0$, $E < V_0$: exponentiell lösningar:

$$\phi_E(x) = a e^{kx} + b e^{-kx} \quad \text{med } k = \sqrt{2m(V_0-E)/\hbar^2}$$

Lösningar är exp. avtagande/växande. E av part. är mindre än V_0, så att området där en part. inte kan vara i klassisk fysik: tunnelning.

Om $V_0 - E < 0$, $E > V_0$: $\phi_E(x) = a\sin(kx) + b\cos(kx)$, med

$$k = \sqrt{2m(E-V_0)/\hbar^2}$$

Sinus formade vågfunktioner (vågor).