Diracs deltafunksjon

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

Fysiske størrelser kan være sterkt lokalisert i rom eller tid. Eks:

- Punktmasse ; $\rho(\vec{r}) = ?$
- Punktladning ; $\rho(\vec{r}) = ?$
- Kortvarig kollisjon ; $\vec{F}(t) = ?$
- Smal potensialbrønn, evt. pot. barriere ; $V(x) = ?$

Kan da bruke Diracs deltafunksjon $\delta(x)$.
Defineres slik:

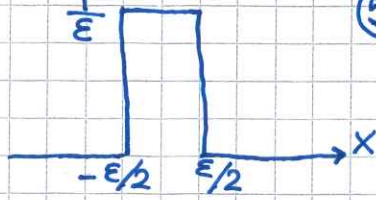
$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,\delta(x)\,dx = f(0)}$$

med $f(x)$ kontinuerlig i $x=0$

Egenskaper:

- $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)\,dx = 1$ [Sett $f(x)=1$. Da er $f(0)=1$]
- $\delta(x) = 0$ for $x \neq 0$ [$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x)\,dx$ er bare avh. av $f(0)$]
- $\delta(0) = \infty$ [Hvis $\delta(0)$ er endelig, blir $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)\,dx = 0$]
- $\delta(x)$ er altså ikke en ordinær funksjon, men kan representeres med ordinære funksjoner

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



$$\left.\begin{array}{l} \lim\limits_{\varepsilon \to 0} \delta_\varepsilon(x) = \begin{cases} \infty & ; \ x = 0 \\ 0 & ; \ x \neq 0 \end{cases} \\ \\ \int\limits_{-\infty}^{\infty} \delta_\varepsilon(x)\, dx = \frac{1}{\varepsilon} \cdot \varepsilon = 1 \end{array}\right\} \Rightarrow \delta(x) = \lim_{\varepsilon \to 0} \delta_\varepsilon(x)$$

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

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

$\frac{\sin(x/\varepsilon)}{\pi x}$ oscillerer med periode $2\pi\varepsilon$, dvs "uendelig raskt" når $\varepsilon \to 0$. Da "overlever" bare bidrag "uendelig nær" $x = 0$ i integralet

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin(x/\varepsilon)}{\pi x} f(x)\, dx = f(0) \lim_{\varepsilon \to 0} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin(x/\varepsilon)}{\pi x}\, dx \overset{\circledast}{=} f(0)$$

Med andre ord: $\lim\limits_{\varepsilon \to 0} \delta_\varepsilon(x) = \delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{ikx}\, dk$

Dette er en Fourier-representasjon av $\delta(x)$.

$\circledast$ $\int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin(x/\varepsilon)}{\pi x}\, dx = 2 \cdot \int\limits_{0}^{\infty} \frac{\sin(x/\varepsilon)}{\pi x}\, dx = 2 \cdot \frac{1}{2} = 1,$

uavhengig av ε. (Dette kan vises på flere måter.)

Flere egenskaper ved δ-funksjonen:

- $\delta(-x) = \delta(x)$. Vises med å substituere $y = -x$:

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

Dermed har vi $\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{\pm ikx}\,dk$

- $\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x)$. Vises med å substituere $y = ax$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(ax) f(x)\,dx = \begin{cases} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(y) f\left(\frac{y}{a}\right)\frac{dy}{a} = \frac{f(0)}{a} & (a>0) \\ \int_{\infty}^{-\infty} \delta(y) f\left(\frac{y}{a}\right)\frac{dy}{a} = -\frac{f(0)}{a} & (a<0) \end{cases}$$

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

- $\delta(\vec{r}) = \delta(x)\cdot\delta(y)\cdot\delta(z)$

Defineres i 3D analogt til def. i 1D:

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

dvs $\delta(\vec{r}) = \infty$ i origo $(x=y=z=0)$; $\delta(\vec{r}) = 0$ ellers

- δ-funksjonen og enheter:

Siden $\int \delta(x)\,dx = 1$, må vi ha $[\delta(x)] = [x]^{-1}$.

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

Dessuten: $[\delta(ax)] = [a]^{-1}\cdot[x]^{-1}$

Eks 1: Ladningstetthet for elektron i posisjon $\vec{a}$:

$$\rho(\vec{r}) = -e \cdot \delta(\vec{r}-\vec{a}) \quad ; \quad [\rho] = C/m^3 \quad (\text{OK})$$

Eks 2: Kraft på ball som kolliderer (kortvarig!) med en vegg:

$$\vec{F}(t) = \Delta\vec{p} \cdot \delta(t-t_0) \; ; \quad [F] = kg \cdot \frac{m}{s} \cdot \frac{1}{s} = N \quad (\text{OK})$$

($\Delta\vec{p}$ = impulsendring ; t_0 = kollisjonstidspunkt)

Eks 3: Normering med δ-funksjonen

Plane bølger, $\psi_k(x) = C\, e^{ikx}$, er egenfunk. til $\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$ med egenverdi $p = \hbar k$. Kan normeres slik:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_k^*(x)\psi_{k'}(x)\,dx = |C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(k'-k)x}\,dx = |C|^2 \cdot 2\pi \cdot \delta(k'-k)$$

Dvs, for frie partikler (den kontinuerlige delen av spekteret) har vi δ-funksjonsnormering når vi velger $C = 1/\sqrt{2\pi}$:

$$\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, e^{ikx}$$

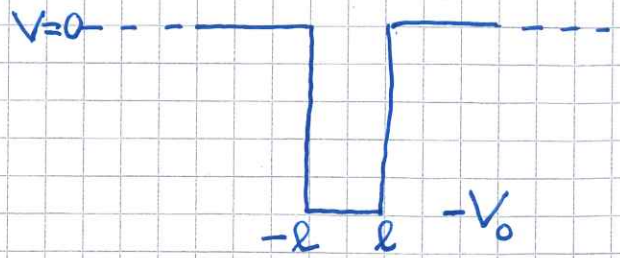
$$\langle \psi_k, \psi_{k'} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_k^*(x)\,\psi_{k'}(x)\,dx = \delta(k'-k) = \delta(k-k')$$

Eventuelt, med $p = \hbar k$:

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

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

Eks 4: δ - funksjonsbrønn



$V_0 \to \infty$; $\ell \to 0$

$\beta = 2\ell V_0$ endelig

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

Skal se at vi her har <u>en</u> bundet tilstand (dvs $E < 0$).

Når $x \neq 0$ er $V(x) = 0$:

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

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

Fastlegger $\varkappa$ og E ved å integrere TUSL "forbi $x = 0$", dvs fra $-\varepsilon$ til $+\varepsilon$ med $\varepsilon \to 0$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' - \beta\,\delta(x)\,\psi = E\psi$$

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

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

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

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

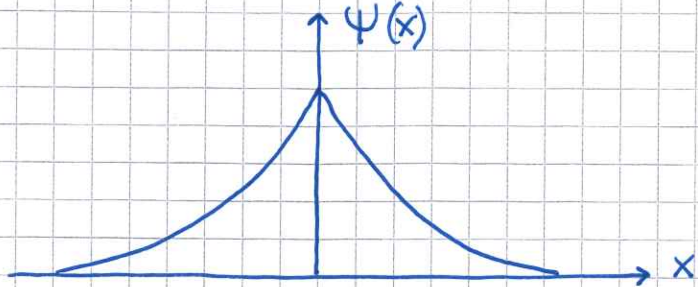
$$\Rightarrow \quad \varkappa = m\beta/\hbar^2$$

$$\Rightarrow \quad \underset{\sim}{E} = -\hbar^2 (m\beta/\hbar^2)^2/2m = \underset{\sim\sim\sim}{-m\beta^2/2\hbar^2}$$

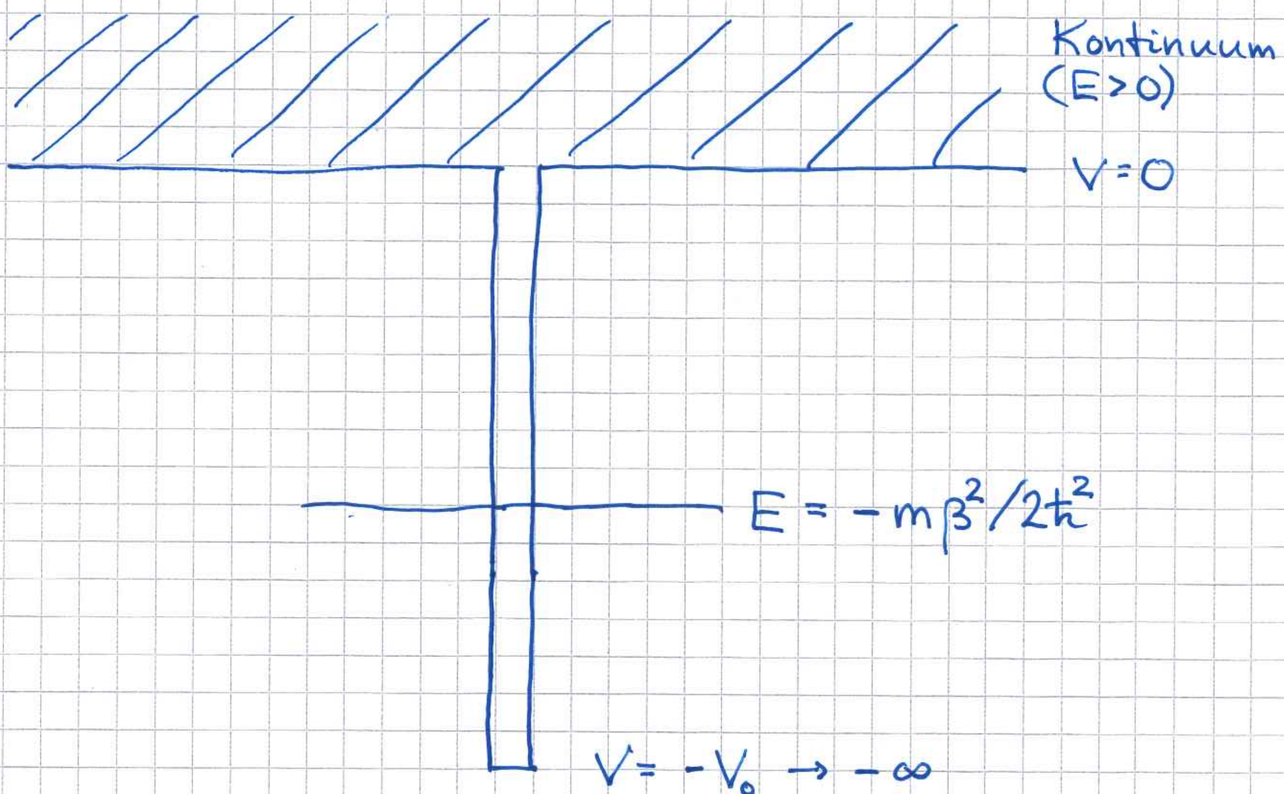
Normering av Ψ:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx = |C|^2 \cdot 2 \cdot \int_0^{\infty} e^{-2\varkappa x} dx = \frac{|C|^2}{\varkappa} \Rightarrow C = \sqrt{\varkappa}$$

$$\Rightarrow \quad \Psi(x) = \left(\sqrt{m\beta}/\hbar\right) \cdot \exp\left(-m\beta|x|/\hbar^2\right)$$



I likhet med endelig pot.brønn er alle $E > 0$ tillatt, dvs vi har et kontinuerlig spektrum av ubundne tilstander.



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

Klassisk :

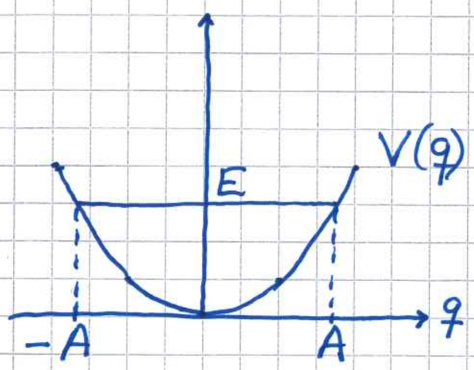
$q(t)$ = utsving fra likevekt

Hookes lov : $F(q) = -kq \Rightarrow V(q) = \frac{1}{2}kq^2$

Newtons 2. lov : $\ddot{q} + \omega^2 q = 0 \quad ; \quad \omega^2 = k/m$

Med startbetingelser (f.eks.) $q(0) = A$ og $\dot{q}(0) = 0$
blir $q(t) = A \cos \omega t$ og $\dot{q}(t) = -\omega A \sin \omega t$

Total energi : $E = K + V = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 A^2$



Klassiske vendepunkter der $E = V$ og $K = 0$: $q = \pm A$

Vi forventer at TUSL (siden V er symmetrisk) gir en symmetrisk grunntilstand uten nullpunkter, og vekselvis antisymm. og symm. eksiterte tilstander med økende antall nullpunkter.

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

Divisjon med $\frac{1}{2}\hbar\omega$ gir dimensjonsløse faktorer foran ψ:

$$\frac{\hbar}{m\omega}\frac{d^2\psi}{dq^2} + \left(\frac{2E}{\hbar\omega} - \frac{m\omega}{\hbar}q^2\right)\psi = 0$$

Dvs : $\varepsilon = 2E/\hbar\omega$ og $x = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,q$ er passende dim. løs energi og koordinat !

TUSL er da på formen

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

Når $|x|$ blir svært stor, ser vi at

$$\psi'' - x^2\psi \approx 0$$

og vi vet at $|\psi| \to 0$, fordi $V \to \infty$.

Da passer det med $\psi(x) \sim \exp(-x^2/2)$, som gir

$$\psi'(x) \sim -x\, e^{-x^2/2} \quad \text{og} \quad \psi''(x) \sim x^2 e^{-x^2/2}.$$

Siden $e^{-x^2/2}$ er symm. og uten nullpunkter, prøver vi

$$\psi_0(x) = C_0\, e^{-x^2/2}$$

Da er $\psi_0' = -x C_0 e^{-x^2/2}$

$$\psi_0'' = -C_0 e^{-x^2/2} + x^2 C_0\, e^{-x^2/2}$$

Innsetting i TUSL gir

$$C_0(x^2-1)\, e^{-x^2/2} + C_0(\varepsilon_0 - x^2)\, e^{-x^2/2} = 0$$

som viser at $\psi_0(x)$ <u>er</u> en løsning, med tilhørende energiegenverdi $\varepsilon_0 = 1$, dvs $E_0 = \hbar\omega/2$.
Dette må være systemets grunntilstand.

Normering fastlegger C_0:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^2\, dq = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\, C_0^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\, C_0^2 \cdot \sqrt{\pi}$$

$$\Rightarrow \quad C_0 = (m\omega/\pi\hbar)^{1/4}$$

Faktoren $e^{-x^2/2}$ må inngå også i de eksiterte tilstandene ψ_1, ψ_2, ... Siden 1. eksiterte tilstand ψ_1 forventes å være antisymm. med 1 nullpunkt, er vel eneste rimelige "gjetning"

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

Da er

$$\psi_1'(x) = C_1\, e^{-x^2/2}\,(1-x^2)$$

$$\psi_1''(x) = C_1\, e^{-x^2/2}\,(-x)(1-x^2) + C_1\, e^{-x^2/2}\,(-2x)$$

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

Innsetting i TUSL gir nå

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

dvs $\psi_1(x)$ er en løsning, med $\varepsilon_1 = 3$, dvs $E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega$.

Normering: $\psi_1^2(q) = C_1^2\, q^2\, e^{-m\omega q^2/\hbar}$

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_1(q)|^2\, dq = C_1^2 \int_{-\infty}^{\infty} q^2\, e^{-m\omega q^2/\hbar}\, dq = C_1^2 \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{3/2} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-x^2}\, dx$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-x^2}\, dx = \left\{-\frac{d}{d\alpha}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2}\, dx\right\}_{\alpha=1} = \left\{-\frac{d}{d\alpha}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}\right\}_{\alpha=1} = \frac{1}{2}\sqrt{\pi}$$

$$\Rightarrow \quad C_1 = \frac{\sqrt{2}}{\pi^{1/4}} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{3/4}$$

Dermed prøver vi den generelle løsningen

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

med (Potensrekkemetoden)

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

der vi vet at $v_0 = C_0' = a_0$ og $v_1(x) = C_1' x = a_1 x$,
og forventer at $v_n(x)$ er et polynom av orden n,
på formen

$$v_2(x) = a_0 + a_2 x^2 \quad \text{(symm)}$$
$$v_3(x) = a_1 x + a_3 x^3 \quad \text{(antisymm)}$$
$$v_4(x) = a_0 + a_2 x^2 + a_4 x^4 \quad \text{(symm)} \qquad \text{osv osv}$$

(NB: med ulike a_0 i $v_0, v_2, v_4, \ldots$ osv)

Innsetting av $\psi = v \cdot e^{-x^2/2}$ i TUSL, med

$$\psi' = v' e^{-x^2/2} - x v e^{-x^2/2}, \text{ dvs}$$
$$\psi'' = (v'' - xv' - v - xv' + x^2 v) e^{-x^2/2}$$
$$= (v'' - 2xv' + (x^2-1)v)\, e^{-x^2/2} \quad \text{gir}$$

$$\left[v'' - 2xv' + (x^2-1)v + (\varepsilon - x^2)v\right] e^{-x^2/2} = 0, \quad \text{dvs}$$

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

Her er

$$xv' = x \sum_{k=1}^{\infty} a_k k x^{k-1} = \sum_{k=1}^{\infty} a_k k x^k = \sum_{k=0}^{\infty} a_k k x^k$$

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

$$\Rightarrow \sum_{k=0}^{\infty} \left\{ a_{k+2}(k+2)(k+1) - 2a_k k + (\varepsilon-1)a_k \right\} x^k = 0$$

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

Vi må ha fysisk akseptable løsninger, dvs

$$\psi(x) \to 0 \quad \text{når} \quad |x| \to \infty$$

Vi skal se at dette resulterer i energikvantisering !

Potensrekka må bryte av. I motsatt fall blir

$$a_{k+2} \approx \frac{2}{k} a_k \quad \text{for} \quad k \gg 1$$

Da divergerer $v(x)$ som $\exp(x^2)$ for store $|x|$:

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

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

Da blir $\psi(x) \approx \exp(x^2 - x^2/2) = \exp(x^2/2)$ for store $|x|$, noe som ikke er fysisk akseptabelt.

Potensrekka bryter av dersom $a_{n+2} = 0 \cdot a_n$, dvs

$$2n+1-\varepsilon_n = 0 \quad \Rightarrow \varepsilon_n = 2n+1 \quad \Rightarrow E_n = (n+1/2)\hbar\omega$$

Da blir $v_n(x)$ et polynom av orden n, og bølgefunksjonen blir på formen

$$\psi_n(x) = v_n(x)\, e^{-x^2/2} = (a_n x^n + a_{n-2} x^{n-2} + \ldots)\, e^{-x^2/2}$$

for $n = 0, 1, 2, \ldots\ldots$

La oss se hvorfor bare odde eller like potenser inngår i hhv $\psi_1, \psi_3, \psi_5 \ldots$ og $\psi_0, \psi_2, \psi_4 \ldots$

$n=0$: $\quad \varepsilon_0 = 1 \Rightarrow a_2 = \frac{2\cdot 0+1-1}{1\cdot 2} a_0 = 0$

$$\Rightarrow a_4 = a_6 = a_8 = \dots = 0$$

Anta at $a_1 \neq 0$. Da er

$a_3 = \frac{2\cdot 1+1-1}{2\cdot 3} a_1 = \frac{1}{3} a_1 \neq 0$, og videre

$a_5 \neq 0$, $a_7 \neq 0, \dots$

Men da blir $\psi_0(x)$ divergent! Følgelig må vi ha $a_1 = a_3 = a_5 = a_7 = \dots = 0$, dvs

$$\psi_0(x) = v_0(x)\, e^{-x^2/2} = a_0\, e^{-x^2/2}$$

$n=1$: $\quad \varepsilon_1 = 3 \Rightarrow a_3 = \frac{2\cdot 1+1-3}{2\cdot 3} a_1 = 0$

$$\Rightarrow a_5 = a_7 = \dots = 0$$

Anta $a_0 \neq 0$. Da blir $a_2 \neq 0$, $a_4 \neq 0$, $a_6 \neq 0 \dots$ og $\psi_1(x)$ blir divergent. Altså må vi nå ha $a_0 = a_2 = a_4 = a_6 = \dots = 0$, dvs

$$\psi_1(x) = v_1(x)\, e^{-x^2/2} = a_1 x\, e^{-x^2/2}$$

$n=2$: $\quad \varepsilon_2 = 5 \Rightarrow a_2 = \frac{2\cdot 0+1-5}{1\cdot 2} = -2a_0$

og $a_4 = a_6 = a_8 = \dots = 0$

Og dessuten $a_1 = a_3 = a_5 = a_7 = \dots = 0$

Dermed

$$\psi_2(x) = v_2(x)\, e^{-x^2/2} = a_0(1-2x^2)\, e^{-x^2/2}$$

osv osv for $n = 3, 4, 5, \dots$

Normering fastlegger til slutt verdiene av a_0 i $\psi_0, \psi_2, \psi_4 \dots$ og verdiene av a_1 i $\psi_1, \psi_3, \psi_5 \dots$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(q)|^2 dq = 1 \quad ; \quad q = x \cdot \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

Resultat :

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

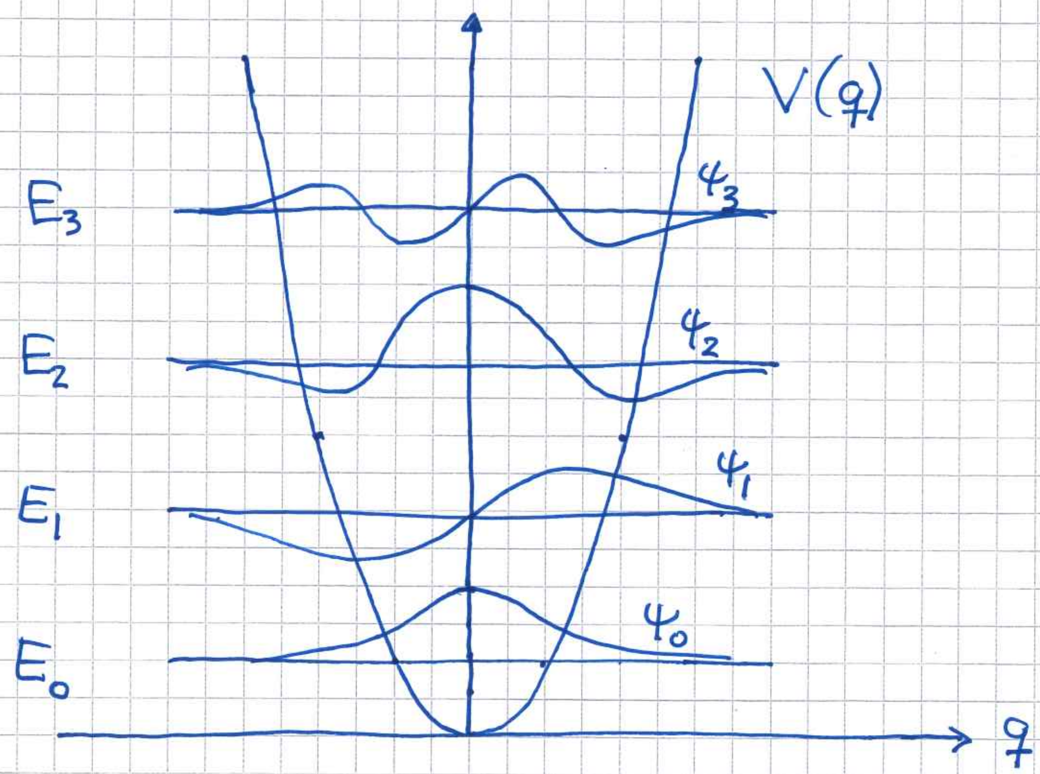
Hermite - polynomene :

$H_0(x) = 1$; $H_1(x) = 2x$; $H_2(x) = 4x^2 - 2$; $H_3(x) = 8x^3 - 12x$; ...

Se f.eks. PCH for diverse relasjoner mellom disse.

Eks :

$$H_n(x) = e^{x^2}\left(-\frac{d}{dx}\right)^n e^{-x^2}$$ (PCH 3.62 ; Rodrigues' formel)



$E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$; $n = 0, 1, 2, \ldots$