KAPITTEL 3: SCHRÖDINGERLIKNINGA

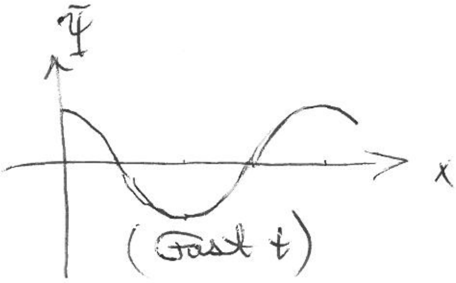
Vi har sett at i tiårene rundt det 20. århundres begynnelse kom det eksperimentelle resultater som var i strid med forutsigelser fra klassisk fysikk. Lys og ~~partikler~~ materie hadde egenskaper som tydet på at begge kunne oppføre seg som både bølger og partikler.

Vi skal nå se hvordan det ble konstruert en likning som kunne beskrive "materiebølgers" utbredelse. Den lar partikler ~~bli~~ beskrevet ved bølgefunksjonen $\Psi(\vec{r},t)$. Vi får bare sannsynligheter for posisjon og impuls, gitt ved $\Psi^*\Psi$.

3.1 Utledning av Schrödingerlikninga.

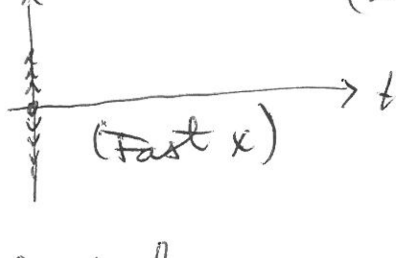
S. l. kan ikke utledes noe mer enn Newtons gravitasjonslikning eller $\vec{F} = m\vec{a}$. Vi skal se at noen rimelige innebygde antakelser leder til en likning der løsningene viser seg å gi numerisk riktige forutsigelser.

Først, litt generelt om bølger:



En plan bølge i positiv x-retning, med frekvens ν og bølgelengde λ, er gitt ved:

$$\Psi(x,t) = A\cos\left(\frac{2\pi x}{\lambda} - 2\pi\nu t\right) \qquad (3.1)$$



Notasjonsforenkling:

$k = \frac{2\pi}{\lambda}$ bølgetallet ~~(3.2)~~

$\omega = 2\pi\nu$ vinkelfrekvens ~~(3.3)~~

Bølgetallet er # bølgelengder pr. lengdeenhet, vinkelfrekvensen # perioder pr. tidsenhet.

$\Rightarrow$
$$\Psi(x,t) = A\cos(kx - \omega t) \qquad (3.2)$$

Hvis en topp når $t=0$ og $x=0$, så beveger den seg slik:

$$x_{max} = \frac{\omega}{k} t \qquad (3.3)$$

eller:

$$\boxed{v = \frac{\omega}{k}} \quad \text{fasehastigheten}$$

I 3D:

En plan bølge i retning $\hat{k}$, hvor
$$\vec{k} = |\vec{k}|\hat{k}$$
er gitt ved
$$\Psi(\vec{r},t) = A\cos(\vec{k}\vec{r} - \omega t)$$
Mer generelt, der A_1 og A_2 bestemmer amplitude og fase:
$$\Psi(\vec{r},t) = A_1\cos(\vec{k}\vec{r} - \omega t) + A_2\sin(\vec{k}\vec{r} - \omega t) \qquad (3.4)$$
Eller i kompleks notasjon:
$$\boxed{\Psi(\vec{r},t) = B e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}} \quad (B \text{ kompleks}) \qquad (3.5)$$

I klassisk mekanikk og elektromagnetisme tar man her underforstått realdelen.
I kvantemekanikk skal vi se at det er forskjellig!

*

For en likning for bølgefunksjonen:
Innfør forbindelser mellom $\vec{k}$, ω, $\vec{p}$ og E.
$$E = h\nu = \hbar\omega \quad (\text{lys})$$
$$p = h/\lambda = \hbar k \quad (\text{materiebølger}) \qquad (3.7)$$
Anta at også E-relasjonen holder for materiebølgen.
I 3D:
$$\boxed{\vec{p} = \hbar\vec{k}}$$

Ikke-relativistisk energi:

$$E = \frac{p^2}{2m} \qquad (3.8)$$

Konstruer den fra (3.5):

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i\omega B e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)}$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hbar\omega B e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)} = E\Psi \qquad (3.9)$$

Merk:

$$\left.\begin{array}{ll} i\hbar\frac{\partial}{\partial t} & \text{– lineær operator} \\ \Psi & \text{– egenfunksjon} \\ E & \text{– egenverdi} \end{array}\right\} \ !$$

For impulsen: Siden

$$\vec{k}\vec{r} = k_x x + k_y y + k_z z$$

har vi

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = ik_x B e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)}$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial y} = ik_y B e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)}$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial z} = ik_z B e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)}$$

eller

$$\nabla\Psi = \hat{x}\frac{\partial \Psi}{\partial x} + \hat{y}\frac{\partial \Psi}{\partial y} + \hat{z}\frac{\partial \Psi}{\partial z}$$

$$= i\vec{k}\Psi$$

$$-i\hbar\nabla\Psi = \hbar\vec{k}\Psi = \vec{p}\Psi$$

Dvs.:

$$\left.\begin{array}{ll} -i\hbar\nabla & \text{– lineær operator} \\ \Psi & \text{– (samme) egenfunksjon} \\ \vec{p} & \text{– egenverdi} \end{array}\right\} \ !$$

Lag en som gir <u>ikkerelativistisk energi</u>:

$$(-i\hbar\nabla)\cdot(-i\hbar\nabla)\Psi = \vec{p}\cdot\vec{p}\,\Psi$$

$$= p^2\Psi$$

$$\Rightarrow \qquad -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi = \frac{p^2}{2m}\Psi = E\Psi \qquad (3.10)$$

(hvor $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$)

eller altså ((3.9) + (3.10)):

$$-\underbrace{\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi}_{p^2/2m} = \underbrace{i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}}_{E} \qquad (3.11)$$

Anta at addisjon på venstre side av: $V\Psi$ gir total klassisk energi, dvs.

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}} \qquad (3.12)$$

SCHRÖDINGER-LIKNINGEN

Den er ikke utledet, bare konstruert slik at for $V=0$ har man plan-bølge-løsningen

$$\Psi = e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}$$

Vi postulerer at (3.12) gir korrekt bølgefunksjons løsning for alle $V \neq 0$.

Vi skal se at prediksjonene er i samsvar med eksperimenter for en stor mengde fysiske fenomener!

Generell fullt utskrevet form:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,y,z,t) + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\Psi(x,y,z,t) + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\Psi(x,y,z,t)\right)$$
$$+V(x,y,z,t)\,\Psi(x,y,z,t) \qquad (3.13)$$
$$= i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,y,z,t)$$

I 1D:

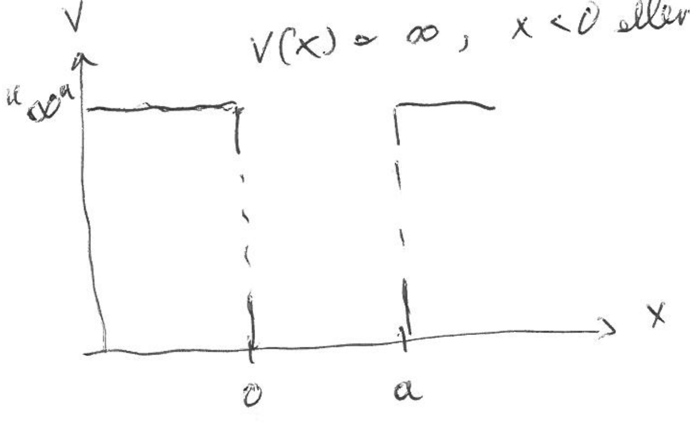
$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) + V(x,t)\,\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)}$$

På neste side:
1D versjon av "partikkel i boks".

Eksempel 3.1: Løsning av 1D SL

Ta det spesielle potensialet

$$\left.\begin{array}{ll} V(x) = 0, & 0 \le x \le a \\ V(x) = \infty, & x < 0 \text{ eller } x > 0 \end{array}\right\} \text{uendelig firkantboks-potensial}$$



God approksimasjon for alle systemer hvor $V \gg E$!

Må ha $\Psi = 0$ utenfor boksen:

$$\Psi(0,t) = \Psi(a,t) = 0$$

Inni:

Har $V=0$; anta separabel form:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} \tag{3.14}$$

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\chi(t) \tag{3.15}$$

Rettferdiggjøres hvis vi kan finne ~~form~~ løsning som oppfyller (3.14)!

(Separasjon av variable virker for en stor klasse av PDL i fysikken!)

Substituer; divider deretter:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}\chi(t) = i\hbar\psi(x)\frac{d\chi(t)}{dt}$$

$$\underbrace{\frac{1}{\psi(x)}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}}_{\text{bare } x\text{-avh.}} = \underbrace{-\frac{2mi}{\hbar}\frac{1}{\chi(t)}\frac{d\chi(t)}{dt}}_{\text{bar } t\text{-avh.}} \tag{3.16}$$

Eneste mulighet:
Begge sider lik en konstant uavh. av både x og t!

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = c\,\psi(x) \tag{3.17}$$

$$-\frac{2mi}{\hbar}\frac{d\chi(t)}{dt} = c\,\chi(t) \tag{3.18}$$

(3.17) har en sum av to eksp. funksjoner som løsning for $C > 0$,
og en sum av to trig. funksjoner for $C < 0$.
For å ha $\psi(0) = \psi(a) = 0$ kan vi <u>ikke</u> ha eksp. funksjoner:

$$\psi(x) = A_1 \sin\sqrt{-C}\,x + A_2 \cos\sqrt{-C}\,x \qquad (3.19)$$

$$\psi(0)=0 \Rightarrow \quad \psi(x) = A_1 \sin\sqrt{-C}\,x$$

$$\psi(a)=0 \Rightarrow \quad \sqrt{-C}\,a = n\pi \quad , \quad n=1,2,3,\ldots \qquad (3.20)$$

Mer i kap. 4 –
her ser vi bare på <u>n = 1</u>:

$$\boxed{C = -\frac{\pi^2}{a^2} \qquad \psi(x) = A_1 \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)}$$

Bruk C-verdien i (3.18):

$$\frac{d\chi}{dt} = -\frac{i\hbar\pi^2}{2ma^2}\chi$$

$$\Rightarrow \quad \chi = A_3 e^{-i\hbar\pi^2 t/2ma^2}$$

Med $A = A_1 A_3$:

$$\boxed{\begin{aligned} \Psi(x,t) &= A \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) e^{-i\hbar\pi^2 t/2ma^2}, \quad 0 \le x \le a \\ &= 0 \quad , \ x<0 \text{ eller } x>a \end{aligned}} \qquad (3.21)$$

I neste avsnitt:
Bestemmelse av A !

Den generelle løsningen, og n's fysiske betydning, skal vi se på i neste kapittel.

3.2 Bølgefunksjonens interpretasjon

Max Borns forslag:

$$\boxed{|\Psi(\vec{r},t)|^2 = \Psi^*(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t)}$$

som er en veell størrelse, gir sannsynlighet pr. enhetsvolum for å finne partikkelen der

$\Psi^*\Psi$ kalles sannsynlighetstetthet.

$\Psi^*\Psi$ — dim(1/volum) i 3D

— dim(1/lengde) i 1D

En partikkel har ikke en bestemt posisjon i rommet som funksjon av tida; vi kan bare kjenne sannsynligheta for å finne partikkelen i en viss region av rommet.

Farvel, grunnidé fra klassisk mekanikk!

Se (3.12) & (3.13):

Hvis $\Psi(\vec{r},t)$ oppfyller S. l., så gjør $c\Psi(\vec{r},t)$ også det!

Sannsynlighetstettheta i eksempel (3.1):

$$\left.\begin{aligned}\Psi^*\Psi &= \left(A^*\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)e^{i\hbar\pi^2 t/2ma^2}\right)\left(A\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)e^{-i\hbar\pi^2 t/2ma^2}\right)\\ &= |A|^2\sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) \qquad \text{(i pot. brønnen)}\end{aligned}\right\} \quad (3.22)$$

Bestem $|A|^2$ ved

$$\boxed{\int \Psi^*\Psi\, d^3\vec{r} = 1} \quad \text{(integral over hele rommet)} \qquad (3.23)$$

Ψ bestemt slik, kalles normalisert.

i vårt 1D eksempel 3.1:

$$\int_0^a |A|^2 \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx = 1 \qquad \text{(se nederst!)}$$

$$|A|^2 \tfrac{1}{2} a = 1$$

$$|A|^2 = \frac{2}{a} \qquad (3.24)$$

Kan velge $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$, men en hvilkensomhelst $A = e^{i\theta}\sqrt{\frac{2}{a}}$ er like bra! Men denne fasen forsvinner alltid når vi tar $\Psi^* \Psi$!

Vi har funnet (konvensjonelt reell & positiv A):

$$\boxed{\begin{aligned}\Psi(x,t) &= \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) e^{-i\hbar\pi^2 t/2ma^2}, \quad 0 \le x \le a \\ &= 0, \quad x<0 \text{ eller } x>a\end{aligned}} \qquad (3.25)$$

Med normalisert Ψ: sannsynligheten for å finne partikkelen i en region, er lik integralet av $\Psi^*\Psi$ over regionen.

Eksempel 3.2 d.s.h. for å finne partikkelen i avstand ε fra venstre vegg:

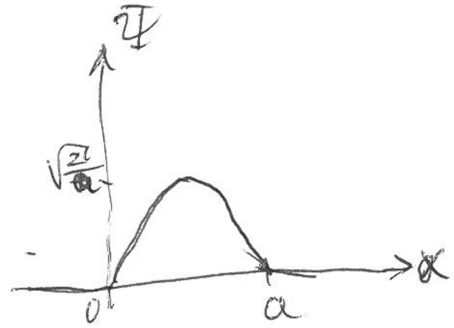
$$P(x<\varepsilon) = \int_{x=0}^{\varepsilon} \Psi^* \Psi \, dx$$

$$= \int_0^{\varepsilon} \frac{2}{a} \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx$$

$$= \frac{\varepsilon}{a} - \frac{1}{2\pi} \sin \frac{2\pi\varepsilon}{a}$$

$$\sin x \approx x - \tfrac{1}{6} x^3 + \dots$$

$$\Rightarrow P(x<\varepsilon) \approx \frac{2}{3}\pi^2 \left(\frac{\varepsilon}{a}\right)^3$$



./.

Variabelskift finn

$$\frac{\pi x}{a} = y, \quad dx = \frac{a}{\pi} dy, \quad x = a \Rightarrow y = \pi;$$

$$\int_0^{\pi} |A|^2 \sin^2 y \, dy \cdot \frac{a}{\pi}$$

$$= |A|^2 \frac{a}{\pi} \underbrace{\int_0^{\pi} \sin^2 y \, dy}_{\pi/2}$$

vanlig!

Vi skal nå se hvordan noen fysisk målbare ~~størrelser~~ framkommer.
Betrakt et stort # identiske partikler, beskrevet av Ψ. Målt gjennomsnittlig posisjon:

$$\boxed{\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\, x\, \Psi(x,t)\, dx} \qquad (3.28)$$

Eksempel 3.3

Gjennomsnittlig posisjon i firkantbrønnen.

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\, x\, \Psi(x,t)\, dx$$

$$= \int_0^a \frac{2}{a}\sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) x\, dx \qquad \left(\frac{\pi x}{a} \to y\right)$$

$$= \frac{2}{a}\left(\frac{a}{\pi}\right)^2 \underbrace{\int_0^{\pi} \sin y \cdot y\, dy}_{\pi^2/4}$$

$$= \frac{1}{2}a \qquad \text{(Midt i brønnen selvsagt)}$$

Impulsen, da?
Anta først spesialtilfellet hvor Ψ er en egenfunksjon for p-operatoren, og normalisert:

$$-i\hbar\nabla\Psi = \vec{p}\,\Psi \quad \to \quad -i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial x} = p\Psi \qquad (1D)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\, p\, \Psi(x,t)\, dx = p \quad \text{OK} \qquad (3.29)$$

Postuler at det følgende gjelder også hvis ikke impuls-egenfunksjon:

$$\boxed{\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x,t)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi(x,t)\, dx}$$

I QM, 1:1 korrespondanse mellom (lineære) operatorer og observabler (målbare ~~størrelser~~):

OBSERVABEL $\leftrightarrow$ OPERATOR	
posisjon	$x \leftrightarrow x$
impuls	$\vec{p} \leftrightarrow -i\hbar\nabla$
energi	$E \leftrightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$

Bare hvis p-egenfunksjon, definitt p:

Eksempelvis

$$\Psi = e^{-iky - i\omega t} \tag{3.30}$$

$$\Rightarrow i\hbar \nabla \Psi = -i\hbar \hat{j} \frac{\partial \Psi}{\partial y} = -\hbar k \hat{j} \Psi$$

<u>Derimot</u>, for firkantbrønnen i (3.25):

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) e^{-i\hbar\pi^2 t/2ma^2}$$

$$= -i\hbar \frac{\pi}{a} \cdot \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) e^{-i\hbar\pi^2 t/2ma^2}$$

$$\neq \text{konstant} \times \Psi$$

Ikke p-egenfunksjon, ikke tilstand med definitt impuls!

Veldefinert derimot, <u>forventningsverdier</u>:

$$\boxed{\langle O \rangle = \int \Psi^*(x,t)\, O\, \Psi(x,t)\, dx}$$

For 1D bølgefunksjoner:

$$\boxed{\begin{aligned}
\langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \Psi \, dx \\
\langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\, x\, \Psi(x,t)\, dx \\
\langle E \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\right) \Psi \, dx
\end{aligned}}$$

Dessuten:

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\, x^2\, \Psi(x,t)\, dx$$

$$\langle p^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \underbrace{\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)}_{-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}} \Psi \, dx$$

<u>Eksempel 3.10</u>

Impulsens forventningsverdi i boksen

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \Psi \, dx$$

$$= \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) e^{i\hbar\pi^2 t/2ma^2} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) e^{-i\hbar\pi^2 t/2ma^2}\, dx$$

$$= -i\hbar \frac{2}{a} \frac{\pi}{a} \underbrace{\int_0^a \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx}_{=0}$$

$$= \underline{0}$$

– et antall målinger viser at partikkelen i gjennomsnitt ikke driver ut av boksen!

3.3 Tidsuavhengig SL; kvalitative løsninger; kvantiseringens opprinnelse

Utledning av tidsuavhengig SL

Anta at potensialet er tidsuavhengig:

$$V(\vec{r},t) \rightarrow V(\vec{r})$$

Spesialiser videre til Ψ som egenfunksjon av energioperatoren, og separabel løsning:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V(\vec{r})\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \qquad (3.31)$$

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = E\,\Psi(\vec{r},t) \qquad (3.32)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\vec{r},t) + V(\vec{r})\Psi(\vec{r},t) = E\Psi(\vec{r},t) \qquad (3.33)$$

$$\Psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r})\chi(t) \qquad (3.34)$$

Fra (3.32):

$$\cancel{i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t}}\; i\hbar\,\psi(\vec{r})\frac{\partial\chi(t)}{\partial t} = E\psi(\vec{r})\chi(t)$$

ψ-kansellering, og løsning:

$$\chi(t) = e^{-iEt/\hbar} \qquad (3.35)$$

Innsetting av (3.34) i (3.32), og $\chi(t)$-kansellering, gir

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})} \qquad (3.36)$$

Dette er den tidsuavhengige Schrödingerlikningen.

Full bølgefunksjonsløsning:

$$\boxed{\Psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r})\,e^{-iEt/\hbar}}$$

Tidsuavhengig SL brukes ved tidsuavhengig potensial til å finne løsninger med definert energi.

Disse kalles også stasjonære tilstander.

Også forventningsverdier kan uttrykkes ved $\psi(\vec r)$:

$$\langle O\rangle = \int \psi(\vec r)^* e^{iEt/\hbar}\, O\, \psi(\vec r)\, e^{-iEt/\hbar}\, d^3\vec r$$

$$= \int \psi(\vec r)^*\, O\, \psi(\vec r)\, d^3\vec r$$

FOR OPERATORER SOM ER TIDSUAVHENGIGE

Med ny operatornotasjon

$$\boxed{H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V} \qquad (3.37)$$

blir tidsuavhengig SL:

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

H kalles Hamiltonoperatoren, som tilsvarer total energi for en klassisk partikkel.

Kvalitative løsninger, og kvantiseringens opprinnelse

Hvordan bestemmes E, når $V(\vec r)$ er gitt for systemet?
Omskriv, i 1D:

$$\boxed{\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}\left[V(x) - E\right]} \qquad (3.38)$$

Rent matematisk:

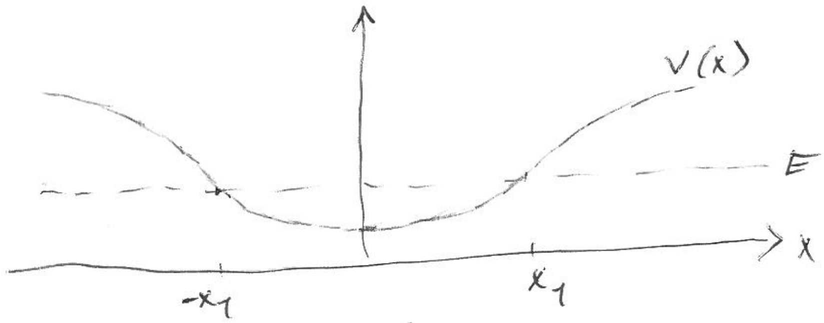
$\frac{d^2\psi}{dx^2} > 0$, $\psi > 0$ $\qquad$ $\frac{d^2\psi}{dx^2} < 0$, $\psi < 0$

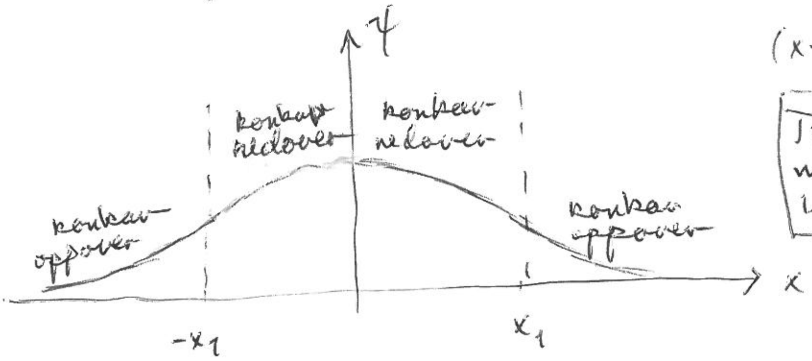
E < V
(klassisk forbudt)

$\frac{d^2\psi}{dx^2} < 0$, $\psi > 0$ $\qquad$ $\frac{d^2\psi}{dx^2} > 0$, $\psi < 0$

E > V
(klassisk tillatt)

Kvantemekanisk, mulig potensial og løsning:





(x-aksen krysses ikke)

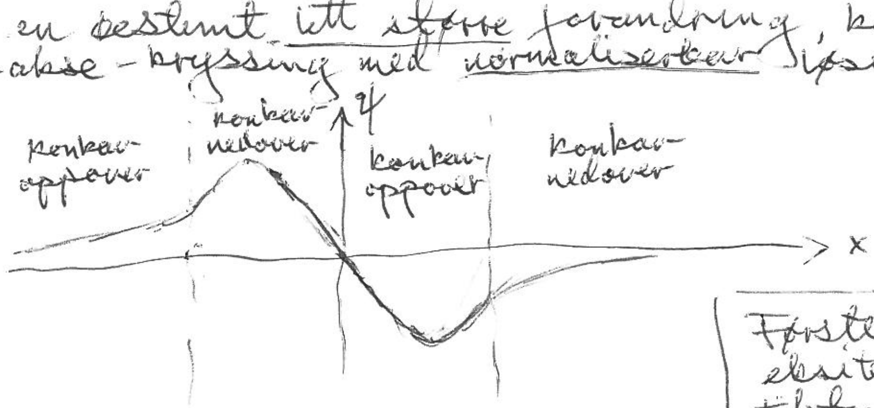
Tilstanden med aller laveste energi

Hvis både ψ og $\frac{d\psi}{dx}$ kontinuerlige, må området for $\psi \neq 0$ strekke seg ut i det klassisk forbudte området!

For $E<V$: ψ-kurven har tendens til å "eksplodere" mot $+\infty$ eller $-\infty$, pga. $d^2\psi/dx^2$.

Anta meget liten forandring, $E \to E'$:
Hvis $\psi \to 0$ for $x \to -\infty$ på venstre side, vil "ubalansen" i $(V-E)$ få kurven til å gå mot $+\infty$ eller $-\infty$ på høyre side!
Ikke normaliserbar løsning!
(Kurven kan da krysse x-aksen)

Men hvis en bestemt litt større forandring, kan vi ha en x-akse-kryssing med normaliserbar løsning:



Første eksiterte tilstand

Generelt resultat for klassisk bundne tilstander:
ψ_0 ingen x-akse-kryssinger, ψ_1 en x-akse-kryssing,
ψ_2 to x-akse-kryssinger, ...

Altså, bunden-tilstand-løsninger fås bare for faste diskrete verdier av E.

Hva med ubunden partikkel, $E > V$?

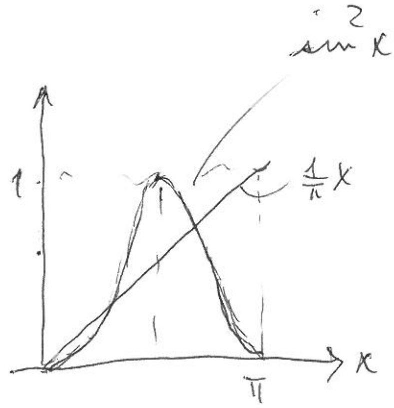
Vi ser, for det samme potensialet;
Kurven vil krumme mot x-aksen overalt.
Man får da akseptable løsninger for svært små forandringer av E.

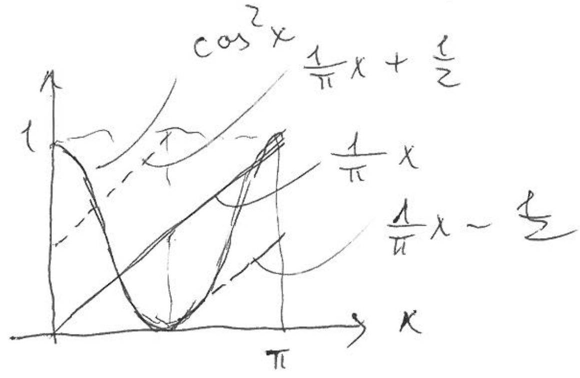
Ubundne tilstander er altså ikke kvantiserte.

Potensialer som det i eksemplet, kan ha både bundne og ubundne tilstander.

$$\boxed{\text{HVA MED } \int_0^{\pi} x \sin^2 x \, dx \text{ ?}}$$

Bortsett fra skalaforvrengning :





$$\frac{1}{\pi}\int_0^{\pi} x\cos^2 x\,dx = \frac{1}{\pi}\int_0^{\pi/2} x\cos^2 x\,dx + \frac{1}{\pi}\int_{\pi/2}^{\pi} x\cos^2 x\,dx$$

$$= \frac{1}{\pi}\int_0^{\pi/2}\underbrace{\left(x+\frac{\pi}{2}-\frac{\pi}{2}\right)}\cos^2 x\,dx + \frac{1}{\pi}\int_{\pi/2}^{\pi}\underbrace{\left(x-\frac{\pi}{2}+\frac{\pi}{2}\right)}\cos^2 x\,dx$$

$\downarrow$ samme resultat som $\frac{1}{\pi}\int_{\pi/2}^{\pi} x\sin^2 x\,dx$

$\downarrow$ samme resultat som $\frac{1}{\pi}\int_0^{\pi/2} x\sin^2 x\,dx$

Og $\left(\frac{1}{\pi}\right)\int_{\pi/2}^{\pi}\cos^2 x\,dx = \left(\frac{1}{\pi}\right)\int_0^{\pi/2}\cos^2 x\,dx$ pga. symmetri !

Dermed

$$\int_0^{\pi} x\sin^2 x\,dx = \int_0^{\pi} x(1-\cos^2 x)\,dx$$

$$= \int_0^{\pi} x(1-\sin^2 x)\,dx$$

$$2\int_0^{\pi} x\sin^2 x\,dx = \int_0^{\pi} x\,dx$$

$$\boxed{\int_0^{\pi} x\sin^2 x\,dx = \frac{\pi^2}{4}}$$