Merknader:

- Symmetri:

  Symmetrisk $V(x)$ gir symmetrisk $|\psi_n(x)|^2$, dvs enten symm. eller antisymm. $\psi_n(x)$.

  Her: $\psi_n(x)$ symm./antisymm. for odde/like n.

- Nullpunkter:

  Antall nullpunkter øker med energien, fra $n=0$ i grunntilstanden (=tilst. med lavest energi) og oppover, for bundne tilstander i en dimensjon.

- Grensebetingelser:

  $\psi(x)$ er kontinuerlig overalt; det gir kontinuerlig sannsynlighetstetthet $|\psi(x)|^2$.

  $\psi' = d\psi/dx$ er også kontinuerlig overalt, unntatt der $V(x)$ gjør et uendelig sprang. Da har $\psi(x)$ et knekkpunkt, ψ' er diskontinuerlig, og ψ'' går mot uendelig, i tråd med TUSL,

  $$\psi''/\psi = \frac{2m}{\hbar^2}(V-E)$$

  Her: Knekkpunkter i $x=0$ og $x=L$.

- Krumningsegenskaper:

  $E>V \Rightarrow \psi''/\psi < 0 \Rightarrow$ krumning mot x-aksen

  $E<V \Rightarrow \psi''/\psi > 0 \Rightarrow$ —"— bort fra x-aksen

  Kvantemekanikk tillater at partikkelen befinner seg i et klassisk forbudt område, med $E<V$. (Dog ikke hvis $V \to \infty$.)

- Ortogonalitet:

$\vec{V}_1$ og $\vec{V}_2$ er ortogonale hvis $\vec{V}_1 \cdot \vec{V}_2 = 0$.
$\vec{V}_1$ og $\vec{V}_2$ er normerte hvis $\vec{V}_1 \cdot \vec{V}_1 = \vec{V}_2 \cdot \vec{V}_2 = 1$.

Kronecker-delta:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0 & ; \ i \neq j \\ 1 & ; \ i = j \end{cases}$$

$\Rightarrow \vec{V}_i \cdot \vec{V}_j = \delta_{ij}$ for <u>ortonormert</u> vektorsett

$\{\vec{V}_i\} = \{\vec{V}_1, \vec{V}_2, \vec{V}_3, \ldots\}$

Tilsvarende er funksjonssettet $\{\psi_n(x)\}$; $n = 1, 2, 3, \ldots$ ortonormert dersom

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

Løsninger $\psi_n(x)$ av TUSL er <u>generelt</u> ortogonale.

Eks: Partikkel i boks, $\psi_n(x) = \sqrt{2/L}\, \sin(n\pi x/L)$

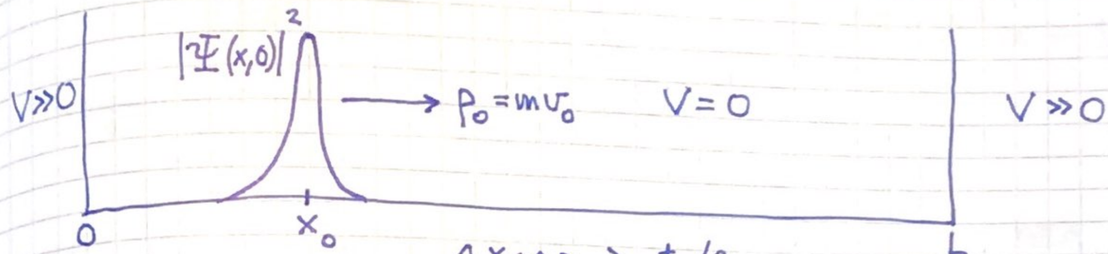
$$\sin\alpha \cdot \sin\beta = \frac{1}{2}\left[\cos(\alpha-\beta) - \cos(\alpha+\beta)\right]$$

$$\Rightarrow \int_0^L \psi_n^*(x)\, \psi_k(x)\, dx = \frac{1}{L}\int_0^L \left[\cos\frac{(n-k)\pi x}{L} - \cos\frac{(n+k)\pi x}{L}\right] dx$$

$= 0$ hvis $n \neq k$ og 1 hvis $n = k$.

Ikke-stasjonære løsninger av SL:

Starttilstand $\Psi(x,0)$ og tidsutviklingen $\Psi(x,t)$



$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2$$

$$\Psi(x,0) = \sum_n c_n \psi_n(x)$$

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

$$
\begin{aligned}
1 &= \int \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)\,dx \\
&= \sum_n \sum_j c_n^* c_j\, e^{i(E_n - E_j)t/\hbar} \cdot \underbrace{\int \psi_n^*(x)\psi_j(x)\,dx}_{=\delta_{nj}} \\
&= \sum_n |c_n|^2 = \sum_n P_n
\end{aligned}
$$

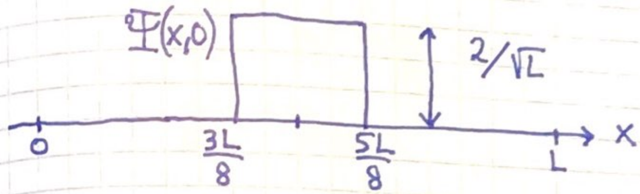
$P_n = |c_n|^2$ = sanns. for å måle at partikkelen har energi E_n

Beregning av c_n når $\Psi(x,0)$ er gitt/kjent:

$$\int \psi_n^* \Psi(x,0)\,dx = \sum_j c_j \int \psi_n^* \psi_j\,dx = \sum_j c_j \delta_{nj} = c_n$$

dvs $\quad c_n = \int \psi_n^*(x)\Psi(x,0)\,dx$

Eks: Hva er P_1 og P_2 når $\Psi(x,0)$ er som i fig. for partikkel i boks?



$$\left(\int |\Psi(x,0)|^2 dx = 1\right)$$

Løsn: $$c_n = \int \psi_n^*(x)\,\Psi(x,0)\,dx = \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \frac{2}{\sqrt{L}} \cdot \int_{3L/8}^{5L/8} \sin\frac{n\pi x}{L}\,dx$$

$$= \frac{2\sqrt{2}}{L} \cdot \frac{L}{n\pi}\left\{\cos\frac{3n\pi}{8} - \cos\frac{5n\pi}{8}\right\}$$

$\Rightarrow P_1 = |c_1|^2 = 0.475 \quad ; \quad P_2 = 0$

Siden $\Psi(x,0)$ her er symmetrisk på $\left(\frac{3L}{8}, \frac{5L}{8}\right)$ mens $\psi_2(x), \psi_4(x), \ldots$ er antisymmetriske, må $c_2 = c_4 = \ldots = 0$.

Postulatene

Empirisk grunnlag i klassisk mek.: Newtons lover

——— " ——— kvantemek. : Følgende postulater

A. Operatorpostulat

Målbare størrelser i klassisk mek. representeres i QM av lineære operatorer som konstrueres ved at impulskoordinater p_j erstattes av operatorer

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

der q_j = tilhørende posisjonskoordinat

Eks: Kinetisk energi

Klassisk: $K = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{1}{2} m (p/m)^2 = \frac{p^2}{2m}$

$$p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$$

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

$$\hat{p}^2 = \left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}\right)^2$$

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

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

B. Tilstandspostulat

Bølgefunksjonen $\Psi(\vec{r}, t)$ beskriver partikkelens tilstand fullstendig og er bestemt av

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

med

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

C. Forventningsverdipostulat

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

$$\langle F \rangle = \int \Psi^* \hat{F} \Psi \, dx \qquad (1D)$$

når Ψ er normert, $\int |\Psi|^2 dx = 1$.

Vi kaller $\langle F \rangle$ forventningsverdien av F.

Eks: Partikkel i boks i stasjonær tilstand

$$\Psi_n(x,t) = \psi_n(x) \exp(-iE_n t/\hbar)$$

$$\langle x \rangle = \int_0^L \Psi_n^*(x,t)\, x \, \Psi_n(x,t)\, dx = \frac{L}{2} \quad (\text{pga symmetri})$$

$$\langle p \rangle = \int_0^L \Psi_n^*(x,t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi_n(x,t)\, dx = 0 \quad (\text{pga symmetri})$$

$$\Big[\langle x \rangle = \frac{2}{L} \int_0^L x \sin^2 \frac{n\pi x}{L}\, dx = \ldots = \frac{L}{2}$$

$$\langle p \rangle \sim \int_0^L \sin \frac{n\pi x}{L} \cos \frac{n\pi x}{L}\, dx = 0 \Big]$$

D. Målepostulat

De mulige måleresultatene ved måling av F er egenverdiene f_j gitt ved

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

der Ψ_j er egenfunksjoner til $\hat{F}$. Hvis F måles, med resultat f_j, havner partikkelen i egentilstanden Ψ_j. Dvs, målingen påvirker partikkelen!

Eks: Anta at en partikkel er preparert i starttilstanden

$$\Psi(x,0) = c_1 \psi_1(x) + c_2 \psi_2(x) \qquad \text{ved tid } t=0.$$

Måling av partikkelens energi E vil da gi E_1 eller E_2, med sanns. hhv. $|c_1|^2$ og $|c_2|^2$.
Anta at vi måler $E = E_2$ ved tid $t_1 > 0$.
Da beskrives part. av

$$\Psi_2(x,t) = \psi_2(x)\, e^{-iE_2 t/\hbar}$$

fra og med $t = t_1$, og en ny energimåling vil med sikkerhet gi resultatet $E = E_2$.