Schrödingerin yhtälö

Kvanttimekaanisen aaltofunktion aaltoyhtälö on

"hattu"

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

eli Schrödingerin yhtälö.

Oletettu edellä:

- vain yksi hiukkanen (vain yksi paikka, x)
- vain yksi ulottuvuus (x)
- ei sisäistä vapausasteita

$\hat{H}$ on Hamiltonin operaattori, jonka muoto riippuu systeemistä.
Vapaalle m-massaiselle epärelativistiselle (eli hitaalle) hiukkaselle $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$.

"Observaabelin operaattorin ominaistilat ovat mahdolliset mittaustulokset"

Mitattava suure

$\longleftrightarrow$ observaabeli
esim. "energia"

$\longrightarrow$ operaattori
esim. "Hamiltonin operaattori"

$\rightarrow$ ominaisarvot

$\rightarrow$ kohta nähdään

Stationaariset ratkaisut

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t).$$

Yrite: $\psi(x,t) = \underbrace{\varphi_n(x)}_{\text{ei riipu ajasta} \to \text{stationaarinen}} \cdot \underbrace{e^{-i\omega_n t}}_{\text{Vaihekerroin}}$

Huomioita:

+ värähtelytaajuus ω_n
  → aikariippuvuus ei muuta todennäköisyysjakaumaa $|\varphi_n(x)e^{-i\omega_n t}|^2 = |\varphi_n(x)|^2$.
  (vrt. klassinen aalto $\varphi_n(x)\cdot\sin(\omega_n t)$)
+ ratkaisuja monta, luetellaan ~~indeksoidaan~~ alaindeksillä "n".
+ $\varphi_n(x)$ on Hamiltonin operaattorin ominaistila (kuten pian nähdään)

Sijoitetaan yrite.

Vasen puoli:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \varphi_n(x)\, i\hbar\frac{\partial}{\partial t}e^{-i\omega_n t}$$

$$= -i^2\hbar\omega_n\varphi_n(x)e^{-i\omega_n t}$$

$$= \hbar\omega_n\,\psi(x,t).$$

Oikea puoli:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi_n(x)\right]\cdot e^{-i\omega_n t}$$

$$\Rightarrow \boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi_n(x) = \hbar\omega_n\varphi_n(x)}$$

$E_n = \hbar\omega_n$ deBroglie relaatio!

Ajasta riippumaton Schrödingerin yhtälö

Yleisemmin: $\hat{H}\varphi_n = E_n\varphi_n$.

Kantatilat

Stationaariset tilat $\varphi_n(x)$

- Hamiltonin operaattorin ominaistiloja $\quad \hat{H}\varphi_n(x) = E_n \varphi_n(x)$.
- energia hyvin määritelty E_n.
- muodostavat täydellisen kannan eli mielivaltainen tila $\psi(x)$ voidaan esittää stationaaristen tilojen lineaarikombinaationa

$$\psi(x) = \sum_n \alpha_n \varphi_n(x) \quad , \text{ missä } \quad \alpha_n = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^*(x)\, \psi(x)\, dx .$$

- ortogonaaliset eli

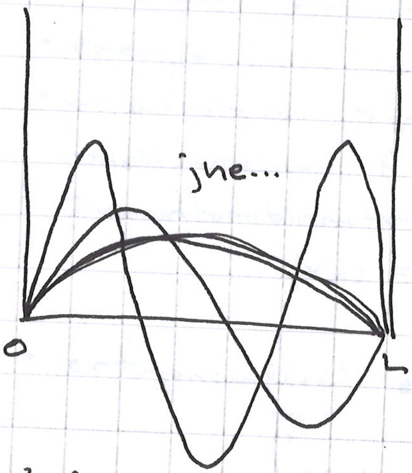
$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n(x)\, \varphi_m(x)\, dx = \begin{cases} 0, & \text{jos } n \neq m \\ 1, & \text{jos } n = m \quad \text{(normitettu)} \end{cases}$$

- tapa ratkaista aikakehitys:

$$\psi(x,t) = \sum_n \alpha_n \varphi_n(x) \cdot e^{-iE_nt/\hbar} .$$

1D potentiaalikuoppa

Reunaehdot $\psi(x,t) = 0$, jos $x \notin]0,L[$



Ratkaise differentiaaliyhtälö

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi_n(x) = E_n\varphi_n(x)$$

Normitus:

$$\int_0^L |\varphi_n(x)|^2 = 1. \;!$$

+ reunaehdot, $\varphi_n(0) = \varphi_n(L) = 0$.

laskareissa

$\Rightarrow \ldots \Rightarrow \quad \varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin(k_n x)$

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

mutta reunaehdoista lisäksi

$k_n = \frac{n\pi}{L} \quad n \in \cancel{\mathbb{Z}}.\ \underline{n \in \mathbb{N}\setminus\{0\}}.$

- $\underbrace{\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}}\psi(x)$

  2. kl derivaatta $\leftrightarrow$ $\psi(x)$:n kaarevuus
- kaarevampi $\leftrightarrow$ suurempi energia
- reunaehdot $\rightarrow$ ~~alimman til~~ alimman energian tila $\sin(k_1 x)$
- lisää nollakohtia
  - $\rightarrow$ suurempi kaarevuus
    - $\rightarrow$ suurempi energia

$$\Rightarrow E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\cdot\left(\frac{\pi}{L}\right)^2\cdot n^2$$

de Broglie:

$k = p/\hbar \rightarrow p = \hbar k$,

$E_{kin} = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$.