

Ehrenfests teorem

(46)

[PCH 4.4; DJG 1.5, 4.1; IØ 4.4]

Uttrykker at kvantemekaniske middelværdier oppfylder klassiske bevægelsesligninger:

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{\langle p \rangle}{m}, \quad \frac{d}{dt} \langle p \rangle = \left\langle -\frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle \quad (1D)$$
$$\frac{d}{dt} \langle \vec{r} \rangle = \frac{\langle \vec{p} \rangle}{m}, \quad \frac{d}{dt} \langle \vec{p} \rangle = \langle -\nabla V \rangle \quad (3D)$$

Bevis (1D): $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + V(x,t)$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, x] \rangle = \frac{i}{2m\hbar} \langle [\hat{p}^2, x] \rangle \quad ([V, x] = 0)$$

$$\begin{aligned} [\hat{p}^2, x] &= \hat{p} \hat{p} x - x \hat{p} \hat{p} \\ &= \hat{p} (\hat{p} x) - (\hat{p} x) \hat{p} + (\hat{p} x) \hat{p} - (x \hat{p}) \hat{p} \\ &= \hat{p} (\hat{p} x - x \hat{p}) + (\hat{p} x - x \hat{p}) \hat{p} \\ &= \hat{p} (-i\hbar) + (-i\hbar) \hat{p} \\ &= -2i\hbar \hat{p} \end{aligned}$$

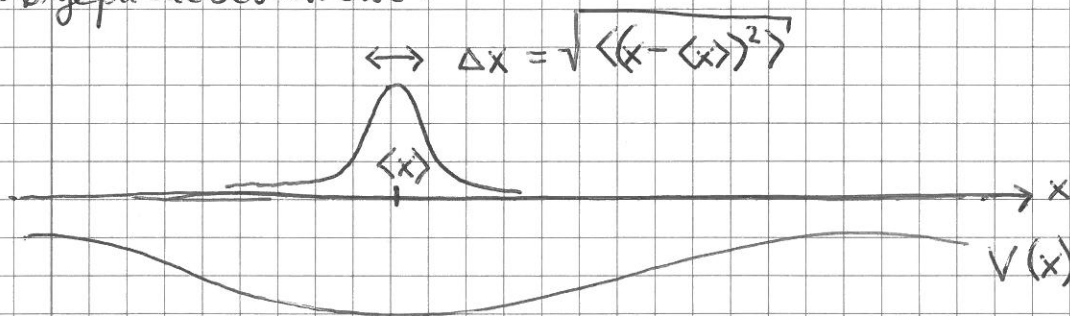
$$\Rightarrow \frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{i(-2i\hbar)}{2m\hbar} \langle \hat{p} \rangle = \frac{\langle \hat{p} \rangle}{m} = \frac{\langle p \rangle}{m}$$

$$\frac{d}{dt} \langle p \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{p}] \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [V, \hat{p}] \rangle \quad ([\hat{p}^2/2m, \hat{p}] = 0) \quad (47)$$

$$\begin{aligned} [V, \hat{p}] \psi &= V \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} V \psi \\ &= \frac{V \hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{V \hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial V}{\partial x} \psi = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial V}{\partial x} \psi \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} \langle p \rangle = \frac{i}{\hbar} \left(-\frac{\hbar}{i} \right) \langle \frac{\partial V}{\partial x} \rangle = \langle -\frac{\partial V}{\partial x} \rangle \quad (\text{qed})$$

Bølgepakkebeskrivelse:



$$F(x) = -\frac{\partial V}{\partial x} = F(\langle x \rangle) + (x - \langle x \rangle) F'(\langle x \rangle) + \frac{1}{2} (x - \langle x \rangle)^2 F''(\langle x \rangle) + \dots$$

$$\Rightarrow \langle F(x) \rangle = \langle -\frac{\partial V}{\partial x} \rangle = F(\langle x \rangle) + \frac{1}{2} \Delta x^2 F''(\langle x \rangle) + \dots$$

$$\Rightarrow \text{Kun hvis } F''(\langle x \rangle) = F'''(\langle x \rangle) = \dots = 0, \text{ er } \langle F(x) \rangle = F(\langle x \rangle),$$

\Rightarrow Kun da vil $\langle x \rangle$ følge den klassiske banen, ^{eksakt} for da har vi

$$\frac{d\langle p \rangle}{dt} = m \frac{d^2 \langle x \rangle}{dt^2} = F(\langle x \rangle), \text{ dvs Newtons 2. lov for } \langle x \rangle !$$

Ser at $\langle F(x) \rangle \approx F(\langle x \rangle)$ (dvs Newton-mekanikk er OK)
dersom Δx kan neglisjeres (makroskopiske "partikler")
og/eller $F''(\langle x \rangle) \rightarrow 0$ (langsomt varierende potensial)

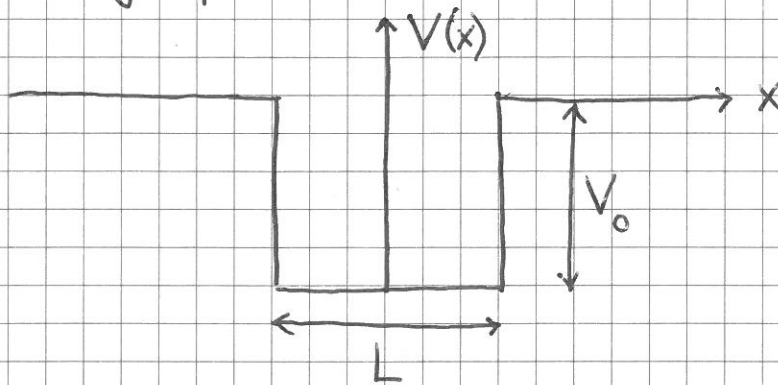
Eks: Konstant tyngdefelt, $V(z) = mgz \Rightarrow F'' = 0 \Rightarrow \langle F(z) \rangle = F(\langle z \rangle)$

Harmonisk oscillator, $V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \Rightarrow F'' = 0 \Rightarrow \langle F(x) \rangle = F(\langle x \rangle)$

ENDIMENSJONALE POTENSIALER

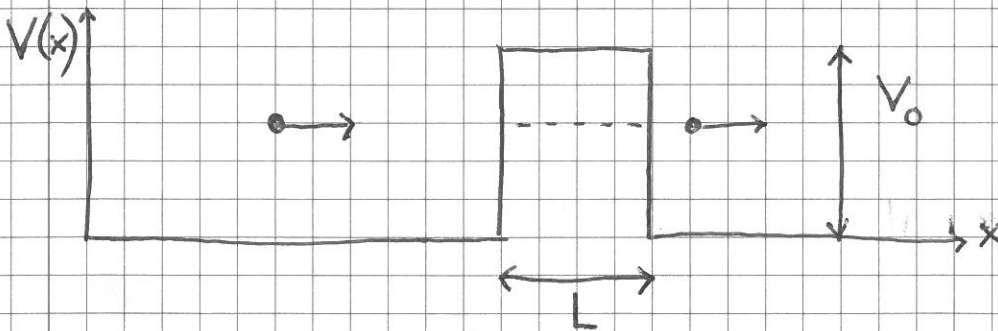
[PCH 3 ; DFG 2 ; IØ 3]

- Endelig potensialbrønn



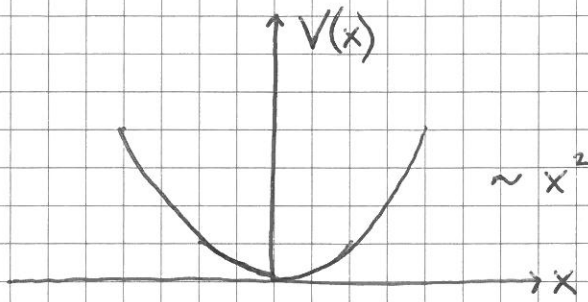
Relevans: Halvlederteknologi, fotonikk

- Potensialbarriere



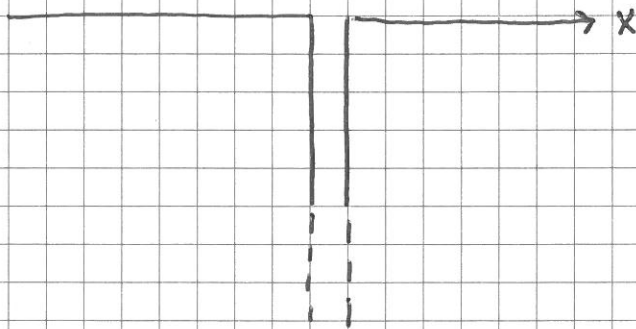
Relevans: Tunnelering. Feltemisjona
 Fisjon, fusjon (radioaktivitet).
 Tunneleringsmikroskop (STM).
 Spredningseksperimenter.

- Harmonisk oscillator



Relevans: Vibrasjoner i molekyler og krystaller.
Alle problemer der et eller annet svinger omkring en likevektsposisjon.

- δ -funksjonspotensial



~~Prøvn~~ Prøvn / bariere med $V_0 \rightarrow \infty$, $L \rightarrow 0$.

Disse kan løses eksakt (analytisk).

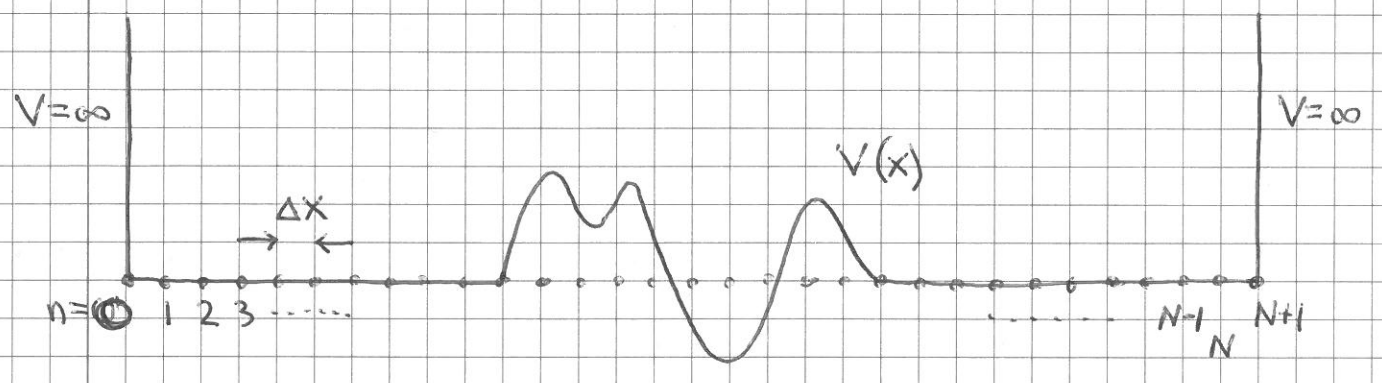
Med "vilkaarlig" $V(x)$ trengs en numerisk løsningsmetode.

Numerisk løsning av TUSL

$$\text{TUSL: } -\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

Strategi: Diskretiserer området $0 < x < L$, slik at det "interessante" intervallet for $V(x)$ er langt unna $x=0$ og $x=L$.

Setter $V = \infty$ for $x \leq 0$ og $x \geq L$.



$$x_n = n \cdot \Delta x$$

$$\left. \begin{aligned} V_n &= V(x_n) = V(n \cdot \Delta x) \\ \psi_n &= \psi(x_n) = \psi(n \cdot \Delta x) \end{aligned} \right\} \begin{aligned} V_0 &= V_{N+1} = \infty \\ \Rightarrow \psi_0 &= \psi_{N+1} = 0 \end{aligned}$$

$$\psi_n'' \approx \frac{\psi'_{n+1/2} - \psi'_{n-1/2}}{\Delta x} \approx \frac{\frac{\psi_{n+1} - \psi_n}{\Delta x} - \frac{\psi_n - \psi_{n-1}}{\Delta x}}{\Delta x}$$

$$= \frac{\psi_{n+1} - 2\psi_n + \psi_{n-1}}{(\Delta x)^2}$$

⇒ TUSL på $0 < x < L$ er nå sett av N

differanseligninger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2} \Psi_{n-1} + \left(\frac{\hbar^2}{m\Delta x^2} + V_n \right) \Psi_n - \frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2} \Psi_{n+1} = E \Psi_n$$

$$(n=1, 2, 3, \dots, N)$$

På kompakt form:

$$\mathbb{H} \vec{\Psi} = E \vec{\Psi}, \quad \text{der } \mathbb{H} \text{ er } (N \times N)\text{-matrise}$$

$$\text{med } H_{nn} = \frac{\hbar^2}{m\Delta x^2} + V_n, \quad H_{n,n\pm 1} = -\frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2},$$

$$H_{ij} = 0 \quad \text{ellers}$$

dvs en reell, symmetrisk, tri-diagonal matrise,

med N forskjellige, reelle egenverdier E_1, E_2, \dots, E_N

med tilhørende egenvektorer $\vec{\Psi}_{\#1}^{(1)}, \vec{\Psi}_{\#2}^{(2)}, \dots, \vec{\Psi}_{\#N}^{(N)}$

som er ortogonale, normerbare, og kan velges reelle.

[Ikke-triviale løsninger, $\vec{\Psi} \neq 0$, kun hvis $\det(\mathbb{H} - E\mathbb{I}) = 0$, gir

N -te-gradslign. $C_N E^N + C_{N-1} E^{N-1} + \dots + C_1 E + C_0 = 0$ med

N løsn. E_1, E_2, \dots, E_N ; hvorefter tilhørende egenvektorer

bestemmes ved å løse $(\mathbb{H} - E_i \mathbb{I}) \vec{\Psi}_{\#i}^{(i)} = 0$.

Normering: $\sum_{n=1}^N |\Psi_{\#n}^{(i)}|^2 \Delta x = 1.$

$$\left(\Psi_n^{(i)} = \Psi^{(i)}(x_n) = \text{verdi av } \Psi^{(i)} \text{ i pos. } x_n = n \cdot \Delta x \right)$$

Standard egenverdi problem; implementert i

"alle" programpakker (matlab, python, ...).

Matlab:

$$[S, D] = \text{eig}(H);$$

$$\Rightarrow D(1,1) = E_1, \dots, D(N,N) = E_N \quad (E_1 < E_2 < \dots < E_N)$$

$$S(n,i) = \psi_n^{(i)} = \psi^{(i)}(x_n), \text{ dvs kolonne nr } i$$

i matrisen S er egenvektor nr i ($i=1,2,\dots,N$)

Python:

```
import numpy as np
```

⋮

```
w, v = np.linalg.eigh(H)
```

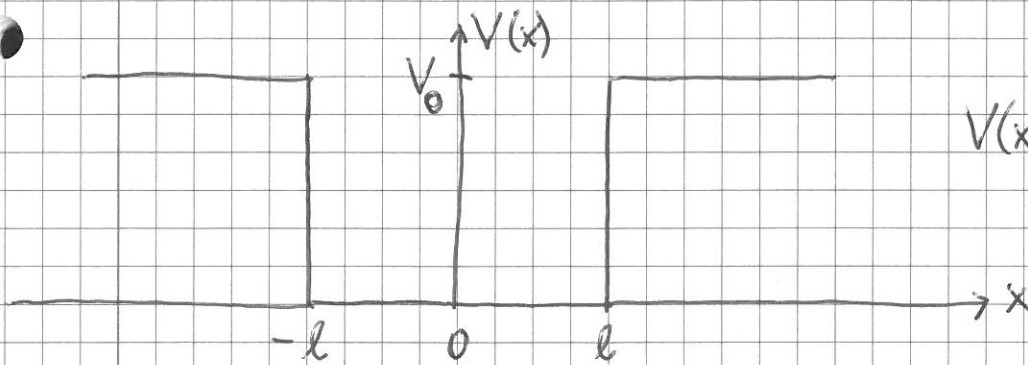
$$\Rightarrow w[0] = E_1, \dots, w[N-1] = E_N \quad (E_1 < E_2 < \dots < E_N)$$

$$v[n-1, i-1] = \psi_n^{(i)} = \psi^{(i)}(x_n), \text{ dvs kolonne nr } i-1$$

i matrisen v er egenvektor nr i ($i=1,2,\dots,N$)

[Python nummererer elementene i tabeller og matriser fra og med 0]

Endelig potensialbrønn [PH 3.3; DFG 2.6; IØ 3.2]



$$V(x) = \begin{cases} 0 & ; |x| \leq l \\ V_0 & ; |x| > l \end{cases}$$

TUSL:
$$\psi''(x) = \begin{cases} -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) & ; |x| \leq l \\ \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \psi(x) & ; |x| > l \end{cases}$$

$E < V_0$:

$$\psi(x) = C \sin kx + D \cos kx \quad ; \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad ; \quad |x| \leq l$$

$$\psi(x) = A e^{\gamma x} + B e^{-\gamma x} \quad ; \quad \gamma = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad ; \quad |x| > l$$

$$e^{\gamma x} \xrightarrow{x \rightarrow \infty} \infty \Rightarrow \psi(x) = B e^{-\gamma x} \quad ; \quad x > l$$

$$e^{-\gamma x} \xrightarrow{x \rightarrow -\infty} \infty \Rightarrow \psi(x) = A e^{\gamma x} \quad ; \quad x < -l$$

5 ukjente, A, B, C, D og energien E, fastlegges med normering, $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$, og 4 grensebetingelser, ψ og ψ' kont. i $x = \pm l$.

Med symmetrisk $V(x)$ forventes symm. $|\psi|^2$, dvs symm, og (eller) antisymm. løsninger $\psi(x)$, dvs $\psi(x) = D \cos kx$ ($C=0$) og $\psi(x) = C \sin kx$ ($D=0$).

Ψ og Ψ' kont. i $x = -l$:

$$A e^{-jkl} = -C \sin kl + D \cos kl \quad (1)$$

$$A jk e^{-jkl} = k(C \cos kl + D \sin kl) \quad (2)$$

Mult. (1) med $\sin kl$ og ~~trek~~ ^{trekk fra} (2) mult. med $\frac{1}{k} \cos kl$

$$\Rightarrow A \frac{j}{k} e^{-jkl} \cos kl - A \sin kl = C$$

$$\Rightarrow C = A e^{-jkl} \cos kl \left(\frac{j}{k} - \tan kl \right) \quad (3)$$

Mult. (1) med $\cos kl$ og legg til (2) mult. med $\frac{1}{k} \sin kl$

$$\Rightarrow A \frac{j}{k} e^{-jkl} \sin kl + A e^{-jkl} \cos kl = D$$

$$\Rightarrow D = A e^{-jkl} \cos kl \left(\frac{j}{k} \tan kl + 1 \right) \quad (4)$$

Ψ og Ψ' kont. i $x = l$:

~~$$B e^{-jkl} = C \sin kl + D \cos kl \quad (5)$$~~

$$-B jk e^{-jkl} = k(C \cos kl - D \sin kl) \quad (6)$$

$$(5) \cdot \frac{j}{k} + (6) \cdot \frac{1}{k} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow C \left(\frac{j}{k} \sin kl + \cos kl \right) + D \left(\frac{j}{k} \cos kl - \sin kl \right) = 0$$

$$\Rightarrow C \left(\frac{j}{k} \tan kl + 1 \right) + D \left(\frac{j}{k} - \tan kl \right) = 0 \quad (7)$$

Innsøtting av (3) og (4) i (7) gir to like ledd:

$$2 \left(\frac{j}{k} \tan kl + 1 \right) \left(\frac{j}{k} - \tan kl \right) = 0$$

$$\frac{\hbar E}{k} \tan kl + 1 = 0 \Rightarrow D = 0$$

$$\Rightarrow \psi(x) = C \sin kx; \text{ antisymm. løsninger}$$

$$\frac{\hbar E}{k} - \tan kl = 0 \Rightarrow C = 0$$

$$\Rightarrow \psi(x) = D \cos kx; \text{ symm. løsninger}$$

Energiegenverdier E gitt ved:

$$\tan kl = \begin{cases} \hbar/k & ; \text{ symm. løsn. (S)} \\ -k/\hbar & ; \text{ antisymm. løsn. (AS)} \end{cases}$$

dvs

$$\tan \frac{\sqrt{2mE}l}{\hbar} = \begin{cases} \sqrt{\frac{V_0 - E}{E}} & (S) \\ -\sqrt{\frac{E}{V_0 - E}} & (AS) \end{cases}$$

Grensefallene: $V_0 \rightarrow \infty$, partikkel i boks.

$$\tan \frac{\sqrt{2mE}l}{\hbar} = \begin{cases} \infty & (S) \\ 0 & (AS) \end{cases}$$

$$\Rightarrow \frac{\sqrt{2mE}l}{\hbar} = \begin{cases} \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}, \frac{5\pi}{2}, \dots & (S) \\ \pi, 2\pi, 3\pi, \dots & (AS) \end{cases}$$

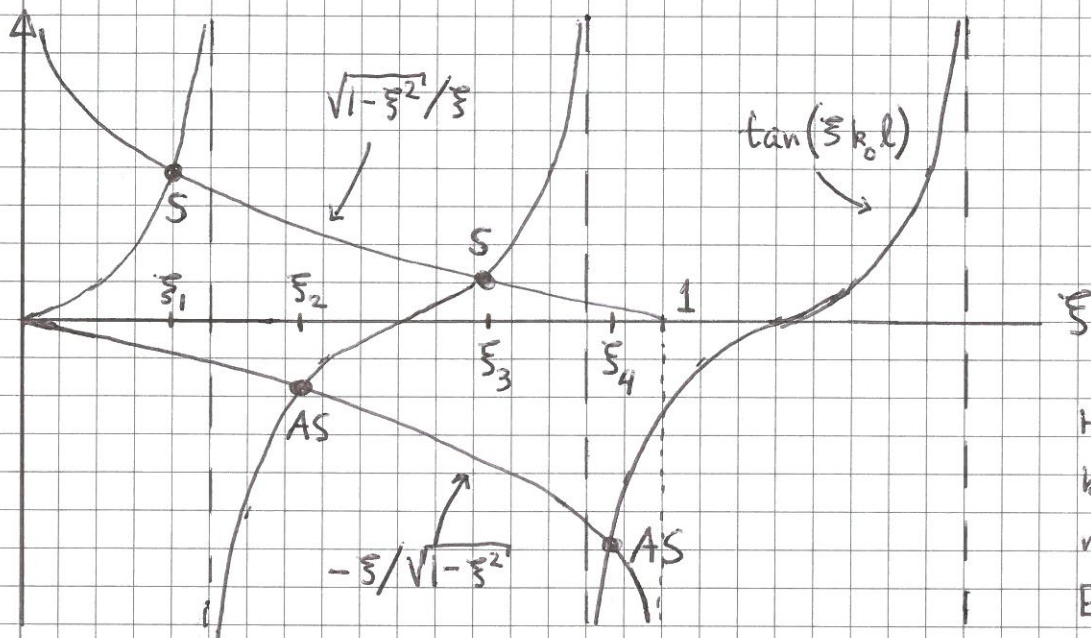
$$\Rightarrow E_n = \frac{\hbar^2}{2ml^2} \cdot \left(\frac{n\pi}{2}\right)^2 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m(2l)^2} \cdot n^2; \quad n=1,2,3,\dots$$

OK; som E_n s. 29!

Antall bundne løsninger:

$E < V_0 \Rightarrow \xi = \sqrt{E/V_0} ; 0 < \xi < 1$

$\Rightarrow \tan(\xi \cdot k_0 l) = \begin{cases} \sqrt{1-\xi^2} / \xi & (S) \\ -\xi / \sqrt{1-\xi^2} & (AS) \end{cases} \quad \left(k_0 = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar} \right)$



Heri 4 bundne tilst. med energi $E_n = V_0 \xi_n^2$ ($n=1,2,3,4$)

- Minst en symm. løsning
- Kun 1 løsn. hvis $k_0 l < \pi/2$: Da er $\xi=1$ til venstre for 1. asymptot til $\tan(\xi k_0 l)$
- 2 løsn. hvis $\frac{\pi}{2} < k_0 l < \pi$: Da er $\xi=1$ til venstre for 1. nullpunkt til $\tan(\xi k_0 l)$
- N løsn. hvis $(N-1)\frac{\pi}{2} < k_0 l < N\frac{\pi}{2}$

$\Rightarrow N < \frac{2k_0 l}{\pi} + 1 < N+1$

$\Rightarrow N = 1 + \text{største heltall mindre enn } \frac{2k_0 l}{\pi}$
 $= 1 + \left[\frac{2k_0 l}{\pi} \right] = 1 + \left[\frac{2l\sqrt{2mV_0}}{\pi\hbar} \right]$

• Økende antall bundne løsninger for dypere og bredere brønn.

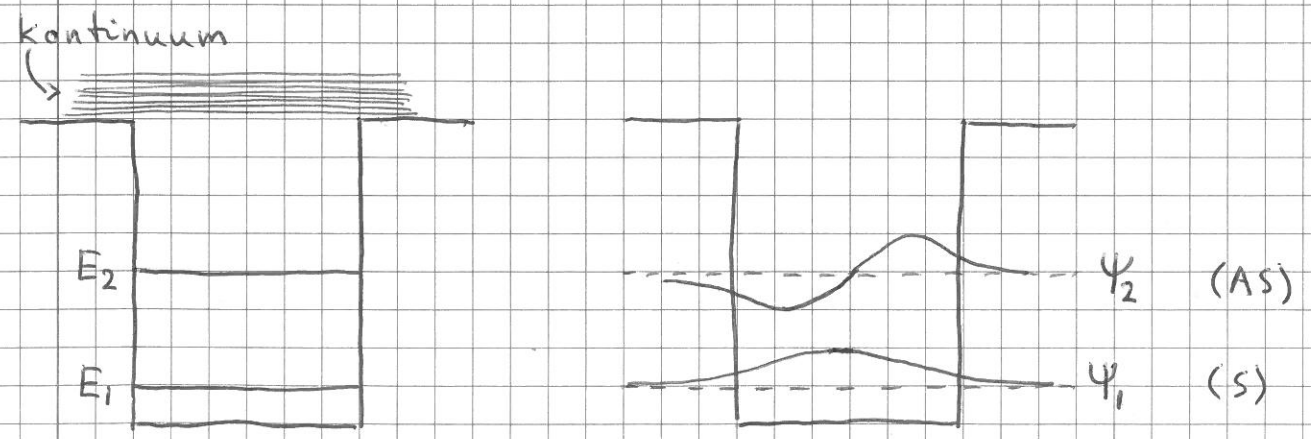
• $|\Psi|^2 > 0$ også utenfor brønnen, dvs en viss sannsynlighet for å finne partikkelen i det klassisk forbudte området, der $E < V_0$.

$E > V_0$:

Når er $\Psi(x) = a \sin Kx + b \cos Kx$ for $|x| > l$, med $K = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$, dvs ikke bundne tilstander.

Kan "matches" med $C \sin kx + D \cos kx$ i $x = \pm l$ (dvs kont. Ψ og Ψ') for alle verdier av $E > V_0$.

\Rightarrow spekteret er kontinuerlig for $E > V_0$.



Inntrengningsdybde: $\frac{1}{\beta} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$

$\Rightarrow \left| \frac{\Psi(l + 1/\beta)}{\Psi(l)} \right| = 1/e$