

Operatorer, egenfunksjoner og egenverdier

(28)

[os 7.1]

$$\begin{array}{c} \text{Operator} \nearrow \hat{A} f(x) = A f(x) \nwarrow \text{Egenfunksjon} \\ \text{Egenverdi, uavhengig av } x \nwarrow \end{array}$$

Eks: $\frac{\partial}{\partial x} \sin kx = k \cos kx$; da er $\sin kx$ ikke en egenfunksjon til operatoren $\frac{\partial}{\partial x}$

Impulsoperator:

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} e^{i(px-Et)/\hbar} = p e^{i(px-Et)/\hbar}$$

Dvs: Planbølgen $e^{i(px-Et)/\hbar}$, som beskriver en fri partikkel med impuls p , er egenf. til oper. $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$, med egenv. p . Da er det rimelig å kalle dette en impulsoperator,

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$$

Operator for kinetisk energi:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{i(px-Et)/\hbar} = \frac{p^2}{2m} e^{i(px-Et)/\hbar}$$

Dvs: Samme planbølge er egenf. til oper. $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$, med egenv. $p^2/2m = K$. Da er det rimelig å si at dette er oper. for kinetisk energi,

$$\hat{K} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

(29)

Operator for total energi:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0\right) e^{i(px-Et)/\hbar} = \left(\frac{p^2}{2m} + V_0\right) e^{i(px-Et)/\hbar}$$

Dus: $\hat{K} + V_0$ er oper. for total energi $E = K + V_0$ for fri partikkel i konstant potensial V_0 .

Hvis $V(x)$ ikke er konstant, er planbølgen ikke lenger en egenf. til oper. $\hat{K} + V(x)$; da vil andre funksjoner være egenfunksjoner.

Tradisjonelt kalles oper. for total energi Hamilton-operatoren, $\hat{H} = \hat{K} + V(x)$. Dermed kan Schrödingerligningen skrives slik:

$$i\hbar \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi \quad \text{SL}$$

$$1D: \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

$$3D: \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r})$$

(30)

Stasjonære tilstander og tidsuavhengig Schrödingerligning (TUSL) [OS 7.3; YF 40.1]

Ofta (og alltid i FY6019) er potensialet uavhengig av tida t , dvs $V = V(x)$. Da er $\hat{H}$ også uavhengig av t , og produktløsninger

$$\Psi(x, t) = \psi(x) \cdot T(t)$$

er løsninger av SL. Innsetting i SL gir:

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

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

Divisjon med $\Psi = \psi \cdot T$ på begge sider gir:

$$i\hbar \frac{\partial T / \partial t}{T} = \frac{\hat{H} \psi}{\psi}$$

Her er venstre side kun avh. av t og høyre side kun avh. av x ; da må begge sider være lik en og samme konstant, som vi "f.eks." kan kalle E . Da kan vi løse ligningen for $T(t)$, en gang for alle:

$$i\hbar \frac{dT/dt}{T} = E \Rightarrow \frac{dT}{T} = \frac{E}{i\hbar} dt$$

$$\Rightarrow \ln T = -iEt/\hbar \quad (+ \text{konstant})$$

$$\Rightarrow \boxed{T(t) = \exp(-iEt/\hbar)}$$

(Notasjon: $\exp(i\alpha)$ er det samme som $e^{i\alpha}$)

Ligningen for $\Psi(x)$:

$$\boxed{\hat{H}\Psi(x) = E\Psi(x)} \quad \text{TUSL}$$

Her er $\hat{H}$ operator for partikkelens totale energi. Dermed tolker vi E som mulige ("tillatte") energieigenverdier for partikkelen, når den befinner seg i potensialet $V(x)$, og $\Psi(x)$ er de tilhørende energieigenfunksjonene (evt. energieigenstandene).

De fullstendige løsningene av SL,

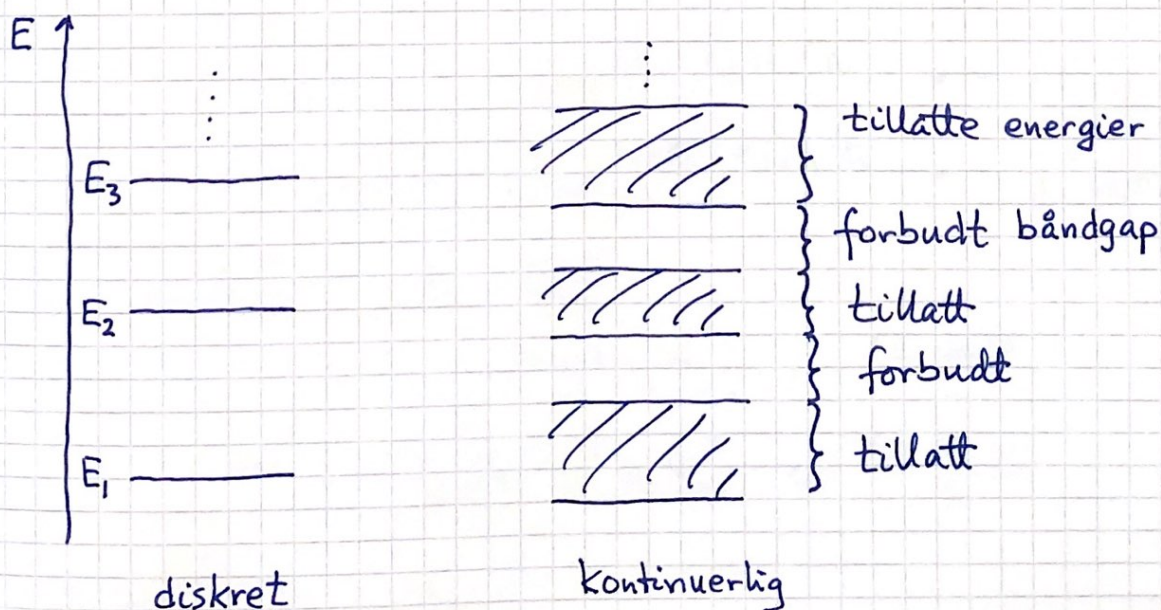
$$\Psi(x,t) = \Psi(x) e^{-iEt/\hbar}$$

kalles naturlig nok stasjonære tilstander, fordi sannsynlighetstettheten

$$|\Psi|^2 = |\Psi|^2$$

er uavhengig av tiden t . (Husk: $|e^{i\alpha}| = 1$.)

TUSL har diskrete (adskilte) egenverdier og/eller (ett eller flere) kontinuerlige energibånd:



(32)

SL og TUSL er lineære ligninger. Da er den generelle løsningen av SL en vilkårlig sum (lineærkombinasjon) av stasjonære tilstander:

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

[Pluss eventuelt et integral over kontinuerlige energibånd, men la oss ikke komplisere for mye...!]

Hvis to eller flere tilstander med ulike verdier av E bidrar til $\Psi(x,t)$, blir $|\Psi|^2$ avhengig av t , og da er Ψ ikke lenger en stasjonær tilstand.

$$\text{Eks: } \Psi(x,t) = c_1 \psi_1(x) e^{-iE_1 t/\hbar} + c_2 \psi_2(x) e^{-iE_2 t/\hbar}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow |\Psi|^2 &= \Psi^* \Psi \\ &= \{c_1^* \psi_1^* e^{iE_1 t/\hbar} + c_2^* \psi_2^* e^{iE_2 t/\hbar}\} \cdot \\ &\quad \{c_1 \psi_1 e^{-iE_1 t/\hbar} + c_2 \psi_2 e^{-iE_2 t/\hbar}\} \\ &= |c_1|^2 |\psi_1|^2 + |c_2|^2 |\psi_2|^2 \\ &\quad + c_1^* \psi_1^* c_2 \psi_2 e^{i(E_1 - E_2)t/\hbar} \leftarrow f(x,t) \\ &\quad + c_1 \psi_1 c_2^* \psi_2^* e^{-i(E_1 - E_2)t/\hbar} \leftarrow f^*(x,t) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} f(x,t) + f^*(x,t) &= 2 \operatorname{Re} f(x,t) \\ &= 2 \operatorname{Re} \{c_1^* \psi_1^* c_2 \psi_2\} \cdot \cos \frac{(E_1 - E_2)t}{\hbar} \\ &\quad - 2 \operatorname{Im} \{c_1^* \psi_1^* c_2 \psi_2\} \cdot \sin \frac{(E_1 - E_2)t}{\hbar} \end{aligned}$$