Schrödinger ekvationen.
(1926)
Varianter: tidsberoende, tidsoberoende.
Här tittar vi på den tidsoberoende SE,
för partiklar som rör sig i en dimension.

TOSE: ekvation för vågfuntionen, som
ger 'läget' (positionen) av partikeln.

Ett kvantsystem beskrivs med ett tillstånd
$|\psi(t)\rangle$. Vi kan ge $|\psi(t)\rangle$ i olika baser,
beroende på vad vi vill mäta:
mätvärde $\longleftrightarrow$ bastillstånd
$s=1$ partikel: $|+\rangle_z$; $|0\rangle_z$; $|-\rangle_z$ för
$S_z = -\hbar, 0\hbar, +\hbar$.
NH_3 molekylen: $|1\rangle$; $|2\rangle$ eller $|I\rangle$; $|II\rangle$.

Om vi har ett ändligt antal bastillstånd:

Om vi har ett ändligt antal bastillstånd:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{j=1}^{N} c_j(t)\,|j\rangle .$$

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

Normering: $\sum_j P_j(t) = \sum_j |c_j(t)|^2 = 1$

Egenskaper av bastillstånd:

$$\langle i|j\rangle = \delta_{i,j}$$

$$\sum_j |j\rangle\langle j| = \mathbb{1}$$

$$|\psi(t)\rangle = \mathbb{1}\,|\psi(t)\rangle = \sum_j |j\rangle \underbrace{\langle j|\psi(t)\rangle}_{c_j(t)}$$

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

Om vi mäter positionen av en partikel, kan den vara kontinuerlig: x, inte

[illegible]
bara ett ändligt antal värden.
Så, vi har "∞ många" möjliga mätvärden, och behöver "∞ många" bastillstånd

Istället av $c_j(t)$, med j diskret, har vi $c_x(t)$, med x kontinuerlig.
Men, vi brukar skriva:
$\psi(x,t)$ för $c_x(t)$, och $\psi(x,t)$ kallas <u>vågfunktionen</u>.

Relation med tillstånd $|\psi(t)\rangle$ (abstrakt!):

$\mathbb{1} = \sum_j |j\rangle\langle j|$ blir:

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

summan blir en integral!

Då skriver vi:

$$|\psi(t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, |x\rangle \underbrace{\langle x|\psi(t)\rangle}_{\psi(x,t)}, \text{ eller}$$

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

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

Viktig: tolkning av $\psi(x,t)$!

$c_j(t)$: sannolikhets <u>amplitud</u>

$|c_j(t)|^2$: sannolikhet.

Nu har vi att sannolikhet att en partikel är i en interval $[a,b]$ är:

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

Vi måste pråta om intervallen, eftersom $\int_a^a dx \; f(x) = 0$, så sannolikhet att hitta en partikel i <u>precis</u> punkten $x=a$ är noll.

Om vi tar en liten interval: $[x, x+\delta x]$, med δx liten:

$$P([x, x+\delta x],t) = \int_x^{x+\delta x} dx' \;\; |\psi(x',t)|^2$$

$$= |\psi(x,t)|^2 \, \delta x, \text{ eftersom}$$

$\psi(x,t)$ är ungefär konstand på intervallen $[x, x+\delta x]$.

Så vi ser att $|\psi(x,t)|^2$ = ... sannolikhet

$[x, x+dx]$.

Så, vi ser att $|\psi(x,t)|^2$ är en sannolikhet per längd.

Nu kan vi titta på Schrödinger ekvationen.

TBSE, diskreta fallet:

$i\hbar \, d/dt \; c_j(t) = \sum_k H_{jk} \, c_k(t)$, eller

$i\hbar \, d/dt \, |\psi(t)\rangle = H \, |\psi(t)\rangle$.

För en partikel som rör sig i en dimension:

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

energi, eller Hamilton operator.

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

Formen av $H(x)$ kan inte härledas, men den består av kinetisk energi $\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \partial^2/\partial x^2\right)$ och potentiell energi $(V(x))$.

Motivation:

Motivation:

$E_{kin} = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{p^2}{2m}$.

Vi tittar på en våg igen: $\psi \sim e^{i(kx-\omega t)}$.

Då $\partial/\partial x\, \psi = ik\, e^{i(kx-\omega t)} = ik\psi$.

Med $p = k\hbar$ får vi: $\partial/\partial x\, \psi = {ip}/{\hbar}\, \psi$, eller

$p\psi = -i\hbar\, \partial/\partial x\, \psi$.

Så, vi associerar p med 'operatorn': $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$.

För $p^2/2m$ får vi $(-i\hbar)^2/2m \frac{\partial^2}{\partial x^2} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$.

Om vi kan lösa TBSE för en given potential $V(x)$, (om vi vet $H(x)$), då har vi $\psi(x,t)$, och därmed sannolikhet att hitta en partikel i ett visst intervall.

Ofta vill vi veta hur stationära tillstånd (med bestämd energi) ser ut.

För stationära tillstånd har vi:

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

Med $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_E(t) = H(x)\, \psi_E(x,t)$ får vi en

Med $i\hbar \partial_t \psi_E(x,t) = H(x)\,\psi_E(x,t)$ får vi en ekvation för $\phi_E(x)$:

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

$$\parallel$$

$$i\hbar\,(-iE/\hbar)\, e^{-iEt/\hbar}\phi_E(x)\text{, så vi har:}$$

$$\underline{H(x)\,\phi_E(x) = E\,\phi_E(x)} \qquad (\text{OBS: } -i \cdot i = +1)$$

Det är den <u>tidsoberoende</u> Schrödinger ekvationen.

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

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

med E energin av partikeln.

Om vi har löst TOSE, och fått E, och $\phi_E(x)$, då har vi också en lösning för TBSE:

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

Om vi vet alla möjliga energier, då har vi en komplett bas: $\psi_E(x,t)$, och då kan vi skriva en godtycklig tillstånd som

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

Låt oss titta på ett exempel, nämligen $V(x) = V_0$ en konstant.

TOSE blir:

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

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

Lösningen beror på tecknet av $V_0 - E$. Om $V_0 - E > 0$, eller $E < V_0$:

Då är $\phi(x)$ exponentiell:

När är q(x) exponentiell:

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

Lösningen är exponentiellt växande eller avtagande.

Vi har att totala energin E är mindre än den potentiella energin. Klassiskt kan detta inte hända: $E = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{kin. energi}}}{T} + V \geq V$, eftersom $T \geq 0$.

Fallet med $V_0 - E < 0$, $E > V_0$:

Vi måste lösa: $\frac{d^2}{dx^2} f(x) = -\alpha f(x)$ med $\alpha > 0$.

Då har vi: $f(x) = a \sin(\sqrt{\alpha}\, x) + b \cos(\sqrt{\alpha}\, x)$.

I det här fallet får vi:

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

Så, lösningen till TOSE är vågor!