Tolkning av bølgefunksjonen

Max Born: (1926, NP 1954)

$d P = |\Psi(x,t)|^2 dx$ = sannsynligheten for at en måling av partikkelens posisjon ved tid t ligger mellom x og $x + dx$

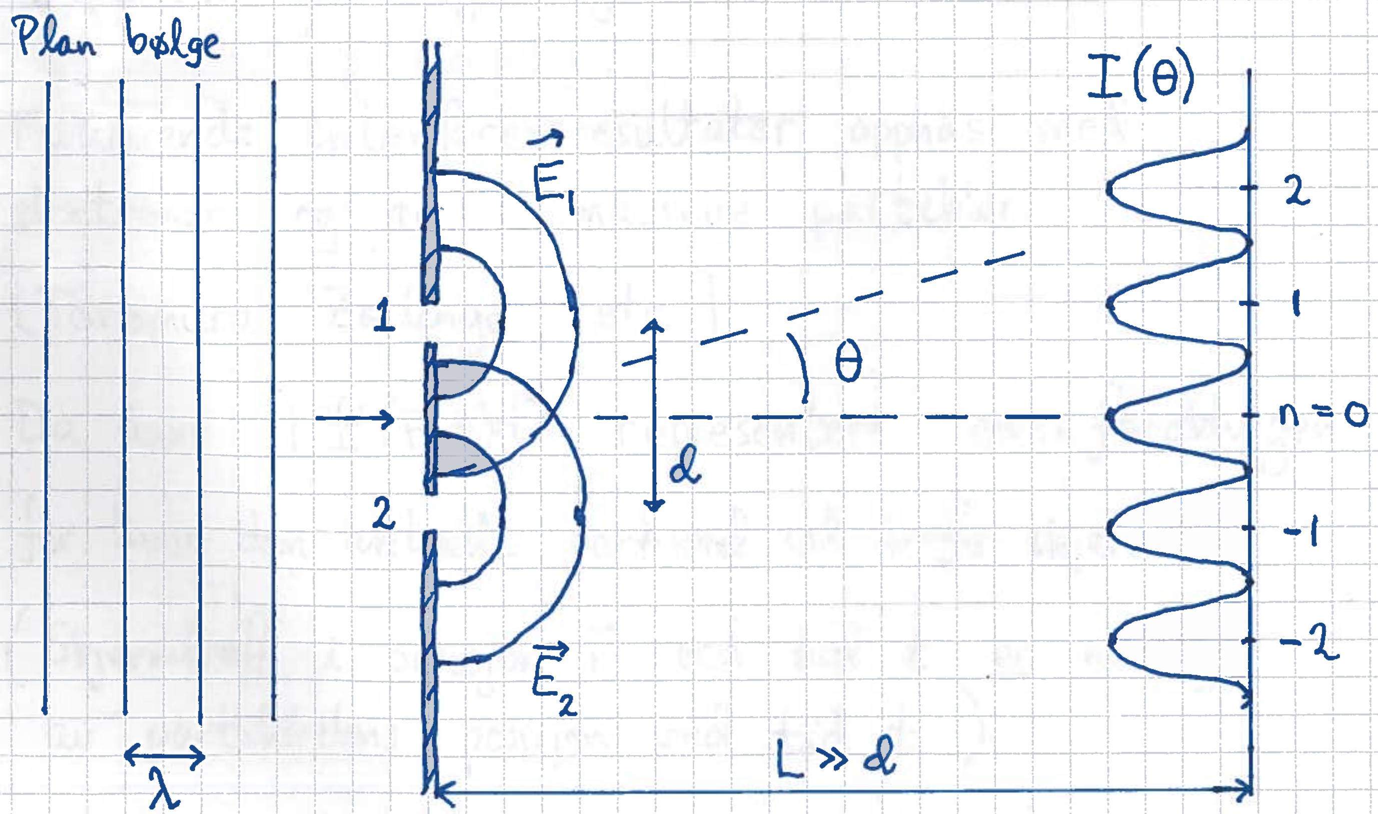
$$\Rightarrow \quad |\Psi(x,t)|^2 = \frac{dP}{dx} = \text{sannsynlighetstettheten}$$

Normering: $\int dP = 1$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = 1}$$

Begrunnelse for Borns tolkning:

Ser på 2-spalteforsøk med lys (evt. diffraksjonsgitter)



Total bølge ved skjermen : $\vec{E} = \vec{E}_1 + \vec{E}_2$

Intensitet på skjermen : $I \sim |\vec{E}|^2 = |\vec{E}_1 + \vec{E}_2|^2$

Veilengdeforskjell : $d \cdot \sin\theta$

Konstruktiv interferens hvis $d \sin\theta = n\lambda$:

$$\vec{E}_2 \approx \vec{E}_1 \quad ; \quad I \sim 4E_1^2$$

Destruktiv interferens hvis $d \sin\theta = (n + \frac{1}{2})\lambda$:

$$\vec{E}_2 \approx -\vec{E}_1 \quad ; \quad I \approx 0$$

Hvis vi sender ett og ett foton mot dobbeltspalten, fås "tilfeldige" treff på skjermen, men etter hvert avtegnes samme interferensmønster $I(\theta)$.

Dvs: Absoluttkvadratet av "bølgefunksjonen" $\vec{E}(\vec{r}, t)$ representerer <u>sannsynlighetsfordelingen</u> for hvor et foton vil treffe skjermen.

Tilsvarende interferensresultater oppnås med elektroner og andre massive partikler.
[Tonomura, Zeilinger etc.]

Da bør $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$ representere sanns. fordelingen for hvor den aktuelle partikkel vil treffe skjermen.

(Skjermtreff i posisjon $\vec{r}$ ved tid t <u>er</u> måling av partikkelens posisjon ved tid t.)

Bølgepakker

Plan bølge med skarp impuls p,

$$\Psi(x,t) = e^{i(px-Et)/\hbar},$$

er ikke normerbar (på vanlig måte):

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2\,dx = \int_{-\infty}^{\infty} 1\cdot dx = \infty$$

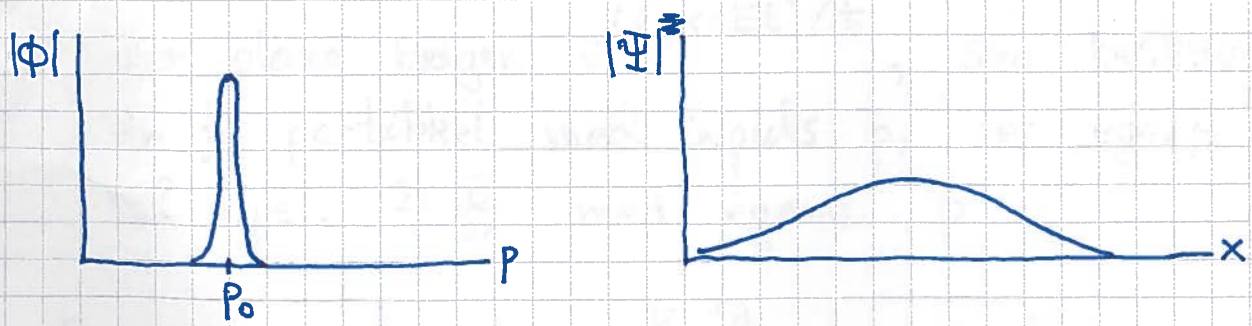
Normerer sannsynligheten og lokaliserer partikkelen ved å tillate slingringsmonn i impulsen, f.eks med sum av plane bølger med ulike impulser – en <u>bølgepakke</u>:

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p)\, e^{i(px-Et)/\hbar}\, dp$$

$\phi(p)$ tilsvarer andelen av $\Psi(x,t)$ med impuls p;

$|\phi(p)|^2$ blir en sannsynlighetstetthet i impulsrommet.

Smal $\phi(p)$ $\Rightarrow$ bred $\Psi(x)$ (og omvendt)



$\Psi(x,0)$ er fouriertransformen av $\phi(p)$

Senere: $\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2$; Heisenbergs uskarphetsrelasjon

Operatorer. Egenfunksjoner. Egenverdier

Hvis <u>operator</u> $\hat{A}$ virker ("opererer") på funksjon $f(x)$, og resultatet blir <u>samme</u> $f(x)$ multiplisert med en <u>konstant</u> A, dvs

$$\hat{A}\, f(x) = A\, f(x),$$

da er $f(x)$ <u>egenfunksjon</u> til $\hat{A}$, med tilhørende <u>egenverdi</u> A. Lign. over er en <u>egenverdiligning</u>.

Eks:

- $\frac{\partial}{\partial x} \sin(px/\hbar) = (p/\hbar) \cos(px/\hbar)$

  $\Rightarrow \sin(px/\hbar)$ er <u>ikke</u> egenf. til oper. $\frac{\partial}{\partial x}$

- $\frac{\partial}{\partial x} e^{ipx/\hbar} = (ip/\hbar)\, e^{ipx/\hbar}$

  $\Rightarrow e^{ipx/\hbar}$ <u>er</u> egenf. til $\frac{\partial}{\partial x}$, med egenv. $\frac{ip}{\hbar}$

- $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} e^{i(px-Et)/\hbar} = p\, e^{i(px-Et)/\hbar}$

  $\Rightarrow$ den plane bølgen $e^{i(px-Et)/\hbar}$, som beskriver en fri partikkel med impuls p, er egenf. til oper. $\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$ med egenv. p

Derfor velger vi å kalle $\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$ en <u>impulsoperator</u>,

$$\boxed{\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}}$$

For en fri partikkel, med (valget) $V=0$, er

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

Vi erstatter p med $\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$ og får oper.

$$\frac{1}{2m}\hat{p}^2 = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

og egenverdiligh.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{i(px-Et)/\hbar} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{ip}{\hbar}\right)^2 e^{i(px-Et)/\hbar}$$
$$= \frac{p^2}{2m} e^{i(px-Et)/\hbar}$$

der $p^2/2m = K =$ kin. energi. Dermed blir det naturlig å kalle $\hat{p}^2/2m = (-\hbar^2/2m)\partial^2/\partial x^2$ en operator for kin. energi, som med $V=0$ her blir oper. for total energi.

I klassisk mekanikk kalles energifunksjonen ofte Hamiltonfunksjonen H.

I QM kalles energioper. som regel Hamiltonoperatoren $\hat{H}$.

For fri partikkel med $V=0$ er

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

som i 3D generaliseres til (med $\hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i}\nabla$)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$$

Med $V = V_0 \neq 0$ har vi fremdeles en fri partikkel $(\vec{F} = -\nabla V = 0)$, med energi

$$E = K + V = \frac{p^2}{2m} + V_0$$

slik at den plane bølgen

$$e^{i(px-Et)/\hbar}$$

er egenf. til Hamiltonoper. $\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + V_0$
med egenv.

$$E = \frac{p^2}{2m} + V_0$$

Altså: En triviell endring, som ventet. Nullpunkt for V kan alltid velges fritt.

Med $V = V(x)$, evt $V(\vec{r})$ i 3D, er $\vec{F} \neq 0$, og impulsen $\vec{p}$ er ikke lenger veldefinert (skarp).

Schrödinger satset likevel på samme ligning, som viste seg å fungere!

SL i 1D:

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

SL i 3D:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) = \hat{H}\Psi(\vec{r},t) \; ; \; \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})$$

Stasjonære tilstander og tidsuavhengig Schrödingerligning

[PCH 2.3; DJG 2.1; IØ 1.7.b, 2.1.a, 2.7.a]

Ofte er potensialet tidsuavhengig. Vi ser kun på slike systemer. Da har SL løsninger på formen

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

såkalte stasjonære tilstander, dvs tilstander med tidsuavhengig sanns. fordeling,

$$|\Psi| = |\psi(x)|^2 \qquad \text{(uavh. av tiden } t\text{)}$$

La oss vise dette:

SL har løsn. på produktform når $\hat{H}$ er uavh. av t:

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\cdot T(t)$$

Innsetting i SL og divisjon med Ψ gir

$$\underbrace{\frac{i\hbar\,\partial T/\partial t}{T}}_{\text{uavh. av } x} = \underbrace{\frac{\hat{H}\psi}{\psi}}_{\text{uavh. av } t}$$

$\Rightarrow$ Begge sider må være lik en og samme konstant, E:

$$\frac{dT}{T} = \frac{E\cdot dt}{i\hbar} \Rightarrow \underline{T(t) = \text{konst}\cdot e^{-iEt/\hbar}}$$

mens lign. for $\psi(x)$ blir

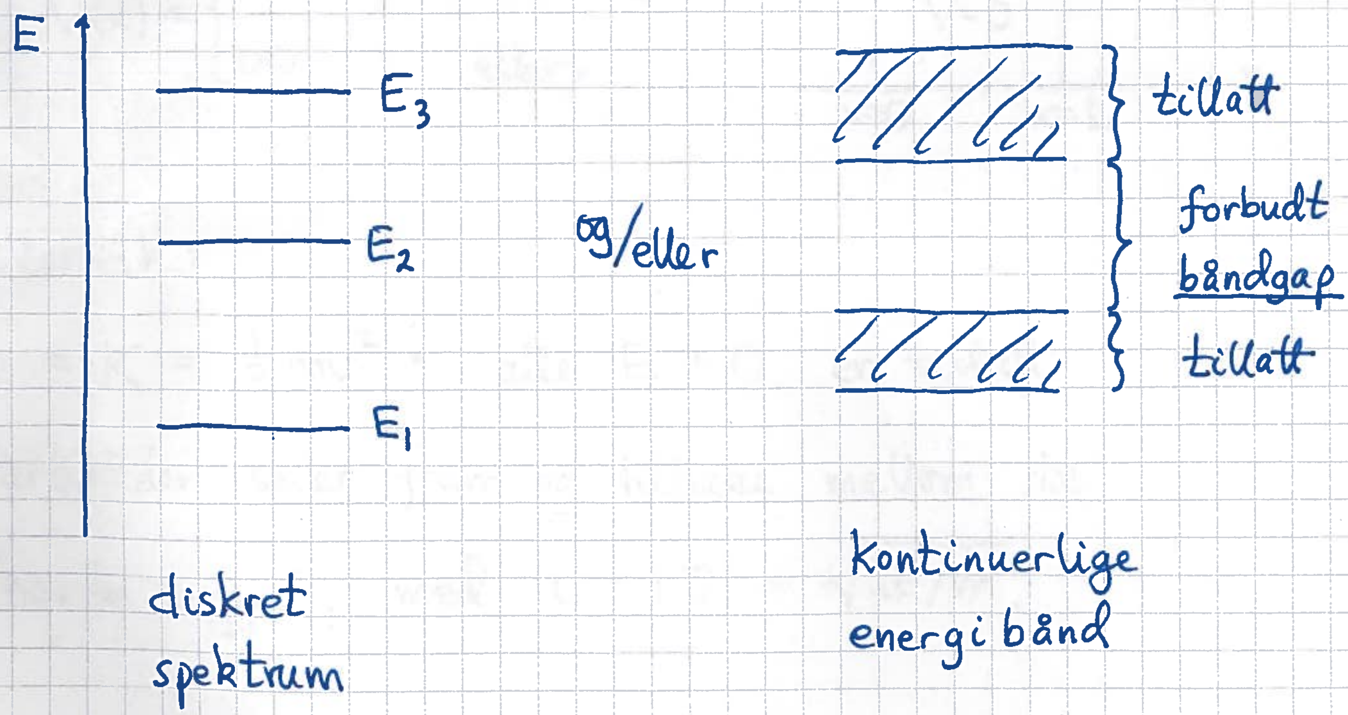
$$\boxed{\hat{H}\psi = E\psi} \qquad \text{TUSL i 1D}$$

Hele løsn. $\Psi(x,t) = \psi(x)\, e^{-iEt/\hbar}$ er stasjonær,

med $|\Psi|^2 = |\psi|^2$ uavh. av t.

TUSL er en egenverdiligning, der $\hat{H}$ er operatoren for partikkelens totale energi. Da er det naturlig å tolke tilhørende egenverdier E som nettopp partikkelens (systemets) mulige energier, og egenfunk. ψ som partikkelens (systemets) mulige tilstander (dvs, den romlige delen av total $\Psi(x,t)$).

Generelt har TUSL diskrete egenverdier $E_1, E_2, \ldots$ (et endelig antall, eller uendelig mange) og/eller et eller flere kontinuerlige energiintervaller, såkalte energibånd der alle verdier av E er mulige:



Siden SL og TUSL er lineære ligninger, er en vilkårlig lineærkombinasjon (sum) av stasjonære løsninger den generelle løsningen av SL:

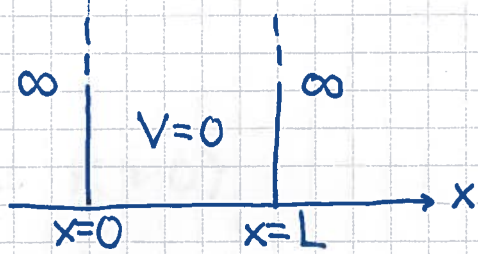
$$\Psi(x,t) = \sum_n c_n \psi_n(x)\, e^{-iE_n t/\hbar} + \int c_E \psi_E(x)\, e^{-iEt/\hbar}\, dE$$

Dersom to eller flere ulike energiverdier bidrar, blir $|\Psi|^2$ avhengig av t; da er $\Psi(x,t)$ ikke stasjonær.

Partikkel i boks [PCH 3.2; DJG 2.2; IØ 2.1]

En partikkel med masse m i potensialet

$$V(x) = \begin{cases} 0 & ; \quad 0 < x < L \\ \infty & ; \quad \text{ellers} \end{cases}$$



Klassisk:

$E = K = \frac{1}{2} m v^2$; alle $E \geq 0$ er tillatt.

Partikkelen seiler fram og tilbake mellom to "harde vegger", med $v = |\vec{v}| = \sqrt{2E/m}$.

QM: SL har løsninger

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

der $\psi(x)$ og E er hhv egenf. og egenv. til Hamiltonoper. $\hat{H} = \hat{K} + V = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$,

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x) \qquad \text{(TUSL)}$$

Utenfor boksen er $V = \infty$; her kan partikkelen ikke være; $\psi = 0$ her.

Inni boksen: $V = 0$

$$\Rightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$$

Rimelig å anta $E \geq 0$ (slik at $K \geq 0$).

Innfør $k = \sqrt{2mE}/\hbar$; da kan TUSL skrives

$$\psi'' + k^2\psi = 0,$$

en velkjent diff. lign. med generell løsning

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$$

Rimelig å anta at sanns. tettheten $|\psi(x)|^2$ må være kontinuerlig overalt; dermed rimelig å anta at $\psi(x)$ er kontinuerlig overalt. (Bevis senere.)

Dermed: $\psi(0) = 0 \Rightarrow B = 0 \Rightarrow \psi(x) = A \sin kx$

$\psi(L) = 0 \Rightarrow \sin kL = 0$

Gir <u>kvantisert energi</u>:

$$k_n \cdot L = n \cdot \pi \quad ; \quad n = 1, 2, 3, \ldots\ldots$$

$$\Rightarrow \quad E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = n^2 \cdot \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$$

Bølgefunksjonene $\psi_n(x) = A \sin k_n x = A \sin \frac{n\pi x}{L}$ <u>normeres</u> slik at hver $|\psi_n(x)|^2$ for seg repr. en sanns. fordeling for den gitte stasjonære tilstanden:

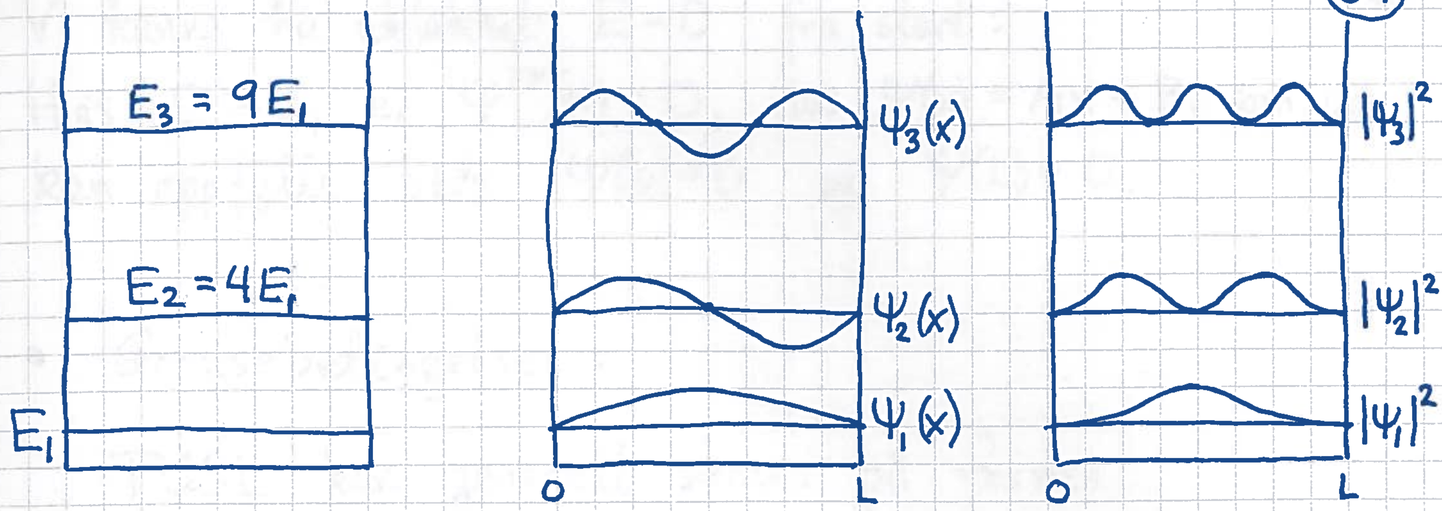
$$\int_0^L |\psi_n(x)|^2 \, dx = 1$$

Integranden $|A|^2 \sin^2 \frac{n\pi x}{L}$ oscillerer n hele perioder på intervallet $[0, L]$, med middelverdi $|A|^2/2$.

Dermed: $L \cdot |A|^2/2 = 1 \Rightarrow |A|^2 = 2/L$

Generell løsn. for A: $A = \sqrt{2/L} \cdot \exp(i\beta)$, med vilkårlig reell β. Siden den <u>fysiske</u> størrelsen $|\psi_n|^2$ er uavh. av β, velger vi like gjerne $\beta = 0$

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



Merknader :

- Bølgefunksjoner $\psi_n(x)$ som for stående bølger på streng.
- Symmetriegenskaper :

  Med symmetrisk $V(x)$ (om $x = L/2$) fås symmetriske ($n = 1, 3, 5, \ldots$) og antisymmetriske ($n = 2, 4, 6, \ldots$) tilstander $\psi_n(x)$, slik at $|\psi_n|^2$ blir symmetrisk for alle n, som ventet.

- Nullpunkter :

  $\psi_n(x)$ har $n-1$ nullpunkter (foruten $x=0$ og $x=L$).

  Dette gjelder <u>generelt</u> for <u>bundne</u> tilstander, dvs når $E_n < V(\pm\infty)$.

- Grunntilstanden :

  Tilstanden med lavest mulig energi.

  Her : $\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi x}{L}$ med $E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} > 0$

Vi kunne ha utelukket $E=0$ fra start:
Hvis $E=0$, er $\psi''(x)=0$, dvs $\psi(x)=Ax+B$, som ikke kan oppfylle både $\psi(0)=0$ og $\psi(L)=0$.

- Grensebetingelser:

TUSL kan generelt skrives på formen

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

Overalt der V er endelig (dvs $V<\infty$) må ψ'' være endelig. Da må både ψ og ψ' være kontinuerlige. (Hvis ψ' er diskontinuerlig et sted, vil $|\psi''| \to \infty$ på dette stedet.)

Dersom V gjør et uendelig sprang et sted, må ψ'' gjøre det samme. Da må ψ' være diskontinuerlig på dette stedet.

(For partikkel i boks er ψ_n' diskontinuerlig i $x=0$ og i $x=L$; der går V fra null til uendelig.)

Men ψ selv må være kontinuerlig overalt, også der $|V|\to\infty$. I motsatt fall blir $|\psi|^2$ diskontinuerlig, som er urimelig. Senere skal vi vise at sanns.strømmen er prop. med $\psi'(x)$. Diskont. ψ gir uendelig ψ', dvs uendelig sanns. strøm; ufysisk!

- Krumningsegenskaper:

Klassisk er $E \geq V$ overalt. Da er $\psi''/\psi \leq 0$, og ψ krummer mot x-aksen.
Kalles <u>klassisk tillatt</u> område.

Område med $E < V$ er <u>klassisk forbudt</u>, men tillatt i QM (med mindre $V = \infty$). Da er $\psi''/\psi > 0$, og ψ krummer bort fra x-aksen

- Ortogonalitet:

Har ortonormert vektorsett $\{\vec{V}_i\}$ dersom

$$\vec{V}_i \cdot \vec{V}_j = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & ; \; i = j \\ 0 & ; \; i \neq j \end{cases}$$

Har ortonormert funksjonssett $\{\psi_n(x)\}$ dersom

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

Gjelder for partikkel i boks; sjekk dette selv ved å bruke $\sin\alpha \cdot \sin\beta = \frac{1}{2}[\cos(\alpha-\beta) - \cos(\alpha+\beta)]$.

(Gjelder temmelig generelt i QM.
Se f.eks. PCH kap. 2.)

- Starttilstand $\Psi(x,0)$ og dens tidsutvikling:

Anta en gitt $\Psi(x,0)$ ved $t=0$, og at denne kan skrives som en lineærkombinasjon av systemets energiegenfunksjoner $\psi_n(x)$ (dvs løsningene av TUSL, $\hat{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x)$; anta et diskret spektrum):

$$\Psi(x,0) = \sum_n c_n \psi_n(x)$$

Tidsutviklingen blir da gitt ved (se s. 31)

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

Koeffisientene c_n fastlegges ved å utnytte at $\{\psi_n\}$ er et ortonormert sett:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_j^*(x)\,\Psi(x,0)\,dx = \sum_n c_n \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \psi_j^*(x)\psi_n(x)\,dx}_{=\delta_{jn}}$$

$$= c_j$$

Hvis $\Psi(x,0)$ er normert, har vi

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,0)\Psi(x,0)\,dx = \sum_n\sum_j c_n^* c_j \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\psi_j(x)\,dx}_{=\delta_{nj}} = \sum_n |c_n|^2$$

og tilstanden $\Psi(x,t)$ forblir normert,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)\,dx = \sum_n\sum_j c_n^* c_j\, e^{i(E_n-E_j)t/\hbar} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\psi_j(x)\,dx}_{=\delta_{nj}}$$

$$= \sum_n |c_n|^2 = 1$$

Postulatene [PCH 2.1; DJG 3.3; IØ 2.2]

Newtons lover danner det empiriske grunnlaget for klassisk mekanikk.

Kvantemekanikk (den såkalte direkteromsrepresentasjonen, som vi bruker i TFY4215) baserer seg på disse postulatene:

A. Operatorpostulat

Målbare størrelser i klassisk mekanikk,

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

representeres i QM av 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

$\hat{q}_j = q_j$ = operator for posisjonskoordinat q_j

$\hat{p}_j = \dfrac{\hbar}{i}\dfrac{\partial}{\partial q_j}$ = —"— impulskoordinat p_j

Rekkefølgen på de ulike $\hat{q}_j$ og $\hat{p}_j$ må være slik at egenverdiene til $\hat{F}$ blir reelle.

Det finnes fysiske størrelser som ikke har en "klassisk utgave", f. eks. spinn.

Eks: Partikkel med masse m i xy-planet

$N = 2$; $\hat{q}_1 = q_1 = x$, $\hat{q}_2 = q_2 = y$

$$\hat{p}_1 = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_2 = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)$$

$$\hat{L}_z = (\hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}})_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x$$
$$= \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

B. Tilstandspostulat

Bølgefunksjonen $\Psi(q_1, q_2, \cdots, q_N, t)$ beskriver systemets tilstand fullstendig, og Ψ er bestemt av SL

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

med $\hat{H} = \hat{K} + V$ = systemets Hamiltonoperator

C. Forventningsverdipostulat

Mange målinger av en størrelse F på systemer som alle er preparert i samme tilstand Ψ vil gi en middelverdi

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

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

$\langle F \rangle$ kalles forventningsverdien til F.

Eks: Hva er $\langle x \rangle_n$ og $\langle p \rangle_n$ for en partikkel i boks, i en gitt stasjonær tilstand $\psi_n(x) \cdot e^{-iE_n t/\hbar}$?

Løsn: Pga symmetri er

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

$$\langle p \rangle_n = \int_0^L \Psi_n^*(x,t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi_n(x,t)\, dx$$

$$\sim \int_0^L \sin \frac{n\pi x}{L} \cdot \cos \frac{n\pi x}{L}\, dx = \underline{\underline{0}}$$

D. Målepostulat

Eneste mulige måleverdier av F er egenverdiene f_j, gitt ved

$$\hat{F}\, \Psi_j = f_j\, \Psi_j$$

Like etter en måling av F som gav verdien f_j, havner systemet i egentilstanden Ψ_j. Dvs, målingen påvirker systemet!

Eks: Anta partikkel preparert i tilstanden $\Psi(x,0) = \sum_{n=1}^{4} c_n \psi_n(x)$ ved $t=0$. Måling av partikkelens energi ved tid $t>0$ vil da gi en av energiene E_n $(n=1,2,3,4)$ med sannsynlighet $|c_n|^2$. Hvis E_2 ble målt ved tid t_1, beskrives partikkelen ved $\Psi_2(x,t) = \psi_2(x) \exp(-iE_2 t/\hbar)$ ved $t_2 \geq t_1$.

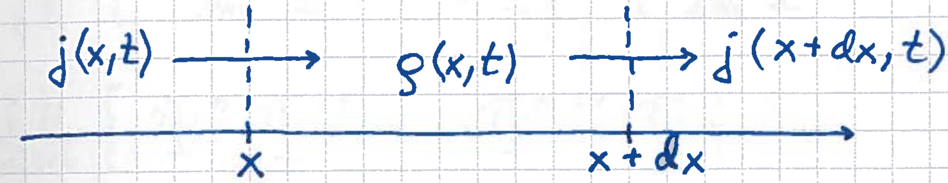
Sannsynlighetsstrøm og sanns. bevarelse

[PCH 2.6 ; DJG 1.4 ; IØ 2.8]

Kontinuitetsligningen uttrykker at sannsynlighet er bevart.

Sanns. tetthet : $\rho(x,t) = \frac{dP}{dx} = |\Psi(x,t)|^2$; $[\rho] = m^{-1}$

Sanns. strøm : $j(x,t)$; $[j] = s^{-1}$



En netto strøm inn/ut gir økning/reduksjon i sannsynlighet pr tidsenhet :

$$j(x,t) - j(x+dx,t) = \frac{\partial}{\partial t}\{\rho(x,t)\,dx\} = dx \cdot \frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t}$$

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

3D : $\rho(\vec{r},t)$; $[\rho] = m^{-3}$

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

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = 0 \quad ; \quad \nabla \cdot \vec{j} = \frac{\partial j_x}{\partial x} + \frac{\partial j_y}{\partial y} + \frac{\partial j_z}{\partial z}$$

Samme ligning gjelder for masse og ladning.

Vi skal regne ut $\frac{\partial \rho}{\partial t}$ med utgangspunkt i SL, og på den måten utlede et uttrykk for j :

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

$$= \Psi^* \frac{\hat{H}\Psi}{i\hbar} + \left(\frac{\hat{H}\Psi}{i\hbar}\right)^* \Psi$$

$$= \frac{\Psi^*}{i\hbar}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi'' + V\Psi\right\} + \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi^{*\prime\prime} + V\Psi^*\right\}\frac{\Psi}{(-i\hbar)}$$

$$= \frac{i\hbar}{2m}\left\{\Psi^*\Psi'' - \Psi^{*\prime\prime}\Psi\right\}$$

Generelt gjelder :

$$\left[fg' - f'g\right]' = f'g' + fg'' - f''g - f'g' = fg'' - f''g$$

så vi kan skrive

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left\{\Psi^*\Psi' - \Psi^{*\prime}\Psi\right\} = -\frac{\partial j}{\partial x}$$

dvs

$$j = -\frac{i\hbar}{2m}\left\{\Psi^*\Psi' - \Psi^{*\prime}\Psi\right\}$$

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

$$= \frac{\hbar}{2m}\cdot 2\,\mathrm{Re}\left\{\frac{1}{i}\Psi^*\Psi'\right\}$$

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

$$= \mathrm{Re}\left\{\Psi^*\left(\frac{\hat{p}}{m}\right)\Psi\right\}$$

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

$= \text{Re}\left\{ \Psi^* \left(\frac{1}{m} \hat{\vec{p}} \right) \Psi \right\}$

Rimelig : I klassisk fysikk er $\vec{j} = \rho \vec{v}$. Nå erstattes ρ av $\Psi^* \cdots \Psi$ og $\vec{v}$ av $\hat{\vec{v}} = \hat{\vec{p}}/m$.

Eks 1 : Stasjonær tilstand i 1D boks

$\Psi_n(x,t) = \sqrt{2/L} \, \sin \frac{n\pi x}{L} \exp(-iE_n t/\hbar)$

slik at

$\Psi_n^* \left(\frac{\hbar}{mi} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi_n$ blir rent imaginær

$\Rightarrow j_n = 0$; som ventet for en stående bølge

Eks 2: Fri partikkel i 1D

$\Psi(x,t) = e^{i(px/\hbar - Et/\hbar)}$

$\Rightarrow j = \text{Re}\left\{ \frac{\hbar}{mi} \cdot \frac{ip}{\hbar} \right\} = \frac{p}{m} = v$

Rimelig : Her er $\rho = \Psi^* \Psi = 1$ overalt (dvs Ψ er ikke normert), slik at

$j = \rho \cdot v = v$

Kommutatorer [PCH 2.2; DJG 2.3.1; IØ 2.3.c]

Operatorenes rekkefølge er generelt ikke likegyldig:

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

$$\hat{p} x f(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \left(x f(x) \right) = \frac{\hbar}{i} f(x) + \frac{\hbar}{i} x \frac{\partial}{\partial x} f(x)$$

$$\Rightarrow (x\hat{p} - \hat{p}x) f(x) = -\frac{\hbar}{i} f(x) = i\hbar f(x)$$

<u>Kommutatoren</u> mellom x og $\hat{p}$:

$$[x, \hat{p}] = x\hat{p} - \hat{p}x$$

Vi ser at virkningen av $[x, \hat{p}]$ på $f(x)$ er det samme som å gange $f(x)$ med konstanten $i\hbar$.

Vi har følgende operator-identitet:

$$[x, \hat{p}] = i\hbar$$

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

Operatorene x og $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ kommuterer altså <u>ikke</u>.

Hermiteske operatorer [PCH 2.2; DJG 3; IØ 2.3]

Fysiske størrelser F er reelle. Da må også deres forventningsverdi $\langle F \rangle$ være reelle. Da er

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

som med forv.verdipostulatet betyr at

$$\int \Psi^* \hat{F} \Psi \, dx = \left\{ \int \Psi^* (\hat{F} \Psi) \, dx \right\}^* = \int \Psi (\hat{F} \Psi)^* \, dx \qquad \text{(PCH 2.7)}$$

Operatorer $\hat{F}$ som oppfyller dette (for vilkårlig normerbar Ψ) kalles hermiteske. Gjelder (PCH 2.7), gjelder også

$$\int \Psi_1^* \hat{F} \Psi_2 \, dx = \int \Psi_2 (\hat{F} \Psi_1)^* \, dx \qquad \text{(PCH 2.8)}$$

Vi koster på oss å bevise (PCH 2.8):
Velg vilkårlig normerbar $\Psi = \Psi_1 + \Psi_2 e^{i\alpha}$, med vilkårlig reell konstant α. Da er

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

$$= \underbrace{\langle F \rangle_1 + \langle F \rangle_2}_{\text{reelle}} + \underbrace{e^{i\alpha} \int \Psi_1^* \hat{F} \Psi_2 \, dx + e^{-i\alpha} \int \Psi_2^* \hat{F} \Psi_1 \, dx}_{\Rightarrow \text{ disse to må være c.c. av hverandre}}$$

$$\Rightarrow \int \Psi_1^* \hat{F} \Psi_2 \, dx = \left\{ \int \Psi_2^* (\hat{F} \Psi_1) \, dx \right\}^* = \int \Psi_2 (\hat{F} \Psi_1)^* \, dx \qquad \text{(qed)}$$

Med andre ord: En hermitesk operator $\hat{F}$ kan flyttes etter behov i integraler som $\int \Psi_1^* \hat{F} \Psi_2 \, dx = \int (\hat{F} \Psi_1)^* \Psi_2 \, dx$.

[Les evt. selv om adjungert og selvadjungert operator; ikke pensum her.]

Usikkerhet og uskarphetsrelasjoner

[PCH 4.5 ; DJG 1.6, 3.4 ; IØ Øving 1]

Standardavviket ("Root Mean Square Deviation", RMSD) i en målbar størrelse x defineres som

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

R M D M S

som med $\langle (x-\langle x\rangle)^2\rangle = \langle x^2 - 2x\langle x\rangle + \langle x\rangle^2\rangle$

$$= \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2$$

havner på den mer hensiktsmessige formen (i hvert fall i QM)

$$\boxed{\Delta X = \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2}}$$

For to målbare størrelser A og B gjelder

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

for uskarphetsproduktet $\Delta A \cdot \Delta B$, noe vi straks skal bevise.

Dette betyr at to størrelser som har operatorer som ikke kommuterer, ikke kan ha skarpe (veldefinerte) verdier samtidig !