

Dette notatet leses med fordel parallelt med kapittel 2 i Hemmer.

TILLEGG 2

2. Fundamentale prinsipper

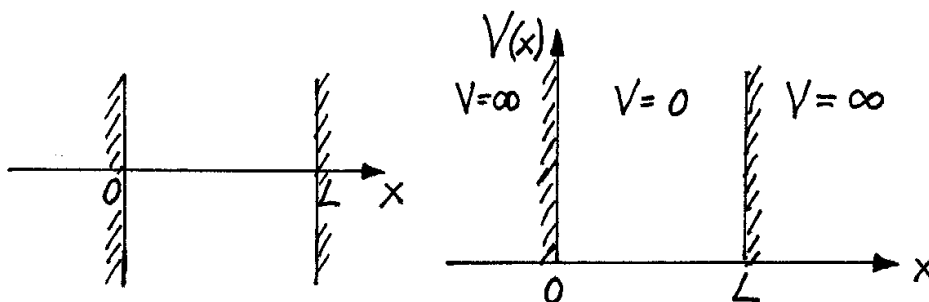
Kapittel 2 i dette kurset — Fundamentale prinsipper — dekkes av Tillegg 2, som du nå leser, sammen med kapittel 2 i Hemmers bok. I dette kapitlet formuleres grunnprinsippene i den kvantemekaniske teorien, og endel begreper og matematiske hjelpemidler som står sentralt blir introdusert.

Avsnittene merket med *** er ikke pensum i begynnerkursene (TFY4215 og FY1006).

Mye av dette stoffet vil i første omgang virke abstrakt og være vanskelig å fordøye. For å gjøre det mer konkret, og for å ha flere “knagger å henge de abstrakte begrepene på”, starter vi med å gjennomgå det aller enkleste eksemplet på et kvantemekanisk system, nemlig en partikkel som kan bevege seg i en uendelig dyp endimensjonal potensialbrønn, også kalt partikkel i boks. Dette er ikke bare et veldig enkelt, men også et veldig viktig eksempel i kvantemekanikk. Derfor vil du ha stort utbytte av å studere det grundig.

2.1 Partikkel i boks

2.1.a Presisering av problemet



to ugjennomtrengelige vegger

potensialdiagram

Dette systemet består av en partikkel med masse m som beveger seg mellom to ugjennomtrengelige vegger. Potensialet (den potensielle energien) er lik null mellom veggene og uendelig ellers:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{for } 0 < x < L, \\ \infty & \text{for } x < 0 \text{ og } x > L. \end{cases}$$

For dette såkalte endimensjonale bokspotensialet neglisjerer vi bevegelsen i y - og z -retningene. Det klassiske uttrykket for energien er da

$$E = K + V = \frac{p_x^2}{2m} + V(x).$$

Ifølge Schrödingers oppskrift (se avsnitt 1.7.a i Tillegg 1) svarer dette klassiske energiuttrykket til en energioperator (Hamilton-operator)

$$\widehat{H} = \widehat{K} + V(x) = \frac{\widehat{p}_x^2}{2m} + V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x).$$

Vi ønsker å finne alle de **stasjonære løsningene** av Schrödingerligningen,

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = \widehat{H} \Psi(x,t)} \quad \left(\begin{array}{l} \text{den tidsavhengige} \\ \text{Schrödingerligningen} \end{array} \right), \quad (\text{T2.1})$$

dvs alle løsninger på formen

$$\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}. \quad (\text{T2.2})$$

Innsetting av (T2.2) i (T2.1) gir da følgende ligning for den **romlige bølgefunksjonen** $\psi(x)$:

$$\boxed{\begin{array}{l} \widehat{H}\psi(x) = E\psi(x), \quad \text{eller} \\ \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi(x) = E\psi(x). \end{array}} \quad (\text{TUSL}) \quad (\text{T2.3})$$

Dette er **Schrödingers tidsuavhengige ligning** (TUSL) i én dimensjon.

Vi ser her at den romlige delen $\psi(x)$ av den stasjonære løsningen (T2.1) må være en egenfunksjon til Hamilton-operatoren \widehat{H} . Det gjelder altså å finne *alle* slike **energieigenfunksjoner**.

For $x < 0$ og for $x > L$, hvor potensialet er uendelig, må disse energieigenfunksjonene alle være lik null. (Det kan vises at dette følger fra TUSL.) Senere skal vi vise vha TUSL at de også må være kontinuerlige over alt.

2.1.b Energikvantisering

For $0 < x < L$ er potensialet lik null, og TUSL tar formen

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

Her er ψ'' **krumningen** av ψ . Den *relative* krumningen er altså

$$\psi''/\psi = -\frac{2mE}{\hbar^2}.$$

For $E < 0$ er altså $\psi''/\psi > 0$, og ψ må krumme *utover* fra x -aksen (egentlig som en lineærkombinasjon av $\sinh \kappa x$ og $\cosh \kappa x$, der $\kappa = \sqrt{-2mE/\hbar^2}$). Men da er det umulig å oppfylle kontinuitetsbetingelsene $\psi(0) = \psi(L) = 0$. Så negative energier er utelukket, slik vi også venter ut fra klassisk mekanikk.

For $E = 0$ er $\psi'' = 0$, slik at $\psi(x) = Ax + B$. Kontinuitetskravet $\psi(0) = \psi(L) = 0$ gir da $\psi(x) = 0$, som selvsagt er ubrukbar som bølgefunksjon (jf sannsynlighetstolkningen). Så her får vi oss en overraskelse i forhold til klassisk mekanikk: Kvantemekanikken (Schrödingerligningen) tillater ikke at partikkelen mellom de to veggene har null (kinetisk) energi.

For $E > 0$ tar TUSL formen

$$\psi'' = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi \equiv -k^2 \psi, \quad k \equiv \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}.$$

Den generelle løsningen er nå sinusformet med bølgetall k :

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx \quad \left(E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right).$$

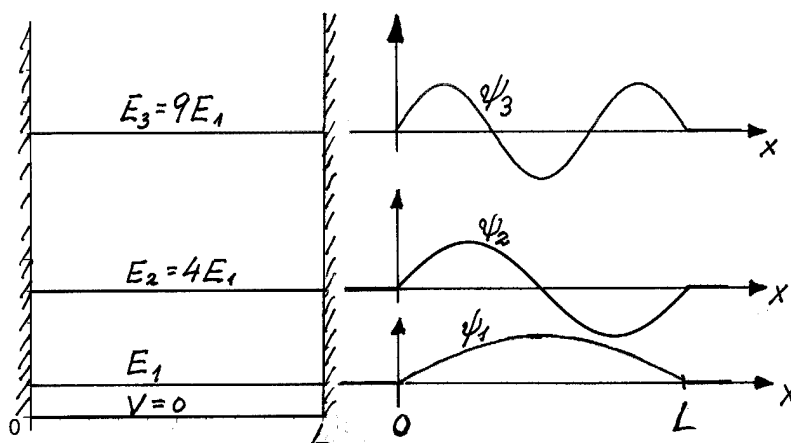
Kontinuitetskravene gir her

$$\psi(0) = B = 0 \quad \text{og} \quad \psi(L) = A \sin kL = 0.$$

(Her må A være forskjellig fra null.) Betingelsen $\sin kL = 0$ betyr at kL er et helt multiplum av π , og innebærer at $\psi(x)$ inne i boksen består av et helt antall av halve bølgelender (halvperioder av sinusen). Vi kommer altså fram til det overraskende resultatet at bølgetallet og energien er **kvantisert**:

$$k_n = n \frac{\pi}{L}, \quad E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2, \quad n = 1, 2, \dots \quad (\text{T2.4})$$

Energikvantisering er karakteristisk for alle bundne tilstander. I dette eksemplet får vi demonstrert at kvantiseringen henger sammen med at Schrödingerligningen er en bølgeligning.



Grunntilstanden (pr definisjon tilstanden med lavest energi) er som vi ser en halvbølge, med energi

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}.$$

Lavere energi enn dette kan ikke partikkelen mellom de to veggene ha. Vi legger merke til at denne minste-energien øker med avtagende masse, og at den også øker med avtagende L . Jo mindre plass vi gir partikkelen, desto større energi er den altså *nødt til å ha*, pga bølgenaturen. Dette vil jeg gjerne kalle “kvantevillskap”. — Jo mindre buret er, desto villere blir tigersen, og tigergutten (som har minst masse) er den vildeste.

2.1.c Nullpunkter, symmetri- og krumningsegenskaper

Vi ser at antallet nullpunkter utenom de to for $x = 0$ og $x = L$ er $n - 1$; grunntilstanden er fri for nullpunkter, 1. eksiterte tilstand har ett, osv. Dette er karakteristisk for bundne tilstander i endimensjonale potensialer. For bokspotensialet er det lett å forstå på bakgrunn av ligningen for den relative krumningen,

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

Økende (kinetisk) energi betyr mer negativ ψ''/ψ , dvs raskere *relativ krumning*, og dermed flere nullpunkter.

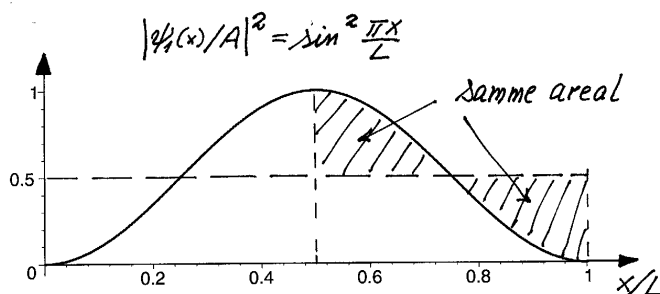
Vi kan merke oss at bokspotensialet er symmetrisk omkring midtpunktet av boksen, $x = L/2$. Dette er i realiteten bakgrunnen for at $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4$ osv er henholdsvis symmetrisk, antisymmetrisk, symmetrisk, antisymmetrisk osv med hensyn på midtpunktet. Senere skal vi se at dette er en generell egenskap for bundne energiegentilstander i et symmetrisk endimensjonalt potensial.

2.1.d Normering, sannsynlighetstetthet

Dersom $|\psi(x)|^2$ skal være **sannsynlighetstettheten**, slik at $|\psi(x)|^2 dx$ er sannsynligheten for å finne partikkelen i intervallet $[x, x + dx]$, må

$$\boxed{\int_0^L |\psi(x)|^2 dx = 1.} \quad \left(\begin{array}{l} \text{normerings-} \\ \text{betingelsen} \end{array} \right), \quad (\text{T2.5})$$

Figuren viser $|\psi_1(x)/A|^2 = \sin^2 \pi x/L = \frac{1}{2}(1 - \cos 2\pi x/L)$.



sannsynlighetstettheten for grunntilstanden

Her ser vi at grunntilstanden inneholder én periode av kosinusen, som dermed ikke vil bidra i normeringsintegralet. Det samme gjelder for 1. eksiterte tilstand, som inneholder to perioder

av kosinusen, osv. Vi kan altså konstatere at middelverdien over boksen av $\sin^2 n\pi x/L$ er lik $\frac{1}{2}$, slik det er indikert i figuren. Normeringsbetingelsen gir derfor

$$1 = |A|^2 \int_0^L \sin^2 \frac{n\pi x}{L} dx = |A|^2 \cdot \frac{1}{2} \cdot L \quad \implies \quad |A| = \sqrt{\frac{2}{L}}.$$

Vi oppnår da en normert bølgefunksjon ved å sette

$$A = e^{i\beta} \sqrt{\frac{2}{L}},$$

der fasen β er fritt valgbar. Et enkelt valg er $\beta = 0$. Ved normering av en bølgefunksjon har vi alltid frihet til å gjøre et fasevalg av denne typen. En slik faktor $e^{i\beta}$ i bølgefunksjonen er nemlig uten fysisk betydning; den faller bort ved beregning av slike størrelser som sannsynlighetstettheten $|\psi_n(x)|^2$ og forventningsverdier som

$$\langle x^k \rangle_{\psi_n} = \int x^k |\psi_n(x)|^2 dx.$$

Med valget ovenfor er de normerte stasjonære løsningene og energiegenfunksjonene for boksen

$$\Psi_n(x, t) = \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}, \quad \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin k_n x, \quad k_n = \frac{n\pi}{L}, \quad E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (\text{T2.6})$$

Merk at normeringskonstanten ble bestemt ved hjelp av normeringsbetingelsen; egenverdiligningen bestemmer *ikke* normeringen.

En liten oppgave: Som vi har sett, er energiegenfunksjonene vekselvis symmetriske og antisymmetriske mhp “symmetri-punktet” i boksen, som er midtpunktet $x = L/2$. Symmetri-egenskapene til egenfunksjonene ψ_1 , ψ_2 og ψ_3 er åpenbare i diagrammene side 3, men om du velger et nytt koordinatsystem, med origo ($x' = 0$) midt i boksen, vil symmetriegenskapene også komme tydelig fram i uttrykkene $\psi_1(x')$, $\psi_2(x')$ og $\psi_3(x')$ for de tre egenfunksjonene.

a. Medfører skiftet av koordinatsystem noen endring av *bølgetallene* k_1 , k_2 og k_3 for de tre egenfunksjonene?

b. Finn uttrykkene for $\psi_1(x')$, $\psi_2(x')$ og $\psi_3(x')$, og overbevis deg om at symmetriegenskapene kommer fram slik de skal. [Hint: $\cos kx'$ og $\sin kx'$ er hhvis symmetrisk og antisymmetrisk.]

2.1.e Ortogonalitet

Det er lett å se at f.eks $\psi_1(x)$ og $\psi_2(x)$ er **ortogonale**. Med dette mener vi at

$$\langle \psi_1, \psi_2 \rangle \equiv \int_0^L \psi_1^*(x) \psi_2(x) dx = 0.$$

Vi skal senere se at dette kan generaliseres:

$$\langle \psi_n, \psi_k \rangle \equiv \int_0^L \psi_n^*(x) \psi_k(x) dx = \begin{cases} 1 & \text{for } n = k \\ 0 & \text{for } n \neq k \end{cases} \equiv \delta_{nk}. \quad (\text{T2.7})$$

Når funksjonene på denne måten er både normerte og ortogonale, sier vi at de utgjør et **ortonormert funksjonssett**.

2.1.f Diskusjon

Klassisk vil en partikkel med energi E sprette fram og tilbake mellom de to harde veggene med hastighet $v_x = \pm\sqrt{2E/m}$. Det er en slående kontrast mellom en slik klassisk bevegelsestilstand og egenskapene til de stasjonære tilstandene vi har sett på her. Vi merker oss at sannsynlighetstetthetene for de stasjonære tilstandene,

$$|\Psi_n(x, t)|^2 = |\psi_n(x)|^2, \quad (\text{T2.8})$$

er tidsuavhengige, og dessuten symmetriske med hensyn på midtpunktet i boksen. Dette innebærer at forventningsverdien av posisjonen x er lik $L/2$. Senere skal vi se at forventningsverdien av p_x (og dermed av v_x) er lik null for alle de stasjonære tilstandene. Så det er ikke mye ”bevegelse å se” i disse tilstandene.

Da må vi jo spørre oss om kvantemeknikken bare beskriver tilstander der det ikke *skjer* noe? Svaret er nei. De stasjonære løsningene er nemlig ikke de eneste løsningene av Schrödingerligningen. Siden denne ligningen er lineær og homogen, er det lett å overbevise seg om at

Dersom $\Psi_a(x, t)$ og $\Psi_b(x, t)$ er to løsninger av den tidsavhengige Schrödingerligningen, så er også lineærkombinasjonen

$$\Psi(x, t) = c_1\Psi_a(x, t) + c_2\Psi_b(x, t)$$

en løsning. Her er c_a og c_b vilkårlige komplekse koeffisienter.

$\left(\begin{array}{c} \text{superposisjons-} \\ \text{prinsippet} \end{array} \right) \quad (\text{T2.9})$

Den mest generelle tilstanden for partikkelen i boks er derfor

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(x). \quad (\text{T2.10})$$

Siden denne bølgefunksjonen ikke har formen (T2.2), beskriver den en **ikke-stasjonær** tilstand. Ved hjelp av ortonormeringsrelasjonen (T2.7) kan det vises at normeringsbetingelsen for denne ikke-stasjonære tilstanden er ¹

$$1 = \int \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) dx = \dots = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2. \quad (\text{T2.11})$$

For en slik ikke-stasjonær tilstand vil forventningsverdier av posisjon og impuls avhenge av tiden, så det *skjer noe* i en slik tilstand.

Matlab-programmet “box_non_stationary.m” viser et eksempel, med en 50/50 superposisjon av de stasjonære løsningene for grunntilstanden og en av de eksiterte tilstandene:

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_1(x, t) + \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_{n2}(x, t).$$

¹Produktet av de to summene $\Psi(x, t)$ og $\Psi^*(x, t)$ inneholder en rekke kryssledd, som gir null ved integrasjonen, på grunn av ortogonaliteten. Integralene over de øvrige leddene, kvadratleddene, inneholder normeringsintegralene.

Kvantetallet n_2 kan du selv velge ved en prøvekjøring av dette programmet. Animasjonen viser hvordan sannsynligheten $|\Psi(x, t)|^2$ samt forventningsverdien $\langle x \rangle$ av posisjonen “flytter på seg” som funksjoner av tiden.

Med en superposisjon av *flere* stasjonære tilstander (med passende valg av koeffisientene c_n) går det også an å konstruere en bølgefunksjon $\Psi(x, t)$ med form av en bølgepakke som etterligner den klassiske bevegelsen til en partikkel som spretter fram og tilbake mellom veggene. En slik animasjon finner du i Matlab-programmet “wavepacket_in_box”.

Noe av moralen i denne diskusjonen er: Siden den mest generelle kvantemekaniske tilstanden er en superposisjon av stasjonære løsninger, er utgangspunktet for en kvantemekanisk behandling av et system å finne alle mulige energiegenfunksjoner (og dermed alle de stasjonære løsningene) for systemet.

Et lite poeng til: Mange stusser over nullpunktene i bølgefunksjonene og sannsynlighetstetthetene for de stasjonære tilstandene. Første eksiterte tilstand har f.eks et nullpunkt midt i boksen: — “Hvordan kan partikkelen komme seg fra venstre til høyre halvdel når $\Psi_2(x, t)$ og $|\Psi_2(x, t)|^2$ er lik null midt i?” — Svar: Med omskrivingen $\sin k_2 x = (e^{ik_2 x} - e^{-ik_2 x})/2i$ ser vi at den stasjonære tilstanden Ψ_2 kan skrives som en “50/50” superposisjon av to de Broglie-bølger:

$$\Psi_2(x, t) = \frac{\sqrt{2/L}}{2i} \left(e^{i(k_2 x - E_2 t/\hbar)} - e^{i(-k_2 x - E_2 t/\hbar)} \right).$$

Dette betyr at nullpunktene skyldes destruktiv interferens mellom de to de Broglie-bølgene. Disse nullpunktene er altså en følge av bølgenaturen, og er like naturlige som de vi fant i dobbeltspalt-eksperimentet.

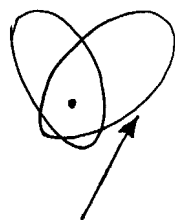
2.2 Grunnprinsippene (Hemmer 2.1)

Etter innledningskapitlet og eksemplet med partikkel i boks skal vi nå se på hvordan en kan formulere et sett med grunnleggende postulater som danner fundamentet for den kvantemekaniske teorien, analogt med at Newtons lover er “grunnmuren” i klassisk mekanikk. Hvilke postulater en velger, og hvordan disse formuleres, er til en viss grad en smakssak. I dette kurset følger vi Hemmer, som gir en fin presentasjon av de fire postulatene. Les denne først. Her bare noen kommentarer:

2.2.a Postulat A (Operator-postulatet)

Når vi skal prøve å forstå kvantefysikk er det viktig at vi lærer oss å skille mellom det *fysiske systemet* vi betrakter og de størrelsene som vi kan observere for dette (systemets **observable**) på den ene siden — og på den andre siden de begrepene og matematiske hjelpemidlene vi bruker i den **kvantemekaniske teorien**.

Fysisk system:

observabel F

Kvantemekanisk teori:

lineær operator \hat{F} 

Operatorpostulatet sier at

Til hver observabel fysisk størrelse F svarer det i kvantemekanisk teori en lineær operator \hat{F} .

(T2.12)

I dette kurset bruker vi den såkalte **posisjonsrom-formuleringen** av kvantemekanikk. For én enkelt partikkel med masse m som beveger seg i et potensial V postulerer vi i denne formuleringen at sammenhengen mellom observable og operatører er som følger:

Fysisk observabel

matematisk operator

 x, y, z $\hat{x} = x$ osv p_x $\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ x^2 x^2 $K_x = \frac{p_x^2}{2m}$ $\hat{K}_x = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ $E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r})$ $\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r})$ $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ $\hat{\mathbf{L}} = \mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}} = \mathbf{r} \times \frac{\hbar}{i} \nabla$ $L_z = xp_y - yp_x$ $\hat{L}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x$

Som demonstrert ovenfor er oppskriften for å finne både Hamilton-operatoren og operatoren for dreieimpuls som følger: Uttrykk den klassiske observabelen ved posisjons- og impulsvariable. Erstatt så impulsvariablene med de kvantemekaniske impulsoperatorene.

Denne oppskriften bruker vi også for mer kompliserte systemer, hvor både energien og enkelte andre observable vil være funksjoner av flere posisjons- og impulsvariable; se 2.1 i Hemmer. (For ladete partikler i magnetfelt må disse oppskriftene modifiseres.)

Hvordan disse kvantemekaniske operatorene *brukes*, vil bli klart etter hvert. Noen av dem har vi allerede sett i aksjon. I kapittel 1 så vi f.eks at de Broglie-bølgen var en egenfunksjon til impulsoperatoren \hat{p}_x . Og i avsnittet om partikkel i boks var jo både \hat{K}_x og den endimensjonale utgaven av Hamilton-operatoren \hat{H} i bruk.

En liten oppgave: Hvilket fysisk system beskrives av Hamilton-operatoren

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_{\mathbf{r}_e}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_p}\nabla_{\mathbf{r}_p}^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p|},$$

(der m_e og m_p er massene til hhvis elektronet og protonet)? Hva er $\nabla_{\mathbf{r}_e}^2$ uttrykt ved komponentene x_e , y_e og z_e av posisjonsvektoren \mathbf{r}_e ?

2.2.b Postulat B (Tilstandspostulatet – om bølgefunksjon og bølge ligning)

Tilstanden til et system er (så) fullstendig (som mulig) beskrevet ved systemets bølgefunksjon $\Psi(q_n, t)$. Dennes tidsutvikling bestemmes av Schrödingerligningen,

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

der \widehat{H} er systemets Hamilton-operator.

(T2.13)

Schrödingerligningen spiller altså rollen som kvantemekanisk bevegelsesligning. Denne ligningen bestemmer $\Psi(q_n, t)$ entydig når bølgefunksjonen $\Psi(q_n, t_0)$ er kjent ved et begynnelses-tidspunkt t_0 . Som vi ser inngår Ψ lineært og i begge leddene i ligningen, som altså er lineær og homogen. Fra dette følger superposisjonsprinsippet; jf (T2.9).

Fra dette postulatet følger det at tilstanden til et system er fullstendig fastlagt dersom vi kjenner bølgefunksjonen. Både her og i annen kvantemekanisk litteratur kalles derfor bølgefunksjonen ofte for “tilstanden”. Vi kan f.eks finne på å si slike ting som: “Anta at systemet ved $t = 0$ er preparert i tilstanden $\Psi(\mathbf{r}, 0)$ ”.

I dette postulatet ligger det også at det ikke er mulig å skaffe seg mer informasjon om det fysiske systemet enn den som ligger i bølgefunksjonen. Hvordan denne informasjonen kan hentes ut vil bli klart etter hvert; se bl.a neste postulat.

2.2.c Postulat C (Forventningsverdi-postulatet)

Når vi gjør et stort antall målinger av en observabel F på et system som foran hver måling er preparert slik at det er i en tilstand $\Psi(q_1, q_2, \dots, q_n, t)$, så vil middelveiden \bar{F} nærme seg den teoretiske forventningsverdien

$$\langle F \rangle_\Psi = \int \Psi^* \widehat{F} \Psi d\tau,$$

der $d\tau = dq_1 dq_2 \dots dq_n$ og integrasjonen går over det aktuelle variasjonsområdet for disse variablene.

(T2.14)

Vi har her forutsatt at bølgefunksjonen er normert: $\int |\Psi|^2 d\tau = 1$. I stedet for å gjenta målingene mange ganger kan vi eventuelt måle på et stort antall identisk preparerte systemer. I begge tilfeller sier vi at målingene gjøres på et **ensemble** av identisk preparerte systemer.

Legg ellers merke til at plasseringen av operatoren \hat{F} generelt er viktig; i integranden ovenfor virker den på faktoren Ψ .

Som et eksempel kan vi la observabelen F være posisjonskoordinaten x . Forventningsverdien av denne er da ifølge postulatet

$$\langle x \rangle_{\Psi} = \int \Psi^* x \Psi d\tau = \int x |\Psi|^2 d\tau.$$

Dette innebærer at $|\Psi|^2$ er sannsynlighetstettheten i posisjonsrommet, i tråd med Borns **sannsynlighetstolkning av bølgefunksjonen**. Sistnevnte er altså inneholdt i forventningsverdipostulatet.

Forventningsverdien av aktuelle fysiske observable er *noe* av den informasjonen som kan hentes ut fra systemets bølgefunksjon, men slett ikke all. Preparerer vi f.eks boks-partikkelen i en av de stasjonære tilstandene $\Psi_n(x, t)$, vil tallet

$$\langle x \rangle = \int_0^L x |\Psi_n(x, t)|^2 dx = \int_0^L x |\psi_n(x)|^2 dx = L/2$$

bare fortelle at den målte middelveiden \bar{x} vil nærme seg den teoretiske forventningsverdien $L/2$ når antallet målinger gjøres stort. Men bølgefunksjonen inneholder mye mer informasjon enn dette. For $n = 1$ for eksempel forutsier teorien at et stort antall måleverdier for x vil fordele seg i overensstemmelse med den teoretiske sannsynlighetsfordelingen $|\psi_1(x)|^2$ som er vist i diagrammet side 4.

Gjør vi bare én måling av posisjonen x , hjelper det lite å kjenne sannsynlighetsfordelingen. Kvantemekanikken kan da bare fortelle oss at x vil ligge et sted mellom de to veggene i boksen. Og tilstandspostulatet forteller oss at det ikke er mulig å skaffe seg mer informasjon om hva denne ene målingen vil vise. Kvantemekanikken har altså **statistisk karakter**, og bryter med våre tilvante forestillinger fra *klassisk* mekanikk, hvor vi er vant med at posisjonen kan bestemmes nøyaktig ved hjelp av Newtons lover, når begynnelsesbetingelsene er gitt.

En liten oppgave: Hva er forventningsverdien $\langle \mathbf{r} \rangle$ av posisjonen \mathbf{r} (til elektronet) i grunntilstanden $\psi_1(\mathbf{r}) = C_1 e^{-r/a_0}$ (som vi diskuterte side 23 i Tillegg 1)? [Hint: Forventningsverdien er “tyngdepunktet” av sannsynlighetsfordelingen $|\psi_1(\mathbf{r})|^2$, som i likhet med $\psi_1(\mathbf{r})$ er kulesymmetrisk.]

2.2.d Postulat D (Måle-teoretisk postulat)

(i) De eneste mulige verdiene som en måling av observabelen F kan gi er en av egenverdiene f_n .

(ii) Umiddelbart etter målingen av F er systemet i en egentilstand til den tilhørende operatoren \hat{F} , nemlig en egentilstand som svarer til den målte egenverdien f_n .

(T2.15)

Når det bare finnes én egenfunksjon Ψ_n med egenverdien f_n ,

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

sier vi at denne egenverdien er **ikke-degenerert**. Det følger da fra (ii) at tilstanden etter målingen er entydig bestemt til Ψ_n .

Merk at (i) sier at måleresultatet aldri kan være noe annet enn en av egenverdiene. *Hvilke* av disse egenverdiene som måles, og sannsynlighetene for disse, avhenger av tilstanden *før* målingen. La oss som et eksempel tenke oss at vi preparerer en ikke-stasjonær boks-tilstand i form av en superposisjon av stasjonære løsninger for de tre laveste energiene:

$$\Psi(x, t) = c_1 \Psi_1(x, t) + c_2 \Psi_2(x, t) + c_3 \Psi_3(x, t).$$

Vi skal da snart se at en måling av energien bare kan gi et av de tre resultatene E_1 , E_2 eller E_3 . Er måleresultatet f.eks E_2 , vil systemet ifølge (ii) havne i tilstanden Ψ_2 etter målingen. Her ser vi at målingen *endrer tilstanden* til systemet. At en måling på denne måten endrer tilstanden er det normale i kvantemekanikk.

En ny måling av energien (etter den første målingen med resultatet E_2) vil igjen gi E_2 , og vil derfor ifølge (ii) *ikke* endre tilstanden. Dette er unntaket.

2.3 Hermiteske og ikke-hermiteske operatorer, kommutatorer, etc

2.3.a Reelle forventningsverdier krever hermiteske operatorer

Operatoren \hat{F} som skal representere en målbar størrelse (observabel) F må være **hermitesk**². Dette er en matematisk egenskap som sikrer at egenverdiene (som jo er mulige måleresultater) er reelle, samt at forventningsverdiene er reelle. Ved å ta utgangspunkt i det siste ser vi at dette krever at

$$\langle F \rangle^* = \langle F \rangle \quad \text{dvs} \quad \int \Psi (\hat{F}\Psi)^* d\tau = \int \Psi^* \hat{F}\Psi d\tau.$$

Dette skal gjelde for alle normerbare (kvadratisk integrerbare) bølgefunksjoner Ψ . I avsnitt 2.2 viser Hemmer at dette kravet er ekvivalent med kravet

$$\int (\hat{F}\Psi_1)^* \Psi_2 d\tau = \int \Psi_1^* \hat{F}\Psi_2 d\tau, \quad (\text{T2.16})$$

for alle kvadratisk integrerbare funksjoner Ψ_1 og Ψ_2 . Når dette kravet er oppfylt, sier vi at operatoren \hat{F} pr definisjon er hermitesk. Legg merke til at operatoren \hat{F} virker på Ψ_1 på venstre side av (T2.16) og på Ψ_2 på høyresiden. Operatoren er altså hermitesk dersom vi ved matematiske manipulasjoner kan flytte den fra den første posisjonen til den andre. Nedenfor skal vi se at alle operatorene side 8 har denne egenskapen, og at dette innebærer at også egenverdiene blir reelle. Relasjonen ovenfor får vi bruk for i mange sammenhenger.

2.3.b Den adjungerte, \hat{F}^\dagger , til operatoren \hat{F}

For å skille mellom hermiteske og ikke-hermiteske operatorer må vi ta oss bryet med å lære hva som menes med den **adjungerte**, \hat{A}^\dagger (uttales “A-kors” eller “A-dagger”), til en operator \hat{A} . Denne defineres ved ligningen

$$\int (\hat{A}\Psi_1)^* \Psi_2 d\tau \stackrel{\text{def}}{=} \int \Psi_1^* \hat{A}^\dagger \Psi_2 d\tau, \quad \forall \quad (\text{kvadratisk integrerbare}) \Psi_1 \text{ og } \Psi_2. \quad (\text{T2.17})$$

²Uttales hermitisk.

For å skjønne meningen med denne definisjonen kan vi gå rett på et eksempel: Den adjungerte til operatoren $\hat{A} = \partial/\partial x$, altså $(\partial/\partial x)^\dagger$, er definert ved

$$\int \left(\frac{\partial}{\partial x} \Psi_1 \right)^* \Psi_2 d\tau \stackrel{\text{def}}{=} \int \Psi_1^* \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^\dagger \Psi_2 d\tau$$

Javel. Hvordan *finner* vi så den adjungerte, $(\partial/\partial x)^\dagger$? Svar: Ved å ta utgangspunkt i uttrykket på venstre side og manipulere matematisk slik at vi får flyttet derivasjonen over fra Ψ_1 til Ψ_2 . Resultatet av disse manipulasjonene blir en operator som virker på Ψ_2 , og denne operatoren er pr definisjon den adjungerte av $\partial/\partial x$. I dette eksemplet trenger vi essensielt bare å gjøre en delvis integrasjon:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial}{\partial x} \Psi_1 \right)^* \Psi_2 dx = [\Psi_1^* \Psi_2]_{x=-\infty}^{x=\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^* \frac{\partial}{\partial x} \Psi_2 dx.$$

Her er randuttrykket lik null fordi kvadratisk integrerbare funksjoner må gå mot null for $x \rightarrow \pm\infty$. Dersom det er aktuelt med flere variable (y og z i tillegg til x), kan vi godt integrere også over y og z i ligningen over, og har altså generelt:

$$\int \left(\frac{\partial}{\partial x} \Psi_1 \right)^* \Psi_2 d\tau = \int \Psi_1^* \left(-\frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi_2 d\tau \stackrel{\text{def}}{=} \int \Psi_1^* \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^\dagger \Psi_2 d\tau.$$

Ut fra definisjonen kan vi altså si at den adjungerte til operatoren $\partial/\partial x$ er

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^\dagger = -\frac{\partial}{\partial x}.$$

Dette illustrerer at *adjungering (i alminnelighet) ikke er det samme som komplekskonjugering*, så disse operasjonene må vi skille mellom. Og det viser at operatoren $\partial/\partial x$ *ikke* er hermitesk. For at en operator \hat{F} skal være hermitesk, må operatoren \hat{F}^\dagger som er resultatet av manipulasjonene være identisk med \hat{F} , dvs selvadjungert som vi sier [slik at ligning (T2.16) er oppfylt]:

$$\hat{F}^\dagger = \hat{F} \quad (\text{selvadjungert=hermitesk}).$$

Det er nå en enkel sak å kontrollere hermitesitetsegenskapene til de vanlige operatorene vi bruker. Eksempelvis representeres posisjonen x av operatoren $\hat{x} = x$ (multiplikasjon med x), og denne operasjonen kan uten problem flyttes fra Ψ_1 til Ψ_2 , siden x er reell. Følgelig er $\hat{x} = x$ hermitesk. Den potensielle energien representeres tilsvarende ved operatoren $V(x)$, som åpenbart er hermitesk.

Mer generelt har vi for en kompleks funksjon $g(x)$ (eller kompleks konstant c)

$$\int [g(x)\Psi_1]^* \Psi_2 d\tau = \int \Psi_1^* g^*(x) \Psi_2 d\tau,$$

dvs

$$[g(x)]^\dagger = g^*(x), \quad \text{og} \\ c^\dagger = c^* \quad (c \text{ en kompleks konstant}).$$

(Så i *dette* tilfellet er adjungering det samme som komplekskonjugering). Fra denne har vi igjen (siden x og $V(x)$ er reelle)

$$x^\dagger = x^* = x,$$

$$[V(x)]^\dagger = V(x) \quad (\text{den reelle potensielle energien}),$$

For å kunne nøste videre på dette kan vi la \hat{A} og \hat{B} være to generelle operatorer. Fra definisjonen av den adjungerte har vi da straks at

$$\int [\hat{A}(\hat{B}\Psi_1)]^* \Psi_2 d\tau = \int (\hat{B}\Psi_1)^* (\hat{A}^\dagger \Psi_2) d\tau = \int \Psi_1^* \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger \Psi_2 d\tau \stackrel{\text{def}}{=} \int \Psi_1^* (\hat{A}\hat{B})^\dagger \Psi_2 d\tau, \quad (\text{T2.18})$$

som gir den enkle regelen

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger. \quad (\text{T2.19})$$

Vha denne kan du også lett finne den adjungerte til produktet av *tre* operatorer, osv. Merk at rekkefølgen av to operatorer generelt er viktig. (Unntaket er når de **kommutterer**, dvs når rekkefølgen er uten betydning.) Denne regelen kan vi bruke til å vise at f.eks impulsoperatorene (og multipla av disse) er hermiteske:

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

$$(\hat{p}_x \hat{p}_x)^\dagger = \hat{p}_x^\dagger \hat{p}_x^\dagger = \hat{p}_x \hat{p}_x, \quad \text{osv.}$$

Videre er det lett å se at

$$(\hat{A} + \hat{B})^\dagger = \hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger,$$

og da er det ikke vanskelig å overbevise seg om at også Hamilton-operatoren er hermitesk, slik vi må forlange av operatoren som skal representere observabelen $E = K + V$:

$$\widehat{H}^\dagger = \left[\frac{\hat{p}_x^2}{2m} + V(x) \right]^\dagger = \widehat{H}.$$

Noen små oppgaver:

a1. Hvor fort må $|f(x)|$ gå mot null når $|x| \rightarrow \infty$ for at funksjonen $f(x)$ skal være kvadratisk integrerbar (og dermed normerbar i vanlig forstand), dvs for at integralet $\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx$ skal eksistere?

a2. Ved delvis integrasjon kan det vises at

$$\int \left(\frac{1}{i} \frac{\partial f}{\partial y} \right)^* g d^3x = \int f^* \frac{1}{i} \frac{\partial g}{\partial y} d^3x$$

for alle kvadratisk integrerbare, komplekse funksjoner $f(x, y, z)$ og $g(x, y, z)$. Hva er etter dette den adjungerte til operatoren $\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial y}$? [Hint: Se definisjonen av den adjungerte side 11.]

b. Påvis at Laplace-operatoren

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

er hermitesk. [Hint: Bruk formelen $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger$ til å finne $(\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x})^\dagger$.]

c1. Vis at operatoren $x\hat{p}_x$ er ikke-hermitesk.

c2. Vis at operatoren $\frac{1}{2}(x\hat{p}_x + \hat{p}_x x)$ er hermitesk.

2.3.c Litt om kommutatorer

Rekkefølgen av operatorer er generelt viktig, unntatt når de kommuterer, dvs når kommutatoren er lik null. Som du kan se side 25 i Hemmer er det lett å vise at

$$(x\hat{p}_x - \hat{p}_xx)F(x, y, z) \equiv [x, \hat{p}_x]F(x, y, z) = i\hbar F(x, y, z)$$

for en vilkårlig funksjon F . **Operator-identiteten**

$$x\hat{p}_x - \hat{p}_xx \equiv [x, \hat{p}_x] = i\hbar, \quad (\text{T2.20})$$

eller mer generelt

$$[x_k, \hat{p}_l] = i\hbar \delta_{kl},$$

spiller en sentral rolle i kvantemekanikken. I avsnitt 4.5 viser Hemmer hvordan kommutatoren $[x, \hat{p}_x] = i\hbar$ kan brukes (bl.a.) til å utlede **Heisenbergs uskarphetsrelasjon**,

$$(\Delta x)_\psi (\Delta p_x)_\psi \geq \frac{1}{2}\hbar, \quad \forall \text{ kvadratisk integrerbare } \psi. \quad (\text{T2.21})$$

Moralen er at når operatorene \hat{A} og \hat{B} (som svarer til to observable A og B) ikke kommuterer, så kan de to observablene ikke ha skarpe verdier samtidig. Det kan vises ved forholdsvis enkle matematiske grep at

$$(\Delta A)(\Delta B) \geq \frac{1}{2} \left| \langle i[\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right|, \quad (\text{T2.22})$$

som er en **generalisert uskarphetsrelasjon**.

Noen enkle regneregler for kommutatorer:

$$\begin{aligned} [\hat{A} + \hat{B}, \hat{C} + \hat{D}] &= (\hat{A} + \hat{B})(\hat{C} + \hat{D}) - (\hat{C} + \hat{D})(\hat{A} + \hat{B}) \\ &= [\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{D}] + [\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{B}, \hat{D}]; \end{aligned} \quad (\text{T2.23})$$

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] \quad (\text{T2.24})$$

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}.$$

De to siste er lette å kontrollere ved å regne baklengs. Det er også lett å vise Jakobis identitet:

$$[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0. \quad (\text{T2.25})$$

Eksempel 1

For å undersøke om dreieimpuls-operatoren $\hat{L}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x$ er hermitesk kan vi adjungere den. Siden x og \hat{p}_y er hermiteske og kommuterer, finner vi at \hat{L}_z er selvdjunkt,

$$\hat{L}_z^\dagger = (x\hat{p}_y - y\hat{p}_x)^\dagger = \hat{p}_y^\dagger x^\dagger - \hat{p}_x^\dagger y^\dagger = \hat{p}_y x - \hat{p}_x y = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x = \hat{L}_z,$$

dvs hermitesk, slik vi må forlange av en operator som skal representere en fysisk observabel.

Eksempel 2

Vha (T2.23) kan vi beregne kommutatoren mellom \hat{L}_x og \hat{L}_y :

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= [y\hat{p}_z - z\hat{p}_y, z\hat{p}_x - x\hat{p}_z] \\ &= [y\hat{p}_z, z\hat{p}_x] - [z\hat{p}_y, z\hat{p}_x] - [y\hat{p}_z, x\hat{p}_z] + [z\hat{p}_y, x\hat{p}_z]. \end{aligned}$$

I den første kommutatoren kommuterer både y og \hat{p}_x med z (og med hverandre). Slik finner vi at

$$[y\hat{p}_z, z\hat{p}_x] = y\hat{p}_z z\hat{p}_x - z\hat{p}_x y\hat{p}_z = y\hat{p}_x(\hat{p}_z z - z\hat{p}_z) = y\hat{p}_x[\hat{p}_z, z] = -i\hbar y\hat{p}_x,$$

og videre at

$$\begin{aligned} [z\hat{p}_y, z\hat{p}_x] &= 0, \\ [y\hat{p}_z, x\hat{p}_z] &= 0, \\ [z\hat{p}_y, x\hat{p}_z] &= i\hbar x\hat{p}_y. \end{aligned}$$

Ved å regne på denne måten finner vi den såkalte **dreieimpulsalgebraen**:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= i\hbar \hat{L}_z, \\ [\hat{L}_y, \hat{L}_z] &= i\hbar \hat{L}_x, \\ [\hat{L}_z, \hat{L}_x] &= i\hbar \hat{L}_y. \end{aligned} \tag{T2.26}$$

Vha disse relasjonene er det lett å vise at

$$[\hat{L}_x^2, \hat{L}_z] = \hat{L}_x[\hat{L}_x, \hat{L}_z] + [\hat{L}_x, \hat{L}_z]\hat{L}_x = \hat{L}_x(-i\hbar \hat{L}_y) + (-i\hbar \hat{L}_y)\hat{L}_x,$$

og på tilsvarende måte at

$$[\hat{L}_y^2, \hat{L}_z] = \hat{L}_y(i\hbar \hat{L}_x) + (i\hbar \hat{L}_x)\hat{L}_y,$$

mens $[\hat{L}_z^2, \hat{L}_z]$ selvsagt er lik null. Tilsammen gir dette

$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z] = [\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2, \hat{L}_z] = 0, \quad \text{q.e.d.} \tag{T2.27}$$

Som vi skal se senere, betyr dette at det eksisterer simultane egenfunksjoner til $\hat{\mathbf{L}}^2$ og f.eks \hat{L}_z . I en slik tilstand er usikkerhetene i observablene \mathbf{L}^2 og L_z lik null. Moralen er altså at størrelsen ($|\mathbf{L}|$) av dreieimpulsen \mathbf{L} for en partikkel kan være skarpt definert samtidig med en av komponentene, f.eks L_z .

Derimot følger det fra dreieimpulsalgebraen (T2.26) og den generaliserte uskarphetsrelasjonen,

$$(\Delta F)_\Psi (\Delta G)_\Psi \geq \frac{1}{2} | \langle i[\hat{F}, \hat{G}] \rangle_\Psi | \quad \forall \text{ (kvadratisk integrerbare) } \Psi,$$

at de målbare komponentene L_x , L_y og L_z av dreieimpulsen \mathbf{L} til en partikkel ikke kan ha skarpe verdier samtidig for en fysisk tilstand (fordi operatorene ikke kommuterer). Dette bryter med våre klassiske mekaniske forestillinger. Jf. jordas banedreieimpuls med hensyn på sola, $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$, som har en veldefinert størrelse og retning (vinkelrett på baneplanet). Det samme er altså ikke mulig for eksempel for elektronet i hydrogenatomet.

2.4 Egenfunksjoner og egenverdier

2.4.a Spektret til en operator

Vi har alt sett at de matematiske begrepene **egenfunksjoner** og **egenverdier** spiller en sentral rolle i kvantemekanikken. Hemmer gir i avsnitt 2.4.1 en veldig konsis og grei framstilling av de viktigste aspektene, sett fra en kvantemekanikers synspunkt. Studér dette avsnittet nøye! Etterpå kan du se på følgende kommentarer:

1. I avsnitt 2.1 ovenfor fant vi at **spektret** (de mulige egenverdiene) til Hamilton-operatoren for den endimensjonale boksen er

$$\left\{ E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 \mid n = 1, 2, 3, \dots \right\}.$$

Vi fant også at egenfunksjonene som svarer til dette **diskrete** energispektret er normerbare (til 1).

2. Vi har i en øvingsoppgave alt stiftet bekjentskap med Hamilton-operatoren

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

for den endimensjonale harmoniske oscillatoren og to av egenfunksjonene (med tilhørende egenverdier):

$$\psi_0(x) = C_0 e^{-m\omega x^2/2\hbar} \quad (\text{med } E_0 = \tfrac{1}{2}\hbar\omega) \quad \text{og} \quad \psi_1(x) = C_1 x e^{-m\omega x^2/2\hbar} \quad (\text{med } E_1 = \tfrac{3}{2}\hbar\omega).$$

Vi skal senere se at dette er grunntilstanden og første eksiterte tilstand for oscillatoren, og at det fullstendige energispektret er

$$\left\{ E_n = \hbar\omega(n + \tfrac{1}{2}) \mid n = 0, 1, 2, \dots \right\}. \quad (\text{T2.28})$$

Det viser seg at alle de tilhørende egenfunksjonene inneholder den samme eksponensialfaktoren $\exp(-m\omega x^2/2\hbar)$, multiplisert med et polynom av grad n . De går derfor alle raskt mot null for $x \rightarrow \pm\infty$, slik at de er normerbare til 1. Dette viser seg å holde stikk generelt:

Egenfunksjoner som svarer til diskrete egenverdier kan alltid normeres til 1.

 (T2.29)

Hva skjer om vi prøver å løse den tidsuavhengige Schrödingerligningen (TUSL) for oscillatoren, $\widehat{H}\Psi = E\Psi$, for en energi E som er forskjellig fra egenverdiene $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$? Jo, da skal vi se at “løsningen” går mot uendelig for store $|x|$. Slike “løsninger” kvalifiserer ikke som egenfunksjoner (hverken i fysikk eller matematikk):

Bare løsninger av egenverdiligningen som (i en viss forstand) er normerbare er egenfunksjoner.

 (T2.30)

3. Som et eksempel på en operator med et *kontinuerlig* egenverdispektrum kan vi ta impulsoperatoren $\widehat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$. Egenverdiligningen er da

$$\widehat{p}_x \psi_p = p \psi_p, \quad \text{eller} \quad \frac{d\psi_p}{dx} = \frac{ip}{\hbar} \psi_p$$

(når vi holder eventuelle andre variable som y, z, t fast). Her er p egenverdien. Denne ligningen kan vi integrere:

$$\frac{d\psi_p}{\psi_p} = \frac{ip}{\hbar} dx \quad \implies \quad \ln \psi_p = \ln C + \frac{ipx}{\hbar} \quad \implies \quad \psi_p(x) = Ce^{ipx/\hbar}.$$

Denne impulsegenfunksjonen har vi sett før, i forbindelse med diskusjonen av de Broglie-bølgene i Tillegg 1. Som diskutert i avsnitt 2.4.1 i Hemmer, kan egenverdien p her ha en vilkårlig reell verdi $p \in (-\infty, +\infty)$. Komplekse verdier er utelukket fordi $|\psi(x)|^2$ da vil gå mot uendelig enten når x går mot $+\infty$ eller $-\infty$. Det siste er ikke akseptabelt for en egenfunksjon. Vi konstaterer altså at impulsoperatoren har et kontinuerlig reelt spektrum, fra $-\infty$ til $+\infty$.

Men selv for reelle p er egenfunksjonene ikke normerbare til 1; integralet $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_p(x)|^2 dx$ eksisterer ikke, fordi $|\psi_p(x)|^2 = |C|^2$ er konstant for alle x . Nedenfor skal vi se at vi da må bruke en annen type normering, såkalt delta-funksjons-normering. (Dette er grunnen til forbeholdet “i en viss forstand” i (T2.30).)

Merk ellers at impulsegenfunksjonen $\psi_p(x) = Ce^{ipx/\hbar}$ — og den tilsvarende de Broglie-bølgen $\Psi_p(x, t) = Ce^{i(px-Et)/\hbar}$ (med $E = p^2/2m$) — beskriver en partikkel med *helt* veldefinert (skarp) impuls $\mathbf{p} = p\hat{\mathbf{e}}_x$. Denne bølgefunksjonen strekker seg over et uendelig stort rom, og er derfor en idealisering. En *virkelig* tilstand må ha endelig utstrekning og være normerbar til 1, og vil da strengt tatt ikke ha helt skarpt bølgetall. Derfor må impulsen $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ til en slik *virkelig* tilstand i det minste være ørlite grann uskarp, sett fra et matematisk synspunkt.

4. Som diskutert i Tillegg 1 (og i en øvingsoppgave) er Hamilton-operatoren for et elektron (med ladning $-e$) som beveger seg i et elektrostatiske potensial $U(r) = e/(4\pi\epsilon_0 r)$

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}.$$

Det viser seg at denne operatoren, som essensielt beskriver hydrogenatomet, for $E < 0$ har et *diskret* spektrum,

$$E_n = -\frac{1}{2}\alpha^2 \frac{mc^2}{n^2}, \quad n = 1, 2, \dots$$

For $n = 1$ har vi alt funnet den tilhørende egenfunksjonen, $\psi = (\pi a_0^3)^{-1/2} e^{-r/a_0}$. Både denne og egenfunksjonene som hører sammen med alle de andre diskrete nivåene er normerbare til 1 (kvadratisk integrerbare), i tråd med (T2.29), og beskriver bundne tilstander. Vi sier også at disse tilstandene er **lokaliserte**, siden de alle går mer eller mindre raskt mot null for store r .

For $E > 0$ har vi ingen energikvantisering, men et *kontinuerlig* spektrum fra $E = 0$ og oppover. Det systemet vi betrakter her har altså et **blandet spektrum**. Energiegenfunksjonene som hører sammen med den kontinuerlige delen av spektret er *ikke lokaliserte*; de strekker seg over hele rommet (i likhet med impulsegenfunksjonene) og er ikke normerbare til 1. For slike ubundne tilstander må en igjen bruke delta-funksjonsnormering. Det viser seg generelt at

For egenfunksjoner som svarer til en kontinuerlig del av et spektrum må en bruke delta-funksjonsnormering.	(T2.31)
--	---------

2.4.b Egenverdier som måleresultat

I avsnitt 2.4.1 viser Hemmer raskt og elegant følgende:

- (i) Egenverdiene f_n til en hermiteske operator \hat{F} er reelle, og
- (ii) i de tilhørende egentilstandene Ψ_n har observabelen F med sikkerhet egenverdien f_n .

(T2.32)

Kommentarer:

(i) Ifølge målepostulatet vil en måling av $F = f_n$ etterlate systemet i den tilhørende egentilstanden, gitt ved

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

der vi husker at \hat{F} er hermiteske, og dermed har reelle forventningsverdier. Her kan vi anta at Ψ_n er normert. Den reelle forventningsverdien av F i denne tilstanden er da lik egenverdien:

$$\langle F \rangle_{\Psi_n} = \int \Psi_n^* \hat{F} \Psi_n d\tau = \int \Psi_n^* f_n \Psi_n d\tau = f_n \int \Psi_n^* \Psi_n d\tau = f_n.$$

Følgelig er egenverdien f_n reell, og det var jo godt å få *det* bekreftet, når vi vet at den er et mulig måleresultat.

(ii) En ny måling av F (umiddelbart etter den første, som etterlot systemet i tilstanden Ψ_n) vil med sikkerhet gi $F = f_n$ én gang til, slik at vi kan si at i tilstanden Ψ_n har observabelen F den skarpe verdien f_n . At verdien er skarp beviser vi som i boka ved å vise at **usikkerheten** (roten av det kvadratiske avviket fra middelveien f_n) er lik null:

$$(\Delta F)_{\Psi_n}^2 \equiv \langle (F - \langle F \rangle_{\Psi_n})^2 \rangle_{\Psi_n} = \langle (F - f_n)^2 \rangle_{\Psi_n} = \int \Psi_n^* (\hat{F} - f_n)^2 \Psi_n d\tau = 0, \quad \text{q.e.d.} \quad (\text{T2.33})$$

Her har vi brukt egenverdiligningen $(\hat{F} - f_n)\Psi_n = 0$.

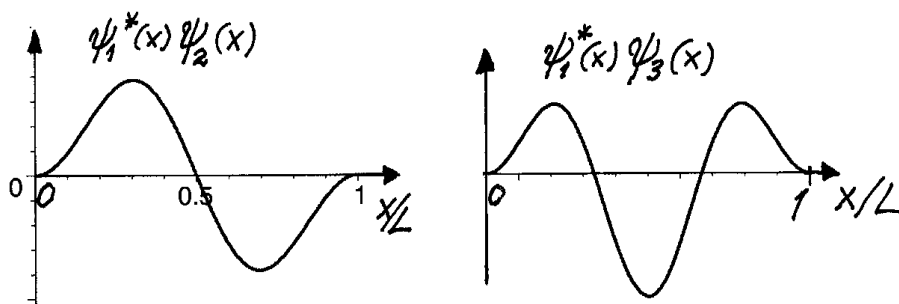
2.4.c Ortogonalitet

En viktig regel som vil bli mye brukt i dette kurset er følgende:

To egenfunksjoner Ψ_n og Ψ_m til en hermiteske operator er **ortogonale** dersom egenverdiene f_n og f_m er forskjellige. Med dette mener vi:

$$f_m \neq f_n \quad \implies \quad \int \Psi_m^* \Psi_n d\tau = 0.$$

(T2.34)



Figuren viser egenfunksjonsproduktene $\psi_1^*(x)\psi_2(x)$ og $\psi_1^*(x)\psi_3(x)$ for partikkel i boks. I det første tilfellet er produktet antisymmetrisk med hensyn på midtpunktet i boksen (fordi ψ_1 er symmetrisk og ψ_2 er antisymmetrisk), og da følger ortogonaliteten av at vi har en antisymmetrisk integrand. I det andre tilfellet er begge faktorene symmetriske, og da må vi regne litt for å vise at integralet er lik null. Slike direkte utregninger er imidlertid helt overflødige, for som du kan se i avsnitt 2.4.3 i boka, er det kjempeenkelt å føre et generelt bevis for regelen ovenfor.

Med $\hat{F}\Psi_n = f_n\Psi_n$ og $\hat{F}\Psi_k = f_k\Psi_k$ følger det fra relasjonen

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

som gjelder for den hermiteske operatoren \hat{F} at

$$0 = \int (\hat{F}\Psi_n)^*\Psi_k d\tau - \int \Psi_n^*\hat{F}\Psi_k d\tau = (f_n - f_k) \int \Psi_n^*\Psi_k d\tau, \quad \text{q.e.d.}$$

2.4.d Ortogonalisering vha “*Komplett sett av kommuterende operatorer*”***³

Men som vi alle vet, det forekommer også at én eller flere av egenverdiene er **degenerert**, dvs at det finnes mer enn én egenfunksjon med den samme egenverdien f_n . Da er det ikke fullt så enkelt å sikre seg ortogonalitet. Et eksempel er 1. eksiterte energinivå for hydrogenatomet, $E_2 = -\frac{1}{2}\alpha^2 mc^2/4$: Det finnes fire lineært uavhengige energieigenfunksjoner med denne egenverdien, dvs vi har **degenerasjonsgrad** 4. Om vi får utlevert fire slike lineært uavhengige energieigenfunksjoner, $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4$, *behøver* de slett ikke å være ortogonale. Regelen side 29 i Hemmer hindrer ikke at skalarproduktene $\langle \psi_i, \psi_j \rangle$ mellom dem kan være forskjellige fra null. I et slikt tilfelle vil vi ønske å skaffe oss fire *ortogonale* funksjoner; vi lærer oss etter hvert at dette er en stor fordel. Én måte å oppnå dette på er vha Gram-Schmidt-ortogonalisering. En annen måte, som er mer brukt i kvantemekanikk, er vha et såkalt **komplett sett av kommuterende operatorer**.

Denne metoden kan vi illustrere vha hydrogenatomet. Degenerasjonen av energinivåene henger her delvis sammen med kulesymmetrien i dette problemet. Fra denne symmetrien følger det at Hamilton-operatoren \hat{H} kommuterer ned dreieimpulsoperatoren $\hat{\mathbf{L}}$ og med kvadratet av denne. Samtidig kommuterer *komponentene* av $\hat{\mathbf{L}}$ med $\hat{\mathbf{L}}^2$, men ikke med hverandre. Dette betyr at operator-settet $\hat{H}, \hat{\mathbf{L}}^2$ og \hat{L}_z kommuterer innbyrdes. Da vet vi (se avsnitt 4.1 i Hemmer) at det eksisterer et simultant egenfunksjonssett til disse tre operatorene. De bundne tilstandene (for $E < 0$) er det kjente egenfunksjonssettet

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi),$$

som oppfyller egenverdiligningene

$$\left\{ \begin{array}{c} \hat{H} \\ \hat{\mathbf{L}}^2 \\ \hat{L}_z \end{array} \right\} \psi_{nlm} = \left\{ \begin{array}{c} E_n \\ \hbar^2 l(l+1) \\ \hbar m \end{array} \right\} \psi_{nlm}, \quad \begin{array}{l} n = 1, 2, 3, \dots, \\ l = 0, 1, 2, \dots, n-1, \\ m = 0, \pm 1, \dots, \pm l. \end{array}$$

Her ser vi at energien er uavhengig av det magnetiske kvantetallet m , som for et gitt dreieimpulskvantetall l kan ta verdiene $m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$, tilsammen $2l + 1$ verdier. Dette er

³Avsnitt merket *** er ikke pensum i begynnerkurset.

den såkalte m -degenerasjonen, som er felles for alle kulesymmetriske potensialer. Dessuten ser vi at energien er uavhengig av l , som for et gitt hovedkvantetall n kan ta verdiene $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$. Dette er den såkalte l -degenerasjonen, som er karakteristisk for $1/r$ -potensialet.⁴ Den totale degenerasjonsgraden for energinivået E_n blir dermed

$$g_n = \sum_{l=0}^{n-1} 2l + 1 = 1 + (2 \cdot 1 + 1) + (2 \cdot 2 + 1) + \dots + (2 \cdot (n-1) + 1) = \frac{1}{2}n(1 + 2n - 1) = n^2,$$

altså 4 for $n = 2$, 9 for $n = 3$, osv. Energinivåene og tilstandene kan illustreres vha følgende nivåskjema:

	$s(l=0)$	$p(l=1)$	$d(l=2)$	$f(l=3)$
E_4	_____	_____	_____	_____
E_3	$\overline{3s(m=0)}$	$\overline{3p(m=0, \pm 1)}$	$\overline{3d(m=0, \pm 1, \pm 2)}$	
E_2	$\overline{2s(m=0)}$	$\overline{2p(m=0, \pm 1)}$		
E_1	$\overline{1s(m=0)}$			

Alle disse tilstandene er nå ortogonale. Det er nemlig bare én egenfunksjon ψ_{nlm} for hver kvantetalls-kombinasjon nlm , og da følger det fra regelen side 29 i Hemmer at vi har et ortogonalt sett. Mer detaljert kan vi si at grunntilstanden ψ_{100} er ortogonal til alle de eksiterte tilstandene fordi energieigenverdiene er forskjellige. Det samme kan vi si om hvilke som helst to energiegentilstander med forskjellige energier, som f.eks paret ψ_{200} og ψ_{300} og paret ψ_{210} og ψ_{310} .

Men hva med funksjoner som tilhører samme energinivå, f.eks $2s$ -tilstanden ψ_{200} og $2p$ -tilstandene ψ_{21m} , med $m = 0, \pm 1$? Svaret er at ψ_{200} er ortogonal til tilstandene ψ_{21m} fordi egenverdiene til $\hat{\mathbf{L}}^2$ er forskjellige (hhvis 0 og $2\hbar^2$). Tilsvarende er de tre tilstandene ψ_{211} , ψ_{210} og ψ_{21-1} ortogonale fordi de er egenfunksjoner til \hat{L}_z med forskjellige egenverdier (hhvis \hbar , 0, og $-\hbar$).

Moralen er at en kan sikre seg at de n^2 egenfunksjonene med energi E_n blir ortogonale ved å forlange at de er simultane egentilstander til et passende sett av operatorer (her $\hat{\mathbf{L}}^2$ og \hat{L}_z) i tillegg til \hat{H} . Velger vi dette operatorsettet slik at vi finner bare én egenfunksjon for hver kombinasjon av egenverdier, så er vi sikret ortogonalitet. Vi sier da at operatorsettet (her \hat{H} , $\hat{\mathbf{L}}^2$ og \hat{L}_z) er et **komplett sett av kommuterende operatorer**. Et annet valg (f.eks \hat{H} , $\hat{\mathbf{L}}^2$ og \hat{L}_x) ville også danne et slikt komplett sett av kommuterende operatorer, med simultane egenfunksjoner som er lineærkombinasjoner av det opprinnelige settet. (Moral: De g_n egenfunksjonene med energi E_n er ikke unike.) Merk også at settet \hat{H} og $\hat{\mathbf{L}}^2$ ikke er komplett.

En liten utfordring: (1) Angi et komplett sett av kommuterende operatorer for den tredimensjonale isotrope harmoniske oscillator (med $V = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$). (2) Tilsvarende for en todimensjonal kvadratisk boks.

⁴ $1/r$ -formen til potensialet innebærer i realiteten en "skjult" symmetri. Det er denne skjulte symmetrien som gjør at vi her får l -degenerasjon, i tillegg til m -degenerasjonen som er felles for alle kulesymmetriske potensialer.

2.4.e Bølgefunksjoner (og andre funksjoner) som “vektorer”

(Jf 2.4.3 i Hemmer)

Notasjonen

$$\int \Psi_n^* \Psi_m d\tau \equiv \langle \Psi_n, \Psi_m \rangle$$

braker vi fordi dette integralet kalles **indreproduktet** eller **skalarproduktet** av de to funksjonene Ψ_n og Ψ_m . Begrepene skalarprodukt og ortogonalitet er hentet fra teorien for (abstrakte) vektorrom. Bølgefunksjoner som skal beskrive fysisk realiserbare tilstander må være normerbare (til 1). Dvs de må høre til klassen av komplekse, kvadratisk integrerbare funksjoner. Slike funksjoner tilfredsstiller alle de kravene som stilles til **vektorer i et vektorrom**:

- Summen av to slike (kvadratisk integrerbare) funksjoner er selv en (kvadratisk integrerbar) funksjon
- Addisjon av funksjoner er kommutativ og assosiativ [$f + g = g + f$; $(f + g) + h = f + (g + h)$]
- Det finnes en “null-funksjon”, $f \equiv 0$
- Multiplikasjon med en kompleks konstant gir en ny funksjon

osv. De komplekse, kvadratisk integrerbare funksjonene oppfyller altså alle kriteriene i sjekk-listen. Matematisk sett “utspenner” disse kvadratisk integrerbare funksjonene et komplekst vektorrom, betegnet som $L_2(-\infty, \infty) \equiv L_2$, og kalt et Hilbert-rom. Dimensjonen av dette rommet er uendelig, fordi det finnes uendelig mange slike funksjoner som er lineært uavhengige.⁵

Som skalarprodukt (også kalt **indreprodukt**) av to komplekse funksjoner f og g i dette rommet bruker vi altså

$$\langle f, g \rangle \equiv \int f^* g d\tau. \quad (\text{T2.35})$$

Dette er analogt med skalarproduktet av to vanlige (komplekse) vektorer (som dere kanskje ikke har brukt?), som i fysikklitteraturen defineres ved

$$\langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle \equiv \mathbf{a}^* \cdot \mathbf{b} \equiv a_x^* b_x + a_y^* b_y + a_z^* b_z \quad (\text{T2.36})$$

Med denne *definisjonen* er skalarproduktet lineært i *høyre* faktor: Når c er et komplekst tall, er ifølge (T2.35)⁶

$$\langle f, cg \rangle = c \langle f, g \rangle, \quad \text{mens} \quad \langle cf, g \rangle = c^* \langle f, g \rangle.$$

⁵At det finnes uendelig mange lineært uavhengige kvadratisk integrerbare funksjoner kan vi lett overbevise oss om ved å se på energieigenfunksjonene $\psi_n(x)$ til den harmoniske oscillatoren som et eksempel. Vi har én slik energieigenfunksjon for hver av de uendelig mange egenverdiene $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$. Alle disse funksjonene er innbyrdes ortogonale og dermed lineært uavhengige ifølge (T2.34), analogt med at enhetsvektorene $\hat{\mathbf{e}}_x$, $\hat{\mathbf{e}}_y$ og $\hat{\mathbf{e}}_z$ i det ordinære tredimensjonale rommet er ortogonale og lineært uavhengige.

⁶En kan like gjerne definere indreproduktet slik at det er lineært i venstre faktor. Dette er vanlig i matematisk litteratur. Men i kvantemekanikken bruker vi altså definisjonen ovenfor: I integralet $\langle f, g \rangle$ skal faktoren f komplekskonjugeres.

Merk at skalarproduktet generelt er et komplekst tall, og at

$$\langle f, g \rangle^* = \langle g, f \rangle.$$

Lengden $|\mathbf{a}|$ av en ordinær kompleks vektor \mathbf{a} defineres som roten av skalarproduktet $\langle \mathbf{a}, \mathbf{a} \rangle$, slik at

$$|\mathbf{a}|^2 = \langle \mathbf{a}, \mathbf{a} \rangle = \mathbf{a}^* \cdot \mathbf{a} = |a_x|^2 + |a_y|^2 + |a_z|^2.$$

Tilsvarende defineres lengden $\|f\|$, også kalt **normen**, av “vektoren” f slik at

$$\|f\|^2 = \langle f, f \rangle = \int f^* f d\tau. \quad (\text{T2.37})$$

Normen av en normert bølgefunksjon Ψ er altså $\|\Psi\| = 1$. Av en annen funksjon $\tilde{\psi}$ som *ikke* er normert kan vi lage en normert utgave ψ slik:

$$\psi = \frac{\tilde{\psi}}{\|\tilde{\psi}\|} = \frac{\tilde{\psi}}{\sqrt{\langle \tilde{\psi}, \tilde{\psi} \rangle}}.$$

Dette er analogt med at $\hat{\mathbf{a}} = \mathbf{a}/|\mathbf{a}|$ er en enhetsvektor.

En liten oppgave:

Finn normen $\|e^{-x^2/2}\|$ av funksjonen $e^{-x^2/2}$, der x går fra $-\infty$ til $+\infty$.

En liten oppgave til:

1. Hva er skalarproduktene $\langle \hat{\mathbf{e}}_x, \mathbf{a} \rangle$ og $\langle \hat{\mathbf{e}}_y, \mathbf{a} \rangle$ for vektoren $\mathbf{a} = 3\hat{\mathbf{e}}_x + 2\hat{\mathbf{e}}_y$?
2. La $\mathbf{b} = 3\hat{\mathbf{e}}_x + 4i\hat{\mathbf{e}}_y$ være en kompleks vektor. Hva er $\langle \mathbf{b}, \mathbf{b} \rangle$, $\langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle$ og $\langle \mathbf{b}, \mathbf{a} \rangle$? [Hint: Se (T2.36). Svar: 25, $9 + 8i$ og $9 - 8i$.]
3. Hva er lengden av \mathbf{b} ? [Svar: $\|\mathbf{b}\| \equiv |\mathbf{b}| = \sqrt{\langle \mathbf{b}, \mathbf{b} \rangle} = \sqrt{\mathbf{b}^* \cdot \mathbf{b}} = 5$.]

2.4.f Delta-funksjonen og δ -funksjonsnormering

Diracs δ -funksjon

Diracs δ -funksjon er gjennomgått i detalj i Appendix B i Hemmers bok. Her bare en oppsummering av noen av de viktigste egenskapene. δ -”funksjonen” har pr definisjon egenskapen

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x) dx = f(0) \quad (\text{T2.38})$$

for alle funksjoner som er kontinuerlige i origo. Definisjonen innebærer at $\delta(x)$ må være lik null for alle $x \neq 0$ og uendelig stor for $x = 0$, på en slik måte at

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1. \quad (\text{T2.39})$$

Ved å innføre $x' = -x$ som ny integrasjonsvariabel innser vi at

$$\delta(-x) = \delta(x). \quad (\text{T2.40})$$

Ved å innføre $x' = |a|x$ i integralet $\int f(x) \delta(ax) dx$ innser vi videre at

$$\delta(ax) = \delta(|a|x) = \frac{1}{|a|} \delta(x). \quad (\text{T2.41})$$

Andre viktige egenskaper er ⁷

$$\int_{a-\Delta}^{a+\Delta} f(x)\delta(x-a)dx = f(a), \quad (\text{T2.42})$$

$$f(x)\delta(x-a) = f(a)\delta(x-a), \quad (\text{T2.43})$$

$$x\delta(x-a) = a\delta(x-a). \quad (\text{T2.44})$$

δ -funksjonen er ikke en funksjon i egentlig forstand, men en såkalt **generalisert funksjon**. Vi kan se på den som grensen av en følge av funksjoner $\delta_\epsilon(x)$,

$$\delta(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \delta_\epsilon(x), \quad (\text{T2.45})$$

der bredden av grafen av $\delta_\epsilon(x)$ går mot null og høyden går mot uendelig, mens arealet under grafen hele tiden er lik 1. Det finnes selvsagt mange slike funksjoner. Et enkelt eksempel er et rektangulært areal med bredde ϵ og høyde $1/\epsilon$:

$$\delta(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \delta_\epsilon(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \begin{cases} 1/\epsilon & \text{for } |x| \leq \epsilon/2, \\ 0 & \text{for } |x| > \epsilon/2. \end{cases} \quad (\text{T2.46})$$

Dette kalles en **representasjon** av δ -funksjonen. I denne og andre representasjoner er det underforstått at grensen egentlig skal tas *etter* at integralene ovenfor er utført:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta_\epsilon(x)dx = f(0). \quad (\text{T2.47})$$

Det er ikke vanskelig å innse at denne er oppfylt med (T2.46). Hemmer gir eksempler på flere representasjoner, som alle har denne egenskapen. Her skal vi fokusere spesielt på to, der funksjonen $\delta_\epsilon(x)$ er henholdsvis

$$\delta_\epsilon(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx - \epsilon|k|} dk = \frac{\epsilon}{\pi(x^2 + \epsilon^2)}$$

og

$$\delta_\epsilon(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-1/\epsilon}^{1/\epsilon} e^{ikx} dk = \frac{\sin(x/\epsilon)}{\pi x}.$$

Arealet under grafene til disse er begge lik 1, og “bredden” går mot null når $\epsilon \rightarrow 0$, mens høyden går mot uendelig. Fordelen med disse to representasjonene er at vi faktisk kan tillate oss å ta grensen $\epsilon \rightarrow 0$ *før* integrasjonen. Vi setter altså

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dk = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} dk. \quad (\text{T2.48})$$

Dette kan vi kalle en Fourier-representasjon av δ -funksjonen, fordi den har form av et Fourier-integral. Her ser det kanskje skummelt ut at integralet ikke eksisterer, men vi kommer alltid ned på beina når vi bruker denne representasjonen i integraler over x , sammen med våre veloppdragne funksjoner $f(x)$. Vi skal se nokså raskt at denne representasjonen er veldig nyttig.

En liten oppgave: Hvilken δ -funksjon representeres av integralet

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-a)} dk ?$$

⁷Merk at det er tilstrekkelig å integrere i et lite intervall omkring det punktet hvor δ -funksjonen er forskjellig fra null, som er der hvor argumentet er lik null.

3 dimensjoner

I tre dimensjoner erstattes den definerende ligningen (T2.38) av

$$\int \int \int f(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r}) d^3r = f(\mathbf{0}).$$

Denne oppfylles av

$$\delta(\mathbf{r}) = \delta(x)\delta(y)\delta(z).$$

Ladningstettheten til en punktpartikkel med ladning q plassert i punktet $\mathbf{r} = \mathbf{a}$ er proporsjonal med en slik δ -funksjon:

$$\rho(\mathbf{r}) = q\delta(\mathbf{r} - \mathbf{a}).$$

Så her har vi enkel konkret illustrasjon av hva en δ -funksjon står for.

δ -funksjonsnormering

Vi har alt nevnt i (T2.31) at en må bruke δ -funksjons-”normering” for egenfunksjoner som svarer til en kontinuerlig del av egenverdispektret. Som et eksempel kan vi se på impulsegenfunksjonene $\psi_p(x) = Ce^{ipx/\hbar}$. Siden $|\psi_p(x)|^2 = |C|^2$, er det klart at normeringsintegralet er uendelig. Impulsegenfunksjonen er derfor ikke normerbar i egentlig forstand.

Hva med ortogonalitet? La oss velge $C = (2\pi\hbar)^{-1/2}$ og regne ut skalarproduktet av ψ_p og $\psi_{p'}$,

$$\langle \psi_p, \psi_{p'} \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \psi_p^*(x) \psi_{p'}(x) dx = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar} e^{ip'x/\hbar} d(x/\hbar) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p'-p)y} dy.$$

Her har vi innført $y = x/\hbar$ som ny integrasjonsvariabel. Sammenligning med (T2.48) viser at resultatet er

$$\boxed{\langle \psi_p, \psi_{p'} \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \psi_p^*(x) \psi_{p'}(x) dx = \delta(p' - p).} \quad \left(\begin{array}{l} \delta\text{-funksjons-} \\ \text{normering} \end{array} \right) \quad (\text{T2.49})$$

Med normeringsvalget

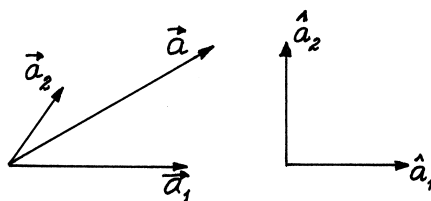
$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$$

oppnår vi altså at skalarproduktet mellom $\psi_p(x)$ og $\psi_{p'}(x)$ er $\delta(p' - p) = \delta(p - p')$. Det er dette som kalles δ -funksjonsnormering (selv om det jo ikke er normering i egentlig forstand).

2.5 Utvikling i egenfunksjoner (Jf 2.5 i Hemmer)

2.5.a Begrepet “fullstendig sett” (eller basis)

I forrige avsnitt har vi gjort et nummer av at kvadratisk integrerbare funksjoner er vektorer i et (uendelig-dimensjonalt) vektorrom. Også begrepet **basis** (eller **fullstendig sett**) er hentet fra vektorlæren, og kan illustreres ved å betrakte et ordinært to-dimensjonalt vektorrom.



Her kan den vilkårlige vektoren \mathbf{a} i dette rommet godt utvikles i en basis som består av vektorene \mathbf{a}_1 og \mathbf{a}_2 , som er to vilkårlige, lineært uavhengige vektorer. Men det er mer praktisk å bruke et *ortonormert* basis-sett $\hat{\mathbf{a}}_1$ og $\hat{\mathbf{a}}_2$,

$$\langle \hat{\mathbf{a}}_i, \hat{\mathbf{a}}_j \rangle = \delta_{ij}, \quad i, j = 1, 2. \quad (\text{T2.50})$$

Enhetsvektorene $\hat{\mathbf{a}}_1$ og $\hat{\mathbf{a}}_2$ er konstruert som lineærkombinasjoner av de to uavhengige vektorene \mathbf{a}_1 og \mathbf{a}_2 ved hjelp av følgende oppskrift:

$$\hat{\mathbf{a}}_1 = \frac{\mathbf{a}_1}{|\mathbf{a}_1|}, \quad \hat{\mathbf{a}}_2 = \frac{\mathbf{a}_2 - \langle \hat{\mathbf{a}}_1, \mathbf{a}_2 \rangle \hat{\mathbf{a}}_1}{|\mathbf{a}_2 - \langle \hat{\mathbf{a}}_1, \mathbf{a}_2 \rangle \hat{\mathbf{a}}_1|}.$$

Merk at $\langle \hat{\mathbf{a}}_1, \mathbf{a}_2 \rangle \hat{\mathbf{a}}_1$ er komponenten av \mathbf{a}_2 langs $\hat{\mathbf{a}}_1$. Telleren i det siste uttrykket er derfor komponenten av \mathbf{a}_2 *normalt* på $\hat{\mathbf{a}}_1$. Nevneren sørger for normeringen. Nøyaktig samme oppskrift kan brukes til å ortogonalisere *funksjoner*, og kalles da **Gram–Schmidt-ortogonalisering**:

En liten oppgave: Anta at $\tilde{\psi}_1, \tilde{\psi}_2$ og $\tilde{\psi}_3$ er tre lineært uavhengige (men ikke nødvendigvis normerte eller ortogonale) funksjoner. Av disse kan vi lage tre ortonormerte lineærkombinasjoner. Én måte å gjøre dette på er:

$$\psi_1 = \frac{\tilde{\psi}_1}{\|\tilde{\psi}_1\|}, \quad \psi_2 = \frac{\tilde{\psi}_2 - \langle \psi_1, \tilde{\psi}_2 \rangle \psi_1}{\|\tilde{\psi}_2 - \langle \psi_1, \tilde{\psi}_2 \rangle \psi_1\|}, \quad \psi_3 = \frac{\tilde{\psi}_3 - \langle \psi_1, \tilde{\psi}_3 \rangle \psi_1 - \langle \psi_2, \tilde{\psi}_3 \rangle \psi_2}{\|\tilde{\psi}_3 - \langle \psi_1, \tilde{\psi}_3 \rangle \psi_1 - \langle \psi_2, \tilde{\psi}_3 \rangle \psi_2\|}.$$

Disse er åpenbart normerte. Kontrollér at de også er ortogonale:

$$\langle \psi_1, \psi_2 \rangle = 0 = \langle \psi_1, \psi_3 \rangle = \langle \psi_2, \psi_3 \rangle.$$

Utviklingsformelen for den vilkårlige vektoren \mathbf{a} er med basisen (T2.50)

$$\mathbf{a} = a_1 \hat{\mathbf{a}}_1 + a_2 \hat{\mathbf{a}}_2 = \sum_{i=1}^2 a_i \hat{\mathbf{a}}_i. \quad (\text{T2.51})$$

Fordelen med en ortonormert basis kommer fram når vi regner ut **projeksjonene** av vektoren \mathbf{a} på de to basisvektorene:

$$\langle \hat{\mathbf{a}}_1, \mathbf{a} \rangle = \langle \hat{\mathbf{a}}_1, a_1 \hat{\mathbf{a}}_1 + a_2 \hat{\mathbf{a}}_2 \rangle = a_1,$$

$$\langle \hat{\mathbf{a}}_2, \mathbf{a} \rangle = \langle \hat{\mathbf{a}}_2, a_1 \hat{\mathbf{a}}_1 + a_2 \hat{\mathbf{a}}_2 \rangle = a_2,$$

eller i ett jafs:

$$\langle \hat{\mathbf{a}}_i, \mathbf{a} \rangle = \left\langle \hat{\mathbf{a}}_i, \sum_j a_j \hat{\mathbf{a}}_j \right\rangle = \sum_j a_j \langle \hat{\mathbf{a}}_i, \hat{\mathbf{a}}_j \rangle = \sum_j a_j \delta_{ij} = \underline{a_i}, \quad i = 1, 2. \quad (\text{T2.52})$$

Utviklingskoeffisientene a_1 og a_2 er altså ganske enkelt lik *projeksjonene* av vektoren \mathbf{a} på de respektive basisvektorene.

Ved å sette inn for koeffisientene finner vi altså at den vilkårlige vektoren \mathbf{a} kan utvikles slik:

$$\mathbf{a} = \langle \hat{\mathbf{a}}_1, \mathbf{a} \rangle \hat{\mathbf{a}}_1 + \langle \hat{\mathbf{a}}_2, \mathbf{a} \rangle \hat{\mathbf{a}}_2 = \sum_i \langle \hat{\mathbf{a}}_i, \mathbf{a} \rangle \hat{\mathbf{a}}_i. \quad (\text{T2.53})$$

Alt dette er selvsagt veldig trivielt, men nedenfor skal vi se at vi kan bruke akkurat den samme regneteknikken for funksjoner.

2.5.b Fullstendige sett av funksjoner

Som forklart i Hemmer og i avsnitt 2.4.d ovenfor, kan vi betrakte normerbare bølgefunksjoner som vektorer i et uendelig-dimensjonalt komplekst vektorrom. En basis for dette vektorrommet må følgelig bestå av uendelig mange funksjoner.

Det merkelige er at egenfunksjonssettene til hermiteske operatorer danner slike basis-sett, eller **fullstendige sett** av funksjoner, som vi kaller dem. Et eksempel på en slik hermitesk operator er Hamilton-operatoren for den endimensjonale harmoniske oscillatoren,

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2.$$

Denne har som vi har nevnt det diskrete og ikke-degenererte spektrumet

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

Vi skal senere se at hver av de tilhørende ortonormerte egenfunksjonene,

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n \left(x \sqrt{m\omega/\hbar} \right) e^{-m\omega x^2/2\hbar} \quad (\langle \psi_k, \psi_n \rangle = \delta_{kn}), \quad (\text{T2.54})$$

går som et **Hermite-polynom** H_n (av grad n) i den dimensjonsløse variabelen $x\sqrt{m\omega/\hbar} \equiv \xi$ multiplisert med Gauss-funksjonen $\exp(-m\omega x^2/2\hbar) \equiv \exp(-\xi^2/2)$ (som sikrer normerbarheten). Merk at antallet slike funksjoner ganske riktig er uendelig.

Det kan bevises matematisk at dette funksjons-settet er fullstendig. Med dette mener vi at en vilkårlig, kvadratisk integrerbar funksjon $g(x)$ kan utvikles i dette settet,

$$g(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x), \quad (\text{T2.55})$$

analogt med at vektoren \mathbf{a} kan utvikles i de to enhetsvektorene $\hat{\mathbf{a}}_1$ og $\hat{\mathbf{a}}_2$. I formelen ovenfor spiller altså den normerte egenfunksjonen $\psi_n(x)$ rollen som “enhetsvektor”. Og på samme måte som i forrige avsnitt gjør *ortogonaliteten* til disse “enhetsvektorene” det lett å bestemme utviklingskoeffisientene c_n . Disse er ganske enkelt projeksjonene av den aktuelle funksjonen $g(x)$ på de respektive “enhetsvektorene” $\psi_n(x)$,

$$c_n = \langle \psi_n, g \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) g(x) dx, \quad (\text{T2.56})$$

analogt med at $a_i = \langle \hat{\mathbf{a}}_i, \mathbf{a} \rangle$. Dette kan vi forvise oss om ved å *regne ut* disse projeksjonene:

$$\langle \psi_n, g \rangle = \left\langle \psi_n, \sum_k c_k \psi_k \right\rangle = \sum_k c_k \langle \psi_n, \psi_k \rangle = \sum_k c_k \delta_{nk} = c_n, \quad \text{q.e.d.} \quad (\text{T2.57})$$

Analogt med formelen $\mathbf{a} = \sum_i a_i \hat{\mathbf{a}}_i = \sum_i \langle \hat{\mathbf{a}}_i, \mathbf{a} \rangle \hat{\mathbf{a}}_i$, ser altså utviklingsformelen for den vilkårlige funksjonen $g(x)$ slik ut:

$$g(x) = \sum_n c_n \psi_n(x) = \sum_n \langle \psi_n, g \rangle \psi_n(x). \quad (\text{T2.58})$$

Utviklingsformelen \implies fullstendighetsrelasjonen

At den vilkårlige funksjonen $g(x)$ kan utvikles på denne måten, innebærer at egenfunksjonssettet $\psi_n(x)$ må ha en spesiell egenskap; de må oppfylle den såkalte **fullstendighetsrelasjonen**. Dette kan vi lett vise ved en liten omskriving av formelen ovenfor: Ved å skrive ut integralet for skalarproduktet (med integrasjonsvariabelen x') og bytte rekkefølge på summasjon og integrasjon finner vi at

$$g(x) = \sum_n \left(\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x') g(x') dx' \right) \psi_n(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\sum_n \psi_n(x) \psi_n^*(x') \right) g(x') dx'. \quad (\text{T2.59})$$

Denne kan vi sammenligne med relasjonen (jf (T2.42))

$$g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x') g(x') dx'. \quad (\text{T2.60})$$

Siden disse relasjonene gjelder for alle kontinuerlige (og kvadratisk integrerbare) funksjoner $g(x)$, kan de to formlene ovenfor bare være forenlige dersom egenfunksjonssettet oppfyller den såkalte **fullstendighetsrelasjonen**:

$$\sum_n \psi_n(x) \psi_n^*(x') = \delta(x - x').$$

(T2.61)

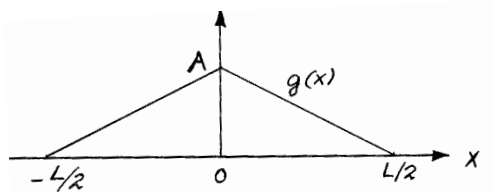
Fullstendighetsrelasjonen \implies utviklingsformelen

Vi har nettopp utledet fullstendighetsrelasjonen fra utviklingsformelen. Men det går også an å gå motsatt vei: Ved å erstatte δ -funksjonen i identiteten (T2.60) med venstresiden i (T2.61) finner vi at utviklingsformelen følger fra fullstendighetsrelasjonen:

$$\begin{aligned} g(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x') g(x') dx' = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\sum_n \psi_n(x) \psi_n^*(x') \right) g(x') dx' \\ &= \sum_n \left(\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x') g(x') dx' \right) \psi_n(x) \\ &\equiv \sum_n \langle \psi_n, g \rangle \psi_n(x) \equiv \sum_n c_n \psi_n(x). \end{aligned} \quad (\text{T2.62})$$

Utviklingsformelen og fullstendighetsrelasjonen er altså helt ekvivalente.

For egenfunksjonssettet ovenfor kan fullstendigheten som nevnt bevises. Slike bevis er også gjennomført for egenfunksjonene til mange andre av de mest brukte hermiteske operatorene i kvantemekanikk. For hermiteske operatorer hvor bevis ikke er gitt, *antar* en i kvantemekanikken at egenfunksjonssettene er fullstendige. Dette kan om ønskelig betraktes som et postulat i den kvantemekaniske teorien.



En liten oppgave: Anta et endimensjonalt bokspotensial, lik null for $|x| < \frac{1}{2}L$ og uendelig for $|x| > \frac{1}{2}L$. Energieigenfunksjonene for dette potensialet kan (for $|x| < \frac{1}{2}L$) skrives på formen

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \cos(n\pi x/L) & \text{for } n = 1, 3, 5, \dots, \\ \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(n\pi x/L) & \text{for } n = 2, 4, 6, \dots. \end{cases}$$

Figuren ovenfor viser en funksjon $g(x)$ som er lik null for $|x| > \frac{1}{2}L$ og lik $A(\frac{1}{2}L - |x|)$ for $|x| < \frac{1}{2}L$. Hvorfor er koeffisientene c_2, c_4, c_6 osv i utviklingsformelen $g(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x)$ alle lik null?

I avsnitt 2.5.1 i Hemmer ser du hvordan formalismen essensielt er den samme for alle fullstendige sett som svarer til diskrete spektra. Også for egenfunksjonssett som svarer til *kontinuerlige* spektra vil du se i Hemmer at framgangsmåten er nesten den samme; en erstatter bare summene i utviklingsformelen og i fullstendighetsrelasjonen med integraler.

Her skal vi se på et eksempel, nemlig egenfunksjonssettet til impulsoperatoren \hat{p}_x . Som et alternativ til framgangsmåten i Hemmers 2.5.1 beviser vi først fullstendighetsrelasjonen for impuls egenfunksjonene, og bruker så denne til å utlede utviklingsformelen (jf diskusjonen ovenfor).

2.5.c Impulseigenfunksjoner som basis. Fourier-integraler

Vi har sett at impulsoperatoren $\hat{p}_x = (\hbar/i)\partial/\partial x$ er hermitesk, med et kontinuerlig spektrum $p \in (-\infty, \infty)$. I dette tilfellet er det lett å *vis*e at egenfunksjonene

$$\psi_p(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{ipx/\hbar}, \quad (\text{T2.63})$$

med deltafunksjonsnormeringen

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_p^*(x) \psi_{p'}(x) dx = \delta(p - p'), \quad (\text{T2.64})$$

danner et fullstendig sett. Her må vi vente at både fullstendighetsrelasjonen og utviklingsformelen inneholder *integraler* over alle egenverdier p (istedenfor summer over diskrete verdier). Vi venter altså å finne en fullstendighetsrelasjon på formen

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_p(x) \psi_p^*(x') dp = \delta(x - x'), \quad (\text{T2.65})$$

og en utviklingsformel som ser slik ut,

$$g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p) \psi_p(x) dp, \quad (\text{T2.66})$$

hvor funksjonen $\phi(p)$ spiller rollen som “utviklingskoeffisient”.

Bevis: Vi beviser først fullstendighetsrelasjonen (T2.65), ved å sette inn impulsegenfunksjonene (T2.63) på venstre side av (T2.65):

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_p(x) \psi_p^*(x') dp = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(x-x')(p/\hbar)} d(p/\hbar) = \delta(x - x'), \quad \text{q.e.d.}$$

Så bruker vi denne på høyresiden i identiteten (T2.60), analogt med framgangsmåten i (T2.62):

$$\begin{aligned} g(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x') g(x') dx' = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \left(\int_{-\infty}^{\infty} dp \psi_p(x) \psi_p^*(x') \right) g(x') \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dp \left(\int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi_p^*(x') g(x') \right) \psi_p(x) \\ &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} dp \langle \psi_p, g \rangle \psi_p(x) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dp \phi(p) \psi_p(x), \quad \text{q.e.d.} \end{aligned} \quad (\text{T2.67})$$

Denne utviklingsformelen,

$$g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p) \psi_p(x) dp, \quad (\text{T2.68})$$

er kjent som et **Fourier-integral**. Vi legger merke til at “utviklingskoeffisienten” $\phi(p)$ også her er en projeksjon av funksjonen $g(x)$ som skal utvikles, på “enhetsvektoren” som her er $\psi_p(x)$:

$$\phi(p) = \langle \psi_p, g \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_p^*(x) g(x) dx. \quad (\text{T2.69})$$

Denne er kjent som **Fourier-transformen** av funksjonen $g(x)$. Det er bare notasjonen som skiller disse formlene fra standardformlene for Fourier-transformasjoner som du finner side 383 i Hemmer,

$$\begin{aligned} g(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} G(k) e^{ikx} dk, \\ G(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} g(x) dx. \end{aligned} \quad (\text{T2.70})$$

(Se også Griffiths side 46, og B&J side 776.)

Et tilstrekkelig (men visstnok ikke helt nødvendig) krav for at Fourier-transformen $\phi(p)$ (eller om du vil, $G(k)$) skal eksistere, er absolutt konvergens av Fourier-integralet: Integralet

$$\int_{-\infty}^{\infty} |g(x)| dx$$

skal eksistere (være endelig). Dette kravet er litt strengere enn kravet om kvadratisk integrerbarhet (som må til for å gi normerte bølgefunksjoner). Når det førstnevnte kravet er oppfylt, har vi full frihet til å bytte rekkefølge på integrasjoner (og summerasjoner), slik vi

har gjort ovenfor. Under disse betingelsene viser det seg at Fourier-transformen har samme normering som funksjonen $g(x)$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |g(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\phi(p)|^2 dp. \quad (\text{T2.71})$$

Denne er kjent som **Parsevals relasjon**.

Legg ellers merke til at diskrete egenfunksjonssett som oscillatorfunksjonene (T2.54) er normerbare (til 1) og altså er medlemmer av “vektor-rommet av kvadratisk integrerbare funksjoner”. Impulseigenfunksjonene

$$\psi_p(x) \propto e^{ipx/\hbar} \equiv e^{ikx},$$

derimot, er ikke normerbare til 1 og krever som vi har sett δ -funksjonsnormering. Vi har derfor den merkelige situasjonen at disse danner en fullt brukbar *basis* for rommet av kvadratisk integrerbare funksjoner, samtidig som de selv ikke hører til i dette rommet. Men Fourier-analytikere vet at dette ikke er noe problem i det hele tatt. Det er helt greit å bruke basisfunksjoner som ligger utenfor dette såkalte Hilbert-rommet, så lenge disse basisfunksjonene danner et fullstendig sett.

3 dimensjoner

Det er enkelt å generalisere formelverket ovenfor til 2 eller 3 dimensjoner. For eksempel har vi at det fullstendige settet av egenfunksjoner til impulsoperatoren $\hat{\mathbf{p}} = \frac{\hbar}{i} \nabla$ er planbølgesettet

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} = \psi_{p_x}(x)\psi_{p_y}(y)\psi_{p_z}(z). \quad (\text{T2.72})$$

Dette settet oppfyller fullstendighetsrelasjonen

$$\int \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{p}'}^*(\mathbf{r}) d^3r = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'), \quad (\text{T2.73})$$

og danner en basis for det tredimensjonale Fourier-integralet: En vilkårlig kvadratisk integrerbar funksjon $g(\mathbf{r})$ kan utvikles som

$$g(\mathbf{r}) = \int \phi(\mathbf{p}) \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) d^3p, \quad (\text{T2.74})$$

og Fourier-transformen er projeksjonen av funksjonen $g(\mathbf{r})$ på “enhetsvektoren” $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$,

$$\phi(\mathbf{p}) = \langle \psi_{\mathbf{p}}, g \rangle = \int \psi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}) g(\mathbf{r}) d^3r. \quad (\text{T2.75})$$

Men andre fullstendige sett kan også brukes; se avsnitt 2.5.1 i Hemmer. Som et spesielt eksempel kan vi nevne egenfunksjonene til H-atomet (Coulomb-problemet), med

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}.$$

I dette tilfellet er de bundne tilstandene kvadratisk integrerbare, mens de ubundne krever deltafunksjonsnormering. I slike tilfeller vil utviklingsformelen og fullstendighetsrelasjonen inneholde både en sum (over diskrete egenverdier) og et integral over kontinuerlige. De bundne tilstandene alene danner altså ikke et fullstendig sett. Se f.eks B&J, avsnitt 5.3.

En liten oppgave: Gauss-funksjonen

$$g(x) = (2\pi\sigma^2)^{-1/4} e^{-x^2/4\sigma^2}$$

kan i likhet med veldig mange andre funksjoner skrives som et Fourier-integral,

$$g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p) \psi_p(x) dp, \quad \text{med} \quad \psi_p(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{ipx/\hbar}. \quad (1)$$

Vis at Fourier-transformen av $g(x)$, $\phi(p) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_p^*(x) g(x) dx$, er gitt ved

$$\phi(p) = \left(\frac{2\sigma^2}{\pi\hbar^2} \right)^{1/4} e^{-\sigma^2 p^2 / \hbar^2}.$$

Som en kontroll kan du sette dette resultatet inn i integralet (1) for å se om du reproducerer den opprinnelige funksjonen $g(x)$. Oppgitt:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2+bx} dx = \sqrt{\pi/a} e^{b^2/4a} \quad (\Re(a) > 0).$$

2.5.d Fysisk tolkning av utviklingskoeffisientene

(Jf 2.5.2 i Hemmer)

Fourier-analyse, basert på fullstendigheten til impulsegenfunksjonene, er et viktig redskap på mange områder i fysikk og teknologi. Men hvorfor er også fullstendigheten til alle de andre egenfunksjonssettene til hermiteske operatorer og de resulterende utviklingsformlene så viktige i kvantemekanikk?

Mye av svaret ligger i **den fysiske tolkningen av utviklingskoeffisientene**. Også dette er nydelig beskrevet i Hemmer, i avsnitt 2.5.2, så det som kommer her blir bare en variasjon over samme tema. For å skjønne dette resonnementet må vi prøve å holde to tanker i hodet på én gang. Den ene er at vi tenker på et fysisk system (egentlig et ensemble), preparert i en fysisk tilstand som beskrives av en normert bølgefunksjon Ψ . Denne kan vi tenke på som en funksjon som avhenger både av rom og tid, eller som den romlige bølgefunksjonen ved et bestemt tidspunkt.

Den andre tanken er at vi kan gjøre målinger av en observabel F på dette systemet. (Vi kan f.eks måle energien E .) Anta for enkelhets skyld at den tilhørende hermiteske operatoren \hat{F} har et diskret, ikke-degenerert⁸ spektrum $\{f_n\}$ med et tilhørende ortonormert egenfunksjonssett ψ_n :

$$\hat{F}\psi_n = f_n\psi_n; \quad \langle \psi_k, \psi_n \rangle \equiv \int \psi_k^* \psi_n d\tau = \delta_{kn}. \quad (\text{T2.76})$$

Da kan vi utvikle systemtilstanden Ψ i det fullstendige settet ψ_n :

$$\Psi = \sum_n c_n \psi_n; \quad c_n = \langle \psi_n, \Psi \rangle \equiv \int \psi_n^* \Psi d\tau. \quad (\text{T2.77})$$

⁸Vi kaller en egenverdi **ikke-degenerert** når det finnes bare én egenfunksjon med denne egenverdien.

Dette kan vi bruke i beregningen av forventningsverdien av observabelen F ved målingene. Ved hjelp av (T2.16) har vi:

$$\begin{aligned}
 \langle F \rangle_{\Psi} &= \int \Psi^* \hat{F} \Psi d\tau = \int (\hat{F} \Psi)^* \Psi d\tau \\
 &= \int \left(\hat{F} \sum_n c_n \psi_n \right)^* \Psi d\tau = \int \left(\sum_n c_n \hat{F} \psi_n \right)^* \Psi d\tau \\
 &= \sum_n c_n^* f_n \underbrace{\int \psi_n^* \Psi d\tau}_{c_n} \quad (f_n \text{ reell}) \\
 &= \sum_n c_n^* f_n c_n = \sum_n |c_n|^2 f_n.
 \end{aligned} \tag{T2.78}$$

Samtidig forteller målepostulatet (se side 23 i Hemmer) at hver måling av F må gi en av egenverdiene f_n og etterlate systemet i den tilhørende egentilstanden ψ_n . Ifølge sannsynlighetsregning betyr dette at forventningsverdien også kan uttrykkes som følger:

$$\langle F \rangle_{\Psi} = \sum_n P_n f_n, \tag{T2.79}$$

der P_n er sannsynligheten for å måle egenverdien f_n . Ved å sammenligne disse to formlene ser vi at sannsynligheten må være lik kvadratet av utviklingskoeffisienten:

$$P_n = |c_n|^2.$$

Moralen som vi kan trekke ut av dette resonnementet er følgende fysiske tolkning av utviklingskoeffisientene i (T2.56):

Når systemet er i tilstanden Ψ , så er sannsynligheten for at en måling av F gir egenverdien f_n (og etterlater systemet i tilstanden ψ_n)

$$P_n = |c_n|^2 = |\langle \psi_n, \Psi \rangle|^2 \equiv \left| \int \psi_n^* \Psi d\tau \right|^2. \tag{T2.80}$$

På grunn av dette kalles selve utviklingskoeffisienten c_n ofte for **sannsynlighetsamplituden** for å måle f_n (og etterlate systemet i den tilhørende egentilstanden ψ_n). Her er det viktig å legge seg på minnet at denne amplituden ganske enkelt er projeksjonen av systemtilstanden Ψ før målingen på den resulterende tilstanden ψ_n etter målingen;

$$c_n = \langle \psi_n, \Psi \rangle.$$

Dette er en sentral regel i kvantemekanikk. Merk at en måling normalt vil *endre* tilstanden til det kvantemekaniske systemet. Dette er snarere en regel enn et unntak. Et eksempel er når vi f.eks måler energien E_n for et system, og etterlater systemet i energiegentilstanden ψ_n . Dersom systemet ikke var i denne tilstanden før målingen, er tilstanden blitt endret. Men etter denne målingen vil en ny måling av energien gi samme verdi E_n og *ikke* endre tilstanden.

Merk ellers at summen av sannsynlighetene er lik 1:

$$\sum_n P_n = \sum_n |c_n|^2 = 1.$$

Dette svarer til at tilstanden Ψ er normert (jf ligning (T2.11)).

En liten oppgave: En harmonisk oscillator er preparert i en tilstand beskrevet ved bølgefunksjonen

$$\psi(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-m\omega(x-a)^2/2\hbar},$$

altså en bølgefunksjon med samme form som grunntilstanden for oscillatoren, bare forskjøvet et stykke a i forhold til denne. Hva er sannsynligheten for at en måling av energien til denne oscillatoren gir grunntilstandsenergien $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$? Hva blir oscillatorens tilstand etter en måling med dette resultatet? Kontrollér at den nevnte sannsynligheten har fornuftige verdier for $a = 0$ og for $a \rightarrow \infty$. (Oppgitt: Integralet side 31.)

Et enkelt eksempel

La systemet være en partikkel i boks, med energieigenfunksjonene $\psi_n(x) = \sqrt{2/L} \sin(n\pi x/L)$ og energieigenverdiene $E_n = n^2 E_1$; $E_1 = \hbar^2 \pi^2 / (2mL^2)$; $n = 1, 2, \dots$. Da vet vi at

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

er (stasjonære) løsninger av Schrödingerligningen for boksen,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \widehat{H} \Psi(x, t).$$

Ifølge superposisjonsprinsippet vil også lineærkombinasjoner av slike stasjonære tilstander oppfylle Schrödingerligningen og beskrive akseptable fysiske tilstander. Som et enkelt eksempel på en slik ikke-stasjonær tilstand kan vi se på bølgefunksjonen

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{2}\sqrt{3} e^{-iE_1 t/\hbar} \psi_1(x) + \frac{1}{2} e^{-iE_2 t/\hbar} \psi_2(x).$$

I dette tilfellet er det bare to sannsynlighetsamplituder som er forskjellige fra null,

$$c_1 = \frac{1}{2}\sqrt{3} e^{-iE_1 t/\hbar} \quad \text{og} \quad c_2 = \frac{1}{2} e^{-iE_2 t/\hbar}.$$

Vi merker oss at summen av de to sannsynlighetene er

$$\sum_n |c_n|^2 = |c_1|^2 + |c_2|^2 = \frac{3}{4} + \frac{1}{4} = 1,$$

som i realiteten svarer til at Ψ er normert. (Dette kan du prøve å sjekke.) Når boks-systemet er preparert i denne tilstanden Ψ , vil en energimåling gi grunntilstandsenergien E_1 (og etterlate systemet i grunntilstanden) med sannsynligheten $3/4$, mens sannsynligheten for å måle energien $E_2 (= 4E_1)$ og etterlate systemet i første eksiterte tilstand er $1/4$. Forventningsverdien av energien er

$$\langle E \rangle_\Psi = \sum_n |c_n|^2 E_n = \frac{3}{4} E_1 + \frac{1}{4} \cdot 4E_1 = \frac{7}{4} E_1.$$

En kan også mere seg med å regne ut usikkerheten i energien i denne tilstanden.

2.5.e Måling av degenerert egenverdi ***⁹

I tilfeller der den målte egenverdien er degenerert, må vi gjøre noen presiseringer, både når det gjelder målepostulatet og tolkningen av utviklingskoeffisientene.

Som et eksempel kan vi tenke på en tredimensjonal isotrop harmonisk oscillator [med $V = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 y^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 z^2$.] Ved å skrive energieigenfunksjonene som produkter av endimensjoale oscillator egenfunksjoner (én for hver av de tre retningene x , y og z) er det lett å se at energinivåene er

$$E_N = \hbar\omega(N + 3/2), \quad N = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{T2.81})$$

(Se side 83 i Hemmer.) For $N \geq 1$ finner en at disse nivåene er degenerert, med degenerasjonsgrad

$$g_N = \frac{1}{2}(N+1)(N+2). \quad (\text{T2.82})$$

For et gitt energikvantetall N er det altså g_N energiegentilstander med samme energi E_N ,

$$\psi_{Ni}, \quad i = 1, 2, \dots, g_N.$$

Tilsammen danner alle disse tilstandene et fullstendig sett, som kan brukes til å utvikle en vilkårlig kvadratisk integrerbar funksjon $g(\mathbf{r})$, deriblant tilstanden Ψ som vi har valgt å preparere oscillatoren i (systemtilstanden):

$$\Psi = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{i=1}^{g_N} c_{Ni} \psi_{Ni} = c_{01} \psi_{01} + \sum_{i=1}^3 c_{1i} \psi_{1i} + \sum_{i=1}^6 c_{2i} \psi_{2i} + \dots \quad (\text{T2.83})$$

Utviklingskoeffisientene er projeksjonene

$$c_{Ni} = \langle \psi_{Ni}, \Psi \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{Ni}^* \Psi d^3r. \quad (\text{T2.84})$$

En serie av målinger av energien på denne oscillatortilstanden Ψ vil gi en middelerdi like i nærheten av den teoretiske forventningsverdien, som kan uttrykkes ved utviklingskoeffisientene, på samme måte som i (T2.78):

$$\begin{aligned} \langle E \rangle_{\Psi} &= \int (\widehat{H}\Psi)^* \Psi d^3r \\ &= \int \left(\sum_N \sum_i c_{Ni} \widehat{H} \psi_{Ni} \right)^* \Psi d^3r \\ &= \sum_N \sum_i c_{Ni}^* E_N \underbrace{\int \psi_{Ni}^* \Psi d^3r}_{c_{Ni}} \\ &= \sum_N \left(\sum_{i=1}^{g_N} |c_{Ni}|^2 \right) E_N. \end{aligned} \quad (\text{T2.85})$$

Samtidig har vi at

$$\langle E \rangle_{\Psi} = \sum_N P_N E_N, \quad (\text{T2.86})$$

⁹Avsnitt merket *** er ikke pensum i begynnerkurset

der P_N er sannsynligheten for å måle energien E_N . Så sannsynligheten for å måle den degenererte energieigenverdien E_N er

$$P_N = \sum_{i=1}^{g_N} |c_{Ni}|^2. \quad (\text{T2.87})$$

Umiddelbart etter denne målingen av energien E_N vil oscillatoren være i en tilstand beskrevet ved (den normerte) bølgefunksjonen

$$\psi_N \equiv \frac{\sum_{i=1}^{g_N} c_{Ni} \psi_{Ni}}{\|\sum_{i=1}^{g_N} c_{Ni} \psi_{Ni}\|} = \frac{\sum_{i=1}^{g_N} c_{Ni} \psi_{Ni}}{\sqrt{\sum_{i=1}^{g_N} |c_{Ni}|^2}}. \quad (\text{T2.88})$$

Så den delen av den opprinnelige bølgefunksjonen Ψ som “ikke er forenlig med energien E_N skrelles altså bort” ved denne målingen. Dette viser hvordan målepostulatet (side 23 i Hemmer) må formuleres når en egenverdi er degenerert. For den ikke-degenererte grunntilstanden ($N = 0$) kan du legge merke til at tilstanden etter målingen (av E_0) ifølge denne formelen blir

$$\frac{c_{01} \psi_{01}}{\|c_{01} \psi_{01}\|} = \frac{c_{01}}{|c_{01}|} \psi_{01},$$

i tråd med formuleringen side 23. (Fasefaktoren $c_{01}/|c_{01}|$ er uten betydning.)

2.5.f Fysisk tolkning i det kontinuerlige tilfellet

Den fysiske tolkningen av utviklingskoeffisientene i det kontinuerlige tilfellet er veldig klart og konsist beskrevet side 33–34 i Hemmer. (Se også Griffiths side 106–107 og B&J side 208.)

Her skal vi igjen se på eksemplet med impulsegenfunksjonene

$$\psi_p(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{ipx/\hbar}, \quad \hat{p}_x \psi_p(x) = p \psi_p(x), \quad p \in (-\infty, \infty). \quad (\text{T2.89})$$

Istedenfor en vilkårlig funksjon $g(x)$ velger vi denne gangen å utvikle den tidsavhengige bølgefunksjonen $\Psi(x, t)$ for et endimensjonalt kvantemekanisk system:

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(p, t) \psi_p(x) dp. \quad (\text{T2.90})$$

Siden $\Psi(x, t)$ avhenger av tiden vil også Fourier-transformen $\Phi(p, t)$ gjøre det:

$$\Phi(p, t) = \langle \psi_p, \Psi(t) \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \psi_p^*(x) \Psi(x, t) dx. \quad (\text{T2.91})$$

I tråd med (T2.78) er opplegget videre å beregne forventningsverdien av observabelen p_x i tilstanden Ψ :

$$\begin{aligned} \langle p_x \rangle_{\Psi} &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, t) \hat{p}_x \Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx (\hat{p}_x \Psi(x, t))^* \Psi(x, t) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\hat{p}_x \int_{-\infty}^{\infty} dp \Phi(p, t) \psi_p(x) \right)^* \Psi(x, t). \end{aligned}$$

Her erstatter vi $\hat{p}_x \psi_p(x)$ med $p \psi_p(x)$ og bytter rekkefølge på integrasjonene:

$$\begin{aligned} \langle p_x \rangle_{\Psi} &= \int_{-\infty}^{\infty} dp \Phi^*(p, t) p \left(\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_p^*(x) \Psi(x, t) \right) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(p, t) p \Phi(p, t) dp = \int_{-\infty}^{\infty} p |\Phi(p, t)|^2 dp. \end{aligned}$$

På den annen side har vi at

$$\langle p_x \rangle_\Psi = \int_{-\infty}^{\infty} p P(p) dp,$$

der $P(p)$ er sannsynlighetstettheten i “ p -rommet” [slik at $P(p)dp$ er sannsynligheten for å måle impulsen p_x i intervallet $(p, p+dp)$]. Den fysiske tolkningen av “utviklingskoeffisienten”, Fourier-transformen $\Phi(p, t)$, er altså:

Når systemet før målingen er i tilstanden $\Psi(x, t)$, så er sannsynligheten for å måle p_x i intervallet $(p, p + dp)$

$$P(p)dp = |\Phi(p, t)|^2 dp = |\langle \psi_p, \Psi \rangle|^2 dp \equiv \left| \int \psi_p^*(x) \Psi(x, t) d\tau \right|^2 dp.$$

(T2.92)

Sannsynlighetstettheten i “ p -rommet” er altså kvadratet av Fourier-transformen $\Phi(p, t)$. Dette er analogt med at sannsynlighetstettheten i x -rommet er $|\Psi(x, t)|^2$.

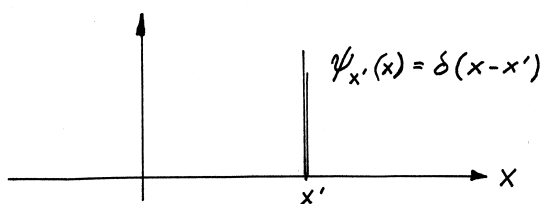
2.5.g Posisjons-egenfunksjonene $\delta(x - x') \equiv \psi_{x'}(x)$ som basis (“ x -basisen”)

Relasjonen

$$x\delta(x - x') = x'\delta(x - x') \quad (\text{T2.93})$$

kan tolkes som en egenverdiligning for operatoren $\hat{x} = x$ (multiplikasjon med tallet x). Her er x' egenverdien, og vi ser at den x -avhengige egenfunksjonen som svarer til denne egenverdien er

$$\delta(x - x') \equiv \psi_{x'}(x) \quad (\text{en funksjon av } x).$$



(Til sammenligning er $\psi_p(x)$ en impulsegenfunksjon med egenverdien p .) Det kontinuerlige spektret $x' \in (-\infty, \infty)$ av egenverdier innebærer at vi må bruke δ -funksjonsnormering:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{x'}^*(x) \psi_{x''}(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x') \delta(x - x'') dx = \delta(x' - x''), \quad (\text{T2.94})$$

analogt med normeringen

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_p^*(x) \psi_{p'}(x) dx = \delta(p - p')$$

for impulsegenfunksjonene.

Posisjonsegenfunksjonene $\psi_{x'}(x) = \delta(x - x')$ er fullt brukbare som en basis for “rommet av kvadratisk integrerbare funksjoner”, selv om heller ikke disse basisfunksjonene hører til i

dette funksjonsrommet. Vi kan f.eks utvikle en systembølgefunksjon Ψ . Denne utviklingen følger direkte fra identiteten

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x', t) \delta(x - x') dx' = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x', t) \psi_{x'}(x) dx'. \quad (\text{T2.95})$$

“Utviklingskoeffisienten” er altså $\Psi(x', t)$. Denne utviklingen er analog med

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(p, t) \psi_p(x) dp.$$

Inspirert av (T2.92) kan vi da tolke $|\Psi(x', t)|^2 dx'$ som sannsynligheten for å måle posisjonen i intervallet $(x', x' + dx')$. Dette gjenkjenner vi som sannsynlighetstolkningen av bølgefunksjonen. Dette illustrerer at rollen som $|\Psi(x, t)|^2$ spiller i posisjons-rommet er den samme som spilles av $|\Phi(p, t)|^2$ i impuls-rommet.

2.6 Impulsrepresentasjonen av kvantemekanikk***¹⁰

Denne “likheten” mellom sannsynlighetstetthetene i posisjons-og impuls-rommene er ingen tilfeldighet. Som forklart i avsnitt 4.6 i Hemmer, er det lett å formulere en versjon av teorien hvor Fourier-transformen $\Phi(p, t)$ av $\Psi(x, t)$ spiller rollen som “bølgefunksjon i impuls-rommet”. Denne rollen er analog med den som spilles av den ordinære bølgefunksjonen $\Psi(x, t)$ i **posisjonsrom-formuleringen av kvantemekanikk**, som vi nå etter hvert er i ferd med å bli vant med, og som er den som brukes mest på dette nivået.

I den nye formuleringen, **impulsrom-formuleringen av kvantemekanikk**, kjenner vi alt oppskriften for å beregne forventningsverdier av observable som bare avhenger av p_x , som f.eks $K = p_x^2/2m$. Siden sannsynlighetstettheten i impulsrommet er $|\Phi(p, t)|^2$, har vi at

$$\langle F(p_x) \rangle_{\Phi} = \int_{-\infty}^{\infty} |\Phi(p, t)|^2 F(p) dp = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(p, t) F(p) \Phi(p, t) dp, \quad (\text{T2.96})$$

som er analog med

$$\langle V(x) \rangle_{\Psi} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) V(x) \Psi(x, t) dx$$

i posisjonsrom-formuleringen. Moralen er at observabelen p_x i impulsrom-formuleringen representeres av en operator som ganske enkelt er lik *tallet* p ,

$$\hat{p}_x = p. \quad (\text{T2.97})$$

Dette er analogt med at $\hat{x} = x$ i posisjonsrom-formuleringen.

Hva så med operatorene som skal representere x og funksjoner av x (som f.eks $V(x)$) i den nye formuleringen? For å finne svaret på dette kan vi anta at $V(x)$ kan Taylor-utvikles,

$$V(x) = \sum_n v_n x^n,$$

hvor koeffisientene er v_n . Forventningsverdiene av x og potenser av x kan vi finne med utgangspunkt i den gamle formuleringen, hvor forventningsverdien av x^n er

$$\begin{aligned} \langle x^n \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) x^n \Psi(x, t) dx = \int_{-\infty}^{\infty} (x^n \Psi)^* \Psi dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(x^n \int_{-\infty}^{\infty} dp \Phi(p, t) \psi_p(x) \right)^* \Psi(x, t). \end{aligned}$$

¹⁰Avsnitt merket med *** er ikke pensum i begynnerkurset.

Her benytter vi oss av identiteten

$$x e^{ipx/\hbar} = \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \right) e^{ipx/\hbar}, \quad (\text{T2.98})$$

som betyr at

$$x^n \psi_p(x) = \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \right)^n \psi_p(x). \quad (\text{T2.99})$$

Innsetting og ordning gir da

$$\begin{aligned} \langle x^n \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\int_{-\infty}^{\infty} dp \Phi(p, t) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \right)^n \psi_p(x) \right)^* \Psi(x, t) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dp \Phi^*(p, t) \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \right)^n \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_p^*(x) \Psi(x, t)}_{\Phi(p, t)} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dp \Phi^*(p, t) \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \right)^n \Phi(p, t). \end{aligned} \quad (\text{T2.100})$$

Ved å sammenligne med den generelle “sandwich-oppskriften” for forventningsverdier,

$$\langle F \rangle_{\Phi} = \int_{-\infty}^{\infty} dp \Phi^*(p, t) \hat{F} \Phi(p, t), \quad (\text{T2.101})$$

kan vi konkludere med at observabelen x^n i impulsrom-formuleringen representeres av n^{te} potens av operatoren

$$\hat{x} = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p}. \quad (\text{T2.102})$$

For en funksjon av x som f.eks $V(x) = \sum v_n x^n$ finner vi at

$$\langle V(x) \rangle_{\Phi} = \int_{-\infty}^{\infty} dp \Phi^*(p, t) \left[\sum_n v_n \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \right)^n \right] \Phi(p, t). \quad (\text{T2.103})$$

Den potensielle energien representeres altså av operatoren

$$\sum_n v_n \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \right)^n \equiv \hat{V} \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \right).$$

Dette kalles en **operatorfunksjon**, og Taylor-utviklingen på venstresiden viser hva vi mener med dette begrepet. Som et eksempel svarer det harmoniske oscillator-potensialet $V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$ til operatoren $\hat{V} = \frac{1}{2} m \omega^2 \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \right)^2$.

Vi har nå lært oss å beregne forventningsverdier av observable som avhenger av x og p_x i den nye formuleringen, vha “bølgefunksjonen” $\Phi(p, t)$. Men kan vi være sikre på at denne funksjonen inneholder all mulig informasjon om systemet, slik $\Psi(x, t)$ gjør ifølge tilstands-postulatet side 7? Svaret er ja: Kjenner vi $\Phi(p, t)$, så kjenner vi også $\Psi(x, t)$, via Fourier-integralet

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(p, t) \psi_p(x) dp,$$

og vice versa, via Fourier-transformen

$$\Phi(p, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_p^*(x) \Psi(x, t) dx.$$

Så de to funksjonene inneholder den samme informasjonen.

Men står ikke $\Psi(x, t)$ i en særstilling, siden den oppfyller en bølgeligning, Schrödingerligningen? Svaret er nei: Det eksisterer en bølgeligning også for $\Phi(p, t)$. Denne kan vi finne ved å starte med den deriverte $i\hbar(\partial/\partial t)\Phi(p, t)$ og håpe på det beste: Ved å sette inn formelen ovenfor finner vi

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(p, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_p^*(x) i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) dx && \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = [\hat{p}_x^2/2m + V(x)] \Psi \right) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_p^*(x) \underbrace{[\hat{p}_x^2/2m + V(x)]}_{\text{hermitesk}} \Psi(x, t) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\left[\hat{p}_x^2/2m + \sum_n v_n x^n \right] \psi_p(x) \right)^* \Psi(x, t) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\left[p^2/2m + \sum_n v_n \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \right)^n \right] \psi_p(x) \right)^* \Psi(x, t) dx. \end{aligned}$$

Her har vi brukt at

$$\hat{p}_x \psi_p(x) = p \psi_p(x) \quad \text{og} \quad x \psi_p(x) = \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \right) \psi_p(x).$$

I det siste uttrykket kan vi flytte operatoren $[]^*$ til venstre for integraltegnet, fordi den ikke avhenger av x , og får:

$$\begin{aligned} \dots &= \left[p^2/2m + \sum_n v_n \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \right)^n \right] \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \psi_p^*(x) \Psi(x, t) dx}_{\Phi(p, t)} \\ &= \left[p^2/2m + \hat{V} \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \right) \right] \Phi(p, t) \equiv \widehat{H} \Phi(p, t). \end{aligned} \quad (\text{T2.104})$$

Dette må vi jo si er en suksess: Φ oppfyller en bølgeligning, og formen er jo slik at vi kan kalle også denne en Schrödingerligning!

Vi har altså to ekvivalente utgaver av kvantemekanikken, posisjonsrom-formuleringen (posisjonsrepresentasjonen) og impulsrom-formuleringen (impulsrepresentasjonen). Denne situasjonen oppsummeres av tabellen side 81 i Hemmer, hvor formalismen er generalisert til 3 dimensjoner. Med betegnelsene x, y, z (eller x_i , $i = 1, \dots, 3$) for de kartesiske koordinatene ser tabellen ut som nedenfor, hvor vi ser at begge bølgefunksjonene oppfyller Schrödingerligningen, med en Hamilton-operatoren gitt ved den generelle formelen

$$\widehat{H}(\hat{x}_i, \hat{p}_i) = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2}{2m} + \widehat{V}(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}).$$

Eksempel: Fri partikkel

For en fri partikkel i én dimensjon ($V = 0$) ser Schrödingerligningen i impulsrepresentasjonen slik ut:

$$i\hbar \frac{\partial \Phi(p, t)}{\partial t} = \frac{p^2}{2m} \Phi(p, t) \quad (p = p_x).$$

	Posisjonsrepresentasjonen	Impulsrepresentasjonen
Bølgefunksjon	$\Psi(x, y, z, t)$	$\Phi(p_x, p_y, p_z, t)$
Operator \hat{x}_i	x_i	$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p_i}$
Operator \hat{p}_i	$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_i}$	p_i
Bølgeligning	$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \widehat{H}(\hat{x}_i, \hat{p}_i) \Psi$	$i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t} = \widehat{H}(\hat{x}_i, \hat{p}_i) \Phi$

Her betyr $\partial/\partial t$ derivasjon med fastholdt p . Da er det lett å se (f.eks ved innsetting) at den tidsavhengige bølgefunksjonen i impulsrommet blir

$$\Phi(p, t) = \Phi(p, 0) e^{-i(p^2/2m)t/\hbar}. \quad (\text{T2.105})$$

Her er $\phi(p, 0)$ impulsbølgefunksjonen ved $t = 0$, som vi i prinsippet kan preparere på en vilkårlig måte, men slik at den er normert:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Phi(p, 0)|^2 dp = 1.$$

Fra løsningen (T2.105) ser vi at sannsynlighetstettheten i impulsrommet blir *tidsuavhengig* for den frie partikkelen,

$$|\Phi(p, t)|^2 = |\phi(p, 0)|^2,$$

og dette bør vel ikke overraske. Det samme vil da gjelde for alle forventningsverdier av rent p -avhengige observable, som f.eks

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(p, t) p \Phi(p, t) dp = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(p, 0) p \Phi(p, 0) dp = \langle p \rangle_{t=0},$$

$\langle p^2 \rangle$, Δp , osv. Vi kan også finne ut hvordan forventningsverdien av posisjonen oppfører seg: Fra (T2.53) og (T2.55) finner vi

$$\begin{aligned}
\langle x \rangle_t &= \int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(p, t) \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \right) \Phi(p, t) dp \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(p, 0) e^{i(p^2/2m)t/\hbar} \left[-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \Phi(p, 0) - \Phi(p, 0) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \left(-\frac{ip^2 t}{2m\hbar} \right) \right] e^{i(p^2/2m)t/\hbar} dp \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(p, 0) \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \right) \Phi(p, 0) dp + \frac{t}{m} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(p, 0) p \Phi(p, 0) dp \\
&= \langle x \rangle_{t=0} + \frac{\langle p \rangle}{m} t.
\end{aligned}$$

Forventningsverdien $\langle x \rangle_t$ beveger seg altså *jevnt*, fra $\langle x \rangle_{t=0}$ ved $t = 0$, og med hastigheten $\langle p \rangle / m$. Dette harmonerer med Newtons første lov.

2.7 Stasjonære og ikke-stasjonære tilstander

2.7.a Stasjonære tilstander (Hemmer s 26, Griffiths s 21)

Vi har i TFY4215 først innført begrepet stasjonær tilstand for å betegne den *fysiske tilstanden* til f.eks et hydrogenatom i “grunntilstanden”, i tråd med Bohrs idé. Senere så vi, på den teoretiske siden, at når Schrödinger kunne finne en egenfunksjon til Hamilton-operatoren \widehat{H} ,

$$\widehat{H}\psi_n(\mathbf{r}) = E_n\psi_n(\mathbf{r}),$$

så er

$$\Psi_n(\mathbf{r}, t) = \psi_n(\mathbf{r})e^{-iE_nt/\hbar}$$

en løsning av (den tidsavhengige) Schrödingerligningen.¹¹ Denne løsningstypen tillot vi oss å kalle en stasjonær løsning (av Schrödingerligningen), fordi den så ut til å gi en teoretisk beskrivelse av den fysiske stasjonære tilstanden. Etter hvert blir en gjerne litt mer løsaktig med språkbruken: Uttrykket stasjonær tilstand brukes både om den fysiske tilstanden og om den tilhørende teoretiske løsningen $\Psi(\mathbf{r}, t)$ av Schrödingerligningen.

I Hemmer side 26 kan du se hvordan stasjonære løsninger dukker opp på en naturlig måte når en forsøker å separere tids- og rom-avhengigheten i Schrödingerligningen, ved å lete etter løsninger på formen

$$\Psi(x, t) = \psi(x)f(t).$$

Det viser seg da at separasjonen bare er mulig dersom

- (i) \widehat{H} er tidsuavhengig,
- (ii) $\psi(x)$ er en egenfunksjon til \widehat{H} ,

dvs ψ må være en løsning av den tidsuavhengige Schrödingerligningen, $\widehat{H}\psi_E(x) = E\psi_E(x)$.

Det er da veldig lett å finne $f(t)$. Den tids-avhengige Schrödingerligningen gir

$$i\hbar \frac{\partial f}{\partial t} \cdot \psi_E(x) = f(t) \widehat{H}\psi_E(x) = f(t) E \psi_E(x).$$

Her betyr den partiell-deriverte $\partial/\partial t$ derivasjon med hensyn på t med fastholdt x . Og med fastholdt x er det lett å integrere ligningen ovenfor over tiden, fra 0 til t :

$$\frac{df}{f} = -\frac{iE}{\hbar} dt \quad \implies \quad \ln f(t) = \ln f(0) - \frac{iEt}{\hbar}, \quad \implies$$

$$f(t) = f(0) e^{-iEt/\hbar}.$$

Konstanten $f(0)$ kan vi trekke inn i $\psi(x)$, slik at løsningen blir

$\Psi_E(x, t) = \psi_E(x) e^{-iEt/\hbar}.$

(T2.106)

Dette kalles som nevnt en **stasjonær løsning** av Schrödingerligningen, fordi

¹¹Se også diskusjonen av partikkel i boks, i avsnitt 2.1.

- sannsynlighetstettheten $|\Psi_E(x, t)|^2 = |\psi_E(x)|^2$ er tidsuavhengig (ikke “beveger seg”)
- alle observable som ikke avhenger eksplisitt av tiden, som f.eks x , p_x , E etc, har tidsuavhengige forventningsverdier i den stasjonære tilstanden $\Psi_E(x, t)$. Vi har nemlig for en slik observabel $F = F(x, p_x)$:

$$\begin{aligned}\langle F \rangle_{\Psi_E} &= \int \Psi_E^*(x, t) \hat{F}(x, \hat{p}_x) \Psi_E(x, t) dx \\ &= \int \psi_E^*(x) \hat{F}(x, \hat{p}_x) \psi_E(x) dx = \text{konstant},\end{aligned}\quad (\text{T2.107})$$

(siden de tidsavhengige ekponensialfunksjonene i integranden kansellerer). Dette betyr at ekponensialfunksjonen $\exp(-iEt/\hbar)$ i realiteten er uten fysisk betydning i en stasjonær tilstand; den har ingen målbare konsekvenser. I en stasjonær tilstand er det altså ingen målbar tidsutvikling; ingen *prosesser*; *ingen ting hender!* Så tilstanden fortjener virkelig betegnelsen stasjonær.

Hvorfor er vi da så interessert i energieigenfunksjonene og de tilhørende stasjonære tilstandene? Det er (minst) fire grunner:

Grunn 1: Når et system har lavest mulig energi (i grunntilstanden), bestemmes alle egenskapene til systemet av energieigenfunksjonen $\psi(\mathbf{r})$ for denne tilstanden. Så selv om det ikke hender noe i denne tilstanden, så inneholder bølgefunksjonen mye interessant informasjon: Den bestemmer **formen** og **størrelsen** (og **energien**) og i det hele tatt *alle* de fysiske egenskapene til systemet. Dette gjelder både for isolerte atomer og for mer sammensatte systemer, som mer eller mindre komplekse molekyler, krystaller osv. Og det gjelder ikke bare for grunntilstanden, men også for eksiterte tilstander, hvor både størrelse og form kan avvike fra det en finner i grunntilstanden.

Grunn 2: Siden $\psi_E(x)$ [og også $\Psi_E(x, t) = \psi_E(x) \exp(-iEt/\hbar)$] er egenfunksjoner til \hat{H} (og \hat{H}^2) med egenverdiene E (og E^2), kan vi si at *energien er skarpt definert* i en stasjonær tilstand, dvs usikkerheten i energien er $\Delta E = 0$. [Husk at $(\Delta E)^2 = \langle (E - \langle E \rangle)^2 \rangle = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$; jf avsnitt 2.4.b.] Disse energiene er viktige i **prosesser** der systemene **eksiteres** eller **de-eksiteres**. (Jf spektrallinjer.)

2.7.b Ikke-stasjonære tilstander

Grunn 3: Ifølge superposisjonsprinsippet er også en vilkårlig lineærkombinasjon av de stasjonære løsningene $\Psi_n(x, t) = \psi_n(x) \exp(-iE_n t/\hbar)$ en løsning av Schrödingerligningen, og beskriver dermed en mulig fysisk tilstand for systemet, slik vi diskuterte for partikkel i boks i avsnitt 2.1:

$$\Psi(x, t) = \sum_n c_n \Psi_n(x, t) = \sum_n c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}. \quad (\text{T2.108})$$

Her er koeffisientene c_n vilkårlige komplekse konstanter (uavhengige av x og t). Det kan vises at $\Psi(x, t)$ er normert dersom $\sum_n |c_n|^2 = 1$ (forutsatt at settet $\psi_n(x)$ er ortonormert). Det kan også vises at uttrykket ovenfor er den mest generelle løsningen av Schrödingerligningen, dvs *alle* løsninger av Schrödingerligningen kan utvikles i de stasjonære løsningene.

Dersom summen ovenfor inneholder ledd med *forskjellige* energier E_n , blir summen *ikke* en egenfunksjon til Hamilton-operatoren \widehat{H} . Da er $\Psi(x, t)$ en ikke-stasjonær løsning av Schrödingerligningen og beskriver en ikke-stasjonær fysisk tilstand for systemet. For en slik tilstand er det lett å se at sannsynlighetstettheten $|\Psi(x, t)|^2$ og (noen av) forventningsverdiene $\langle F \rangle_\Psi$ vil avhenge av tiden (i motsetning av hva som er tilfellet for stasjonære tilstander). Grunnen til dette er selvsagt at fasefaktorene $\exp(-iE_nt/\hbar)$ “løper rundt den komplekse enhets-sirkelen med forskjellig fart”, eller forskjellige perioder $T_n = 2\pi\hbar/E_n$. Så her er disse fasefaktorene (eller egentlig forholdene mellom dem) faktisk viktige. (Slike ikke-stasjonære tilstander kommer inn i bildet når vi skal beskrive **prosesser**, der det *skjer noe*.)

Grunn 4: En sentral problemstilling i kvantemekanisk teori er “begynnelsestilstands-problemet”: Systemet prepareres i en bestemt begynnelses-tilstand ved et gitt tidspunkt, f.eks. $t = 0$. Denne tilstanden svarer til en bølgefunksjon $\Psi(x, 0)$. Spørsmålet er så hvordan tilstanden vil utvikle seg med tiden. Svaret er at tilstanden hele tiden beskrives av bølgefunksjonen $\Psi(x, t)$, som bestemmes av Schrödingerligningen. Siden $\Psi(x, t)$ alltid kan utvikles i stasjonære tilstander,

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

er problemet essensielt løst dersom vi kan finne utviklingskoeffisientene c_n . Disse bestemmes av begynnelses-tilstanden. Ved å sette $t = 0$ i utviklingen ovenfor har vi nemlig

$$\Psi(x, 0) = \sum_n c_n \psi_n(x). \quad (\text{T2.109})$$

Med erfaringene fra avsnitt 2.5.b ovenfor ser vi nå klart og tydelig at c_n er projeksjonen av $\Psi(x, 0)$ på egenfunksjonen $\psi_n(x)$, men det skader ikke å gjenta beregningen: Ved å projisere $\Psi(x, 0)$ på egentilstanden $\psi_n(x)$ finner vi at

$$\langle \psi_n, \Psi(0) \rangle = \left\langle \psi_n, \sum_k c_k \psi_k \right\rangle = \sum_k c_k \langle \psi_n, \psi_k \rangle = \sum_k c_k \delta_{nk} = \underline{c_n}, \quad \text{q.e.d.} \quad (\text{T2.110})$$

Dermed har vi funnet den tidsavhengige bølgefunksjonen:

$$\Psi(x, t) = \sum_n \langle \psi_n, \Psi(0) \rangle \psi_n(x) e^{-iE_nt/\hbar}, \quad (\text{T2.111})$$

hvor altså

$$\langle \psi_n, \Psi(0) \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \Psi(x, 0) dx. \quad (\text{T2.112})$$

Det *trivielle* eksemplet har vi nå begynnelses-tilstanden svarer til en av energieigenfunksjonene, dvs når $\Psi(x, 0) = \psi_i(x)$. (i for “initial”.) Da gir oppskriften ovenfor

$$c_n = \langle \psi_n, \Psi(0) \rangle = \langle \psi_n, \psi_i \rangle = \delta_{ni},$$

og systemet *fortsetter* å være i den tilsvarende stasjonære tilstanden:

$$\Psi(x, t) = \sum_n \delta_{ni} \psi_n(x) e^{-iE_nt/\hbar} = \psi_i(x) e^{-iE_it/\hbar} \equiv \Psi_i(x, t).$$

Konklusjon: Når en skal angripe en kvantemekanisk problemstilling der Hamilton-operatoren er tidsuavhengig, så består den grunnleggende strategien i å finne det fullstendige settet $\psi_n(x)$ av energieigenfunksjoner, og de tilhørende stasjonære løsninger $\Psi_n(x, t) = \psi_n(x) \exp(-iE_nt/\hbar)$ av Schrödingerligningen.

2.8 Bevarelse av sannsynlighet

Dette avsnittet dekkes av 2.6.1 i Hemmer, og er nydelig beskrevet der. (Avsnitt 2.6.2 er ikke pensum.) Her bare noen kommentarer.

Normeringen er bevart

For en *stasjonær* tilstand er bølgefunksjon og normeringsbetingelse gitt ved

$$\Psi_E(\mathbf{r}, t) = \psi_E(\mathbf{r})e^{-iEt/\hbar} \quad \text{og} \quad \int |\Psi_E(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r = \int |\psi_E(\mathbf{r})|^2 d^3r = 1.$$

Her ser vi at dersom bølgefunksjonen er normert for $t = 0$, så er den normert for alle tider; *sannsynligheten er bevart*. Dette må selvsagt også gjelde for ikke-stasjonære tilstander $\Psi(\mathbf{r}, t)$ — i vår ikke-relativistiske teori må jo partikkelen befinne seg et eller annet sted, dvs integralet over sannsynlighetstettheten $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ må være lik 1 hele tiden.¹² At dette holder stikk kan vi se fra utviklingen i stasjonære (og ortonormerte) tilstander,

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n \Psi_n(\mathbf{r}, t),$$

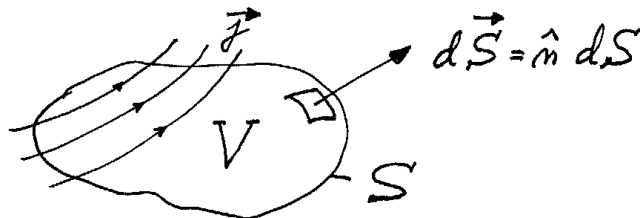
der koeffisientene c_n er tidsuavhengige. Som diskutert i avsnitt 2.1 ovenfor, vil kryssleddene i produktet av de to summene $\Psi^*(\mathbf{r}, t)$ og $\Psi(\mathbf{r}, t)$ i normeringsintegralet bli borte under integrasjonen. Normeringsbetingelsen er nemlig

$$\int \Psi^* \Psi d^3r = \int \left(\sum_m c_m^* \Psi_m^* \right) \left(\sum_n c_n \Psi_n \right) d^3r = \sum_{nm} c_m^* c_n \underbrace{\int \Psi_m^* \Psi_n d^3r}_{\delta_{mn}} = \sum_n |c_n|^2 = 1, \quad (\text{T2.113})$$

og vi ser at når denne er oppfylt for $t = 0$, så er den oppfylt for alle t ; normeringen er “bevart”.

Sannsynlighetsbevarelse, på integralform

Dersom sannsynligheten $\int_V \rho(\mathbf{r}, t) d^3r$ for å finne partikkelen innenfor et tenkt volum V for eksempel øker, må det gå en strøm av sannsynlighet inn i dette volumet gjennom overflaten S .



Det må altså finnes en **sannsynlighets-strømtetthet** $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$, slik at strømmen *inn* i volumet er gitt ved overflateintegralet $-\int_S \mathbf{j} \cdot d\mathbf{S}$. (Merk at $d\mathbf{S} = \hat{\mathbf{n}} dS$ peker *utover*.) For at sannsynligheten skal være bevart må vi da ha

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho(\mathbf{r}, t) d^3r = \int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} d^3r = - \int_S \mathbf{j} \cdot d\mathbf{S} \stackrel{\text{G.t}}{=} - \int_V \nabla \cdot \mathbf{j} d^3r. \quad (\text{T2.114})$$

¹²I relativistisk teori — og i realiteten — er det ikke så enkelt; partikler kan skapes eller annihileres.

Her har vi brukt Gauss' teorem (divergensteoremet) til å omforme overflateintegralet til et integral over divergensen til strømtettheten. Denne ligningen er et uttrykk for sannsynlighetsbevarelse, på integralform.

Differensiell form, kontinuitetsligningen

Siden bevarelsesloven ovenfor på integralform gjelder for et volum V med vilkårlig plassering og størrelse, ser vi at ρ og \mathbf{j} må oppfylle **kontinuitetsligningen**:

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0.} \quad \left(\begin{array}{c} \text{kontinuitets-} \\ \text{ligningen} \end{array} \right) \quad (\text{T2.115})$$

Denne bevarelsesloven på differensiell form gjelder som forklart i Hemmer ikke bare for sannsynlighet, men f.eks også for ladning i elektrodynamikken, masse i hydrodynamikk, "sild i stim" (når denne ikke spises), osv.

Uttrykket for \mathbf{j}

Som vist i Hemmer, er det en enkel sak å finne et uttrykk for sannsynlighets-strømtettheten \mathbf{j} . Her skal vi gjenta denne utledningen for et endimensjonalt tilfelle. Ved hjelp av Schrödingerligningen,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) \right] \Psi(x, t),$$

har vi da at

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t}(\Psi^* \Psi) = \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \\ &= -\frac{\hbar}{2mi} \left(\Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \Psi \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \right) = -\frac{\hbar}{2mi} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right). \end{aligned}$$

(I den nest siste overgangen kansellerer leddene med $V(x, t)$. Den siste overgangen er det lettest å ta baklengs.) Da $z + z^* = 2\Re(z)$, kan dette omskrives til

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi^* \frac{\hbar}{2mi} \frac{\partial}{\partial x} \Psi + \Psi \frac{\hbar}{2m(-i)} \frac{\partial}{\partial x} \Psi^* \right) = -\frac{\partial}{\partial x} \Re \left(\Psi^* \frac{\hbar}{mi} \frac{\partial}{\partial x} \Psi \right).$$

Vi har altså i én dimensjon (hvor ting av henger bare av x og t , og hvor sannsynlighetsstrømmen må gå i x -retningen)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j_x}{\partial x} = 0, \quad j_x = \Re \left(\Psi^* \frac{\hat{p}_x}{m} \Psi \right). \quad (\text{T2.116})$$

I tre dimensjoner finner Hemmer tilsvarende

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0,} \quad \boxed{\mathbf{j} = \Re \left(\Psi^* \frac{\hat{\mathbf{p}}_x}{m} \Psi \right).} \quad (\text{T2.117})$$

For en normerbar tilstand må bølgefunksjonen og dermed også \mathbf{j} gå mot null “langt ute”. Lar vi da volumet i (T2.114) bli tilstrekkelig stort, er det klart at overflateintegralet $\int_S \mathbf{j} \cdot d\mathbf{S}$ er lik null:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho(\mathbf{r}, t) d^3r = - \int_V \nabla \cdot \mathbf{j} d^3r = 0.$$

Den samlede sannsynligheten innenfor volumet V er altså konstant i tid; igjen et bevis for at “normeringen er bevart”, slik vi fant ovenfor.

Strømtettheten for de Broglie-bølge

Formelen for strømtettheten kan også brukes for ikke-lokaliserte tilstander som f.eks de Broglie-bølgen (og impulsbølgefunksjonen)

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) e^{-iEt/\hbar}, \quad \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar}, \quad E = p^2/2m. \quad (\text{T2.118})$$

Vi merker oss først at \mathbf{j} er tidsuavhengig for denne og andre stasjonære tilstander:

$$\mathbf{j} = \Re \left[\Psi_{\mathbf{p}}^* \frac{\hbar}{im} \nabla \Psi_{\mathbf{p}} \right] = \Re \left[\psi_{\mathbf{p}}^* \frac{\hbar}{im} \nabla \psi_{\mathbf{p}} \right]. \quad (\text{T2.119})$$

Vi ser også at ψ må være kompleks for å gi en strøm. I dette konkrete tilfellet er $\nabla e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar} = i(\mathbf{p}/\hbar) e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar}$, slik at strømtettheten blir

$$\mathbf{j} = |\psi_{\mathbf{p}}|^2 \frac{\mathbf{p}}{m}. \quad (\text{T2.120})$$

(Sjekk dette.) Vi kommer altså fram til det fornuftige resultatet $\mathbf{j} = \rho \mathbf{v}$, der $\mathbf{v} = \mathbf{p}/m$ er den klassiske hastigheten.

En liten oppgave: Det kan vises at for en fri partikkel med masse m vil begynnelsestilstanden

$$\Psi(x, 0) = (2\pi\sigma^2)^{-1/4} e^{-x^2/4\sigma^2} e^{ip_0x/\hbar}$$

gi opphav til en bølgepakke som beveger seg med gruppehastigheten $v_x = p_0/m$. Bredden av denne bølgepakken øker når t øker fra null. Denne breddeøkningen kalles dispersjon, og er uavhengig av hvilken verdi vi velger for p_0 .

a. Vis at dersom vi velger $p_0 = 0$, så er strømtettheten lik null ved $t = 0$, $j(x, 0) = 0$.

b. Hvorfor må (fortsatt for $p_0 = 0$) $j(x, t)$ være forskjellig fra null for $t > 0$?

c. Vis at med $p_0 \neq 0$ er strømtettheten ved $t = 0$

$$j(x, 0) = |\Psi(x, 0)|^2 \frac{p_0}{m} = \rho(x, 0) v_x.$$