

Forelesning 3

February 11, 2022

1 Den tidsuavhengige Schrödingerligningen

Vi skal nå i dette kapitellet massere S.L. litt slik at vi den blir enklere å jobbe med framover. Vi starter med å skille tids- og posisjons-avhengigeten fra hverandre.

1.1 Separasjon av variable

Vi har S.L. som

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \quad (1)$$

vi har allerede løst ligningen for tilfellet med $V(x)$, altså for en fri partikk. Vi skal i det følgende løse S.L. for ikke trivuelle potensialer. Når vi antar (som vi nesten alltid gjør) at potensialet er tidsuavhengige ($V(x) = 0$) så kan vi bruke separasjon av variabler til å løse ligningen. Dette er noe vi ofte gjør når vi kan skrive ligningen slik at all posisjons-avhengigeten til operatorene er på venstre og all tids-avhengigeten på høyre side av likhetstegetn.

Det gjøres ved å anta følgende Ansatz

$$\Psi(x, t) = \psi(x)f(t) \quad (2)$$

dvs. vi antar at vi kan dekomponere bølgefunksjonen i en del som varierer som en funksjon av posisjon og en del som funksjon av tid. Vi setter inn i S.L.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [\psi(x)f(t)] + V(x)\psi(x)f(t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [\psi(x)f(t)] \quad (3)$$

$$\Rightarrow f(t) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + V(x)\psi(x) \right] = \psi(x)i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f(t) \quad (4)$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\psi(x)} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + V(x)\psi(x) \right] = \frac{i\hbar}{f(t)} \frac{\partial}{\partial t} f(t) \quad (5)$$

(6)

Vi har nå fått ligningen på en form slik at tids og posisjons-avhengigeten er på hver sin side av likhetstegetn. Den eneste måten at denne ligningen kan være oppfylt på helt generelt er om begge sidene er lik en konstant. Vi kaller denne konstant E siden vi skal assosiere den med partikkelen energi, vi ser allerede at den må ha samme enhet som $V(x)$ som vi vet har enhet energi. Vi har

$$\frac{1}{\psi(x)} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + V(x)\psi(x) \right] = E \quad (7)$$

og

$$\frac{i\hbar}{f(t)} \frac{\partial}{\partial t} f(t) = E \quad (8)$$

Den tidsavhengige ligningen er her veldig grei å løse og trengs bare å løse en gang for alle $V(x)$. Vi har at

$$f(t) = f(0)e^{-i\frac{Et}{\hbar}} \quad (9)$$

Vi absorberer $f(0)$ inn i $\psi(x)$, som vi normerer etterhvert uansett, og vi har at den tidsavhengige løsningen er

$$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-i\frac{Et}{\hbar}} \quad (10)$$

Så vi har nå redusert problemet til å løse en ordinær differensialligning, hhilket er mye lettere enn partielle differensialligninger. I tillegg har vi at

$$|\Psi(x, t)|^2 = |\psi(x)|^2 \quad (11)$$

altså at sannsynlighetstettheten er tidsuavhengig hvis vi vet at systemet vårt er i tilstanden gitt av $\psi(x)$, og derfor kaller vi $\psi(x)$ stationære tilstander.

1.2 Partikkelen i boks

Vi skal nå beregne de stasjonære tilstandene for et spesifikt system, nemlig en såkalt partikkelen i boks, som er beskrevet av det følgende potensialet

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x \in (0, L) \\ \infty, & x \notin (0, L) \end{cases} \quad (12)$$

Vi kan forholdsvis enkelt løse S.L. for partikkelen inne i boksen, siden den her er

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) = E\psi(x) \quad x \in (0, L) \quad (13)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) = -k^2 \psi(x) \quad (14)$$

hvor vi introduserer konstanten $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ og vi ser nå at bølgefunksjonen er like seg selv modulus en negativ konstant når den deriveres mhp. x to ganger, som vi vet er en egenskap cosinus og sinus kurver har.

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad x \in (0, L) \quad (15)$$

$$(16)$$

Her er A og B vilkårlige konstanter. Utenfor boksen så må vi ha at $\psi(x) = 0$, siden potensialet er uendelig her. Videre så har vi at bølgefunksjonen må være kontinuerlig overalt siden T.U.S.L. er en andre-ordens ordinær differensialligning, fysikalsk betyr dette at sannsynligheten for å finne partikkelen ikke kan ha noen diskontinuiteter. Spesifikt har vi da at

$$\psi(0) = A \sin(0) + B \cos(0) = B = 0 \quad (17)$$

og

$$\psi(L) = A \sin(kL) = 0 \quad (18)$$

Vi utelukker den trivuelle løsningene med $A = 0$ siden den representerer situasjonen med ingen partikkelen i boksen. De andre mulige løsningene finner vi når sinus-funksjonen er 0, hvilket er tilfellet når

$$n\pi = kL \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (19)$$

Dette gir oss det diskrete settet av tillatte verdier for k som

$$k_n = \frac{n\pi}{L} \quad (20)$$

Vi husker nå hvordan vi definerte variabelen k og bruker det til å finne energien, som da også er kvantisert

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2L^2 m} \quad (21)$$

Her har vi altså kvantiserte energi-nivåer. Videre har vi bølgefunksjonen

$$\psi(x) = A_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad (22)$$

Vi kan bestemme konstanten A_n fra normaliseringskravet som

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx \quad (23)$$

$$= \int_0^L |A_n|^2 \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx \quad (24)$$

$$= |A_n|^2 \int_0^L \left(1 - \cos\left(\frac{2n\pi x}{L}\right)\right) dx \quad (25)$$

$$= |A_n|^2 \left[x - \frac{L}{2n\pi} \sin\left(\frac{2n\pi x}{L}\right)\right]_0^L dx \quad (26)$$

$$= |A_n|^2 \frac{L}{2} \quad (27)$$

Vi velger nå fasen til amplituden til å være real, hvilket gir oss konstanten som

$$A_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \quad (28)$$

For fullstendighetens skyld har vi nå hele den tidsuavhengige bølgefunksjonen som

$$\psi(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) & x \in (0, L) \\ 0 & x \notin (0, L) \end{cases} \quad (29)$$

Dette er i sterkt kontrast til det vi forventer av en klassisk partikkelen i boks, siden klassisk kan partikkelen ha alle mulige energier mens vi her har et diskret sett av mulige energinivåer. Denne kvantiseringen kommer fra randbetingelsene, for den fullstendige frie partikkelen hadde vi ikke kvantiserte energinivåer.

I tillegg har vi at det ikke finnes noe $E = 0$ løsning. Det kommer av at selv grunntilstanden oscillerer og beveger på seg. Dette kan vi også se utifra Heisenberg's uskarphetsrelasjon. Hvis partikkelen hadde ingen energi hadde den ikke vært i bevegelse, altså vært helt i ro. Da ville bevegelsesmengden ha vært 0 og dermed også $\Delta p = 0$. Men det hadde da betydd at vi måtte ha hatt $\Delta x = \infty$ og det er ikke mulig siden vi vet med sikkerhet at partikkelen er inne i boksen. Det er da også slik at for en mindre boks vil Δx være mindre og Δp derfor kunne være større, hvilket også tillater at energien er større.

1.2.1 Tidsavhengighet

Vi ser at om en partikkelen er i en av de stasjonære tilstandene så er sannsynlighetstettheten uavhengig av tid, og partikkelen beveger seg ikke. Partikkelen har ingen bestemt posisjon men sannsynligheten for å finne partikkelen på forskjellige steder er konstant i tid. Dette har vi siden

$$\Psi_n(x, t) = \psi_n e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} \Rightarrow |\Psi_n(x, t)|^2 = |\psi_n(x)|^2 \quad (30)$$

Hvis vi derimot ser for oss at partikkelen er i superposisjon av stasjonære tilstander, e.g.

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_1(x) e^{-i \frac{E_1 t}{\hbar}} + \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_2(x) e^{-i \frac{E_2 t}{\hbar}} \quad (31)$$

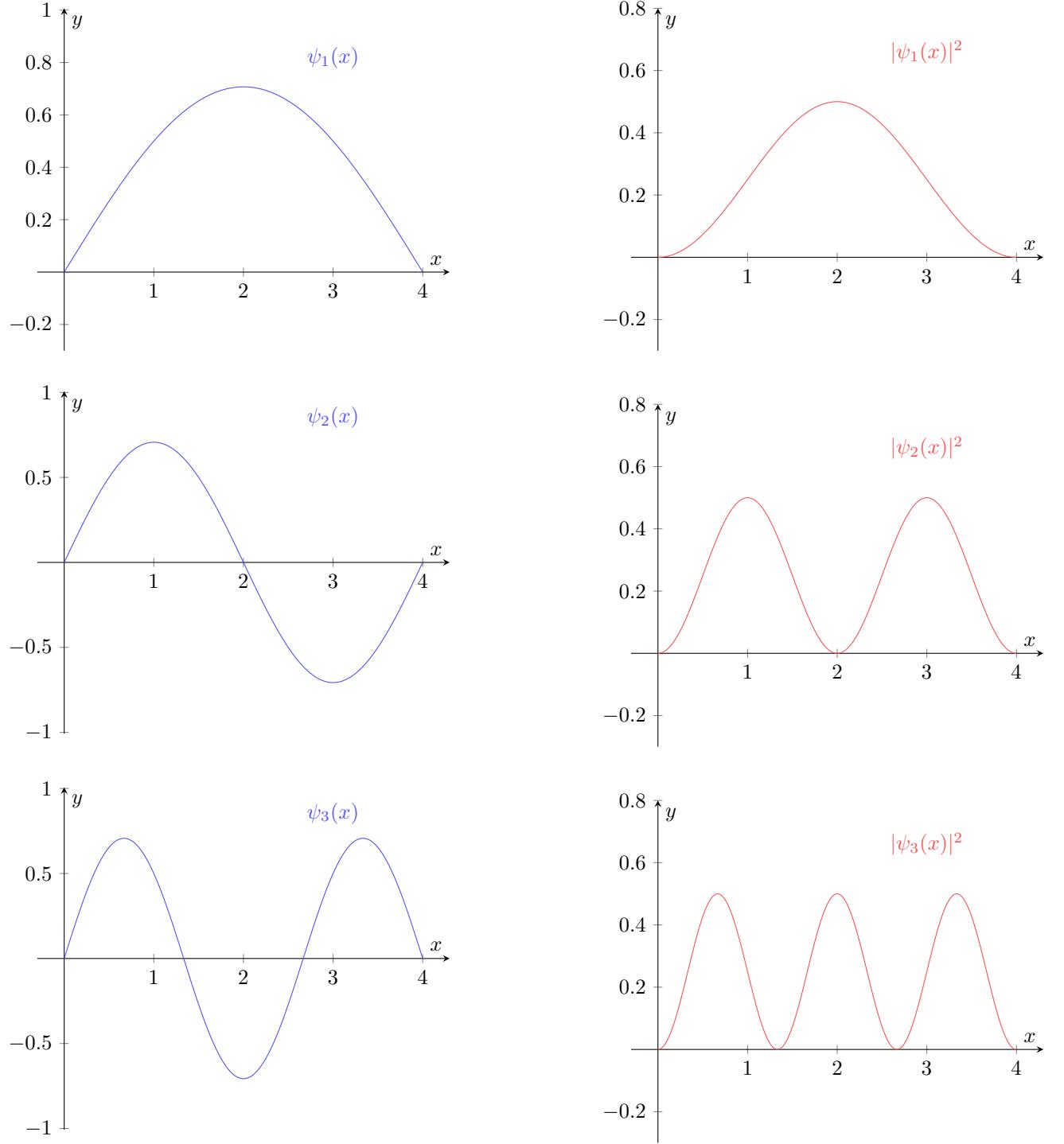


Figure 1: De tre første stasjonære tilstandene til partikkelen i boks.

Da har vi

$$|\Psi(x, t)|^2 = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\psi_1(x)e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} + \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_2(x)e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}} \right) \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\psi_1^*(x)e^{i\frac{E_1 t}{\hbar}} + \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_2^*(x)e^{i\frac{E_2 t}{\hbar}} \right) \quad (32)$$

$$= \frac{1}{2}|\psi_1(x)|^2 + \frac{1}{2}|\psi_2(x)|^2 + \frac{1}{2}\psi_1(x)\psi_2^*(x)e^{i\frac{(E_2-E_1)t}{\hbar}} + \frac{1}{2}\psi_1^*(x)\psi_2(x)e^{-i\frac{(E_2-E_1)t}{\hbar}} \quad (33)$$

$$= \frac{1}{2}|\psi_1(x)|^2 + \frac{1}{2}|\psi_2(x)|^2 + \psi_1(x)\psi_2(x)\cos\left(\frac{(E_2-E_1)t}{\hbar}\right) \quad (34)$$

hvor vi brukte at $\psi_n(x)$ er real. Vi ser nå at for en partikkell som er i en blanding av stasjonære tilstander så endrer sannsynlighetstettheten i tid, og partikkelen sannsynlighet oscillerer fram å tilbake. Dette kommer av kryss-termene mellom ψ_1 -leddet og ψ_2 -leddet, dette leder til en slags interferens mellom de forskjellige stasjonære bøgefunkjonene.

1.3 Statistisk tolkning av kvantemekanikk

Vi ser nå for oss en enda mer generell bølgefunksjon som en superposisjon av stasjonære tilstander som

$$\Psi(x, t) \sum_{n=1}^{\infty} c_n(t) \psi_n(x) \quad (35)$$

hvor vi har $c_n(t) = c_n e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t}$.

Vi skal nå se at settet av alle stasjonære tilstander $\{\psi_n(x)\}$ utgjør et **ortonormalt sett**, dvs at de er ortogonale og normalisert. Dette er analogt med enhetsvektorene $\hat{\mathbf{i}}_x$, $\hat{\mathbf{i}}_y$ og $\hat{\mathbf{i}}_z$ som vi kjenner fra \mathbb{R}^3 , som vi vet er ortonormale mhp. et indreprodukt som vi kjenner som prikk-produktet. Dvs. vi har

$$\hat{\mathbf{i}}_i \cdot \hat{\mathbf{i}}_j = \delta_{i,j} \quad \forall i, j \in [x, y, z] \quad (36)$$

hvor vi har Kroenecker-deltaet som

$$\delta_{n,m} = \begin{cases} 1 & n = m \\ 0 & n \neq m \end{cases} \quad (37)$$

Her i \mathbb{R}^3 tolker vi ortogonaliteten til enhetsvektorene at de står vinkelrett på hverandre i rommet.

Tilsvarende har vi for de stasjonære tilstandene

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \psi_m(x) dx = \delta_{n,m} \quad \forall n, m \in \mathbb{N}_+ \quad (38)$$

Her har vi at indreprodukt ikke er prikk-produktet, men integralet over hele domenet av den ene bølgefunktjonen multiplisert med den kompleks konjugerte av den andre. I tillegg er de stasjonære tilstandene ψ_n **komplette**, dvs alle mulige tilstander (bølgefunktjoner) kan uttrykkes som en linearkombinasjon av de. Altså kan alle mulige bølgefunktjoner skrives som

$$\psi = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n \quad (39)$$

Dette er i analogi med enhetsvektorene $\hat{\mathbf{i}}_x$, $\hat{\mathbf{i}}_y$ og $\hat{\mathbf{i}}_z$, hvor vi vet at enhver vektor i \mathbb{R}^3 kan skrives på formen

$$\mathbf{v} = v_x \hat{\mathbf{i}}_x + v_y \hat{\mathbf{i}}_y + v_z \hat{\mathbf{i}}_z \quad (40)$$

hvor vi også kan finne vekten/komponenten til en av enhetsvektorene som

$$v_i = \hat{\mathbf{i}}_i \cdot \mathbf{v} \quad \forall i, j \in [x, y, z] \quad (41)$$

altså ved å ta indreprodukt av vektoren med den vektoren i linearkombinasjon som vi vil finne vekten til. Dette fungerer på samme måte for de stasjonære tilstandene, men vi har et annet indre produkt. Vi må her multiplisere bølgefunktjonen med den kompleks konjugerte av den stasjonære tilstanden som vi vil finne vekten til og integrere som

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \sum_{m=1}^{\infty} c_m \psi_m dx \quad (42)$$

$$= \sum_{m=1}^{\infty} c_m \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi_m dx \quad (43)$$

$$= \sum_{m=1}^{\infty} c_m \delta_{m,n} \quad (44)$$

$$= c_n \quad (45)$$

Koeffisientene c_n spiller en veldig viktig rolle i kvantemekanikk, og vi har at for normaliserte bølgefunksjoner

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx \quad (46)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} c_m^* \psi_m^* \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n dx \quad (47)$$

$$= \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} c_m^* c_n \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n dx \quad (48)$$

$$= \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} c_m^* c_n \delta_{m,n} \quad (49)$$

$$= \sum_{m=1}^{\infty} |c_m|^2 \quad (50)$$

hvor viser at kvadratet av koeffisientene summerer til en. Dette lokker på en tolkning av koeffisientene som sannsynligheter

$$|c_n|^2 = P_n \quad (51)$$

hvor de gir sannsynligheten for å måle at en partikkel har energien E_n som er assosiert med den stasjonære tilstanden ψ_n . Vi har da at de eneste tillatte verdiene vi kan måle for energien er $\{E_n\}$ og sannsynligheten for å måle E_n er gitt som $|c_n|^2$, hvilket gir forventningsverdien som

$$\langle E \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 E_n \quad (52)$$