Jafna Schrödingers

$$i\hbar\partial_t\Psi = H\Psi$$

Athugum lausnir fyrir

$$H = \frac{p^2}{2m} + V$$

þar sem V er ekki háð tíma og við notum

$$p \to -i\hbar\partial_x$$

Síðar sjáum við að þessar lausnir má nota á vissan hátt t.þ.a. fá lausnir fyrir tímaháð H

Uppbygging jöfnunar bendir til þess að við getum reynt lausn með aðskilnaði breytistærða: reynum

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\varphi(t)$$

Fyrir þessa lausn fæst

$$i\hbar\, \psi(x)\left(d_t \varphi(t)\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(d_x^2 \psi(x)\right)\varphi(t) + V(x)\psi(x)\varphi(t)$$

Deilum með $\psi\varphi$

$$i\hbar \frac{d_t \varphi(t)}{\varphi(t)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d_x^2 \psi(x)}{\psi(x)} + V(x)$$

Einungis háð t　　　　Aðeins háð x

En verður að vera jafnt fyrir öll gildi á x og t

Aðeins hægt ef báðar hliðar eru sami fastinn, E þá fást

$$i\hbar \frac{d_t \varphi}{\varphi} = E \quad \rightarrow \quad \boxed{d_t \varphi = -\frac{iE}{\hbar}\varphi}$$

og

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d_x^2 \psi}{\psi} + V = E \quad \rightarrow \quad \boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} d_x^2 \psi + V\psi = E\psi}$$

Hlutafleiðujafnan er orðin að tveimur afleiðujöfnum

Sú fyrri hefur lausnina

$$\varphi(t) = \exp\left\{-i\frac{Et}{\hbar}\right]$$

með stuðli sem við förum inn í ψ

sú seinni er eigingildisjafna kölluð tím-óháða jafna Schrödingers, sem við þurfum að kanna betur

Við munum komast að því eigingildin E eru orka kerfisins, þau geta verið strjál eða samfelld, þ.e. lausnir finnast stundum aðeins fyrir strjál gildi, E_1, E_2, ... endanlega mörg eða óendanlega mörg. Stundum eru eigingildin samfelld á endanlegu bili og stundum á óendanlegu bili

Eigingildi -> orkuróf kerfisins

Skoðum betur

Sístöð ástönd

Lausnin fyrir víst gildi E er háð tíma

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

en líkindaþéttleikinn

$$|\Psi(x,t)|^2 = \Psi^* \Psi$$

$$= \psi^* \psi \exp\left\{-i \frac{t}{\hbar}(E-E)\right\} = |\psi(x)|^2$$

er óháður tíma

Í þannig ástandi er væntigildi tímaóháðra virkja óháð tíma

$$\langle Q(x,p)\rangle = \underbrace{\int dx\, \psi\, Q\, \psi}$$

fasaþátturinn $\varphi(t)$ styttist aftur út hér

Eiginástönd H með orku E

Tímaóháða jafna Schrödingers er

$$-\frac{\hbar^2}{2m} d_x^2 \psi + V\psi = E\psi$$

eða

$$\left\{-\frac{\hbar}{2m} d_x^2 + V\right\}\psi = E\psi$$

eða

$$\boxed{H\psi = E\psi}$$

Eigingildi H er E

Væntigildi H:

$$\langle H \rangle = \int \psi^* H \psi dx = E \int dx\, |\psi|^2$$

$$= E$$

fáum því líka

$$\langle H^2 \rangle = E^2$$

$$\rightarrow \Delta H = \sqrt{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2} = 0$$

Sístæðu lausnirnar $\psi(x)$ eru bylgjuföll ástanda með fasta ákveðna orku

Hvernig er það mögulegt?

Seinna kynnumst við óvissulögmáli

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

Sístætt ástand breytist ekki í tíma: $\Delta t \to \infty$

og $\Delta E \to 0$

Liðun

Almenna lausn jöfnu Schrödingers

$$i\hbar \partial_t \Psi(x,t) = H \Psi(x,t)$$

er samantekt allra sístæðu lausnanna

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

Hér gerum við ráð fyrir óendanlegu strjálu orkurófi $E_1 \dots\dots$ með eiginlausnum $\psi_1 \dots\dots$
Þetta verður að skrifa með heildi fy- samfellt róf.

$\boxed{\text{Jaðar skilyrði og tímaóháða Schrödinger jafnan ákvarða } \psi_n(x) \text{ og } E_n}$

$\boxed{\text{Upphafsskilyrði (t.d. við } t=0) \text{ ákvarða liðunar stuðlana } C_n}$

Takið sérstaklega eftir því að

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \psi_n(x) e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

gefur líkinda þéttleika

$|\Psi(x,t)|^2$ sem er háður

tíma ef minnst tvö

C_n eru ekki jöfn 0

Eind í almennu ástandi

$\Psi(x,t)$ er þá heldur

ekki með fasta skarpa orku

eða eigingildi virkja

Q

sjáum síðar

$\boxed{\text{eigingildi } H \text{ er fast}}$

þurfum að kynnast betur lausnum jöfnunar

Byrjum á tveimur sértilvikum:

Óendanlegum mættis brunni

og

Hreintónasveifli

Bæði dæmin sýna sameiginlega eiginleika sem við munum finna fyrir önnur tilvik

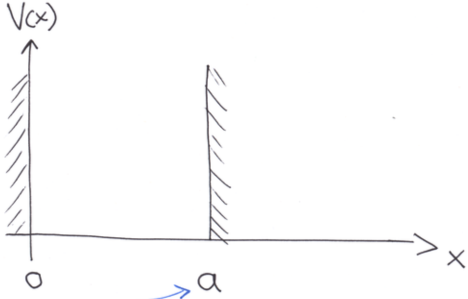
Bæði dæmin eru góð nálgun fyrir kerfi sem finnast í náttúrunni og í manngerðum kerfum

skammta brunnur í hálfleiðara

þversnið af skammtavír

Óendanlegur brunnur

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{ef} \quad 0 \le x < a \\ \infty & \text{annars} \end{cases}$$



eini náttúrulegi lengdarkvarðinn sem mun finnast hér

Jaðarskilyrði

Utan brunns gildir $\psi(x) = 0$

Innan brunns gildir

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

með jaðarskilyrði $\psi(0) = 0$
$\psi(a) = 0$

til þess að tryggja samfellu

Óendanlega mættis þrepið í $x = 0$ og a kemur í veg fyrir samfellu ψ'

skoðum síðar

Umritun jöfnunnar innan brunnsins

$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar}}$

$$\psi''(x) + k^2\psi(x) = 0$$

sama jafnan og fyrir hreintóna sígildan sveifil.

Reynum lausn

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

$$\cos(0) = 1 \quad \rightarrow \quad B = 0$$

$$\psi(x) = A\sin(kx)$$

jaðarskilyrði

$$\sin(k \cdot 0) = 0$$

$$\sin(ka) = 0$$

leysist sjálfkrafa

en hér fæst $ka = 0$

eða líka $\pm\pi, \pm 2\pi$

þ.a. öll k-gildi sem uppfylla jaðarskilyrðið eru

$$k_n = \frac{n\pi}{a}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$$

$k_n = 0$ gefur ekki normanlegt fall

neikvæðu gildin gefa ekki nýtt bylgjufall því

$\sin(-\theta) = -\sin\theta$

og „-" getur farið inn í A

einkvæmar normanlegar lausnir fást því fyrir

$$k_n = \frac{n\pi}{a}, \quad n \in \mathbb{N}$$

$$k_n = \sqrt{\frac{2mE_n}{\hbar^2}}$$

eða

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

er orkuróf eindarinnar

skýjalt $E_n \sim n^2$