Sjekk: $V_0 \to \infty$; partikkel i boks (s. 29)

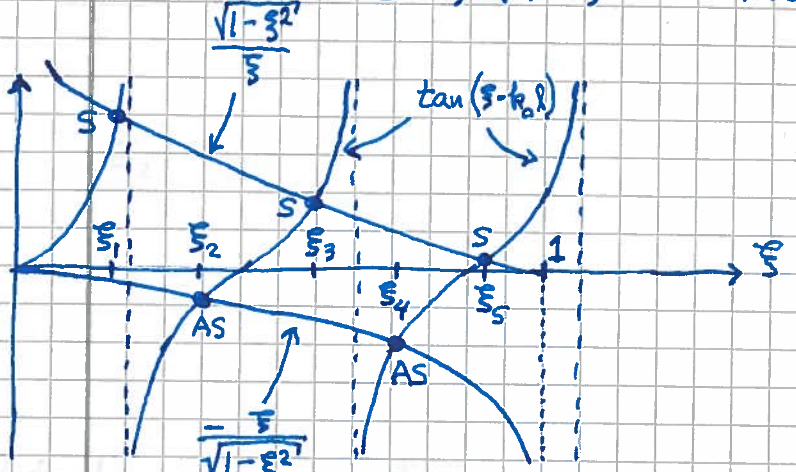
$$\tan \frac{\sqrt{2mE}\,\ell}{\hbar} = \begin{Bmatrix} \infty & (S) \\ 0 & (AS) \end{Bmatrix} \Rightarrow \frac{\sqrt{2mE}\,\ell}{\hbar} = \begin{cases} \pi/2,\ 3\pi/2, \dots & (S) \\ \pi,\ 2\pi, \dots & (AS) \end{cases}$$

$$\Rightarrow E_n = \frac{\hbar^2}{2m\ell^2} \cdot \left(\frac{n\pi}{2}\right)^2 \overset{L=2\ell}{=} \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2} \cdot n^2 \quad ; \quad n = 1, 2, 3, \dots \qquad \text{OK !}$$

Antall bundne Løsninger:

$$E < V_0 \Rightarrow \xi = \sqrt{E/V_0}\,, \quad 0 < \xi < 1 \quad ; \quad k_0 = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}$$

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



Her: 5 bundne tilst. med energi

$$E_n = V_0\, \xi_n^2 \quad (n = 1, \dots, 5)$$

- Minst 1 symm. løsn. ($\sqrt{1-\xi^2}/\xi$ må krysse $\tan(\xi k_0 \ell)$)
- Bare 1 løsn. hvis $k_0 \ell < \pi/2$; da ligger $\xi = 1$ til venstre for 1. asymptote til $\tan(\xi k_0 \ell)$
- 2 løsn. hvis $\frac{\pi}{2} < k_0 \ell < \pi$; da ligger $\xi = 1$ til venstre for 1. nullpunkt til $\tan(\xi k_0 \ell)$
- N løsn. hvis $\frac{(N-1)\pi}{2} < k_0 \ell < \frac{N\pi}{2} \Rightarrow N < \frac{2k_0\ell}{\pi} + 1 < N+1$

$\Rightarrow \underline{N} = 1$ + største heltall som er mindre enn $2k_0\ell/\pi$

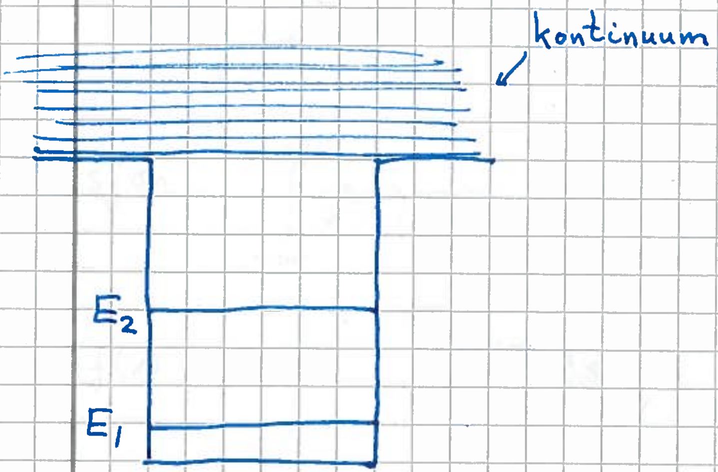
$$= 1 + \left[\frac{2k_0\ell}{\pi}\right] = \underline{1 + \left[\frac{2\ell\sqrt{2mV_0}}{\pi\hbar}\right]} \quad \left(\begin{matrix}\text{dvs: } \underline{\text{øker}} \\ \text{med } \ell \text{ og } V_0\end{matrix}\right)$$

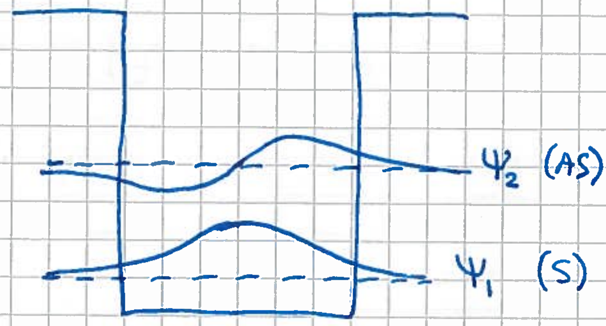
- $|\psi|^2 > 0$ for $|x| > \ell$, dvs part. kan være i <u>klassisk forbudt</u> område ($E < V_0$)

$E > V_0$: Ubundne tilstander

Nå er $\psi(x) = a \sin Kx + b \cos Kx$ for $|x| > \ell$, med $K = \sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar$; denne kan "matches" med $C \sin kx + D \cos kx$ i $x = \pm \ell$ (kont. ψ og ψ') for alle verdier av $E > V_0$.

Dvs, spekteret er kontinuerlig for $E > V_0$





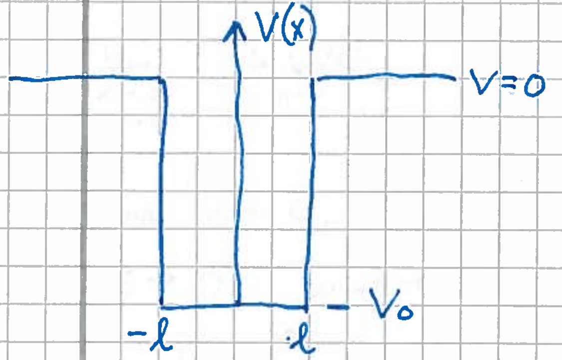
Bølgefunksjonene "trenger inn" i det klassisk forbudte området.

Inntrengningsdybde : $\varkappa_j^{-1} = \dfrac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E_j)}}$; $j = 1, 2, \cdots$

dvs $\left| \dfrac{\psi(\ell + \varkappa_j^{-1})}{\psi(\ell)} \right| = 1/e$

Deltafunksjonspotensial

[PCH 3.4, App B; DJG 2.5; IØ 3.3, 2.4.f]



Grensetilfellet

$V_0 \to \infty, \quad \ell \to 0$

med endelig $\beta = 2V_0\ell$

kan beskrives med Diracs deltafunksjon $\delta(x)$

Definisjon: $$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,\delta(x)\,dx = f(0) \qquad [f(x) \text{ kontinuerlig i } x=0]$$

Hvis $f(x) = 1$: $$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)\,dx = 1$$

Kun $f(0)$ avgjør verdien av $\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,\delta(x)\,dx$

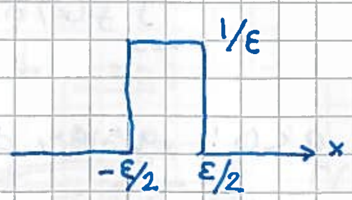
$\Rightarrow$ vi må ha $\delta(x) = 0$ for $x \neq 0$

Hvis $\delta(0)$ er endelig, er da $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)\,dx = 0$

$\Rightarrow$ vi må ha $\delta(0) = \infty$

Kan representere $\delta(x)$ med "vanlige" funksjoner.

Eks 1: $$\delta_\varepsilon(x) = \begin{cases} 1/\varepsilon & ; \quad |x| \leq \varepsilon/2 \\ 0 & ; \quad |x| > \varepsilon/2 \end{cases}$$



Da er $$\lim_{\varepsilon \to 0} \delta_\varepsilon(x) = \begin{cases} \infty & ; \quad x = 0 \\ 0 & ; \quad x \neq 0 \end{cases},$$ som påkrevd

Dessuten: $$\int_{-\infty}^{\infty} \delta_\varepsilon(x)\,dx = \frac{1}{\varepsilon} \cdot 2 \cdot \frac{\varepsilon}{2} = 1,$$ som påkrevd

Dvs: $$\delta(x) = \lim_{\varepsilon \to 0} \delta_\varepsilon(x)$$

Eks 2: $\delta_\varepsilon(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-1/\varepsilon}^{1/\varepsilon} e^{ikx}\,dk$

$$= \frac{1}{2\pi i x}\left(e^{ix/\varepsilon} - e^{-ix/\varepsilon}\right) = \frac{\sin(x/\varepsilon)}{\pi x}$$

$$\lim_{\substack{x\to 0\\ \varepsilon\to 0}} \frac{\sin(x/\varepsilon)}{\pi x} = \lim_{\varepsilon\to 0}\frac{1/\varepsilon}{\pi} = \infty$$

Hvis $x \neq 0$, vil $\sin(x/\varepsilon)/\pi x$ oscillere uendelig raskt når $\varepsilon \to 0$, unntatt i (umiddelbar nærhet av) $x = 0$, slik at

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\sin(x/\varepsilon)}{\pi x}\cdot f(x)\,dx = f(0)\cdot\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\sin(x/\varepsilon)}{\pi x}\,dx}_{=1} = f(0)$$

Dermed: $\delta(x) = \lim_{\varepsilon\to 0}\delta_\varepsilon(x)$

$$\Rightarrow \boxed{\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx}\,dk}$$

Fourier-representasjon av $\delta(x)$

Noen ~~nyttige egenskaper~~ ved $\delta(x)$:

- Substituér $y = -x$; da er $dx = -dy$ og

$$\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x)\,dx = \int_{\infty}^{-\infty}\delta(-y)(-dy) = \int_{-\infty}^{\infty}\delta(-y)\,dy$$

Dermed: $\boxed{\delta(-x) = \delta(x)}$ (slik at $\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{\pm ikx}\,dk$)

- Subst. $y = ax$; $dy = a\,dx$ (anta $a > 0$)

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,\delta(ax)\,dx = \int_{-\infty}^{\infty} f\left(\frac{y}{a}\right)\delta(y)\,\frac{dy}{a} = f(0)/a = \frac{f(0)}{|a|}$$

dvs $\delta(ax)$ gir samme resultat som $\delta(x)/|a|$ når $a > 0$.

Hvis $a < 0$, får vi

$$\int_{+\infty}^{-\infty} f(y/a)\,\delta(y)\,dy/a = \int_{-\infty}^{\infty} f(y/a)\,\delta(y)\,dy/(-a) = f(0)/(-a) = f(0)/|a|$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\,\delta(x)} \qquad \text{(uavh. av fortegn på } a\text{)}$$

- Tredimensjonal deltafunksjon; defineres ved

$$\int f(\vec{r})\,\delta(\vec{r})\,d^3r = f(0) \qquad (= f(0,0,0))$$

dvs $\delta(\vec{r}) = 0$ unntatt når $x = y = z = 0$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\delta(\vec{r}) = \delta(x)\cdot\delta(y)\cdot\delta(z)}$$

<u>Fysisk relevans</u> av δ-funksjonen:

- Ladningstetthet for punktladning q i posisjon $\vec{r} = \vec{a}$:

$$\rho(\vec{r}) = q\cdot\delta(\vec{r}-\vec{a})$$

Da er total ladning korrekt ivaretatt:

$$\int \rho(\vec{r})\,d^3r = q\int\delta(\vec{r}-\vec{a})\,d^3r = q\cdot 1 = q \quad ; \text{ OK!}$$

Tilsvarende for punktmasse.

- Kortvarig puls ved tid T kan uttrykkes med $\delta(t-T)$

<u>Enhet:</u>

Siden $\int\delta(x)\,dx = 1$ og $\int\delta(\vec{r})\,d^3r = 1$, må

$[\delta(x)] = \frac{1}{[dx]} = m^{-1}$ (hvis x er lengde) og $[\delta(\vec{r})] = m^{-3}$

Deltafunksjons-normering

Vi så at plane bølger for fri partikkel med impuls p,

$$\psi_p(x) = C\, e^{ipx/\hbar}$$

ikke er normerbare i vanlig forstand, siden

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_p(x)|^2 dx = |C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx = \infty$$

Men vi har

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_p^*(x)\,\psi_{p'}(x)\,dx = |C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p'-p)x/\hbar}\,dx =$$

$$= |C|^2\hbar \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p'-p)y}\,dy = |C|^2\hbar \cdot 2\pi \cdot \delta(p'-p)$$

$\Rightarrow$ Hvis vi velger $C = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$, har vi såkalt

<u>δ-funksjonsnormering</u> av tilstandene $\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, e^{ipx/\hbar}$

i den kontinuerlige delen av energispekteret, dvs

$$\boxed{\langle \psi_p, \psi_{p'} \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \psi_p^*(x)\,\psi_{p'}(x)\,dx = \delta(p'-p) = \delta(p-p')}$$

Tilbake til "δ-brønnen", $V_0 \to \infty$, $\ell \to 0$, endelig $\beta = 2V_0\ell$. Kan nå skrive

$$V(x) = -\beta\,\delta(x)$$

$x \neq 0$: $\quad V(x) = 0$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' = E\psi \quad \Rightarrow \quad \psi'' = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = \kappa^2\psi$$

med $\kappa^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{2m|E|}{\hbar^2}$, og med akseptabel løsning (endelig $|\psi|$ overalt; ψ kontinuerlig i $x=0$)

$$\psi(x) = \begin{cases} C\,e^{-\kappa x} & ; \quad x > 0 \\ C\,e^{\kappa x} & ; \quad x < 0 \end{cases}$$

Triks: Siden TUSL inneholder leddet $V(x)\psi(x) = -\beta\delta(x)\psi(x)$, velger vi å integrere TUSL "gjennom $x=0$", dvs fra $-\varepsilon$ til $+\varepsilon$. Til slutt lar vi $\varepsilon \to 0$ og oppdager at dette fastlegger κ, og dermed energien E til den bundne tilstanden!

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

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

$$\Rightarrow \underbrace{\lim_{\varepsilon\to 0}\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\frac{d}{dx}\psi'(x)\,dx}_{=\psi'(0^+)-\psi'(0^-)} = \underbrace{\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{2m}{\hbar^2}\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}(-\beta)\delta(x)\psi(x)\,dx}_{= -\frac{2m\beta}{\hbar^2}\psi(0)} - \underbrace{\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{2m}{\hbar^2}E\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\psi(x)\,dx}_{=0}$$

Med $\psi(x) = C_1 e^{\pm \varkappa x}$ $(x \lessgtr 0)$ er

$\psi(0) = C_1$, $\psi'(0^+) = -\varkappa C_1$, $\psi'(0^-) = \varkappa C_1$ slik at

$-2\varkappa C_1 = -\frac{2m\beta}{\hbar^2} C_1$, dvs $\varkappa = m\beta/\hbar^2$, og

$$E = -\frac{\hbar^2 \varkappa^2}{2m} = \underline{\underline{-\frac{m\beta^2}{2\hbar^2}}}$$

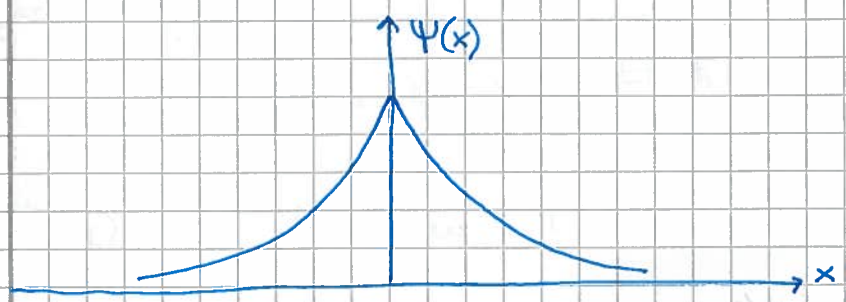
Dvs, kun <u>en</u> bundet tilstand i en slik δ-brønn.

Fra før (s. 28): Diskontinuerlig $d\psi/dx$ der $V(x)$ gjør uendelig sprang.

Her: $\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = -\frac{2m\beta}{\hbar^2}\psi(0)$

Normert bølgefunksjon for den bundne tilstanden:

$$\psi(x) = \frac{\sqrt{m\beta}}{\hbar} \exp(-m\beta|x|/\hbar^2)$$

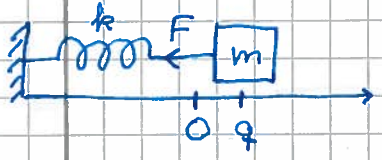


$E > 0$: Kontinuerlig spektrum, med $\psi(x)$ som for fri partikkel, fortsatt med diskontinuerlig $d\psi/dx$ i $x = 0$.

Harmonisk oscillator

[PCH 3.5 ; DJG 2.3.2 ; IØ 3.4]

Klassisk :



$$F(q) = -kq \quad \Rightarrow \quad V(q) = \tfrac{1}{2} k q^2 = \tfrac{1}{2} m \omega^2 q^2$$

$$q(t) = A \cos(\omega t + \varphi) \; ; \quad \omega = \sqrt{k/m}$$

$$E = V_{max} = \tfrac{1}{2} k A^2 = \tfrac{1}{2} m \omega^2 A^2$$

Relevans:

Alle problemer der et eller annet svinger omkring en likevektstilstand, f.eks. vibrasjoner i molekyler og krystaller.

QM :

Med tidsuavh. $V(q)$ har vi stasjonære tilstander som løsninger av SL,

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

der $\psi(q)$ er løsn. av TUSL,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dq^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 q^2 \psi = E\psi ,$$

[symm. $V(q) \Rightarrow$ må ha symm. og antisymm. $\psi(q)$]

som kan formuleres på dimensjonsløs form,

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + (\varepsilon - x^2)\psi = 0 ,$$

med $x \equiv q\sqrt{m\omega/\hbar}$ og $\varepsilon \equiv E/(\hbar\omega/2)$.

Vi ser at $\psi_0(x) = C_0\, e^{-x^2/2}$ løser TUSL, med $\varepsilon_0 = 1$, dvs $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$, siden $(e^{-x^2/2})'' = -e^{-x^2/2} + x^2 e^{-x^2/2}$.

Og ψ_0 må være grunntilstanden, da den er symmetrisk og uten nullpunkter.

Normering: $\int_{-\infty}^{\infty} C_0^2 \, e^{-m\omega q^2/\hbar} \, dq = 1$; $x = q\sqrt{m\omega/\hbar}$

$$\Rightarrow \quad C_0^2 \cdot \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \cdot \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx}_{=\sqrt{\pi}} = 1 \quad \Rightarrow \quad C_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}$$

Vi fristes nå til å prøve $\psi_1(x) = C_1 \, x \, e^{-x^2/2}$ som 1. eksiterte tilstand (pga ett nullpunkt, og antisymmetrisk):

$$(\psi_1)'' = C_1 \, e^{-x^2/2} \, (x^3 - 3x)$$

$$\Rightarrow \quad C_1 (x^3 - 3x) e^{-x^2/2} + C_1 (\varepsilon_1 x - x^3) e^{-x^2/2} = 0$$

dvs: ψ_1 er løsning, med $\varepsilon_1 = 3$, dvs $E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega$

Vi fristes videre til å prøve som generell løsning

$$\psi(x) = v(x) \, e^{-x^2/2},$$

der vi vet at $v_0 = C_0$ og $v_1(x) = C_1 x$, så vi satser på polynom (potensrekke)

$$v(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k$$

Vi vet at $v_0 = C_0 = a_0$, $v_1 = C_1 x = a_1 x$, og mistenker at $v_n(x)$ er et polynom av orden n, dvs at potensrekka for $v_n(x)$ bryter av fra og med a_{n+1}, dvs $a_{n+1} = a_{n+2} = \dots = 0$ i $v_n(x)$. Dette viser seg å stemme.

"Ansatz"-en $\psi(x) = v(x)\exp(-x^2/2)$ gir:

$$\psi'' = \left(v' e^{-x^2/2} - x v e^{-x^2/2}\right)'$$

$$= \left(v'' - x v' - x v' - v + x^2 v\right) e^{-x^2/2}$$

som innsatt i TUSL gir

$$\left(v'' - 2x v' - v + x^2 v + \varepsilon v - x^2 v\right) e^{-x^2/2} = 0$$

dvs en 2. ordens diff. lign. for $v(x)$:

$$v'' - 2x v' + (\varepsilon - 1) v = 0$$

Vi setter inn $v = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k$, $v' = \sum_{k=1}^{\infty} a_k k x^{k-1} = \sum_{k=0}^{\infty} a_{k+1} \cdot (k+1) \cdot x^k$

og $v'' = \sum_{k=2}^{\infty} a_k k(k-1) x^{k-2} = \sum_{k=0}^{\infty} a_{k+2} (k+2)(k+1) x^k$:

$$\sum_{k=0}^{\infty} \underbrace{\left\{ a_{k+2}(k+2)(k+1) - 2a_k \cdot k + (\varepsilon - 1) a_k \right\}}_{=0 \text{ for alle } k} x^k = 0$$

$$\Rightarrow \quad a_{k+2} = \frac{2k + 1 - \varepsilon}{(k+1)(k+2)} \cdot a_k \quad ; \quad k = 0, 1, 2, \ldots$$

Normering av ψ_0 og ψ_1 gir hhv a_0 og a_1, som videre gir hhv $a_2, a_4, a_6, \ldots$ og $a_3, a_5, a_7, \ldots$

<u>Hvorfor</u> må begge disse rekkene <u>bryte av</u>?

Hvis ikke, vil $a_{k+2}/a_k \approx 2/k$ for store k, noe som gir

$$v(x) \sim e^{x^2} = 1 + x^2 + \tfrac{1}{2}x^4 + \ldots = \sum_{k=0,2,4\ldots} \frac{x^k}{(k/2)!},$$

for da er nettopp

$$a_{k+2}/a_k = \frac{(k/2)!}{(\frac{k}{2}+1)!} = \frac{1}{\frac{k}{2}+1} \approx \frac{2}{k} \quad (k \gg 1)$$

Men i så fall er $\psi(x) = v(x)\exp(-x^2/2) \sim \exp(x^2/2)$, som divergerer når $|x| \to \infty$, som er <u>ufysisk</u>!

Rekkeavbrudd fordrer $2k+1-\varepsilon = 0$, dvs <u>ε = odde heltall</u>

$\varepsilon = 1 \Rightarrow a_2 = a_4 = a_6 = \ldots = 0$

og $a_1 = a_3 = a_5 = \ldots = 0$

($a_1 \neq 0$ ville <u>hindre</u> rekkeavbrudd !)

$\varepsilon = 3 \Rightarrow a_3 = a_5 = \ldots = 0$

og $a_0 = a_2 = a_4 = \ldots = 0$

($a_0 \neq 0$ ville hindre rekkeavbrudd)

$\varepsilon = 5 \Rightarrow a_4 = a_6 = \ldots = 0$ (og $a_1 = a_3 = \ldots = 0$)

$\varepsilon = 7 \Rightarrow a_5 = a_7 = \ldots = 0$ (og $a_0 = a_2 = \ldots = 0$)

$\vdots$

$\varepsilon = 2k+1 \Rightarrow$ polynom av orden k ; $k = 0, 1, 2, \ldots$

$$\Rightarrow \quad E_n = \frac{1}{2}\hbar\omega\,\varepsilon_n = \frac{1}{2}\hbar\omega\cdot(2n+1) = \underline{\underline{(n+1/2)\hbar\omega}} \quad ; \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

Tilhørende normerte egenfunksjoner (q = utsving fra likevekt) :

$$\psi_n(q) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n \cdot n!}}\, e^{-m\omega q^2/2\hbar}\, H_n\!\left(\frac{q}{\sqrt{\hbar/m\omega}}\right)$$

Hermite-polynomene:

$H_0(x) = 1$, $H_1(x) = 2x$,

$H_2(x) = 4x^2 - 2$,

$H_3(x) = 8x^3 - 12x$, ...