Stasjonære tilstander og tidsuavhengig Schrödingerligning (TUSL)

[PCH 2.3 ; DJG 2.1 ; IØ 1.7.b, 2.1.a, 2.7.a]

Vi skal i dette kurset bare studere tidsuavhengige potensialer V, slik at $\hat{H}$ er uavhengig av t.

Vi prøver produktløsning

$$\Psi(x,t) = \psi(x) \cdot T(t)$$

Innsetting i SL og divisjon med Ψ gir

$$\frac{i\hbar}{T}\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{\psi}\hat{H}\psi$$

Begge uttrykk må være lik en og samme konstant, som vi kan kalle E. Da løser vi lett for $T(t)$:

$$\frac{dT}{T} = \frac{E}{i\hbar}dt \quad \Rightarrow \quad T(t) = e^{-iEt/\hbar}$$

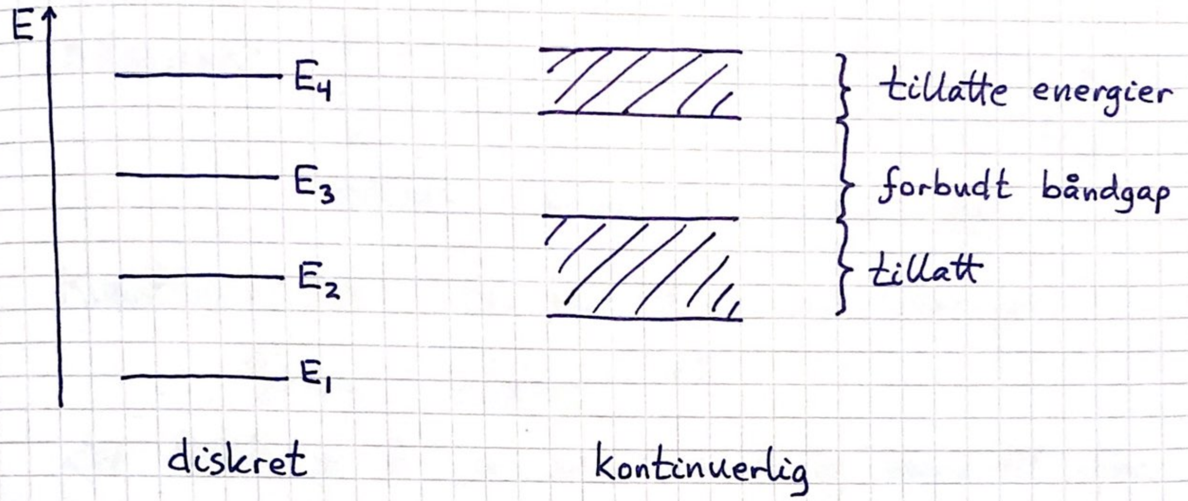
Lign. for $\psi(x)$ blir: $\boxed{\hat{H}\psi = E\psi}$ som er den tidsuavh. Schrödingerligningen (TUSL).

$\Psi(x,t) = \psi(x)\, e^{-iEt/\hbar}$ kalles naturlig nok en stasjonær tilstand siden sannsynlighetstettheten

$$|\Psi|^2 = |\psi(x)|^2$$

er uavhengig av tiden t. Siden $\hat{H}$ er operator for partikkelens energi, tolker vi E som mulige energiegenverdier og $\psi(x)$ som mulige energiegentilstander (evt. energiegenfunksjoner).

TUSL vil ha diskrete egenverdier og/eller kontinuerlige energibånd:



SL og TUSL er lineære ligninger, slik at den generelle løsningen av SL er en vilkårlig lineærkombinasjon av stasjonære løsninger:

$$\Psi(x,t) = \sum_n c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} + \int c_E \psi_E(x) e^{-iEt/\hbar} dE$$

Merk at hvis tilstander med ulike E-verdier bidrar til $\Psi(x,t)$, blir $|\Psi|^2$ tidsavhengig; dvs $\Psi(x,t)$ er da ikke stasjonær.

Partikkel i 1D boks [PCH 3.2; DJG 2.2; IØ 2.1]

$V(x) = 0$ for $0 < x < L$; $V = \infty$ ellers

Klassisk: $E = K = \frac{1}{2} m v^2$, og alle $E \geq 0$ er tillatt. $v = \pm \sqrt{2E/m}$, partikkelen seiler fram og tilbake mellom to harde vegger.

Kvantemekanisk: SL har stasjonære løsninger,

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

der $\psi(x)$ og E er hhv egenf. og egenv. til oper.

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

dvs

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$$

Utenfor boksen: $V = \infty \Rightarrow |\psi|^2 = 0$; null sanns. for å finne partikkelen der $V = \infty$.

Inni boksen: $V = 0$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad ; \quad E = K \geq 0$$

$$\Rightarrow \psi'' + k^2\psi = 0 \quad ; \quad k = \sqrt{2mE}/\hbar$$

Generell løsning: $\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$

Krever naturligvis kontinuerlig sanns. fordeling $|\psi|^2$ og ψ:

$\psi(0) = 0 \Rightarrow B = 0 \Rightarrow \psi(x) = A \sin kx$

$\psi(L) = 0 \Rightarrow \sin kL = 0 \Rightarrow k_n L = n\pi$; $n = 1, 2, 3, \ldots$

$\Rightarrow$ Kvantisert energi: $E_n = \dfrac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \dfrac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$

Normering av sanns.: $\int_0^L |\psi_n(x)|^2 \, dx = 1$

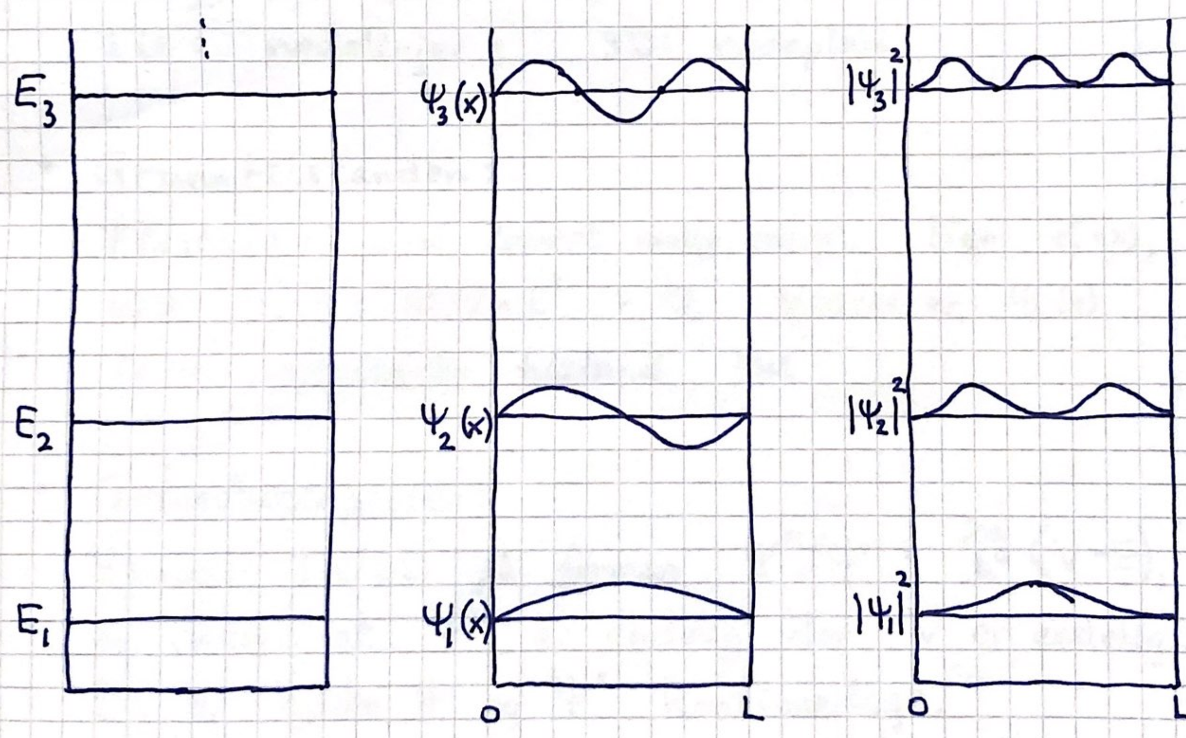
På intervallet $0 < x < L$ har $\sin^2(n\pi x/L)$ n hele perioder og svinger mellom 0 og 1, dvs med middelverdi ½. Dermed:

$$|A_n|^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx = |A_n|^2 \cdot \frac{L}{2} = 1$$

$$\Rightarrow \quad A_n = \sqrt{\frac{2}{L}}\, e^{i\beta_n}, \quad \text{med vilkårlig reell } \beta_n.$$

Da $|\psi_n|^2$ er uavh. av β_n, velges $\beta_n = 0$, slik at

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\frac{n\pi x}{L} \quad ; \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$



Vi ser likheten med stående bølger på en streng.

Merknader (med generell gyldighet):

- Symmetri:

  Med symmetrisk $V(x)$ må $|\psi_n|^2$ være symmetrisk, dvs $\psi_n(x)$ enten symm. eller antisymm. Her er $\psi_n(x)$ symm. for odde n og antisymm. for like n.

- Nullpunkter:

  $\psi_n(x)$ har $n-1$ nullpunkter. Gjelder generelt for bundne tilstander, dvs $E_n < V(x \to \pm\infty)$.
  [Her kommer de to nullpunktene i $x=0$ og $x=L$ i tillegg pga grensebetingelsene når $V \to \infty$.]
  2D: nodelinjer ; 3D: nodeplan

- Grunntilstanden:

  Tilstanden med lavest mulig energi. Her $\psi_1(x)$, med $E_1 = \pi^2 \hbar^2 / 2m L^2 > 0$. Videre er $\psi_2(x)$ første eksiterte tilstand osv.

- Grensebetingelser:

  Skriver TUSL på formen $\psi''/\psi = \frac{2m}{\hbar^2}(V-E)$, og innser at ψ'' er endelig der V er endelig. Da er både ψ og ψ' kontinuerlige.
  Der V gjør et uendelig sprang gjør ψ'' det samme. Da er ψ' diskontinuerlig, og ψ får en "knekk".
  Men ψ, og dermed $|\psi|^2$ er kontinuerlige overalt.

- Krumningsegenskaper:
  ψ''/ψ har samme fortegn som $V-E$.
  Klassisk tillatt område, $E \geq V$: $\psi''/\psi \leq 0$ og ψ krummer mot x-aksen.
  Klassisk forbudt område, $E < V$: $\psi''/\psi > 0$ og ψ krummer bort fra x-aksen. Dette er kvantemekanisk tillatt område, så lenge $V < \infty$.

- Ortogonalitet:
  Et vektorsett $\{\vec{V}_1, \vec{V}_2, \dots\} = \{\vec{V}_i\}$ er ortogonalt og normert, dvs ortonormert, når

$$\vec{V}_i \cdot \vec{V}_j = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{når } i=j \\ 0 & \text{når } i \neq j \end{cases}$$

  Kronecker delta

  Et funksjonssett $\{\psi_n(x)\}$ er ortonormert når

$$\langle \psi_n, \psi_k \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\, \psi_k(x)\, dx = \delta_{nk}$$

  Gjelder temmelig generelt for løsninger av TUSL. Se PCH kap. 2. Sjekk selv for partikkel i boks.

- Starttilstand og dens tidsutvikling:
  En gitt $\Psi(x,0)$ kan uttrykkes som en lineær-kombinasjon av energiegenfunksjoner,

$$\Psi(x,0) = \sum_n c_n \psi_n(x)$$

  Vi antar her et diskret spektrum, slik vi har med partikkel i boks (og generelt når $V \to \infty$ for $|x| \to \infty$).

Tidsutviklingen blir da

$$\Psi(x,t) = \sum_n c_n \psi_n(x) e^{-iE_nt/\hbar}$$

dvs en lineærkombinasjon av stasjonære tilstander.
Koeffisientene c_n fastlegges slik:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\,\Psi(x,0)\,dx = \sum_j c_j \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\psi_j(x)\,dx = \sum_j c_j \delta_{nj} = c_n$$

Med en normert $\Psi(x,0)$ har vi:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,0)\Psi(x,0)\,dx = \sum_n \sum_j c_n^* c_j \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\,\psi_j(x)\,dx}_{=\delta_{nj}} = \sum_n |c_n|^2$$

Da forblir $\Psi(x,t)$ normert:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)\,dx =$$

$$= \sum_n \sum_j c_n^* c_j e^{i(E_n-E_j)t/\hbar} \cdot \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\,\psi_j(x)\,dx}_{=\delta_{nj}}$$

$$= \sum_n |c_n|^2 = 1$$

Med andre ord, sannsynligheten er bevart.