F-12

Schrödinger ekvationen (SE)

↳ Schrödinger ponerade den i 1926.

Varianter av SE: tidsberoende (TBSE)

tidsoberoende (TOSE)

Vi ska nu titta på TOSE, för partiklar som rör sig i en dimension. Den ger vågfunktionen, som beskriver läget av partikeln.

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

1 mätvärde $\leftrightarrow$ 1 bastillstånd

Ex: $s=1$ partikel: $|+\rangle$; $|0\rangle$; $|-\rangle$ för $S_z = +1, 0, -1$

NH_3 molekylen: $|1\rangle$; $|2\rangle$, eller $|I\rangle$, $|II\rangle$.

Diskreta tillstånd: mätvärden är diskret:

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

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

$P_j(t) = |c_j(t)|^2$ = sannolikhet att systemet är i tillstånd j vid tid t.

Systemet är alltid i något tillstånd:

$\sum_j P_j(t) = \sum_j |c_j(t)|^2 = 1$: $|\psi(t)\rangle$ måste vara normerat!

Upprepning av egenskaper av bastillstånd:
$$\langle i|j\rangle = \delta_{i,j}$$
$$\sum_i |i\rangle\langle i| = \mathbb{1}$$

$$|\psi(t)\rangle = \mathbb{1}|\psi(t)\rangle = \sum_i |i\rangle \underbrace{\langle i|\psi(t)\rangle}_{c_i(t)} = \sum_i c_i(t)|i\rangle$$

Nu tittar vi på läget av en kvantpartikel.
x är kontinuerlig!
Så '∞ många' mätvärden, så vi behöver '∞ många' bastillstånd.
Vi har inte en samling diskreta värden $c_i(t)$, men en funktion som beror på x, t: $c_x(t) = c(x,t)$, men vi brukar skriva: $\psi(x,t)$, och den kallas

skriva: $\psi(x,t)$, och den kallas 'våg funktion'.

Summorna ovan 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 vi skriver relationen mellan tillstånd och vågfunction som:

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

Vad är tolkningen av $\psi(x,t)$?

$c_i(t)$ var en sannolikhets amplitud, $|c_i(t)|^2$ en sannolikhet.

Sannolikhet att hitta partikeln i en intervall $a \le x \le b$ är:

$$P(a \le x \le b, t) = \int_a^b dx \; |\psi(x,t)|^2.$$

Om vi skulle vilja veta sannolikhet att partikeln är *precis* vid $x=a$:

$$P(x=a,t) = \int_a^a dx\, |\psi(x,t)|^2 = 0.$$

Så vi måste prata om 'intervaller'.

Vi kan ta en liten interval Δx rund x':

$$P(x \le x' \le x+\Delta x) = \int_{x'}^{x'+\Delta x} dx\, |\psi(x,t)|^2$$

$$\underset{\Delta x \text{ liten}}{\simeq} |\psi(x',t)|^2 \Delta x$$

Så, $|\psi(x,t)|^2$ är proportionell med SLH att hitta partikeln i en interval rund x,

$|\psi(x,t)|^2$ är en sannolikhets *densitet*.

Vad är generalisering av $\langle i|j\rangle = \delta_{i,j}$?

Det är lite knepigt.

Diskreta fallet:

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

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

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

Vi får rätt svar med $\langle i | j \rangle = \delta_{i,j}$

Kontinuerlig:

$$\psi(x', t) = \langle x' | \psi(t) \rangle = \langle x' | \mathbb{1} | \psi(t) \rangle$$

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

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

Vänster led: beror på hur $\psi(x,t)$ ser ut vid $x = x'$, så vi borde ha att $\langle x' | x \rangle = 0$ om $x = 0$. Om vi skulle sätta $\langle x' | x \rangle = 1$ för $x = x'$, då blir integralen i höger led noll.

Lösning: $\langle x' | x \rangle$ måste vara 'oändlig' för $x = x'$.

Så, $\langle x' | x \rangle$ är ingen vanlig funktion, det är en <u>fördelning</u>!

$\langle x' | x \rangle = \delta(x - x')$; Dirac 'deltafunktion',

som har definition:

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

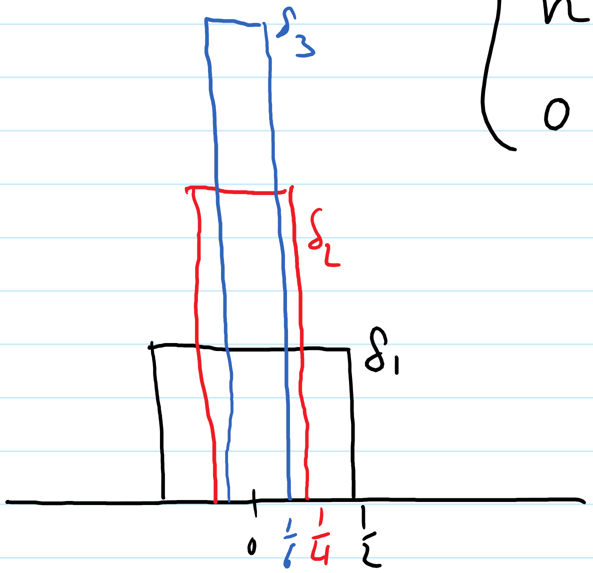
$\int_{-\infty} \ldots f(x) \ldots)$.

Ex: $\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \delta(x-x')\, 1 = 1$

Hur kan man 'bygga' den?

Ex:

$$\delta_n(x) = \begin{cases} 0 & x < -1/2n \\ n & -\frac{1}{2n} < x < \frac{1}{2n} \\ 0 & x > 1/2n \end{cases}$$



$$\lim_{n\to\infty} \delta_n(x) = \delta(x)$$

TBSE diskreta fallet:

$i\hbar \frac{d}{dt} c_i(t) = \sum_j H_{ij}\, c_j(t)$, eller

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

Nu: partikel som rör sig i en dimension:

TBSE:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) = H(x)\, \psi(x,t)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{energi,} \\ \text{eller Hamilton operator.}}}{H(x)} \psi(x,t)$$

$$= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi(x,t)$$

Formen av $H(x)$ går inte att härleda, men består av kinetisk energi $\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)$ och potentiell energi $(V(x))$

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

$\left[F = m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} \text{ ger oss } x(t) \text{ om vi vet } F \right).$]

För att veta hur en system beter sig, måste vi lösa TBSE.

Ofta vill vi veta hur stationära tillstånd ser ut. Då är alla sannolikheter tidsoberoende, och är energi bestämd:

$\psi_E(x,t)$ stationär, då kan vi skriva:

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

Nu använder vi $i\hbar \partial/\partial t\, \psi(x,t) = H(x)\psi(x,t)$,
och får:

$$i\hbar \partial/\partial t \left(e^{-iEt/\hbar} \phi_E(x)\right) = H(x)\, e^{-iEt/\hbar} \phi_E(x)$$

eller

$$i\hbar (-iE/\hbar)\, e^{-iEt/\hbar} \phi_E(x) = H(x)\, e^{-iEt/\hbar} \phi_E(x)$$

Så: $(i\cdot(-i) = 1)$

$$H(x)\,\phi_E(x) = E\,\phi_E(x).$$ Tidsoberoende Schrödinger ekvationen.

Med $H(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$ har vi:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi_E(x) + V(x)\,\phi_E(x) = E\,\phi_E(x)$$

E är energi av systemet.

Om vi har löst TOSE, och fått $\phi_E(x)$,
då får vi en lösning för TBSE via
$\psi_E(x,t) = e^{-iEt/\hbar}\phi_E(x)$

Om vi vet alla möjliga energier, då
har vi en komplett bas: $\psi_E(x,t)$

har vi en komplett bas: $\psi_E(x,t)$.
Så, vi kan skriva ett godtycklig tillstånd som:

$$\psi(x,t) = \sum_{E} c_E \psi_E(x,t) = \sum_E c_E e^{-iEt/\hbar} \phi_E(x)$$

(alla energier)

Nu tittar vi på ett exempel:
$V(x) = V_0$ en konstant.
Vi har TOSE:

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

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

Lösningen beror på tecknet av $V_0 - E$:

Om $V_0 - E > 0$, eller $E < V_0$:
$\phi(x)$ är exponentiell:

$$\phi_E(x) = ae^{kx} + be^{-kx}, \text{ med } k = \sqrt{2m(V_0-E)/\hbar^2}$$

Lösning är exponentiell växande eller

lösning är exponentiellt växande eller
avtagande.
I det här fallet är energi av partikeln
mindre än den potentiella energi.
Så, klassiskt kan en partikel inte
befinna sig i ett område med $V_0 > E$!

Fallet med $V_0 - E < 0$, eller $E > V_0$.

Nu måste vi lösa $\frac{d^2}{dx^2} f(x) = -\alpha f(x)$, $\alpha > 0$.
$f(x) = a \sin(\sqrt{\alpha}\, x) + b \cos(\sqrt{\alpha}\, x)$

Så, vi har nu: $\phi_E(x) = a \sin(kx) + b \cos(kx)$
med $k = \sqrt{2m(E - V_0)/\hbar^2}$.
Så, lösningar till TOSE är vågor i det
här fallet!