→ ψ er kontinuerlig overalt, også der $|V| \to \infty$.
Diskontinuerlig ψ ville bety at sannsynlighetstettheten $|\psi|^2$ var diskontinuerlig, som er urimelig. (Et mer overbevisende argument: Start med et endelig potensialsprang V_0, og ta grensen $V_0 \to \infty$ til slutt. Da vil resultatet bli kontinuerlig ψ.)

- Krumning av ψ:

Klassisk er selvsagt $E > V$ overalt. Da er $\psi''/\psi < 0$, og ψ krummer mot x-aksen. Vi kaller dette et klassisk tillatt område.
Områder med $E < V$ er klassisk forbudt, men kvantemekanisk tillatt (med mindre $V = \infty$). Da er $\psi''/\psi > 0$, og ψ krummer bort fra x-aksen.

- Ortogonalitet:

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

Ortonormert funksjonssett $\{\psi_n\}$ når

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

Brukes f.eks. $\sin\alpha \cdot \sin\beta = \frac{1}{2}[\cos(\alpha-\beta) - \cos(\alpha+\beta)]$ fås for partikkel i boks $\langle \psi_n, \psi_k \rangle = \delta_{nk}$, dvs ortonormerte egenfunksjoner.

Gjelder ganske generelt; mer om det senere.
(Se evt PCH 2.2, 2.4.)

- Starttilstand og tidsutvikling:

Anta en gitt starttilstand $\Psi(x,0)$ ved $t = 0$. (Normert.)

$\Psi(x,0)$, og $\Psi(x,t)$, kan utvikles i stasjonære tilstander:

$$\Psi(x,0) = \sum_n c_n \psi_n(x) \quad ; \quad \Psi(x,t) = \sum_n c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$$

Finner c_n slik:

$$\underline{\int_{-\infty}^{\infty} \psi_j^*(x) \Psi(x,0)\, dx} = \sum_n c_n \int_{-\infty}^{\infty} \psi_j^*(x) \psi_n(x)\, dx = \sum_n c_n \delta_{nj} = \underline{c_j}$$

Normering:

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

Tilstanden forblir normert:

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

$$= \sum_n |c_n|^2 = \underline{1}$$

Postulatene [PCH 2.1; DJG 3.3; I Ø 2.2]

Empirisk grunnlag, klassisk mek: Newtons lover

I QM, følgende postulater:

A. Operatorpostulat:

Til målbare størrelser i klassisk mek.

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

svarer i QM en lineær operator

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

med

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

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

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

Noen målbare størrelser har ikke en klassisk versjon, f.eks. spinn.

Eks: Partikkel i 2D

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

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

$$L_z = (\vec{r}\times\vec{p})_z = x p_y - y p_x$$

$$\Rightarrow \hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

B. Tilstandspostulat

Bølgefunksjonen $\Psi(q_1 q_2 \cdots q_N, t)$ beskriver systemets tilstand fullstendig.

Tidsutviklingen gitt ved SL

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

$\hat{H}$ = systemets Hamiltonoperator

Eks: Partikkel i 2D

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

C. Forventningsverdipostulat

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

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

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

$\langle F \rangle$ kalles <u>forventningsverdien</u> til F.

Eks: For partikkel i 1D boks er (pga symmetri)

$$\langle x \rangle_n = \int_0^L \Psi_n^* (x,t)\, x \, \Psi_n(x,t)\, dx = \int_0^L x \, |\psi_n(x)|^2 dx = L/2$$

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

for alle de stasjonære tilstandene $\Psi_n(x,t) = \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$

D. Målepostulat

Eneste mulige måleverdier av F er en av 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. Målingen påvirker systemet!

Eks: Anta at en partikkel ved $t=0$ er preparert i tilstanden

$$\Psi(x,0) = \sum_{n=1}^{4} c_n \Psi_n(x,0)$$

Måling av partikkelens energi ved tidspunkt $t>0$ vil da gi en av energiene E_n $(n=1,2,3,4)$, med sannsynlighet $|c_n|^2$.

$\left(\sum_{n=1}^{4} |c_n|^2 = 1\right)$

Hvis f.eks. E_4 ble målt ved tid t, beskrives partikkelen ved $\Psi_4(x,t)$ etter tid t.

Sannsynlighetsstrøm og -bevarelse

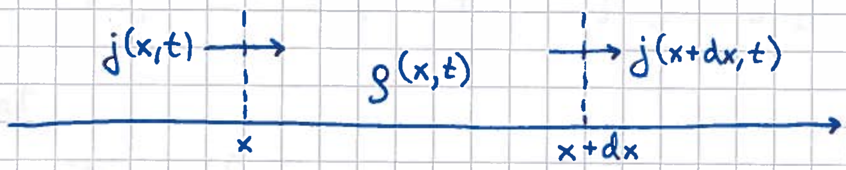
[PCH 2.6 ; DJG 1.4 ; IØ 2.8]

Kontinuitetsligninger, for masse, ladning etc, uttrykker at en størrelse er bevart.

Gjelder også for sannsynlighet :

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

Sanns. strøm : $j(x,t)$; $[j] = 1/s$



Netto strøm inn gir økning i sannsynlighet pr tidsenhet:

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

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

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

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

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla\cdot\vec{j} = 0} \qquad \left(\nabla\cdot\vec{j} = \frac{\partial j_x}{\partial x} + \frac{\partial j_y}{\partial y} + \frac{\partial j_z}{\partial z}\right)$$

Vi regner ut $\partial\rho/\partial t$ fra SL og fastlegger på den måten j.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}\{\Psi^* \Psi\} = \Psi^* \underbrace{\frac{\partial \Psi}{\partial t}}_{=\frac{\hat{H}\Psi}{i\hbar}} + \underbrace{\frac{\partial \Psi^*}{\partial t}}_{=\left(\frac{\hat{H}\Psi}{i\hbar}\right)^*} \Psi$$

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

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

Har generelt

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

slik at

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

som er nettopp kont. lign, med sanns.strøm

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

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

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

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

Generaliseres i 3D til

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

Ikke urimelig: I klassisk fysikk er $\vec{j} = \rho\vec{v}$.

I QM inngår $\Psi^* \ldots \Psi$ istedenfor ρ

og $\hat{\vec{v}} = \hat{\vec{p}}/m$ istedenfor $\vec{v}$.

Eks 1: Stasjonær tilstand for partikkel i 1D boks.

$$\Psi_n \sim \sin\frac{n\pi x}{L}\, e^{-iE_n t/\hbar}$$

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

Rimelig for stående bølger.

Eks 2: Fri partikkel i 1D, $\vec{p} = p\,\hat{x}$

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

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

Rimelig: Her er $\rho = \Psi^*\Psi = 1$ overalt,

og $j = \rho v = v$

<u>Kommutatorer</u> [PCH 2.2; DJG 2.3.1; IØ 2.3.c]

Operatorenes <u>rekkefølge</u> er generelt <u>ikke likegyldig</u>:

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

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

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

Vi kaller $[x, \hat{p}] \equiv x\hat{p} - \hat{p}x$ <u>kommutatoren</u> mellom x og $\hat{p}$.

Virkningen av $[x, \hat{p}]$ på $f(x)$ tilsvarer å gange $f(x)$ med $i\hbar$,

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

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

$\Rightarrow$ x og $\hat{p}$ <u>kommuterer ikke</u>.

Hermitesk operator [PCH 2.2 ; DJG 3 ; IØ 2.3]

Vi krever reell fysisk størrelse F og reell forv.verdi $\langle F \rangle$.

Da er $\langle F \rangle = \langle F \rangle^*$, dvs

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

og $\hat{F}$ kalles hermitesk. Enda mer generelt er $\langle F \rangle$ reell hvis

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

Bevis: Velg $\Psi = \Psi_1 + \Psi_2 e^{i\alpha}$ med vilkårlig reell konstant α.

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

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

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

Dvs: Hermitesk oper. $\hat{F}$ kan flyttes (etter behov) i integraler som

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

Adjungert operator defineres ved

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

$\hat{F}^\dagger$ ("dagger") er den adjungerte av $\hat{F}$

Sammenligning med PCH 2.8 ovenfor viser nå at dersom $\hat{F}$ er hermitesk, så er $\hat{F}^\dagger = \hat{F}$.

Da kan vi alternativt si at $\hat{F}$ er selvadjungert.