$V_0 \to \infty$ gir E for partikkel i boks:

$$\tan \frac{\sqrt{2mE}\,\ell}{\hbar} = \begin{cases} \infty & (S) \\ 0 & (AS) \end{cases} \Rightarrow \frac{\sqrt{2mE}\,\ell}{\hbar} = \begin{cases} \pi/2,\ 3\pi/2, \ldots & (S) \\ \pi,\ 2\pi, \ldots & (AS) \end{cases} \qquad (k=0 \Rightarrow \psi = 0 \Rightarrow \text{ikke aktuell})$$

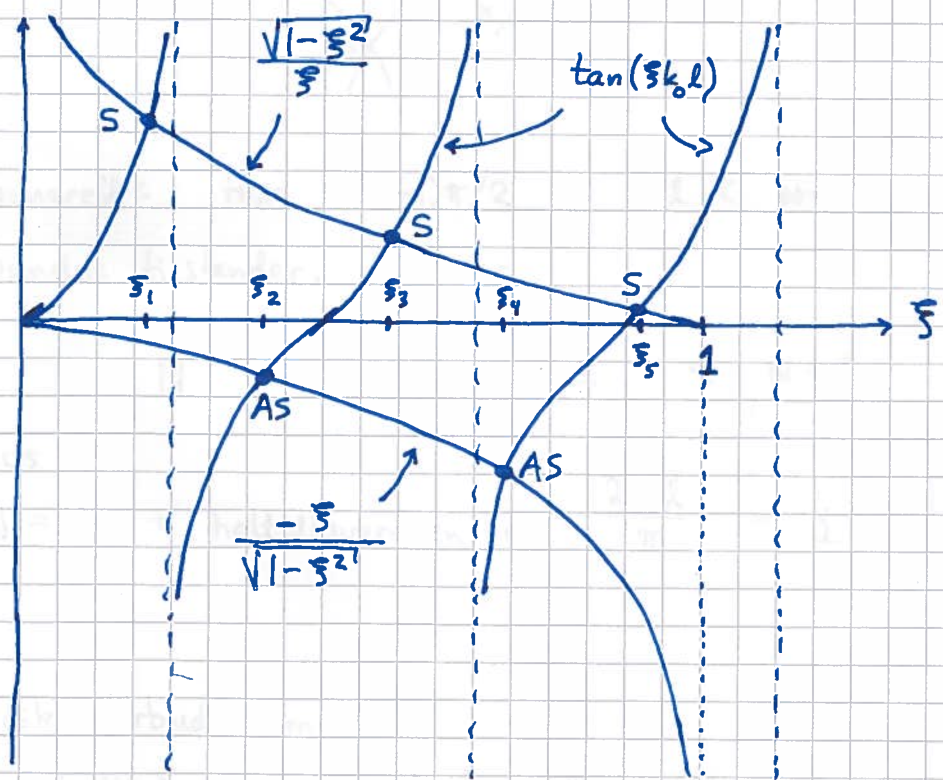
$$\Rightarrow E_n = \frac{\hbar^2}{2m\ell^2}\left(\frac{n\pi}{2}\right)^2 \overset{L=2\ell}{=} \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\cdot n^2 \qquad (n = 1, 2, 3, 4, \ldots)$$

Hvor mange bundne løsninger med endelig brønndybde V_0?

Innfører $\xi = \sqrt{E/V_0}$ $(0 < \xi < 1)$ og $k_0 = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}$

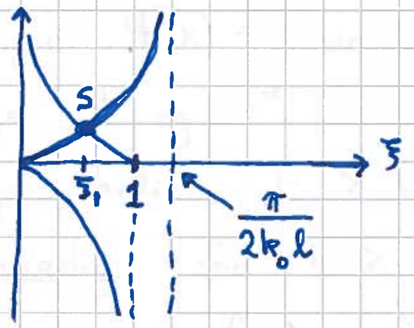
$$\Rightarrow \tan(\xi \cdot k_0 \ell) = \begin{cases} \sqrt{1-\xi^2}/\xi & (S) \\ -\xi/\sqrt{1-\xi^2} & (AS) \end{cases}$$

Dette er transcendente ligninger, uten analytiske løsninger, så vi ser på uttrykkene grafisk:



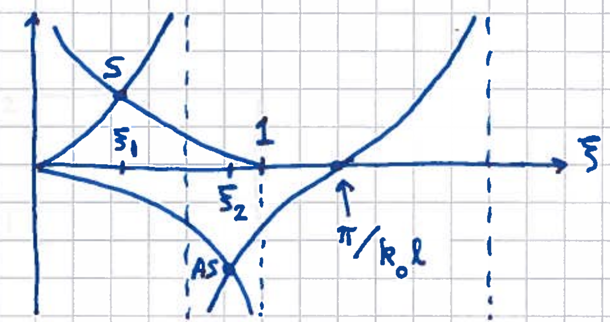
- Alltid <u>minst en</u> symmetrisk løsning, siden $\frac{\sqrt{1-\xi^2}}{\xi}$ må krysse $\tan(\xi k_0 \ell)$ minst en gang. (I figuren: Fem bundne tilstander.)

- Hvis $k_0 \ell < \pi/2$, ligger $\xi = 1$ til venstre for første asymptote til $\tan(\xi k_0 \ell)$:



$\Rightarrow$ Kun en løsning

Hvis $\pi/2 < k_0 \ell < \pi$, ligger $\xi = 1$ mellom 1. asymptote og 1. nullpunkt til $\tan(\xi k_0 \ell)$:



$\Rightarrow$ To løsninger

Generelt: Hvis $(N-1)\pi/2 < k_0 \ell < N\pi/2$, har vi N bundne tilstander. Da er

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

dvs

$$N = 1 + \text{heltallsverdien av } \frac{2k_0\ell}{\pi} = 1 + \left[\frac{2\sqrt{2mV_0}\,\ell}{\pi\hbar}\right]$$

Klassisk forbudt område:

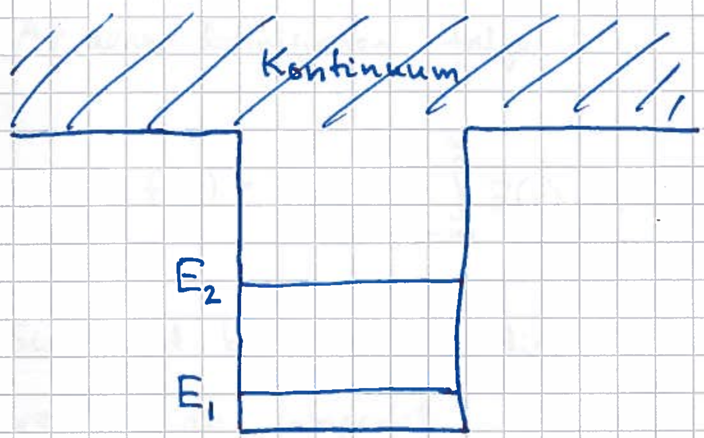
Vi har $\psi(x) \sim \exp(-\varkappa|x|)$ for $|x| > \ell$, der $E < V_0$. Dvs, $|\psi|^2 > 0$, som betyr at det er en viss sjanse for at partikkelen befinner seg i det klassisk forbudte området.

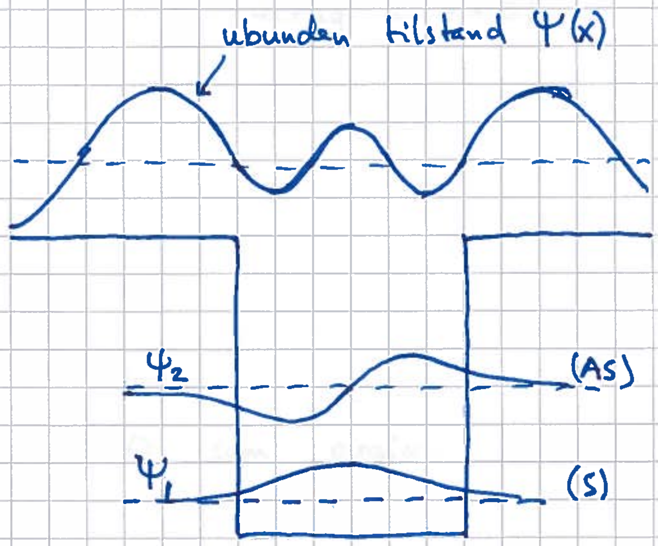
$E > V_0$: Ubundne tilstander

For $|x| > \ell$ er nå TUSL $\psi''(x) = -\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}\psi(x)$,

med løsninger $\psi(x) = a \sin Kx + b \cos Kx$; $K = \sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar$.

Kontinuerlige ψ og ψ' i $x = \pm \ell$ kan nå oppnås med **alle** mulige verdier $E > V_0$. Med andre ord, spekteret er **kontinuerlig** for $E > V_0$.





Bølgefunksjonene for bundne tilstander "trenger inn" i det klassisk forbudte området:

$$\psi_j \sim \exp(-\varkappa_j |x|)$$

Naturlig å definere inntrengningsdybden som

$$\varkappa_j^{-1} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E_j)}} \quad ; \quad j = 1, 2, \ldots$$

slik at

$$\left| \frac{\psi(\ell + 1/\varkappa_j)}{\psi(\ell)} \right| = \frac{1}{e}$$

Deltafunksjonspotensial

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

Hvis potensialbrønnen er <u>dyp</u> og <u>smal</u>, dvs $V_0 \to \infty$ og $\ell \to 0$, kan den beskrives med <u>Diracs deltafunksjon</u> $\delta(x)$.

Definisjon : $\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,\delta(x)\,dx = f(0)}$ (når $f(x)$ er kontinuerlig i $x=0$)

Av denne definisjonen følger :

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

- Siden det bare er verdien av $f(x)$ i $x=0$ som avgjør verdien av integralet

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,\delta(x)\,dx ,$$

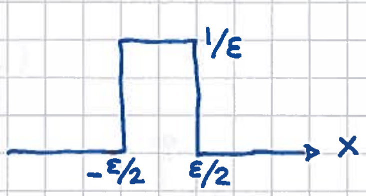
må $\delta(x) = 0$ når $x \neq 0$

- Hvis $\delta(0)$ hadde vært endelig, ville $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)\,dx$ ha blitt lik null.

Følgelig er $\delta(0) = \infty$

- $\delta(x)$ er dermed ikke en "ordinær" funksjon, men den kan <u>representeres</u> med ordinære funksjoner

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



Da er $\delta(x) = \lim\limits_{\varepsilon \to 0} \delta_\varepsilon(x)$:

$$\left.\begin{array}{l} \lim\limits_{\varepsilon\to 0} \delta_\varepsilon(x) = \begin{cases} \infty & ; \quad x = 0 \\ 0 & ; \quad x \neq 0 \end{cases} \\ \displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \delta_\varepsilon(x)\, dx = \frac{1}{\varepsilon} \int_{-\varepsilon/2}^{\varepsilon/2} dx = \frac{1}{\varepsilon} \cdot \varepsilon = 1 \end{array}\right\} \text{ ok}$$

Eks 2: Fourier-representasjon av $\delta(x)$

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

Da er $\delta(x) = \lim\limits_{\varepsilon \to 0} \delta_\varepsilon(x) = \dfrac{1}{2\pi} \displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx}\, dk$:

Integralet er: $\delta_\varepsilon(x) = \dfrac{1}{2\pi i x} \left(e^{ix/\varepsilon} - e^{-ix/\varepsilon} \right) = \dfrac{\sin(x/\varepsilon)}{\pi x}$

og $\lim\limits_{\substack{x \to 0 \\ \varepsilon \to 0}} \dfrac{\sin(x/\varepsilon)}{\pi x} = \lim\limits_{\varepsilon \to 0} \dfrac{1/\varepsilon}{\pi} = \infty$

Men er <u>definisjonen</u> oppfylt? Ja: Når $\varepsilon \to 0$ vil $\sin(x/\varepsilon)/\pi x$ oscillere uendelig raskt, unntatt i $x = 0$, slik at

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

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

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

$$\Rightarrow \boxed{\delta(-x) = \delta(x)} \qquad \left(\text{og} \quad \delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{\pm ikx}\,dk\right)$$

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

Hvis $a<0$, fås $\int_{\infty}^{-\infty} f\left(\frac{y}{a}\right)\delta(y)\,\frac{dy}{a} = -\frac{f(0)}{a}$, slik at

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,\delta(ax)\,dx = \frac{f(0)}{|a|}}$$

Med andre ord: $\boxed{\delta(ax) = \delta(x)/|a|}$

- I flere dimensjoner, f.eks tre, defineres $\delta(\vec{r})$ ved

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

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

og $\delta(\vec{r}) = 0$ ellers.

Da er det klart (?) at $\boxed{\delta(\vec{r}) = \delta(x)\cdot\delta(y)\cdot\delta(z)}$

- δ-funksjonens enhet:

Siden $\int \delta(x)\,dx = 1$ må $[\delta(x)] = \frac{1}{[dx]} = m^{-1}$ (når x er en lengde)

Videre: $\int \delta(\vec{r})\,d^3r = 1 \Rightarrow [\delta(\vec{r})] = m^{-3}$

Eksempler på bruk av δ-funksjonen i fysikk:

- Punktladning q betyr uendelig ladningstetthet i et punkt, og null ellers $\Rightarrow$ $\rho(\vec{r}) = q \cdot \delta(\vec{r} - \vec{a})$ når q er i $\vec{r} = \vec{a}$

  Total ladning:

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

- Tilsvarende for en punktmasse.
- Og tilsvarende for en kortvarig puls, som kan uttrykkes ved $\delta(t-T)$; dvs puls ved tid $t = T$.

Normering med δ-funksjonen

Plane bølger for fri partikkel, $\psi_p(x) = C\, e^{ipx/\hbar}$, er ikke normerbare i vanlig forstand, fordi

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

Men (se Eks 2, s 56):

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

$$= |C|^2 \hbar \cdot 2\pi\, \delta(p'-p)$$

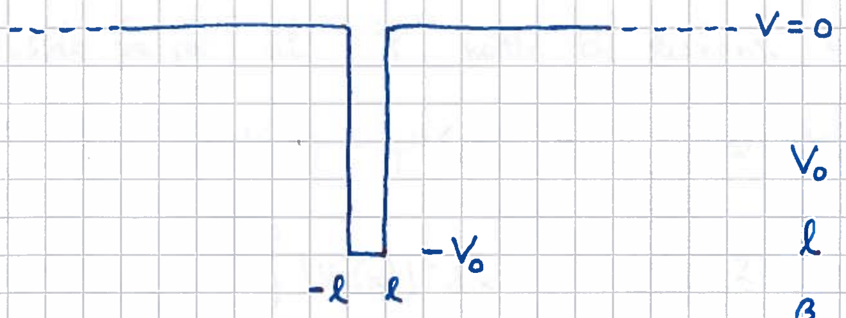
Det betyr at hvis vi velger $C = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$, har vi såkalt δ-funksjonsnormering av tilstandene

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, e^{ipx/\hbar}$$

i den kontinuerlige delen av energispekteret. Dvs:

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

δ - brønn :



$V_0 \to \infty$

$\ell \to 0$

$\beta = 2V_0 \ell$ endelig

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

$E<0$ (bundet tilstand):

$x \neq 0$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' = E\psi \quad \Rightarrow \quad \psi'' - \kappa^2\psi = 0 \quad ; \quad \kappa^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{2m|E|}{\hbar^2}$$

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

(endelig $|\psi|$ overalt og kont. ψ i $x=0$)

Bestemmer κ, og dermed energien E, ved å integrere TUSL fra $-\varepsilon$ til $+\varepsilon$ og la $\varepsilon \to 0$ til slutt :

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

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

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\frac{d}{dx}\psi'(x)\,dx = \lim_{\varepsilon\to 0}\left\{\psi'(\varepsilon) - \psi'(-\varepsilon)\right\} = \psi'(0^+) - \psi'(0^-)$$

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\frac{2m}{\hbar^2}(-\beta)\,\delta(x)\,\psi(x)\,dx = -\frac{2m\beta}{\hbar^2}\psi(0)$$

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\frac{2m}{\hbar^2}(-E)\,\psi(x)\,dx = 0$$

$$\Rightarrow \quad -\kappa C - \kappa C = -\frac{2m\beta}{\hbar^2}C \quad \Rightarrow \quad \kappa = \frac{m\beta}{\hbar^2}$$

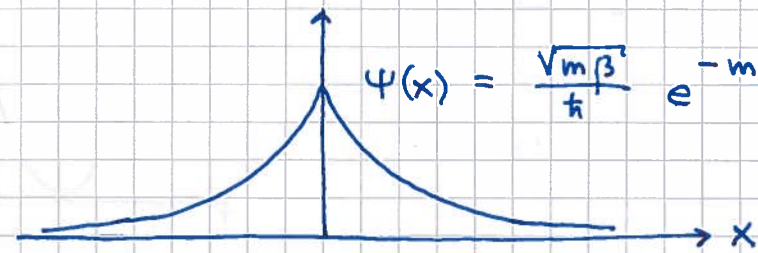
$$\Rightarrow \quad E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} = \underline{-\frac{m\beta^2}{2\hbar^2}}$$

Nøyaktig en bundet tilstand i en δ-brønn.

Visste fra før at ψ' måtte bli diskont. når V gjør uendelig sprang.

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

Normering, $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = |C|^2 \cdot 2\int_0^{\infty} e^{-2\kappa x} dx = 1$, gir

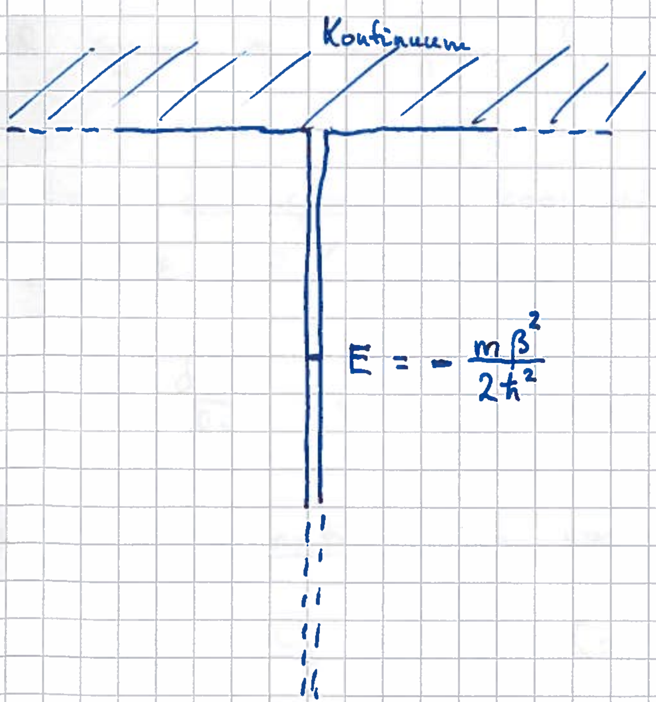


$\psi(x) = \frac{\sqrt{m\beta}}{\hbar} e^{-m\beta|x|/\hbar^2}$

$E > 0$:

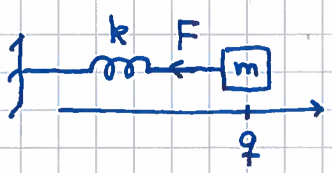
Ubundne tilstander, kontinuerlig spektrum.

Bølgefunk. ψ som for fri partikkel, med diskont. ψ' i $x = 0$.



Harmonisk oscillator [PCH 3.5 ; DJG 2.3.2 ; IØ 3.4]

(Påminnelse!)
Minner om klassisk oscillator:



$$F(q) = -kq \overset{N2}{\Rightarrow} \ddot{q} + \omega^2 q = 0 \quad ; \quad \omega^2 = \frac{k}{m}$$

$$\Rightarrow q(t) = A \cos \omega t$$

$$E = K + V = \tfrac{1}{2} k A^2 = \tfrac{1}{2} m \omega^2 A^2$$

$$V(q) = \tfrac{1}{2} k q^2 = \tfrac{1}{2} m \omega^2 q^2$$

Relevans: Alt som svinger om en likevekt.

Med tidsuavhengig potensial er løsn. av SL stasjonære tilstander,

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

der $\psi(q)$ er løsn. av TUSL,

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

med symm. og antisymm. ψ (siden V er symm).

Innfører <u>dimensjonsløs</u> koordinat $x = q\sqrt{m\omega/\hbar}$ og energi $\varepsilon = E / (\hbar\omega/2)$:

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

Vi finner <u>grunntilstanden</u> ved inspeksjon:

$$\psi_0(x) = C_0\, e^{-x^2/2} \quad \text{(symm. uten nullpunkter)}$$

$$\varepsilon_0 = 1 \quad ; \quad E_0 = \hbar\omega/2$$

$$\left(\text{Sjekk : } \psi_0'' = C_0\, e^{-x^2/2}(x^2-1) \; ; \; \text{OK}\right)$$

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

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

1. eksiterte tilstand er antisymm. med ett nullpunkt

$\Rightarrow$ Vi prøver $\psi_1(x) = C_1 \, x \, e^{-x^2/2}$, hvoretter innsetting i TUSL bekrefter mistanken og fastlegger tilhørende energi ε_1 :

$$\underbrace{C_1 (x^3 - 3x) e^{-x^2/2}}_{=\psi_1''} + C_1 (\varepsilon_1 x - x^3) e^{-x^2/2} = 0$$

$\Rightarrow \varepsilon_1 = 3$, dvs $E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega$

Vi prøver som generell løsning $\psi(x) = v(x) \, e^{-x^2/2}$, med polynom $v(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k$. Vet at $v_0 = C_0 = a_0$ og $v_1 = C_1 x = a_1 x$.

Mistenker derfor at for n. eksiterte tilstand $\psi_n(x)$ blir $v_n(x)$ polynom av orden n, dvs potensrekka bryter av, med $a_{n+1} = a_{n+2} = \dots = 0$.

Mistanken bekreftes ved innsetting i TUSL.

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

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

$$\Rightarrow \quad v'' - 2xv' + (\varepsilon - 1) v = 0$$