Schrödinger ekvationen (TOSE):

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

med E energin av systemet.

Lösningar för konstant potential $V(x) = V_0$:

beror på tecknet av $V_0 - E$.

Om $E < V_0$: exponentiella lösningar:

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

a, b: konstanter.

Om $E > V_0$: sinus lösningar:

$$\phi(x) = a \sin(kx) + b \cos(kx); \quad k = \sqrt{2m(E - V_0)/\hbar^2}$$

Potentialgrop: V är konstant på olika områden,

till ex: $x < 0$: $V(x) = V_1$

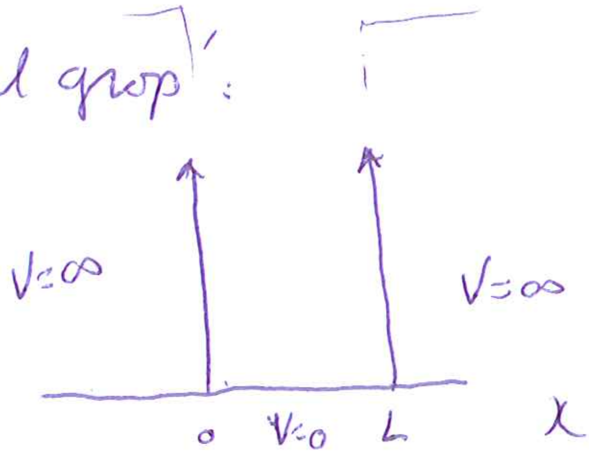
$0 < x < L$: $V(x) = V_2$

$x > L$: $V(x) = V_3$

För att få lösningen till TOSE: lös den för de olika områden, och klistra ihop!

'Oändlig djup potential grop':

$V_1 = V_3 = \infty$; $V_2 = 0$



Område 3!

$x > L$! $E < V_3 = \infty$, så $\phi(x) = ae^{kx} + be^{-kx}$

$k = \sqrt{2m(V_3 - E)/\hbar^2} = \infty$, så $be^{-kx} = 0$.

Så: $\phi(x) = ae^{kx}$ men $e^{kx} \to \infty$, så

sh. att hitta partikeln skulle vara ∞.

Vi måste ha $a = 0$! $\Rightarrow$ $\underline{\phi(x > L) = 0}$

Område 1: $x < L$ $E < V_1 = \infty$, så $\phi(x) = ae^{kx} + be^{-kx}$.

Nu är $ae^{kx} = 0$ $(x<0!)$, och $e^{-kx} \to \infty$.

Så, vi måste ha $b = 0$, som ger: $\phi(x < 0) = 0$.

Område 2: $0 < x < L$: $E > V_2 = 0$, så vi har här:

$\phi(x) = a \sin(kx) + b \cos(kx)$, med

$k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$

$\phi(x)$ ska vara kontinuerlig i $x = 0$ och $x = L$.

$\phi(x=0) = a \cdot 0 + b \cdot 1 = 0 \Rightarrow \underline{b=0}$

Detta ger: $\phi(x) = a \sin(kx)$
$(0 \leq x \leq L)$

nu: $\phi(x=L) = a \sin(kL) = 0$, så vi måste

ha: $kL = n\pi$, med π ett heltal:

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

Inuti lådan: $\phi_n(x) = a_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$
$(0 \leq x \leq L)$

Vad är energierna? $k = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} \Rightarrow E_n = \frac{k_n^2 \hbar^2}{2m}$

$= \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$

Vi ser att E tar bara diskreta värden!

~~Tillstånden kallas för bundna tillstånd~~!

~~Detta ~~ Vilka värden av n kan man ha?

$n=0$: då $\phi_0(x) = 0$: ingen fysikalisk lösning
$P(x) = 0$ överallt!

$n = -1, -2, \ldots$ samma lösning som

$n = 1, 2, \ldots$, eftersom $\phi_{-n}(x) = -\phi_n(x)$

Samma uppställ ett ~~tek~~ tecken, och fasen av $\phi(x)$
spelar ingen roll! ger samma $P(x)$

Hur bestämmer vi a_n?

Vi måste ha: $P(-\infty < x < \infty) = 1$, så

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\phi_n(x)|^2 \, dx = \int_{0}^{L} |\phi_n(x)|^2 \, dx$$

$$\sin^2 x = \frac{1-\cos(2x)}{2}$$

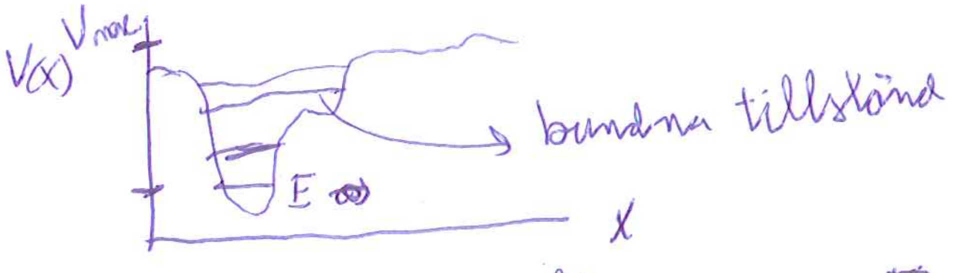
$$= |a_n|^2 \int_{0}^{L} \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx$$

$$= \frac{|a_n|^2}{2} \int_{0}^{L} \left[1 - \cos\left(\frac{2\pi n x}{L}\right)\right] dx$$

$$= \frac{|a_n|^2}{2} \left[x - \underbrace{\frac{L}{2\pi n} \sin\left(\frac{2\pi n x}{L}\right)}_{\text{ger noll}}\right]_{x=0}^{x=L} = \frac{|a_n|^2}{2} L$$

Så: $|a_n|^2 = \frac{2}{L}$. Vi kan välja fasen som vi vill, till ex $a_n = \sqrt{\frac{2}{L}}$

När har vi bundna tillstånd? Om energi är högre än $V(x)$ i ett begränsad område; eller $E < V_{max}$

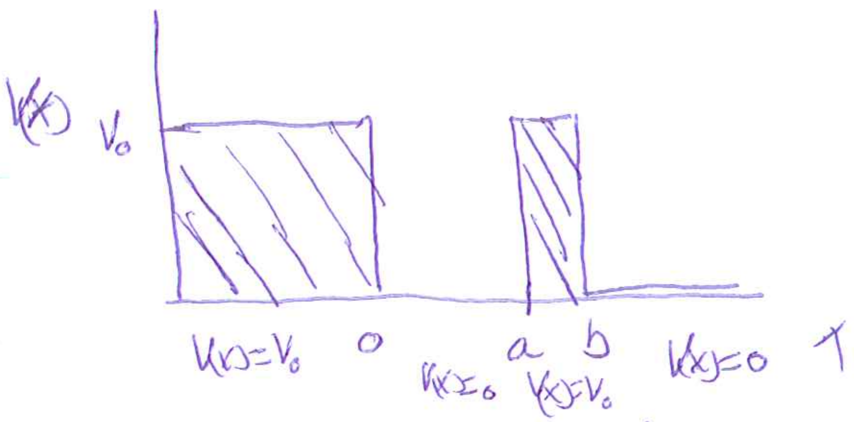


Ex: väte atom!!

Tillstånd med godtycklig energi: $E > V_{max}$

Ex: tunneling:

Område med ändlig potential:



Vi antar att $E < V_0$.

$\phi(x)$: sinus för $0<x<a$ och $x>b$

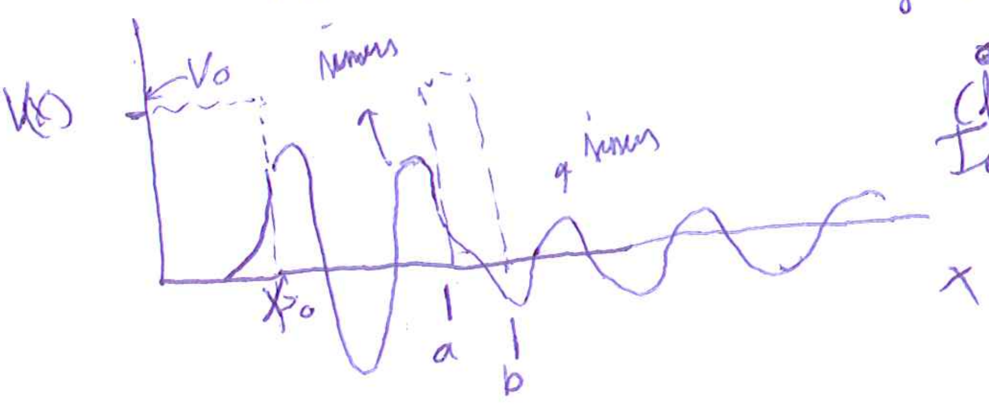
exp för $x<0$, $a<x<b$.

Klassiskt: partikeln kan <u>inte</u> befinna sig i områdena ~~x<~~ $x<0$, och $a<x<b$ eftersom $E<V_0$

KM: det är möjligt! (om $V_0<\infty$)

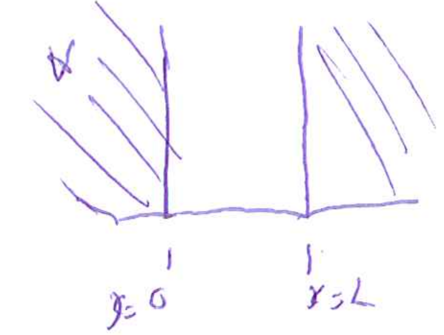
Vågfunktion: $\phi(x)$ kontinuerlig och $\frac{d\phi(x)}{dx}$ kontinuerlig

I fallet ovan:



En partikel som befinner sig i $0<x<a$ kan ta sig genom området $a<x<b$: (klassiskt förbjudet!) <u>Tunneling</u>

Övning med ∞ potential gropp:



Tillstånd:

$$E_n = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2m} \quad : \quad |n\rangle : \text{bestämd energi!}$$

Nu har vi tillståndet $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|3\rangle$

Vad är resultatet av en energi mätning?

$$E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m} \quad \text{med slh} \quad P(E = E_1) = |\langle 1|\psi\rangle|^2$$

$$= \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\langle 1|1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}\underbrace{\langle 1|3\rangle}_{=0}\right|^2$$

$$= \frac{1}{2}$$

$$E_3 = \frac{9\hbar^2\pi^2}{2m} \quad \text{med} \quad P(E = E_3) = \frac{1}{2}.$$

Skissa $\psi(x)$ och $|\psi(x)|^2$

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\langle x|1\rangle - \langle x|3\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_1(x) - \phi_3(x)\right)$$