

Når vi nå har løst TUSL for 1D partikkel

i boks, dvs funnet normerte egenfunk. $\Psi_n(x)$ og tilhørende energiegenv. E_n , kan vi se på sentrale størrelser og begreper som: forventningsverdier, ortogonalitet, superposisjon (ikke-stasjonære tilstander), grensebetingelser, sannsynlighetsstrøm (og bevaring av sanns.), usikkerhet (og Heisenbergs uskarphetsrelasjon) og sammenhengen mellom klassisk mekanikk og kvantemekanikk (Ehrenfests teorem).

Og ikke minst: De såkalte postulatene, som utgjør det empiriske grunnlaget for kvantemekanikk som teori.

Forventningsverdier

Forv.verdien $\langle x \rangle$ til en fysisk, målbar størrelse x (f.eks. posisjonen til en partikkel) er lik middelverdien av mange målinger av x på identiske systemer (evt. på samme system, som er identisk preparert et stort antall ganger).

Eks: Terningkast. Hva er forv.verdien av antall øyne $\langle j \rangle$?

Løsn: $p(j) = \text{sanns. for } j \text{ øyne} = 1/6 \quad (j=1,2,\dots,6)$

$$\langle j \rangle = \sum_{j=1}^6 j \cdot p(j) = \frac{1+2+3+4+5+6}{6} = 3.5$$

Dermed, hvis $|\Psi_n(x)|^2 dx$ er sanns. for å finne partikkelen mellom x og $x+dx$ (når vi vet at den er i tilstanden $\Psi_n(x)$), blir forv.verdien til partikkelens posisjon

$$\langle x \rangle_n = \int x |\Psi_n(x)|^2 dx,$$

der integralet går over alle mulige posisjoner for partikkelen.

(Vi kan integrere fra $-\infty$ til $+\infty$, siden $\Psi_n(x) = 0$ der partikkelen ikke kan befinne seg.)

Eks: Hva er $\langle x \rangle_n$ for partikkel i boks ($0 < x < L$)?

Løsn: $\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}$

$$\Rightarrow \langle x \rangle_n = \int_0^L x \cdot \frac{2}{L} \sin^2 \frac{n\pi x}{L} dx$$

Av symmetrigrunner er det "opplagt" at $\langle x \rangle_n = \frac{L}{2}$.

(Sanns.tettheten $|\Psi_n(x)|^2$ symmetrisk om $x = L/2$, dvs like stor sanns. for å finne part. i pos. $L/2 \pm x$.)

Regnes evt. ut med identiteten $\sin^2 \alpha = \frac{1}{2}(1 - \cos 2\alpha)$, og bruk av delvis integrasjon.

[Nok å kunne produktregel for derivasjon for å utlede "oppskrift" for delvis integrasjon:

$$d(u \cdot v) = u \cdot dv + du \cdot v \Rightarrow \int u dv = uv - \int v du$$

$$\Rightarrow \int u \frac{dv}{dx} dx = uv - \int v \frac{du}{dx} dx]$$

[Kommer straks til hvordan f.eks $\langle p \rangle_n$ skal beregnes!]

Ortogonalitet

- To "vanlige" vektorer $\vec{V}_1$ og $\vec{V}_2$ er ortogonale hvis $\vec{V}_1 \cdot \vec{V}_2 = 0$. Og en vektor har lengde (norm) lik 1 hvis $\vec{V}_i \cdot \vec{V}_i = V_i^2 = 1$.

Dvs: V_i har såkalt ortonormerte vektorer hvis

$$\vec{V}_i \cdot \vec{V}_j = \delta_{ij}$$

- [Kronecker-delta: $\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{hvis } i=j \\ 0 & \text{--- } i \neq j \end{cases}$]

Tilsvarende med egenfunksjoner $\Psi_n(x)$:

Dersom

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

utgjør $\{\Psi_n\}$ [= $\{\Psi_1, \Psi_2, \dots\}$] et ortonormert funksjonssett.

Eks: Bruk identiteten $\sin \alpha \sin \beta = \frac{1}{2} [\cos(\alpha - \beta) - \cos(\alpha + \beta)]$ til å vise at egenfunksjonene $\Psi_n(x) = \sqrt{2/L} \sin \frac{n\pi x}{L}$ for part. i boks er ortogonale. [Vi vet fra før at de er normerte, se s. 36.]

Løsn: $\langle \Psi_n, \Psi_k \rangle = \frac{1}{L} \int_0^L \left[\cos \frac{(n-k)\pi x}{L} - \cos \frac{(n+k)\pi x}{L} \right] dx$

Integrasjon gir $\sin \frac{(n \pm k)\pi x}{L}$, som er null i både øvre og nedre grense. Dermed er $\langle \Psi_n, \Psi_k \rangle = \delta_{nk}$ for partikkel i boks.

Superposisjon og ikke-stasjonære løsninger av SL

SL er en lineær (ingen ledd prop. med Ψ^2, Ψ^3 ; kun Ψ^1) og homogen (alle ledd $\sim \Psi$; ingen ledd uavh. av Ψ) ligning. Hvis da $\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \dots$ hver for seg er løsning av SL, er også en vilkårlig lineærkombinasjon av disse en løsning:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_1}{\partial t} = \hat{H} \Psi_1, \quad i\hbar \frac{\partial \Psi_2}{\partial t} = \hat{H} \Psi_2, \quad \dots$$

↓

$$i\hbar \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial t} = \hat{H} \bar{\Psi} \quad \text{med} \quad \bar{\Psi} = c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2 + \dots = \sum_{j=1}^{(\infty)} c_j \Psi_j$$

Dette er (et eksempel på) superposisjonsprinsippet (SPP).

(Kjent fra mange deler av fysikken!)

Stasjonære løsn. av SL: $\Psi(x,t) = \psi(x) e^{-iEt/\hbar}$

($\Rightarrow |\Psi(x,t)|^2 = |\psi(x)|^2$ uavh. av $t \Rightarrow \langle x \rangle, \langle x^2 \rangle$ osv uavh. av t)

$$\text{Funksjonen } \Psi(x,t) = \sum_{j=1}^N c_j \bar{\Psi}_j(x,t) = \sum_{j=1}^N c_j \psi_j(x) e^{-iE_j t/\hbar}$$

gir ikke tidsuavhengig $|\Psi(x,t)|^2$, og kalles derfor

en ikke-stasjonær tilstand. Da blir $\langle x \rangle, \langle x^2 \rangle$ osv

også tidsavhengige ("dynamiske") størrelser.

Normering av ikke-stasjonære tilstander:

Anta $\Psi(x,t) = \sum_j c_j \Psi_j(x,t) = \sum_j c_j \psi_j(x) e^{-iE_j t/\hbar}$, der $\{\psi_j\}$ utgjør et ortonormert sett. Da er $\sum_j |c_j|^2 = 1$.

$$\text{Bevis: } 1 = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) \Psi(x,t) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ c_1^* \psi_1^*(x) e^{iE_1 t/\hbar} + \dots \right\} \cdot \left\{ c_1 \psi_1(x) e^{-iE_1 t/\hbar} + \dots \right\} dx$$

$$= |c_1|^2 \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_1(x)|^2 dx}_{=1} + |c_2|^2 \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_2(x)|^2 dx}_{=1} + \dots$$

$$+ c_1^* c_2 e^{i(E_1 - E_2)t/\hbar} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x) \psi_2(x) dx}_{=0} + \dots$$

$$= |c_1|^2 + |c_2|^2 + \dots = \sum_j |c_j|^2 \quad (\text{qed})$$

En måling av energien vil da, med sannsynlighet $|c_j|^2$, gi resultatet E_j . (Vi kommer tilbake til dette straks.)

Postulatene

Newtons lover er det empiriske grunnlaget for klassisk mekanikk.

Tilsvarende er følgende postulater grunnlaget for kvantemekanikk:

Postulat A: Til en observerbar størrelse i klassisk mekanikk,

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

svarer i kvantemek. en lineær operator

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

der

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

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

$(j=1, 2, \dots, N)$

Eks: 1D boks, en partikkel

$$N=1$$

$$\hat{q}_1 = q_1 = x, \quad \hat{p}_1 = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$$

La oss ta for oss de mest sentrale størrelsene.

Fysisk størrelse

$$x, y, z$$

$$p_x, p_y, p_z$$

$$\vec{p}$$

$$K$$

$$V$$

$$E = K + V$$

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

$$L_x = y p_z - z p_y$$

$$L_y = z p_x - x p_z$$

$$L_z = x p_y - y p_x$$

Kvantemekanisk operator

$$\hat{x} = x, \hat{y} = y, \hat{z} = z$$

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}, \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}$$

$$\hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i} \nabla = \frac{\hbar}{i} \left(\hat{x} \frac{\partial}{\partial x} + \hat{y} \frac{\partial}{\partial y} + \hat{z} \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

$$\hat{K} = \hat{\vec{p}}^2 / 2m = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$$

$$\hat{V} = V$$

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V$$

$$\hat{\vec{L}} = \vec{r} \times \hat{\vec{p}} = \vec{r} \times \frac{\hbar}{i} \nabla$$

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)$$

$$\hat{L}_y = \frac{\hbar}{i} \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

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

Postulat B: Et systems tilstand er fullstendig beskrevet ved en bølgefunksjon $\Psi = \Psi(q_1, q_2, \dots, q_N, t)$ som oppfyller ligningen

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi \quad (5L)$$

der $\hat{H}$ er systemets Hamiltonfunksjon, som regel lik systemets energifunksjon, dvs

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{V} = K(\hat{p}_j) + V(\hat{q}_j) = K(\hat{p}_j) + V(q_j)$$

Eks: 1D boks. $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x); \quad V(x) = \begin{cases} 0 & ; 0 < x < L \\ \infty & ; x < 0 \text{ og } x > L \end{cases}$

Postulat C: Forventningsverdien til F er

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

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

Et stort antall målinger av F på systemer preparert i tilstanden Ψ vil gi en middelværdi som nærmer seg (den teoretiske) $\langle F \rangle$.

Eks: 1D boks, $n=1$ (grunntilst.):

$$\langle x \rangle = \int_0^L \Psi_1^* x \Psi_1 dx = \int_0^L x |\Psi_1|^2 dx = \frac{L}{2}$$

$$\langle p \rangle = \int_0^L \Psi_1^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi_1 dx \sim \int_0^L \underbrace{\sin \frac{\pi x}{L}}_{\text{symm.}} \cdot \underbrace{\cos \frac{\pi x}{L}}_{\text{antisymm.}} dx = 0$$

Postulat D: De eneste mulige verdier som en måling av F kan gi er en av egenverdiene f_j (slik at $\hat{F}\Psi_j = f_j\Psi_j$). Etter måling av F , som gav resultatet f_j , harer systemet i egentilstanden Ψ_j .

Eks: 1D boks. Anta $\Psi(x, t_0) = c_1\Psi_1(x, t_0) + c_2\Psi_2(x, t_0) + c_3\Psi_3(x, t_0)$

En energimåling ved $t_1 > t_0$ vil da gi ett av resultatene

E_1, E_2 eller E_3 , med sanns. hhv. $|c_1|^2, |c_2|^2$ og $|c_3|^2$.

(der $\sum_{j=1}^3 |c_j|^2 = 1$). Hvis målingen ved t_1 gav f.eks. E_2 , så er $\Psi(x, t > t_1) = \Psi_2(x, t)$.

Med andre ord: Målingen påvirker systemet!

Grensebetingelser

Krav om entydig sannsynlighetstetthet $|\Psi(x,t)|^2$ for alle x og t betyr at $\Psi(x)$ må være kontinuerlig overalt.

Omskriving av TUSL gir:

$$\frac{\Psi''(x)}{\Psi(x)} = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E]$$

Vi ser nå at dersom $V(x)$ gjør et "sprang" fra en endelig til en uendelig verdi, så ~~blir~~ $\Psi''(x)$ ~~ubestemt~~ ~~blir~~.

Da ~~kan~~ $\Psi'(x)$ ~~bli~~ diskontinuerlig mens $\Psi(x)$ ~~kan~~ har en "knekk" i dette punktet. Men:

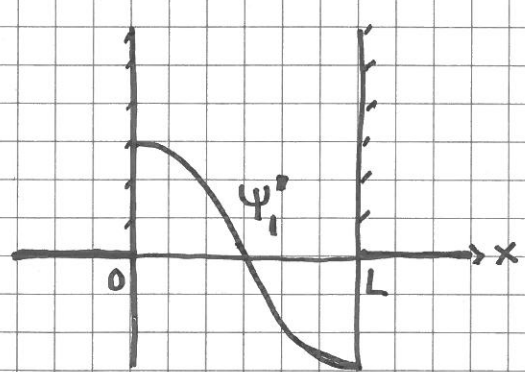
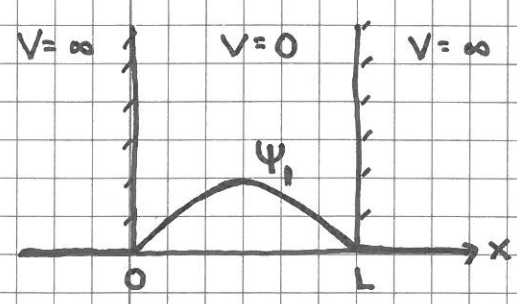
Hvis $|V(x)| < \infty$, er både Ψ og Ψ' kontinuerlige funksjoner.

Eks: 1D boks har ∞ sprang for $V(x)$ i $x=0$ og $x=L$.

La oss se på

$$\Psi_1(x) = \begin{cases} 0 & ; x < 0 \text{ og } x > L \\ \frac{1}{\sqrt{2/L}} \sin \frac{\pi x}{L} & ; 0 < x < L \end{cases}$$

$$\Rightarrow \Psi_1'(x) = \begin{cases} 0 & ; \text{---} \text{---} \text{---} \\ (\pi/L) \frac{1}{\sqrt{2/L}} \cos \frac{\pi x}{L} & ; \end{cases}$$

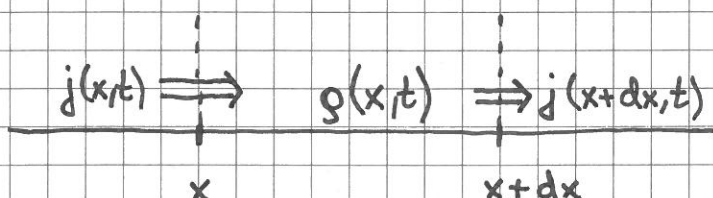


Sannsynlighetsstrøm og -bevarelse

• $g(x,t) = |\Psi(x,t)|^2 = \text{sannsynlighetstetthet} ; [g] = \frac{1}{m}$

Normering: $\int_{-\infty}^{\infty} g(x,t) dx = 1$; må gjelde for alle tider t

En eventuell endring i $g(x,t)$ må skyldes en netto strøm, inn eller ut, av sannsynlighet ved x :



$j(x,t) = \text{sannsynlighetsstrøm ved posisjon } x \text{ ved tid } t$

$$[j] = \left[\frac{\text{sanns.}}{\text{tid}} \right] = \frac{1}{s}$$

$\Rightarrow j(x,t) - j(x+dx,t) = \text{netto økning i sannsynlighet pr tidsenhet, ved tid } t, \text{ på intervallet } (x, x+dx)$

Samtidig har vi

$$\frac{\partial g(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial [g(x,t) \cdot dx]}{\partial t} = \frac{\partial g(x,t)}{\partial t} \cdot dx$$

$= \text{økning i sanns. pr tidsenhet, ved tid } t, \text{ på } (x, x+dx)$

Dermed:

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

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

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

Kontinuitetsligning i 1D
for sannsynlighet. Uttrykker
bevaring av sannsynlighet.

Kommentarer:

- I tre dimensjoner er $g(\vec{r}, t)$ sanns. pr volumenhet, med $[g] = 1/m^3$. Da kan sannsynlighet strømme inn og ut av et volumelement i alle tre retninger, og sanns.strømmen blir en vektor $\vec{j}(\vec{r}, t)$ som da er en sanns.strømtektet, dvs sanns.strøm pr flateenhet, med $[j] = \frac{1}{s \cdot m^2}$.

Kont.lign. generaliseres da til

$$\frac{\partial g}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = 0,$$

der $\nabla \cdot \vec{j} (= \text{div } \vec{j}) = \frac{\partial j_x}{\partial x} + \frac{\partial j_y}{\partial y} + \frac{\partial j_z}{\partial z}$

$$\vec{j} = \hat{x} j_x + \hat{y} j_y + \hat{z} j_z$$

- Vi har tilsvarende kont.lign. for ladning i elektrodynamikk, for masse i hydrodynamikk osv.

Det gjenstår å vise at SL faktisk gir sanns.bevarelse, dvs at vi får en lign. på formen (i 1D) $\partial g / \partial t + \partial j / \partial x = 0$, med $g = |\Psi|^2$, fra SL. Da vil vi samtidig få bestemt j .

$$\frac{\partial g}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \Psi^* \Psi \right\} = \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi + \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

$$\text{SL: } i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi \Rightarrow \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right\} \Psi$$

$$\Downarrow$$

$$\left[i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right]^* = \left[\hat{H} \Psi \right]^*$$

$$\Downarrow$$

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \hat{H}^* \Psi^* \Rightarrow \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right\} \Psi^*$$

Setter inn for $\partial \Psi / \partial t$ og $\partial \Psi^* / \partial t$ i $\partial g / \partial t$ (leddene med $V(x)$ kansellerer):

$$\frac{\partial g}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \Psi^* \Psi'' - \frac{i\hbar}{2m} (\Psi^*)'' \Psi$$

Ønsker nå å få høyre side på formen $-\frac{\partial}{\partial x} \{ \dots \}$.

$$\begin{aligned} \text{Har generelt: } [f g' - f' g]' &= f' g' + f g'' - f'' g - f' g' \\ &= f g'' - f'' g \end{aligned}$$

Så med $f = \Psi^*$ og $g = \Psi$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial g}{\partial t} &= \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \Psi^* \Psi' - (\Psi^*)' \Psi \right\} \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{i\hbar}{2m} \Psi^* \Psi' + \left[\frac{i\hbar}{2m} \Psi^* \Psi' \right]^* \right\} \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left\{ 2 \operatorname{Re} \left[\frac{i\hbar}{2m} \Psi^* \Psi' \right] \right\} \\ &= -\frac{\partial}{\partial x} \left\{ \operatorname{Re} \left[\Psi^* \left(\frac{1}{m} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi \right] \right\} \end{aligned}$$

Med andre ord: SL gir bevart sannsynlighet,

• med sannsynlighetsstrøm

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

Merk at $\frac{1}{m} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{1}{m} \hat{p}$ er en hastighetsoperator, og i kombinasjon med $\Psi^* \Psi$, som representerer en tetthet, bør vi få som resultat en strøm, j .

[Som i klassisk fysikk, $j = \rho \cdot v$]

Eks: Stasjonær tilstand $\Psi_n(x,t)$ i 1D boks. $j_n = ?$

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

Derivasjon av denne mhp x endrer ikke på den tids-avhengige delen, og da $\Psi_n^*(x,t) \sim \exp(+iE_n t/\hbar)$, ser vi at det vi skal ta realdelen (Re) av blir rent imaginært. Følgelig blir $j_n = 0$.

Som ventet: Disse stasjonære løsningene er som stående bølger, uten noen netto transport av noe som helst i noen retning.

[Prøv til sammenligning fri partikkel, $\Psi = e^{ikx} e^{-iEt/\hbar}$!]

Usikkerhet og uskarphetsrelasjoner

- Vanlig mål for usikkerhet i en fysisk størrelse x :

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

$$D: x - \langle x \rangle$$

$$SD: (x - \langle x \rangle)^2$$

$$MSD: \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$$

$$RMSD: \sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle}$$

"Forenkling" (Omskiving):

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

$\Rightarrow$

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

RMSD

Forventningsverdier i QM:

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

Tilsvarende for impuls:

$$\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} ; \langle p^n \rangle = \int \Psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^n \Psi dx$$

Det kan vises at

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{1}{2} \hbar$$

Heisenbergs uskarphetsrelasjon

[Se PCH 4.5 for bevis. Litt "kronglete"; bevises ikke her.]

Mer generelt kan det vises at

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{1}{2} \cdot |\langle [\hat{x}, \hat{p}] \rangle|$$

Her har vi på høyre side abs.verdien ($|\dots|$) av
forv.verdien ($\langle \dots \rangle$) av den såkalte kommutatoren
mellom de to QM operatorene $\hat{x}$ og $\hat{p}$:

$$[\hat{x}, \hat{p}] \stackrel{\text{def}}{=} \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}$$

Denne kan vi regne ut ved å la $[\hat{x}, \hat{p}]$ virke på en
tilstand $\Psi(x)$:

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{p}] \Psi(x) &= x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x) - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} x \Psi(x) \\ &= \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi - x \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) \\ &= i \hbar \Psi(x) \end{aligned}$$

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

$$\Rightarrow \Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{1}{2} |\langle i \hbar \rangle| = \frac{1}{2} \hbar$$

Helt generelt har vi altså:

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

Heisenbergs uskarphetsrelasjon for to fysiske størrelser A og B , med QM operatorer $\hat{A}$ og $\hat{B}$.

Merk at hvis A og B har operatorer som

kommuterer, dvs $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, så er

$\Delta A \cdot \Delta B \geq 0$. Dvs, både A og B kan måles helt nøyaktig, samtidig!

Eks: $\Delta x \cdot \Delta p_y = 0$, $\Delta x \cdot \Delta y = 0, \dots$

"Minimum uncertainty wave packet":

Det kan vises at en gaussisk tilstand,

$$\Psi(x, 0) = C \cdot e^{-\alpha(x - \langle x \rangle)^2} e^{i\langle p \rangle x / \hbar},$$

(ved tidspunktet $t=0$) har såkalt minimal usikkerhet, dvs $\Delta x \cdot \Delta p = \frac{1}{2} \hbar$.

[Vi viser dette sammen i øving 2!]

[Og vi bør vel også kunne klare å beregne $\Delta x \cdot \Delta p$ for partikkel i boks...]

Tidsutvikling av forventningsverdier

I all slags fysikk er vi ofte interessert i å finne ut hvordan ulike fysiske størrelser endrer seg med tiden.

Vi skal se at QM forventningsverdier "styres" av ligninger på samme form som tilsvarende klassiske bevegelsesligninger.

Fra SL følger det at

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

(så lenge $\hat{A}$ ikke avhenger eksplisitt av tiden t).

Dermed: Hvis $[\hat{H}, \hat{A}] = 0$ ($\hat{A}$ kommuterer med $\hat{H}$), er $\langle A \rangle = \text{konstant}$, dvs $\hat{A}$ er en bevegelseskonstant.

Eks: Fri partikkel, $\Psi(x) = e^{ipx/\hbar}$; $\frac{d}{dt} \langle p \rangle = ?$

Løsn: Her er $\hat{H} = \hat{p}^2/2m$, slik at

$$[\hat{H}, \hat{p}] = 0,$$

dvs $\langle p \rangle = p = \text{konstant}$

Sammenhengen mellom klassisk mekanikk og QM:

Ehrenfests teorem

Klassiske bevegelseslign. i 1D:

$$\frac{dx}{dt} = p/m ; \quad \frac{dp}{dt} = -\partial V / \partial x \quad (F = -\frac{\partial V}{\partial x})$$

Forventer noe lignende for $\langle x \rangle$ og $\langle p \rangle$ i QM!

La oss se!

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x, t)$$

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, x] \rangle = \frac{i}{2m\hbar} \langle [\hat{p}^2, x] \rangle \quad (\text{da } [V, x] = 0)$$

$$\begin{aligned} [\hat{p}^2, x] &= \hat{p}^2 x - x \hat{p}^2 = \hat{p} (\hat{p} x) - (x \hat{p}) \hat{p} \\ &= \hat{p} (\hat{p} x) - \underbrace{(\hat{p} x) \hat{p} + (\hat{p} x) \hat{p}}_{=0} - (x \hat{p}) \hat{p} \\ &= \hat{p} \underbrace{(\hat{p} x - x \hat{p})}_{=-i\hbar} + \underbrace{(\hat{p} x - x \hat{p}) \hat{p}}_{=-i\hbar} \\ &= -2i\hbar \hat{p} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \underline{\frac{d}{dt} \langle x \rangle} = \frac{i}{2m\hbar} \cdot (-2i\hbar) \cdot \langle \hat{p} \rangle = \underline{\langle p \rangle / m}$$

$$\frac{d}{dt} \langle p \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{p}] \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [V, \hat{p}] \rangle \quad (\text{da } [\hat{p}^2/2m, \hat{p}] = 0) \quad (56)$$

$$\begin{aligned} [V, \hat{p}] \psi &= (V \hat{p} - \hat{p} V) \psi \\ &= \frac{\hbar}{i} \left(V \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} V \right) \psi \\ &= \frac{\hbar}{i} \left(V \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial V}{\partial x} \psi - V \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \\ &= -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial V}{\partial x} \psi \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \underline{\frac{d}{dt} \langle p \rangle} = \frac{i}{\hbar} \cdot \left(-\frac{\hbar}{i} \right) \langle \frac{\partial V}{\partial x} \rangle = \underline{\langle -\frac{\partial V}{\partial x} \rangle}$$

Oppsummert:

$$1D : \quad \frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{\langle p \rangle}{m}, \quad \frac{d}{dt} \langle p \rangle = \langle -\frac{\partial V}{\partial x} \rangle$$

$$3D : \quad \frac{d}{dt} \langle \vec{r} \rangle = \frac{\langle \vec{p} \rangle}{m}, \quad \frac{d}{dt} \langle \vec{p} \rangle = \langle -\nabla V \rangle$$

Ehrenfests
teorem

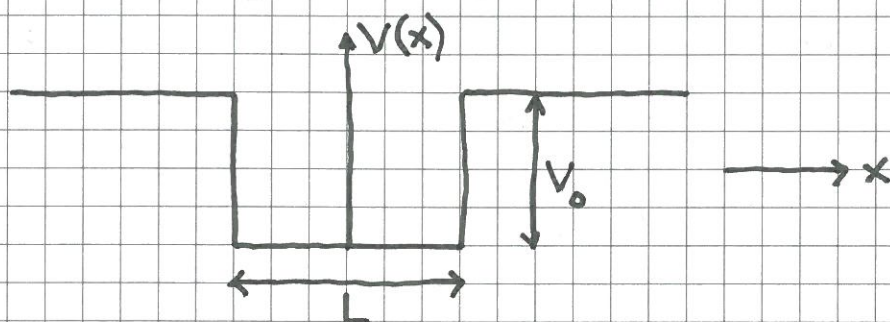
Med andre ord: Bevegelseslign. for QM foru.verdier
av posisjon og impuls har samme form som de
tilsvarende klassiske bevegelsesligningene.

Flere konkrete potensialer i 1D og 3D

- Vi har nå et slags grunnlag på plass: Vi har analysert "partikkel i boks" ("∞ dyp potensialbrønn") i 1D, og brukt dette enkle eksemplet til å belyse diverse grunnleggende, generelle postulater og resultater: Foru.verdier, ortogonalitet, superposisjon, grensebetingelser, sannsynlighetsstrøm etc.

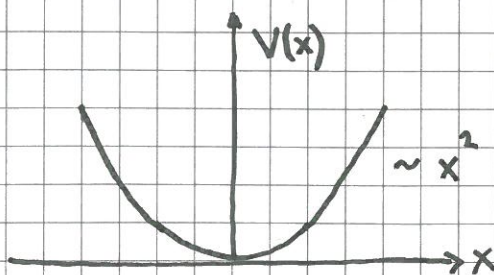
Neste oppgave blir å se på noen flere viktige eksempler:

- Endelig potensialbrønn (1D)



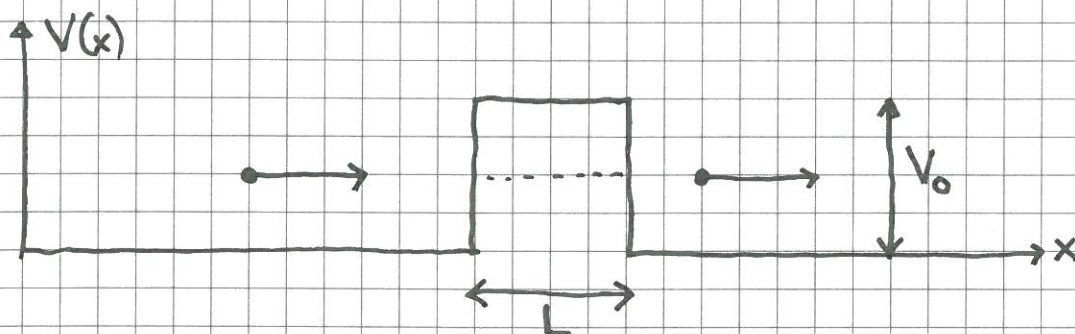
Relevans: Halvledere. Laserteknologi.

- Harmonisk oscillator (1D)



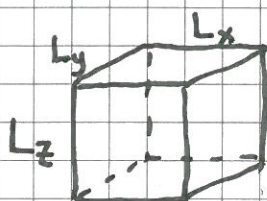
Relevans: Vibrasjoner i molekyler og faste stoffer

- Tunneleffekt (1D)



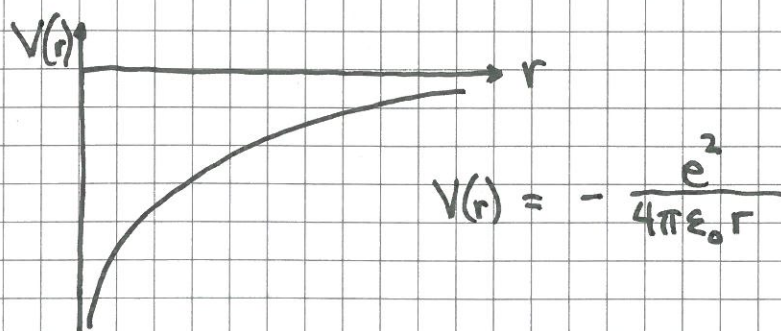
Relevans: Feltemisjon. STM. Radioaktivitet.
Fusjon. Spredningeksperimenter.

- Partikkel i boks (3D)



Relevans: Ideelle gasser. Faststoff-fysikk. Nanoteknologi

- Coulombpotensialet



Relevans: H-atomet. Andre atomer. Molekyler. Faste stoffer
(Krystaller)