Tidsberoende Schrödinger ekvationen:

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

Viktig fall: stationära tillstånd med bestämd energi. Tidsberoende är genom en gemensam fas:

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

Sannolikheter är då tidsoberoende!

Ekvationen för $\phi_E(x)$ blir:

$$H(x)\, \phi_E(x) = E\, \phi_E(x).$$

För att lösa problemet helt, måste vi

För att lösa problemet helt, måste vi hitta alla möjliga energier E, och deras motsvarande vågfunktioner. (OBS: om vi väljer en energi E, finns det inte alltid en lösning!).

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 har gjort det, kan ett allmänt tillstånd skrivas som

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

(alla möjliga energier)

Det är en lösning till tidsberoende SE!

Hamiltonianen för en partikel i en dimension:

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

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

kin. del ... potentiell del.

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:

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

Lösningen är exponentiellt växande eller avtagande.

Vi har att totala energin E är mindre än den potentiella energin. Klassiskt kan detta den potentiella energin. Klassiskt kan detta inte hända: $E = T + V \geq V$, eftersom $T \geq 0$.

T: kin. energi

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!

Potential grop

$V(x)$: olika konstanter för olika områden.

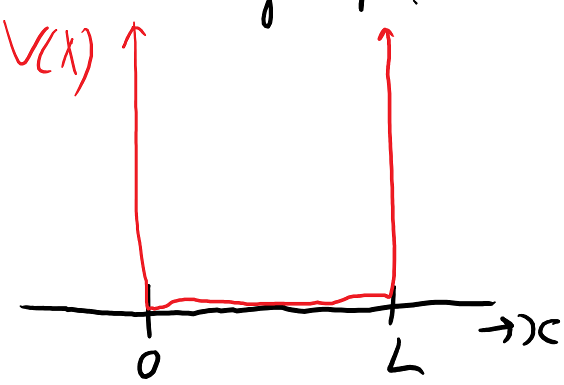
Ex:

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

För att lösa TOSE i det här fallet löser man det först i de tre olika områden. Sedan 'klistrar man ihop' lösningarna: $\phi(x)$ måste vara kontinuerlig (för oändlig potential grop, i bland d fler krav).

Oändligt djup potential grop:

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



Lösning i område 3, $x > L$:

$E < V_3 = \infty$, så vi har

$\phi(x) = a e^{kx} + b e^{-kx}$, med

$\varphi(x) = ae + be$, med
$k = \sqrt{2m(V_3 - E)/\hbar^2} \to \infty$, så vi har

$e^{-kx} \to 0$, eftersom $x > 0$

Då har vi: $\phi(x) = ae^{kx}$, men $e^{kx} \to \infty$,
och då har vi:
$P(x > L) = a \int_L^\infty e^{2kx}\, dx$, och det blir
∞ om $a > 0$.
Så, vi har att $a = 0$, annars är vågfunktionen
inte normerbar.
* $\phi(x) = 0$ om $x > L$.

Område 1: $E < V_1 = \infty$, så
$\phi(x) = ae^{kx} + be^{-kx}$.
Nu är e^{kx} noll, eftersom $x < 0$, och
$be^{-kx} \to \infty$ om $b > 0$. Så, vi måste ha
att $b = 0$, som i område 3.
* $\phi(x) = 0$ om $x < 0$.

Område 2: $E > V_2 = 0$, 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 $x=L$.

Titta först på $x=0$:

$\phi(x=0) = a \cdot 0 + b \cdot 1 = b$ (område 2) $\quad \phi(x=0) = 0$ (område 1)

Vi får att $b=0$.

Från $x=L$ har vi:

$\phi(x=L) = a \sin(kL)$ (område 2) $\quad \phi(x=L) = 0$ (område 3)

Så vi har: $a \sin(kL) = 0$.

Det gäller om $kL = n\pi$, med n heltal.

Så de möjliga värden för k är:

$$k_n = n\pi/L.$$

Inuti gropen ges vågfunktionerna av

$$\phi_n(x) = a_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

Vad är energierna för de här vågfunktioner?

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

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

Så, de möjliga värden för energin är diskreta!

Vilka värden för n kan man ha?

$n=0$: då är $\phi_0(x) = 0$.

Det är ingen fysikalisk lösning, det går inte att normera $\phi_0(x)$: ∞

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

Om man tar en vågfunktion, och multiplicerar den med en fas, då ändras sannolikheterna inte (beror på $|\phi(x)|^2$).
Så, till ex $\phi(x)$ och $-\phi(x)$ motsvarar samma tillstånd.
I det här fallet har vi att lösningarna med $n = -1, -2, -3, \ldots$ motsvarar de med

$n = +1, +2, +3, \ldots$

Värden på n: $n = +1, +2, +3, \ldots$

Hur bestämmer vi a_n?

$P(-\infty < x < \infty) = 1$, eller

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

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

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

$$= \frac{|a_n|^2}{2} \left[x - \frac{L}{2\pi n} \underbrace{\sin\left(\frac{2\pi n x}{L}\right)}_{\text{ger noll}}\right]_0^L = \frac{|a_n|^2}{2} L = 1$$

Så vi får att $|a_n|^2 = 2/L$.

Vi får välja fasen hur vi vill, så vi kan ta

$$a_n = \sqrt{2/L}.$$

Så, för en oändlig potential grop $(0 < x < L)$ har vi

$$\phi_n(x) = \sqrt{2/L} \sin(n\pi x/L), \text{ med energi}$$

$$E_n = \frac{1}{2m}\left(\frac{n\pi\hbar}{L}\right)^2$$