F-13

Schrödinger ekvationen (TOSE).

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

med E energi av partikeln.

Lösning med $V(x) = V_0$ konstant:
form beror på tecknet av $V_0 - E$.

För $E < V_0$: exp. lösning:

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

a, b: konstanter.

Om $E > V_0$: periodiska lösningar

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

Potential grop: $V(x)$: olika konstanter för olika områden;

Ex:

$$V(x) = \begin{cases} V_1 & \text{om } x < 0 \\ V_2 & 0 < x < L \\ V_3 & x > L \end{cases}$$

Lösning till TOSE får man genom att

[illegible]

vilka lösningen i de olika områden, som man 'klistra ihop'.

Oändligt djup potential grop:

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

Lösning för område 3, $x > L$:

$E < V_3 = 0$, så $\phi(x) = a e^{kx} + b e^{-kx}$, med

$k = \sqrt{2m(V_3 - E)/\hbar^2} \to \infty$, så $e^{-kx} = 0$ $(x > 0)$

Så: $\phi(x) = a e^{kx}$. Men, $e^{kx} \to \infty$, så

$$P(x > L) = a \int_L^\infty e^{2kx} \, dx \to \infty \text{ om } a > 0.$$

Så, a måste vara noll. (Det kostar ∞ mycket energi att vara i område 3, så det händer inte).

Så $\phi(x) = 0$ för $x > L$

Område 1: $x < 0$. $E < V_1 \leq \infty$, så

$\phi(x) = a e^{kx} + b e^{-kx}$. Nu är $e^{kx} = 0$ $(x < 0)$

och $b e^{-kx} \to \infty$ om $b \neq 0$. Precis som i område 3 måste vi ha $\phi(X) = 0$ för $x < 0$.

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

$\phi(X) = a \sin(kX) + b\cos(kX)$ med

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

$\phi(X)$ måste vara kontinuerlig i

$x = 0$ och $x = L$.

$\phi(X=0) = a \cdot 0 + b \cdot 1 = b$, och $\phi(x=0) = 0$ (område 1),

så: $\underline{b = 0}$.

Nu: $\phi(X=L) = a\sin(kL) = 0$, så vi har:

$kL = n\pi$, med n ett heltal:

$k_n = n\pi / L$.

Inuti gropen: $\phi_n(X) = a_n \sin\left(\frac{n\pi X}{L}\right)$.

Vad blir energierna?

$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$, så $E_n = \frac{k_n^2 \hbar^2}{2m} = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$

Vi ser att de möjliga värden för E är diskreta!

Vilka värden för n kan man ha?

$n=0$: då är $\phi_0(x)=0$. Ingen fysikalisk lösning, normering av vågfunktion:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, |\phi_0(x)|^2 = 0. \quad (\text{eller } P(x)=0\ \forall x)$$

Om man tar en vågfunktion och multiplicerar med en konstant fas, då ändrar man ingen sannolikhet (som beror på $|\phi(x)|^2$).

Så, de motsvarar samma lösning.

DVS: $n=-1,-2,\ldots$ motsvarar $n=1,2,3,\ldots$

Så vi tar bara lösningar med $n=1,2,3,\ldots$

Hur bestämmer vi a_n?

$P(-\infty < X < \infty) = 1$, så

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, |\phi(x)|^2 = \int_0^L dx\, |\phi(x)|^2$$

$$= |a_n|^2 \int_0^L dx\, \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \qquad \sin^2 x = \frac{1-\cos(2x)}{2}$$

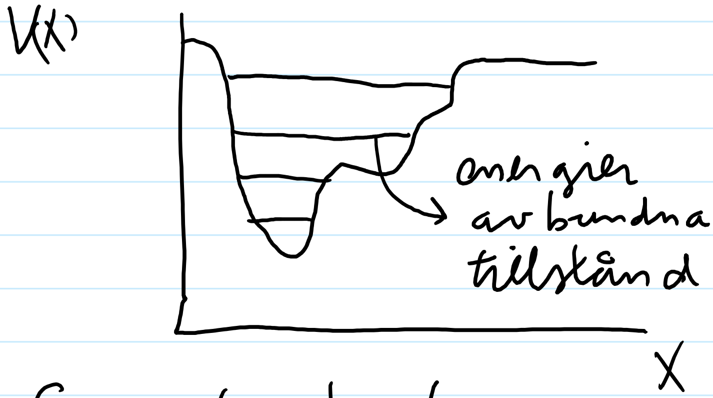
$$= \frac{|a_n|^2}{2} \int_0^L \left[1-\cos\left(\frac{2n\pi x}{L}\right)\right] dx$$

$$= \frac{|a_n|^2}{2} \left[x - \frac{L}{2n\pi} \underbrace{\sin\left(\frac{2n\pi x}{L}\right)}_{\text{ger noll}}\right]_0^L = \frac{|a_n|^2}{2} L$$

Så: $|a_n|^2 = 2/L$. Vi kan välja fasen som vi vill, Så: $|a_n|^2 = 2/L$, Vi kan välja fasen som vi vill, så vi tar $a_n = \sqrt{2/L}$

De här 'diskreta' tillstånd kallas bundna tillstånd. När finns de?

Vi tittar på $V(x)$, till ex. max värde av $V(x)$ kallar vi V_{max}.



Om $E < V_{max}$, då finns det bundna tillstånd

Ex: väte atom!

Man kan också lösningar med godtycklig energi $E > V_{max}$ (utspridda tillstånd).

Ex: tunneling:

Område med ändlig potential:

Vi antar att $E < V_0$

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

$\phi(x)$ exp. för $x < 0$ och $a < x < b$

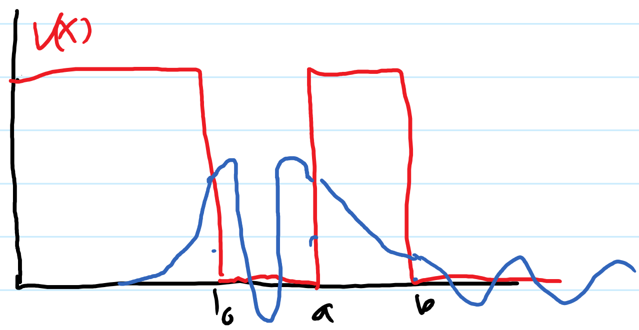
Klassiskt: partikeln kan inte vara i

Klassiskt: partikeln kan inte vara i områden $x<0$ och $a<x<b$, eftersom $E<V_0$

I kvantmekanik är det möjligt!

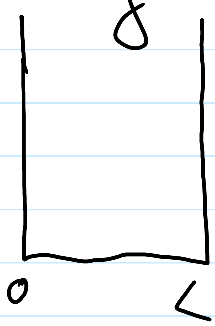
Hur ser vågfunktionen ut i fallet ovan?

måste ha att $\phi(x)$ och $\frac{d\phi(x)}{dx}$ är kontinuerlig.



En partikel som befinner sig i $0<x<a$ kan ha en chans att befinna sig i $x>b$ senare.

Övning med ∞ djup potential grop.



Tillstånd har: $E_n = \frac{n^2\hbar^2\pi^2}{2m}$

$|n\rangle$: bas med bestämd energi.

Nu har vi en partikel i tillstånd:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|3\rangle.$$

Vad kan vi få om vi mäter energi, och med vilken sannolikhet?

[illegible]
med vilken sannolikhet?

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

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

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

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

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

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

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\phi_1(x) - \phi_3(x) \right)$$

Så: