

(32)

Noen flere generelle resultater og sammenhenger
fra kap. 2 og 4 i PCH ("Fundamentale
prinsipper" og "Viktige teoremer")

Sist:

- Postulatene
 - Sannsynlighetsstrøm(-tetthet)
-

Kommutatorer

$$[\hat{A}, \hat{B}] \stackrel{\text{def}}{=} \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

Hvis $[\hat{A}, \hat{B}]f = 0$: $\hat{A}$ og $\hat{B}$ kommuterer

$[\hat{A}, \hat{B}]f \neq 0$: — " — — " — ikke

Eks 1: $[x, x] = ?$

Løsning 1: $[x, x]f(x) = x^2 f(x) - x^2 f(x) = 0$

$$\Rightarrow [x, x] = 0$$

Eks 2: $[x, y] = ?$

Løsning 2: $[x, y]f(x, y) = xy f(x, y) - yx f(x, y) = 0$

$$\Rightarrow [x, y] = 0$$

Eks 3: $[q_i, q_j] = ?$ ($q_i, q_j = \text{pos. koord.}$)

(33)

Løs 3: Fra Eks 1 og 2 følger $[q_i, q_j] = 0$

Eks 4: $[x, \hat{p}_x] = ?$

Løs 4: $[x, \hat{p}_x] f(x) = x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} f(x) - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} x f(x) = i\hbar f(x)$
 $= \frac{\hbar}{i} (\cancel{\frac{\partial f}{\partial x}} + f)$

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

Eks 5: $[\hat{p}_x, x] = ?$

Løs 5: Åpenbart er $[\hat{B}, \hat{A}] = -[\hat{A}, \hat{B}] \Rightarrow [\hat{p}_x, x] = -i\hbar$

Eks 6: $[y, \hat{p}_y] = ?$

Løs 6: Navnet skjemmer ingen, så $[y, \hat{p}_y] = i\hbar$

Eks 7: $[x, \hat{p}_y] = ?$

Løs 7: $[x, \hat{p}_y] f(x, y) = x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} f - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} x f = 0$

$\Rightarrow [x, \hat{p}_y] = 0$

Eks 8: $[q_i, \hat{p}_j] = ?$

Løs 8: Innser nå at $[q_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}$

Eks 9: $[\hat{p}_x, \hat{p}_y] = ?$

(34)

Løsn 9: $[\hat{p}_x, \hat{p}_y] f(x, y) = -\hbar^2 \left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} f - \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} f \right) = 0$

$$\Rightarrow [\hat{p}_x, \hat{p}_y] = 0$$

Eks 10: $[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = ?$

Løsn 10: Innser at $[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0$

Eks 11: $[V(x), \hat{p}_x] = ?$

Løsn 11: $[V(x), \hat{p}_x] f(x) = V(x) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} f(x) - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} V(x) f(x)$
 $= -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial V}{\partial x} \cdot f(x)$

$$\Rightarrow [V(x), \hat{p}_x] = i\hbar \frac{\partial V}{\partial x}$$

Eks 12: $[\hat{K}, x] = ?$

Løsn 12: $[\hat{K}, x] f(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial x^2} x f - x \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right\}$

$$\frac{\partial^2 (x f)}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left(x \frac{\partial f}{\partial x} + f \right) = x \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial f}{\partial x}$$

$$\Rightarrow [\hat{K}, x] f(x) = -\frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial}{\partial x} f(x)$$

$$\Rightarrow [\hat{K}, x] = -\frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial}{\partial x} = -\frac{i\hbar}{m} \cdot \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\hbar}{im} \hat{p}_x$$

Dermed: $[\hat{H}, x] = \frac{\hbar}{im} \hat{p}_x$

$$[\hat{H}, \hat{p}_x] = i\hbar \frac{\partial V}{\partial x}$$

Adjungert av en operator

(35)

Dersom

$$\int (\hat{A} \Psi_1)^* \Psi_2 dx = \int \Psi_1^* (\hat{B} \Psi_2) dx$$

er operatoren $\hat{B}$ den adjungerte av $\hat{A}$.

Notasjon: $\hat{A}^\dagger$ ("A-dagger") er adjungert av $\hat{A}$

Dermed:
$$\int (\hat{A} \Psi_1)^* \Psi_2 dx = \int \Psi_1^* (\hat{A}^\dagger \Psi_2) dx \quad (\text{PCH } 2.9)$$

Hermiteiske operatoren

F = fysisk størrelse

$\hat{F}$ = QM operator som repr. F

$\langle F \rangle$ = forv.verdi av F , må være reell

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

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

Mer generelt (se H20 for bevis):

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

Da er $\hat{F}$ hermitesk, og selvadjungert, siden $\hat{F}^\dagger = \hat{F}$.

Eks 1: Er $\frac{\partial}{\partial x}$ en hermitesk operator?

(36)

Løsn 1: Nei, da den ikke er selvadjungert:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial}{\partial x} \Psi_1\right)^* \Psi_2 dx = \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^* \Psi_2 dx}_{=0} - \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^* \left(\frac{\partial}{\partial x} \Psi_2\right) dx$$

$$\Rightarrow \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^\dagger = -\frac{\partial}{\partial x}$$

Eks 2: Hva er den adjungerte av en (generelt kompleks) konstant c ?

$$\text{Løsn 2: } \int (c \Psi_1)^* \Psi_2 dx = \int \Psi_1^* c^* \Psi_2 dx$$

$$\Rightarrow c^\dagger = c^*$$

Eks 3: Hva er $[f(x)]^\dagger$ for (kompleks) funksjon $f(x)$?

$$\text{Løsn 3: } \int (f(x) \Psi_1)^* \Psi_2 dx = \int \Psi_1^* f^*(x) \Psi_2 dx$$

$$\Rightarrow [f(x)]^\dagger = [f(x)]^*$$

Eks 4: Hva er adjungert av et produkt?

$$\text{Løsn 4: } \int \Psi_1^* (AB)^\dagger \Psi_2 dx \stackrel{2.9}{=} \int (AB \Psi_1)^* \Psi_2 dx$$

$$\stackrel{2.9}{=} \int (B \Psi_1)^* A^\dagger \Psi_2 dx \stackrel{2.9}{=} \int \Psi_1^* B^\dagger A^\dagger \Psi_2 dx$$

$$\Rightarrow (AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$$

Eks 5: Vis at $\hat{p}_x$ er hermitesk.

(37)

Løsn 5: $(\hat{p}_x)^\dagger = \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}\right)^\dagger = \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^\dagger \left(\frac{\hbar}{i}\right)^\dagger = \left(-\frac{\partial}{\partial x}\right) \left(-\frac{\hbar}{i}\right) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$
 $\Rightarrow \hat{p}_x^\dagger = \hat{p}_x$, dvs selvadjungert og hermitesk

Eks 6: Er $\hat{K}$ hermitesk?

Løsn 6: $\hat{K}^\dagger = \frac{1}{2m} (\hat{p} \hat{p})^\dagger = \frac{1}{2m} \hat{p}^\dagger \hat{p}^\dagger = \frac{\hat{p}^2}{2m} = \hat{K}$; så ja!

Eks 7: Er $\hat{H}$ hermitesk?

Løsn 7: Ja. Fra Eks 6 er $\hat{K}$ hermitesk. Siden $V(x)$ er en reell funksjon, er $V^\dagger = V^* = V$.
Dermed er $\hat{H}^\dagger = (\hat{K} + V)^\dagger = \hat{K}^\dagger + V^\dagger = \hat{K} + V = \hat{H}$.

Usikkerhet i fysiske størrelser

(38)

Standardavvik:

$$\Delta F = \sqrt{\langle (F - \langle F \rangle)^2 \rangle}$$

= Root Mean Square Deviation

$$\begin{aligned}\langle (F - \langle F \rangle)^2 \rangle &= \langle F^2 - 2F\langle F \rangle + \langle F \rangle^2 \rangle \\ &= \langle F^2 \rangle - 2\langle F \rangle^2 + \langle F \rangle^2 = \langle F^2 \rangle - \langle F \rangle^2\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \Delta F = \sqrt{\langle F^2 \rangle - \langle F \rangle^2}$$

$$\langle F \rangle = \int \Psi^* \hat{F} \Psi dx$$

$$\langle F^2 \rangle = \int \Psi^* \hat{F}^2 \Psi dx$$

Eks: Grunntilst. for partikkel i boks. $\Delta x = ?$ $\Delta p = ?$ ($0 < x < L$)

Løs: Fra før er $\langle x \rangle = L/2$ og $\langle p \rangle = 0$.

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2}{L} \int_0^L x^2 \sin^2 \frac{\pi x}{L} dx = L^2 \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2} \right)$$

$$\Rightarrow \Delta x = \sqrt{L^2 \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2} - \frac{1}{4} \right)} \approx \underline{0.18 L}$$

$$\langle p^2 \rangle = \frac{2}{L} \int_0^L \sin \frac{\pi x}{L} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \sin \frac{\pi x}{L} dx$$

$$= \frac{2}{L} \cdot (-\hbar^2) \cdot \left(\frac{\pi}{L} \right)^2 \cdot \frac{L}{\pi} \cdot \underbrace{\int_0^\pi (-\sin^2 z) dz}_{= \pi/2 \cdot (-1)} = \left(\frac{\pi \hbar}{L} \right)^2$$

$$\Rightarrow \Delta p = \underline{\pi \hbar / L}$$

$$\Rightarrow \underline{\Delta x \cdot \Delta p \approx 0.57 \hbar}$$

Uskarphetsprodukt

(39)

For to målbare fysiske størrelser A og B er

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \left| \frac{1}{2} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right| \quad (\text{PCH 4.35})$$

(Se H20 for bevis)

Dvs at $\hat{A}$ og $\hat{B}$ må kommutere for at A og B skal kunne ha skarpe verdier samtidig.

Eks: Heisenbergs uskarphetsrelasjon

$$[x, \hat{p}_x] = i\hbar \Rightarrow \Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

En gaussisk bølgefunksjon

$$\Psi(x, t=0) = G \cdot \exp\left\{-\frac{(x - \langle x \rangle_0)^2}{2\Delta x_0^2} + ikx\right\}$$

har minimalt uskarphetsprodukt $\Delta x_0 \cdot \Delta p_0 = \frac{\hbar}{2}$,

tyngdepunkt i $\langle x \rangle_0$ og $\langle p \rangle_0 = \hbar k$.

Hvis $V=0$ (fri partikkel):

$$\langle x \rangle(t) = \langle x \rangle_0 + \frac{\langle p \rangle_0}{m} \cdot t$$

$$\langle p \rangle(t) = \langle p \rangle_0 = \hbar k$$

$\Delta x(t)$ øker med t (dispersjon)

$$\Delta p(t) = \Delta p_0 = \hbar/2\Delta x_0 \text{ uendret}$$

(Se øving, og notater/video H20.)

Tidsutvikling av forventningsverdier

Ser på $\hat{F}$ der $\partial \hat{F} / \partial t = 0$

(Eks: $\hat{x}$, $\hat{p}_x$, $V(x)$, $\hat{K}$, $\hat{L}$)

$$\text{Utg.punkt: } \frac{d}{dt} \langle F \rangle = \frac{d}{dt} \left\{ \int \Psi^* \hat{F} \Psi dx \right\}$$

Bruk produktregel for derivasjon, skriv om

$$\partial \Psi^* / \partial t \text{ og } \partial \Psi / \partial t \text{ rha SL, i\hbar } \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi,$$

og bruk PCH 2.8 for hermiteske operator

$$\Rightarrow \boxed{\frac{d}{dt} \langle F \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{F}] \rangle}$$

Ehrenfests teorem:

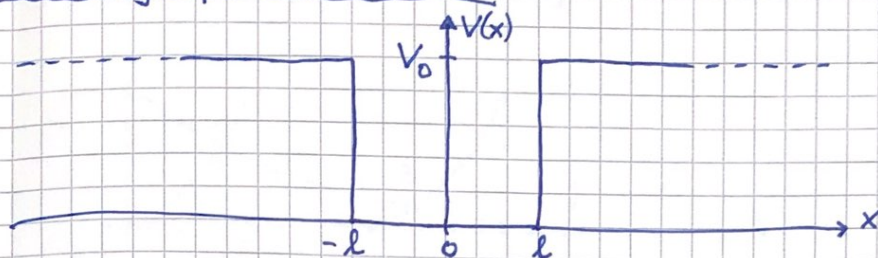
De klassiske bevegelsesligningene gjelder for $\langle x \rangle$ og $\langle p \rangle$ i kvantemekanikken:

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, x] \rangle = \frac{i}{\hbar} \cdot \frac{\hbar}{im} \langle \hat{p} \rangle = \frac{\langle p \rangle}{m} \quad \left[\text{Eks 12} \right]_{s 34}$$

$$\frac{d\langle p \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{p}] \rangle = \frac{i}{\hbar} \cdot i\hbar \left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle = - \left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle \quad \left[\text{Eks 11} \right]_{s 34}$$

Kombinert gir disse

$$m \frac{d^2 \langle x \rangle}{dt^2} = - \left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle$$

Endelig potensialbrønn

$$\Psi''(x) = \begin{cases} -k^2 \Psi(x) & ; |x| < l & ; k^2 = 2mE/\hbar^2 \\ \kappa^2 \Psi(x) & ; |x| \geq l & ; \kappa^2 = 2m(V_0 - E)/\hbar^2 \end{cases}$$

$E < V_0$: Bundne tilstander

$$\Psi(x) = \begin{cases} A e^{\kappa x} & (x \leq -l) \\ C \sin kx + D \cos kx & (|x| < l) \\ B e^{-\kappa x} & (x \geq l) \end{cases}$$

Kontinuerlige Ψ og Ψ' i $x = \pm l$ og normering av Ψ

$\Rightarrow$ 5 lign. $\Rightarrow$ Fastlegger A, B, C, D og mulige E .

Symm. tilst: $D \cos kx$

Antisymm. tilst: $C \sin kx$

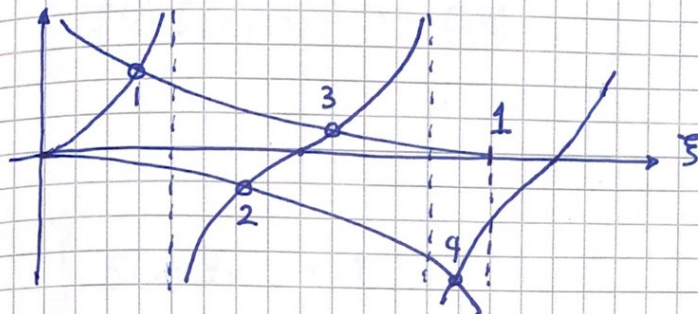
Tillatte E bestemt av

$$\tan kl = \begin{cases} \kappa l / k & (\text{symm } \Psi) \\ -k / \kappa & (\text{antisymm } \Psi) \end{cases}$$

eller med $k_0^2 = 2mV_0/\hbar^2$ og $\xi = k/k_0$:

$$\tan k_0 l \xi = \begin{cases} \sqrt{1 - \xi^2} / \xi & (\text{symm}) \\ -\xi / \sqrt{1 - \xi^2} & (\text{antisymm}) \end{cases}$$

Plotting av $V(x)$ og de to $H(x)$ gir ξ -verdier, dvs mulige E (42)

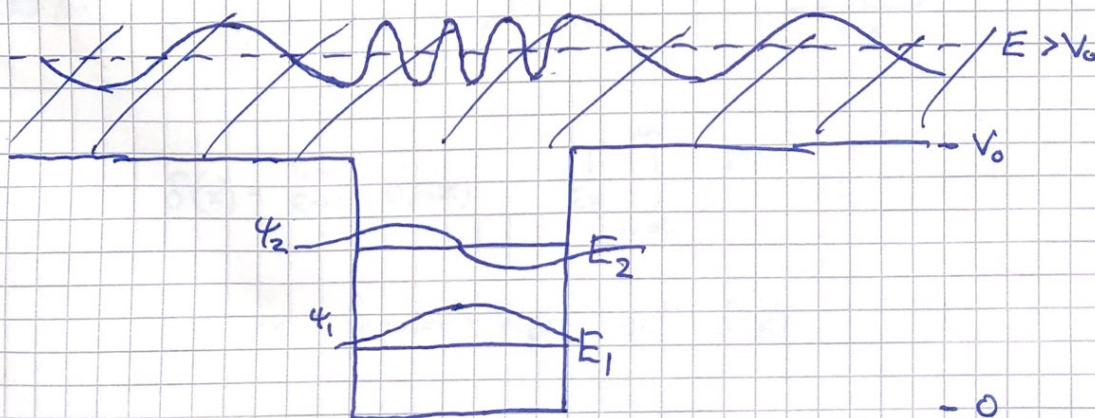


- Minst 1 bundet tilstand
- Antall bundne tilstander: $N = 1 + \left[\frac{2\sqrt{2mV_0}l}{\pi\hbar} \right]$ ↑ Heltallsverdien
- $\Psi(x) \sim e^{-\xi|x|}$ i det klassisk forbudte området.

Inntrengningsdybde ξ^{-1} , def. ved $\left| \frac{\Psi(l + \frac{1}{2}\pi)}{\Psi(l)} \right| = e^{-1}$

$E > V_0$: Ubundne tilstander

$\Psi(x) = a \sin Kx + b \cos Kx$ for $|x| > l$; ingen refleksjoner på $K = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar \Rightarrow$ kontinuum



Diracs deltafunksjon

(43)

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x) dx = f(0) \quad ; \quad \begin{array}{l} \text{kontinuerlig } f(x) \\ \text{ i } x=0 \end{array}$$

$$\Rightarrow \bullet \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1$$

$$\bullet \delta(x) = 0 \quad \text{for } x \neq 0$$

$$\bullet \delta(0) = \infty$$

Representasjoner:

$$\text{Eks 1: } \delta_{\varepsilon}(x) = \begin{cases} 1/\varepsilon & |x| \leq \varepsilon/2 \\ 0 & |x| > \varepsilon/2 \end{cases}$$

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \delta_{\varepsilon}(x)$$

$$\text{Eks 2: } \delta_{\varepsilon}(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-1/\varepsilon}^{1/\varepsilon} e^{ikx} dk = \frac{\sin(x/\varepsilon)}{\pi x}$$

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \delta_{\varepsilon}(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dk$$

altså en fourier-repr. av $\delta(x)$

- $\delta(-x) = \delta(x)$
- $\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x)$
- $\delta(\vec{r}) = \delta(x) \cdot \delta(y) \cdot \delta(z)$
- Enhet: $[\delta(x)] = \frac{1}{[x]}$

δ -funksjonsnormering

En partikkel har plan bølge $\Psi_k(x) = A e^{ikx}$ som løsning av TUSL. Kan ikke normeres på ordinært vis, men ortonormering kan uttrykkes ved hjelp av δ -funksjonen:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{k'}^*(x) \Psi_k(x) dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(k-k')x} dx = |A|^2 \cdot 2\pi \cdot \delta(k-k')$$

$\Rightarrow$ Velger $A = 1/\sqrt{2\pi}$ og får

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{k'}^*(x) \Psi_k(x) dx = \delta(k-k')$$

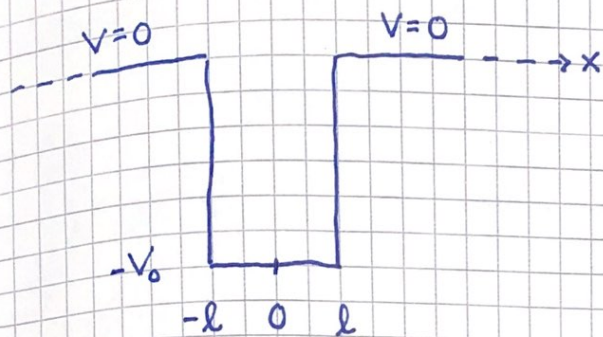
Erst. uttrykt ved impulsen $p = \hbar k$:

$$\Psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$$

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{p'}^*(x) \Psi_p(x) dx &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p-p')x/\hbar} dx = \frac{1}{\hbar} \delta\left(\frac{p-p'}{\hbar}\right) \\ &= \frac{1}{\hbar} \cdot \hbar \delta(p-p') = \delta(p-p') \end{aligned}$$

Deltafunksjonsbrønn

(45)



Ta grensene

$$V_0 \rightarrow \infty \quad \text{og} \quad l \rightarrow 0$$

slik at

$$\beta = 2l \cdot V_0 \quad \text{er} \quad \text{endelig}$$

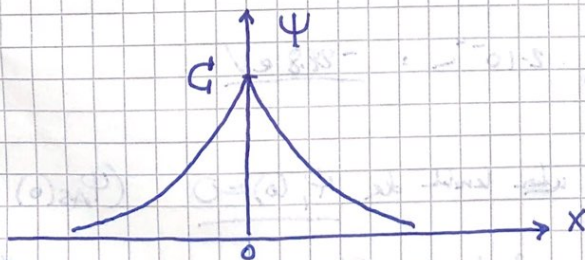
$$\Rightarrow V(x) = -\beta \delta(x) = \begin{cases} -\infty & (x=0) \\ 0 & (x \neq 0) \end{cases}$$

Anta $E < 0$ (bundet tilstand):

TUSL for $x \neq 0$:

$$\psi'' = \kappa^2 \psi \quad ; \quad \kappa = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} > 0$$

$$\Rightarrow \psi(x) = C e^{\mp \kappa x} \quad ; \quad x \gtrless 0$$



$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = 2|C|^2 \int_0^{\infty} e^{-2\kappa x} dx = \frac{|C|^2}{\kappa}$$

$$\Rightarrow \psi(x) = \sqrt{\kappa} e^{-\kappa|x|}$$

Finnes mulig(e) E-verdi(er) med "triks" : (46)
 Integrer TUSL fra $-\epsilon$ til ϵ :

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

$$\int_{-\epsilon}^{\epsilon} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dx} \Psi' - \beta \delta(x) \Psi \right\} dx = \int_{-\epsilon}^{\epsilon} E \Psi dx$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} [\Psi'(\epsilon) - \Psi'(-\epsilon)] - \beta \Psi(0) = E \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \Psi(x) dx$$

Tar så grensen $\epsilon \rightarrow 0$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} [-\hbar\sqrt{\kappa} - \hbar\sqrt{\kappa}] - \beta\sqrt{\kappa} = E \cdot 0 = 0$$

$$\Rightarrow \kappa = m\beta/\hbar^2$$

$$\Rightarrow E = -\hbar^2 \kappa^2 / 2m = -m\beta^2 / 2\hbar^2$$

Dvs en bundet tilstand.

Alle $E > 0$ er tillatt, dvs kontinuum av ubundne tilstander.