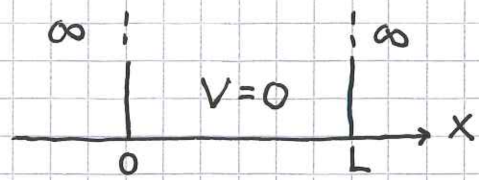
Partikkel i boks [PCH 3.2; DJG 2.2; IØ 2.1]

Partikkel med masse m i potensialet

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



Klassisk er $E = K = \frac{1}{2} m v^2$ med alle $E \geq 0$ tillatt.

Partikkelen går fram og tilbake mellom to harde vegger med $v = |\vec{v}| = \sqrt{2E/m}$.

QM:

SL har stasjonære løsninger $\Psi(x,t) = \psi(x)\, e^{-iEt/\hbar}$ med $\psi(x)$ og E hhv egenf. og egenv. til $\hat{H} = \hat{K} + V = (-\hbar^2/2m)\, d^2/dx^2 + V(x)$, dvs $\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$.

Utenfor boksen: $V = \infty \Rightarrow |\psi|^2 = 0 \Rightarrow \psi = 0$;
her kan partikkelen ikke være

Inni boksen: $V = 0 \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$
med $E = K \geq 0$. Med $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ er

$$\psi'' + k^2\psi = 0$$

med generell løsning

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

Rimelig å anta kontinuerlig sannsynlighetstetthet overalt, dvs kont. $|\psi|^2$ og ψ, slik at

$\psi(0) = 0$, som gir $B = 0$, dvs $\psi(x) = A \sin kx$

$\psi(L) = 0$, som nå gir $\sin kL = 0$

Gir <u>kvantisert energi</u>: $k_n \cdot L = n \cdot \pi$; $n = 1, 2, 3, \ldots$

$$\Rightarrow E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = n^2 \cdot \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$$

Hvis vi <u>vet</u> at partikkelen har en bestemt ("skarp") energi E_n, må tilhørende sanns. tetthet $|\psi_n(x)|^2$ være normert:

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

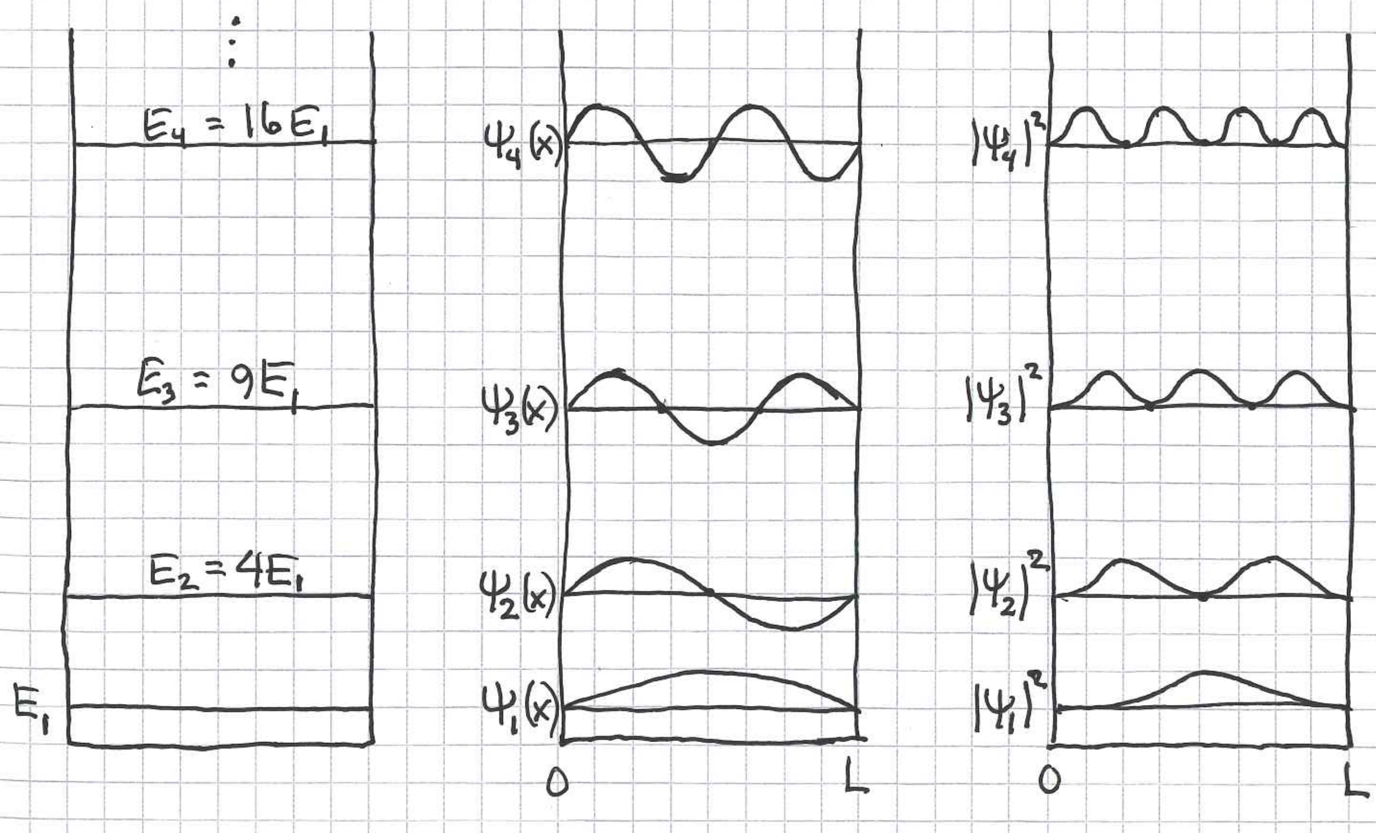
Siden $|\psi_n(x)|^2 = |A_n|^2 \sin^2 \frac{n\pi x}{L}$ oscillerer n hele perioder på $[0, L]$, med middelverdi $|A_n|^2/2$, må vi ha

$$\frac{1}{2}|A_n|^2 \cdot L = 1, \quad \text{dvs} \quad |A_n|^2 = \frac{2}{L}, \quad \text{dvs}$$

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

Den <u>fysiske</u> størrelsen $|\psi_n|^2$ er uavhengig av β_n, så vi velger (typisk) $\beta_n = 0$. Dvs:

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



Her er det <u>mye</u> å merke seg:

- Bølgefunksjonene $\psi_n(x)$ har samme form som stående bølger på en streng.

- Symmetriegenskaper: Med symmetrisk $V(x)$, her mhp $x = L/2$, er $\psi_n(x)$ symmetriske (odde n) eller antisymmetriske (like n) slik at $|\psi_n|^2$ blir symmetrisk for alle n, som den <u>må</u> være

- Nullpunkter: $\psi_n(x)$ har $n-1$ nullpunkter (i tillegg til $x=0$ og $x=L$, som skyldes grensebetingelsene). Dette viser seg å gjelde <u>generelt</u> for <u>bundne</u> tilstander, dvs når $E_n < V(\pm\infty)$ og $\psi_n(\pm\infty) = 0$.

- Grunntilstanden: Den tilstanden som tilsvarer lavest mulig energi. Her: $\psi_1(x) = \sqrt{2/L}\,\sin(\pi x/L)$ med energi $E_1 = \pi^2\hbar^2/2mL^2 > 0$.
  (Vi visste at $E=0$ ikke er mulig. <u>Hvis</u> $E=0$, er $\psi''(x) = 0$, dvs $\psi(x) = Ax + B$, som ikke kan gi både $\psi(0) = 0$ og $\psi(L) = 0$.)

- Grensebetingelser: Med TUSL på formen

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

ser vi at ψ'' må være <u>endelig</u> overalt 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 på dette stedet.
ψ selv er kontinuerlig overalt, slik at $|\psi|^2$ er kont. overalt.

- Krumning: Klassisk er $E \geq V$. Da er $\psi''/\psi \leq 0$, og ψ krummer mot x-aksen i klassisk tillatte områder. Områder med $E < V$ er klassisk forbudt, men tillatt i følge TUSL (med mindre $V = \infty$, selvsagt). Da er $\psi''/\psi > 0$, og ψ krummer bort fra x-aksen.

- Ortogonalitet:

  Et vektorsett $\{\vec{V}_i\}$ er ortonormert dersom

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

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

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

  Dette gjelder for partikkel i boks (sjekk selv!), og det gjelder (temmelig) generelt i QM (se feks. PCH kap. 2).

- Starttilstand $\Psi(x,0)$ og dens tidsutvikling:

  En gitt $\Psi(x,0)$ ved $t=0$ kan skrives som en lineærkombinasjon av systemets energiegenfunksjoner $\psi_n(x)$,

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

  der vi (for enkelhets skyld) antar et diskret spektrum. Tidsutviklingen er da gitt ved

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

  dvs en lin. komb. av stasjonære tilstander.

Koeffisientene c_n fastlegges ved å bruke at $\{\psi_n\}$ danner et ortonormert sett:

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

Hvis $\Psi(x,0)$ er normert:

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

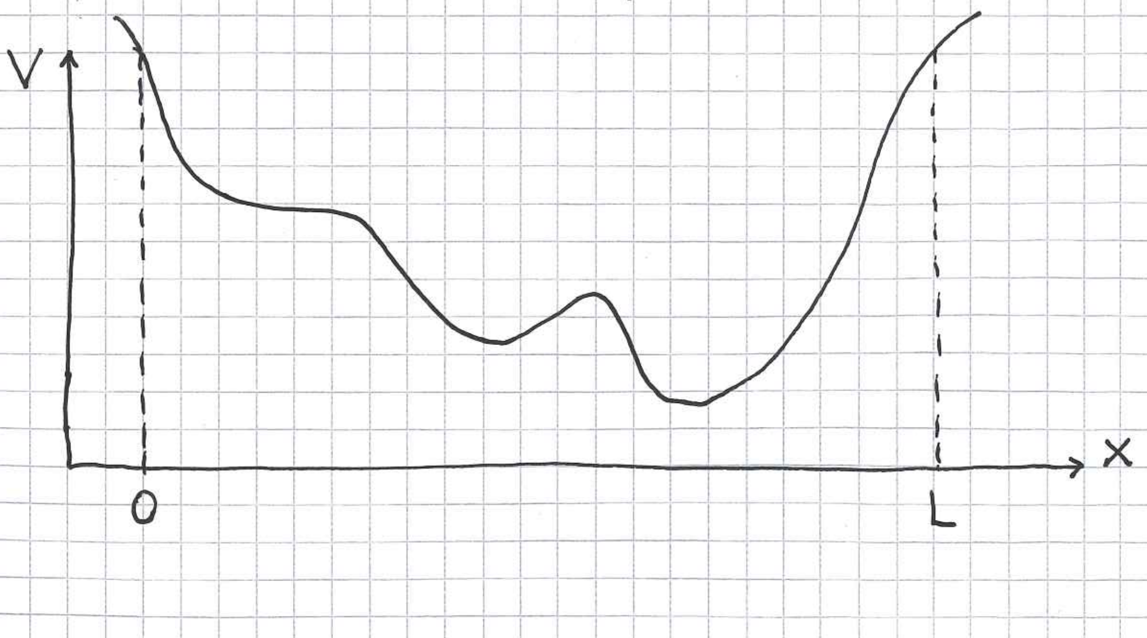
Da forblir $\Psi(x,t)$ normert:

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

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

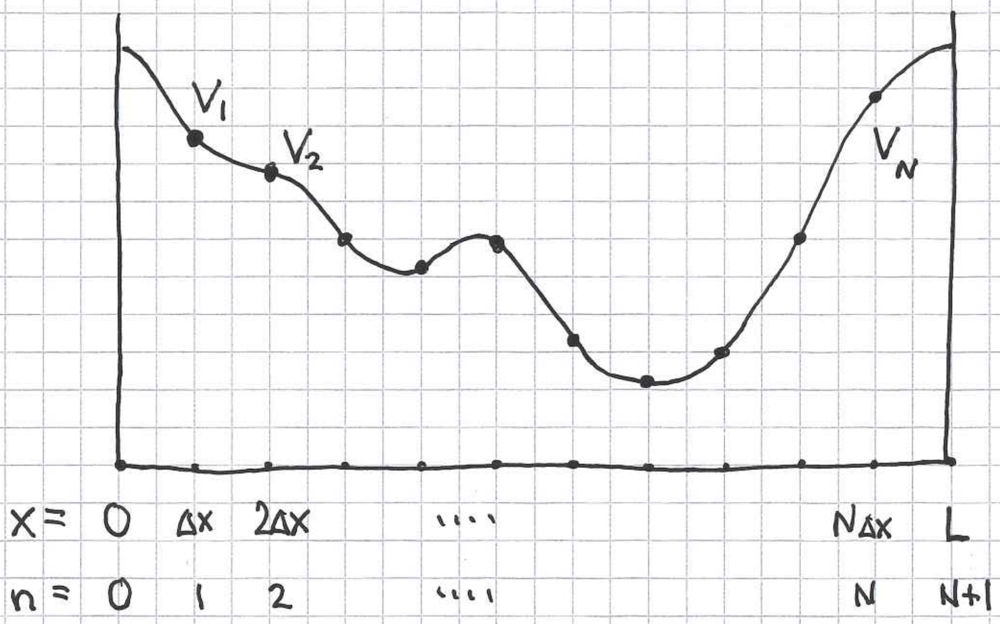
Numerisk Løsning av TUSL i 1D

Anta at vi ønsker å løse TUSL for en partikkel med masse m i et vilkårlig potensial $V(x)$:



Vi begrenser oss til bundne tilstander med energiegenverdier $E \ll V(0)$ og $E \ll V(L)$.
Da er $|\psi| \approx 0$ for $x < 0$ og $x > L$, og vi introduserer bare ubetydelige feil ved å sette $V = \infty$ for $x \leq 0$ og $x \geq L$, og dermed $\psi = 0$ for $x \leq 0$ og $x \geq L$.

Området $0 \leq x \leq L$ <u>diskretiseres</u>, dvs deles i $N+1$ (små) intervaller med bredde $\Delta x = L/(N+1)$; eventuelt $N+2$ punkter $x_n = n \cdot \Delta x$; $n = 0, 1, 2, \ldots, N+1$, med $V_n = V(x_n)$ og dermed $V_0 = V_{N+1} = \infty$.



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

$$\psi_n = \psi(x_n) \quad ; \quad \psi_0 = \psi_{N+1} = 0$$

$$\psi''(x_n) = \psi_n'' \approx \frac{\psi'_{n+1/2} - \psi'_{n-1/2}}{\Delta x}$$

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

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

$$(n = 1, 2, \ldots, N)$$

N ligninger for N ukjente $\Psi_1, \Psi_2, \ldots, \Psi_N$

På matriseform: $\quad \mathbb{H}\vec{\Psi} = E\vec{\Psi}$

Hamiltonmatrisen $\mathbb{H}$ er tridiagonal, reell og symmetrisk:

$H_{nn} = \dfrac{\hbar^2}{m(\Delta x)^2} + V_n$ langs diagonalen

$H_{n,n\pm 1} = -\dfrac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2}$ over og under diagonalen

Har ikke-trivielle løsninger, dvs $\vec{\Psi} \neq 0$, når

$$\det\left\{\mathbb{H} - E\,\mathbb{1}\right\} = 0$$

Gir N. gradsligning

$$c_N E^N + c_{N-1}E^{N-1} + \ldots + c_1 E + c_0 = 0$$

med N løsninger $E_1, E_2, \ldots, E_N$ og tilhørende egenvektorer $\vec{\Psi}^{(1)}, \vec{\Psi}^{(2)}, \ldots, \vec{\Psi}^{(N)}$

som bestemmes ved å løse

$$(\mathbb{H} - E_j\,\mathbb{1})\,\vec{\Psi}^{(j)} = 0 \quad ; \quad j = 1, 2, \ldots, N$$

Python: eigh_tridiagonal fra scipy

Gir N ortonormerte bølgefunksjoner:

$$\sum_{n=1}^{N} \Psi_n^{(j)} \cdot \Psi_n^{(k)} = \delta_{jk}$$

Danner et fullstendig sett, dvs

$$\sum_{j=1}^{N} \psi_\ell^{(j)} \cdot \psi_k^{(j)} = \delta_{\ell k}$$

som vi kan utvikle en vilkårlig starttilstand i:

$$\Psi(x_k, 0) = \Psi_k(0) = \sum_{j=1}^{N} c^{(j)} \psi_k^{(j)}$$

Mult. med $\psi_k^{(i)}$ og $\sum_k$ gir

$$\sum_k \psi_k^{(i)} \Psi_k(0) = \sum_j c^{(j)} \sum_k \psi_k^{(i)} \psi_k^{(j)} = \sum_j c^{(j)} \delta_{ij} = c^{(i)}$$

som innsatt i utviklingen av $\Psi_k(0)$ gir

$$\Psi_k(0) = \sum_j \sum_\ell \psi_\ell^{(j)} \Psi_\ell(0) \psi_k^{(j)} = \sum_\ell \Psi_\ell(0) \sum_j \psi_\ell^{(j)} \psi_k^{(j)}$$

For vilkårlig $\Psi_k(0)$ er dette kun oppfylt dersom

$$\sum_j \psi_\ell^{(j)} \psi_k^{(j)} = \delta_{\ell k}$$

som beviser fullstendighetsrelasjonen.

Med $c^{(j)}$ fastlagt kan vi studere tidsutviklingen,

$$\Psi_k(t) = \sum_j c^{(j)} \psi_k^{(j)} \exp(-iE_j t/\hbar)$$

og dermed forventningsverdier $\langle x \rangle(t)$ og $\langle p \rangle(t)$ osv.

Mer om dette etter hvert, og i num. øving 1 og 3.