Omskrivning av TUSL:

$$\psi''/\psi = \frac{2m}{\hbar^2}(V-E) \quad ; \quad \psi'' = \frac{d^2\psi}{dx^2}$$

- Endelig V ($|V| < \infty$) $\Rightarrow$ kontinuerlig ψ' og ψ (pga endelig ψ'')
- Hvis $V \to \infty$ (som her, i $x=0$ og $x=L$):

  $\psi \to 0$ eller $\psi'' \to \infty$ (eller begge deler)

  $\Rightarrow$ kontinuerlig ψ, diskontinuerlig ψ' (der V gjør ∞ sprang)
- Dvs kontinuerlig ψ (og $|\psi|^2$) overalt.
  (Sprang i ψ ville gi ~~∞~~ $\psi' \to \infty$, dvs $p \to \infty$, ufysisk.)
- For vår boks i 1D: $\psi(0) = \psi(L) = 0$

TUSL inni boksen, $0 < x < L$: $\psi'' = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi$

- $E < 0 \Rightarrow \psi''/\psi > 0 \Rightarrow$ krumning bort fra x-aksen

  $\Rightarrow$ umulig å oppnå både $\psi(0)=0$ og $\psi(L)=0$.
- $E = 0 \Rightarrow \psi(x) = Ax + B$, som med $\psi(0)=\psi(L)=0$

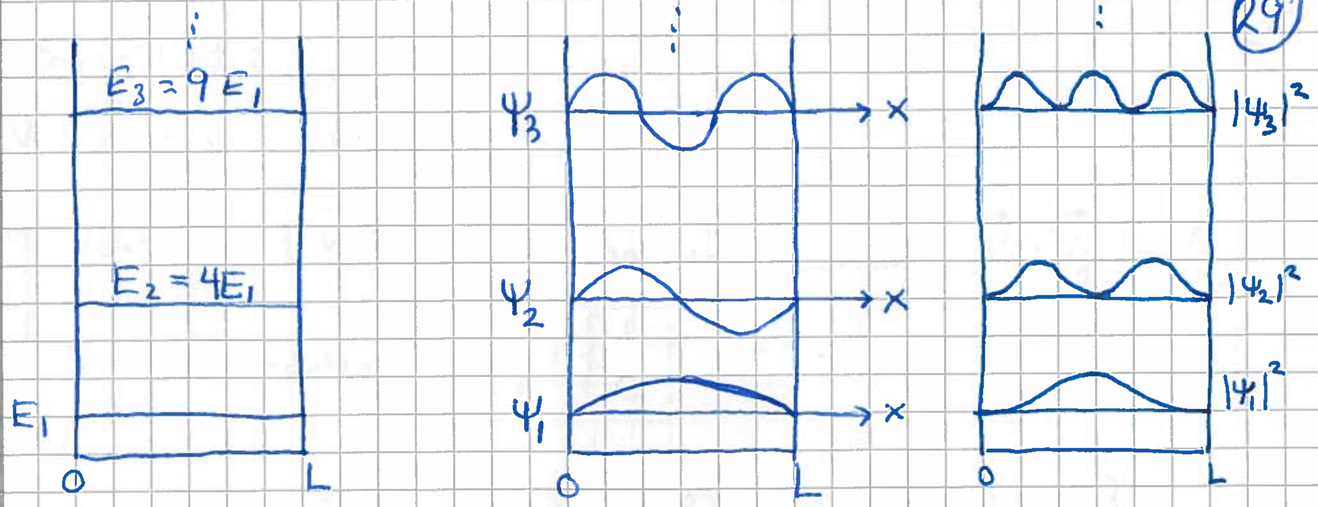
  gir $A=B=0$, dvs $\psi(x)=0$, ingen partikkel.
- Dvs, må ha $E > 0$! Innfører $k = \sqrt{2mE}/\hbar$

$\Rightarrow \psi'' + k^2\psi = 0 \Rightarrow \psi(x) = A\sin kx + B\cos kx$

$\psi(0) = B = 0$; $\psi(L) = A \sin kL = 0$ gir kvantisering:

$$kL = n\pi \Rightarrow k_n = \frac{n\pi}{L} \Rightarrow E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\cdot n^2 \quad ; \quad n = 1,2,3,\dots$$

29



- Bundne tilstander $\left(\lim_{|x|\to\infty} \psi_n = 0\right)$ $\Rightarrow$ Energikvantisering

- Analogi: Stående bølger på streng, grunntone med $\lambda_1 = 2L$.
  Her: Grunntilstand $\psi_1(x)$ (dvs den tilstand som har lavest energi) med bølgelengde $\lambda_1 = 2\pi/k_1 = 2L$.

- $\psi_n(x)$ har $n-1$ nullpunkter (i tillegg til $x=0$ og $x=L$), som øker med økende relativ krumning $|\psi_n''/\psi_n|$, dvs med økende energi $E_n = \hbar^2 |\psi_n''/\psi_n| / 2m$

- Symmetrisk $V(x)$ (om $x = L/2$) gir symm. og antisymm. tilstander, dvs symmetrisk $|\psi_n|^2$ for alle n, som ventet

- Normering: Må ha $\int_0^L |\psi_n(x)|^2 dx = 1$ for partikkel i stasjonær tilstand med energi E_n. Ser at $|\psi_n|^2 = \sin^2(n\pi x/L)\cdot|A|^2$ oscillerer n hele perioder i boksen, med middelverdi $(1/2)\cdot|A|^2$

$$\Rightarrow \quad \frac{1}{2}|A|^2 \cdot L = 1 \quad \Rightarrow \quad A = \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot e^{i\beta} \quad \text{(vilkårlig reell } \beta)$$

Fysisk størrelse $|\psi_n|^2$ uavh. av β $\Rightarrow$ velger $\beta = 0$

$$\Rightarrow \quad \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\frac{n\pi x}{L} \quad ; \quad E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}$$

$$\Psi_n(x,t) = \psi_n(x)\exp(-iE_n t/\hbar) \quad \text{(stasjonær tilstand)}$$

- Ortogonalitet:

$$\vec{V}_1 \cdot \vec{V}_2 = 0 \quad \text{når} \quad \vec{V}_1 \perp \vec{V}_2$$

$\Rightarrow$ vektorene $\{\vec{V}_i\}$ er <u>ortonormerte</u> hvis $\vec{V}_i \cdot \vec{V}_j = \delta_{ij}$

Kronecker-delta: $\delta_{ij} = \begin{cases} 1 \, ; & i=j \\ 0 \, ; & i \neq j \end{cases}$

Tilsvarende: Funksjonssettet $\{\psi_n\} = \{\psi_1, \psi_2, \ldots\}$ er ortonormert hvis

$$\langle \psi_n, \psi_k \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\, \psi_k(x)\, dx = \delta_{nk}$$

For partikkel i boks vet vi at $\langle \psi_n, \psi_n \rangle = 1$, normering, og med $\sin\alpha \cdot \sin\beta = \frac{1}{2}\left[\cos(\alpha-\beta) - \cos(\alpha+\beta)\right]$ fås

$$\langle \psi_n, \psi_k \rangle = \frac{1}{L}\int_0^L \left[\cos\frac{(n-k)\pi x}{L} - \cos\frac{(n+k)\pi x}{L}\right] dx \overset{n \neq k}{=} 0,$$

dvs $\langle \psi_n, \psi_k \rangle = \delta_{nk}$; ortonormert!

Gjelder <u>generelt</u> for egenfunksjoner til operatorer som representerer målbare, fysiske størrelser, med <u>reelle</u> egenverdier.

(Såkalt <u>hermiteske</u> operatorer; mer om det senere.)

- **Superposisjon. Ikke-stasjonære tilstander.**
  [PCH 2.3 ; DJG 2.1 ; IØ 2.1.f]

SL er lineær (og homogen)

$\Rightarrow \Psi = c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2 + \dots = \sum_n c_n \Psi_n$ er den generelle løsn.

dersom $\Psi_n(x,t) = \psi_n(x) \exp(-i E_n t/\hbar)$ er stasjonære løsn.

av $i\hbar \partial \Psi_n / \partial t = \hat{H} \Psi_n$ (med tidsuavh. $\hat{H}$).

Normering: $\int \Psi^* \Psi \, dx = 1$

$$\Rightarrow \int \sum_n c_n^* \psi_n^* e^{iE_n t/\hbar} \cdot \sum_k c_k \psi_k e^{-iE_k t/\hbar} \, dx = 1$$

$$\Rightarrow \sum_n |c_n|^2 \underbrace{\int |\psi_n|^2 dx}_{=1} + \sum_{n \neq k} c_n^* c_k e^{i(E_n - E_k)t/\hbar} \underbrace{\int \psi_n^* \psi_k \, dx}_{= \delta_{nk}} = 1$$

$$\Rightarrow \boxed{\sum_n |c_n|^2 = 1}$$

Når flere Ψ_n med ulike energier E_n inngår i

$$\boxed{\Psi(x,t) = \sum_n c_n \psi_n(x) \exp(-iE_n t/\hbar)}$$

ser vi at $|\Psi(x,t)|^2$ må avhenge av t, dvs $\Psi(x,t)$ er ikke en stasjonær tilstand.

(Hvis SL i tillegg har løsninger som gir et eller flere kontinuerlige spektra, må integraler over disse legges til for å finne den mest generelle løsningen $\Psi(x,t)$.)

Python: box_non_stationary.py

box_non_stationary_3.py

Postulatene [PCH 2.1; DJG 3.3; IØ 2.2]

Empirisk grunnlag i klassisk mekanikk er Newtons lover.
I kvantemekanikk er grunnlaget fire postulater:

A. Operatorpostulat

Til alle målbare størrelser i klassisk mekanikk,

$$F(q_1, q_2, \cdots, q_N, p_1, p_2, \cdots, p_N),$$

svarer i kvantemekanikk en lineær operator

$$\hat{F}(\hat{q}_1, \hat{q}_2, \cdots, \hat{q}_N, \hat{p}_1, \hat{p}_2, \cdots, \hat{p}_N),$$

der

$$\hat{q}_j = q_j = \text{operator for posisjonskoord. } q_j$$

$$\hat{p}_j = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q_j} = \text{—— '' —— impulskoord. } p_j$$

Rekkefølge slik at egenverdiene til $\hat{F}$ blir reelle. (Hermitesk $\hat{F}$)
Ikke alle målbare størrelser har et klassisk uttrykk. Eks: Spinn.

Eks: En partikkel i 1D

$$N = 1, \quad \hat{q}_1 = q_1 = x, \quad \hat{p}_1 = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} = \hat{p}$$

$$V(x) \to V(x), \quad K(p) = p^2/2m \to \hat{K}(\hat{p}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

Eks: En partikkel i 2D

$$N = 2, \quad \hat{q}_1 = q_1 = x, \quad \hat{q}_2 = q_2 = y, \quad \hat{p}_1 = \hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_2 = \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}$$

$$K = p^2/2m = \vec{p}^{\,2}/2m \to -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)$$

$$L_z = (\vec{r} \times \vec{p})_z = x p_y - y p_x \to \hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

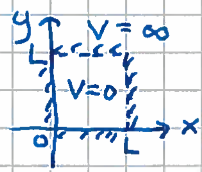
B. Tilstandspostulat

Tilstanden til et system er fullstendig beskrevet ved en bølgefunksjon $\Psi(q_1, q_2, \cdots, q_N, t)$ med en tidsutvikling bestemt av Schrödingerligningen

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\,\Psi$$

Her er $\hat{H}$ systemets Hamiltonoperator.

Eks: Kvadratisk boks i 2D, en partikkel



$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2\right) + V(x,y)$$

C. Forventningsverdipostulat

Forventningsverdien til en målbar størrelse F er

$$\langle F \rangle = \int \Psi^* \hat{F}\, \Psi \, d\tau$$

med $d\tau = dq_1\, dq_2 \cdots dq_N$ og $\int |\Psi|^2 d\tau = 1$.

Det betyr at mange målinger av F på systemer som alle er preparert i tilstanden Ψ, vil gi en middelverdi som nærmer seg $\langle F \rangle$.

Eks: Stasjonær tilstand $\Psi_n(x)$ for en partikkel i 1D boks.

$$\langle x \rangle_n = \int_0^L \Psi_n^*(x,t)\, x\, \Psi_n(x,t)\, dx = \int_0^L x\,|\Psi_n(x)|^2 dx = \underline{\frac{L}{2}}$$

$$\langle p \rangle_n = \int_0^L \Psi_n^*(x,t)\, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\, \Psi_n(x,t)\, dx \sim \int_0^L \sin\frac{n\pi x}{L} \cdot \cos\frac{n\pi x}{L}\, dx = \underline{0}$$

D. Målepostulat

De eneste mulige verdiene en måling av F kan gi, er en av egenverdiene f_j, gitt ved $\hat{F}\Psi_j = f_j \Psi_j$.

Etter en måling av F som gav verdien f_j, havner systemet i egentilstanden Ψ_j.

Med andre ord: Målingen påvirker systemet.

Eks: Anta at en partikkel er preparert, ved $t = t_0$, i en tilstand $\Psi(x,t_0)$ som er en lineærkombinasjon av grunntilstanden $\Psi_1(x,t_0)$ og første eksiterte tilstand $\Psi_2(x,t_0)$,

$$\Psi(x,t_0) = c_1 \Psi_1(x,t_0) + c_2 \Psi_2(x,t_0)$$

En måling av partikkelens energi ved $t_1 > t_0$ vil da gi verdien E_1 eller E_2, med sannsynlighet hhv $|c_1|^2$ og $|c_2|^2$.

Hvis det ble målt f.eks. E_2, er partikkelen etter t_1 beskrevet ved bølgefunksjonen

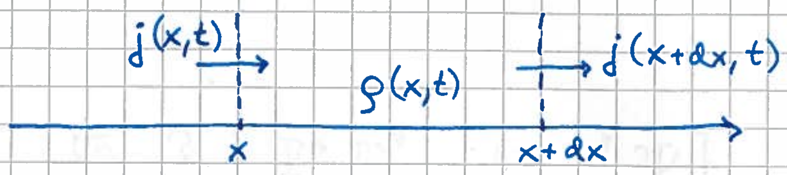
$$\Psi_2(x,t)$$

Sannsynlighetsstrøm og sanns. bevarelse

[PCH 2.6 ; DJG 1.4 ; IØ 2.8]

I fysikken har vi <u>kontinuitetsligninger</u> for ulike størrelser (masse, ladning etc), som uttrykker at størrelsene er <u>bevart</u>.

Ser her på <u>sanns. tetthet</u> (i 1D), $\rho(x,t) = |\Psi(x,t)|^2$:



$dP = \rho(x,t)\,dx$ = sanns. mellom x og $x+dx$ ved tid t

$j(x,t)$ = sanns. strøm ved pos. x og tid t ; $[j] = 1/s$

$\Rightarrow$ $j(x,t) - j(x+dx,t)$ = netto sanns. økning pr tidsenhet på $(x,\ x+dx)$ ved tid t

$$= \frac{\partial}{\partial t}(dP) = \frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t}\cdot dx$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0}$$

I 3D: $\quad \dfrac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla\cdot\vec{j} = 0$

$$\rho = \rho(\vec{r},t) \ ; \quad [\rho] = 1/m^3$$

$$\vec{j} = \vec{j}(\vec{r},t) \ ; \quad [j] = 1/s\cdot m^2$$

$$\nabla\cdot\vec{j} \ \left(= \operatorname{div}\vec{j}\right) = \frac{\partial j_x}{\partial x} + \frac{\partial j_y}{\partial y} + \frac{\partial j_z}{\partial z}$$

Vi skal se at SL gir oss en kont. lign. for $\rho = |\Psi|^2$, og dermed får vi samtidig bestemt $\vec{j}$.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}\{\Psi^* \Psi\} = \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t}\Psi$$

$$\overset{SL}{=} \Psi^* \hat{H}\Psi/i\hbar + (\hat{H}\Psi/i\hbar)^* \Psi$$

$$= \frac{i\hbar}{2m}\left\{\Psi^* \Psi'' - (\Psi^*)''\Psi\right\}$$ (fordi ledd med $V(x)$ kansellerer)

Generelt er:

$$fg'' - f''g = f'g' + fg'' - f''g - f'g' = [fg' - f'g]'$$

Dermed:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left[\Psi^* \Psi' - (\Psi^*)'\Psi\right],$$ som er kont. lign. med

$$j = \frac{\hbar}{2m}\left[\left(\frac{1}{i}\Psi^* \Psi'\right) + \left(\frac{1}{i}\Psi' \Psi^*\right)^*\right]$$

$$= \mathrm{Re}\left[\Psi^* \left(\frac{1}{m}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi\right] = \mathrm{Re}\left[\Psi^* \left(\frac{\hat{p}}{m}\right)\Psi\right]$$

3D: $$\vec{j} = \mathrm{Re}\left[\Psi^* \left(\frac{1}{m}\frac{\hbar}{i}\nabla\right)\Psi\right] = \mathrm{Re}\left[\Psi^* \left(\frac{\hat{\vec{p}}}{m}\right)\Psi\right]$$

Rimelige uttrykk: $\vec{j} = \rho\vec{v}$ i klassisk fysikk; her erstattet med $\mathrm{Re}\left[\Psi^* (\hat{\vec{v}})\Psi\right]$; $\hat{\vec{v}} = \hat{\vec{p}}/m$

ρ

Eks 1: Bundet, stasjonær tilstand i 1D boks, $\Psi_n \sim \sin\frac{n\pi x}{L} \cdot \exp(-iE_n t/\hbar)$

$\Rightarrow \Psi_n^* \left(\frac{\hbar}{m i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi_n$ blir imaginær $\Rightarrow j_n = 0$

Som ventet for stående bølger.

Eks 2: Fri partikkel, $\vec{p} = p\hat{x}$,

$\Psi = \exp(ikx - iEt/\hbar)$; $k = p/\hbar$

$\Rightarrow j = \mathrm{Re}\left[\frac{1}{m}\cdot\frac{\hbar}{i}\cdot ik\right] = \hbar k/m = p/m = v$

(OK: Her er $\rho = 1$ overalt. Og $[\Psi] = 1$; skulle "egentlig" $m^{-1/2}$ for at $[\rho\, dx] = [\Psi^*\Psi\, dx] = m^{-1}\cdot m = 1$)

Usikkerhet. Uskarphetsrelasjoner

[PCH 4.5 ; DJG 1.6, 3.4 ; IØ Øv.1]

Vanlig mål for usikkerhet i størrelse x:

$$\Delta x = \sqrt{\left\langle \left(\underbrace{x - \langle x \rangle}_{D} \right)^2 \right\rangle} = \text{standardavvik}$$

R M D S

(Root Mean Square Deviation)

$$= \sqrt{\langle x^2 - 2x\langle x\rangle + \langle x\rangle^2 \rangle}$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\Delta x = \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2}} \quad \text{RMSD}$$

Fra postulat G:

$$\langle x^n \rangle = \int \Psi^* \, x^n \, \Psi \, dx$$

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

Vi skal vise at dette gir $\boxed{\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2}$, Heisenbergs uskarphetsrelasjon for posisjon og impuls,

og mer generelt, for to målbare størrelser A og B, at

$$\boxed{\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} \left| \langle i [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right|}$$

der $[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ er den såkalte kommutatoren

mellom de to hermiteske operatorene $\hat{A}$ og $\hat{B}$.

Hermiteske operatorer. Kommutatorer

[PCH 2.2 ; DJG 3 ; IØ 2.3]

Krever reell fysisk størrelse F og forventningsverdi $\langle F \rangle$

$$\Rightarrow \langle F \rangle = \langle F \rangle^*$$

$$\Rightarrow \int \Psi^* \hat{F} \Psi \, dx = \left(\int \Psi^* (\hat{F} \Psi) \, dx \right)^* = \int \Psi (\hat{F} \Psi)^* dx$$

I såfall kalles $\hat{F}$ en hermitesk operator.

Alternativ definisjon: $$\boxed{\int \Psi_1^* \hat{F} \Psi_2 \, dx = \int \Psi_2 (\hat{F} \Psi_1)^* dx} \quad \text{(PCH 2.8)}$$

Bevises ved å velge $\Psi = \Psi_1 + \Psi_2 e^{i\alpha}$, med vilkårlig reell (konstant) α, og benytte at $\langle F \rangle$ må være reell:

$$\langle F \rangle = \int (\Psi_1^* + \Psi_2^* e^{-i\alpha}) \hat{F} (\Psi_1 + \Psi_2 e^{i\alpha}) \, dx$$

$$= \underbrace{\langle F \rangle_1 + \langle F \rangle_2}_{\text{reelle størrelser}} + e^{i\alpha} \int \Psi_1^* \hat{F} \Psi_2 \, dx + e^{-i\alpha} \int \Psi_2^* \hat{F} \Psi_1 \, dx$$

som bare er reell dersom de to integralene er c.c. av hverandre:

$$\underline{\int \Psi_1^* \hat{F} \Psi_2 \, dx} = \left(\int \Psi_2^* (\hat{F} \Psi_1) \, dx \right)^* = \underline{\int \Psi_2 (\hat{F} \Psi_1)^* dx}$$

Med andre ord, en hermitesk operator $\hat{F}$ kan flyttes etter behov ved beregning av integraler som

$$\int \Psi_1^* \hat{F} \Psi_2 \, dx = \int (\hat{F} \Psi_1)^* \Psi_2 \, dx$$

Definerer adjungert operator ved: $\int \Psi_1^* \hat{F}^\dagger \Psi_2 \, dx = \int \Psi_2 (\hat{F} \Psi_1)^* dx$

PCH 2.8 gir da at hermitesk $\hat{F}$ betyr at $\hat{F}^\dagger = \hat{F}$.

Kaller dermed "selvadjungert" ! ($\dagger$: "dagger") [IØ 2.3.6]

Rekkefølgen på operatorer er generelt ikke likegyldig:

$$x\hat{p}\, f(x) = x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial f}{\partial x}$$

mens $\hat{p}\, x\, f(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}\big(x f(x)\big) = \frac{\hbar}{i} f + \frac{\hbar x}{i} \frac{\partial f}{\partial x} \neq x\hat{p}\, f(x)$

Dvs: $(x\hat{p} - \hat{p}x)\, f(x) = -\frac{\hbar}{i} f(x) = i\hbar\, f(x)$

Dvs: Resultatet av at kommutatoren $[x, \hat{p}] \equiv x\hat{p} - \hat{p}x$ virker på en funksjon $f(x)$, blir det samme som å gange $f(x)$ med $i\hbar$. Vi skriver da

$$[x, \hat{p}] = i\hbar \qquad \text{(en operator-identitet)}$$

Hvis $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, sier vi at $\hat{A}$ og $\hat{B}$ kommuterer.

Dvs, x og $\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$ kommuterer ikke.

Vi kan nå vise at "uskarphetsproduktet" for to målbare størrelser alltid må oppfylle ulikheten

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} \left| \langle i [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right|$$

Det betyr f.eks. at A og B kan måles skarpt samtidig bare dersom de tilhørende operatorene kommuterer, dvs dersom $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$.