Postulatene [PCH 2.1 ; DJG 3.3 ; IØ 2.2]

Newtons lover danner det empiriske grunnlaget for klassisk mekanikk.

Kvantemekanikk baserer seg på følgende postulater :

A. Operatorpostulat

$F(q_1, q_2, \cdots, q_N, p_1, p_2, \cdots, p_N)$ = målbar størrelse i klassisk mekanikk ; 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

$\hat{p}_j = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q_j}$ = operator for impulskoordinat p_j

Rekkefølge på $\hat{q}_j$ og $\hat{p}_j$ slik at egenverdiene F til operatoren $\hat{F}$ blir reelle.

Eks: Partikkel i xy-planet, masse m

$$\hat{q}_1 = q_1 = x \quad , \quad \hat{q}_2 = q_2 = y$$

$$\hat{p}_1 = \hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} \quad , \quad \hat{p}_2 = \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}$$

$$\hat{K} = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)$$

$$\hat{L}_z = (\vec{r} \times \hat{\vec{p}})_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x$$

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

B. Tilstandspostulat

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

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

der $\hat{H} = \hat{K} + V$ er systemets Hamiltonoperator.

C. Forventningsverdipostulat

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

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

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

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

Eks: Partikkel i boks, i gitt stasjonær tilstand $\Psi_n(x,t)$.

Beregn $\langle x\rangle$ og $\langle p\rangle$.

Løsn: $\langle x\rangle = \int_0^L \Psi_n^* \, x \, \Psi_n \, dx = \int_0^L x\, |\psi_n|^2 dx = \underline{\underline{\frac{L}{2}}}$

$$\langle p\rangle = \int_0^L \Psi_n^* \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\Psi_n \, dx$$

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

D. Målepostulat

Eneste mulige måleverdier av F er egenverdiene f_j, gitt ved

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

Her er Ψ_j egenfunksjoner til $\hat{F}$.

Hvis F måles, med resultat f_j, havner systemet i egentilstanden Ψ_j. Målingen påvirker systemet!

Eks: Anta partikkel preparert i tilstanden

$$\Psi(x,0) = \sum_{n=1}^{3} c_n \psi_n(x) \qquad \text{ved } t=0$$

Måling av partikkelens energi ved $t>0$ vil da gi

E_1, E_2 eller E_3 med sannsynlighet hhv

$|c_1|^2$, $|c_2|^2$ og $|c_3|^2$.

Hvis E_3 ble målt ved et tidspunkt t_1,

beskrives partikkelen av tilstanden

$$\Psi_3(x,t) = \psi_3(x)\, e^{-iE_3 t/\hbar}$$

ved tider $t \geq t_1$.

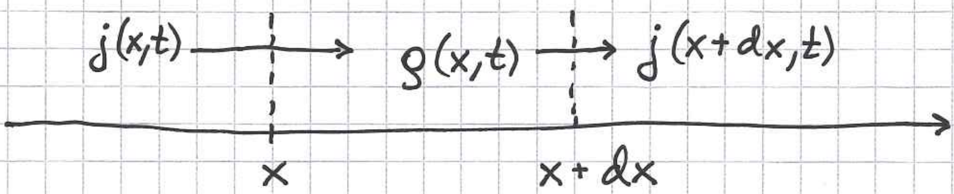
Sannsynlighetsstrøm og bevaring av sannsynlighet

[PCH 2.6 ; DJG 1.4 ; IØ 2.8]

Kontinuitetsligninger uttrykker at ulike størrelser er bevart.

Sanns. tetthet : $\rho(x,t) = \frac{dP}{dx} = |\Psi(x,t)|^2$

Sanns. strøm : $j(x,t)$



$$\underbrace{j(x,t) - j(x+dx,t)}_{\text{netto strøm inn på } (x,\, x+dx)} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial t}\{\varrho(x,t)\,dx\}}_{\text{endring pr tidsenhet}} = dx\,\frac{\partial}{\partial t}\varrho(x,t)$$

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

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

3D : $\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \nabla\cdot\vec{j} = 0$; $\nabla\cdot\vec{j} = \frac{\partial j_x}{\partial x} + \frac{\partial j_y}{\partial y} + \frac{\partial j_z}{\partial z}$

[som bevaring av masse i TFY4163]

Vi bruker SL og regner ut $\partial\varrho/\partial t$, og kan deretter identifisere et generelt uttrykk for j.

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

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

$$= \frac{i\hbar}{2m}\{\Psi^* \Psi'' - \Psi^{*''} \Psi\} \qquad \left[\begin{array}{l}\text{Leddene med} \\ V(x) \text{ kansellerer}\end{array}\right]$$

Generelt har vi

$[f g' - f' g]' = f'g' + f g'' - f''g - f'g' = f g'' - f'' g$, slik at

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\{\Psi^* \Psi' - \Psi^{*'} \Psi\} \overset{\text{kont.}}{\underset{\text{Lign.}}{=}} -\frac{\partial j}{\partial x}, \text{ dvs}$$

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

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

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

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

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

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

Rimelig resultat: I klassisk fysikk er $\vec{j} = \rho\vec{v}$.
I QM erstattes ρ av $\Psi^* \Psi$, og $\vec{v}$
erstattes av $\hat{\vec{v}} = \frac{1}{m}\hat{\vec{p}}$.

Eks 1: Fri partikkel

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

$$j = \mathrm{Re}\left\{\Psi^* \frac{\hbar}{mi} \cdot \frac{ip}{\hbar} \Psi\right\} = \frac{p}{m} = v$$

Rimelig: $\rho = \Psi^*\Psi = 1$ overalt $\Rightarrow j = \rho v = v$

Eks 2: Partikkel i stasjonær tilstand i boks

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

Her blir $\Psi_n^* \frac{\hbar}{mi} \frac{\partial}{\partial x} \Psi$ rent imaginær $\Rightarrow j_n = 0$

Rimelig for en stående bølge

Eks 3: Partikkel i vilkårlig stasjonær bundet tilstand $\Psi(x,t) = \psi(x)\exp(-iEt/\hbar)$

Kan alltid velge reell $\psi(x)$ for bundet tilstand i en dimensjon.

Da blir $j = 0$.

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

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

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

dvs operatorenes rekkefølge kan ha betydning. Vi ser at

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

Vi definerer <u>kommutatoren</u> mellom to operatorer:

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

Ser at virkningen av $[x, \hat{p}]$ på f tilsvarer å multiplisere f med konstanten $i\hbar$.

Vi har en operator-identitet: $[x, \hat{p}] = i\hbar$

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

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

Eks 1: $[V(x), \hat{p}] = ?$

$$[V, \hat{p}] f = V \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} f - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}(Vf)$$

$$= V \frac{\hbar}{i} \frac{\partial f}{\partial x} - V \frac{\hbar}{i} \frac{\partial f}{\partial x} - \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial V}{\partial x}\right) f = i\hbar \frac{\partial V}{\partial x} \cdot f$$

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

Eks 2: $[\hat{K}, \hat{p}] = ?$

$$[\hat{K}, \hat{p}] f = \frac{1}{2m} (\hat{p}\hat{p}\hat{p} - \hat{p}\hat{p}\hat{p}) f = 0$$

$$\Rightarrow \underline{[\hat{K}, \hat{p}] = 0}$$

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

Fysiske størrelser F, og deres forventningsverdier $\langle F\rangle$, er <u>reelle</u>, dvs $\langle F\rangle = \langle F\rangle^*$. Dermed:

$$\underbrace{\int \Psi^* \hat{F} \Psi \, dx}_{\langle F\rangle} = \underbrace{\left\{ \int \Psi^* \hat{F} \Psi \, dx \right\}^*}_{\langle F\rangle^*} = \int \Psi (\hat{F}\Psi)^* dx \quad \text{(PCH 2.7)}$$

Mer generelt gjelder da også

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

Når en operator $\hat{F}$ oppfyller disse ligningene, for vilkårlige normerbare funksjoner Ψ (evt. Ψ_1 og Ψ_2), sier vi at $\hat{F}$ er <u>hermitesk</u>.

Da kan $\hat{F}$ "flyttes etter behov" i slike integraler.

Notasjon: $\Psi_2 (\hat{F}\Psi_1)^* = (\hat{F}\Psi_1)^* \Psi_2$

Dvs, her virker $\hat{F}$ bare på Ψ_1 når vi har parentes rundt.

Den <u>adjungerte</u> av en operator $\hat{F}$ betegnes $\hat{F}^\dagger$ ("F-dagger"; i LaTeX \dagger) og defineres (i 1D):

$$\int (\hat{F}\Psi_1)^* \Psi_2 \, dx \stackrel{\text{def}}{=} \int \Psi_1^* (\hat{F}^\dagger \Psi_2) \, dx \quad \text{(PCH 2.9)}$$

Sammenligning av (PCH 2.9) med (PCH 2.8) viser at $\hat{F}^\dagger = \hat{F}$ når $\hat{F}$ er hermitesk. Sier da at $\hat{F}$ er <u>selvadjungert</u>.

Vi beviser (PCH 2.8) og ser på noen eksempler.

Bevis for (PCH 2.8):

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

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

$$= \underbrace{\int \Psi_1^* \hat{F} \Psi_1 dx}_{\langle F \rangle_1} + \underbrace{\int \Psi_2^* \hat{F} \Psi_2 dx}_{\langle F \rangle_2} \leftarrow \text{reelle størrelser}$$

$$+ e^{i\alpha} \int \Psi_1^* \hat{F} \Psi_2 dx + e^{-i\alpha} \int \Psi_2^* \hat{F} \Psi_1 dx$$

Siden $\langle F \rangle$ er reell, må de to siste integralene være komplekskonjugerte (c.c.) av hverandre:

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

som er (PCH 2.8).

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

Løsn 1: Sjekker om den er selvadjungert.

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

dvs $\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^\dagger = -\frac{\partial}{\partial x}$, dvs <u>ikke</u> selvadjungert, evt. <u>ikke hermitesk</u>.

Eks 2: Vis at $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$

Løsn 2: $\int \Psi_1^* \underline{(AB)^\dagger} \Psi_2 dx \overset{PCH 2.9}{=} \int (AB\Psi_1)^* \Psi_2 dx$

$\overset{PCH 2.9}{=} \int (B\Psi_1)^* A^\dagger \Psi_2 dx \overset{PCH 2.9}{=} \int \Psi_1^* \underline{B^\dagger A^\dagger} \Psi_2 dx$; OK!

Eks 3: Er operatoren $\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$ hermitesk?

Tips: Fra definisjonen (PCH 2.9) av den adjungerte følger det at $[f(x)]^\dagger = f^*(x)$ for en vilkårlig kompleks funksjon $f(x)$ og at $c^\dagger = c^*$ for en vilkårlig kompleks konstant c, noe du raskt kan sjekke selv.

Løsn. 3: Vi bruker $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger$ med $\hat{A} = \frac{\hbar}{i}$ og $\hat{B} = \frac{\partial}{\partial x}$.

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

Fra Eks 1: $(\partial/\partial x)^\dagger = -\partial/\partial x$

Fra "Tips": $(\hbar/i)^\dagger = (\hbar/i)^* = -\hbar/i$

Dermed:

$$\hat{p}^\dagger = \left(-\frac{\partial}{\partial x}\right)\cdot\left(-\frac{\hbar}{i}\right) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} = \hat{p}$$

dvs $\hat{p}$ er selvadjungert ($\equiv$ hermitesk).