TMA4101/4106/4111/4121

2 - 12 - SCHRÖDINGERLIKNINGEN - LF

Akkurat som for bølge- og varmelikningen, er det slik at må være konstante.

$\boxed{2}$ V er et energipotensiale, og både

$$i\hbar\frac{\dot{f}(t)}{f(t)} \qquad \text{og} \qquad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\psi''(x)}{\psi(x)} + V(x)$$

har benevning joule, så separasjonskonstanten er energi, derav E. Kvantefysikkfolk er stort sett opptatt av å finne E i forskjellige situasjoner.

$\boxed{3}$ Siden den ene siden av likningen kun avhenger av t og den andre kun av x, må E være konstant. Likningen

$$i\hbar\frac{\dot{f}(t)}{f(t)} = E$$

gir

$$i\hbar\dot{f}(t) = Ef(t)$$

som løses av

$$f(t) = e^{-Eit/\hbar}.$$

Resten av likningen

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

gir den tidsuavhengige schrödingerlikningen

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\psi = E\psi.$$

$\boxed{4}$ Greit, så vi må løse likningen

$$\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + E\psi = 0.$$

At $E > 0$ følger av randkravene og kravet om at $|\Psi|^2$ skal være en sannsynlighetstetthet. Dersom $E = 0$ får får

$$\psi(x) = ax + b$$

og dersom denne rette linjen skal tilfredsstille $\psi(0) = \psi(\pi) = 0$, må $a = b = 0$, men da blir arealet under $|\Psi|^2$ null, og det kan vi ikke ha noe av. Dersom $E < 0$, får vi

$$\psi(x) = ae^{\sqrt{-2Em}x/\hbar} + be^{-\sqrt{-2Em}x/\hbar}.$$

Skal dette tilfreddstille $\psi(0) = 0$, må $a = -b$, og skal vi ha $\psi(\pi) = 0$, får vi

$$0 = a\left(e^{\sqrt{-2Em}x/\hbar} - e^{-\sqrt{-2Em}x/\hbar}\right) = 2a\cosh\left(\sqrt{-2Em}x/\hbar\right)$$

Cosinushyperbolicusfunksjonen blir som kjent aldri null, så da må $a = 0$, og slik får vi også nå ingen sannsynlighetstetthet. Altså må $E > 0$, og vi får

$$\psi(x) = a\sin\left(\sqrt{2Em}x/\hbar\right) + b\cos\left(\sqrt{2Em}x/\hbar\right)$$

Hvis vi nå bruker $\psi(0) = 0$, får vi $b = 0$, mens $\psi(\pi) = 0$ gir

$$0 = a \sin\left(\sqrt{2Em}\pi/\hbar\right).$$

Dette klarer vi fint på andre måter enn $a = 0$; vi kan nemlig sette $\sqrt{2Em}\pi/\hbar$ til å være en heltallsmultippel av π, som gir

$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2}{2m}$$

der n er ovennevnte heltall. Dette er de berømte kvantiserte energinivåene, og alt i alt har vi nå en uendelig familie av løsninger på formen

$$\Psi_n(x,t) = a_n e^{-E_n it/\hbar} \sin nx = a_n e^{-i\frac{\hbar}{2m}n^2 t} \sin nx.$$

Det som gjenstår er nå å sette a_n slik at $|\Psi|^2$ blir en sannsynlighetstetthet. Vi beregner

$$\begin{aligned}
1 &= \int_0^\pi |\Psi(x,t)|^2 \, dx \\
&= \int_0^\pi \left|a_n e^{-E_n it/\hbar} \sin nx\right|^2 \, dx \\
&= |a_n|^2 \int_0^\pi \sin^2 nx \, dx \\
&= |a_n|^2 \int_0^\pi \frac{1 - \cos 2nx}{2} \, dx = \frac{\pi}{2}|a_n|^2
\end{aligned}$$

som gir

$$a_n = \sqrt{\frac{\pi}{2}} e^{i\theta}$$

der θ er en ukjent kompleks faseforskyvning. Denne ser det ut til at kvantefysikkfolk ikke bryr seg så mye om, så vi setter $\theta = 0$, og får

$$a_n = \sqrt{\frac{\pi}{2}}$$

som gir

$$\Psi_n(x,t) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-E_n it/\hbar} \sin nx = \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-i\frac{\hbar}{2m}n^2 t} \sin nx$$

Nå er det på sin plass å observere at dette er det samme vi får ved å løse varmelikningen

$$\dot{u} = \alpha u''$$

med $\alpha = \frac{i\hbar}{2m}$ og så normalisere istedet for å bruke initialkrav.

$\boxed{5}$ Vi beregner

$$\begin{aligned}
\langle \Psi_k | \Psi_n \rangle =& \frac{2}{\pi} \int_0^\pi e^{E_k it/\hbar} \sin kx e^{-E_n it/\hbar} \sin nx \, dx \\
=& \frac{2}{\pi} e^{(E_k - E_n)it/\hbar} \int_0^\pi \sin kx \sin nx \, dx = \begin{cases} 1 & n = k \\ 0 & n \neq k \end{cases}
\end{aligned}$$

$$\begin{cases} 1 & k = n \\ 0 & k \neq n \end{cases}$$

$\boxed{7}$ Energi kan måles i lab, altså må det være egenverdien til en hermittisk lineæroperator. Hermittiske lineæroperatorer har reelle egenverdier, og følgelig må alt som har benevning energi (i vårt tilfelle V og E) være reelle tall.

$\boxed{10\text{-}12}$ Du skal få slippe å kunne den kvanteharmoniske oscillatoren til eksamen i år. Om du allikevel er interessert, har Astrid gjort oppgavene her:

`https://ntnu.cloud.panopto.eu/Panopto/Pages/Viewer.aspx?id=1cbef379-e0f2-4ba0-8661-b0f200efba55`
`https://ntnu.cloud.panopto.eu/Panopto/Pages/Viewer.aspx?id=86202190-1c63-42ba-b86d-b0f200efe9f1`