



Øvelser til fremme af forståelsen af den kvantemekaniske bølgemekanik

FY521, projekt nr.1

Simon Holst Traberg-Larsen og Søren Emil Wegner Petersen
d. 15. februar 2013

Dette projektdokument har til formål at gennemgå de grundlæggende egenskaber ved den kvantemekaniske bølgemekanik. Dette gøres igennem matematiske udledninger, numeriske analyser og fysiske overvejelser.

Indholdsfortegnelse

1 Schrödingerligningen	3
1.1 Den stationære Schrödingerligning	3
1.2 Den dimensionsløse form af SE	6
1.3 Bølgefunktionen, betingelser og geometrisk opførsel	8
1.4 Specifikke eksempler	11
1.5 WKB approksimationen	15
2 Numeriske resultater	16
2.1 Endelig firkantet brønd	16
2.2 Trekantspotentiale	17
2.3 WKB approksimationen	18
3 Egenfunktioner til Hamiltonoperatoren og variationsmetoden	19
3.1 Egenskaber ved egenfunktionerne til Hamiltonoperatoren	19
3.2 Variationsmetoden	22
3.3 Analytisk eksempel på variationsmetoden	22
4 Numeriske resultater af variationsmetoden	25
5 Sammenfatning	26
6 Appendiks	27
6.1 Appendiks A1	27
6.2 Appendiks A2	28
6.3 Appendiks A3	29

1 Schrödingerligningen

1.1 Den stationære Schrödingerligning

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(r, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(r, t)}{\partial r^2} + V(r)\Psi(r, t) \quad 1.1$$

Et kvantemekanisk system er bestemt vha. den tidsafhængige Schrödingerligning (SE): hvor $\Psi(r, t)$ er bølgefunktionen, $V(r)$ er et udtryk for den potentielle energi, m er partiklens masse og \hbar er Plancks konstant, h , divideret med 2π . Igennem denne del af projektet, vil SE blive brugt til at løse flere forskellige problemstillinger. Projektet vil desuden belyse omfanget af SE.

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad 1.2$$

Konstanten, \hbar , har samme dimension som drejningsmoment. Dette ses ifølge de Broglies sætning

$$h = \lambda p = [L \cdot M \cdot L \cdot S^{-1}] = [ML^2S^{-1}] \quad 1.3$$

hvor λ er bølgelængde og p er impulsmoment (bevægelsesmængde). Dimensioner M, L og S svarer hhv. til masse, længde og tid. Enheden kan også skrives

$$[h] = \frac{kg \cdot m^2}{s} = N \cdot m \cdot s = J \cdot s$$

$$[\hbar\omega] = Nm = J \quad 1.4$$

Produktet $\hbar\omega$ har enheden fordi $[\omega] = s^{-1}$.

Ligning 1.1 medfører umiddelbart, at alle løsninger er tidsafhængige. Dette er dog ikke altid tilfældet, hvilket kan ses, hvis ligning 1.1 løses ved separation af de variable. Det antages, at løsningen til ligning 1.1 kan skrives

$$\Psi(r, t) = T(t)\Psi(r) \quad 1.5$$

Når ligning 1.5 substitueres ind i ligning 1.1 og de variable separeres fås

$$i\hbar \frac{dT(t)}{dt} = ET(t) \quad 1.6$$

og

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(r)}{dr^2} + V(r)\Psi(r) = E\Psi(r) \quad 1.7$$

hvor E er en konstant, der udtrykker partiklens eller systemets energi. Udledningen af både den tidsafhængige og positionsafhængige løsning findes i Appendiks A1, afsnit 6.1.

Det er værd at undersøge, om løsninger på formen i ligning 1.5 har tidsafhængige sandsynlighedstætheder. Dette er kun tilfældet, hvis $T(t)$ har tidsafhængige sandsynlighedstætheder, da $\Psi(r)$ per

definition er tidsuafhængig. $T(t)$ bestemmes ved at løse den almindelige differentialligning i ligning 1.6. Hvis de variable heri separeres fås

$$\frac{dT(t)}{T(t)} = \frac{E}{i\hbar} dt = -\frac{iE}{\hbar} dt \quad 1.8$$

Når der integreres på begge sider (mht. $T(t)$ på venstre side og t på højre side) fås

$$\ln T(t) = -\frac{iE}{\hbar} t + C_1 \quad 1.9$$

eller

$$T(t) = e^{\frac{-iE}{\hbar}t + C_1} = e^{\frac{-iE}{\hbar}t} \cdot e^{C_1} = C_2 e^{\frac{-iE}{\hbar}t} \quad 1.10$$

hvor C_2 er en arbitrær integrationskonstant. Sandsynlighedstætheden er givet ved

$$\rho = T(t) \cdot \overline{T(t)} \quad 1.11$$

hvor $\overline{T(t)}$ betegner den komplekst konjugerede af $T(t)$. Dette giver vha. ligning 1.10, at

$$\rho = C_2 e^{\frac{-iE}{\hbar}t} \cdot \overline{C_2} e^{\frac{iE}{\hbar}t} = C_2 \overline{C_2} \quad 1.12$$

hvilket viser, at sandsynlighedstætheden er tidsuafhængig. Løsningerne hertil kan derfor kaldes stationære og tilhører stationære tilstande. Det ses fra ligning 1.10, hvorledes stationære bølgefunktioner er tidsafhængige, idet der huskes på, at $\Psi(r, t) = T(t)\Psi(r)$.

Sandsynlighedstætheden, ρ , skal forstås således, at den beskriver sandsynligheden for at observere en partikel på et givet sted. Derfor gælder der, at

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \rho dr = |\Psi(r)|^2 = 1 \quad 1.13$$

hvor $|\Psi(r)|^2$ kaldes normkvadratet af $\Psi(r)$. Dette resultat giver god mening, da sandsynligheden for at finde en partikel et hvilket som helst sted er lig med 1.

For en fri partikel, dvs. når potentialet $V(r) = 0$, kan det vises, at løsningen til ligning 1.6 og 1.7 svarer til den for en plan bølge. Differentialligningen 1.6 er allerede løst i ligning 1.10. Tilbage er den tidsuafhængige differentialligning, $\Psi(r)$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(r)}{dr^2} + V(r)\Psi(r) = E\Psi(r) \quad 1.14$$

Siden at $V(r) = 0$ vil det andet led ikke have nogen betydning. Differentialligningen omformuleres:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(r)}{dr^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \Psi(r) = -k^2\Psi(r) \quad 1.15$$

$$\Psi(r) = e^{\pm ikr} \quad 1.16$$

Når energien $E > 0$ haves der oscillerende løsninger på formen
Den samlede løsning $\Psi(r, t)$ kan altså sammensættes til

$$\Psi(r, t) = T(t)\Psi(r) = e^{\frac{-iE}{\hbar}t} e^{\pm ikr} = e^{i(\pm kr - \omega t)} \quad 1.17$$

hvor der bruges relationen $E/\hbar = \omega$. Det ses, at løsningen svarer til en plan bølge, der bevæger sig begge veje pga. \pm -ledet. Partiklens energi er via ligning 1.15 defineret som

$$E = \frac{k^2 \hbar^2}{2m} \quad 1.18$$

Siden der er tale om en fri partikel er den totale mekaniske energi lig med partiklens kinetiske energi

$$E_{kin} = E = \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m} \quad 1.19$$

hvor p er impulsmomentet og v hastigheden. Derfor haves fra ligning 1.18 og 1.19, at

$$\frac{k^2 \hbar^2}{2m} = \frac{p^2}{2m} \quad 1.20$$

↓

$$p = k\hbar \quad 1.21$$

Det ses, at k repræsenterer planbølgens bølgetal, og følgende relation gælder:

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad 1.22$$

Når ligning 1.22 substitueres ind i 1.21 fås

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{h}{p} \quad 1.23$$

hvor $\hbar = h/2\pi$. Denne relation kendes også som de Broglie relationen.

1.2 Den dimensionsløse form af SE

For at lave numeriske beregninger på SE, skal denne ligning omformes til en dimensionsløs form. Dette gøres ved at transformere hver del med en dimensionsfaktor således at følgende ligning bliver gældende:

$$-\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + v(x)\psi(x) = \epsilon\psi(x) \quad 1.24$$

hvor følgende gælder for de transformerede størrelser:

$$x = \frac{r}{L}, \quad v(x) = \frac{V(xL)}{E^*}, \quad \epsilon = \frac{E}{E^*}, \quad \psi(x) = \Psi(x)(xL)\sqrt{L} \quad 1.25$$

Her er L er en karakteristisk længde af systemet, fx bredden af potentialet, og E^* er en karakteristiske energi. Denne kan vises at være

$$E^* = \frac{\hbar^2}{2mL^2} \quad 1.26$$

Udledningen fremgår i Appendiks A2, afsnit 6.2. Man kan opskrive den dimensionsløse SE for en uendelige brønd med bredde $2a$ udelukkende ved at definere det dimensionsløse potentiale, $v(x)$. Først indses det, at

$$V(r) = \begin{cases} 0 & 0 < r < 2a \\ \infty & \text{ellers} \end{cases} \quad 1.27$$

Ved at anvende substitutionen $x = r/L$ fra ligning 1.25 med $L = a$ fås den øvre grænsebetingelse til 2:

$$x = \frac{r}{L} = \frac{2a}{a} = 2 \quad 1.28$$

og det dimensionsløse potentiale $v(x)$ fås til

$$v(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < 2 \\ \infty & \text{ellers} \end{cases} \quad 1.29$$

Når potentialebrønden ikke er uendelig, men har en dybde V_0 defineres den dimensionsløse brønd ved at bestemme det dimensionløse endelige potentiale, $v_0(x)$

$$v_0 = \frac{V_0}{E^*} = \frac{2mL^2V_0}{\hbar^2} \quad 1.30$$

hvis længdeenheden vælges til a bliver det dimensionsløse potentiale

$$v(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < 2 \\ \frac{2ma^2V_0}{\hbar^2} & \text{ellers} \end{cases} \quad 1.31$$

Hvis der betragtes et harmonisk potentiale $m\omega^2r^2/2$ kan dette skrives dimensionsløst hvis energienheden sættes til $\hbar\omega$, $E^* = \hbar\omega$.

$$v(x) = \frac{m\omega^2 r^2}{2\hbar\omega} = \frac{m\omega r^2}{2\hbar} \quad 1.32$$

Ligeledes kan man bestemme det dimensionsløse Coulombpotentiale for et hydrogenatom. Coulombpotentialet er givet ved

$$V_c(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \quad 1.33$$

Hvis man som længdeenhed bruger a :

$$a = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{e^2 m} \approx 0,5\text{\AA} \quad 1.34$$

og anvender substitutionsreglerne i ligning 1.25:

$$r = xa \quad \text{og} \quad v(x) = \frac{V(xL)}{E^*} \quad 1.35$$

fås:

$$V(xa) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{m}{\hbar^2} \frac{1}{x} = \frac{e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{m}{\hbar^2} \frac{1}{x} \quad 1.36$$

Herefter divideres med E^* for at opnå det dimensionsløse potentiale

$$v(x) = \frac{V(xa)}{E^*} = -\frac{\frac{e^4 m}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \frac{1}{x}}{\frac{2m \left(\frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{e^2 m}\right)^2}{\hbar^2}} = -\frac{e^4 m}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \frac{2m \left(\frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{e^2 m}\right)^2}{\hbar^2} \frac{1}{x} \quad 1.37$$

De to parenteser skrives ud:

$$-\frac{16\pi e^4 m \hbar^4 m \epsilon_0^2}{16\pi e^4 m \hbar^2 \hbar^2 m \epsilon_0^2} \frac{2}{x} = -\frac{2}{x} \quad 1.38$$

Hvilket er det dimensionsløse Coulombpotentiale.

1.3 Bølgefunktionen, betingelser og geometrisk opførsel

Det er værd at undersøge, om den afledte bølgefunktion ψ' er kontinuert eller diskontinuert i punkter, hvor potentialet $v(x)$ er hhv. kontinuert og har en endelig diskontinuitet. Der benyttes først og fremmest, at bølgefunktionen ψ er kontinuert for alle x . Den dimensionsløse SE kan omskrives til

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = (v(x) - \varepsilon)\psi(x) \quad 1.39$$

Ligning 1.39 integreres fra $x - \varepsilon$ til $x + \varepsilon$ (NB: $\varepsilon \neq \varepsilon$):

$$\frac{d\psi(x + \varepsilon)}{dx} - \frac{d\psi(x - \varepsilon)}{dx} = \int_{x-\varepsilon}^{x+\varepsilon} [v(x) - \varepsilon]\psi(x) dx \quad 1.40$$

Venstresiden er kontinuert fordi den går imod 0 når $\varepsilon \rightarrow 0$. Dermed er højresiden også kontinuert. Hvis potentialet $v(x)$ har en uendelig stor diskontinuitet, f.eks. hvis $v(x) = v_0\delta(x)$ vil højresiden af ligning 1.40 blive

$$\frac{d\psi(x + \varepsilon)}{dx} - \frac{d\psi(x - \varepsilon)}{dx} = \int_{x-\varepsilon}^{x+\varepsilon} [v_0\delta(x) - \varepsilon]\psi(x) dx \quad 1.41$$

↓

$$\frac{d\psi(x + \varepsilon)}{dx} - \frac{d\psi(x - \varepsilon)}{dx} = \int_{x-\varepsilon}^{x+\varepsilon} v_0\delta(x)\psi(x) dx - \int_{x-\varepsilon}^{x+\varepsilon} \varepsilon\psi(x) dx \quad 1.42$$

hvor det andet led, som indeholder Diracs deltafunktion, blot giver $v_0\psi(0)$. Det betyder, at bølgefunktionen, $\psi(x)$, er kontinuert, også når potentialet er uendelig diskontinuert og at bølgefunktionen er 0 i punktet $x = 0$, $\psi(0) = 0$.

I tilfælde, hvor potentialet $v(x)$ er symmetrisk omkring $x = 0$, udviser bølgefunktionen $\psi(x)$ særlige egenskaber. Hvis $x = -x'$ substitueres i SE fås

$$\frac{d^2\psi(-x')}{d(-x')^2} = (v(-x') - \varepsilon)\psi(-x') \quad 1.43$$

Herefter indføres definitionen $\psi_2(x) = \psi_1(-x')$ og der fås

$$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} = (v(x) - \varepsilon)\psi_2(x) \quad 1.44$$

Ved sammenligning af ligning 1.44 og 1.39 ses det, at den fremkomne SE er identisk med den oprindelige. Derfor eksisterer der kun én uafhængig løsning, hvortil alle andre løsninger er proportionale

$$\psi_2(x) = k \cdot \psi_1(x) \quad 1.45$$

For at bestemme konstanten k betragtes normkvadratet af $\psi_2(x)$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_2(x)|^2 dx = 1 \quad 1.46$$

når ligning 1.45 substitueres ind i ligning 1.46 ses det, at

$$\int_{-\infty}^{+\infty} k^2 \psi_1(x)^2 dx = 1 \quad 1.47$$

Eftersom det antages, at både løsning ψ_2 og ψ_1 er komplette løsninger, der har sandsynlighed 1 når der integreres over normkvadratet for $x \rightarrow \pm\infty$, må det gælde, at

$$\frac{1}{k^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1(x)^2 dx = 1 \quad 1.48$$

↓

$$k^2 = 1 \quad 1.49$$

eller


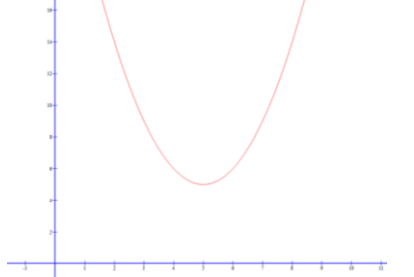
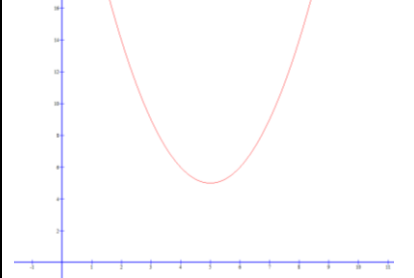

$$k = \pm 1 \quad 1.50$$

Denne egenskab er meget interessant, da den antyder, at i symmetriske potentialer kan bølgefunktionerne være enten lige eller ulige (de har paritet ± 1). Dvs. $\psi(x) = \pm\psi(-x)$

I SE indgår bølgefunktionens anden afledte. Dens betydning er væsentlig for forståelsen af bølgemeknikken. Typisk betegner en funktions anden afledte funktionens krumning. En positiv krumning har retning "væk fra" x -aksen mens en negativ krumning har retning "imod" x -aksen. Sammenhængen mellem en partikels krumning og energi kan deduceres fra SE:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = (v(x) - \varepsilon)\psi(x) \quad 1.51$$

Her angiver $v(x) - \varepsilon$ energidifferensen mellem den potentielle energi og den kinetiske energi. Bølgefunktionens geometriske egenskaber kan visualiseres i fire situationer, som er vist i Tabel 1.1. To af de fire forskellige bølgefunktioner giver problemer: fordi den samlede sandsynlighed $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$ må bølgefunktionen ikke være voksende når $x \rightarrow \pm\infty$. Tværtimod, bølgefunktionen skal stabiliseres på $\psi(x) = 0$ for $x \rightarrow \pm\infty$. Det ses fra Tabel 1.1, at der ikke kan eksistere en stationær tilstand, hvor $\varepsilon < v_{min}(x)$, da dette vil medføre en evigt voksende bølgefunktion.

	$\psi > 0$	$\psi < 0$
$\varepsilon > v(x)$		
$\varepsilon < v(x)$		

Tabel 1.1: Bølgefunktionens geometriske opførsel.

For en fri partikel i en uendelig brønd er $v(x) = 0$. Derfor er krumningen konstant og krumningen giver anledning til en sinus eller cosinus. Hvis krumningen hæves, skal den hæves så meget at bølgefunktionen rammer $\psi = 0$ ved potentialets væg.

Hvis $\psi \neq 0$ ved potentialets væg ses det fra SE ligning 1.51, at energidifferensen går imod $\pm\infty$, hvorfor krumningen går imod $\pm\infty$, hvilket ikke er i overensstemmelse med kravet om en samlet sandsynlighed på 1 (en krumning på $\pm\infty$ betyder, at bølgefunktionen stiger eller falder uendelig hurtigt).

Det viser sig altså, at energien af en bølge er karakteriseret af krumningen af denne. Jo flere nulpunkter der skal være på bølgefunktionen, jo større krumning skal der være på bølgefunktionen, for at dette kan opnås. Derfor kan antallet af nulpunkter af bølgefunktionen bruges til at karakterisere energien for en bølge. Jo flere nulpunkter, jo større energi.

Der eksisterer ikke stationære tilstande imellem to energiniveauer, og dette giver indledningen til kvantespring, hvor kvantespringet er ændringen af energien fra en bølgefunktion til en anden.

I en uendelig brønd er det vist, at $\psi(x) = 0$ på potentialets væg. Dette er ikke nødvendigvis tilfældet for en endelig brønd, hvor bølgefunktionen kan have en "hale", der befinder sig uden for væggen og senere konvergerer imod 0. Denne kendsgerning betyder, at energierne er større i den uendelige brønd end i den endelige, fordi bølgefunktionens krumning ikke nødvendigvis er lige så stor i den endelige brønd som i den uendelige.

Man kan hypotetisk antage, at man graver et "hul" i en brønd med en i forvejen stationær bølgefunktion. Et hul skal i denne forstand betyde, at potentialet $v(x)$ sænkes. Når $v(x)$ sænkes bliver differensen $v(x) - \varepsilon$ større, hvilket korresponderer til en større energi.

1.4 Specifikke eksempler

I en uendelig brønd, der strækker sig fra $x = 0$ til $x = L$, kan man bestemme bølgefunktionerne og energierne vha. SE, som kan skrives

$$\frac{d^2\psi}{dr^2} = -\frac{E2m}{\hbar^2}\psi = -k^2\psi \quad 1.52$$

hvor $k = \sqrt{E2m}/\hbar$. Denne andenordens differentiaalligning har generelle løsninger på formen

$$\psi = A \cos kr + B \sin kr \quad 1.53$$

Vha. randbetingelserne $\psi(0) = \psi(L) = 0$ (bølgefunktionen er 0 ved væggen i en uendelig brønd, j.f. afsnit 1.3), hvor L er den højre væg, fås

$$\psi(0) = A = 0 \quad 1.54$$

og

$$\psi(L) = B \sin kL = 0 \quad 1.55$$

Da $B \neq 0$ for ikke-trivielle løsninger, må $\sin kL = 0$. Dette indtræder, når $kL = n\pi$ for $n = 1, 2, 3, \dots$, dvs.

$$k = \frac{n\pi}{L}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad 1.56$$

Hvis E isoleres i $k = \sqrt{E2m}/\hbar$ og ligning 1.56 substitueres for k haves

$$E = \frac{k^2\hbar^2}{2m} = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2} \quad 1.57$$

Hvis længdeenheden vælges til L kan der skrives

$$E = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m(2L)^2} = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8mL^2} \quad 1.58$$

De dimensionsløse energi er defineret ved $\varepsilon = E/E^*$, hvor $E^* = \hbar^2/2mL$. Derfor fås, at

$$\varepsilon = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8mL} \cdot \frac{2mL}{\hbar^2} = \frac{n^2\pi^2}{4}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad 1.59$$

Partiklens energiniveauer, ε , er altså bestemt af antal halve bølgelængder, n . Konstanten B kan bestemmes, hvis man betragter integralet af normkvadratet af bølgefunktionen for $0 < r < L$

$$\int_0^L (B \sin kr)^2 dr = 1 \quad 1.60$$

↓

$$B^2 \int_0^L \left(\sin \frac{n\pi r}{L}\right)^2 dr = 1 \quad 1.61$$

↓

$$B^2 \frac{L}{2} = 1 \quad 1.62$$

eller

$$B = \sqrt{2/L} \quad 1.63$$

SE har altså løsninger

$$\psi_n(x) = \sqrt{2/L} \sin \frac{n\pi}{L} r \quad 1.64$$

Heraf ses det, at hvis bølgelængden λ indsættes på r 's plads giver indholdet i sinus 2π :

$$\frac{n\pi\lambda}{L} = 2\pi \quad 1.65$$

↓

$$\lambda = \frac{2L}{n} \quad 1.66$$

Det er det samme som at skrive

$$k\lambda = 2\pi \Rightarrow \lambda = \frac{2\pi}{k} \quad 1.67$$

hvor k betegner bølgetallet. Hvis impulsmomentet $p = \sqrt{\varepsilon}$ bliver produktet af bølgelængden og impulsmomentet

$$\lambda p = \frac{2\pi}{k} \cdot \sqrt{\varepsilon} = \frac{2\pi}{k} \cdot n\pi = \frac{2n\pi^2}{k} \quad 1.68$$

Hvis k substitueres i ligning 1.68 fås

$$\lambda p = 2\pi L \quad 1.69$$

Herefter kan der multipliceres med $\sqrt{E^*}$ for at fjerne dimensionsløsheden

$$\lambda p = 2\pi L \cdot \frac{\hbar}{\sqrt{2mL}} = \frac{h}{\sqrt{2m}} \quad 1.70$$

hvilket blot er de Broglies relation for en fri partikel med en faktor $1/\sqrt{2m}$. Hvis potentialet ikke har form som en (uendelig) brønd, men i stedet er beskrevet bedst ved en deltafunktion, $v(x) = v_0\delta(x)$,

fås der løsningerne forskellige fra dem i forrige eksempel. Først opskrives SE, men ledet hidrørende potentialet er i dette tilfælde nærværende:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - v_0\delta(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad 1.71$$

Når man studerer de bundne tilstande for $x < 0$ er potentialet imidlertid $v(x) = 0$. Derfor gælder der for $x < 0$, at

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{E2m}{\hbar^2}\psi = \kappa^2\psi \quad 1.72$$

hvor det er antaget, at $E < 0$ fordi der kigges på bundne tilstande. Derfor er κ positiv og reel og er givet ved

$$\kappa = \frac{\sqrt{-E2m}}{\hbar^2} \quad 1.73$$

Differentialligning 1.72 har generelle løsninger på formen

$$\psi = Ae^{-\kappa x} + Be^{\kappa x} \quad 1.74$$

Hér ses det, at når $x \rightarrow -\infty$ vil $e^{-\kappa x} \rightarrow \infty$, hvorfor $A = 0$. For $x < 0$ haves det generelt, at

$$\psi = Be^{\kappa x}, \quad x < 0 \quad 1.75$$

Samme fremgangsmåde udføres for $x > 0$ og man kan vise, at

$$\psi = Fe^{-\kappa x}, \quad x > 0 \quad 1.76$$

Hvis man betragter tilfældets randbetingelser, ses det at ψ altid er kontinuert (man skal forestille sig en voksende eksponentialfunktion for $x < 0$ og en aftagende for $x > 0$). $d\psi/dx$ er kontinuert undtagen i punkter, hvor potentialet er uendelig. Konsekvensen af disse randbetingelser er for det første, at $B = F$, sådan at den samlede løsning kan skrives

$$\psi = \begin{cases} Be^{\kappa x} & , x \leq 0 \\ Be^{-\kappa x} & , x \geq 0 \end{cases} \quad 1.77$$

Det er interessant at undersøge diskontinuiteten af $d\psi/dx$. Dette gøres ved at integrere SE fra $-\epsilon$ til $+\epsilon$ og derefter studere grænseværdien når $\epsilon \rightarrow 0$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \frac{d^2\psi}{dx^2} dx + \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} v(x)\psi dx = E \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \psi dx \quad 1.78$$

Højresiden er tydeligvis 0, og ligning 1.78 reducerer til

$$\left[\frac{d\psi}{dx} \right]_{-\epsilon}^{+\epsilon} = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} v(x)\psi dx \quad 1.79$$

og

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[\frac{d\psi}{dx} \right]_{-\epsilon}^{+\epsilon} = \frac{2m}{\hbar^2} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} v(x)\psi dx \quad 1.80$$

Normalt er højresiden lig med 0, fordi potentialet er kontinuert, men i dette tilfælde, hvor potentialet er Diracs deltafunktion, er højresiden forskellig fra 0. Når $v(x) = -v_0\delta(x)$ substitueres i ligning 1.79 fås pga. regnereglerne for Diracs deltafunktion

$$\left[\frac{d\psi}{dx} \right]_{-\epsilon}^{+\epsilon} = \Delta \left(\frac{d\psi}{dx} \right) = -\frac{2mv_0}{\hbar^2} \psi(0) \quad 1.81$$

Størrelsen $\Delta(d\psi/dx)$ kan bestemmes vha. ligning 1.77 til

$$\Delta \left(\frac{d\psi}{dx} \right) = \frac{d\psi}{dx} \Big|_{x>0} - \frac{d\psi}{dx} \Big|_{x<0} = -B\kappa - B\kappa = -2B\kappa \quad 1.82$$

Fordi $\psi(0) = B$ og med hjælp fra ligning 1.81 og 1.82 ses det, at

$$-2B\kappa = -\frac{2mv_0B}{\hbar^2} \Rightarrow \kappa = \frac{mv_0}{\hbar^2} \quad 1.83$$

Ifølge definitionen i ligning 1.73 kan energierne bestemmes til

$$E = -\frac{\kappa^2 \hbar^2}{2m} = -\frac{m^2 v_0^2 \hbar^2}{\hbar^4 2m} = -\frac{mv_0^2}{2\hbar^2} \quad 1.84$$

Konstanten B kan bestemmes, når integralet af normkvadratet betragtes for $x \rightarrow \pm\infty$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_0^{+\infty} (2B^2 e^{-2\kappa x}) dx = 2B^2 \left[\frac{e^{-2\kappa x}}{-2\kappa} \right]_0^{+\infty} = \frac{B^2}{\kappa} = 1 \quad 1.85$$

dvs.

$$B = \sqrt{\kappa} = \frac{\sqrt{mv_0}}{\hbar} \quad 1.86$$

Den endelige løsning er således

$$\psi(x) = \frac{\sqrt{mv_0}}{\hbar} e^{-\frac{mv_0|x|}{\hbar^2}} \quad 1.87$$

1.5 WKB approksimationen

Indtil videre er der set på brønde, som har uendelige vægge når energien for en bølge skal udregnes analytisk, som gjort i 1.4. I tilfælde hvor potentialet kun giver en uendelig væg ved den ene grænse, eller hvor der ingen uendelige vægge er tilstede, kan følgende approksimation anvendes:

$$\int_{L_1}^{L_2} p(x) dx = \begin{cases} (n - 1/4)\pi\hbar & \text{for et potentiale med en uendelig væg} \\ (n - 1/2)\pi\hbar & \text{for et potentiale uden uendelig væg} \end{cases} \quad 1.88$$

Denne approksimation er dannet ud fra betingelsen af at en bølge i en uendelig brønd, er nødsaget til at være en stående bølge, se del 1.4.

L_1 og L_2 er for tilfælde hvor der ikke er 2 uendelige vægge, vendepunkterne for bølgefunktionen. Ud over disse grænser vil potentialet få en større værdi end energien af bølgen. Resultatet er at $p(x)$ kommer til at blive et komplekst tal, da:

$$p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))} \quad 1.89$$

Derved kan vendepunkterne findes, når $V(x) = E$ for de potentiale vægge som ikke er uendeligt høje. Når vendepunkterne er fundet indsættes disse på energiens (E) plads i udtrykket for $p(x)$, og denne integreres. Når integrationsværdien er fundet bruges kvantiseringsbetingelserne, bestemt ud fra om der er en eller ingen uendelige vægge, til at finde de energier som WKB approksimationen giver.

For et harmonisk potentiale, dvs. $V(r) = m\omega^2 r^2/2$, kan energien i vendepunkterne $r_i = r_1$ og r_2 skrives

$$E = \frac{m\omega^2 r_i^2}{2} \quad 1.90$$

Ifølge ligning 1.88 gælder der følgende for det harmoniske potentiale:

$$\int_{r_1}^{r_2} p(r) dr = \left(n - \frac{1}{2}\right)\pi\hbar \quad 1.91$$

hvor der i den semiklassiske beskrivelse gælder, at

$$p(r) = \sqrt{2m(E - V(r))} \quad 1.92$$

Når venstresiden af ligning 1.91 udledes fås (udledning fremgår i Appendiks A3, afsnit 6.3)

$$\int_{r_1}^{r_2} p(r) dr = \frac{2m\omega r_i^2 \pi}{4} = \frac{E\pi}{\omega} \quad 1.93$$

Når dette substitueres i ligning 1.91 fås sammenhængen

$$E = \left(n - \frac{1}{2}\right)\omega\hbar \quad 1.94$$

2 Numeriske resultater

2.1 Endelig firkantet brønd

I opgave 1.4.1 blev det udledt, hvordan energierne for bølgerne i en uendelig brønd med bestemt dimension, hænger sammen med bølgetallet, n :

$$E = \frac{n^2 \pi^2}{4} \quad 2.1$$

Udledningen af denne sammenhæng kan findes i appendiks.

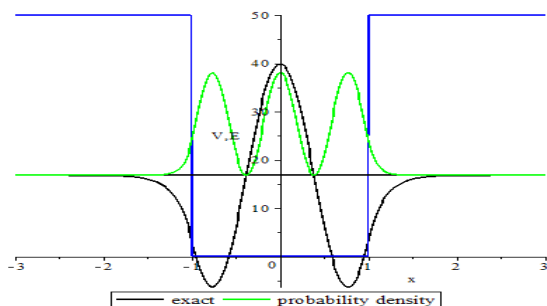
Bølgetallet skal være et naturligt tal, og den endelige brønd, som skal testes, har højden 50. Derfor er den maksimale energi som bølgen kan antage 50. For den uendelige brønd testes det, hvornår bølgen får en energi over 50.

Det testes derefter i Maple, om disse energier også gælder for den endelige brønd. I Maple er to operationer brugt, som kan bestemme energien for bølgerne i brønden. Ved at bruge den såkaldte Shoot, tilnærmes en øvre og nedre værdi for bølgeenergien. AutoShoot bruges herefter til de to funde værdier, og bølgen og dens tilhørende bølgeenergi samt sandsynlighedstæthed bliver oplyst. Følgende resultater er opnået:

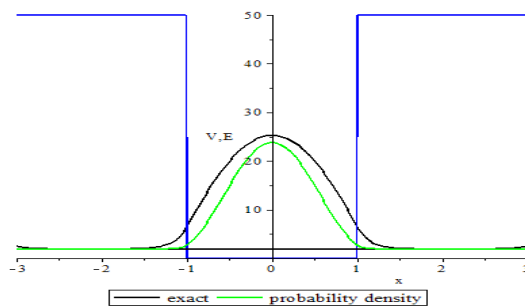
n	E for den uendelige brønd	E for den endelige brønd	Ændring fra uendelig brønd til endelig i procent
1	2,47	1,89	23,5
2	9,87	7,53	23,7
3	22,20	16,77	24,5
4	39,48	29,29	25,8
5	61,69	44,03	28,6

Det ses derfor at der kun kan være 4 bølger i den uendelige brønd, da energien ellers vil være for høj. Sammenlignes dette med værdierne for den uendelige brønd, ligger energierne for den endelige brønd konsekvent under værdierne for den uendelige brønd. Dette er også forventet da bølgerne i den endelige brønd, ikke skal ende i 0 på grænsen, og derfor får disse en lavere krumning, derved en lavere energi. På Figur 2.2 ses det at bølgen ikke ender i 0 ved grænsen, men går ud over denne.

Ændringen af forskellen i procent fra den uendelige brønd, til den endelige, vokser i størrelse. Dette skyldes at en større del af bølgen går over grænsen i stedet for at stoppe i 0, jo større bølgetallet bliver. Sammenholdes Figur 2.1 med Figur 2.2 ses denne tendens.



Figur 2.2: Bølgefunktionen med $n=3$, den sorte streg angiver bølgefunktionen og den grønne sandsynlighedstæthed



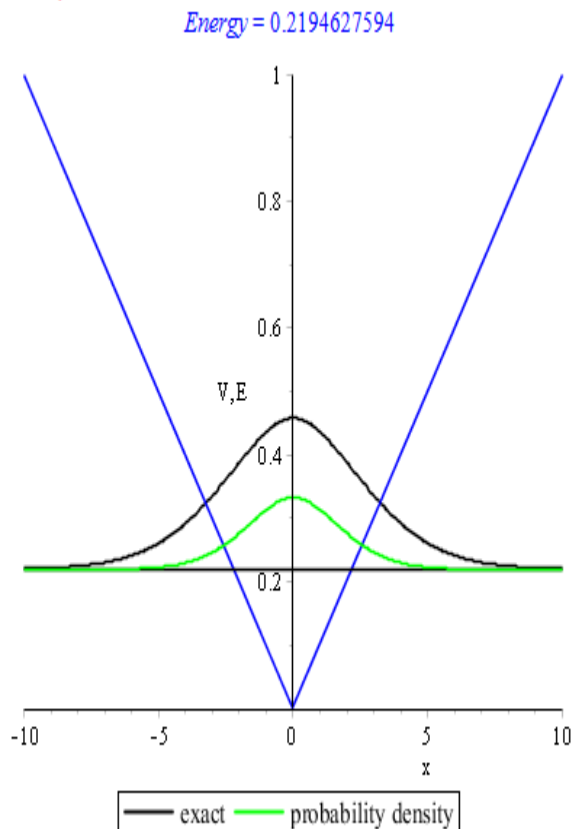
Figur 2.1: Bølgefunktion med $n=1$, den sorte streg angiver bølgefunktionen og den grønne sandsynlighedstæthed det ses desuden at der er mindre af bølgen som går over grænsen end ved $n=3$

2.2 Trekantspotentiale

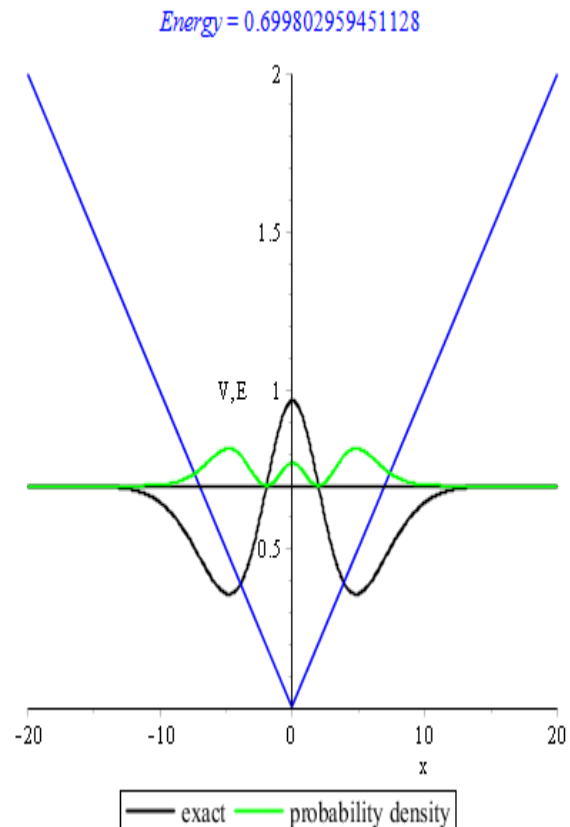
For at vise hvordan sandsynlighedstætheden fordeler sig, er samme metode som i den endelige firkan- tede brønd blevet brugt, men nu med en anden potentialefordeling. For at danne et trekantspotentiale er den absolutte værdi blevet brugt, samt en skaleringsfaktor.

$$V(x) = \frac{1}{10} |x| \tag{2.2}$$

Ved igen at bruge Shoot og AutoShoot er følgende resultater blevet fundet for trekantspotentialet:



Figur 2.4: Trekantspotentiale med n=1



Figur 2.3: Trekantspotentiale med n=3

Det ses ved sammenligning af Figur 2.3 og Figur 2.4 at sandsynlighedstætheden ændrer sig. Hvad der er vigtigt at bemærke er, at sandsynligheden for at finde partiklen bliver større ved grænsen af potentialet, jo højere at energien bliver for bølgen. Sandsynlighedstætheden kommer derfor til at ligne en harmonisk svingning, jo højere energien er for bølgen.

2.3 WKB approksimationen

En tilnærmelse til energierne kan dannes ved WKB approksimationen. Metoden for WKB er forklaret i afsnit 1.5. Ved hjælp af funktionen WKB i Maple vides det at energierne for en funktion:

$$v(x) = \frac{x^2}{4} \quad 2.3$$

Beskrives ved:

$$\epsilon = n - \frac{1}{2} \quad 2.4$$

Dette testes ved shooting metoden i Matlab og sammenlignes. For potentialet med sammenhængen $\frac{x^2}{4}$ er det fundet at:

n	Shooting	WKB	Forskel i procent
1	$0,5 - 2,9 \cdot 10^{-9}$	0,5	$-5,8 \cdot 10^{-7}$
2	$1,5 + 1,5 \cdot 10^{-8}$	1,5	$1 \cdot 10^{-6}$
3	$2,5 + 1,6 \cdot 10^{-8}$	2,5	$6,4 \cdot 10^{-7}$
4	$3,5 + 3,8 \cdot 10^{-8}$	3,5	$1,1 \cdot 10^{-6}$
5	$4,5 + 3,3 \cdot 10^{-8}$	4,5	$7,3 \cdot 10^{-7}$
6	$5,5 + 6 \cdot 10^{-8}$	5,5	$1,1 \cdot 10^{-6}$
7	$6,5 + 3,8 \cdot 10^{-8}$	6,5	$5,8 \cdot 10^{-7}$

Det viser sig, at WKB metoden er en meget præcis approksimation. For de ulige tilstande gælder det at deres usikkerhed ligger lavere end de lige tilstande. Desuden er det værd at bemærke at den første tilstand ligger over shooting metoden, ellers er approksimationens energier en smule lavere end de faktiske værdier. Den mest præcise del er den anden tilstand, som kun afviger med 10^{-6} %.

3 Egenfunktioner til Hamiltonoperatoren og variationsmetoden

3.1 Egenskaber ved egenfunktionerne til Hamiltonoperatoren

De stationære tilstande er bestemt af løsningerne til den stationære Schrödingerligning (SE). På dimensionsløs form kan denne skrives

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + v(x) \right] \psi_n(x) = \varepsilon_n \psi_n(x) \quad 3.1$$

eller blot

$$\mathcal{H} \psi_n(x) = \varepsilon_n \psi_n(x) \quad 3.2$$

hvor \mathcal{H} betegner Hamiltonoperatoren. Notationen i ligning 3.2 antyder, at $\psi_n(x)$ er en egenfunktion til \mathcal{H} med egenværdi ε_n . En vigtig egenskab i kvantemekanikken er superpositionsprincippet, som betyder, at enhver bølgefunktion kan skrives som en superposition af de stationære bølgefunktioner

$$\psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x) \quad 3.3$$

hvor c_n generelt er komplekse, men kan være reelle. Sandsynligheden for at observere energien ε_n er lig med $|c_n|^2$. Det kan vises at to bølgefunktioner ψ_n og ψ_k , der korresponderer til forskellige energier $\varepsilon_n \neq \varepsilon_k$, er orthogonale, og at de kan være orthonormale. For de to bølgefunktioner kan der skrives

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + v(x) \right] \psi_n(x) = \varepsilon_n \psi_n(x) \quad 3.4$$

og

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + v(x) \right] \psi_k^*(x) = \varepsilon_k^* \psi_k^*(x) \quad 3.5$$

hvis ligning 3.4 multipliceres med den kompleks konjugerede af den egenfunktion ψ_k^* (ligning 3.5) og integreres for $x \rightarrow \pm\infty$, mens der huskes, at udtrykket i firkantparentesen fungerer som operator, og der gøres det tilsvarende for ligning 3.5, blot med ψ_n i stedet for ψ_k^* fås

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_k^*(x) \left[-\frac{d^2}{dx^2} + v(x) \right] \psi_n(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \varepsilon_n \psi_n(x) \psi_k^*(x) dx \quad 3.6$$

og

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n(x) \left[-\frac{d^2}{dx^2} + v(x) \right] \psi_k^*(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \varepsilon_k^* \psi_k^*(x) \psi_n(x) dx \quad 3.7$$

Efterfølgende kan ligning 3.6 og 3.7 trækkes fra hinanden. Først ses det, at potentiale-leddet, $v(x)$, udgår fra begge ligninger og tilbage står der

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} -\psi_k^*(x) \frac{d^2}{dx^2} \psi_n(x) dx - \int_{-\infty}^{+\infty} -\psi_n(x) \frac{d^2}{dx^2} \psi_k^*(x) dx \\ = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n(x) \psi_k^*(x) (\varepsilon_n - \varepsilon_k^*) dx \end{aligned} \quad 3.8$$

Ved at benytte partiel integration på de to integraler, I_1 og I_2 , på venstre side af ligning 3.8 ses dette, at give

$$I_1 = -\psi_k^*(x) \left[\frac{d}{dx} \psi_n(x) \right]_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d}{dx} \psi_k^*(x) \frac{d}{dx} \psi_n(x) dx \quad 3.9$$

og (fortegnet foran integrationstegnet er ikke inddraget)

$$I_2 = -\psi_n(x) \left[\frac{d}{dx} \psi_k^*(x) \right]_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d}{dx} \psi_n(x) \frac{d}{dx} \psi_k^*(x) dx \quad 3.10$$

Når I_2 trækkes fra I_1 ses det, at ligning 1.38 reduceres til

$$\begin{aligned} \psi_n(x) \left[\frac{d}{dx} \psi_k^*(x) \right]_{-\infty}^{+\infty} - \psi_k^*(x) \left[\frac{d}{dx} \psi_n(x) \right]_{-\infty}^{+\infty} \\ = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n(x) \psi_k^*(x) (\varepsilon_n - \varepsilon_k^*) dx \end{aligned} \quad 3.11$$

hvor det er klart, at de første afledte af de to bølgefunktioner ψ_k^* og ψ_n evalueret i grænseværdierne $x \rightarrow \pm\infty$ giver 0 (da bølgefunktionen $\psi(\pm\infty) \rightarrow 0$). Derfor haves der fra højreside af ligning 3.11, at

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n(x) \psi_k^*(x) (\varepsilon_n - \varepsilon_k^*) dx = 0 \quad 3.12$$

Heraf kan der erkendes to egenskaber. Hvis $n = k$, så er

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n(x) \psi_n^*(x) dx = 1 \quad 3.13$$

og så må $\varepsilon_n - \varepsilon_n^* = 0$, hvilket medfører, at energierne ε_i er reelle. Hvis $n \neq k$, så er $\varepsilon_n - \varepsilon_n^* \neq 0$, hvorfor der må gælde, at

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n(x) \psi_k^*(x) dx = 0 \quad 3.14$$

hvilket betyder, at bølgefunktionernes indre produkt er lig med 0, som geometrisk betyder, at bølgefunktionerne er orthogonale. Bølgefunktionerne kan også skrives orthonormale, så det er vist, at

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n(x) \psi_k^*(x) dx = \delta_{n,k} \quad 3.15$$

I ligning 3.3 introduceres størrelsen c_n , hvortil der gælder

$$P_n = |c_n|^2 \quad 3.16$$

hvor P_n er sandsynligheden for at observere energien ε_n . Når alle $\psi_n(x)$ er normerede ses det, at

$$1 = \langle \psi | \psi \rangle = \langle \sum_n c_n \psi_n | \sum_k c_k^* \psi_k^* \rangle = \sum_n \sum_k c_n c_k^* \langle \psi_n | \psi_k^* \rangle = \sum_n \sum_k c_n c_k^* \langle \psi_n | \psi_k^* \rangle \quad 3.17$$

Det viste sig i ligning 3.15 at bølgefunktionerne ψ_n og ψ_k^* er orthogonale, så

$$1 = \sum_n \sum_k c_n c_k^* \delta_{n,k} = \sum_n c_n c_n^* = \sum_n |c_n|^2 \quad 3.18$$

hvor det indses, at deltanotationen kun giver 1, når $n = k$. Gennemsnitsenergien i en stationær tilstand er ifølge statistisk teori

$$\bar{\varepsilon} = \sum_n P_n \varepsilon_n \quad 3.19$$

Når ligning 3.16 substitueres i ligning 3.19 fås

$$\bar{\varepsilon} = \sum_n |c_n|^2 \varepsilon_n \quad 3.20$$

Det kan vises, at integralet

$$\langle \mathcal{H} \rangle \equiv \langle \psi | \mathcal{H} | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \mathcal{H} \psi dx = \bar{\varepsilon} \quad 3.21$$

hvor \mathcal{H} er Hamiltonoperatoren defineret i ligning 3.1 og 3.2. Når sidstnævnte definition indsættes i ligning 3.21 fås

$$\langle \mathcal{H} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \varepsilon_n \psi dx = \bar{\varepsilon} \quad 3.22$$

Herefter udnyttes superpositionsprincippet i ligning 3.3, så

$$\langle \mathcal{H} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_n (c_n^* \psi_n^*) \sum_n (c_n \psi_n) \varepsilon_n dx = \bar{\varepsilon} \quad 3.23$$

$\int \psi_n^* \psi_n = 1$ og $\sum c_n^* c_n = |c|^2$, så det fremkommer, at

$$\langle \mathcal{H} \rangle = \sum_n |c|^2 \varepsilon_n = \bar{\varepsilon} \quad 3.24$$

Hvilket er i overensstemmelse med ligning 3.20. Eftersom grundtilstandens energi aldrig kan være mindre end minimumspotentialet vil det gennemsnitslige niveau, $\bar{\varepsilon}$, altid være større end eller lig med grundtilstandens, ε_{gs}

$$\langle \mathcal{H} \rangle = \sum_n |c_n|^2 \varepsilon_n \geq \sum_n |c_n|^2 \varepsilon_{gs} = \varepsilon_{gs} \quad 3.25$$

hvilket er en meget vigtig relation i variationsregning til bestemmelse af grundtilstandes energier.

3.2 Variationsmetoden

I variationsmetoden forsøger man, at bestemme grundtilstandens energi. Den grundlæggende filosofi i variationsmetoden er, at vælge en test-bølgefunktion, hvor man beregner forventningsværdien af Hamiltonoperatoren, $\langle \mathcal{H} \rangle$, som altid vil være større end eller lig med grundtilstandsenergien. Herefter minimerer man $\langle \mathcal{H} \rangle$ for at komme så tæt på ε_{gs} som muligt. Formalistisk kan det skrives, at

$$\langle \mathcal{H} \rangle = \langle \sum_n c_n \psi_n | \mathcal{H} | \sum_m c_m \psi_m \rangle \quad 3.26$$

dvs.

$$\langle \mathcal{H} \rangle = \sum_n \sum_m c_n^* c_m \langle \psi_n | \mathcal{H} \psi_m \rangle \quad 3.27$$

Når $\mathcal{H} \psi_m = \varepsilon_m \psi_m$ substitueres fås

$$\langle \mathcal{H} \rangle = \sum_n \sum_m c_n^* c_m \varepsilon_m \langle \psi_n | \psi_m \rangle \quad 3.28$$

hvor $\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{n,m}$, så

$$\langle \mathcal{H} \rangle = \sum_n c_n^* c_n \varepsilon_n = \sum_n |c_n|^2 \varepsilon_n \geq \varepsilon_{gs} \quad 3.29$$

Typisk efterlader man en konstant i $\langle \mathcal{H} \rangle$, som man senere kan bruge til at minimere udtrykket med.

3.3 Analytisk eksempel på variationsmetoden

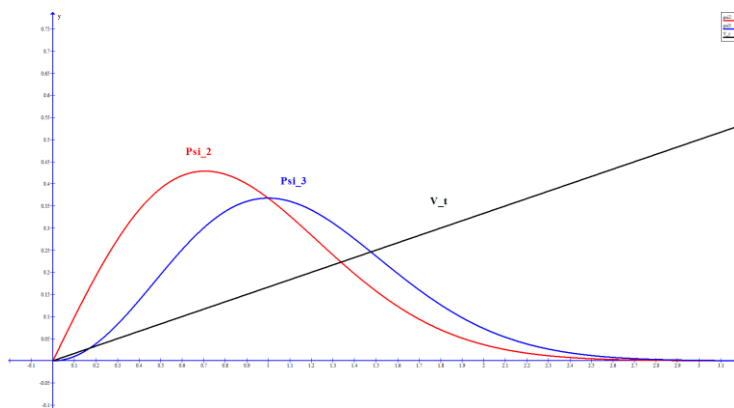
En partikel er bundet i et éndimensionelt potentiale på formen

$$V(x) = \begin{cases} \infty & , \quad x < 0 \\ \alpha x & , \quad x > 0 \end{cases} \quad 3.30$$

Man kan opstille følgende testfunktioner:

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= e^{-\beta x^2} & , \quad x > 0 \\ \psi_2(x) &= x e^{-\beta x^2} & , \quad x > 0 \\ \psi_3(x) &= x^2 e^{-\beta x^2} & , \quad x > 0 \\ \psi_i(x) &= 0 & , \quad x < 0 \quad \forall i \end{aligned} \quad 3.31$$

Visse af disse funktioner er ikke fysisk acceptable. F.eks. vil $\psi_1 \rightarrow \infty$ når $x \rightarrow 0$. Både ψ_2 og ψ_3 er acceptable, idet polynomiumsleddene foran eksponentialleddene sørger for, at funktionen går imod 0, når $x \rightarrow 0$. ψ_i er en triviel funktion for $x > 0$, men den er gyldig for $x < 0$. Blandt de fire testfunktioner kan man forvente, at ψ_2 har størst lighed med den eksakte. Dette skyldes, at ψ_2 peaket tidligere end ψ_3 samt at krumningen af ψ_2 stemmer bedre overens med den kendsgerning, at den ene væg i potentialet er uendelig.



Figur 3.1: Illustration af testbølgefunktionerne 2 og 3.

Variationsmetoden kan benyttes på $\psi_2(x)$, som først skal normeres. Der implementeres således en normeringskonstant, A

$$\psi_2(x) = A x e^{-\beta x^2}, \quad x > 0 \tag{3.32}$$

Normeringen forløber vha. $\langle \psi_2 | \psi_2 \rangle = 1$, så

$$\int_0^{\infty} |A|^2 x^2 e^{-2\beta x^2} dx = 1, \quad x > 0 \tag{3.33}$$

så¹

$$|A|^2 = \frac{8\sqrt{2}\beta^{3/2}}{\sqrt{\pi}} \tag{3.34}$$

Hamiltonoperatoren \mathcal{H} er summen af de to energi bidrag (kinetisk og potentiel)

$$\langle \mathcal{H} \rangle = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \alpha x \right] = \langle K \rangle + \langle V \rangle \tag{3.35}$$

Forventningsværdien af den kinetiske energi er derfor²

$$\langle K \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} |A|^2 \int_0^{\infty} x e^{-\beta x^2} \frac{d^2}{dx^2} x e^{-\beta x^2} dx = \frac{3}{2} \frac{\hbar^2 \beta}{m} \tag{3.36}$$

Tilsvarende kan forventningsværdien af den potentielle energi bestemmes

¹ Integralet er løst i Mathematica

² Integralet er løst i Mathematica

$$\langle V \rangle = \alpha |A|^2 \int_0^\infty x^3 e^{-2\beta x^2} dx = \frac{\sqrt{2}\alpha}{\sqrt{\pi\beta}} \quad 3.37$$

så der i alt fås

$$\langle \mathcal{H} \rangle = \langle K \rangle + \langle V \rangle = \frac{3\hbar^2\beta}{2m} + \frac{\sqrt{2}\alpha}{\sqrt{\pi\beta}} \quad 3.38$$

Af dette resultat ses det, at den kinetiske energi stiger, når β stiger, og omvendt for den potentielle energi. Dette giver god mening, eftersom β bestemmer hældningen på bølgefunktionen ψ_2 . Jo større en hældning, jo større en krumning og dermed en større kinetisk energi. Når β falder bliver ψ_2 geometrisk "bredere" således at der vil være en større sandsynlighed for at observere partiklen længere væk fra $x = 0$, altså stiger den potentielle energi.

For at beregne det bedste estimat på grundtilstandsenergien skal forventningsværdien $\langle \mathcal{H} \rangle$ minimeres. Hvis den første afledte af denne mht. variationsvariablen β sættes lig 0, kan der bestemmes den β , hvortil gennemsnitsværdien er mindst.

$$\frac{d}{d\beta} \langle \mathcal{H} \rangle = \frac{3\hbar^2}{2m} - \frac{\alpha}{\sqrt{2\pi}\beta^{3/2}} = 0 \quad 3.39$$

↓

$$\beta^{-3/2} = \frac{3\sqrt{2\pi}\hbar^2}{2m\alpha} \quad 3.40$$

↓

$$\beta = \left(\frac{3\sqrt{2\pi}\hbar^2}{2m\alpha} \right)^{-2/3} \quad 3.41$$

Når dette indsættes i ligning 3.39 fås de minimerede forventningsværdier, $\langle \mathcal{H} \rangle_{min}$

$$\langle \mathcal{H} \rangle_{min} = \frac{3\hbar^2}{2m} \left(\frac{3\sqrt{2\pi}\hbar^2}{2m\alpha} \right)^{-2/3} + \frac{\sqrt{2}\alpha}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\left(\frac{3\sqrt{2\pi}\hbar^2}{2m\alpha} \right)^{-1/3}} \quad 3.42$$

eller

$$\langle \mathcal{H} \rangle_{min} = \frac{3 \cdot \alpha^{2/3} \cdot \hbar^{2/3} \cdot \left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3}}{2^{2/3} \cdot m^{1/3}} \quad 3.43$$

4 Numeriske resultater af variationsmetoden

5 Sammenfatning

6 Appendiks

6.1 Appendiks A1

Udledningen af den tidsafhængige og stationære løsning af SE gøres ved separation af de variable. Ved først at definere bølgefunktionen til at være produktet af en stedafhængig og en tidsafhængig funktion, kan separation af de variable foregå

$$\Psi(r, t) = T(t)\Psi(r) \quad 6.1$$

Dette sættes nu ind i bølgeligningen

$$i\hbar \frac{\partial T(t)\Psi(r)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 T(t)\Psi(r)}{\partial r^2} + V(r)T(t)\Psi(r) \quad 6.2$$

Der differentieres nu med hensyn til den gældende variabel. Den del af ligningen som ikke har med den gældende variabel at gøre, betragtes som en konstant. Funktioner differentieret med hensyn til tiden markeres med prikker mens funktioner differentieret med hensyn til positionen markeres med apostroffer:

$$i\hbar \dot{T}(t)\Psi(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} T(t)\Psi(r)'' + V(r)T(t)\Psi(r) \quad 6.3$$

Herefter isoleres udtryk som er afhængige af tiden på venstresiden og udtryk som har med positionen på højresiden:

$$\frac{i\hbar \dot{T}(t)}{T(t)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Psi(r)''}{\Psi(r)} + V(r) \quad 6.4$$

Det ses nu at denne ligning på være lig med en konstant, da venstresiden kun afhænger af tiden og højresiden af positionen. Konstant betegnes E . Der kan nu skrives

$$\frac{i\hbar \dot{T}(t)}{T(t)} = E \quad 6.5$$

og

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Psi(r)''}{\Psi(r)} + V(r) = E \quad 6.6$$

Herefter ganges der igennem med nævnerne i ligning 6.5 og 6.6 så der fås:

$$i\hbar \dot{T}(t) = ET(t) \quad 6.7$$

og

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi(r)'' + V(r)\Psi(r) = E\Psi(r) \quad 6.8$$

hvor ligning 6.7 er den tidsafhængige løsning og 6.8 er den stationære løsning, der er afhængig af position.

6.2 Appendiks A2

Den dimensionsløse SE er givet ved ligning

$$-\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + v(x)\psi(x) = \varepsilon\psi(x) \quad 6.9$$

Først opskrives bølgeligningen (SE):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(r)}{\partial r^2} + V(r)\Psi(r) = E\Psi(r) \quad 6.10$$

Ved at erstatte følgende størrelser ind i ligning 6.10

$$x = \frac{r}{L}, \quad v(x) = \frac{V(xL)}{E^*}, \quad \varepsilon = \frac{E}{E^*}, \quad \psi(x) = \Psi(x)(xL)\sqrt{L} \quad 6.11$$

kan den dimensionsløse form af SE opnås

$$-\frac{\hbar^2}{2mE^*}\frac{d^2\Psi(r)}{dr^2} + \frac{V(r)}{E^*}\Psi(r) = \frac{E}{E^*}\Psi(r) \quad 6.12$$

↓

$$-\frac{\hbar^2}{2mE^*}\frac{d^2\psi(x)}{d(xL)^2}\frac{1}{\sqrt{L}} + \frac{v(x)}{\sqrt{L}}\psi(x) = \frac{\varepsilon}{\sqrt{L}}\psi(x) \quad 6.13$$

↓

$$-\frac{\hbar^2}{2mE^*L^2}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + v(x)\psi(x) = \varepsilon\psi(x) \quad 6.14$$

Ved sammenligning af ligning 6.14 og 6.9 ses det, at

$$\frac{\hbar^2}{2mE^*L^2} = 1 \quad 6.15$$

↓

$$E^* = \frac{\hbar^2}{2mL^2} \quad 6.16$$

E^* og L er altså ikke uafhængige, og man kan kun frit vælge én af dem.

6.3 Appendiks A3

Der haves følgende ligning, hvor integralet på venstresiden skal evalueres:

$$\int_{r_1}^{r_2} \sqrt{2m(E - V(r))} dr = \left(n - \frac{1}{2}\right) \pi \hbar \quad 6.17$$

hvor

$$V(r) = \frac{m\omega^2 r^2}{2} \quad 6.18$$

og

$$E = \frac{m\omega^2 r_i^2}{2} \quad 6.19$$

Når ligningerne 6.18 og 6.19 indsættes i ligning 6.17 fås

$$\int_{r_1}^{r_2} \sqrt{2m \left(\frac{1}{2} m\omega^2 (r_i^2 - r^2)\right)} dr = \left(n - \frac{1}{2}\right) \pi \hbar \quad 6.20$$

↓

$$2m\omega \int_0^{r_2} \sqrt{r_i^2 - r^2} dr = \left(n - \frac{1}{2}\right) \pi \hbar \quad 6.21$$

Der udføres en substitution, hvor $r = r_i \sin \theta$ så $dr/d\theta = r_i \cos \theta$

$$2m\omega \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sqrt{r_i^2 (1 - \sin^2 \theta)} \cos \theta \cdot r_i d\theta = \left(n - \frac{1}{2}\right) \pi \hbar \quad 6.22$$

$1 - \sin^2 \theta = \cos^2 \theta$ ifølge "idiotformlen", så

$$2m\omega \int_0^{\frac{\pi}{2}} r_i^2 \cos^2 \theta d\theta = \left(n - \frac{1}{2}\right) \pi \hbar \quad 6.23$$

r_i^2 er konstant, så den kan trækkes ud af integrationen og tilbage får man

$$2m\omega r_i^2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} \cos^2 \theta d\theta = \left(n - \frac{1}{2}\right) \pi \hbar \quad 6.24$$

hvor venstresiden er det samme som

$$\frac{2m\omega r_i^2 \pi}{4} = \frac{E\pi}{\omega} \quad 6.25$$

