Stasjonære tilstander og tidsuavhengig Schrödingerligning

[PCH 2.3] [DJG 2.1] [IØ 1.7.b, 2.1.a, 2.7.a] ("TUSL")

For fri partikkel:

$$|\Psi(x,t)|^2 = |e^{i(px-Et)/\hbar}|^2 = 1$$

dvs sanns. fordelingen er <u>uavhengig av tida t</u>,
og vi kaller $\Psi(x,t)$ en <u>stasjonær tilstand</u>.

Anta tidsuavh. potensial $V(x)$ (ofte tilfelle!)

$\Rightarrow$ $\hat{H}$ uavh. av t $\Rightarrow$ SL kan <u>separeres</u>:

$\Psi(x,t) = \psi(x) \cdot T(t)$ settes inn i SL:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\{\psi(x)\cdot T(t)\} = \hat{H}\{\psi(x)\cdot T(t)\}$$

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

$$\Rightarrow \quad \underbrace{i\hbar\frac{\partial T/\partial t}{T}}_{\text{kun avh. av } t} = \underbrace{\frac{\hat{H}\psi}{\psi}}_{\text{kun avh. av } x}$$

$\Rightarrow$ Begge må være lik en og samme <u>konstant</u>,
som vi kaller E:

$$\frac{dT}{T} = \frac{1}{i\hbar}E\,dt = -\frac{iE}{\hbar}dt$$

$$\Rightarrow \quad T(t) = \text{konstant} \cdot e^{-iEt/\hbar}$$

Dessuten: $\boxed{\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)}$ TUSL (i 1D)

Total løsning:

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

$$\Rightarrow \quad |\Psi(x,t)|^2 = |\psi(x)|^2, \quad \text{uavh. av } t,$$

med andre ord, en stasjonær tilstand!

Som regel representerer ~~h~~ Hamiltonoperatoren $\hat{H}$ energien

$\Rightarrow$ TUSL er en egenverdiligning, der egenverdiene E gir oss de mulige energiene systemet kan ha.

Generelt vil TUSL ha et antall diskrete egenverdier $E_1, E_2, \ldots$ (endelig eller uendelig mange) og/eller energiintervall(er) (ett eller flere) der alle ~~ve~~ verdier av E er mulig, dvs et diskret og/eller et kontinuerlig spektrum av energier.

Siden TUSL (og SL) er lineære, er den generelle løsningen av SL en vilkårlig sum (lineær kombinasjon) av stasjonære tilstander:

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

(+ eventuelt et integral over kontinuerlige spektra)

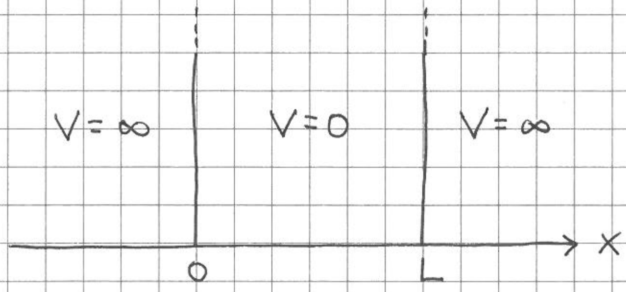
Partikkel i boks, i én dimensjon

[PCH 3.2] [DJG 2.2] [IØ 2.1]

Enkelt, illustrativt eksempel:

Én partikkel, masse m, i potensialet

$$V(x) = \begin{cases} 0 & ; \quad 0 < x < L \\ \infty & ; \quad x < 0 \text{ og } x > L \end{cases}$$



[Klassisk analogi: Ball som spretter fram og tilbake mellom to harde vegger; elastiske kollisjoner med veggene; $g = 0$. Vilkårlig energi $E = K = \frac{1}{2}mv^2$, hastighet $v = \pm\sqrt{2E/m}$.]

Har tidsuavhengig $V = V(x)$

$\Rightarrow$ Løsninger av SL er <u>stasjonære tilstander</u>

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

der $\psi(x)$ er <u>egenfunksjoner</u> til

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

med tilhørende <u>energiegenverdier</u> E,

dvs løsninger av TUSL,

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

Partikkelen kan ikke være utenfor [0, L], der $V = \infty$

$\Rightarrow \quad \psi(x) = 0$ utenfor [0, L]

Grensebetingelser:

TUSL kan skrives på formen

$$\frac{\psi''}{\psi} = \frac{2m}{\hbar^2}(V - E) \quad ; \quad \psi'' = \frac{d^2\psi}{dx^2}$$

Anta <u>endelig V</u>. Hvis ψ er diskontinuerlig et sted, blir ψ' og ψ'' uendelige der.

Men endelig V betyr <u>endelig ψ''</u>.

$\Rightarrow \quad \psi$ må være kontinuerlig

og ψ' ——— " ———

Anta så at <u>$V \to \infty$</u> et sted (som her, i $x = 0$ og $x = L$).

Da må $\psi \to 0$ eller $\psi'' \to \infty$ (eller begge deler).

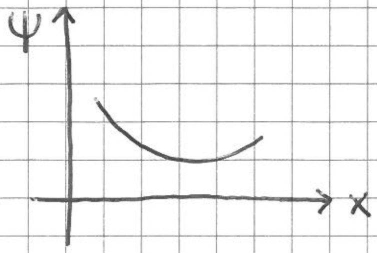
$\Rightarrow \quad \psi'$ ikke (nødvendigvis) kontinuerlig der

V blir uendelig

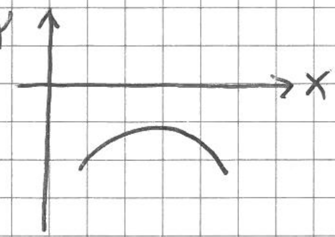
For $0 < x < L$: $\psi'' = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi$

Forventer $E \geq 0$, som stemmer: Hvis $E < 0$,

er $\psi''/\psi > 0$ $\Rightarrow$ krumning bort fra x-aksen,



eller



$\Rightarrow$ umulig å oppfylle både $\psi(0) = 0$ og $\psi(L) = 0$

Hva med $E = 0$ (som er OK klassisk) ?

Da er $\psi'' = 0$, dvs $\psi(x) = Ax + B$, som med

$\psi(0) = \psi(L) = 0$ gir $\psi(x) = 0$; "ingen partikkel" !

$\Rightarrow$ $\psi'' + k^2\psi = 0$; $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$; $E > 0$

Generell løsning:

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

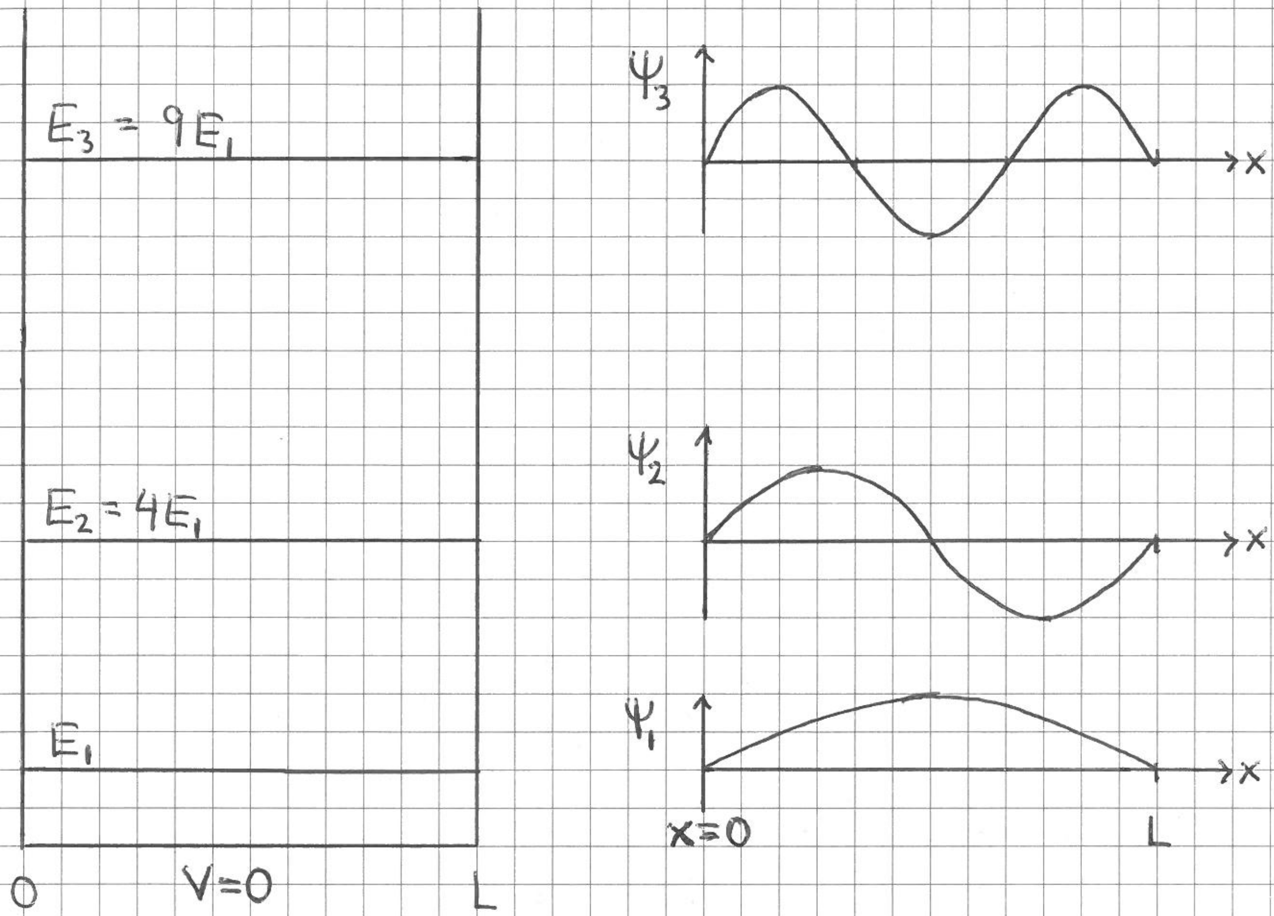
Kontinuerlig ψ

$\Rightarrow \psi(0) = B = 0$; $\psi(L) = A \underbrace{\sin kL}_{} = 0$ $(A \neq 0)$

Gir kvantisering av k, og dermed E.

$$\sin kL = 0 \Rightarrow kL = n\pi$$

$$\Rightarrow k_n = \frac{n\pi}{L}, \quad E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \cdot n^2 \quad ; \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$



- Har alltid energikvantisering for slike bundne tilstander.
- Ligner veldig på stående bølger på en streng, med grunntone med $\lambda_1 = 2L$. Har her en grunntilstand $\psi_1(x)$, dvs tilstanden med lavest energi, med bølgetall $k_1 = \pi/L$ og dermed bølgelengde $\lambda_1 = 2\pi/k_1 = 2L$.
- $\psi_n(x)$ har $n-1$ nullpunkter, som naturlig nok øker med økende relativ krumning $|\psi_n''/\psi_n|$, dvs med økende energi $E_n = \hbar^2 |\psi_n''/\psi_n| / 2m$.

- Har <u>symmetrisk</u> $V(x)$ om $x = L/2$ og fant <u>symmetriske og antisymmetriske</u> tilstander (hhv $\psi_1, \psi_3, \ldots$ og $\psi_2, \psi_4, \ldots$), som forventet:
Da er <u>sanns.tettheten</u> $|\psi_n(x)|^2$ <u>symmetrisk</u> for alle n.

- Normering: Hvis partikkelen er i en <u>stasjonær</u> tilstand, dvs med gitt energi E_n, må vi ha

$$\int_0^L |\psi_n(x)|^2 dx = 1$$

Siden $\sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$ "svinger" n <u>hele</u> perioder mellom 0 og 1 på intervallet $0 < x < L$, med middelverdi $\frac{1}{2}$, blir $\int_0^L \sin^2(n\pi x/L)\, dx = \frac{1}{2} L$ for alle $n = 1, 2, 3 \ldots$

$$\Rightarrow |A|^2 = \frac{2}{L} \Rightarrow |A| = \sqrt{2/L} \Rightarrow A = e^{i\beta}\sqrt{2/L}$$

med vilkårlig, reell β: $|e^{i\beta}| = 1$, så valg av β påvirker ikke den <u>fysiske</u> størrelsen $|\psi_n(x)|^2$.

Med valget $\beta = 0$:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\frac{n\pi x}{L} \; ; \quad k_n = \frac{n\pi}{L} \; ; \quad E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}$$

og $\Psi_n(x,t) = \psi_n(x)\, e^{-iE_n t/\hbar}$ (den <u>stasjonære</u> tilstanden)

- Ortogonalitet:

Med "vanlige" vektorer:

$$\vec{V}_1 \cdot \vec{V}_2 = 0 \quad \text{når} \quad \vec{V}_1 \perp \vec{V}_2$$

Normering: $\vec{V}_i \cdot \vec{V}_i = V_i^2 = 1$

$\Rightarrow$ Ortonormerte vektorer hvis

$$\vec{V}_i \cdot \vec{V}_j = \delta_{ij} \quad ; \quad \delta_{ij} = \begin{cases} 1 \; ; \; i = j \\ 0 \; ; \; i \neq j \end{cases} \quad \text{(Kronecker-delta)}$$

Tilsvarende med egenfunksjoner $\psi_n(x)$:

Har et ortonormert sett av funksjoner $\{\psi_n\} = \{\psi_1, \psi_2, \dots\}$ dersom

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

For partikkel i boks: $\quad \sin\alpha \sin\beta = \frac{1}{2}\left[\cos(\alpha-\beta) - \cos(\alpha+\beta)\right]$

$$\Rightarrow \langle \psi_n, \psi_k \rangle = \frac{1}{L} \int_0^L \left[\cos\frac{(n-k)\pi x}{L} - \cos\frac{(n+k)\pi x}{L}\right] dx$$

$$\overset{n \neq k}{=} \Big|_0^L \left[\frac{1}{n-k} \sin\frac{(n-k)\pi x}{L} - \frac{1}{n+k} \sin\frac{(n+k)\pi x}{L}\right] = 0$$

$\Rightarrow \langle \psi_n, \psi_k \rangle = \delta_{nk} \qquad$ [Vet allerede at $\langle \psi_n, \psi_n \rangle = 1$]

Superposisjon og ikke-stasjonære tilstander

[PCH 2.3 ; DJG 2.1 ; IØ 2.1.f]

SL er lineær og homogen

$\Rightarrow$ Hvis $\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \dots$ er løsninger av SL, dvs

$$i\hbar\,\partial\Psi_1/\partial t = \hat{H}\Psi_1 \; ; \quad i\hbar\,\partial\Psi_2/\partial t = \hat{H}\Psi_2 \; ; \dots$$

så er

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi \quad \text{med} \quad \Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2 + \dots = \sum_n c_n\Psi_n$$

(superposisjonsprinsippet).

Når $\hat{H}$ uavh. av t: $\Psi_n(x,t) = \psi_n(x)\,e^{-iE_nt/\hbar}$ (stasjonære tilstander)

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

Er <u>ikke</u> en stasjonær tilstand (dvs $|\Psi|^2$ avhenger av t)

Normering: $\boxed{\sum_n |c_n|^2 = 1}$ (når $\{\psi_n\}$ er ortonormert)

Bevis: $$1 = \int \Psi^*\Psi\,dx = \int \sum_n c_n^*\psi_n^*\,e^{iE_nt/\hbar} \cdot \sum_k c_k\psi_k\,e^{-iE_kt/\hbar}\,dx$$

$$= \sum_n |c_n|^2 \underbrace{\int|\psi_n|^2dx}_{=1} + \sum_{n\neq k} c_n^* c_k\, e^{i(E_n-E_k)t/\hbar} \cdot \underbrace{\int\psi_n^*\psi_k\,dx}_{\delta_{nk}}$$

$$= \sum_n |c_n|^2 \qquad \text{(qed)}$$

[Se box_non_stationary.m (.py) og box_non_stationary_3.m (.py)]

Postulatene [PCH 2.1, DJG 3.3, IØ 2.2]

- Empirisk grunnlag, klassisk mekanikk: Newtons lover.
- ——"——, kvantemekanikk: Postulat A – D.

A: Operatorpostulat ("posisjonsromformulering")

Til en målbar størrelse i klassisk mekanikk,

$$F(q_1, q_2, \cdots, q_N; p_1, p_2, \cdots, p_N)$$

svarer i kvantemek. en lineær operator

$$\hat{F}(\hat{q}_1, \hat{q}_2, \cdots, \hat{q}_N, \hat{p}_1, \hat{p}_2, \cdots, \hat{p}_N),$$

der

$\hat{q}_j = q_j$ = operator for posisjonskoordinat q_j

$\hat{p}_j = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q_j}$ = ——"—— impuls ——"—— p_j

$(j = 1, 2, \cdots, N)$

Eks: 1 partikkel i 1D boks

$N = 1$

$\hat{q}_1 = q_1 = x$; $\hat{p}_1 = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$

Eks: $L_z = (\vec{r} \times \vec{p})_z = x p_y - y p_x$; $\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$

B: Tilstandspostulat

- Et systems tilstand er fullstendig beskrevet ved en bølgefunksjon $\Psi(q_1, q_2, \dots, q_N, t)$ med tidsutvikling bestemt av Schrödingerligningen

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi$$

der $\hat{H}$ er systemets Hamiltonoperator.

- Eks: 1D boks $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$; $V(x) = \begin{cases} 0 & (0<x<L) \\ \infty & (x<0, x>L) \end{cases}$

C: Forventningsverdipostulat

Forventningsverdien til en målbar størrelse F ("observabel") er

$$\langle F \rangle = \int \Psi^* \hat{F} \Psi \, d\tau$$

der $d\tau = dq_1 dq_2 \cdots dq_N$ og $\int |\Psi|^2 d\tau = 1$.

Dvs: <u>Mange</u> målinger av F på systemer som alle er preparert i tilstand Ψ vil gi <u>middelverdi</u> som nærmer seg $\langle F \rangle$.

Eks: Grunntilstanden i 1D boks

$$\langle x \rangle = \int_0^L \Psi_1^* \, x \, \Psi_1 \, dx = \int_0^L x |\Psi_1|^2 dx = \underline{L/2}$$

$$\langle p \rangle = \int_0^L \Psi_1^* \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} \Psi_1 \, dx \sim \int_0^L \underbrace{\sin\frac{\pi x}{L}}_{\text{symm}} \underbrace{\cos\frac{\pi x}{L}}_{\text{antisymm}} dx = \underline{0}$$

D: Målepostulat

De eneste mulige verdier en måling av F kan gi er en av egenverdiene f_j, gitt ved $\hat{F}\Psi_j = f_j \Psi_j$. Etter måling av F som gav f_j havner systemet i egentilstanden Ψ_j.

Dvs, målingen påvirker systemet.

Eks: Anta at $\Psi(x,t_0) = c_1 \Psi_1(x,t_0) + c_2 \Psi_2(x,t_0)$.

En energimåling ved $t_1 > t_0$ må da gi E_1 eller E_2, ~~eller E_2,~~ med sannsynlighet hhv $|c_1|^2$ og $|c_2|^2$.

Hvis målingen gav E_2, er

$$\Psi(x, t > t_1) = \Psi_2(x,t)$$