Separasjon av variable

ψ Ψ

$\uparrow$ liten $\nwarrow$ stor

Vi skal løse SL

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V(x)\,\Psi = i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

Vi skal holde oss til V uavhengig av tiden t

Starter med å se etter løsninger på formen

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\,\varphi(t)$$ <u>separasjon av variable</u>

Da er $\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = \varphi(t)\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$, $\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \psi(x)\frac{d\varphi(t)}{dt}$

Slik at SL blir $-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi(t)\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x)\varphi(t) = i\hbar\psi(x)\frac{d\varphi(t)}{dt}$ $\quad\Big|\cdot\frac{1}{\psi\varphi}$

$$\Rightarrow \quad \underline{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi(x)}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)} = \underline{i\hbar\frac{1}{\varphi(t)}\frac{d\varphi(t)}{dt}} = \underline{\underline{E}}$$

Løser ligningen: $i\hbar\frac{d\varphi(t)}{dt} = E\varphi(t)$

$$i\hbar\int\frac{1}{\varphi(t)}\,d\varphi(t) = \int E\,dt$$

$$i\hbar\ln\varphi = Et + c'$$

$$\ln\varphi = -\frac{i}{\hbar}Et + c''$$

$$e^{\ln\varphi} = e^{-\frac{i}{\hbar}Et + c''}$$

$$\boxed{\varphi(t) = C\,e^{-\frac{i}{\hbar}Et}}$$

Den andre diff ligningen er den tids-uavhengige SL (TUSL)

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

Hvorfor er de separable løsningene interessante?

1) Postulat: Den generelle løsningen av SL er en lineærkombinasjon av separable løsninger:

$$\Psi(x,t)=\sum_{n=1}^{\infty} c_n \underline{\psi_n(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}} \quad \text{hvor } c_n\in\mathbb{C}$$

2) Separable løsninger er <u>stasjonære tilstander.</u>

$\Psi(x,t)=\psi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ avhenger av t, men

$|\Psi(x,t)|^2=|\psi(x)|^2$ er uavhengig av t

og $\langle Q(x,p)\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^* Q(\hat{x},\hat{p})\Psi\,dx=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)Q(\hat{x},\hat{p})\psi(x)\,dx$

er uavhengig av t.

Spesielt $\langle x\rangle$ konstant i tid, og derfor $\langle p\rangle=m\frac{d\langle x\rangle}{dt}=0$

3) Skarpt bestemt energi
(definite)

Skarpt bestemt betyr at $\sigma = 0$

$$\hat{E}\,\Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar}Et} = i\hbar\left(-\frac{i}{\hbar}E\right)\psi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et} = E\,\Psi(x,t)$$

så separable løsninger/stasjonære tilstander er egenfunksjoner til $\hat{E}$ med egenverdi E (energi).

Det betyr også at $\hat{H}\Psi = \hat{E}\Psi = E\Psi$

$$\langle H \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{H} \Psi\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* E \Psi\, dx = E \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dx = E$$

$$\langle H^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{H}^2 \Psi\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* E^2 \Psi\, dx = E^2$$

$$\sigma_H^2 = \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2 = E^2 - E^2 = 0$$

$\Rightarrow$ Alle målinger av energien må gi E

$\Rightarrow$ skarpt bestemt energi $\sigma_E = 0$.

Kokebok for å løse SL (d.v.s. på eksamen)

1) Du blir gitt $V(x)$ og $\Psi(x,0)$ (initialbetingelse), skal finne $\Psi(x,t)$.

2) Løs TUSL for å finne stasjonære tilstander $\psi_n(x)$ og E_n ved bruk av <u>grensebetingelser</u> for ψ.

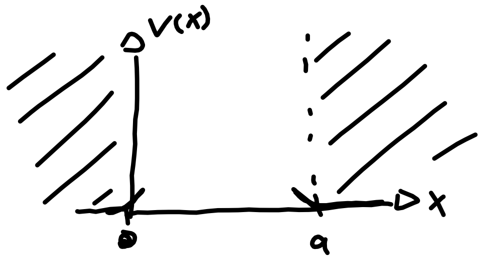
3) Finne c_n slik at $\Psi(x,0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x)$

ved hjelp av <u>Fouriers triks</u>.

4) Skriv ned $\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$

Uendelig brønn

Vårt første potensial $V(x) = \begin{cases} 0 & \text{for } 0 \leq x \leq a \\ \infty & \text{ellers} \end{cases}$



Løsninger av TUSL

For $x<0$ og $x>a$: $\psi(x) = 0$

TUSL inni brønn : $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi$ med $\boxed{k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}}$

Har løsning $\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx$ (oblig 1)

For å bestemme A og B må vi bruke grensebetingelser.

$\boxed{\psi_n(x) = A\sin(k_n x)}$

$\boxed{E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\, n^2}$

$\Uparrow$

$\boxed{\begin{array}{l}\text{Grensebetingelser for } \psi(x): \\ \text{1) } \psi \text{ kontinuerlig over alt, } \psi(x)=0 \text{ der } V(x)=\infty. \\ \text{2) } \frac{d\psi}{dx} \text{ kontinuerlig, unntatt der } V(x)=\pm\infty \end{array}}$

Kontinuitet krever at $\psi(0) = \psi(a) = 0$

$\psi(0) = B \Rightarrow B = 0$

$\psi(a) = A\sin ka \Rightarrow ka = \pi, 2\pi, 3\pi \Rightarrow k_n = \frac{n\pi}{a}$, $n = 1,2,3,\ldots$ kvantisert!

Fra normering av bølgefunksjon

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = 1$$ så får vi at $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$

Full løsning av TUSL

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) \quad \text{for } 0 \leq x \leq a$$

og $E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m a^2} n^2$ hvor $n = 1, 2, 3, \ldots$

Disse løsningene er

1) Ortonormale $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi_m \, dx = \delta_{mn} = \begin{cases} 1 & \text{når } n=m \\ 0 & \text{når } n \neq m \end{cases}$ (Griffiths)

2) Komplette $f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x)$ for „alle" $f(x)$ (Fourier-rekker)

Full løsningen av SL (TASL) er da

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}, \quad E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m a^2} n^2$$

Hvordan finne c_n gitt $\Psi(x,0)$?

Fourier triks

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \, \Psi(x,0)\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \left(\sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n \right) dx = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n \, dx = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \delta_{mn} = c_m$$

så, for å finne c_n løser vi

$$\boxed{c_n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \, \Psi(x,0)\, dx}$$

Tolkning av c_n : $|c_n|^2$ er sannsynligheten for å observere energien E_n for et system beskrevet av $\Psi(x,t)$.

Bevis: Regn ut $\langle H \rangle$.

Får at $\langle H \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 E_n$