Odde funksjoner

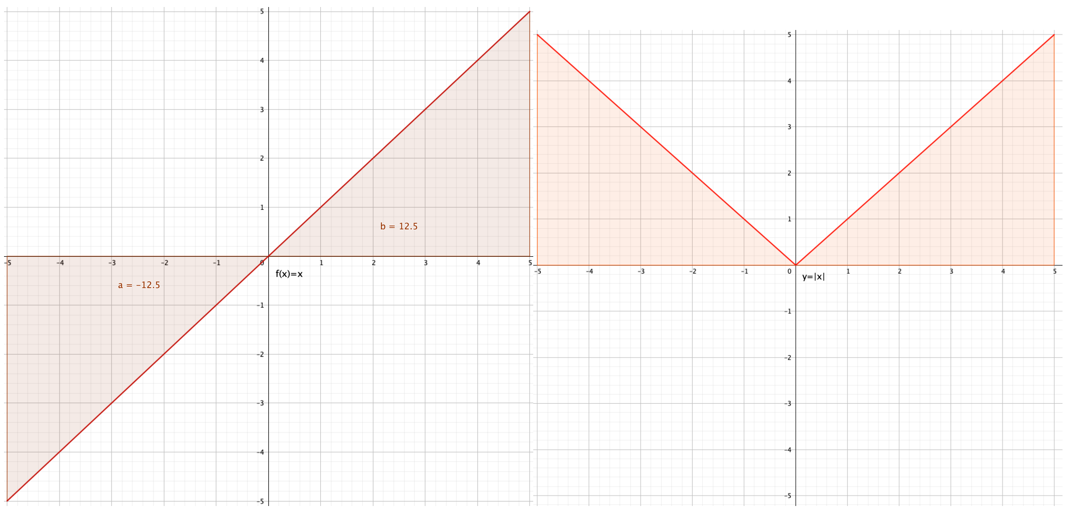
Odde funksjoner er ikke symmetriske om y-aksen. For eksempel funksjonen $y = x$, som er en rett linje om origo. Da vil $f(x) = -f(-x)$. Integraler fra $(-L, L)$ vil dermed være lik null.

$$\int_{-L}^{L} f(x)\,dx = 0 \tag{1}$$

Jevne funksjoner

Jevne funksjoner er symmetriske om y-aksen. For eksempel funksjonen $y = |x|$, som er en V om origo. Da vil $f(x) = f(-x)$. Integraler fra $(-L, L)$ vil dermed være lik to ganger integralet fra $(0, L)$.

$$\int_{-L}^{L} f(x)\,dx = 2\int_{0}^{L} f(x)\,dx \tag{2}$$



(a) Odd (b) Jevn

Sammensatte funksjoner

$$\text{jevn} * \text{jevn} = \text{jevn} \quad \text{odd} * \text{odd} = \text{odd} \quad \text{odd} * \text{jevn} = \text{odd}$$

$$cos(x) * x^2 \text{ er jevn} \quad sin(x) * x \text{ er jevn} \quad cos(x) * sin(x) \text{ er odd}$$

$$\text{jevn} + \text{jevn} = \text{jevn} \quad \text{odd} + \text{odd} = \text{odd}$$

$$cos(x) + x^2 \text{ er jevn} \quad sin(x) + x \text{ er odd}$$

Integration by parts

$$\int u'v\,dx = uv - \int uv'\,dx \tag{3}$$

eller

$$\int uv\,dx = u\int v\,dx - \int u'(\int v\,dx)\,dx \tag{4}$$

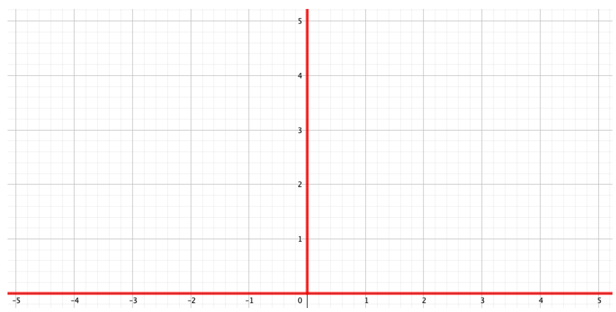
Gaussian integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta x^2}\, dx = \sqrt{\frac{\pi}{\beta}} \tag{5}$$

Dirac-delta distribusjon

$$\delta(x) = \begin{cases} \infty, & x = 0 \\ 0, & ellers \end{cases} \tag{6}$$

Hvor vi ser på $\delta(x)$ som en uendelig tynn Gauss-distribusjon.



$$\delta(x) = \lim_{\beta \to \infty} \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} e^{-\beta x^2} \tag{7}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)\, dx = 1 \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x)\, dx = f(0) \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} f(\chi)\delta(x-\chi)\, dx = f(\chi) \tag{8}$$

Man kan tenke på Dirac-delta som $(x-\chi)$, hvor for $x = \chi$ man får ut $= 1$ i integralet. Dette tilsier at $f(\chi)\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-\chi)dx = f(\chi) * 1$.
$\delta(x) = \delta(-x)$. Det er altså en jevn funksjon. $\delta(ax) = \frac{\delta(x)}{|a|}$

Dirac-delta funksjon

"Most generally, it is used to normalize wave functions which cannot be normalized to unity"
Eksempel:
Antar at V(x) er null for alle verdier utenom for x = 0. Da kan potensialet uttrykkes vha. Dirac-delta:

$$\frac{2m}{\hbar} V(x) = -\frac{\alpha}{a}\delta(x) \tag{9}$$

I stedet for å se på de "originale" grensene, ser vi nå på $x < 0$ og $x > 0$. Siden Schrödingers likning er en andre ordens diff.likn. og vi vil ha den kontinuerlig, integrerer vi fra begge sider til 0, og ser at den ikke er kontinuerlig:

$$\int_{0^-}^{0^+} \frac{d^2\psi}{dx^2} dx = (\frac{d\ \psi}{dx})_{0^+} - (\frac{d\ \psi}{dx})_{0^-} = \frac{2m}{\hbar^2}\int_{0^-}^{0^+} [V(x) - E]\psi(x) dx \tag{10}$$

Siden bredden på integralet er uendelig smal, og bølgefunksjonen er avgrenset (finite), setter vi:

$$\frac{2mE}{\hbar^2}\int_{0^-}^{0^+} \psi(x) dx = 0 \tag{11}$$

og derfor

$$\frac{2m}{\hbar^2}\int_{0^-}^{0^+} V(x)\psi(x) dx = -\frac{\alpha}{a}\int_{0^-}^{0^+} \delta(x)\psi(x) dx = -\frac{\alpha}{a}\psi(0) \tag{12}$$

som gir

$$(\frac{d\ \psi}{dx})_{0^+} - (\frac{d\ \psi}{dx})_{0^-} = -\frac{\alpha}{a}\psi(0) \tag{13}$$

Den første-deriverte er ikke kontinuerlig ved $x = 0$.
For $x \neq 0$, blir Schrödingers likn.

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi \tag{14}$$

Og for $E < 0$ blir $\psi = Ae^{-\kappa x} + Be^{\kappa x}$, hvor $\kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$.
For en avgrenset brønn med betingelsene at den er normaliserbar og kont. i $x = 0$ får man med tilhørende graf

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\kappa x}, & x \leq 0 \\ Ae^{-\kappa x}, & x \geq 0 \end{cases} \tag{15}$$

og ser at den deriverte tydelig ikke er kont. ved $x = 0$. Ved å løse for energien får man

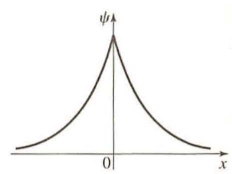


Figure 4.15 The wave function (4.85) for a particle bound in a Dirac delta function potential energy well.

$$E = -\frac{\hbar^2\alpha^2}{8ma^2} \tag{16}$$

Operatorer

Hermitiske operatorer

Hermitiske operatorer er observable. Det vil si at eigenverdien til Hermitiske operatorer er reelle tall, og videre at operatoren er lik sin egen kompleks-konjugat.

$$\hat{H}\psi = \mathbb{R}\psi \tag{17}$$

$$\hat{H}^*\hat{H} = \hat{H}\hat{H} = \hat{H}^2 \tag{18}$$

For matriser:

$$\hat{H} = (\hat{H}^*)^T = \hat{H}^\dagger \tag{19}$$

Hamiltonian operator

Hamiltonian operator opererer på en funksjon og gir den totale energien (eigenvalue) til funksjonen (eigen"vektor").

$$\hat{H}\psi = E\psi \tag{20}$$

Hvor E er total energi til systemet/funksjonen ψ.