På 1. samling:

- Historisk bakgrunn for QM
- Spesiell relativitetsteori
- Bohr-modellen
- de Broglie og "partikkelbølger"
- Schrödingerligningen (SL og TUSL)
- Bølgefunksjon. Sannsynlighetstolkning
- Partikkel i boks:
  - Grensebetingelser
  - Energikvantisering
  - Symmetri
  - Ortonormerte bølgefunksjoner
  - Bølgepakker

På 2. samling: Det tida tillater !!
Inkl. et labbesøk (håper jeg).

Kvantemekanikkens postulater

Empirisk grunnlag for klassisk mekanikk er Newtons lover.

Empirisk grunnlag for kvantemekanikk er følgende postulater:

A. Operatorpostulat

Til en målbar størrelse i klassisk mekanikk,

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

har vi i QM en lineær operator

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

Her er

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

$\hat{p}_j = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q_j}$ = —〃— impulskoordinat p_j

Eks: En partikkel i en dimensjon.

$N = 1$. $\hat{q}_1 = q_1 = x$, $\hat{p}_1 = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$

Fysisk størrelse	QM operator
$x, \quad y, \quad z$	$\hat{x} = x, \quad \hat{y} = y, \quad \hat{z} = z$
$p_x, \; p_y, \; p_z$	$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$ etc.
$\vec{p}$	$\hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i}\nabla = \frac{\hbar}{i}\left(\hat{x}\frac{\partial}{\partial x} + \hat{y}\frac{\partial}{\partial y} + \hat{z}\frac{\partial}{\partial z}\right)$
$K = p^2/2m$	$\hat{K} = \hat{\vec{p}}^{\,2}/2m = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$
$V(\vec{r})$	$\hat{V} = V(\vec{r})$
$E = K + V$	$\hat{H} = \hat{K} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V$
$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$	$\hat{\vec{L}} = \vec{r} \times \hat{\vec{p}} = \vec{r} \times \frac{\hbar}{i}\nabla$
$L_x = yp_z - zp_y$	$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)$
$L_y = zp_x - xp_z$	$\hat{L}_y = \frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)$
$L_z = xp_y - yp_x$	$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$

osv.

B. Tilstandspostulat

Systemets tilstand er fullstendig beskrevet ved bølgefunksjonen $\Psi(q_1, q_2, \ldots, q_N, t)$ som oppfyller ligningen

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi \qquad \text{(SL)}$$

der

$\hat{H} = \hat{K} + \hat{V}$ = systemets Hamiltonoperator (energioperator).

Eks: 1 partikkel i 1D boks

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

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

C. Forventningsverdipostulat

Et stort antall målinger av en fysisk størrelse F, på systemer preparert i samme tilstand Ψ, vil gi en middelverdi som nærmer seg

$$\langle F \rangle = \int \Psi^* \hat{F} \, \Psi \, dq_1 \, dq_2 \cdots dq_N$$

Eks: 1D boks, grunntilstanden $(n=1)$

$$\Psi_1(x,t) = \psi_1(x) \, e^{-iE_1 t/\hbar} \quad ; \quad \psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi x}{L}$$

$$\langle x \rangle = \int_0^L \Psi_1^*(x,t) \, x \, \Psi_1(x,t) \, dx$$

$$= \int_0^L x |\psi_1(x)|^2 dx = \dots = L/2$$

$$\langle p \rangle = \int_0^L \Psi_1^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right) \Psi_1 \, dx$$

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

(pga antisymmetrisk integrand)

D. Målepostulat

En måling av F kan bare gi som resultat en av egenverdiene f_j, dvs slik at

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

Etter måling av F, der resultatet ble f_j, havner systemet i egentilstanden Ψ_j.

Dvs: Målingen påvirker systemet!

Eks: 1D boks. Anta en starttilstand

$$\Psi(x,t_0) = c_1 \Psi_1(x,t_0) + c_2 \Psi_2(x,t_0)$$

En energimåling ved $t_1 > t_0$ vil da gi E_1 eller E_2, med sannsynlighet hhv $|c_1|^2$ og $|c_2|^2$.

Hvis målingen gav (f.eks) E_2, så er

$\Psi(x,t) = \Psi_2(x,t)$ for $t > t_1$.

Usikkerhet og uskarphetsrelasjoner

Standardavvik er et vanlig mål for usikkerhet i en fysisk størrelse:

$$\Delta x = \sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle} \quad \text{(Root Mean Square Deviation)}$$

Hensiktsmessig omskriving:

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

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

Standardavviket i størrelsen x

For posisjon og impuls (postulat C):

$$\langle x^n \rangle = \int \Psi^* x^n \Psi \, dx = \int x^n |\Psi|^2 dx$$

$$\langle p^n \rangle = \int \Psi^* \left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)^n \Psi \, dx$$

Eks: Med "gaussisk" starttilstand

$\Psi(x,0) = C \cdot e^{-\alpha(x-x_0)^2} \cdot e^{ip_0 x/\hbar}$ fås (øving 2)

$\Delta x \cdot \Delta p = \hbar/2$, som er <u>minste</u> teoretiske verdi for uskarphetsproduktet $\Delta x \cdot \Delta p$.

For to vilkårlige fysiske størrelser A og B, med QM operatorer $\hat{A}$ og $\hat{B}$, kan en vise at

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

der $[\hat{A}, \hat{B}] \overset{\text{def}}{=} \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ = kommutatoren mellom $\hat{A}$ og $\hat{B}$.

Eks: $\hat{A} = \hat{x} = x$, $\hat{B} = \hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$. Vi beregner $[\hat{x}, \hat{p}]$ ved å la den virke på en funksjon $\Psi(x)$.

$$[\hat{x}, \hat{p}]\Psi(x) = x \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\Psi(x) - \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\left(x\Psi(x)\right)$$

$$= \frac{\hbar}{i} x \frac{d\Psi}{dx} - \frac{\hbar}{i}\Psi - \frac{\hbar}{i} x \frac{d\Psi}{dx} = i\hbar\Psi(x)$$

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

$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{1}{2} \cdot \left| \langle i\hbar \rangle \right| = \hbar/2$, som er Heisenbergs uskarphetsrelasjon.

Merk: Hvis $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, er $\Delta A \cdot \Delta B \geq 0$, dvs det er (teoretisk) <u>mulig</u> å måle både A og B helt nøyaktig, samtidig. Eks: $[x, \hat{p}_y] = 0$

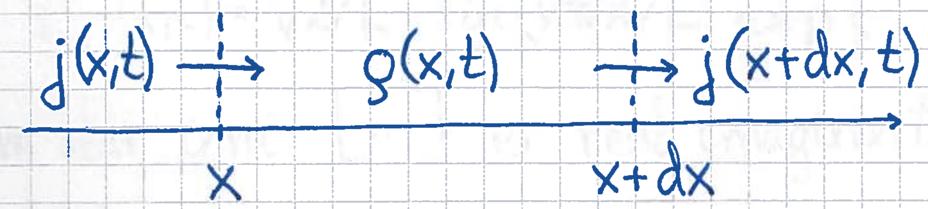
$\Rightarrow$ x <u>og</u> p_y <u>kan</u> måles nøyaktig samtidig

Sannsynlighetsstrøm og -bevarelse

Sanns. tetthet : $\rho(x,t) = |\Psi(x,t)|^2$, med enheten $[\rho] = 1/m$ i 1D. ($1/m^3$ i 3D)

Normering : $\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x,t)\,dx = 1$

Hvis ρ endrer seg et sted, må det skyldes en netto strøm (inn eller ut) av sannsynlighet her:



Sanns. strøm ved pos. x ved tid t : $j(x,t)$, med enhet $[j] = [\text{sanns.}/\text{tid}] = 1/s$ i 1D. ($\frac{\text{sanns.}}{\text{tid} \cdot \text{flate}}$ i 3D, enhet $1/s \cdot m^2$)

Sanns. bevarelse er nå uttrykt via en såkalt kontinuitetsligning for sannsynlighet :

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0} \quad \text{1D}$$

(Vi har tilsvarende kont.lign. for ladning i elektromagnetisme, for masse i hydrodynamikk, etc.)

Det er "rett fram" å vise at SL,

$i\hbar\, \partial\Psi/\partial t = \hat{H}\Psi$, med $\rho = \Psi^*\Psi$ gir

sanns. bevarelse, med sanns. strøm

$$\boxed{j(x,t) = \mathrm{Re}\left[\Psi^*(x,t)\frac{1}{m}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x,t)\right]}$$

Eks 1: Stasjonær tilstand i 1D boks; $j_n = ?$

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

Det som står inni $[\cdots]$ er rent imaginært $\Rightarrow j_n = 0$

Som ventet: Ingen netto strøm knyttet til stående bølger.

Eks 2: Fri partikkel, $\Psi(x,t) = e^{ikx}\cdot e^{-iEt/\hbar}$.

Løsn: $\partial\Psi/\partial x = ik\cdot\Psi$

$$\Rightarrow j = \mathrm{Re}\left[\frac{1}{m}\frac{\hbar}{i}\,ik\right] = \frac{\hbar k}{m} = p/m = v$$

Som ventet. (Her ble $[j] = $ m/s fordi vi brukte en dimensjonsløs Ψ.)