

Kapittel 1

INNLEDNING TIL KVANTEMEKANIKKEN

Den teoretiske beskrivelse av naturen som kalles kvantemekanikk ble skapt av europeiske fysikere i 1925–28. Det var en intellektuell revolusjon, og teorien inneholdt elementer som var fullstendig ukjente i klassisk fysikk:

- **Kvantisering:** Mange fysiske størrelser kan bare ha visse diskrete verdier.
- **Bølge-partikkel dualisme:** En materiell partikkel og elektromagnetisk stråling er ikke så forskjellige som i klassisk fysikk. Begge har både bølgeegenskaper og partikkel-egenskaper.
- **Sannsynlighetsutsagn:** Den kvantemekaniske beskrivelsen kan bare gi sannsynligheten for å finne en partikkel på et bestemt sted.
- **Uskarpetsprinsipp:** Naturen legger fundamentale begrensninger på den presisjon som enkelte fysiske størrelser kan måles med.
- **Annihilasjon og skapelse:** Enhver partikkel kan tilintetgjøres eller skapes.

Kvantemekanikken var nødvendig fordi en rekke eksperimentelle resultater var totalt uforenlige med klassisk fysikk. De første tegn kom ved slutten av det nittende århundre, og skapte en krise i fysikken.

Det hadde riktignok tidligere vært sett fenomener som ikke er mulig å forklare klassisk. Linjespektrene er et godt eksempel. Alt i 1752 observerte Thomas Melvill den karakteristiske natriumlinjen, og med Fraunhofers målinger i 1814 av de mørke linjene i solspektret startet spektroskopien for alvor. Balmers¹ enkle

¹Johann Jacob Balmer (1825–98), sveitsisk fysiker, var lærer ved en pikeskole i Basel. Han hadde studert matematikk, og hans to doktorgrader var „Om sykloider” og „Profeten Ezekiels tempelvisjon, anskuelig fremstilt og arkitektonisk forklart”.

empiriske formel fra 1885 for bølgelengdene λ_n i lyset fra en atomær hydrogengass som det går strøm igjennom²,

$$\lambda_n = 3.6456 \cdot 10^{-7} \text{ m} \frac{n^2}{n^2 - 4}, \quad n = 3, 4, 5, 6. \quad (1.1)$$

gjorde mangelen på forklaring enda mer påtrengende.

Det er likevel forskjell på å ikke ha en forklaring på et fenomen, og det at en klassisk beregning av et fenomen gir resultater som ikke stemmer med observasjonene. Det var dette siste som skapte krisen.

Jeg skal kort oppsummere noen viktige eksperimentelle resultater som på den ene siden viste at klassisk fysikk kom til kort, og som på den annen side ga viktig inspirasjon og bakgrunn for de dristige gjetninger som ledet til kvantemekanikken. Det er ment som bakgrunnstoff, uten fullstendige utledninger.

1.1 Varmekapasiteten for toatomige gasser

I klassisk fysikk er det enkelt å beregne varmekapasiteten C_V for et mol av en gass med toatomige molekyler. Ved temperatur T er et energibeløp $\frac{3}{2}RT$ knyttet til molekylens tyngdepunktbevegelse, et beløp RT til rotasjonsenergi, og et beløp RT til atomenes vibrasjoner, med det temperaturuavhengige resultatet $C_V = \frac{7}{2}R$ for den molare varmekapasiteten, der R er gasskonstanten. Eksperimentene viste atskillig lavere verdier. For oksygen, f. eks., er $C_V = 2.51 R$ ved romtemperatur. Dette viste at klassisk fysikk var utilstrekkelig, og ga ved slutten av det nittende århundre stor frustrasjon, men liten inspirasjon til ny teorigenning.

1.2 Plancks strålingslov

Ethvert legeme sender ut elektromagnetisk stråling. Intensiteten og frekvensfordelingen av strålingen avhenger av legemets temperatur. I figur 1 er vist den spektrale emittans $I(\nu, T)$, definert ved at utsendt energistrøm av stråling med frekvens i intervallet $(\nu, \nu + d\nu)$ er $I(\nu, T)d\nu$, for et svart legeme med temperatur 5900 K. Et svart legeme er et objekt med en fullstendig absorberende overflate. Et hulrom med et lite hull i veggen er et eksempel på et såkalt "svart legeme",

²Når den elektriske utladningen går gjennom hydrogengassen dissosierer H_2 og gir energetisk eksiterte H-atomer. Bølgelengdene (1.1) som sendes ut når H-atomene går over i en tilstand med lavere energi, kalles naturlig nok *Balmer-serien*. Vi kommer naturligvis tilbake til dette i detalj.

fordi hullet absorberer all innfallende stråling.

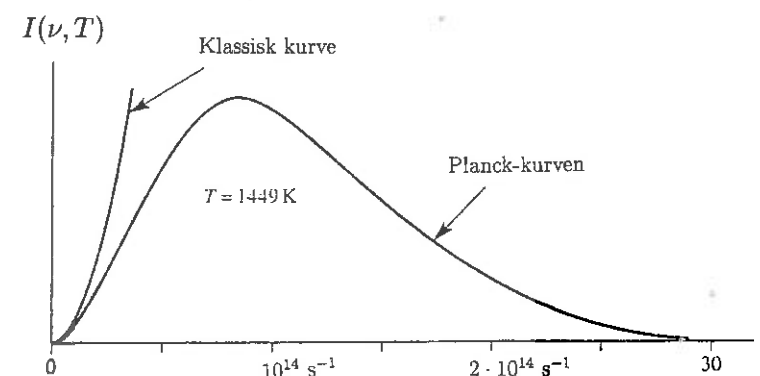


Fig. 1.1 Den eksperimentelle spektrale strålingsemitans for et svart legeme, gitt ved Planck-fordelingen, sammenliknet med det klassiske resultatet.

En klassisk beregning er basert på at hver elektromagnetisk svingemodus er som en harmonisk oscillator, og klassisk statistisk mekanikk gir at en harmonisk oscillator i likevekt ved temperatur T har en midlere energi kT , der k er Boltzmanns konstant. Resultatet blir

$$I(\nu, T) = \frac{2\pi\nu^2}{c^2} kT \quad (\text{klassisk}), \quad (1.2)$$

der c er lysfarten.

Som vi ser av figur 1.1 så stemmer dette ikke på noen måte med den eksperimentelle kurven. Ja, det klassiske resultatet gir til og med at den totale energistrømmen

$$J(T) = \int_0^\infty I(\nu, T) d\nu \quad (1.3)$$

er uendelig! Dette absurde resultatet ble kalt *ultrafiolett katastrofen* fordi divergensen kommer ved korte bølgelengder $\lambda = c/\nu$.

I et teselskap søndag 7. oktober 1900 hjemme hos Max Planck³ hørte Planck av sin gjest professor Rubens om målingene av strålingenergien. Senere på kvelden fant Planck fram til en formel som passet til målingene:

$$I(\nu, T) = \frac{2\pi\nu^2}{c^2} \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}, \quad (1.4)$$

der h er en ny konstant, senere kalt *Plancks konstant*, som måtte være omtrent $6.6 \cdot 10^{-34}$ Js for å få overensstemmelse med dataene.

³Max Karl Ernst Ludwig Planck (1858–1947), tysk fysiker, med termodynamikk som hovedfelt.

Senere fant Planck ut at han kunne *forklare* den empiriske formelen (1.4) ved å *anta* at energien for stråling med frekvens ν var *kvantisert* i enheter $h\nu$, dvs tar bare de diskrete verdiene

$$E = 0, h\nu, 2h\nu, 3h\nu, \dots \quad (1.5)$$

Denne energikvantiseringen var en fullstendig ny idé, det var begynnelsen av kvantefysikken. Planck presenterte dette i et foredrag 14. desember 1900, og denne datoen kan stå som kvanteteoriens fødselsdag.

Paradoksalt nok aksepterte Planck aldri⁴ at det var en revolusjonerende ny idé! For ham var det „en handling i desperasjon”.

1.3 Den fotoelektriske effekt

Den fotoelektriske effekt er at lys som faller inn mot en metalloverflate kan slå løs elektroner. Dersom frekvensen er under en viss grense ν_0 så vil ingen elektroner komme ut, uansett hvor stor intensiteten i lysstråler er. Videre viste eksperimentene (figur 2) at den kinetiske energi E_{kin} av elektronene som blir slått løs er forbausende nok *uavhengig* av intensiteten i det innfallende lyset, men varierer lineært med lysets frekvens:

$$E_{\text{kin}} = h(\nu - \nu_0) \quad \text{for } \nu > \nu_0 \quad (1.6)$$

At elektroner i et metall kan rives løs av det elektriske felt i den innfallende strålen er forståelig utfra klassisk elektromagnetisk teori. Men frekvensavhengigheten kan ikke forstås klassisk, for energien i en elektromagnetisk bølge er proporsjonal med intensiteten og frekvensen kommer ikke inn.

Einstein⁵ forklarte den fotoelektriske effekt ved å anta at lyset besto av diskrete kvant, *fotoner*, med energi

$$E = h\nu \quad (1.7)$$

⁴Likevel fikk Planck Nobelprisen 1918 for „oppdagelsen av elementærkvanta”.

⁵Einstein (1879–1955) var utrolig kreativ og arbeidsom i mars-juni 1905. I tillegg til full jobb som „teknisk ekspert av tredje klasse” i patentbyrået i Bern gjorde han ferdig doktorgraden og publiserte tre fundamentale arbeider i Annalen der Physik: teorien for Brownske bevegelser, den spesielle relativitetsteorien, og teorien for den fotoelektriske effekt.

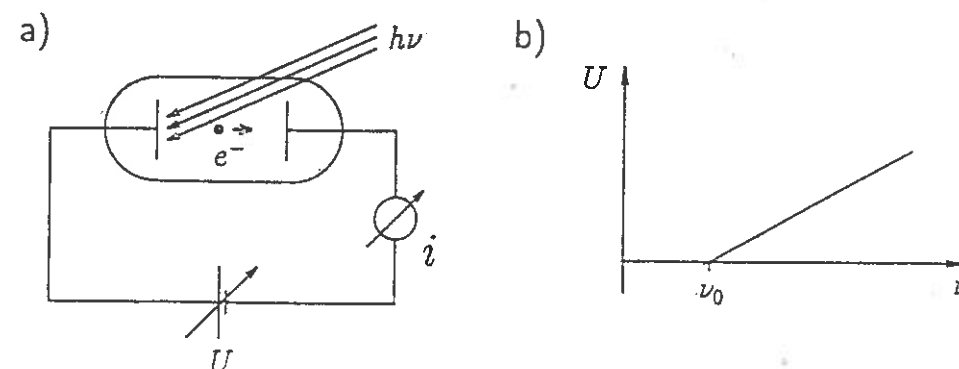


Fig. 1.2 Fotoelektrisk effekt. a) Apparaturen består av et vakuumrør med to elektroder. Lys som faller inn på katoden slår løs elektroner som kan nå anoden og lage en strøm i i kretsen. Ved å se hvilken motspenning U som må legges på for at strømmen skal forsvinne kan en måle elektronenes kinetiske energi $E_{\text{kin}} = eU$. b) Kinetisk energi for løsrevne elektroner i fotoelektrisk effekt, som funksjon av frekvensen ν av det innfallende lys.

bestemt av frekvensen. Når et elektron absorberer et foton øker elektronets energi med $h\nu$. Noe av denne energien, W , (kalt frigjøringsarbeidet) må brukes til å frigjøre elektronet fra metallet, og resten er elektronets kinetiske energi:

$$E_{\text{kin}} = h\nu - W. \quad (1.8)$$

Dette stemmer med eksperimentene⁶: Fotoelektronenes kinetiske energi varierer lineært med frekvensen, med en grensefrekvens gitt ved $\nu_0 = W/h$.

Når intensiteten i lysstråler øker blir det bare et større antall fotoner. Relasjonen (1.7) mellom energi og frekvens blir precis den samme som Planck⁷ måtte postulere, likn. (1.5).

⁶Spesielt gjorde Robert Millikan (1868–1953) nøyaktige målinger og fikk Nobelprisen for dette og for sin presisjonsbestemmelse av elektronladningens størrelse. Millikan ble ledet inn på fysikk fordi han var så god i gresk. I sitt andre år på college ble han spurt av gresklæreren om han kunne overta noe undervisning i fysikk. Prestesønnen Millikan kunne ikke noe særlig fysikk, men læreren hevdet hårdnakket at alle som var dyktige i gresk måtte kunne undervise fysikk!

⁷Ironisk nok aksepterte Planck aldri Einsteins fotonteori. Han skrev i 1913 i et innvalgsforslag til det prøyssiske vitenskapsakademi: „En kan si at det blant de store problemer som moderne fysikk er så rik på, knapt er et eneste som ikke Einstein har tatt stilling til. At han av og til har bommet i sine spekulasjoner, som for eksempel i hypotesen om lyskvant, kan en egentlig ikke holde mot ham, for selv i de mest eksakte vitenskaper er det ikke mulig å introdusere nye idéer uten en gang iblant å måtte løpe en risiko.”

1.4 Compton-effekten

Det eksperimentet som mest direkte viste partikkelnaturen til elektromagnetisk stråling ble utført i 1923 av Compton⁸. Han oppdaget at når stråling med en viss frekvens (i røntgenområdet) ble sendt gjennom et folie, så vil endel av strålingen forandre frekvens med et beløp som avhenger av retningen på den spredte strålingen. Han viste at eksperimentet kunne tolkes som støt mellom to partikler, et elektron i foliet og et innfallende foton med energi $E = h\nu$ og impuls⁹

$$p = h\nu/c, \quad (1.9)$$

ved hjelp av bevarelsesetningene for energi og impuls. (Vi følger standard språkbruk og bruker betegnelsen *impuls* i stedet for bevegelsesmengde eller driv.) Denne Comptoneffekten var nok et bevis for fotonbegrepet, og det som til syvende og sist overbeviste skeptikerne.

I andre eksperimenter (med interferens, diffraksjon, ...) er naturligvis elektromagnetisk stråling *bølger*. Så stråling viser både bølgeegenskaper og partikkel-egenskaper, avhengig av eksperimentet¹⁰.

1.5 Diffraksjon av elektroner

Ikke bare har stråling både bølgeegenskaper og partikkelegenskaper. Det samme har elektroner og andre materielle enheter som vanligvis oppfattes som typiske partikler.

Dersom vi uttrykker bølgelengden λ for fotoner ved fotonimpulsen p får vi

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{hc}{h\nu} = \frac{hc}{E} = \frac{hc}{pc},$$

⁸Arthur Holly Compton (1892–1962), amerikansk fysiker, kjent også for sine undersøkelser av kosmisk stråling. Nobelpris 1927 for Compton-effekten.

⁹Sammenhengen $E = pc$ er den samme som i den relativistiske sammenhengen mellom energi og impuls

$$E = \sqrt{m_0^2 c^4 + p^2 c^2}$$

for en partikkel med hvilemasse $m_0 = 0$. Så fotoner har ingen hvilemasse. Det følger forøvrigt også av den relativistiske sammenheng mellom fart og impuls,

$$p = \frac{m_0 v}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \text{ eller omvendt } v = \frac{pc}{\sqrt{m_0^2 c^2 + p^2}},$$

fordi lysfarten ($v = c$) oppnås bare ved å sette $m_0 = 0$. Sammenhengen $E = pc$ gjelder også for stråling i klassisk elektrodynamikk, men ovenstående relativistiske utledning er enklere.

¹⁰Dersom en synes det er vanskelig, kan en trøste seg med at Einstein skrev da han var 72 år: „Femti års grubling har ikke brakt meg nærmere svaret på hva fotoner virkelig er.”

dvs

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (1.10)$$

Denne relasjonen mellom bølgelengde og impuls (bevegelsesmengde) kalles *de Broglies relasjon* fordi de Broglie postulerte at den var universelt gyldig, *også for partikler*. λ kalles *de Broglie-bølgelengden*.

Det avgjørende eksperimentelle resultatet som bekreftet de Broglies hypotese var diffraksjon av elektroner på en krystall der atomene virket som et gitter. Den eksperimentelle observasjon ble foretatt av C. J. Davisson¹¹ og L. H. Germer som brukte en nikkelkrystall, og like etterpå av G. P. Thomson¹² som spredte elektroner gjennom tynne filmer av gull. De fikk interferensmønster på samme måte som med røntgenstråler (eller som synlig lys ved et optisk gitter), og bølgelengden som en kunne beregne ut fra interferensmønsteret stemte med de Broglies relasjon (1.10). Det vil si at interferensmønsteret kan forklares ved å tilskrive elektronet en bølge

$$\Psi(\vec{r}, t) = A e^{2\pi i(\vec{e} \cdot \vec{r}/\lambda - \nu t)} = A e^{i(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)/\hbar}. \quad (1.11)$$

Her er $\vec{e}$ en enhetsvektor i forplantningsretningen, og A en vilkårlig amplitude. Sammenhengene $h\nu = E$ (1.7) og $\lambda = h/p$ (1.10) er benyttet, og $\hbar \equiv h/2\pi$. Når bølgelengdene er de samme vil interferensmønsteret bli det samme for røntgenstråler og elektronstråler!

Det at elektroner har bølgeegenskaper ledet til konstruksjon av elektronmikroskopet. Det er velkjent at oppløsningsevnen for et optisk mikroskop er begrenset av lysets bølgelengde, av størrelsesorden 500 nm. Det er mulig å gi elektroner så stor energi at de Broglie-bølgelengden deres blir omlag tusen ganger mindre enn dette. Med et elektronmikroskop kan en derfor se detaljer av samme størrelsesorden som atomer og molekyler.

1.6 Bølgepakkebeskrivelse av en fri partikkel

Planbølgen (1.11) strekker seg over hele rommet og kan derfor vanskelig beskrive en partikkel. Skal vi representere et lokalisert objekt må vi bruke en overlaging av planbølger, en bølgepakke:

$$\Psi(\vec{r}, t) = (2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}} \int \varphi(\vec{p}) e^{i(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)/\hbar} d^3 p, \quad (1.12)$$

¹¹Clinton Joseph Davisson (1881–1958). Davissons første målinger allerede i 1921 viste at refleksjonen fra en krystalloverflate varierte sterkt med vinkelen, en effekt Davisson ikke hadde noen forklaring på. Etter kjennskap til de Broglies hypotese om partiklers bølgeegenskaper gjentok han og Germer forsøket i 1927. Nobelpris 1937.

¹²G. P. Thomson, som fikk Nobelprisen (også i 1937) for på denne måten å ha vist at elektroner er bølger, er sønn av J. J. Thomson som fikk Nobelprisen for å ha vist at elektroner er partikler!

der $E = p^2/2m$ for en fri ikke-relativistisk partikkel.

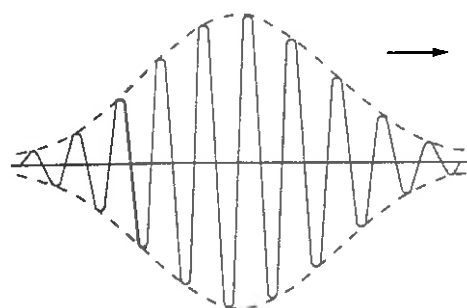


Fig. 1.3 En bølgepakke.

Vektfunksjonen $\varphi(\vec{p})$ bestemmer formen på bølgepakken. Det er ikke nødvendig å ha med den konstante prefaktoren $(2\pi\hbar)^{-3/2}$, men som vi skal se senere er det hensiktsmessig.

Fasehastigheten v_f av planbølgen (1.11) er forholdet mellom sirkelfrekvens $\omega = 2\pi\nu$ og bølgetall $k = p/\hbar$:

$$v_f = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar\omega}{\hbar k} = \frac{E}{p} = \frac{p^2/2m}{p} = \frac{p}{2m} = \frac{v}{2}, \quad (1.13)$$

halve partikkelhastigheten! Uoverensstemmelsen er bare tilsynelatende, fordi en slik bølgepakke beveger seg med *gruppeshastigheten*

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} = \frac{p}{m} = v, \quad (1.14)$$

som det helst burde være.

*

I fysikk er det mer hensiktsmessig å finne *likningene* som fysiske størrelser oppfyller enn å slå seg til ro med spesielle *løsninger*. Likninger er almengyldige, løsningene er særegne for hver ny situasjon. Så la oss forsøke å finne likningen som vår partikkel-bølge tilfredstiller, uansett hva vektfaktoren $\varphi(\vec{p})$ måtte være. Derivasjon av (1.12) med hensyn på tida gir

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= -\frac{i}{\hbar}(2\pi\hbar)^{-3/2} \int \varphi(\vec{p}) \frac{p^2}{2m} e^{i(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et)/\hbar} d^3p \\ &= \frac{i}{\hbar}(2\pi\hbar)^{-3/2} \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \int \varphi(\vec{p}) e^{i(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et)/\hbar} d^3p = \frac{i}{\hbar} \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi, \end{aligned} \quad (1.15)$$

med Laplaceoperatoren¹³

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (1.16)$$

¹³Pierre-Simon de Laplace (1749–1827), fransk matematiker og teoretisk astronom.

Resultatet

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi \quad (1.17)$$

er *Schrödingerlikningen for en fri partikkel*. Bølgefunksjonen Ψ oppfyller nok andre bølgelikninger, men denne er den enkleste. Den er lineær og av første orden i tida, slik at om vi kjenner Ψ til ett tidspunkt, så bestemmer bølgelikningen Ψ til alle andre tidspunkt.

Det er tydelig at vi fikk to gangers derivasjon etter stedskoordinatene på høyre side av (1.17) fordi energien for en fri partikkel er proporsjonal med p^2 . For å tydeliggjøre det kan vi innføre en annen betegnelse på derivasjonsoperatorene ved

$$\hat{p}_x \equiv \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y \equiv \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \quad \text{og} \quad \hat{p}_z \equiv \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}. \quad (1.18)$$

Da kan Schrödingerlikningen (1.17) for en fri partikkel skrives

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2}{2m} \Psi = \frac{\hat{p}^2}{2m} \Psi, \quad (1.19)$$

der

$$\hat{p} \equiv \frac{\hbar}{i} \nabla. \quad (1.20)$$

Vi kommer tilbake til dette uttrykket senere når vi generaliserer til bevegelse av en partikkel i et potensial.

1.7 Tydning av bølgefunksjonen. Dobbeltpaltforsøk

En kunne tenke seg at interferensmønsteret i Davisson-Germer og Thomson-forsøkene var en kollektiv effekt, avhengig av at det var mange elektroner tilstede i strålen. Men senere forsøk har vist at en får bygget opp et interferensmønster selv når intensiteten i strålen er så lav at bare ett elektron er i apparaturen av gangen (eksempelvis ett elektron pr. min, som i et eksperiment av V.A. Fabrikant, L.B. Biberman og N. Sushkin). Så bølgefunksjonen for ett elektron må tydeligvis interferere med seg selv.

På den annen side er det ikke slik at bølgefunksjonen er som en klassisk bølge som interfererer. I så fall ville ett elektron bare gi et blekt bilde av interferensmønsteret. I virkeligheten gir ett elektron bare ett punkt i interferensmønsteret, så partikkelaspektet dominerer ved deteksjonen. Først når mange elektroner har blitt detektert vil en begynne se interferensmønsteret. Figur 4 illustrerer dette i et dobbeltpaltforsøk som er det enklest mulige interferenseksperiment. Det ble

brukt i 1802 av Young¹⁴ for å vise at lys oppfører seg som bølger; nå viser det at elektroner (eller andre partikler) oppfører seg som bølger.



Fig. 1.4 Interferensmønsteret i et dobbeltspaltforsøk kommer fram først når mange elektroner er blitt detektert. Antall registreringer (hvite prikker) øker mot høyre.

Max Born formulerte¹⁵ i 1926 følgende sannsynlighetsinterpretasjon tyding av Ψ :

$$|\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r \text{ er sannsynligheten for å finne partikkelen i volumelementet } d^3r \text{ omkring stedet } \vec{r} \text{ ved tida } t. \quad (1.21)$$

Denne sannsynlighetsinterpretasjonen av bølgefunksjonen muliggjør at både partikelnaturen og bølgenaturen til elektronet kommer fram ved slike eksperimenter: Elektronene detekteres som partikler, og lager mønster som var de bølger. Elektronet reiser som en bølge og kommer fram som en partikkel!

Interpretasjonen oppfyller det selvsagte krav om at sannsynlighetstetthet ρ er ikkenegativ:

$$\rho(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \geq 0. \quad (1.22)$$

Til ethvert tidspunkt er partikkelen et eller annet sted. Når en tar med alle mulige posisjoner må sannsynlighetene addere seg til 1:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r = 1. \quad (1.23)$$

¹⁴Thomas Young (1773–1829) var en imponerende vitenskapsmann. Utdannet som lege fant han årsaken til astigmatisme og utviklet teorien for fargesyn (Young-Helmholtz trefargeteori). Hans interferenseksperimenter demonstrerte lysets bølgenatur, og han foreslo at lys var transversale svingninger for å forklare polarisasjon. Han er kjent for teori for overflatespenning og for Youngs modulus i elastisitetsteori. Om ikke nok med det: Han var egyptolog og var den første som tydet noen av Rosetta-steinens hieroglyfer. (Champollion bygget på dette da han tydet resten.)

¹⁵Max Born (1882–1970), tysk fysiker. Nobelpris 1954 for sannsynlighetsinterpretasjonen. I kvantemekanisk sammenheng er han også kjent for Born-Oppenheimer-approksimasjonen (kap. 7) og Born-approksimasjonen i spredningsteori (kap. 13).

Så dette begrenser hvilke løsninger av Schrödingerlikningen som er fysisk akseptable. Slike funksjoner Ψ der integralet på venstre side av (1.23) er endelig kalles *kvadratisk integrerbare*. For en kvadratisk integrerbar funksjon kan vi ved å multiplisere med en passende konstant alltid sørge for at funksjonen er *normert*, som vil si at (1.23) er oppfylt. Som vi senere skal se sørger Schrödingerlikningen selv for at $\Psi(\vec{r}, t)$ er normert til alle tider dersom den er det ved ett tidspunkt.

I visse tilfeller, som for planbølgen (1.11) er det øyensynlig problemer med normeringen. Den enkleste måten å hjelpe seg på er å normere i et kjempestort hjelpevolum V_0 , og i sluttsvaret la $V_0 \rightarrow \infty$. Vi kommer tilbake til disse spesielle normeringsproblemene i neste kapittel.

1.8 Schrödingerlikningen for partikkel i felt

La oss nå se på en partikkel med masse m som beveger seg i et potensial $V(\vec{r})$, f.eks. et Coulombfelt. Energifunksjonen er da summen av kinetisk og potensiell energi:

$$H(\vec{p}, \vec{r}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}). \quad (1.24)$$

Vi kaller energifunksjonen H fordi dette er også Hamiltonfunksjonen (se Appendix A). Vi reserverer betegnelsen E for *størrelsen* av energien.

For en fri partikkel med energi $H(\vec{p}) = \vec{p}^2/2m$ var Schrödingerlikningen (1.17)

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \Psi = H(\hat{p}) \Psi. \quad (1.25)$$

Det er ikke unaturlig å gjette at med den mer alminnelige energifunksjonen (1.24) gjelder samme likning der nå energifunksjonen også avhenger av stedet:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \Psi. \quad (1.26)$$

En enorm mengde eksperimenter bygger opp under denne gjetningen: Oppførselen av en partikkel i et potensial beskrives av denne likningen. Vi kommer til å løse denne senere for mange viktige potensialer.

Vi noterer oss at løsninger av (1.26) må være *komplekse*, fordi en reell tids-avhengig funksjon Ψ kan ikke oppfylle (1.26). Så bruk av komplekse funksjoner i kvantemekanikk er mer dyptliggende enn i mange andre deler av fysikken der de bare er hensiktsmessige representasjoner av reelle størrelser.

Etter denne innledningen går vi løs på kvantemekanikken. Det er grunn til å understreke at teorien ikke kan *utledes*, på samme vis som Newtons likninger i klassisk mekanikk heller ikke kan utledes. Teorien er i likhet med alle fundamentale naturvitenskapelige teorier basert på grunnlikninger som forskere, ledet

av eksperimentelle kjennsgjæringer, har funnet fram til ved dristige og briljante gjetninger.

Kvantemekanikken kan formuleres på flere ulike måter. Disse er matematisk forskjellige, men ekvivalente i den forstand at de gir samme prediksjoner for fysiske størrelser. Vi starter med grunnprinsippene for kvantemekanikk beskrevet i rom og tid, også kalt bølgemekanikk. Selv om endel begreper (som ortogonalitet og fullstendighet) er mer naturlig knyttet til den generelle formulering, så tror jeg det er best å begynne med kvantemekanikken i posisjonsrommet. Det gir den mest håndgripelige framstillingen, og da bruker en verktøyet differensiallikninger som allerede er velkjent i klassisk fysikk. Den mer generelle formulering av kvantemekanikken tar vi fatt på i kapittel 6.

Oppgaver

1. Bruk Plancks strålingslov (1.4) til å vise at den totale energistrømmen er gitt ved Stefan-Boltzmanns lov

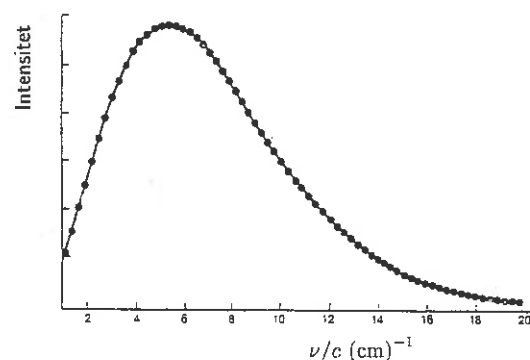
$$J = \sigma T^4,$$

$$\text{der } \sigma = (2\pi^5/15)k^4h^{-3}c^{-2} = 5.67 \cdot 10^{-8} \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-4}.$$

2. Vis at dersom størrelsen på energikvantet settes lik null, dvs $h \rightarrow 0$, så vil Plancks formel (1.4) gå over i det klassiske resultatet (1.2).
3. Vis at maksimum av strålingsfordelingen (1.4) tilsvarer en temperaturavhengig frekvens

$$\nu_m = 2.82kT/h.$$

Figuren nedenfor viser frekvensfordelingen av strålingen som strømmer inn fra verdensrommet (den kosmiske bakgrunnstråling), målt 1989 fra Cosmic Background Explorer-satelitten. (Abscissen er invers bølgelengde ν/c .) Anslå temperaturen som dette tilsvarer.



4. Hvor mange fotoner sendes ut per sekund av en 100 W natriumlampe som gir gult lys med bølgelengde 589 nm? (Forutsett at 50% av energien går til lys.) Hvor mange vil treffe øyet til en observatør som står 5 km borte, når pupill diameteren er 5 mm?
5. Hvor kort må bølgelengden være for at en elektromagnetisk stråle skal frigjøre elektroner fra nikkel, der frigjøringsarbeidet er 4.6 eV?
6. Hva er de Broglie-bølgelengden for et elektron med kinetisk energi 20 keV, en typisk energi for elektroner i et fargefjernesynsrør?

Kapittel 2

FUNDAMENTALE PRINSIPPER

2.1 Grunnprinsippene

Enhver fundamental fysisk teori må funderes på visse grunnleggende hypoteser. For kvantemekanikken i posisjonsrommet vil vi basere oss på fire grunnprinsipper.

Postulat A. Til enhver observerbar størrelse F svarer i kvantemekanikken en lineær operator $\hat{F}$. Til en observerbar størrelse som i klassisk mekanikk har formen $F(q_1, q_2, \dots, q_f, p_1, p_2, \dots, p_f)$ svarer operatoren $\hat{F} = F(\hat{q}_1, \hat{q}_2, \dots, \hat{p}_1, \hat{p}_2, \dots)$, der operatorene for impuls- og posisjons-koordinatene er

$$\hat{p}_n = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_n} \quad \text{og} \quad \hat{q}_n = q_n.$$

Rekkefølgen av disse operatorene må være slik at operatoren $\hat{F}$ er hermitesk.

Her er q_n en generalisert koordinat og p_n den tilhørende generaliserte impuls (se Appendix A for definisjoner). For de fleste systemer som vi skal studere kan q_n tas som en kartesisk koordinat og p_n den tilsvarende impuls $m\dot{q}_n$.

Det finnes kvantemekaniske operatorer som ikke kan konstrueres ut fra et klassisk uttrykk for den fysiske størrelsen. *Spinn* er det viktigste eksemplet. Vi studerer spinn i kap. 8.

Hva det betyr at en operator er hermitesk blir forklart i neste avsnitt.

Postulat B. Tilstanden for et system er fullstendig beskrevet ved en bølgefunksjon Ψ . Denne er en funksjon av systemets uavhengige koordinater q_n og tida, og adlyder

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

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

Hamiltonoperatoren $\hat{H}$ er den kvantemekaniske operator som er tilordnet systemets klassiske Hamiltonfunksjon¹ H . For svært mange systemer, men ikke alltid, er Hamiltonfunksjonen lik systems energifunksjon. Appendix A inneholder en oppsummering av hvorledes Hamiltonfunksjonen finnes for et generelt klassisk system. Men la oss ikke gjøre dette mer komplisert enn det er. Helt til vi skal behandle systemer i magnetfelt kan vi sette Hamiltonfunksjonen lik energien som funksjon av stedsvariable og impulsvariable.

Bølgelikningen

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi \quad (2.1)$$

kalles *den tidsavhengige Schrödinger-likningen*, eller rett og slett Schrödinger-likningen².

Postulat C. Forventningsverdien for en observerbar størrelse F er gitt ved

$$\langle F \rangle = \int \Psi^* \hat{F} \Psi d\tau, \quad (2.2)$$

der Ψ^* er den komplekskonjugerte av Ψ , og $d\tau = dq_1 \cdot dq_2 \cdots dq_f$. Integralet er et bestemt integral over variasjonsområdene for koordinatene q_i .

Forventningsverdien av en størrelse er middelverdien av måleresultatene av størrelsen F ved et stort antall uavhengige målinger.

Som eksempel kan vi ta en partikkel i tre dimensjoner, og la den observerbare størrelsen være partikkelposisjonen, dvs $F = \vec{r}$. Postulat C gir

$$\langle \vec{r} \rangle = \iiint \vec{r} |\Psi(\vec{r})|^2 d^3r, \quad (2.3)$$

som er presis hva Borns sannsynlighetsinterpretasjon (1.21) av $|\Psi|^2$ som posisjonell sannsynlighetstetthet tilsier. Og skal $|\Psi|^2$ være en sannsynlighetstetthet må den være *normert*,

$$\iiint |\Psi(\vec{r})|^2 d^3r = 1. \quad (2.4)$$

¹William Rowan Hamilton (1805–1865) var et vidunderbarn: Han leste engelsk tre år gammel, ved fire begynte han med gresk, latin og hebraisk, ved ti sanskrit og arabisk. 14 år gammel begynte han med matematikk og fysikk som rekreasjon. Som 22 år gammel student ble han utnevnt til professor i astronomi i Dublin foran mange kjente astronomer. Hamilton hadde ikke søkt!

²Østerrikeren Erwin Schrödinger (1887–1961) fikk Nobelprisen i 1933. Han var en kvantemekanisk kjetter som hele livet angrep sannsynlighetsinterpretasjonen av bølgefunksjonen, og sa at hvis den ble stående så angret han på at han i det hele tatt hadde hatt noe med kvanteteorien å gjøre!

Han hadde godt følge av Einstein som også angrep sannsynlighetsinterpretasjonen. „Gud kaster ikke terninger!“, sa Einstein.

Det integreres over hele rommet. Normeringen uttrykker at partikkelen må være et eller annet sted.

Postulat D. De eneste mulige verdier som en måling av en observerbar størrelse F kan gi er en av egenverdiene f_n av operatoren $\hat{F}$.

Umiddelbart etter målingen av F er systemet i en egentilstand for $\hat{F}$ som svarer til den målte egenverdien f_n .

Egenverdiene f_n , med tilhørende egenfunksjoner φ_n , er løsninger av likningen

$$\hat{F}\varphi = f\varphi, \quad f = \text{konstant}. \quad (2.5)$$

Som vi skal se nedenfor er der en sammenheng mellom postulatene C og D.

2.2 Hermiteske operatorer

Kravet i Postulat A om at operatorene som svarer til observerbare størrelser må være hermiteske bunner i at måleresultater må være *reelle*. Enhver forventningsverdi må derfor oppfylle

$$\langle F \rangle = \langle F \rangle^*. \quad (2.6)$$

Innsetting fra postulat C gir

$$\int \Psi^* \hat{F} \Psi d\tau = \int \Psi (\hat{F} \Psi)^* d\tau. \quad (2.7)$$

En operator $\hat{F}$ som oppfyller dette for *enhver* normerbar funksjon Ψ kalles *hermitisk*³.

En tilsynelatende mer generell definisjon av en hermitesk operator er at

$$\int \Psi_1^* \hat{F} \Psi_2 d\tau = \int \Psi_2 (\hat{F} \Psi_1)^* d\tau. \quad (2.8)$$

for alle funksjoner Ψ_1 og Ψ_2 . Integralene er bestemte integraler som går over hele rommet. I virkeligheten er (2.7) og (2.8) ekvivalente. Det vises lett ved å beregne forventningsverdien av F med $\Psi = \Psi_1 + \Psi_2 e^{i\alpha}$, der α er reell. Det gir

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

³Etter den franske matematiker Charles Hermite (1822–1902), som bl.a. viste at e er et transcendent tall. I neste kapittel møter vi navnet hans igjen i Hermite-polynomene. (Uttal „hermitesk“ som „hermitsk“.)

De to første leddene er reelle når $\hat{F}$ oppfyller (2.7), og derfor blir $\langle F \rangle$ reell for alle α hvis og bare hvis de to siste leddene er komplekskonjugerte av hverandre, og dette er precis kravet (2.8).

En hermiteske operator kalles også for en *selvadjungert* operator. Denne språkbruken skyldes at for en gitt operator $\hat{F}$ kan en definere den *adjungerte* operatoren $\hat{F}^\dagger$ ved at

$$\int \Psi_1^* \hat{F}^\dagger \Psi_2 d\tau = \int \Psi_2 (\hat{F} \Psi_1)^* d\tau \quad (2.9)$$

for vilkårlige funksjoner Ψ_1 og Ψ_2 . Kravet (2.8) er at $\hat{F}^\dagger = \hat{F}$, operatoren lik sin adjungerte, altså selvadjungert. Det er lett å vise at den adjungerte til et produkt av to operatører er gitt ved

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger \quad (2.10)$$

ved å bruke definisjonen (2.9), også med $B\Psi_1$ og $A^\dagger\Psi_2$ som en av funksjonene:

$$\int \Psi_1^* (AB)^\dagger \Psi_2 d\tau = \int (AB\Psi_1)^* \Psi_2 d\tau = \int (B\Psi_1)^* A^\dagger \Psi_2 d\tau = \int \Psi_1^* B^\dagger A^\dagger \Psi_2 d\tau.$$

Vi får mer bruk for adjungerte operatører i den generelle formulering av kvantemekanikken.

La oss kontrollere at operatorene som svarer til viktige fysiske størrelser er hermiteske.

Eksempel 1: Impulskoordinaten p_x , med tilsvarende operator

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

Vi har ved en delvis integrasjon

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi_2 dx = \frac{\hbar}{i} [\Psi_1^* \Psi_2]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_2 \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi_1^*}{\partial x} dx. \quad (2.11)$$

Det første leddet er null for en kvadratisk integrerbar funksjon fordi Ψ må gå mot null for $x \rightarrow \pm\infty$. Og da $-(\hbar/i)\partial/\partial x = \hat{p}_x^*$ så får vi

$$\int \Psi_1^* \hat{p}_x \Psi_2 dx = \int \Psi_2 (\hat{p}_x \Psi_1)^* dx.$$

Dersom det er flere posisjonsvariable enn x er det bare å integrere over de øvrige variable for å være i overensstemmelse med definisjonen (2.8). $\hat{p}_x$ er altså hermitesk.

Eksempel 2: En funksjon av posisjonen, f.eks. den potensielle energi $V(\vec{r})$ for en partikkel. I dette tilfellet er det trivielt at kravet (2.8) er oppfylt:

$$\int \Psi_1^* V(\vec{r}) \Psi_2 d\tau = \int \Psi_2 V(\vec{r}) \Psi_1^* d\tau.$$

Rekkefølgen av kvantemekaniske operatører er viktig. For eksempel er i alminnelighet $x\hat{p}_x \neq \hat{p}_x x$. Det ser en enkelt fordi

$$x\hat{p}_x F(x) = x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial F}{\partial x}, \quad \text{mens} \quad \hat{p}_x x F(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} (xF) = \frac{\hbar}{i} \left(F + x \frac{\partial F}{\partial x} \right).$$

for en vilkårlig funksjon $F(x)$. Derav følger at

$$(x\hat{p}_x - \hat{p}_x x) F = i\hbar F.$$

Det viser at uansett hvilken funksjon F som operatoren $x\hat{p}_x - \hat{p}_x x$ virker på, har denne operatoren samme virkning som multiplikasjon med konstanten $i\hbar$. Vi har altså *operator-identiteten*:

$$x\hat{p}_x - \hat{p}_x x = i\hbar. \quad (2.12)$$

Vi benytter anledningen til å innføre to viktige begreper. Dersom det er likegyldig i hvilken rekkefølge vi anvender to operatører $\mathcal{O}_1$ og $\mathcal{O}_2$ sier vi at operatorene *kommuterer*. Eksemplet viser at x og $\hat{p}_x$ ikke kommuterer. Kombinasjonen

$$\mathcal{O}_1 \mathcal{O}_2 - \mathcal{O}_2 \mathcal{O}_1 \equiv [\mathcal{O}_1, \mathcal{O}_2] \quad (2.13)$$

kalles *kommutatoren* av de to operatorene, og skrives som vist på høyre side. Kommutator-relasjonen (2.12),

$$[x, \hat{p}_x] = i\hbar, \quad (2.14)$$

er en uhyre sentral relasjon i kvantemekanikken, som vi skal se senere. Det er klart at x kommuterer med $\hat{p}_y$, f.eks., og mer generelt har vi

$$[\hat{q}_k, \hat{p}_l] = i\hbar \delta_{kl}, \quad (2.15)$$

der

$$\delta_{kl} = \begin{cases} 1 & \text{dersom } k = l \\ 0 & \text{dersom } k \neq l \end{cases} \quad (2.16)$$

er et *Kronecker-delta*⁴.

Hva skal vi gjøre hvis vi har en klassisk størrelse, f.eks. $x p_x$, der den tilhørende kvantemekaniske operator som en umiddelbart skriver ned, i dette tilfellet $x\hat{p}_x$, ikke er hermitesk? Det er ikke vanskelig å finne en veg ut av problemet, fordi en kan skrive den klassiske funksjonen på mange ekvivalente måter, f.eks. er $x p_x$, $p_x x$, og $\frac{1}{2}(x p_x + p_x x)$ samme klassiske funksjon. Men de tilsvarende operatorene er ulike! Og $\frac{1}{2}(x\hat{p}_x + \hat{p}_x x)$ er en akseptabel operator fordi den er hermitesk (Oppgave 1). Det er likevel ingen *entydig* oppskrift på hvorledes en skal danne en hermitesk operator ut fra et klassisk uttrykk. Oppgave 2 eksemplifiserer dette. I praksis er dette uproblematisk.

⁴Leopold Kronecker (1823–1891), tysk matematiker. Han ønsket å aritmetisere så meget som mulig, og sa: „De naturlige tall har Gud skapt, resten er menneskeverk.”

2.3 Stasjonære tilstander

Når Hamiltonfunksjonen – og dermed Hamiltonoperatoren – ikke inneholder tida eksplisitt, kan den tidsavhengige Schrödingerlikningen

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(\vec{r}, t) \quad (2.17)$$

separeres ved å sette

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) T(t). \quad (2.18)$$

Innsetting i (2.17) og divisjon med Ψ gir

$$i\hbar \frac{dT(t)/dt}{T(t)} = \frac{\hat{H}\psi(\vec{r})}{\psi(\vec{r})}. \quad (2.19)$$

Venstre side avhenger bare av t , høyre side bare av $\vec{r}$. Da må begge sider være en konstant, som vi kaller E . Det gir to likninger, en for $T(t)$ og en for $\psi(\vec{r})$. Løsningen av

$$i\hbar \frac{dT(t)/dt}{T(t)} = E$$

er

$$T(t) = \text{konstant } e^{-iEt/\hbar}.$$

Den andre likningen,

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}), \quad (2.20)$$

kaller vi *Schrödingers tidsuavhengige likning*.

Løsningene vi har funnet, av formen

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) e^{-iEt/\hbar}, \quad (2.21)$$

kalles *stasjonære tilstander*, fordi sannsynlighetstettheten er tidsuavhengig, og fordi forventningsverdien for alle variable som ikke avhenger eksplisitt av tida er også konstante:

$$\langle F \rangle = \int \Psi^*(\vec{r}, t) \hat{F} \Psi(\vec{r}, t) d^3r = \int \psi^*(\vec{r}) \hat{F}(\vec{r}, \vec{p}) \psi(\vec{r}) d^3r = \text{uavhengig av } t.$$

At tilstanden er stasjonær betyr *ikke* at partiklene er ubevegelige. Men f.eks. deres midlere kinetiske energi er den samme hele tiden.

Den tidsuavhengige Schrödingerlikningen $\hat{H}\psi = E\psi$ er en egenverdilikning, og en av kvantemekanikkens hovedoppgaver er å løse denne. For én partikkel med masse m i et potensial $V(\vec{r})$ lyder den eksplisitt

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(\vec{r})\psi = E\psi(\vec{r}). \quad (2.22)$$

Med flere partikler tilstede blir det en differensiallikning i flere variable. Men den tidsavhengige faktoren $e^{-iEt/\hbar}$ for stasjonære tilstander har samme form uansett hvor komplisert systemet er.

Egenverdien er kalt E fordi i de aller fleste tilfellene er energien representert ved Hamiltonoperatoren. I såfall er altså energien skarpt bestemt i en tilstand med en slik enkel tidsavhengighet. De ulike egenverdiene en finner gir energispektret, og hvis dette er diskret, fås *energikvantisering*, med energinivåene E_1 , E_2 , osv.

Den mest generelle løsning av den tidsavhengige Schrödingerlikningen er en vilkårlig sum av slike stasjonære tilstander:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_n c_n \psi_n(\vec{r}) e^{-iE_n t/\hbar}. \quad (2.23)$$

(Med et kontinuerlig spektrum tilstede må en i tillegg til summen ha et integral over energiene i dette.) At summen (2.23) er en løsning av den tidsavhengige Schrödingerlikningen ser en ved innsetting i (2.17). Når summen involverer flere forskjellige energier er tilstanden ikke stasjonær; $|\Psi|^2$ varierer med tida.

2.4 Egenfunksjoner og egenverdier

2.4.1 Spektret til en operator

Dersom operatoren $\hat{F}$ virker på en funksjon φ vil i alminnelighet resultatet $\hat{F}\varphi$ være en funksjon som er helt ulik φ . Dersom det finnes en akseptabel funksjon φ_n som er slik at $\hat{F}\varphi_n$ er *proporsjonal* med φ_n ,

$$\hat{F}\varphi_n = f_n \varphi_n,$$

der f_n er en tallfaktor, kaller vi φ_n en *egenfunksjon* for operatoren $\hat{F}$, og f_n en *egenverdi*.

Settet av alle egenverdiene kaller vi *spektret* til operatoren. Spektret kan være *diskret*, dvs. bestå av isolerte verdier f_n , $n = 1, 2, \dots$, eller *kontinuerlig*, eller en blanding. Systemene vi ser på senere inneholder eksempler på alle tre typer: Spektret til energioperatoren er diskret for en harmonisk oscillator, kontinuerlig for en fri partikkel, og blandet diskret og kontinuerlig for hydrogenatomet.

Ovenfor er det presisert at egenfunksjonen φ_n må være en *akseptabel* funksjon. For et diskret spektrum betyr det at funksjonen må være kvadratisk integrerbar. Det er nettopp dette kravet som gir de spesielle diskrete egenverdiene. Når $\hat{F}$ har et kontinuerlig spektrum er situasjonen annerledes. Det er ingen isolerte egenverdier, og egenfunksjonene er ikke kvadratisk integrerbare.

Et enkelt og viktig eksempel på en operator som har et kontinuerlig spektrum er operatoren for en impulskomponent, f. eks. $\hat{p}_x$. Egenverdilikningen er da

$$\hat{p}_x \varphi = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \varphi = f \varphi.$$

Vi ser umiddelbart at

$$\varphi_f(x) = \text{konstant} \cdot e^{ifx/\hbar} \quad (2.24)$$

er en egenfunksjon som svarer til egenverdien f . Egenverdien f må være reell for ellers divergerer φ_f når x går mot $-\infty$ eller når x går mot $+\infty$. Da $|\varphi|^2$ er konstant er ikke disse egenfunksjonene kvadratisk integrerbare. I punkt 2.3.4 kommer vi tilbake til normeringsproblemet i det kontinuerlige spektret.

2.4.2 Egenverdier som måleresultater

Dersom $\hat{F}$ er hermitesk er egenverdiene reelle. Det følger av

$$\int \Psi_n^* \hat{F} \Psi_n d\tau = f_n \int \Psi_n^* \Psi_n d\tau,$$

fordi begge integralene er reelle.

La for enkelthets skyld Ψ_n være normert, slik at ovenstående blir

$$f_n = \int \Psi_n^* \hat{F} \Psi_n d\tau. \quad (2.25)$$

Etter postulat C vil det si f_n er forventningsverdien $\langle F \rangle$ (middelverdien) av størrelsen F i tilstanden Ψ_n . Og spredningen omkring denne middelverdien (variansen) er lik *null*. Bevis:

$$\langle (F - \langle F \rangle)^2 \rangle = \langle (F - f_n)^2 \rangle = \int \Psi_n^* (\hat{F} - f_n)^2 \Psi_n d\tau = 0,$$

da $(\hat{F} - f_n)\Psi_n = (f_n - f_n)\Psi_n = 0$. Av dette slutter vi at egenfunksjonen Ψ_n representerer en tilstand der den fysiske størrelsen F med sikkerhet har verdien f_n .

2.4.3 Ortogonalitet

For en hermitesk operator er egenfunksjoner som tilhører *ulike* egenverdier ortogonale:

$$f_m \neq f_n \Rightarrow \int \Psi_m^* \Psi_n d\tau = 0. \quad (2.26)$$

Bevis: Når $\hat{F}$ er hermitesk gjelder (2.8):

$$\int \Psi_n^* \hat{F} \Psi_m d\tau = \int \Psi_m (\hat{F} \Psi_n)^* d\tau.$$

Da $\hat{F} \Psi_n = f_n \Psi_n$ og $\hat{F} \Psi_m = f_m \Psi_m$ med reelle egenverdier fås

$$(f_m - f_n) \int \Psi_n^* \Psi_m d\tau = 0,$$

som impliserer (2.26).

Integralet på høyre side av (2.26) kaller vi *skalarproduktet* av funksjonene Ψ_m og Ψ_n . Denne språkbruken er hentet fra vektoranalysen, og det samme er bruken av betegnelsen *ortogonalitet*. Som vi skal se senere er denne språkbruken mer naturlig i den generelle formulering av kvantemekanikken der tilstandene er vektorer i et uendelig-dimensjonalt komplekst vektorrom. En alternativ betegnelse for skalarprodukt er *indreprodukt*. En hendig notasjon⁵ er

$$\int \Psi_m^* \Psi_n d\tau \equiv \langle \Psi_m, \Psi_n \rangle. \quad (2.27)$$

Det medfører at

$$\langle \Psi_n, \Psi_m \rangle = \langle \Psi_m, \Psi_n \rangle^*. \quad (2.28)$$

I denne notasjonen tar definisjonen (2.8) av en hermitesk operator $\hat{F}$ den oversiktlige formen

$$\langle \Psi_n, \hat{F} \Psi_m \rangle = \langle \hat{F} \Psi_n, \Psi_m \rangle. \quad (2.29)$$

Dersom det til en bestemt egenverdi f hører flere uavhengige⁶ egenfunksjoner $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_g$, så sier vi at denne egenverdien er *degenerert* med degenerasjonsgrad g . Ved degenerasjon er ovenstående bevis for ortogonalitet av egenfunksjonene ikke anvendbart, og det er ingen grunn til at egenfunksjonene er ortogonale. Men vi skal vise at vi kan *velge* spesielle lineærkombinasjoner $\tilde{\Psi}_1, \dots, \tilde{\Psi}_g$ av de degenererte egenfunksjonene som er ortogonale og normerte:

$$\langle \tilde{\Psi}_n, \tilde{\Psi}_m \rangle = \int \tilde{\Psi}_n^* \tilde{\Psi}_m d\tau = \delta_{nm} \equiv \begin{cases} 0 & \text{om } n \neq m \text{ (ortogonalitet)} \\ 1 & \text{om } n = m \text{ (normering).} \end{cases} \quad (2.30)$$

Fremgangsmåten er en skrittvis prosedyre som kalles *Gram-Schmidts ortogonalisering*. Anta at de opprinnelige egenfunksjonene Ψ_i er normerte. (Det er bare å multiplisere hver av dem med en passende konstant dersom det ikke er tilfellet.) Vi starter med å *velge* $\tilde{\Psi}_1 = \Psi_1$. Den nye $\tilde{\Psi}_2$ danner vi som en lineærkombinasjon av Ψ_1 og Ψ_2 :

$$\tilde{\Psi}_2 = a_1 \Psi_1 + a_2 \Psi_2,$$

og velger konstantene a_1 og a_2 slik at ortogonalitet på $\tilde{\Psi}_1$ og normering er oppfylt. Ortogonalitet krever

$$0 = \int \tilde{\Psi}_1^* \tilde{\Psi}_2 d\tau = a_1 + a_2 \int \Psi_1^* \Psi_2 d\tau, \quad (2.31)$$

⁵I denne notasjonen er

$$\langle c\Psi, \Phi \rangle = c^* \langle \Psi, \Phi \rangle, \quad \text{og} \quad \langle \Psi, c\Phi \rangle = c \langle \Psi, \Phi \rangle$$

der c er et tall. I matematisk litteratur brukes ofte motsatt konvensjon, indreproduktet er lineært i venstre faktor.

⁶Det vil si at ingen av egenfunksjonene kan skrives som en lineærkombinasjon av de øvrige. Mer formelt vil det si at $\sum_n c_n \Psi_n \equiv 0$ bare hvis alle $c_n = 0$.

og normering krever

$$\begin{aligned} 1 &= \int \tilde{\Psi}_2^* \tilde{\Psi}_2 d\tau = \int (a_1^* \Psi_1^* + a_2^* \Psi_2^*) (a_1 \Psi_1 + a_2 \Psi_2) d\tau \\ &= |a_1|^2 + |a_2|^2 + a_1^* a_2 \int \Psi_1^* \Psi_2 d\tau + a_1 a_2^* \int \Psi_1 \Psi_2^* d\tau \\ &= |a_2|^2 - |a_1|^2, \end{aligned} \quad (2.32)$$

der (2.31) er brukt i siste likhet. (2.31) og (2.32) er to likninger for bestemmelse av konstantene a_1 og a_2 . Vi får

$$|a_2| = \left(1 - \left| \int \Psi_1^* \Psi_2 d\tau \right|^2 \right)^{-\frac{1}{2}}.$$

Hermed er a_2 bestemt på en vilkårlig fasefaktor⁷ nær. Likning (2.31) bestemmer så a_1 .

Slik fortsettes det. I neste omgang setter en

$$\tilde{\Psi}_3 = b_1 \Psi_1 + b_2 \Psi_2 + b_3 \Psi_3,$$

og bestemmer de ukjente koeffisientene b_1 , b_2 og b_3 ved å kreve at $\tilde{\Psi}_3$ er normert og ortogonal til både $\tilde{\Psi}_1$ og $\tilde{\Psi}_2$. Osv.

Konklusjonen er at med degenerasjon er ikke egenfunksjonene automatisk ortogonale, men vi kan velge egenfunksjoner som danner et normert ortogonal-system:

$$\int \Psi_n^* \Psi_{n'} d\tau = \delta_{nn'}. \quad (2.33)$$

2.4.4 Normering i det kontinuerlige spektret

Vi bemerket tidligere at egenfunksjonene (2.24) for $\hat{p}_x$,

$$\Psi_f(x) = \text{konstant} \cdot e^{ifx/\hbar}, \quad (2.34)$$

tilhører et kontinuerlig spektrum og er ikke kvadratisk integrerbare. Vi kan derfor ikke normere til 1 som for egenfunksjonene i et diskret spektrum, men vi kan normere slik at

$$\int \Psi_{f'}^* \Psi_f d\tau = \delta(f - f'), \quad (2.35)$$

⁷En fasefaktor er et komplekst tall av modul 1, dvs av formen $e^{i\delta}$ med reell δ . Også i andre sammenhenger vil tilstedeværelsen av en slik konstant fasefaktor være uten fysisk betydning.

der Diracs deltafunksjon $\delta(x)$ erstatter Kronecker-deltaet $\delta_{nn'}$ i (2.33). Egenskapene til deltafunksjonen er beskrevet i Appendix B.

For at egenfunksjonene (2.34) skal være normert i henhold til (2.35) må vi velge konstanten passende:

$$\Psi_f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ifx/\hbar}. \quad (2.36)$$

La oss kontrollere at dette er korrekt:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{f'}^* \Psi_f dx = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(f-f')x/\hbar} dx = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(f-f')y} dy = \delta(f - f'),$$

ved hjelp av $x = \hbar y$ og integralframstillingen for deltafunksjonen (Appendix B).

La oss se på en annen operator med kontinuerlig spektrum, nemlig posisjonsoperatoren x . Operasjonen er multiplikasjon med x , og egenverdilikningen er

$$x\Psi_f(x) = f\Psi_f(x),$$

med løsning

$$\Psi_f(x) = \delta(x - f), \quad (f \text{ reell}), \quad (2.37)$$

multiplisert med en vilkårlig konstant. Konstantvalget i (2.37) gir egenfunksjoner som oppfyller normeringen (2.35) fordi

$$\int \Psi_{f'}^*(x) \Psi_f dx = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - f') \delta(x - f) dx = \delta(f - f'), \quad (2.38)$$

etter regnereglene for deltafunksjonen (Appendix B).

I begge disse tilfellene ser vi at deltafunksjon-normeringen (2.35) for et kontinuerlig spektrum er mulig og naturlig.

2.5 Utvikling etter egenfunksjoner

2.5.1 Fullstendighet

I kvantemekanikken antar en at egenfunksjonene for en hermiteske operator danner et fullstendig sett. Med det mener vi at en tilstrekkelig regulær og kvadratisk integrerbar funksjon $g(\vec{r})$ kan representeres som en overlaging av egenfunksjoner⁸:

$$g(\vec{r}) = \sum_n c_n \Psi_n(\vec{r}), \quad (2.39)$$

⁸For enkelhets skyld bruker vi en notasjon med $\vec{r}$ som variabel, men det går helt på samme vis med et annet sett generaliserte koordinater.

idet vi først ser på tilfellet at funksjonene Ψ_n danner et ortonormert sett med et diskret spektrum. Utviklingskoeffisienten c_m finnes ved multiplikasjon av begge sider av (2.39) med Ψ_m^* og integrasjon over $\vec{r}$:

$$\int \Psi_m^*(\vec{r}) g(\vec{r}) d^3r = \sum_n c_n \int \Psi_m^* \Psi_n d^3r = \sum_n c_n \delta_{mn} = c_m.$$

Vi har benyttet ortonormeringen (2.33). Resultatet⁹

$$c_m = \int \Psi_m^*(\vec{r}') g(\vec{r}') d^3r'. \quad (2.40)$$

setter vi tilbake i utviklingen (2.39), og får

$$g(\vec{r}) = \int g(\vec{r}') \left[\sum_n \Psi_n^*(\vec{r}') \Psi_n(\vec{r}) \right] d^3r'. \quad (2.41)$$

Dette kan bare være oppfylt for enhver funksjon $g(\vec{r})$ dersom

$$\sum_n \Psi_n^*(\vec{r}') \Psi_n(\vec{r}) = \delta(\vec{r}' - \vec{r}), \quad (2.42)$$

en tredimensjonal deltafunksjon (se Appendix B). Denne egenskapen til et egenfunksjonsett kalles *fullstendighetsrelasjonen*.

Et slikt fullstendig sett av funksjoner danner matematisk sett et *Hilbertrom*. Et Hilbertrom er et lineært vektorrom der det er definert et skalarprodukt (indre produkt). Og et lineært vektorrom er et sett elementer ϕ_i som er slik at summen av to elementer, og også en konstant multiplisert med et element, tilhører vektorrommet. Betegnelsen vektorrom betyr ikke at elementene nødvendigvis er vektorer, de kan, som her, være funksjoner. Som vanlig i fysikk-litteraturen reserverer vi betegnelsen Hilbertrom for den mer generelle formuleringen av kvantemekanikken (kap. 6). I den foreliggende sammenheng bruker vi bare betegnelsen fullstendige funksjonsett.

For egenfunksjoner med et kontinuerlig spektrum må summen i (2.39) erstattes med et integral:

$$g(\vec{r}) = \int c(f) \Psi_f(\vec{r}) df. \quad (2.43)$$

For å bestemme overlagringskoeffisientene $c(f)$ multipliserer vi (2.43) med $\Psi_{f'}^*(\vec{r})$ og integrerer over rommet:

$$\int \Psi_{f'}^*(\vec{r}) g(\vec{r}) d^3r = \int df c(f) \int \Psi_{f'}^*(\vec{r}) \Psi_f(\vec{r}) d^3r = \int df c(f) \delta(f - f') = c(f').$$

⁹Den integrasjonsvariable er gitt nytt navn $\vec{r}'$ for ikke å skape forvirring med den fri variable $\vec{r}$ i (2.39).

Vi har brukt normeringen (2.35). Innsetting av resultatet

$$c(f) = \int \Psi_f^*(\vec{r}') g(\vec{r}') d^3r' \quad (2.44)$$

i utviklingen (2.43) gir

$$g(\vec{r}) = \int g(\vec{r}') \left[\int df \Psi_f^*(\vec{r}') \Psi_f(\vec{r}) \right] d^3r'.$$

Dette er oppfylt for enhver $g(\vec{r})$ hvis og bare hvis hakeparentesen er en deltafunksjon

$$\int \Psi_f^*(\vec{r}') \Psi_f(\vec{r}) df = \delta(\vec{r}' - \vec{r}), \quad (2.45)$$

som er fullstendighetsrelasjonen for et kontinuerlig spektrum.

Dersom egenfunksjonene ikke er funksjoner i det tredimensjonale rom, men avhenger av de generaliserte koordinater q_i , vil fullstendighetsrelasjonen måtte modifiseres tilsvarende, med høyre side lik $\prod_i \delta(q'_i - q_i)$.

Det er lett å se at egenfunksjonsettet (2.36) for $\hat{p}_x$ oppfyller den éndimensjonale varianten av denne fullstendighetsrelasjonen, fordi

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{-ifx'/\hbar} e^{ifx/\hbar} df = \delta(x - x'),$$

og at egenfunksjonene (2.38) for posisjonsoperatoren x også gjør det.

2.5.2 Den fysiske tydning av utviklingskoeffisientene

La oss se på en fysisk størrelse F for et system som er i en kvantemekanisk tilstand beskrevet ved bølgefunksjonen Ψ , og la oss for enkelhets skyld anta at den tilsvarende operator $\hat{F}$ har et diskret spektrum f_n med tilsvarende egenfunksjoner Ψ_n . Vi kan da utvikle systemets bølgefunksjon i dette egenfunksjonsettet:

$$\Psi = \sum_n c_n \Psi_n. \quad (2.46)$$

Tilstanden er bestemt av koeffisientene c_n og vi kan beregne forventningsverdien av F uttrykt ved disse koeffisientene:

$$\begin{aligned} \langle F \rangle &= \int \Psi^* \hat{F} \Psi d\tau = \int \left(\sum_m c_m^* \Psi_m^* \right) \hat{F} \left(\sum_n c_n \Psi_n \right) d\tau \\ &= \sum_n \sum_m c_m^* c_n f_n \int \Psi_m^* \Psi_n d\tau = \sum_n \sum_m c_m^* c_n f_n \delta_{mn}. \end{aligned} \quad (2.47)$$

Pga egenskapene til Kroneckerdeltaet (2.16) fås bare bidrag fra $m = n$:

$$\langle F \rangle = \sum_n |c_n|^2 f_n. \quad (2.48)$$

På den annen side har vi etter postulat D at dersom vi forsøker å måle størrelsen F så kan resultatet bare være en av egenverdiene f_n . Dersom vi kaller sannsynligheten for å få resultatet f_n for P_n , så kan middelverdien også uttrykkes som

$$\langle F \rangle = \sum_n P_n f_n. \quad (2.49)$$

Sammenlikning mellom (2.48) og (2.49) gir $P_n = |c_n|^2$. Den fysiske tolkning av utviklingskoeffisientene er altså følgende:

Sannsynligheten for at en måling av F gir resultatet f_n , når systemtilstanden er Ψ , er $|c_n|^2 = |\int \Psi_n^ \Psi d\tau|^2$.*

(2.50)

Dersom tilstanden Ψ er en *egentilstand* for $\hat{F}$ blir sannsynligheten naturligvis lik 1 for å finne den tilhørende egenverdi.

Siden $|c_n|^2$ er en sannsynlighet, kalles koeffisienten c_n ofte for en *sannsynlighetsamplitude*. Og vi må ha at $\sum_n |c_n|^2 = 1$ (se oppgave).

For et kontinuerlig spektrum går det på liknende vis. Med utviklingen (2.43) av bølgefunksjonen uttrykker vi forventningsverdien som

$$\begin{aligned} \langle F \rangle &= \int \left(\int c^*(f) \Psi_f^* df \right) \hat{F} \left(\int c(f') \Psi_{f'} df' \right) d\tau \\ &= \int df \int df' c^*(f) c(f') f' \int \Psi_f^* \Psi_{f'} d\tau \\ &= \int df \int df' c^*(f) c(f') f' \delta(f' - f) = \int df |c(f)|^2 f. \end{aligned} \quad (2.51)$$

Det viser at $|c(f)|^2$ er sannsynlighetstettheten for verdien f :

Sannsynligheten for å måle F i intervallet $(f, f + df)$ når systemtilstanden er Ψ er $|c(f)|^2 df = \left| \int \Psi_f^ \Psi d\tau \right|^2 df$.*

(2.52)

Eksempel: For spesialtilfellet der $\hat{F}$ er posisjonsoperatoren x , med egenfunksjoner $\delta(x - f)$, blir (i én dimensjon)

$$c(f) = \int \delta(x - f) \Psi(x) dx = \Psi(f),$$

og (2.52) sier at $|\Psi(f)|^2 df$ er sannsynligheten for å finne x i intervallet $(f, f + df)$. Men det er jo det vi måtte få i lys av interpretasjonen av $|\Psi(x)|^2$ som sannsynlighetstetthet for posisjon!

*

Tilslutt er det bare å bemerke at i det mest generelle tilfellet med et *blandet* diskret og kontinuerlig spektrum må funksjoner utvikles som følger:

$$g(\vec{r}) = \sum_n c_n \Psi_n(\vec{r}) + \int c(f) \Psi_f(\vec{r}) df. \quad (2.53)$$

Fullstendighetsrelasjonen får nå bidrag både fra det diskrete og det kontinuerlige spektret, og interpretasjonen av utviklingskoeffisientene c_n og $c(f)$ er som før.

2.6 Bevarelse av sannsynlighet

Sannsynlighetsinterpretasjonen for én partikkel gir

$$\rho(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2$$

(2.54)

som den romlige sannsynlighetstettheten. Den er normert til 1, dvs

$$\int \rho(\vec{r}, t) d^3r = 1, \quad (2.55)$$

integrert over hele rommet. Men Ψ og dermed også ρ endrer seg med tida. Skal det være konsistens i beskrivelsen må endringene, diktert av Schrödingerlikningen, være slike at normeringen er opprettholdt til alle tider - sannsynligheten må være bevart.

2.6.1 Sannsynlighetsstrømtettheten

Dersom sannsynligheten øker i et endelig volum V må det være knyttet til at det er en strøm av sannsynlighet *inn* gjennom overflata F av volumet med strømtetthet $\vec{j}$:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho d^3r = - \int_F \vec{j} \cdot d\vec{f}, \quad (2.56)$$

Via Gauss sats, $\int_V \nabla \cdot \vec{j} d^3r = \int_F \vec{j} \cdot d\vec{f}$ kan vi omskrive bevarelsessetningen (2.56) til

$$\int_V \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} \right] d^3r = 0.$$

Dette må gjelde for ethvert volum V , og det er bare tilfelle om integranden forsvinner:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = 0 \quad (2.57)$$

En slik bevarelsessetning, enten på integralform som (2.56) eller på differensiell form som (2.57), gjelder for ladning i elektrodynamikk, for masse i hydrodynamikk, osv. Foreløpig gjenstår det å vise at den gjelder for sannsynlighetstettheten i kvantemekanikk. La oss se, dvs la oss vise at Schrödingerlikningen for en partikkel i et felt $V(\vec{r}, t)$,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t), \quad (2.58)$$

sørger for bevarelse av sannsynlighet.

Endringen av sannsynlighetstettheten (2.54), $\rho = \Psi^* \Psi$, med tida er

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^* \Psi) = \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi^* \nabla^2 \Psi - \Psi \nabla^2 \Psi^*), \quad (2.59)$$

fordi leddene med $V(\vec{r}, t)$ faller bort når vi setter inn de tidsderiverte fra (2.58). Da $fg'' - f''g = (fg' - f'g)'$ kan vi skrive resultatet som

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \nabla \cdot (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) = -\nabla \cdot \mathcal{R}e \left(\Psi^* \frac{\hbar}{im} \nabla \Psi \right). \quad (2.60)$$

Her står $\mathcal{R}e$ for realdelen, og vi har brukt at $f + f^* = 2 \mathcal{R}e f$. Vi har altså funnet

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{j},$$

med

$$\vec{j} = \mathcal{R}e \left(\Psi^* \frac{\hbar}{im} \nabla \Psi \right), \quad (2.61)$$

eller utskrevet:

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*). \quad (2.62)$$

$\vec{j}$ er sannsynlighetsstrømtettheten. Operatoren i (2.61), $(\hbar/im)\nabla = \hat{p}/m$, er en hastighetsoperator, og uttrykket gir assosiasjoner til det klassiske uttrykk for strømtetthet, som er lik tetthet multiplisert med hastighet.

Når Ψ og dermed $\vec{j}$ er null uendelig langt borte, vil integrasjon over hele rommet i (2.56) gi null på høyre side. Normeringen endrer seg altså ikke under tidsutviklingen.

For stasjonære tilstander der Ψ er en reell funksjon, multiplisert med en posisjonsuavhengig faktor $e^{-iE_n t/\hbar}$, ser vi at strømtettheten blir null. For situasjoner med en dynamisk utvikling, f.eks. ved spredningseksperimenter, er det derfor nødvendig med komplekse bølgefunksjoner.

2.6.2 Strømtetthet i magnetfelt*

Med et magnetfelt $\vec{B}$ tilstede er Schrödingerlikningen for en partikkel med ladning q :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{(\hat{p} - q\vec{A})^2}{2m} \Psi + V(\vec{r}, t) \Psi, \quad (2.63)$$

der $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$. (Se Appendix A.) Et eventuelt elektrostatiske potensial kan være inneholdt i $V(\vec{r}, t)$. Uttrykket for strømtettheten finner vi på samme måte som ovenfor:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{1}{2i\hbar m} \left[\Psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q\vec{A} \right)^2 \Psi - \Psi \left(-\frac{\hbar}{i} \nabla - q\vec{A} \right)^2 \Psi^* \right] \quad (2.64)$$

Da

$$\begin{aligned} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q\vec{A} \right)^2 \Psi &= \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q\vec{A} \right) \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q\vec{A} \right) \Psi \\ &= -\hbar^2 \nabla^2 \Psi - q \frac{\hbar}{i} \Psi \nabla \cdot \vec{A} - 2q \frac{\hbar}{i} \vec{A} \cdot \nabla \Psi + q^2 \vec{A}^2 \Psi, \end{aligned} \quad (2.65)$$

så får vi

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= \frac{1}{2i\hbar m} \left[-\hbar^2 (\Psi^* \nabla^2 \Psi - \Psi \nabla^2 \Psi^*) - 2 \frac{\hbar}{i} q \nabla \cdot (\vec{A} \Psi^* \Psi) \right] \\ &= -\frac{1}{2m} \nabla \cdot \left[\Psi^* \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi - \Psi \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi^* - 2 \Psi^* q \vec{A} \Psi \right] = -\frac{1}{2m} \nabla \cdot \left[\Psi^* \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi - \Psi^* q \vec{A} \Psi \right] + \text{k. k.} \\ &= -\frac{1}{m} \mathcal{R}e \nabla \cdot \left[\Psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q\vec{A} \right) \Psi \right], \end{aligned} \quad (2.66)$$

der k.k. står for den komplekse konjugerte. Vi får altså bevarelsessetningen $\partial \rho / \partial t + \nabla \cdot \vec{j} = 0$, med

$$\vec{j} = \frac{1}{m} \mathcal{R}e \left[\Psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q\vec{A} \right) \Psi \right] = \frac{1}{m} \mathcal{R}e \left[\Psi^* (\hat{p} - q\vec{A}) \Psi \right] \quad (2.67)$$

Uttrykket (2.67) er den naturlige generalisering av (2.61). For med magnetfelt tilstede er, som vist i Appendix A, partikkelhastigheten klassisk lik

$$\vec{v} = \frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{\vec{p} - q\vec{A}}{m}.$$

Tilleggsleddet i uttrykket for $\vec{j}$ pga magnetfeltet kan også skrives $-q\vec{A}\rho/m$.

Oppgaver

1. Vis at operatoren $\frac{1}{2}(\hat{p}_x x + x \hat{p}_x)$ er hermitesk.
2. I en halvleder der materialegenskapene varierer med stedet beskrives i såkalt effektivmasse teori et elektron som en partikkel med stedsavhengig masse $m(\vec{r})$. I denne beskrivelsen kan en tenke seg å representere elektronets kinetiske energi $T = p_x^2/2m(x)$ (her i én dimensjon) ved en kvantemekaniske operator på flere alternative måter, bl.a. følgende tre:

$$\hat{T}_1 = \hat{p}_x \frac{1}{2m(x)} \hat{p}_x, \quad \hat{T}_2 = \frac{1}{4m(x)} \hat{p}_x^2 + \hat{p}_x^2 \frac{1}{4m(x)} \quad \text{og} \quad \hat{T}_3 = \frac{1}{\sqrt{2m(x)}} \hat{p}_x^2 \frac{1}{\sqrt{2m(x)}}.$$

Er $\hat{T}_1$, $\hat{T}_2$ og $\hat{T}_3$ alle hermiteske?

3. Vis at $\langle F^2 \rangle \geq 0$ hvis $\hat{F}$ er en hermitesk operator.
4. Beregn kommutatoren $[\frac{1}{x}, \hat{p}_x]$.
5. Beregn kommutatoren $[x^2 \hat{p}_y^2, y \hat{p}_x]$.
6. Beregn kommutatorene $k_n = [x^n, \hat{p}_x]$ og $K_n = [x, \hat{p}_x^n]$ (heltallig $n \geq 1$) på to ulike måter: (a) Ved å bruke $\hat{p}_x = -i\hbar \partial/\partial x$, og (b) ved å uttrykke k_n og K_n ved hhv k_{n-1} og K_{n-1} og benytte at $k_1 = K_1 = i\hbar$.
7. La $\hat{A}$ og $\hat{B}$ være to kvantemekaniske (hermiteske) operatorer som ikke kommuterer. Vis at operatoren $\hat{C} = i(\hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B})$ er hermitesk.
8. La $\Psi_1(\vec{r}, t)$ og $\Psi_2(\vec{r}, t)$ være to tidsavhengige løsninger av Schrödingerlikningen. Vis at skalarproduktet av Ψ_1 og Ψ_2 er tidsuavhengig.
9. Vis at forventningsverdien av impulsen $\vec{p}$ i en stasjonær tilstand er null.
10. Anta at for et visst system er alle stasjonære tilstander $\psi_n(\vec{r})$, E_n kjente. Finn et uttrykk for bølgefunksjonen $\Psi(\vec{r}, t)$ ved et vilkårlig tidspunkt når startverdien $\Psi(\vec{r}, 0)$ er kjent.
11. Vis at operatoren $\hat{T}(x_0) = e^{i\hat{p}_x x_0/\hbar}$ flytter en funksjon et stykke x_0 :

$$\hat{T}(x_0) \psi(x) = \psi(x + x_0).$$

Operatoren $\hat{T}$ er altså en *translasjonsoperator*. (Tips: Taylorrekkeutvikling av eksponensialfunksjonen.)

12. Vis at $\sum_n |c_n|^2 = 1$, der c_n er sannsynlighetsamplitude nr. n (se (2.50)).

Kapittel 3

ENDIMENSJONALE
POTENSIALER

I dette kapitlet skal vi løse endel enkle kvantemekaniske problemer i én dimensjon. Det vil gi nyttige illustrasjoner av ikke-klassiske effekter, og til og med resultater anvendbare i den tredimensjonale verden.

3.1 Generelle egenskaper ved bølgefunksjonen

Vi skal i dette kapitlet hovedsakelig se på stasjonære løsninger, dvs løsninger av den tidsuavhengige Schrödingerlikningen

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi(x) \quad (3.1)$$

for en partikkel med masse m i et éndimensjonalt potensial $V(x)$. (3.1) er en differensiallikning med bare reelle størrelser, så vi kan begrense oss til reelle løsninger.

3.1.1 Grensebetingelser

Dersom vi omskriver (3.1) til

$$\frac{\psi''(x)}{\psi(x)} = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E], \quad (3.2)$$

så ser vi at når potensialet er overalt endelig så må ψ''/ψ være endelig. Det krever at både bølgefunksjonen og dens deriverte er kontinuerlige overalt. For dersom den deriverte er diskontinuerlig i $x = a$ (en „knekk” i bølgefunksjonen), så er ψ' diskontinuerlig, og ψ'' får derfor et singulært bidrag proporsjonalt med $\delta(x - a)$

mens høyre side av (3.2) ikke er singulær. Altså er konklusjonen:

$$\text{Der hvor } |V(x)| < \infty \text{ er } \psi(x) \text{ og } \psi'(x) \text{ kontinuerlige.} \quad (3.3)$$

Skulle derimot potensialet ha en deltafunksjon-singularitet, så må naturligvis den deriverte ψ' være diskontinuerlig (Men bølgefunksjonen selv er kontinuerlig!). Vi skal se et eksempel ganske snart.

3.1.2 Bølgefunksjonens krumning

Men vi kan få mer kvalitativ informasjon ut av Schrödingerlikningen. Siden bølgefunksjonens krumning er bestemt av $\psi''(x)$ så viser (3.2) at krumningen avhenger om $V(x) > E$ eller $V(x) < E$. Siden energien i henhold til *klassisk* mekanikk alltid er lik eller større enn den potensielle energien $V(x)$, så vil et område der $V(x) > E$ være et klassisk utilgjengelig område. I et slikt område vil bølgefunksjonen krumme seg bort fra x -aksen (hvis $\psi(x) > 0$ så er $\psi'' > 0$, bølgefunksjonen krummer seg oppover; hvis $\psi(x) < 0$ så er $\psi'' < 0$, bølgefunksjonen krummer seg nedover). Omvendt vil bølgefunksjonen krumme seg mot aksene i et klassisk tillatt område der $V(x) < E$. Fig. 3.1 viser situasjonen.

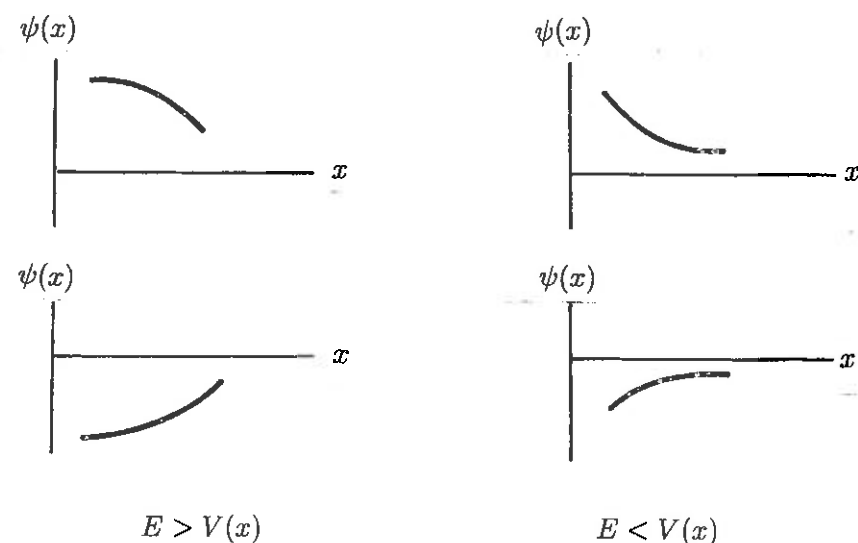


Fig. 3.1 Eksempler på krumning av bølgefunksjonen i et klassisk tillatt område (venstre figur), og i et klassisk utilgjengelig område (høyre figur).

3.1.3 Ingen degenerasjon i én dimensjon

En energieigenverdi E kalles *degenert* dersom det er minst to egenfunksjoner som svarer til denne egenverdien. For tredimensjonale problemer er dette ofte tilfelle, som vi skal se i senere kapitler.

Men i én romdimensjon kan det ikke svare mer enn én kvadratisk integrerbar egenfunksjon $\psi(x)$ til hver egenverdi. La oss bevise det.

Anta at det er *to* ulike kvadratisk integrerbare egenfunksjoner, $\psi_1(x)$ og $\psi_2(x)$, som gir samme energiverdi E . La oss beregne

$$(\hbar^2/2m)(\psi_1'\psi_2 - \psi_1\psi_2')' = (\hbar^2/2m)[\psi_1''\psi_2 - \psi_1\psi_2''] = (V-E)\psi_1\psi_2 - \psi_1(V-E)\psi_2 = 0,$$

vha den tidsuavhengige Schrödingerlikning (3.1). Dette medfører at

$$\psi_1'(x)\psi_2(x) - \psi_1(x)\psi_2'(x) = \text{konstant} \quad (3.4)$$

Verdien på konstanten finner vi ved å sette $x = \infty$. Fordi $\psi_1(\infty) = \psi_2(\infty) = 0$ for kvadratisk integrerbare egenfunksjoner er konstanten lik null. Resultatet kan vi da skrive slik:

$$\frac{\psi_1'}{\psi_1} - \frac{\psi_2'}{\psi_2} = 0,$$

som integrert gir

$$\ln \psi_1(x) - \ln \psi_2(x) = C = \text{konstant}.$$

Dvs at

$$\psi_1(x) = C\psi_2(x),$$

slik at $\psi_1(x)$ er et multiplum av $\psi_2(x)$. Altså holder ikke hypotesen om at funksjonene er ulike! Konklusjonen er derfor at *det er ikke degenerasjon av bundne tilstander i én dimensjon*. Dette vil i praksis si i det diskrete energieigenverdispektret.

I det kontinuerlige spektret gjelder *ikke* dette. Et enkelt eksempel er en fri partikkel, der både $\sin(kx)$ og $\cos(kx)$ gir samme energi $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$. Teoremet gjelder heller ikke for et system som er éndimensjonalt ved at det lever på en sirkel e.l.l. Det sviker i dette tilfellet fordi argumentet som ga at konstanten i (3.4) måtte være null ikke er gyldig i slike tilfeller.

La oss nå løse den stasjonære Schrödingerlikningen

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

for noen konkrete problemer.

3.2 En uendelig dyp potensialbrønn

Det enkleste potensial som gir bundne tilstander er

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{for } 0 < x < L \\ \infty & \text{ellers} \end{cases} \quad (3.5)$$

som beskriver bevegelse mellom to harde vegger. Schrödingerlikningen for intervallet $0 < x < L$ (inni brønnen) er

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi, \quad (3.6)$$

med generell løsning

$$\psi(x) = C_1 \sin(x\sqrt{2mE/\hbar^2}) + C_2 \cos(x\sqrt{2mE/\hbar^2}), \quad (3.7)$$

der C_1 og C_2 er konstanter.

Partikkelen kan ikke være utenfor intervallet $(0, L)$ pga de harde veggene, og derfor er $\psi = 0$ utenfor dette intervallet. Kontinuitet av bølgefunksjonen¹ krever derfor at $\psi(0) = \psi(L) = 0$. For den indre løsningen (3.7) medfører $\psi(0) = 0$ at konstanten $C_2 = 0$. Det gjenværende kravet $\psi(L) = 0$ er oppfylt hvis

$$L\sqrt{2mE/\hbar^2} = n\pi,$$

der n er et positivt heltall: $n = 1, 2, \dots$ ($n = 0$ gir ingen bølgefunksjon i det hele tatt, og negative heltall gir samme bølgefunksjoner som positive heltall.) Dette bestemmer de tillatte energiverdier:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2 \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.8)$$

Ved å sette inn for E blir bølgefunksjonene $\psi_n(x) = C_1 \sin(n\pi x/L)$. Normeringen krever

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = |C_1|^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx = |C_1|^2 \frac{L}{2},$$

som tilfredsstilles av $C_1 = \sqrt{2/L}$. Altså:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right). \quad (3.9)$$

¹Grensebetingelsen at ψ , men ikke ψ' , er kontinuerlig i dette tilfellet med uendelig sterkt potensial følger ikke av (3.3). En overbeviser seg enklest om at det er korrekt ved å ta $V(x) = V_0 < \infty$ for x utenfor intervallet $(0, L)$, og la $V_0 \rightarrow \infty$ tilslutt (se neste avsnitt).

Disse bølgefunksjonene krummer seg overalt mot x -aksen, i overensstemmelse med hva vi fant i forrige avsnitt.

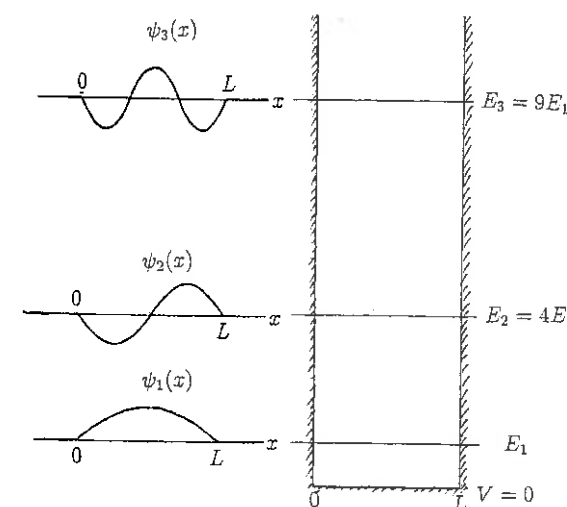


Fig. 3.2 Egenfunksjoner og egenverdier for partikkel mellom harde vegger. ψ_2 og ψ_3 er her vist med en annen og like god normering som i (3.9).

Vi ser at partikkelens energi må være minst E_1 . En slik endelig *nullpunktsenergi* er en ny kvantemekanisk effekt. For en klassisk partikkel er det ikke noen minimumsverdi for den kinetiske energi. Vi skal senere se at eksistensen av nullpunktsenergien kan forstås ut fra Heisenbergs uskarphetsprinsipp.

Vi ser videre av figuren at egenfunksjonene enten er *symmetriske* eller *antisymmetriske* omkring potensialets symmetripunkt, midten av intervallet $(0, L)$. Det følger av (3.9):

$$\psi_n(L-x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(n\pi - \frac{n\pi x}{L}\right) = -\sqrt{\frac{2}{L}} \cos n\pi \sin \frac{n\pi x}{L} = (-1)^{n+1} \psi_n(x).$$

Eigenfunksjonene med odde n er symmetriske omkring midten av intervallet, med like n antisymmetriske. Vi sier at egenfunksjonene har henholdsvis like og odde (ulike) *paritet*, og skal se senere at når et potensial er symmetrisk omkring et punkt, så vil egenfunksjonene ha en bestemt paritet mhp dette punktet.

Vi ser også at i *grunntilstanden*, dvs laveste energiegentilstand, er egenfunksjonen ikke-negativ, for nestlaveste tilstand har egenfunksjonen ett nullpunkt, $\psi_3(x)$ har to nullpunkter, osv. Dette er også en generell egenskap ved egenfunksjoner i én dimensjon.

3.3 En endelig potensialbrønn

La oss nå se på et potensial som er mindre ekstremt ved at potensialforskjellen mellom "inne" og "ute" er endelig, ikke uendelig:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{for } |x| \leq l \\ V_0 & \text{for } |x| > l \end{cases} \quad (3.10)$$

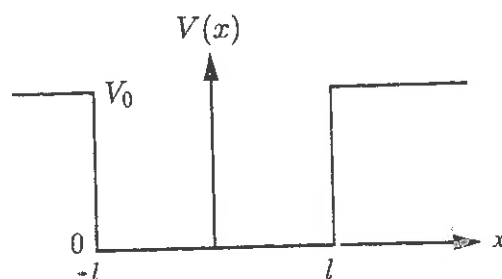


Fig. 3.3 En potensialbrønn.

Dette enkle potensialet er viktig i anvendt fysikk og elektrooptisk teknologi fordi en nå med atomær presisjon kan lage *kvantebrønner*, lagdelte halvledere som består av en tynn plate av ett materiale (f.eks. GaAs) innleiret i et annet materiale (f.eks. $\text{Ga}_x\text{Al}_{1-x}\text{Ga}$). For elektronbevegelse på tvers av platen er der en potensialforskjell V_0 mellom materialene, og de bundne tilstandene for bevegelse i denne retningen er av stor interesse.

Schrödingerlikningen er nå

$$\psi''(x) = 2m\hbar^{-2}(V_0 - E)\psi \quad \text{for } |x| > l \quad (3.11)$$

$$\psi''(x) = -2m\hbar^{-2}E\psi \quad \text{for } |x| \leq l \quad (3.12)$$

Formen på løsningene avhenger av om $E > V_0$ eller $E < V_0$. La oss først anta $E < V_0$. Utenfor brønnen er da løsningene av (3.11) eksponensialfunksjoner:

$$\psi(x) = Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x}, \quad (3.13)$$

der

$$\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar. \quad (3.14)$$

Skal vi ha en kvadratisk integrerbar bølgefunksjon, så kan vi ikke bruke den eksponensialfunksjonen som divergerer når $|x| \rightarrow \infty$. Dvs at løsningen utenfor er

av formen

$$\psi(x) = Ae^{\kappa x} \quad \text{for } x < -l \quad (3.15)$$

$$\psi(x) = Be^{-\kappa x} \quad \text{for } x > l \quad (3.16)$$

Innenfor brønnen er de uavhengige løsningene av (3.12)

$$\psi(x) = C \sin(kx) + D \cos(kx), \quad (3.17)$$

der

$$k = \sqrt{2mE}/\hbar. \quad (3.18)$$

Vi skjøter nå den indre løsningen (3.17) til de ytre løsningene (3.15–3.16) ved å benytte at både ψ og ψ' er kontinuerlige.

I punktet $x = -l$ krever kontinuitet av ψ og ψ' :

$$Ae^{-\kappa l} = -C \sin(kl) + D \cos(kl) \quad (3.19)$$

$$A\kappa e^{-\kappa l} = k[C \cos(kl) + D \sin(kl)], \quad (3.20)$$

som løst mhp C og D gir

$$C = Ae^{-\kappa l} \cos(kl) \left(\frac{\kappa}{k} - \tan(kl) \right) \quad (3.21)$$

$$D = Ae^{-\kappa l} \cos(kl) \left(\frac{\kappa}{k} \tan(kl) + 1 \right). \quad (3.22)$$

Skjøtingen av ψ og ψ' ved $x = l$ gir så

$$C \sin(kl) + D \cos(kl) = Be^{-\kappa l} \quad (3.23)$$

$$k[C \cos(kl) - D \sin(kl)] = -B\kappa e^{-\kappa l}. \quad (3.24)$$

Eliminasjon av B gir

$$C \left(\frac{\kappa}{k} \tan(kl) + 1 \right) + D \left(\frac{\kappa}{k} - \tan(kl) \right) = 0, \quad (3.25)$$

og innsetting for C og D fra (3.21–3.22) gir så

$$2 \left(\frac{\kappa}{k} \tan(kl) + 1 \right) \left(-\tan(kl) + \frac{\kappa}{k} \right) = 0. \quad (3.26)$$

Vi ser at det er to ulike tilfeller, avhengig av hvilken faktor i (3.26) som er null. Legg merke til når første faktor er null, så viser (3.22) at $D = 0$, og når andre faktor i (3.26) er null, så viser (3.21) at $C = 0$. Altså

$$\tan(kl) = \frac{\kappa}{k} \quad \text{Symmetriske egenfunksjoner:} \quad \psi(-l \leq x \leq l) \propto \cos kx \quad (3.27)$$

$$\tan(kl) = -\frac{k}{\kappa} \quad \text{Antisymmetriske egenfunksjoner:} \quad \psi(-l \leq x \leq l) \propto \sin kx \quad (3.28)$$

De to likningene mellom κ og k er, vha uttrykkene (3.14) og (3.18), likninger for energien E :

$$\tan(\sqrt{2ml^2\hbar^{-2}E}) = \begin{cases} \sqrt{(V_0 - E)/E} & (\text{symmetriske } \psi) \\ -\sqrt{E/(V_0 - E)} & (\text{antisymmetriske } \psi) \end{cases} \quad (3.29)$$

Spørsmålet er nå: Eksisterer løsninger?

Før vi går videre legger vi merke til at for $V_0 = \infty$ blir høyre side av (3.29) lik ∞ eller 0. Det krever at argumentet av tangens-funksjonen må være et multiplum av $\pi/2$. Det skjer for energiverdiene

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m(2l)^2} n^2 \quad n = 1, 2, \dots,$$

som gjenvinner vårt tidligere resultat (3.8) for et uendelig høyt potensial (da $L = 2l$).

Vi kan ikke løse likningene (3.29) analytisk, men det er lett å få en oversikt ved å studere figur 3.4, der både venstre og høyre side av (3.29) er tegnet som funksjon av den dimensjonsløse energiparameteren $\xi = \sqrt{E/V_0}$. Uttrykt ved ξ i stedet for E tar likning (3.29) formen

$$\tan(\xi \sqrt{2ml^2 V_0 \hbar^{-2}}) = \begin{cases} \frac{\sqrt{1-\xi^2}}{\xi} & (\text{symmetriske } \psi) \\ -\frac{\xi}{\sqrt{1-\xi^2}} & (\text{antisymmetriske } \psi) \end{cases} \quad (3.30)$$

Likningen viser at det er kombinasjonen $l^2 V_0$ av brønnparameterene som bestemmer hvor mange løsninger vi får, og hva de er.

Høyre side av (3.30) er to faste funksjoner av ξ , mens venstre side varierer med størrelsen av potensialbrønnen. Venstre side divergerer for

$$\xi \sqrt{\frac{2ml^2 V_0}{\hbar^2}} = \frac{1}{2}\pi, \frac{3}{2}\pi, \frac{5}{2}\pi, \dots \quad (3.31)$$

Når vi øker $V_0 l^2$ i figur 3.4 vil avstanden mellom divergenspunktene for tangensfunksjonen bli mindre. Vi får derfor flere og flere løsninger (skjæringspunkter)

når $V_0 l^2$ øker.

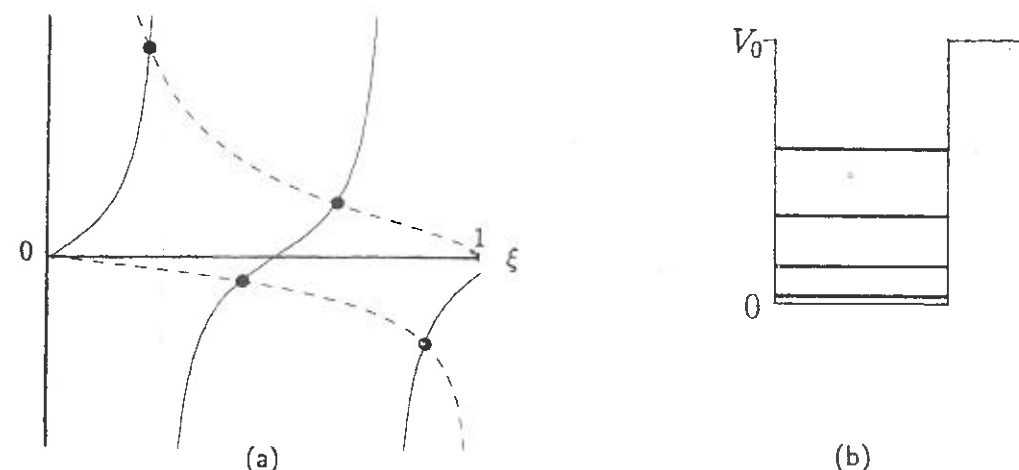


Fig. 3.4 (a) Grafisk løsning av energiverdilikningen (3.30) for bundne tilstander i en potensialbrønn. Abscissen er $\xi = \sqrt{E/V_0}$. Høyre side av (3.30), funksjonene $\sqrt{(1-\xi^2)}/\xi$ og $-\xi/\sqrt{1-\xi^2}$, er stiplede. Venstre side av (3.30), som er vist heltrukket, divergerer for $\xi = (k + \frac{1}{2})\pi\hbar/\sqrt{2ml^2 V_0}$, $k = 0, 1, 2, \dots$. Skjæringspunktene ξ_n mellom stiplede og heltrukne kurver (svarte sirkler) bestemmer energieigenverdiene $E_n = V_0 \xi_n^2$. (b) Energispektret.

Det eksisterer alltid minst én symmetrisk løsning, og når første divergenspunkt av tangensfunksjonen ikke faller inni det relevante intervallet $0 \leq \xi \leq 1$ så får vi bare denne ene løsningen. Det skjer for

$$V_0 l^2 \leq \frac{\pi^2}{4} \frac{\hbar^2}{2m} \quad (3.32)$$

Øker verdien av $V_0 l^2$ får vi så i tillegg en bundet antisymmetrisk egenfunksjon, så nok en symmetrisk løsning, osv. Vi ser at det er en løsning i hvert intervall av lengde $\pi/2$ av tangensfunksjonen. Altså er totalt antall bundne tilstander lik

$$N = 1 + \left[2\sqrt{2ml^2 V_0 \hbar^{-2}}/\pi \right], \quad (3.33)$$

hvor $[x]$ er det største heltall som er mindre enn x .

Dette avklarer situasjonen for energier $E < V_0$. Hva med høyere energier? For $E > V_0$ har Schrödingerlikningen utenfor brønnen,

$$\psi''(x) = -2m\hbar^{-2}(E - V_0)\psi = -K^2\psi \quad \text{for } |x| \geq l \quad (3.34)$$

løsninger som ikke faller eksponensielt av, men oscillerer med konstant amplitude:

$$\psi(x) = a \sin(Kx) + b \cos(Kx), \quad (|x| \geq l), \quad (3.35)$$

løsninger som for en fri partikkel. Disse tilstandene er ikke lokalisert i nærheten av brønnen, de beskriver ikke bundne tilstander. Og det er slike løsninger for alle energier, slik at vi har et kontinuerlig spektrum for $E > V_0$.

Vi har fått betydelig kvantemekanisk erfaring gjennom dette enkle eksemplet. La oss oppsummere noen hovedpunkter:

- Bundne tilstander finnes bare for visse diskrete energiverdier (energikvantisering).
- Egenfunksjonene for bundne tilstander er enten symmetriske eller antisymmetriske omkring potensialets symmetripunkt. Grunntilstanden er symmetrisk.
- En kan få flere bundne tilstander ved å gjøre brønnen bredere, og/eller dypere.
- Det er *alltid* minst en bunden tilstand. Dette er generelt tilfelle for éndimensjonale potensialer som er overalt tiltrekkende, dvs $V(x) \leq V(-\infty) = V(\infty)$ for alle x , og $V(x) < V(\infty)$ over et endelig intervall. I tre dimensjoner er dette ikke tilfelle, og heller ikke i én dimensjon hvis $V(-\infty) \neq V(+\infty)$.
- For bundne tilstander er det alltid en viss sannsynlighet for å finne partikkelen i det klassisk utilgjengelige området utenfor brønnen.
- For energier så høye at en klassisk partikkel ikke ville være bundet i potensialet er energispektret kontinuerlig.

3.4 Deltafunksjon-potensialet

Et ekstremt dypt og ekstremt smalt éndimensjonalt potensial vil kunne approksimeres med en Dirac deltafunksjon:

$$V(x) = -\alpha \delta(x), \quad (3.36)$$

med positiv α . Utenfor potensialet (dvs for $x \neq 0$) har Schrödinger-likningen

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) - \alpha\delta(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (3.37)$$

eksponensielle løsninger for $E < 0$:

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi(0) e^{+\sqrt{-2mE}x/\hbar} & \text{for } x < 0 \\ \psi(0) e^{-\sqrt{-2mE}x/\hbar} & \text{for } x > 0. \end{cases} \quad (3.38)$$

Etter hva vi kom fram til i begynnelsen av dette kapitlet vil et sprang i den deriverte av bølgefunksjonen tilsvare en deltafunksjon i potensialet. For å finne spranget i den deriverte integrerer vi Schrödingerlikningen (3.37) fra $x = -\epsilon$ til $x = +\epsilon$ (med positiv ϵ) og får

$$-\frac{\hbar^2}{2m}[\psi'(+\epsilon) - \psi'(-\epsilon)] - \alpha\psi(0) = E \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \psi(x) dx.$$

For $\epsilon \rightarrow 0$ forsvinner høyre side, og vi får

$$-\frac{\hbar^2}{2m}[\psi'(0+) - \psi'(0-)] = \alpha\psi(0). \quad (3.39)$$

Innsetting fra (3.38) gir en felles faktor $\psi(0)$ og forøvrig

$$\frac{\hbar^2}{2m}2\sqrt{-2mE}/\hbar = \alpha.$$

Dette gir

$$E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}. \quad (3.40)$$

Potensialet har altså én og bare én bunden tilstand uansett potensialets styrke. Og vha (3.38), (3.40) og normering blir bølgefunksjonen

$$\psi(x) = \sqrt{m\alpha/\hbar^2} e^{-m\alpha|x|/\hbar^2}. \quad (3.41)$$

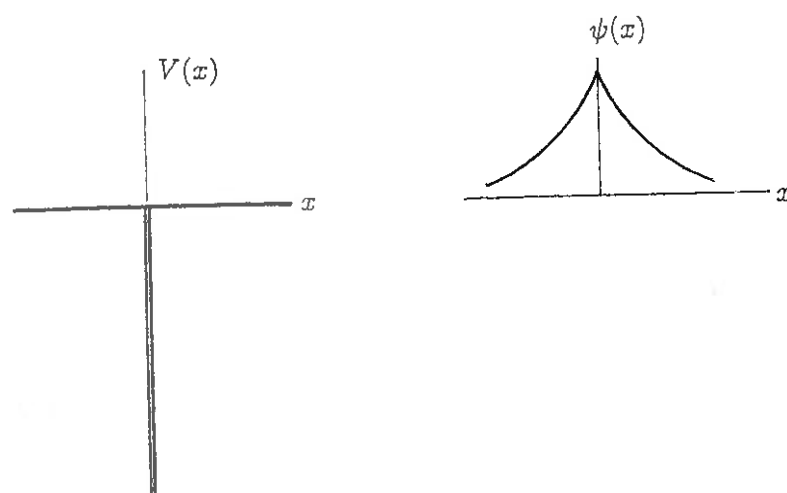


Fig. 3.5 Deltafunksjon-potensialet og den bundne tilstanden.

Dette resultatet kan en også få av resultatene for en endelig potensialbrønn ved en grenseovergang der brønnen blir uendelig smal og uendelig dyp. (Jfr. oppgave.)

For $E \geq 0$ har vi et kontinuerlig spektrum, med bølgefunksjoner som for en fri partikkel, bortsett fra at den deriverte i origo fremdeles må oppfylle (3.39).

3.5 Endimensjonal harmonisk oscillator

En partikkel som trekkes mot en likevektsposisjon av en kraft $(-kq)$ proporsjonal med utsvinget q fra likevektsposisjonen (Hookes lov) er en harmonisk oscillator².

Den klassiske energifunksjonen (Hamiltonfunksjonen) for en slik harmonisk oscillator har et kvadratisk potensial:

$$H(p, q) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2. \quad (3.42)$$

Vi har uttrykt kraftkonstanten $k = m\omega^2$ på denne spesielle måten fordi sirkelfrekvensen av en klassisk svingning er $\omega = \sqrt{k/m}$, og har antatt at likevektsposisjonen er i origo.

Den harmoniske oscillatoren er et av de aller viktigste systemer i fysikken, fordi det i naturen er mengdevis av systemer – bl.a. molekyler, faste stoffer, elektromagnetiske felt – som kan oscillere omkring sine likevektsposisjoner, og som i hvertfall tilnærmet er harmoniske.

Vi løser energieigenverdi-problemet for oscillatoren med en analytisk metode her. I kap. 6 skal vi benytte en annen fremgangsmåte – en algebraisk og enklere metode – for oscillatorproblemet.

3.5.1 Egenverdilikningen

Den tidsuavhengige Schrödingerlikningen $\hat{H}\psi = E\psi$ som svarer til (3.42) er

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dq^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 \psi = E\psi. \quad (3.43)$$

Det vil forenkle videre regning om vi skriver likningen på dimensjonsløs form. Divisjon av (3.43) med $\frac{1}{2}\hbar\omega$, og innføring av

$$\epsilon = \frac{E}{\frac{1}{2}\hbar\omega} \quad (3.44)$$

og

$$x = \frac{q}{\sqrt{\hbar/m\omega}} \quad (3.45)$$

gir

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + (\epsilon - x^2)\psi(x) = 0. \quad (3.46)$$

²Ordet *oscillere* har en interessant etymologi. I vingårdene i det gamle Rom ble små masker av vinguden Bacchus hengt opp i trær for sikre en god høst. En slik maske var en *oscillum*, et lite ansikt, en diminutiv av *os*, ansikt. De hang og svingte i vinden, og i tidens løp gikk *oscillum* over til å bety en svingning, og *oscillare* å svinge.

Den enkleste måten å løse differensiallikningen på er å søke i den matematiske litteraturen for å se om noen allerede har gjort arbeidet. Løsningene er kjente. Men det er instruktivt å arbeide seg gjennom detaljene i løsningen, så det vil vi gjøre.

Vi starter med å undersøke hvorledes bølgefunksjonene forholder seg for store x , der

$$x^{-2} \frac{d^2}{dx^2} \psi = \psi \left(1 - \frac{\epsilon}{x^2}\right) \approx \psi \quad (\text{store } x). \quad (3.47)$$

To gangers derivasjon og to divisjoner med x skal altså essensielt (dvs for store x) reproducere funksjonen. En gangs derivasjon og én divisjon med x reproducerer funksjonen $e^{\pm \frac{1}{2}x^2}$. Derfor er det nærliggende å forsøke slike funksjoner:

$$x^{-2} \frac{d^2}{dx^2} e^{\pm \frac{1}{2}x^2} = e^{\pm \frac{1}{2}x^2} \left(1 \pm \frac{1}{x^2}\right) \approx e^{\pm \frac{1}{2}x^2} \quad (\text{store } x). \quad (3.48)$$

Vi konkluderer med at $\psi(x) \simeq e^{-\frac{1}{2}x^2}$ for store x . Naturligvis er bare minus-tegnet i eksponenten akseptabelt for normerbare funksjoner. (Og i forbifarten ser vi også av (3.47) og (3.48) at for $\epsilon = 1$ er $e^{-\frac{1}{2}x^2}$ en *eksakt* løsning!)

For å temme løsningen spalter vi av denne dominerende asymptotiske oppførsel ved å sette

$$\psi(x) = v(x) e^{-\frac{1}{2}x^2}. \quad (3.49)$$

Ved direkte innsetting i (3.46) finner vi at $v(x)$ må tilfredsstille

$$v'' - 2xv' + (\epsilon - 1)v = 0. \quad (3.50)$$

3.5.2 Energinivåene

Vi finner den ukjente funksjon $v(x)$ som en potensrekke:

$$v(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k. \quad (3.51)$$

Det gir

$$v' = \sum_{k=0}^{\infty} k a_k x^{k-1} \quad v'' = \sum_{k=0}^{\infty} k(k-1) a_k x^{k-2}.$$

De to første leddene bidrar ikke til v'' , så vi øker summasjonsindeksen med 2:

$$v'' = \sum_{k=2}^{\infty} k(k-1) a_k x^{k-2} = \sum_{k=0}^{\infty} (k+2)(k+1) a_{k+2} x^k.$$

Innsetting i (3.50) gir da

$$\sum_{k=0}^{\infty} [(k+2)(k+1) a_{k+2} - (2k+1-\epsilon) a_k] x^k = 0. \quad (3.52)$$

Denne er oppfylt for alle x hvis og bare hvis alle hakeparentesene forsvinner. Dvs

$$a_{k+2} = \frac{2k+1-\epsilon}{(k+1)(k+2)} a_k \quad \text{for } k = 0, 1, 2, \dots \quad (3.53)$$

Ved hjelp av denne rekursjonsformelen kan vi uttrykke alle koeffisientene med like indekser ved a_0 , og alle koeffisienter med odde indekser ved a_1 . Både a_0 og a_1 er fritt valgbare:

$$v(x) = a_0 \left[1 + \frac{1-\epsilon}{2!} x^2 + \frac{(1-\epsilon)(5-\epsilon)}{4!} x^4 + \dots \right] + a_1 \left[x + \frac{3-\epsilon}{3!} x^3 + \frac{(3-\epsilon)(7-\epsilon)}{5!} x^5 + \dots \right]. \quad (3.54)$$

Poenget er nå at for en vilkårlig verdi av ϵ vil disse løsningene divergere sterkt for $|x| \rightarrow \infty$. La oss sannsynliggjøre det. Skål en studere løsningen for store x er det klart at forløpet av koeffisientene for store k er viktig. Fra (3.53) har vi

$$\frac{a_{k+2}}{a_k} \simeq \frac{2}{k}$$

for store k . Dette er akkurat som forholdet mellom koeffisientene i rekkeutviklingen for e^{x^2} :

$$e^{x^2} = 1 + \frac{1}{2!} x^2 + \frac{1}{4!} x^4 + \dots = \sum_{k=0,2,4,\dots} \frac{1}{(\frac{1}{2}k)!} x^k,$$

idet

$$\frac{(\frac{1}{2}k)!}{(\frac{1}{2}(k+2))!} = \frac{1}{\frac{1}{2}k+1} \simeq \frac{2}{k}$$

for store k . Denne konklusjonen ville blitt den samme om e^{x^2} var blitt multiplisert med et polynom; eksponensialfunksjonen dominerer. Den ubehagelige konklusjon er at begge hakeparentesene i (3.54) har for store x en divergens som er dominert av funksjonen e^{x^2} . Det er uakseptabelt, fordi $\psi(x) = v(x)e^{-\frac{1}{2}x^2}$ vil i såfall divergere og derfor ikke være normerbar.

Den eneste måten dette problemet kan unngås på er ved at rekkene bryter av, slik at $v(x)$ er et *polynom* og ikke en potensrekke. Vi ser av (3.53) at det bare kan oppnås dersom ϵ er et odde positivt heltall:

$$\epsilon = 2n + 1; \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.55)$$

Da blir $a_{n+2} = 0$, og dermed $a_{n+4} = a_{n+6} = \dots = 0$. For *like* n blir altså den første hakeparentesen i (3.54) et polynom, men den andre hakeparentesen bryter ikke av. Derfor må vi sette $a_1 = 0$ i dette tilfellet. Omvendt må vi sette $a_0 = 0$ for odde n for å fjerne den rekken som ikke bryter av.

Vi har altså funnet akseptable bølgefunksjoner av formen

$$\psi(x) = (\text{polynom i } x) e^{-\frac{1}{2}x^2},$$

når $\epsilon = 2n + 1$, som vha (3.44) tilsvarer energiverdiene

$$E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.56)$$

Dette er diskrete egenverdier med jevnstore avstander $\hbar \omega$. At energien bare kan økes med beløp $\hbar \omega = h\nu$ synes kjent, for det var dette Planck måtte postulere for strålingsfeltet, likning (1.5). Det er ingen tilfeldighet, for det elektromagnetiske felt er essensielt en overlaging av uavhengige harmoniske svingninger. Mer om dette i kap. 16, der det elektromagnetiske felt kvantiseres.

3.5.3 Hermite-polynomene

For de akseptable verdiene $\epsilon = 2n + 1$ blir likningen for polynomene $v(x)$:

$$v''_n - 2xv'_n + 2nv_n = 0. \quad (3.57)$$

Etter det ovenstående har denne likningen bare én polynomløsning, av grad n , og med en fritt valgbar multiplikativ konstant. Dersom den multiplikative konstanten velges slik at koeffisienten foran den høyeste potens x^n er 2^n , så kalles polynomet tradisjonelt for det nte *Hermite-polynomet* $H_n(x)$.

I prinsipp kan Hermite-polynomene finnes vha rekkeutviklingen ovenfor. Men det er flere andre oppskrifter på å generere Hermite-polynomer, og mange relasjoner mellom Hermite-polynomer som viser seg nyttige i ulike sammenhenger. Vi utleder nå følgende relasjoner:

$$H''_n - 2xH'_n + 2nH_n = 0 \quad (3.58)$$

$$H'_n = 2nH_{n-1} \quad (3.59)$$

$$H_{n+1} = 2xH_n - 2nH_{n-1} \quad (3.60)$$

$$S(x, s) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{s^n}{n!} = e^{-s^2 + 2xs} \quad (3.61)$$

$$H_n(x) = e^{x^2} \left(-\frac{d}{dx} \right)^n e^{-x^2} \quad (3.62)$$

$$H_n(x) = e^{\frac{1}{2}x^2} \left(x - \frac{d}{dx} \right)^n e^{-\frac{1}{2}x^2} \quad (3.63)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(x) H_m(x) e^{-x^2} dx = 0 \quad (n \neq m) \quad (3.64)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n^2(x) e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi} 2^n n! \quad (3.65)$$

Bevis for (3.58-3.65):

- (3.58) er identisk med (3.57) med navneskiftet $v_n = H_n$.
- Derivasjon av (3.58) gir $H'''_n - 2xH''_n + 2(n-1)H'_n = 0$. Det viser at H'_n oppfyller samme differensiallikning som H_{n-1} , og da differensiallikningen bestemmer polynomet entydig må vi ha $H'_n = c_n \cdot H_{n-1}$, der c_n er en konstant. Konstanten c_n bestemmes ved å se på høyeste potens på hver side. På venstre side får vi $H'_n = \frac{d}{dx}(2^n x^n + \dots) = 2^n n x^{n-1} + \dots$, og på høyre side: $c_n \cdot 2^{n-1} x^{n-1} + \dots$, som gir $c_n = 2n$, qed.
- Av (3.58) fås $H_{n+1} = (2xH'_{n+1} - H''_{n+1})/(2n+2)$, og når de deriverte elimineres vha (3.59) fås (3.60). Q.e.d.
- Den genererende funksjonen $S(x, s) = \sum_n H_n(x) s^n / n!$ er ofte nyttig. Derivasjon mhp s og bruk av (3.60) gir

$$\frac{\partial S}{\partial s} = \sum_{n=1}^{\infty} H_n \frac{s^{n-1}}{(n-1)!} = \sum_{n=1}^{\infty} (2xH_{n-1} - 2(n-1)H_{n-2}) \frac{s^{n-1}}{(n-1)!}.$$

Sett $n = m + 1$ i første ledd og sett $n = m + 2$ i andre ledd på høyre side. Det gir

$$\frac{\partial S}{\partial s} = (2x - 2s) \sum_{m=0}^{\infty} H_m(x) \frac{s^m}{m!} = (2x - 2s) S(x, s),$$

som kan skrives

$$\frac{\partial}{\partial s} \ln S(x, s) = 2x - 2s.$$

Ved integrasjon fås

$$\ln S(x, s) = 2xs - s^2 + C(x),$$

der $C(x)$ er en vilkårlig funksjon av x . Ved å sette $s = 0$ ser en at $C(x) = \ln H_0 = \ln 1 = 0$. Vi har altså funnet $\ln S(x, s) = 2xs - s^2$, som beviser (3.61).

- Av (3.61) følger

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-x^2} H_n(x) \frac{s^n}{n!} = e^{-(s-x)^2}.$$

Ved å rekkeutvikle høyre side i potenser av s skal altså koeffisienten foran $s^n/n!$ være $e^{-x^2} H_n(x)$:

$$e^{-x^2} H_n(x) = \left[\left(\frac{\partial}{\partial s} \right)^n e^{-(s-x)^2} \right]_{s=0} = \left[\left(-\frac{\partial}{\partial x} \right)^n e^{-(s-x)^2} \right]_{s=0} = \left(-\frac{d}{dx} \right)^n e^{-x^2},$$

som beviser (3.62). Denne relasjonen (og liknende uttrykk bl.a. for Legendrepolynomer) kalles Rodrigues³ formel.

- Ved å kombinere (3.59) og (3.60) til $H_{n+1} = 2xH_n - H'_n$ har vi

$$\left(x - \frac{d}{dx}\right) H_n(x) e^{-\frac{1}{2}x^2} = [2xH_n(x) - H'_n(x)] e^{-\frac{1}{2}x^2} = H_{n+1}(x) e^{-\frac{1}{2}x^2}.$$

Det gir

$$H_n e^{-\frac{1}{2}x^2} = \left(x - \frac{d}{dx}\right) H_{n-1} e^{-\frac{1}{2}x^2} = \left(x - \frac{d}{dx}\right)^n H_0 e^{-\frac{1}{2}x^2} = \left(x - \frac{d}{dx}\right)^n e^{-\frac{1}{2}x^2},$$

som beviser (3.63).

- (3.64) følger av det alminnelige teorem om at bølgefunksjoner som tilhører ulike egenverdier er ortogonale.
- For å vise normeringsintegralet (3.65) uttrykker vi det ene Hermite-polynom med Rodrigues formel (3.62), og gjør n delvise integrasjoner, med resultat

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_n^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} dx H_n(x) \left(-\frac{d}{dx}\right)^n e^{-x^2} = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} \left(\frac{d}{dx}\right)^n H_n(x).$$

Da $H_n(x)$ har $2^n x^n$ som høyeste potens vil derivasjonen gi $2^n n!$, slik at vi får

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_n^2 dx = 2^n n! \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} = 2^n n! \sqrt{\pi},$$

som beviser (3.65).

*

En eksplisitt beregning av de første Hermite-polynomene kan gjøres på mange vis: fra rekkeutviklingen, fra (3.60), fra (3.61) eller fra (3.62). Vi finner

$$\begin{aligned} H_0 &= 1 \\ H_1 &= 2x \\ H_2 &= 4x^2 - 2 \\ H_3 &= 8x^3 - 12x \\ H_4 &= 16x^4 - 48x^2 + 12 \\ H_5 &= 32x^5 - 160x^3 + 120x \end{aligned} \quad (3.66)$$

³Olinde Rodrigues (1794–1851), fransk matematiker og økonom. Meget aktiv som propagandist for Saint-Simons tidlig-sosialisme.

Vi ser at Hermite-polynomene er avvekslende like og odde funksjoner av x . Det kan en også se direkte av (3.62) eller (3.63):

$$H_n(-x) = (-1)^n H_n(x). \quad (3.67)$$

3.5.4 Egenfunksjonene

Den opprinnelige stedsvariable var $q = x\sqrt{\hbar/m\omega}$. Vha (3.64) ser vi at de normerte bølgefunksjonene er

$$\psi_n = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} (\sqrt{\pi} 2^n n!)^{-\frac{1}{2}} H_n(x) e^{-\frac{1}{2}x^2}, \quad (3.68)$$

eller

$$\psi_n(q) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-m\omega q^2/2\hbar} H_n(q\sqrt{m\omega/\hbar}). \quad (3.69)$$

Egenfunksjonene for de laveste energinivåene er skissert i Fig. 3.6. Funksjonene har alle en bestemt paritet, like for n like og ulike for odde n . Det følger direkte av (3.67).

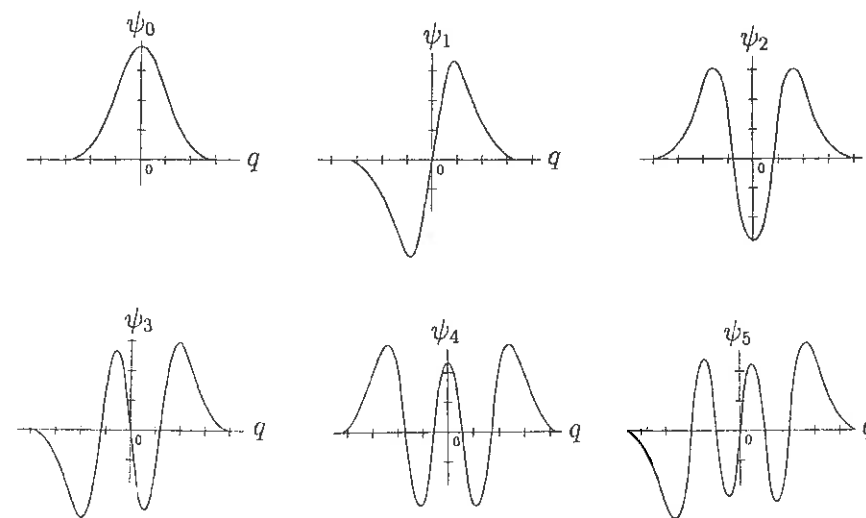


Fig. 3.6 Bølgefunksjonene for de seks tilstandene med lavest energi.

*

I kap. 6 skal vi ta for oss den harmoniske oscillatoren igjen, og vise hvorledes energieigenverdier og tilstander kan finnes ved en helt annen metode, uten å løse noen differensiallikning i det hele tatt!

3.5.5 Sammenlikning med en klassisk oscillator

En klassisk oscillator må på en eller annen måte kunne oppfattes som et grensetilfelle av den kvantemekaniske oscillatoren. På hvilken måte?

La oss først se på en oscillator som vi kjenner energien til, men forøvrig vet vi ingenting om dens dynamiske tilstand. Vi søker sannsynligheten $\rho(q) dq$ for å finne oscillatoren i intervallet $(q, q + dq)$.

Kvantemekanisk vil fastlagt energi si at oscillatoren er i den stasjonære tilstand som svarer til energien, og $\rho = |\psi_n(q)|^2$. Vi venter at klassiske forhold får vi for store energier. Eksempelvis viser Fig. 3.7 sannsynlighetstettheten $\rho(q) = |\psi_{20}|^2$ for en energi $E = 20.5\hbar\omega$.

For den klassiske oscillatoren med fastlagt energi kjenner vi bare maksimalutslaget $q_0 = \sqrt{2E/m\omega^2}$. Sannsynligheten for å finne oscillatoren i intervallet $(q, q + dq)$ er lik den brøkdelen av tida som oscillatoren er i dette intervallet. I én passasje av dq tilbringer den tida dq/v i intervallet, der v er hastigheten, gitt ved $\frac{1}{2}mv^2 = E - \frac{1}{2}m\omega^2 q^2$. Det er altså mest sannsynlig å finne oscillatoren nær q_0 der hastigheten er lav. Da oscillatoren passerer intervallet to ganger i løpet av svingetida $2\pi/\omega$, blir $\rho(\text{klassisk}) dq = (\omega/\pi) dq/v$, eller utskrevet:

$$\rho(\text{klassisk}) = \frac{1}{\pi\sqrt{2E/m\omega^2 - q^2}} = \frac{1}{\pi\sqrt{q_0^2 - q^2}} \quad \text{for } -q_0 < q < q_0, \quad (3.70)$$

og $\rho(\text{klassisk}) = 0$ for $|q| > q_0$. Denne klassiske sannsynlighetsfordelingen er også tegnet inn i Fig. 3.7 for energien $E = 20.5\hbar\omega$.

Dersom vi midler over de raske svingningene i bølgefunksjonen ser vi at overenstemmelsen er rimelig god. En kan vise analytisk at den blir bedre og bedre jo større energien er.

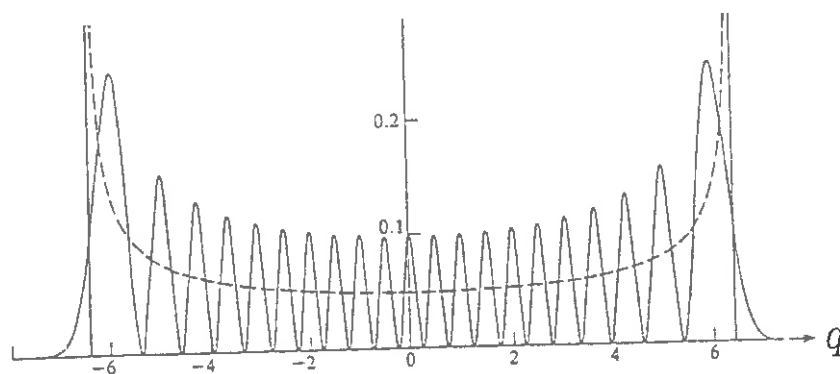


Fig. 3.7 Kvantemekanisk (heltrukket) og klassisk (stiplet) sannsynlighetstetthet for posisjonen til en partikkel med energi $E = 20.5\hbar\omega$ i et harmonisk oscillatorpotensial. Dimensjonsløse variable er benyttet, dvs at avstander er i enheter $(\hbar/m\omega)^{1/2}$ og sannsynlighetstettheter i enheter $(m\omega/\hbar)^{1/2}$.

Denne sammenlikningen er vel og bra, men den viser ikke tidsutviklingen av et oscillerende massepunkt i detalj. Slipper vi en partikkel med null hastighet og med amplitude q_0 vil den klassisk oscillere som $q(t) = q_0 \cos \omega t$. Hva er det kvantemekaniske motstykket til dette?

De kvantemekaniske energieigenfunksjonene oscillerer ikke, de er jo stasjonære tilstander med tidsuavhengig sannsynlighetstetthet. For å få det til å svinge må vi se på ikke-stasjonære tilstander. Disse kan alltid betraktes som overlageringer av stasjonære tilstander. Som et eksempel anta at bølgefunksjonen ved $t = 0$ er som i grunntilstanden, men sentrert ved en amplitude q_0 :

$$\Psi(q, 0) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-m\omega(q-q_0)^2/2\hbar}. \quad (3.71)$$

Av symmetrigrunner er $\langle q \rangle = q_0$, og en viser lett at forventningsverdien $\langle p \rangle$ av impulsen er lik null ved $t = 0$. Så bortsett fra at begynnelsesverdiene for posisjon og impuls ikke er skarpt definert, likner dette på den klassiske startsituasjonen. Denne bølgefunksjonen har forøvrig minimalt uskarphetsprodukt, idet $\Delta q \Delta p = \hbar/2$ (se kap. 4.5). Ved å utvikle i stasjonære tilstander, $\Psi(q, t) = \sum_n c_n \psi_n(q) e^{-iE_n t/\hbar}$, bestemme c_n utfra $\Psi(q, 0)$, og utføre summen over n , får en etter endel regning (se oppgave)

$$|\Psi(q, t)|^2 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-m\omega(q-q_0 \cos \omega t)^2/\hbar}. \quad (3.72)$$

Dette er den beste analogi til en klassisk svingning som vi kan få. Bølgepakken svinger med en middelposisjon $\langle q \rangle = q_0 \cos \omega t$ som følger den klassiske svingning. En slik oscillerende gaussisk bølgepakke kalles en *koherent tilstand* (se også kap. 6.5.6). Men prisen for å få denne klassisk-liknende oscillasjonen er at energien ikke lenger er skarpt definert.

3.6 Spredning i én dimensjon

Hittil har vi studert endel éndimensjonale potensialer for å finne hvilke bundne tilstander som eksisterer i de ulike potensialene. Slike diskrete energinivåer danner basis for interpretasjon av eksperimentelle spektra; fra kjennskap til spektrene kan en finne egenskaper til potensialet som en partikkel befinner seg i. Men det er andre eksperimenter enn spektralanalyse som kan gi informasjon om potensialet. I et *spredningseksperiment* sendes en partikkelstråle inn mot en spredder, et target, og detektorer måler hvor stor brøkdel av partiklene som kommer ut i de ulike retningene. Retningsfordelingen for de spredte partiklene er karakteristisk for potensialet.

Vi skal i kapittel 13 behandle spredning i tre dimensjoner. I én dimensjon, som vi tar for oss her, er problemet enklere fordi det bare er to retninger: Enten fortsetter en partikkel etter spredningen i samme retning som den innfallende

strålen – den transmitteres gjennom sprederen –, eller så har den motsatt retning – den spres tilbake. Vi ønsker derfor å beregne

$$\begin{aligned} R &= \text{sannsynligheten for at partikkelen reflekteres,} \\ T &= \text{sannsynligheten for at partikkelen transmitteres.} \end{aligned}$$

Refleksjonskoeffisienten R og transmisjonskoeffisienten T avhenger av potensialet og av partikkelens energi.

3.6.1 Planbølgeløsninger

Spredningeksperimentet består i at en innfallende partikkel med masse m og med en positiv impuls p beveger seg fra venstre mot høyre inn mot et lokalisert spredende potensial $V(x)$. At potensialet er lokalisert medfører at partikkelen i stor avstand fra potensialet oppfører seg som en *fri* partikkel. Løsningene av den stasjonære Schrödingerlikningen for en fri partikkel,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi(x), \quad (3.73)$$

er plane bølger,

$$\psi(x) = A_{\pm} e^{\pm ikx}, \quad \text{med} \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (3.74)$$

Disse er egentilstander for impulsoperatoren $\hat{p}_x$ med egenverdier $\pm\hbar k$, så en planbølge beskriver en partikkel med en helt bestemt impulsverdi. De fullstendige bølgefunksjonene, med $e^{-iEt/\hbar}$ heftet på, er

$$\Psi(x, t) = A_{\pm} e^{i(\pm kx - \hbar k^2 t/2m)}.$$

Vi vil her behandle spredning som et *stasjonært* problem der den innfallende partikkel har en helt bestemt energi. Det er teknisk enklere enn alternativet der den innfallende partikkel beskrives ved en lokalisert bølgepakke av typen som er vist i Fig. 1.3.

Det er bare *utenfor* rekkevidden av potensialet at bølgefunksjonen har den enkle formen (3.74). Ved potensialet er forløpet mer komplisert. Å normere bølgefunksjonene kan derfor være vanskelig. Men vi kan godt bruke unormerte bølgefunksjoner når vi benytter sannsynlighetsstrømtettheter $\bar{j}$, utledet i kap. 2.6. Bølgefunksjonene (3.74) tilsvarer strømtetthetene

$$j_{\pm} = \Re \left(\psi_{\pm}^* \frac{\hbar}{im} \psi'_{\pm}(x) \right) = \pm \frac{\hbar k}{m} |A_{\pm}|^2. \quad (3.75)$$

I stedet for å tenke på sannsynlighetsstrømtettheter for en eneste partikkel, kan vi tenke på partikkelstråler med en mengde uavhengige partikler i innfallende stråle. Det tilsvarer en realisering ved gjentatte forsøk av sannsynlighetene for

ulike resultater for én partikkel, på samme vis som kast med en stor mengde terninger realiserer sannsynlighetene for ulike resultater for én terning.

Det vil være *forholdet* mellom utgående strømtetthet i foroverretningen (j_t) eller bakoverretningen (j_r) og innfallende strømtetthet j_i som bestemmer transmisjons- og refleksjons-koeffisientene T og R :

$$T = \frac{j_t}{j_i} \quad R = \frac{|j_r|}{j_i}. \quad (3.76)$$

3.6.2 Spredning på potensialbrønn

Enkle eksempler på spredning i én dimensjon er spredning på en potensialbrønn eller potensialbarriere. Dette er viktige eksempler fordi de illustrerer sammenhenger med klassisk mekanikk, men enda mer fordi de illustrerer *nye* kvantemekaniske fenomener, som ikke-klassisk refleksjon, spredningsresonans og tunnelering.

Den eksperimentelle situasjon er vist i Fig. 3.8: En innfallende strøm j_i av partikler med masse m og energi E produserer en transmittert strøm j_t og en reflektert strøm j_r .

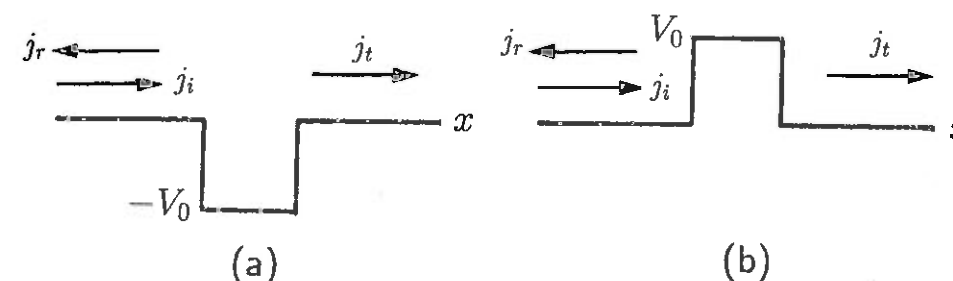


Fig. 3.8 Spredning på (a) en potensialbrønn, og (b) en potensialbarriere.

Forskjellen på de to tilfellene er bare fortegnet på potensialet V_0 i intervallet $0 \leq x \leq L$. Her er potensialet satt lik null utenfor intervallet, i motsetning til i kap.3.3 der vi målte potensialet fra bunnen av brønnen.

Vi starter med potensialbrønnen:

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{for } 0 \leq x \leq L \\ 0 & \text{ellers.} \end{cases} \quad (3.77)$$

Løsningen av den stasjonære Schrödingerlikningen i de tre områdene er

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + r e^{-ikx} & \text{for } x < 0 \\ a e^{iqx} + b e^{-iqx} & \text{for } 0 \leq x \leq L \\ t e^{ikx} & \text{for } x > L, \end{cases} \quad (3.78)$$

der

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad \text{og} \quad q = \sqrt{\frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}}. \quad (3.79)$$

Her er koeffisienten foran e^{ikx} -leddet for den innfallende strålen satt lik 1. Det er ingen innskrenkning for som (3.76) viser er vi bare interessert i forhold mellom strømtettheter.

Legg merke til at vi ikke har noe e^{-ikx} -ledd i bølgefunksjonen for $x > L$, selv om den generelle løsning av Schrödingerlikningen i dette området har et slikt ledd. Grunnen er at et e^{-ikx} -ledd beskriver en bølge som beveger seg mot venstre, og slik eksperimentet er satt opp er det finnes ikke en partikkelstrøm inn mot potensialet fra høyre. Dette, og tilsvarende for spredning i tre dimensjoner, er en *utstrålingsbetingelse*: Bortsett fra den innfallende strålen har alle partikkelstrømmer retning bort fra det spredende potensialet.

De fire konstantene a , b , r og t bestemmes av de fire grensebetingelsene som skjøter de tre delene av bølgefunksjonen (3.78) sammen. Skjøtingsbetingelsene er kontinuitet av ψ og ψ' i $x = 0$ og $x = L$:

$$1 + r = a + b \quad (3.80)$$

$$ik - ikr = iqa - iqb \quad (3.81)$$

$$ae^{iqL} + be^{-iqL} = te^{ikL} \quad (3.82)$$

$$iqae^{iqL} - iqbe^{-iqL} = ikte^{ikL} \quad (3.83)$$

De to første likningene beskriver skjøtingen ved $x = 0$, de to siste skjøtingen ved $x = L$. De to første likningene gir

$$\begin{aligned} a &= \frac{q+k}{2q} + \frac{q-k}{2q} r \\ b &= \frac{q-k}{2q} + \frac{q+k}{2q} r \end{aligned} \quad (3.84)$$

Innsetting av disse uttrykkene for a og b i (3.82) og (3.83) gir to likninger til å bestemme r og t , med resultatet

$$r = \frac{i(q^2 - k^2) \sin(qL)}{2kq \cos(qL) - i(k^2 + q^2) \sin(qL)} \quad (3.85)$$

$$t = e^{-ikL} \frac{2kq}{2kq \cos(qL) - i(k^2 + q^2) \sin(qL)} \quad (3.86)$$

Innfallende, reflektert og transmittert strøm er ifølge (3.75) lik

$$j_i = \frac{\hbar k}{m}, \quad j_r = -\frac{\hbar k}{m} |r|^2, \quad j_t = \frac{\hbar k}{m} |t|^2.$$

Vi får dermed refleksjonskoeffisient og transmisjonskoeffisient lik

$$R = \frac{|j_r|}{j_i} = |r|^2 = \frac{(k^2 - q^2)^2 \sin^2(qL)}{4k^2q^2 + (k^2 - q^2)^2 \sin^2(qL)} = \frac{4E(V_0^2 \sin^2(qL))}{4E(E + V_0) + V_0^2 \sin^2(qL)} \quad (3.87)$$

$$T = \frac{j_t}{j_i} = |t|^2 = \frac{4k^2q^2}{4k^2q^2 + (k^2 - q^2)^2 \sin^2(qL)} = \frac{4E(E + V_0)}{4E(E + V_0) + V_0^2 \sin^2(qL)} \quad (3.88)$$

Legg for det første merke til at

$$R + T = 1. \quad (3.89)$$

Det er et uttrykk for partikkelbevarelse, eller, om en vil, sannsynlighetsbevarelse.

For det andre ser vi at $q > k$, dvs at partikkelen får større impuls inne i brønnen enn utafor. Det er akkurat som i klassisk mekanikk.

For det tredje ser en at normalt vil det være en endelig sannsynlighet for at partikkelen reflekteres. I klassisk mekanikk vil en slik refleksjon naturligvis ikke skje. En klassisk partikkel vil, etter å ha hatt en større hastighet i intervallet $0 \leq x \leq L$, fortsette med den opprinnelige farten. Dette kvantemekaniske fenomenet kalles *ikke-klassisk refleksjon* eller *anti-tunnelering*.

For det fjerde ser vi at for spesielle energier, de som gjør $\sin(qL) = 0$, dvs $qL = n\pi$, er likevel transmisjonskoeffisienten $T = 1$. De tilsvarende energier er etter (3.79)

$$E = -V_0 + \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2mL^2}, \quad \text{for } n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.90)$$

Disse energiene svarer til at fram-og-tilbake-avstanden over brønnen, $2L$, er et helt antall bølgelengder (bølgelengden er $2\pi/q$). De kan forstås, på samme måte som tilsvarende effekt i optikk, som at reflektert bølge fra første grenseflate og reflektert bølge fra andre grenseflate (der det skjer et faseskift) slukker hverandre ut. Figur 3.9 viser transmisjonskoeffisienten som funksjon av energien.

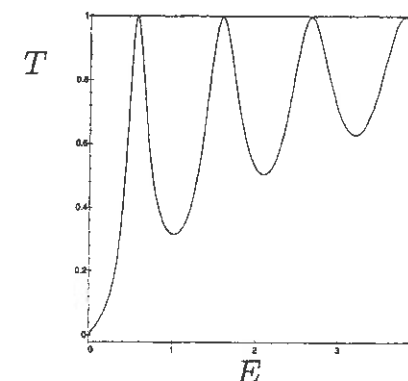


Fig. 3.9 Transmisjonskoeffisient T ved spredning på en potensialbrønn, som funksjon av partikkelenergien E .

Vi vil komme tilbake til liknende fenomener med minimal spredning (Ramsauer-Townsend-effekten) når vi senere behandler spredning i tre dimensjoner.

Tilbakespredningen er maksimal når $qL = (n + \frac{1}{2})\pi$, med heltallig n . Tilsvarende *spredningsresonanser* vil vi møte i tredimensjonal spredning.

3.6.3 Spredning på potensialbarriere

Spredning på en potensialbarriere følger av resultatene for potensialbrønnen, ved å la $V_0 \rightarrow -V_0$. Det virkelig interessante tilfellet er når partikkelenergien E er mindre enn barrierehøyden V_0 . I dette tilfellet blir q imaginær så vi setter

$$q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)} = i\kappa, \quad \text{med} \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}. \quad (3.91)$$

I uttrykket (3.88) bruker vi at $\sin(ix) = i \sinh(x)$, og får transmisjonskoeffisienten for potensialbarrieren lik

$$T = \frac{(2k\kappa)^2}{(k^2 + \kappa^2)^2 \sinh^2(\kappa L) + (2k\kappa)^2} = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \sinh^2(\kappa L)}. \quad (3.92)$$

Refleksjonskoeffisienten er fremdeles gitt ved $R = 1 - T$.

For høye barrierer i forhold til partikkelenergien (stor κ), og for brede barrierer (stor L), er argumentet for sinh-funksjonen stort. Da $\sinh(x) \approx \frac{1}{2}e^x$ for store x blir transmisjonssannsynligheten liten for disse tilfellene:

$$T \approx \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2\kappa L} = \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2L\sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2}}. \quad (3.93)$$

Her er det eksponensialfunksjonen som er avgjørende faktoren, den kan bli svært liten.

Hovedpoenget er at partikkelen har alltid en *endelig* sannsynlighet for å trenge igjennom barrieren! Dette er en ren kvantemekanisk effekt, for i klassisk mekanikk vil partikkelen ikke ha tilstrekkelig energi til å passere potensialtoppen. Fenomenet kalles kvantemekanisk *tunnelering*.

3.6.4 Anvendelser av tunnelering

Kvantemekanisk tunnelering er viktig i mange sammenhenger. Her er noen få eksempler:

1. Feltemisjon

For å frigjøre et elektron fra et metall må elektronet tilføres minst et energibeløp W , frigjøringsarbeidet. I den fotoelektriske effekt ble denne energien tilført ved innfallende fotoner (kap. 1.3). En helt annen måte å frigjøre elektronene på

er *feltemisjon*. Figur 3.10 viser prinsippet: Et konstant ytre elektrisk felt $\mathcal{E}$, tilsvarende tilleggspotensialet $-e\mathcal{E}x$ (hvis feltet går i x -retning), gir en triangulær barriere som elektroner kan tunnelere igjennom. Dette gir en strøm av elektroner.

Hvorledes strømmen avhenger av feltstyrken kan vi estimere som følger. Et mål for bredden L av barrieren er den avstanden x som gjør $W - e\mathcal{E}x = 0$, dvs $L = W e^{-1}\mathcal{E}^{-1}$. I analogi med likning (3.93) for den firkantede potensialbarrieren venter vi at transmisjonskoeffisienten varierer med feltet som $\ln T \propto -L \propto \mathcal{E}^{-1}$. Eksperimenter viser en slik lineær sammenheng mellom $\ln T$ og $\mathcal{E}^{-1}$.

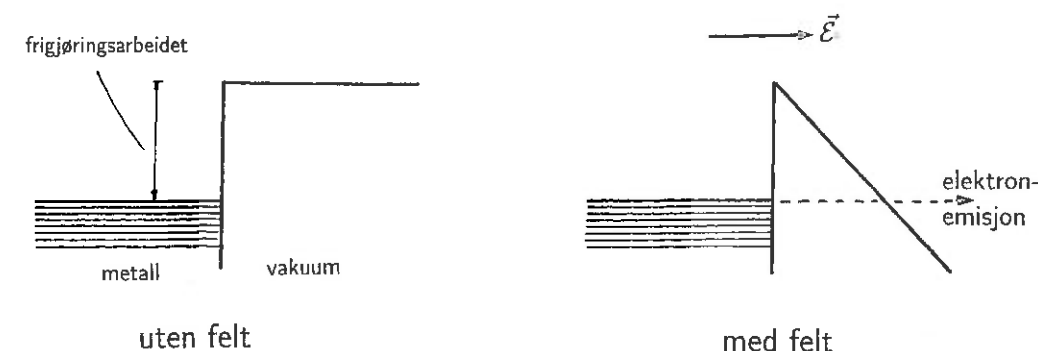


Fig. 3.10 Potensial for det mest energirike elektron i et metall (a) før, og (b) etter at et ytre elektrisk felt er påtrykt. Tunnelering gjennom det trekantede potentialet gir feltemisjon.

2. Sveipe-tunnelerings-mikroskopi

En relativ ny teknikk som har hatt stor betydning for å avbilde atomære strukturer er *sveipe-tunnelerings-mikroskopi* (standard akronym er STM, fra engelsk Scanning Tunneling Microscopy).

Skjematisk sett fungerer mikroskopet ved at et meget tynn metallspiss danner en elektrode over metalloverflaten som skal undersøkes. Ved at en ytre spenningsforskjell pålegges kan elektroner tunnelere mellom spissen og metalloverflata. Når spissen sveipes over overflata sørger en tilbakekoplingsmekanisme for å justere spissens vertikale posisjon slik at tunneleringsstrømmen holdes konstant. Dette gir høydeprofiler som danner en avbildning av overflata.

Det er viktig at spissen dannes av noen få overflate-atomer. Presisjonen blir god fordi tunnelerings-sannsynligheten er en uhyre følsom funksjon av avstanden (L i likning (3.93).) Nøyaktigheten blir utrolig god, ned til en brøkdel av 1 Å! Dette er et godt eksempel på at kvantemekanikk kan skape ny teknologi.

3. Radioaktiv α -desintegrasjon og fusjon av kjerner

En enkel modell av radioaktiv desintegrasjon, f.eks. ved at en alfa-partikkel (He^4 -kjerne) unnslipper fra en kjerne, er følgende: En α -partikkel som dannes inne

i kjernen følger et potensial omtrent som skissert i figuren. Ved store avstander representerer potentialet Coulombfrastøtningen mellom den positive ladede α -partikkelen og den positivt ladede restkjernen. I tillegg vil ved små avstander kjernekreftene gi en tiltrekning som holder α -partikkelen bundet til kjernen (Fig. 3.11).

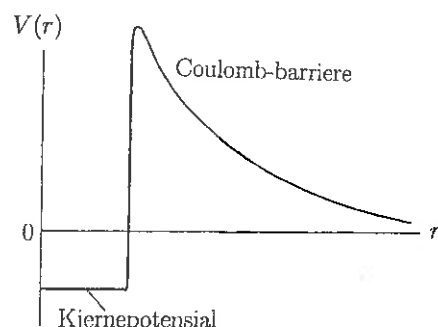


Fig. 3.11 Skjematisk modellpotensial for α -partikkel i kjerne.

Selv om α -partikkelen har mindre energi enn toppen av potensialbarrieren så kan den tunnelere igjennom. Halveringstiden τ for en ustabil kjerne er omvendt proporsjonal med tunnelering-sannsynligheten, og kan være fra mikrosekunder til millioner av år. En kan tenke seg at α -partikkelen skrangler rundt inni kjernen, og gjør gjentatte forsøk på å slippe ut. Ut fra kinetisk energi og kjerneadien kan en estimere hvor ofte en α -partikkel „banker på porten” for å komme ut, det er noe i størrelsesorden 10^{21} ganger pr. sekund. Det forteller oss for det første at tunnelering-sannsynlighetene kan være svært forskjellige, og for det andre at de er utrolig små.

Her ga det frastøtende Coulombpotentialet en barriere som α -partikkelen måtte tunnelere gjennom for å komme ut av kjernen. I *fusjonsreaksjoner* opptrer prosesser av omvendt type, der to kjerner må overvinne deres gjensidige Coulomb-barriere for å komme så nær hverandre at de korttrekkende kjernekreftene får virke. Igjen er sannsynligheten for kvantemekanisk tunnelering gjennom barrieren hovedfaktoren som bestemmer reaksjonsraten. Da solenergien kommer fra fusjonsprosesser, er tunnelering simpelthen livsviktig for oss!

Oppgaver

1. Vis at for en partikkel i grunntilstanden i en uendelig dyp potensialbrønn er sannsynligheten for å finne partikkelen i den midtre halvdel av boksen ($\frac{1}{4}L \leq x \leq \frac{3}{4}L$) ca. 82%.
2. Vis at når potensialbrønnen i kap. 3.3 blir svært grunn, eller svært smal, vil sannsynligheten bli vilkårlig nær 1 for å finne en bundet partikkel i det klassisk utlengelige området utenfor brønnen.

3. En partikkel i brønnen (3.5) har ved $t = 0$ bølgefunksjonen

$$\Psi(x, 0) = \text{konstant} (\sin(\pi x/L) + \sin(2\pi x/L)).$$

Hva er bølgefunksjonen ved senere tidspunkt t ? Bestem sannsynlighetsstrømteiteten $j(\frac{1}{2}L, t)$ i midten av boksen.

4. For hvilke potensialstyrker V_0 vil en partikkel med masse m i det éndimensjonale potentialet

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & \text{for } x < 0 \\ -V_0 & \text{for } 0 \leq x \leq l \\ 0 & \text{for } x > l \end{cases}$$

ha minst én bunden tilstand?

5. Anslå hvor bred en GaAs/GaAlAs kvantebrønn må være for at avstanden mellom de to laveste nivåene skal være 40 meV. Barrier høyden er $V_0 = 300$ meV og i halvledermaterialet kan elektronene anses som partikler med en effektiv masse $m^* = 0.067m_e$, der m_e er elektronmassen.
6. Finn bindingsenergien (3.40) i deltafunksjon-potentialet (3.36) ved en grenseovergang i resultatene for potensialbrønnen. (Tips: Sett $E = V_0 + \tilde{E}$, for å måle energiverdien i forhold til potensialnivået utenfor brønnen. Innfør videre $l = \alpha/(2V_0)$, og ta grensen $V_0 \rightarrow \infty$ med α konstant.
7. Deltafunksjon-potentialet (3.36) ligger i en avstand l fra en hard ugjennomtrengelig vegg. Hva er betingelsen for det eksisterer minst én bunden tilstand?
8. Deltafunksjon-potentialet (3.36) ligger i en avstand l fra to harde ugjennomtrengelige vegger, en på hver side, slik at grunntilstandsenergien er lik null. Hva er avstanden l ? Skissér bølgefunksjonen i grunntilstanden.
9. Et éndimensjonalt potensial som består av to deltafunksjoner i avstand $2l$,

$$V(x) = -\alpha\delta(x+l) - \alpha\delta(x-l),$$

er et enkelt tilfelle av en dobbelbrønn. Hva er grunntilstandsenergien når l er svært stor, og når l er svært liten? Finn den minste verdien for l som gir to bundne tilstander i potentialet.

10. Gi vha (3.62) et induksjonsbevis for at alle n nullpunktene av $H_n(x)$ er reelle.
11. En partikkel med masse m i deltafunksjonspotentialet $-\alpha\delta(x)$ har ved $t = 0$ bølgefunksjonen

$$\Psi(x, 0) = \sqrt{m\alpha c/\hbar^2} e^{-m\alpha c|x|/\hbar^2},$$

der c er et dimensjonsløst tall. Finn sannsynligheten $P(c)$ for at partikkelen er bundet. Skissér $P(c)$.

12. Beregn for en harmonisk oscillator $\psi_n(0)$, og finn det asymptotiske uttrykk for store n vha Stirlings formel $n! \simeq n^n e^{-n} \sqrt{2\pi n}$. Forklar at resultatet er i overensstemmelse med det en kunne vente ut fra (i) paritet og (ii) klassisk mekanikk.

13. Bruk Rodrigues formel (3.62) for Hermitepolynomene til å vise at starttilstanden (3.71),

$$\Psi(q, 0) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-m\omega(q-q_0)^2/2\hbar}$$

for en harmonisk oscillator er en lineærkombinasjon av stasjonære tilstander med koeffisienter

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} x_0^n e^{-\frac{1}{2}x_0^2},$$

der $x_0 = q_0 \sqrt{m\omega/\hbar}$. Vis at dette leder til resultatet (3.72). Hva er middelenergien for denne oscillasjonen?

14. En partikkel med masse m befinner seg i et harmonisk-oscillator potensial utenfor en hard vegg:

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & \text{for } x < 0 \\ \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 & \text{for } x \geq 0 \end{cases}$$

Finn energieigenverdiene.

15. En partikkel med masse m befinner seg i et éndimensjonalt potensial $V(x)$ som er null i uendeligheten. Partikkelen er i en stasjonær tilstand

$$\psi_0(x) \propto \frac{1}{(x^2 + a^2)^{\frac{3}{2}}}.$$

Bestem potensialet og den tilhørende energieigenverdien.

16. Bevis *virialteoremet* for en partikkel med masse m som er bundet i en (reell) energieigen-tilstand i et éndimensjonalt potensial $V(x)$:

$$\frac{1}{2} \left\langle x \frac{dV(x)}{dx} \right\rangle = \left\langle \frac{p_x^2}{2m} \right\rangle.$$

(Tips: Start med å derivere Schrödingerlikningen på formen

$$V(x) = E + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi''}{\psi} \quad \text{mhp } x.)$$

Bruk virialteoremet til å vise at for en harmonisk oscillator er forventningsverdiene av kinetisk og potensiell energi like store.

17. En partikkel med masse m og energi E sendes inn fra venstre mot en potensialbarriere som består av et enkelt trinn:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{for } x < 0 \\ V_0 & \text{for } x \geq 0. \end{cases}$$

Anta $E > V_0 > 0$ og beregn refleksjons- og transmisjons-koeffisientene.

18. Anta $E < V_0$ i den foregående oppgaven, og vis at $R = 1$. Hva er inntrengningsdybden? (Dvs hvor langt inni barrieren vil amplituden av bølgefunksjonen ha sunket til f.eks. $1/e$ av verdien ved barrierens begynnelse?)
19. Beregn transmisjons- og refleksjons-koeffisient for en partikkel med masse m og energi E som sendes inn mot deltafunksjonsbrønnen

$$V(x) = -\alpha\delta(x).$$

Hva blir forskjellen når α endrer fortegn, slik at potensialet blir en deltafunksjonsbarriere?

Kapittel 4

VIKTIGE KVANTEMEKANISKE TEOREMER

4.1 Simultane egenfunksjoner

En fysisk størrelse F har en veldefinert verdi (f) hvis og bare hvis systemet er i en egentilstand φ for den tilhørende operator, $\hat{F}\varphi = f\varphi$.

Dersom to fysiske størrelser F og G skal kunne ha veldefinerte verdier samtidig, så må derfor systemet være i en *felles* egentilstand φ for de tilhørende operatorene $\hat{F}$ og $\hat{G}$:

$$\hat{F}\varphi = f\varphi \quad \text{og} \quad \hat{G}\varphi = g\varphi. \quad (4.1)$$

Ved å operere på den første likningen med $\hat{G}$ og på den siste likningen med $\hat{F}$ fås

$$\hat{G}\hat{F}\varphi = f\hat{G}\varphi = fg\varphi \quad \text{og} \quad \hat{F}\hat{G}\varphi = g\hat{F}\varphi = gf\varphi. \quad (4.2)$$

Ved å trekke den siste av disse to likningene fra den første får vi

$$(\hat{G}\hat{F} - \hat{F}\hat{G})\varphi = [\hat{G}, \hat{F}]\varphi = 0. \quad (4.3)$$

Dersom dette bare var gyldig for én funksjon φ ville det ikke være særlig interessant. La oss anta at det gjelder for et fullstendig sett av egenfunksjoner φ_n . Pga fullstendighet kan en vilkårlig funksjon φ utvikles i settet φ_n , og vi har derfor $[\hat{F}, \hat{G}]\varphi = 0$ for *enhver* funksjon φ . Altså er kommutatoren ekvivalent med null:

$[\hat{F}, \hat{G}] = 0.$

(4.4)