

Noter til KM1 på KU (Kvantemekanik 1)

af Nikolai Plambeck Nielsen, LPK331. Version 1.0

Indhold

1	Bølgefunktionen	6
1.1	Schrödingerligningen	6
1.2	Den statistiske fortolkning	6
1.3	Sandsynligheder	7
1.3.1	Diskrete variable	7
1.3.2	Kontinuerte variable	8
1.4	Normalisering	8
1.5	Impuls og operatorer	9
1.5.1	Ehrenfests teorem og den hurtige metode til at regne forventningsværdier	9
1.6	Usikkerhedsprincippet	10
2	Den tidsuafhængige Schrödingerligning	11
2.1	Stationære tilstande	11
2.1.1	Resultater fra problem 2.1 og 2.2	12
2.2	Den uendelig potentialbrønd	13
2.3	Den harmonisk oscillator	14
2.4	Den fri partikel	17
2.5	Deltafunktionspotentialet	18
2.5.1	Bundne og ubundne tilstande	18
2.5.2	Deltafunktionsbrønden	19
2.6	Den endelige potentialbrønd	20

Introduktion

Fundamentale ligninger

Schrödingerligningen	$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi$
Tidsuafhængige Schrödingerligning	$\hat{H}\psi = E\psi, \quad \Psi = \psi e^{-iEt/\hbar}$
Hamiltonoperator	$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V$
Impulsoperator	$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$
Tidsafhængighed af forventningsværdi	$\frac{d\langle\hat{Q}\rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\langle[\hat{H}, \hat{Q}]\rangle + \left\langle\frac{\partial\hat{Q}}{\partial t}\right\rangle$
Generaliseret usikkerhedsrelation	$\sigma_A\sigma_B \geq \left \frac{1}{2i}\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle\right $
Heisenbergs usikkerhedsrelation	$\sigma_x\sigma_p \geq \hbar/2$
Kanonisk kommutator	$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$
Angulært moment	$[L_x, L_y] = i\hbar L_z, \quad [L_y, L_z] = i\hbar L_x, \quad [L_z, L_x] = i\hbar L_y$
Paulimatricer	$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

Fundamentale konstante

Plancks (reducerede) konstant	$\hbar = h/2\pi = 1.05457 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$ $= 6.58212 \cdot 10^{-16} \text{ eV s}$
Plancks oprindelige konstant	$h = 6.62607 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$ $= 4.13567 \cdot 10^{-15} \text{ eV s}$
Lysets hastighed	$c = 2.99792 \cdot 10^8 \text{ m/s}$
Elektronmasse	$m_e = 9.10938 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$
Protonmasse	$m_p = 1.67262 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
Elementarladning	$e = 1.60218 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
Vakuumpermittivitet	$\epsilon_0 = 8.85419 \cdot 10^{-12} \text{ C}^2/\text{J m}$
Boltzmannkonstanten	$k_B = 1.38065 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$
Elektronvolt	$1 \text{ eV} = e \cdot 1 \text{ V} = 1.60218 \cdot 10^{-19} \text{ J}$

Hydrogenatomet

Finstrukturkonstanter	α	$= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}$	$= 1/137.036$
Bohrradius	a	$= \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = \frac{\hbar}{\alpha m_e c}$	$= 5.29177 \cdot 10^{-11} \text{ m}$
Bohrenergier	E_n	$= -\frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 n^2}$	$= \frac{E_1}{n^2} \text{ (} n = 1, 2, 3, \dots \text{)}$
Bindingsenergi	$-E_1$	$= \frac{\hbar^2}{2m_e a^2} = \frac{\alpha^2 m_e c^2}{2}$	$= 13.6057 \text{ eV}$
Grundstadie	ψ_0	$= \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}$	
Rydbergformlen	$\frac{1}{\lambda}$	$= R \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$	
Rydbergkonstanter	R	$= -\frac{E_1}{2\pi\hbar c}$	$= 1.09737 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$

Matematiske formler

Trigonometri

$$\begin{aligned}\sin(a \pm b) &= \sin a \cos b \pm \cos a \sin b \\ \cos(a \pm b) &= \cos a \cos b \mp \sin a \sin b\end{aligned}$$

Cosinusrelationen (c er siden over for vinklen θ)

$$c^2 = a^2 + b^2 - 2ab \cos \theta$$

Integraler

$$\begin{aligned}\int x \sin ax \, dx &= \frac{1}{a^2} \sin ax - \frac{x}{a} \cos ax \\ \int x \cos ax \, dx &= \frac{1}{a^2} \cos ax + \frac{x}{a} \sin ax\end{aligned}$$

Ekspontielle integraler

$$\int_0^\infty x^n e^{-x/a} \, dx = n! a^{n+1}$$

Gaussiske integraler

$$\begin{aligned}\int_0^\infty x^{2n} e^{-x^2/a^2} \, dx &= \sqrt{\pi} \frac{(2n)!}{n!} \left(\frac{a}{2}\right)^{2n+1} \\ \int_0^\infty x^{2n+1} e^{-x^2/a^2} \, dx &= \frac{n!}{2} a^{2n+2}\end{aligned}$$

Partiel integration (produktreglen for differentiation, baglens)

$$\int_a^b f \frac{dg}{dx} \, dx = - \int_a^b \frac{df}{dx} g \, dx + [fg]_a^b$$

(u)lige funktioner og deres bestemte integraler

Herunder følger lige en kort note om lige og ulige funktioner, og hvordan deres bestemte integraler ret nemt kan regnes. Først en lille kort opfrisker hvad lige og ulige funktioner er. En funktion er lige om et punkt x_0 , hvis den er spejlvendt om den lodrette linje gennem punktet. I formelsprog er dette

$$f(x_0 + x) = f(x_0 - x) \quad (0.1)$$

Et eksempel er $\cos(x)$, der er lige, for eksempel omkring $x_0 = 0$.

En funktion er lige omkring punktet x_0 , hvis den er rotationssymmetrisk om punktet (Søm funktionen fast i x_0 og rotér den 180 grader om punktet. Hvis den er ens, så er funktionen ulige). Matematisk er dette

$$f(x_0 + x) = -f(x_0 - x) \quad (0.2)$$

Et eksempel er $\sin(x)$, der er ulige omkring $x_0 = 0$.

Selve ordene ulige og lige er fra polynomier, der er (u)lige, hvis deres højeste potens af x er (u)lige. x er ulige, x^2 er lige, x^3 er ulige, etc.

En funktion **kan ikke både være lige eller ulige** (ud over det trivielle tilfælde 0). En funktion kan dog **godt** være hverken lige eller ulige ($\exp(x)$), eksempelvis.

Man kan **skabe** en lige og en ulige funktion (om $x_0 = 0$) fra enhver funktion $f(x)$. Følgende funktion er *lige*

$$f_e(x) = f(x) + f(-x). \quad (0.3)$$

Og følgende funktion er *ulige*:

$$f_o(x) = f(x) - f(-x). \quad (0.4)$$

Dette kan indses, hvis man skifter koordinat fra x til $-x$:

$$f_e(-x) = f(-x) + f(-[-x]) = f(-x) + f(x) = f_e(x) \quad (0.5)$$

$$f_o(-x) = f(-x) - f(-[-x]) = f(-x) - f(x) = -f_o(x) \quad (0.6)$$

Integraler af lige og ulige funktioner

Integraler af lige og ulige funktioner, omkring deres symmetripunkter, er ret nemme. For funktioner, der er **ulige** omkring punktet x_0 fås:

$$\int_{x_0-a}^{x_0} f(x) \, dx = - \int_{x_0}^{x_0+a} f(x) \, dx, \quad \Rightarrow \quad \int_{x_0-a}^{x_0+a} f(x) \, dx = 0 \quad (0.7)$$

For funktioner, der er **lige** om x_0 gælder

$$\int_{x_0-a}^{x_0} f(x) \, dx = \int_{x_0}^{x_0+a} f(x) \, dx, \quad \Rightarrow \quad \int_{x_0-a}^{x_0+a} f(x) \, dx = 2 \int_{x_0}^{x_0+a} f(x) \, dx \quad (0.8)$$

Ofte skal uendelige integraler løses, og disse kan gøres nemmere ved symmetribetragtninger. Specielt gælder det også, at hvis vi arbejder med kvadratisk integrable funktioner (kvadrerede funktioner, hvis uendelige integral giver en endelig værdi: $\int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2 \, dx \neq \infty$) gælder de samme regler for deres integraler:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f_{\text{ulige}}(x) \, dx = 0, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} f_{\text{lige}}(x) \, dx = 2 \int_0^{\infty} f_{\text{lige}}(x) \, dx \quad (0.9)$$

Algebraiske regler for (u)lige funktioner

Den følgende liste af regler er løftet direkte fra Wikipedia, [link](#). Hvis der står (u)lige betyder det, at det gælder for *både* lige og ulige funktioner

Addition og subtraktion

- Summen af to (u)lige funktioner er (u)lige (og enhver konstant ganget med en (u)lige funktion er også (u)lige)
- Differensen af to (u)lige funktioner er (u)lige
- Summen af en lige og ulige funktion er hverken lige eller ulige, med mindre en af funktionerne er 0 over hele domænet (du ved, det trivielle tilfælde).

Multiplikation og division

- Produktet af to (u)lige funktioner er en *lige* funktion
- Produktet af en lige og en ulige funktion er en *ulige* funktion
- kvotienten af to (u)lige funktioner er en *lige* funktion
- kvotienten af en lige og en ulige funktion er en *ulige* funktion

Sammensatte funktioner

- Sammensætningen af to (u)lige funktioner er (u)lige
- sammensætningen af en lige funktion og en ulige funktion er lige
- Sammensætningen af enhver funktion *med* en *lige* funktion, er en *lige* funktion (men ikke nødvendigvis omvendt)

1 Bølgefunktionen

1.1 Schrödingerligningen

I klassisk mekanik går et problem oftest ud på at finde en partikels position til alle tider t , $\mathbf{r}(t)$. Dette gøres ved at løse Newtons ligninger for passende begyndelsesbetingelser ($\mathbf{r}(0) = 0$, $\mathbf{v}(0) = \mathbf{k}$, $\mathbf{a}(0) = 1/2g\hat{\mathbf{y}}$, eller hvad det nu kan være). Når positionen kendes, kan hastigheden og accelerationen udregnes, og ud fra disse tre størrelser (samt partiklens masse), kan alle andre relevante størrelser udledes.

I kvantemekanik er historien dog lidt anderledes. Her skal partiklens *bølgefunktion* $\Psi(\mathbf{r}, t)$, og denne fås ved at løse Schrödingerligningen:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi \quad (1.1)$$

hvor \hbar er Plancks (reducerede) konstant, i den imaginære enhed $i^2 = -1$, m partiklens masse og V er *potentialet* hvori partiklen befinder sig. Klassisk set, kan potentialet bruges til at udlede accelerationen (såfremt det er konservative kraftfelter, hvor rotationen er 0. Kan du huske dit MatF1?): $\mathbf{F} = -\nabla V$. Det bemærkes at bølgefunktionen generelt set er en *kompleks* funktion, i modsætning til klassisk mekanik, hvor, hvis man fik et imaginært eller komplekst udtryk, havde man uden tvivl regnet forkert.

1.2 Den statistiske fortolkning

Bølgefunktionen er dog lidt mystisk, for hvad er den *egentlig* og hvad fortæller den os om partiklen vi nu prøver at beskrive? Det mystiske ved kvantemekanikken er, at det er *ikke-deterministisk*, i modsætning til klassisk mekanik. Absolutkvadratet af bølgefunktionen beskriver nemlig *sandsynligheden* for at finde en partikel i et bestemt punkt. Dette er den tyske fysiker Max Borns *statistiske fortolkning* af bølgefunktionen. Nærmere bestemt er:

$$\int_a^b |\Psi(x, t)|^2 dx = \begin{cases} \text{sandsynligheden for at finde partiklen} \\ \text{mellem punkterne } a \text{ og } b, \text{ til tiden } t. \end{cases} \quad (1.2)$$

Dette vil altså sige, at sandsynligheden er arealet under grafen for $|\Psi|^2$. Det bemærkes, at selvom bølgefunktionen Ψ er en kompleks funktion, da er absolutkvadratet $|\Psi|^2 = \Psi^* \Psi$ både reel og positivt, som sandsynligheder skal være (Ψ^* er bølgefunktionens kompleks konjugerede).

Hvis vi så foretager en måling på partiklen og den befinder sig i punktet x_0 , så er et nærtliggende spørgsmål: hvor var den før? Der er tre »hovedsvar« til dette spørgsmål:

- **Realisten.** Partiklen var i punktet x_0 , også før vi målte på den. Dette synspunkt medfører nødvendigvis, at kvantemekanik er en ufuldstændig teori, idet den ikke kunne fortælle os, at partiklen rent faktisk befinder sig i x_0 . For dem er ikkedeterminismen af kvantemekanik ikke et naturfænomen, men rettere produktet af vores uvidenhed. Dette var også Einsteins syn på kvantemekanik (gud spiller ikke med terninger og alt det.)
- **Den Ortodokse/Københavnerfortolkningen.** Partiklen var *ikke nogen steder* førend vi foretog målingen. Det var selve målingen der, så at sige, tvang partiklen til at befinde sig i punktet x_0 . Dette kaldes for Københavnerfortolkningen, idet det var Bohr og hans tilhængere, der fortolkede kvantemekanikken på denne måde.
- **Den agnostiske.** Det giver ikke mening at spørge, hvor partiklen var førend målingen blev foretaget. Dette svarer til at spørge, hvor er nord, når man står på nordpolen.

Hvis man foretager endnu en måling på partiklen, kort tid efter den første, vil man dog finde den i samme punkt, x_0 , som før, også selvom bølgefunktionen måske siger, at dette er en statistisk umulighed. I følge Københavnerfortolkningen ændrer målingen på bølgefunktionen, den *kollapser*, og bliver tilnærmelsesvist til en delta-funktion omkring x_0 .

Men hvad er en måling så? Indtil videre er det den type ting, som vi fysikere gør i laboratoriet med måleinstrumenter som linealer, Geigerrør, stopure og lignende.

1.3 Sandsynligheder

1.3.1 Diskrete variable

Idet det er en statistisk model, vi beskæftiger os med, huer det os at have et crash course i sandsynlighedsregning. Til dette startes der med diskrete variable. Lad os sige vi har en aldersfordeling af 14 mennesker, og vi lader $N(j)$ repræsentere antallet af folk med alderen j . Værdierne er som følger:

j	14	15	16	22	24	25
$N(j)$	1	1	3	2	2	5

mens $N(j)$ for alle andre værdier af j er 0. Det **samlede antal mennesker** er

$$N = \sum_{j=0}^{\infty} N(j). \quad (1.3)$$

Sandsynligheden for at en tilfældigt valgt person har alderen j , skrives som $P(j)$ og er givet ved

$$P(j) = \frac{N(j)}{N}. \quad (1.4)$$

Sandsynligheden for at en person enten er 14 år *eller* 15 år, er summen af de individuelle sandsynligheder, og den samlede sum må nødvendigvis være 1 (der er 100 procent chance for, at en person i aldersfordelingen har en alder, der er i aldersfordelingen. Tautologier, yay!):

$$\sum_{j=0}^{\infty} P(j) = 1. \quad (1.5)$$

Den **mest sandsynlige værdi** for denne aldersfordeling er 25, og er der hvor $N(j)$ har sit maksimum. **Medianen** eller **midterværdien** er her 23, og er den værdi j , hvor sandsynligheden for at vælge en person der er ældre/ynge er lige stor (i dette tilfælde 7 på hver side).

Middelværdien skrives ved $\langle j \rangle$ og er givet ved

$$\langle j \rangle = \frac{\sum_0^{\infty} jN(j)}{N} = \sum_{j=0}^{\infty} jP(j) \quad (1.6)$$

Det ses, at den for dette datasæt er 21. Det observeres også, at ingen individer har hverken middelværdien eller medianværdien som deres alder.

Generelt vil gennemsnittet af en given funktion $f(j)$ være givet ved

$$\langle f(j) \rangle = \sum_{j=0}^{\infty} f(j)P(j). \quad (1.7)$$

Specielt bruges gennemsnittet af kvadraterne af j ofte: $\langle j^2 \rangle = \sum j^2 P(j)$. Denne bruges i forbindelse med spredningen af datasættet.

Hvis man har differensen fra gennemsnittet $\Delta j = j - \langle j \rangle$, vil gennemsnittet af denne være 0: $\langle \Delta j \rangle = 0$, hvilket giver god mening, grundet gennemsnittets natur, idet det halvdelen af tiden er større og halvdelen af tiden er lavere (ikke helt halvdelen, det er jo medianværdien, men værdierne summerer altid til 0). Men hvis man lige tager kvadratet af differensen, *inden* man igen tager gennemsnittet fås **spredningen**, eller **variansen**:

$$\sigma^2 = \langle (\Delta j)^2 \rangle. \quad (1.8)$$

Læg mærke til parentesernes rækkefølge! Man tager først differensen fra gennemsnittet, kvadrerer denne og så tager gennemsnittet af disse værdier. Kvadrat*roden* af dette, σ er standardafvigelsen som vi kender den, og i praksis bruger man ikke denne formel. Her bruger man en anden formel, som man ret let kan bevise, hvis man har styr på sine summationstegnsregning:

$$\sigma = \sqrt{\langle j^2 \rangle - \langle j \rangle^2} \quad (1.9)$$

Læg igen mærke til rækkefølgen! Her er det $\langle j^2 \rangle$ først (altså gennemsnittet af kvadratet), så $\langle j \rangle^2$ (altså det kvadrerede gennemsnit). Idet variansen altid er positiv (dette følger fra definitionen, da $(\delta j)^2$ altid er positivt), vil standardafvigelsen også altid være positiv. Dette giver følgende relation

$$\langle j^2 \rangle \geq \langle j \rangle^2 \quad (1.10)$$

hvor de kun er ens, hvis alle individer i fordelingen har samme værdi.

1.3.2 Kontinuerte variable

Generaliseringen af disse formler til kontinuerte variable er ret ligefrem, men der er nogle ting, der lige skal slås fast. Sandsynligheden for at få én bestemt værdi for en måling er 0 (prøv at spørge en tilfældig person på gaden, om de er 32 år, 75 dage, 1 time og 23.234 sekunder gamle), og det giver da kun mening at snakke om sandsynligheden for at en måling ligger inden for et interval.

Hvis man vælger dette interval så det er passende kort, vil sandsynligheden for at målingen ligger inden for intervallet være proportionelt med intervallets længde (det er cirka dobbelt så stor sandsynligt at en persons alder er mellem 16 år, og 16 år + 2 dage, end mellem 16 år, og 16 år + 1 dag). Helt specifikt snakkes der om infinitesimale intervaller:

$$\rho(x) dx = \begin{cases} \text{sandsynligheden for at et tilfældig valgt} \\ \text{individ ligger mellem } x \text{ og } x + dx \end{cases} \quad (1.11)$$

Her kaldes proportionalitetsfaktoren $\rho(x)$ for **sandsynlighedstætheden**. Sandsynligheden for at x ligger mellem det endelige interval a og b er da integralet af alle disse infinitesimale sandsynligheder:

$$P_{ab} = \int_a^b \rho(x) dx. \quad (1.12)$$

Og alle de andre regler generaliseres ligeså:

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x) dx, \quad (1.13)$$

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x \rho(x) dx, \quad (1.14)$$

$$\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \rho(x) dx, \quad (1.15)$$

$$\sigma^2 \equiv \langle (\delta x)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2. \quad (1.16)$$

1.4 Normalisering

Nu tilbage til den statistiske fortolkning af bølgefunktionen. Hvis $|\Psi|^2$ skal være sandsynlighedstætheden for bølgens position (og andre relevante størrelser), må der nødvendigvis gælde:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1. \quad (1.17)$$

I praksis gøres dette ved at gange en (kompleks) faktor A på bølgefunktionen Ψ , hvilket er helt fint, idet Schrödingerligningen har fysikernes yndlingssegenskab: den er lineær! You get a superposition, and YOU get a superposition, EVERYONE GETS A SUPERPOSITION!

Dette betyder selvfølgelig, at hvis Ψ_1 og Ψ_2 begge løser Schrödingerligningen, så vil enhver linearkombination af disse også løse ligningen. Det er dog ikke altid, at det kan lade sig gøre, at få integralet til at give 1. Eksempelvis hvis bølgefunktionen er uendelig, eller 0. Alle fysiske stadier kan dog beskrives ved kvadratisk integrable funktioner (funktioner, hvor det samlede integral kan gøres lig 1), hvilket er ret heldigt. Dette betyder også følgende:

$$\Psi(-\infty, t) = \Psi(+\infty, t) = 0, \quad (1.18)$$

altså at bølgefunktionen *altid* går mod 0, i uendelig.

Det at gange en konstant på bølgefunktionen, for at få det kvadratiske integral til at give 1, kaldes for **normalisering** af bølgefunktionen, og bølgefunktioner, der ikke kan normaliseres kaldes, sjovt nok, for *ikkenormaliserbare* løsninger.

Det næste, naturlige spørgsmål er så, om denne faktor vi ganger på, rent faktisk er konstant. Nærmere betegnet, om bølgefunktionens integral udvikler sig i tid. Det gør det heldigvis ikke, hvilket man kan bevise ved at kigge på Schrödingerligningen og bruge det faktum at bølgefunktionen går mod 0 i uendeligt. Det vil altså sige:

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 0 \quad (1.19)$$

og hvis man normaliserer bølgefunktionen til ét tidspunkt (eksempelvis $t = 0$) forbliver den normaliseret.

1.5 Impuls og operatorer

For en partikel, der er beskrevet med bølgefunktionen Ψ (normalt siges det bare, at partiklen er i tilstanden Ψ , hvilket også er hvad jeg skriver fra nu af, for det andet er træls), vil dens forventningsværdi af x være

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\Psi(x, t)|^2 dx. \quad (1.20)$$

Dette betyder dog ikke, at hvis du foretager en hel masse målinger på partiklen, så vil $\langle x \rangle$ være midelværdien af disse. Bølgefunktionen kolliderer jo efter den første måling, og alle andre målinger herefter (såfremt de udføres hurtigt nok), giver den samme position. Forventningsværdien af x betyder rettere, at hvis man foretager én måling på en masse identiske partikler, alle i tilstanden Ψ , så vil gennemsnittet af disse målinger være givet ved $\langle x \rangle$.

Hvis man tager den tidsligt afledte af denne størrelse får man, ved hjælp af randbetingelserne og to gange partiel integration:

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{-i\hbar}{m} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} dx. \quad (1.21)$$

Dette er hastigheden af *forventningsværdien* af x , hvilket ikke er det samme som partiklens hastighed. Ydermere, er det overhovedet ikke sikkert, hvad hastighed her betyder, idet partiklen ikke havde en veldefineret position, inden den blev målt. Det postuleres dog, at dette rent faktisk er forventningsværdien for partiklens hastighed, og det bevises senere i kurset.

I kvantemekanik bruger man dog meget oftere impuls ($p = mv$) end hastighed. Dermed fås

$$\langle p \rangle = m \frac{d\langle x \rangle}{dt} = -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} dx. \quad (1.22)$$

Hvis disse skrives på en lidt anden måde, opstår et pænt mønster, som kommer til at blive brugt igen og igen:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x) \Psi dx, \quad (1.23)$$

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi dx. \quad (1.24)$$

Det, inde i parenteser i integralet kaldes for en **operator**, og operatoren $\hat{x} = x$ siges at »repræsentere« position, og operatoren $\hat{p} = -i\hbar \partial/\partial x$ siges at »repræsentere« impulsen. **I kvantemekanik regnes alle relevante størrelser altså ud, ved at tage størrelsens repræsentative operator, og smide den ind mellem Ψ^* og Ψ i det uendelige integral.**

Men hvad er en operator *egentlig*? Jeg har ikke den formelle definition, men i dette kursus er det så at sige en instruks om, at der skal gøres noget, på den følgende funktion (i dette tilfælde Ψ). I dette kursus består operatorer *altid* af afledte (d/dt , d^2/dt^2 , el.lign.) og/eller multiplikative faktorer (2, i , x^2 el.lign.).

I klassisk mekanik kan *alle* relevante størrelser beskrives ved en kombination af position og impuls. Eksempelvis er den kinetiske energi T (eller E_k , men den notation bruges ikke rigtig i kvant) givet ved

$$T = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}. \quad (1.25)$$

For at regne forventningsværdien af en given størrelse (operator) $\hat{Q}(x, p)$, skal alle p 'er bare erstattes med $\hat{p} = -i\hbar(\partial/\partial x)$, og så skal udtrykket smides ind i midten af integralet, og hele skidtet integreres:

$$\langle \hat{Q}(x, p) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \hat{Q} \left(x, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi dx. \quad (1.26)$$

Og i tilfældet af den kinetiske energi, er forventningsværdien

$$\langle \hat{T} \rangle = \frac{-\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} dx. \quad (1.27)$$

1.5.1 Ehrenfests teorem og den hurtige metode til at regne forventningsværdier

En rigtig smart måde at regne komplicerede forventningsværdier på, er ved at bruge Ehrenfests teorem. Dette er beskrevet i teksten til problem 1.7, og siger følgende:

Ehrenfests teorem. Forventningsværdier følger klassiske love.

Dette vil sige, at forventningsværdien for impuls for eksempel er ret nemt at udregne, hvis man har regnet forventningsværdien for positionen:

$$\langle \hat{p} \rangle = m \frac{d\langle x \rangle}{dt} \quad (1.28)$$

Ligeledes kan den kinetiske energi også regnes nemt:

$$\langle \hat{T} \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} \quad (1.29)$$

Idet vi arbejder med konservative kraftfelter, kan kraften skrives som den negative gradient til et potential V . Men dette potential indgår jo også i Schrödingerligningen, og hvis man skal bruge den tidsafledte af impulsen, kan denne fås ved at tage forventningsværdien af kraften (Newtons anden lov), som også er forventningsværdien af den negative gradient af potentialet (dette er også resultatet af problem 1.7):

$$\frac{d\langle \hat{p} \rangle}{dt} = \left\langle -\frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle \quad (1.30)$$

1.6 Usikkerhedsprincippet

Hvis man producerer en transversal sinusbølge langs et reb, er det ret nemt at specificere bølgelængden, jo længere sinusbølgen er. Til gengæld giver det ikke rigtig mening at spørge om bølgens position, idet den jo er fordelt over et ret stort stykke reb. Hvis man til gengæld bare sender én sinuslignende puls af sted langs rebet, er det modsatte sandt: positionen er nem at specificere, men bølgelængden er ikke særlig veldefineret. Dette betyder altså, at jo bedre defineret en bølges position er, jo værre defineret bliver dens bølgelængde.

I MatF1 fik vi meget (meget) kort introduceret usikkerhedsprincippet fra Fourieranalyse, der er kvantificeringen af dette. I kvantemekanik er det sådan, at bølgelængde og impuls er relateret ved **de Broglies formel**:

$$p = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} \quad (1.31)$$

hvormed en usikkerhed i bølgelængde giver en usikkerhed i impuls. Hvis man sætter alt dette sammen, får man det famøse **Heisenbergs Usikkerhedsprincip**:

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (1.32)$$

hvor σ_x er standardafvigelsen i bølgens position og σ_p er standardafvigelsen af bølgens impuls. Læg også mærke til, at dette er en ulighed. Der er kun et minimum på produktet af standardafvigelserne, men ingen øvre grænse. Dette vil sige, at du kan lave en uhyre præcis måling af enten position eller impuls, men den anden bliver meget upræcis; men man kan også lave vildt upræcise målinger af *begge* størrelser.

2 Den tidsuafhængige Schrödingerligning

2.1 Stationære tilstande

For at løse Schrödinger ligningen antages det først i dette kapitel (og i det meste af bogen), at potentialet $V(x, t)$ er *uafhængigt af t* . I dette tilfælde, kan ligningen løses ved separation af de variable. Juhu! Altså:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x) \Psi(x, t) \Rightarrow \Psi(x, t) = \psi(x) \varphi(t). \quad (2.1)$$

Som sædvanligt vil dette kun give et undersæt af de mulige løsninger til ligningen, men de har en masse gode egenskaber, og den generelle løsning til ligningen kan som oftest konstrueres fra de separable løsninger. Efter den normale behandling af separation af de variable (indsæt den antagede løsningsform, og divider igennem med den), fås

$$i\hbar \frac{1}{\varphi} \frac{d\varphi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + V \quad (2.2)$$

Læg mærke til symbolerne og de variable. Det er almindeligt afledte nu, og på venstre side står der kun noget, der afhænger af tid, og på højre noget, der kun afhænger af position. For at dette må være en løsning, må begge disse da være konstante! Denne konstant vælger vi at kalde E , da dette er ret smart (kan du gætte hvorfor?). De to ligninger lyder da (efter lidt omrokering)

$$\frac{d\varphi}{dt} = -\frac{iE}{\hbar} \varphi, \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + V\psi = E\psi \quad (2.3)$$

Det ses da, at hvis V havde afhængt både af x og t , ville denne ikke generelt kunne separeres. Den første ligning har løsningen $C \exp(-iEt/\hbar)$, men konstanten C kan lige så godt absorberes i ψ , idet det er produktet af de to funktioner, der er betydende (plus, så kommer den bare med i normaliseringen til sidst). Dermed:

$$\varphi(t) = e^{-iEt/\hbar} \quad (2.4)$$

Den anden ligning kaldes for den **Tidsuafhængige Schrödingerligning**, og vi kommer ingen løsning nærmere, med mindre potentialet $V(x)$ specificeres. Separable løsninger har tre vigtige egenskaber:

De er stationære stadier. Selvom bølgefunktionen, $\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$, afhænger af tid, så gør sandsynlighedstætheden det ikke:

$$|\Psi(x, t)|^2 = \psi^* e^{iEt/\hbar} \psi e^{-iEt/\hbar} = |\psi(x)|^2. \quad (2.5)$$

De tidslige dele går nemlig ud med hinanden, når absolutkvadratet tages! Det samme gør sig faktisk gældende for udregning af forventningsværdien af enhver dynamisk variabel Q , idet:

$$\langle Q(x, p) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* Q \left(x, -i\hbar \frac{d}{dx} \right) \psi dx. \quad (2.6)$$

Her går de tidslige komponenter nemlig også ud, idet Q ikke afhænger af tiden, og dermed ikke ændrer på disse. Dette betyder da, at forventningsværdien altid er konstant i tid! Dermed arbejdes der som oftest kun med ψ , fordi φ for det meste er lige meget. Den har altid den samme form, og det er kun når den samlede bølgefunktion skal opgives, at det er nødvendigt at smide den med. Det ses da, at $\langle x \rangle$ er konstant, og dermed fra Ehrenfests teorem, må $\langle p \rangle = 0$, altid.

I klassisk mekanik, er den samlede mekaniske energi (kinetisk plus potentiel) givet ved Hamiltonen:

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + V(x). \quad (2.7)$$

Og det ses, at hvis man substituerer impulsen med dens kvantemekaniske modpart, fås

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x), \quad (2.8)$$

Og dermed kan den tidsuafhængige Schrödingerligning skrives kompakt ved

$$\hat{H}\psi = E\psi. \quad (2.9)$$

Ved dette, kan standardafvigelsen i H udregnes gennem dennes forventningsværdier:

$$\langle H \rangle = E, \quad \langle H^2 \rangle = E^2 \quad \Rightarrow \quad \sigma_H^2 = \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2 = E^2 - E^2 = 0. \quad (2.10)$$

Dette sker kun, hvis alle individer i en given population har den samme værdi for H . Dette vil altså at enhver måling af den samlede energi, giver E . Se nu, hvor smart det var, at kalde separationskonstanten for E !

De er tilstande med bestemt total energi. I klassisk mekanik, kan den totale mekaniske energi (kinetisk plus potentiel) beskrives ved hamiltonen:

$$H(p, x) = \frac{p^2}{2m} + V(x). \quad (2.11)$$

Og ved substitution med den kvantemekaniske ækvivalent til impulsen, fås *Hamiltonoperatoren*:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x). \quad (2.12)$$

Og med dette kan den tidsuafhængige Schrödingerligning skrives på den kompakte form

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (2.13)$$

Variansen i H kan udregnes ved dennes forventningsværdier:

$$\langle H \rangle = E, \quad \langle H^2 \rangle = E^2, \quad \Rightarrow \quad \sigma_H^2 = \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2 = E^2 - E^2 = 0 \quad (2.14)$$

Dette betyder, at alle individer af populationen har den samme værdi! I dette tilfælde vil det sige, at enhver måling på en partikel i tilstanden ψ , vil give energien E . Se nu, hvor smart det var at kalde separationskonstanten for E !

Den generelle løsning er en lineær kombination af separable løsninger. Det viser sig, at der for alle de potentialer vi møder, er uendeligt mange løsninger til den tidsuafhængige Schrödingerligning, ψ_1 , ψ_2 , etc, hver med sin energi E_1 , E_2 , etc. Ydermere viser det sig, at enhver løsning til den tidsafhængige (altså *med* tid) kan opskrives som en linearkombination af disse løsninger (idet de er komplette, som vi kommer mere ind på i kapitel 3. Det er lige som med sin og cos for Fourierrækker). Først konstrueres $\Psi(x, 0)$ ud fra løsningerne til den tidsuafhængige Schrödingerligning:

$$\Psi(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) \quad (2.15)$$

Og da smides den karakteristiske tidsfaktor bare på hvert led, for at få tidsudviklingen med:

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n(x, t) \quad (2.16)$$

Spørgsmålet er bare at finde de konstante c_n . Det ses, at Ψ_n alle er stationære tilstande, idet tidsudviklingen går ud med sig selv, når absolutkvadratet regnes ($|\exp -iE_n t/\hbar|^2 = 1$). Dette betyder dog *ikke*, at det samme gør sig gældende for de generelle løsninger. For når du har en linearkombination af flere stationære tilstande, går hver deres karakteristiske tidsfaktorer ikke ud med *hinanden*. De interfererer i tid, hvilket er hvad, der giver tidsudviklingen i den generelle løsning.

2.1.1 Resultater fra problem 2.1 og 2.2

I problem 2.1 (og 2.2) skal 3 (1) nyttige teoremer bevises. Jeg vil kort beskrive resultaterne fra disse:

1. **For normaliserbare løsninger, må separationskonstanten E nødvendigvis være reel.**
2. **Den tidsuafhængige bølgefunktion $\psi(x)$ kan altid regnes for reel.** Dette betyder *ikke*, at alle løsninger til den tidsuafhængige Schrödingerligning er reelle, men at alle komplekse bølgefunktioner kan skrives som en superposition af reelle bølgefunktioner. Dermed kan man lige så godt bare arbejde med de reelle.

3. Hvis $V(x)$ er en lige funktion, kan $\psi(x)$ altid regnes for at være enten lige eller ulige (lige og ulige funktioner kan konstrueres ud fra $\psi(x)$ og $\psi(-x)$ som beskrevet i afsnittet om lige og ulige funktioner).
4. Energien E skal overstige den mindste værdi af potentialet V for at løsningen til Schrödingerligningen er normaliserbar. Dette gælder dog *ikke* for ubundne tilstande, da disse ikke er normalt normaliserbare.

2.2 Den uendelig potentialbrønd

I dette og de resten af afsnittene af dette kapitel, gider jeg ikke at skrive »den tidsafhængige Schrödingerligning«, så jeg skriver bare Schrödingerligningen. Hvis jeg mener den tidsafhængige ligning, så skriver jeg det eksplicit.

Den uendelige potentialbrønd er et potential, der har formen

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq a \\ \infty, & \text{ellers.} \end{cases} \quad (2.17)$$

Inden for brønden (mellem 0 og a) er partiklen fri, men alle andre steder, er potentialet uendeligt, og en uendelig kraft holder da partiklen inden for brønden. I steder, hvor potentialet er uendeligt er bølgefunktionen da 0. Inde i brønden lyder Schrödingerligningen

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} = E\psi, \quad \frac{d^2 \psi}{dx^2} = -k\psi, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \quad (2.18)$$

hvor energien E antages for større end, eller lig 0, per problem 2.2. Dette er den klassiske simple harmoniske oscillator, og løsningen er

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx. \quad (2.19)$$

For at finde A og B , må der indføres randbetingelser. Normalt skal bølgefunktionen både være kontinuert og differentiabel (den kan differentieres, og dennes afledte er kontinuert) i alle punkter. Dog gælder den sidste randbetingelse ikke for uendelige potentialer (mere om det i afsnit 2.5.2). Idet bølgefunktionen er 0 uden for brønden, må der gælde følgende

$$\psi(0) = \psi(a) = 0 \quad (2.20)$$

Den første randbetingelse giver at $B = 0$, og den anden giver enten $A = 0$, eller $\sin ka = 0$. Vi vælger $\sin ka = 0$, da vi ellers ender med den unormaliserbare løsning $\psi = 0$. Dermed fås

$$ka = n\pi, \quad \Leftrightarrow k_n = \frac{n\pi}{a}, \quad n \in \mathbb{N} \quad (2.21)$$

hvor n altså løber over alle positive heltal. De negative heltal giver bare negative løsninger, og vi kan lige så godt tage dette fortegn med i A , og $k = 0$ giver også 0-løsningen. Fra ligning (2.18) fås da, at partiklen kun kan have bestemte energier E_n :

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad (2.22)$$

For at finde den sidste ubekendte, A , normaliseres bølgefunktionen, og man får

$$\int_0^a |A|^2 \sin^2(kx) = |A|^2 \frac{a}{2} = 1, \quad \Rightarrow \quad A = \sqrt{\frac{2}{a}}, \quad (2.23)$$

hvor den positive reelle rod vælges. Dermed bliver den samlede løsning til den uendelige potentialbrønd:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right). \quad (2.24)$$

Det ses da, at ligningen har uendeligt mange løsninger (én for hvert positivt heltal n). Den første tilstand, $n = 1$, kaldes da for **grundtilstanden**. Disse løsninger har en række smarte egenskaber

1. De er skiftevis lige og ulige, med hensyn til midten af brønden (ψ_1 er ulige, ψ_2 er lige, etc).
2. De har $n - 1$ knudepunkter (punkter x_0 hvor $\Psi_n(x_0, t) = 0$ for alle t), hvor man ikke tæller de trivielle knudepunkter i enden med.
3. De er ortonormale:

$$\int_0^a \psi_m(x)^* \psi_n(x) dx = \delta_{mn}, \quad (2.25)$$

hvor δ_{mn} er Kroneckerdeltaet. Alle ψ_m er reelle, så konjugeringen er ikke strengt nødvendigt, men det er god øvelse, altid at have det i baghovedet, at man egentlig skal konjugere denne.

4. De udgør et komplet sæt, idet enhver velopførende funktion $f(x)$ kan opskrives som en linearkombination af disse:

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) \quad (2.26)$$

Og dette er jo bare Fourierrækken for $f(x)$! For at finde $f(x)$ bruger man følgende formel (som Griffiths kalder for **Fouriers trick**):

$$c_n = \int_0^a \psi_n(x)^* f(x) dx. \quad (2.27)$$

Disse fire egenskaber er dog ikke enestående for den uendelige potentialbrønd. Den første opstår når potentialet er symmetrisk. Den anden gælder altid. Ortogonalitet ligeså. At løsningerne udgør et komplet sæt er som oftest sandt (i hvert fald for alle de potentialer, vi kommer til at støde ind i).

Med alt dette i baghovedet er de stationære tilstande for den uendelige potentialbrønd

$$\Psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{-iE_n t/\hbar}, \quad E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, \quad (2.28)$$

og den generelle løsning er en linearkombination af disse

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n(x, t). \quad (2.29)$$

I praksis får man en bølgefunktion til tiden $t = 0$, og da er

$$\Psi(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x), \quad c_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \Psi(x, 0) dx. \quad (2.30)$$

Absolutkvadratet på koefficienterne, $|c_n|^2$ fortæller, hvad sandsynligheden er, for at en måling på partiklen giver resultatet E_n . Og fra normaliseringen af bølgefunktionen følger det også, at summen af disse giver én:

$$\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = 1. \quad (2.31)$$

Forventningsværdien for energien (Hamiltonoperatoren) er

$$\langle \hat{H} \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 E_n, \quad (2.32)$$

og det faktum, at forventningsværdien er tidsuafhængig, viser da energibevarelse i kvantemekanik.

2.3 Den harmonisk oscillator

I dette og de resten af afsnittene af dette kapitel, gider jeg ikke at skrive »den tidsafhængige Schrödingerligning«, så jeg skriver bare Schrödingerligningen. Hvis jeg mener den *tidsafhængige* ligning, så skriver jeg det eksplicit.

Den klassiske harmoniske oscillator (uden friktion) er givet ved den samme ligning som den uendelige potentialbrønd:

$$F = m \frac{d^2 x}{dt^2} = -kx, \quad k > 0 \quad (2.33)$$

Ved at bruge, at F er et konservativt kraftfelt, fås at potentialet er

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \quad (2.34)$$

I praksis er der selvfølgelig ingen perfekt harmonisk oscillator, men faktum er, at for små afvigelser fra et minimum i potentialet, er bevægelsen af en partikel tilnærmelsesvist harmonisk oscillerende (jeg undskylder meget for denne sætning). Hvis man Taylorekspanderer potentialet om minimumet x_0 fås

$$V(x) = V(x_0) + V'(x)(x - x_0) + \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2 + \dots \quad (2.35)$$

Idet man kan trække konstante fra potentialet uden problemer, og at $V'(x_0) = 0$, er potentialet approksimativt

$$V(x) \approx \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2 \quad (2.36)$$

hvor der ses bort fra led af højere orden, da vi ikke bevæger os langt fra minimumet. Dette er da en simpel harmonisk oscillator om $x = x_0$, med fjederkonstanten $k = V''(x_0)$. I kvantemekanik skrives potentialet oftest med den klassiske frekvens $\omega = \sqrt{k/m}$, og potentialet er da

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (2.37)$$

Med dette bliver Schrödingerligningen

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi = E\psi. \quad (2.38)$$

Denne løses oftest på to måder: polynomiumsserier (Power series) eller algebraisk. I disse noget beskrives kun den algebraiske metode, da den er klart nemmere, involverer **hæve/sænkeoperatorer**, og fordi vi ikke har brugt resultaterne fra den anden metode i kurset endnu.

Ideen med denne metode er at faktorisere Hamiltonoperatoren \hat{H} . Dette gøres ved at opskrive Schrödingerligningen på en lidt anden form, og introducere to nye operatorer. Først ligningen:

$$\frac{1}{2m}[\hat{p}^2 + (m\omega\hat{x})^2]\psi = E\psi. \quad (2.39)$$

(I den følgende udledning bruger jeg altid \hat{x} , selvom denne også bare er lig x , for at illustrere, at det er operatorer vi arbejder med) Hvor Hamiltonoperatoren er givet ved

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}[\hat{p}^2 + (m\omega\hat{x})^2]. \quad (2.40)$$

Hvis \hat{p} og \hat{x} bare var tal, ville dette være nemt nok, da disse kommuterer. Men det gør operatorer desværre ikke (normalt, i hvert fald). Derfor indføres »kommutatoren« af to operatorer \hat{A} og \hat{B} :

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}, \quad (2.41)$$

der er et mål for, hvor »dårligt de to operatorer kommuterer«. For \hat{x} og \hat{p} fås det, som kaldes for den **kanoniske kommutator**:

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar. \quad (2.42)$$

For at udregne kommutatoren af to operatorer opskrives man kommutatoren og lader en testfunktion $f(x)$ virke på den. Da udregner man resultatet, og smider funktionen væk til sidst, når et pænt (eller, i hvert fald så pænt som muligt) resultat opnås.

Men nok om kommutatorer for \hat{x} og \hat{p} . Nu skal de to relevante operatorer indføres

$$\hat{a}_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(\mp i\hat{p} + m\omega\hat{x}). \quad (2.43)$$

Produktet $\hat{a}_-\hat{a}_+$ er

$$\hat{a}_-\hat{a}_+ = \frac{1}{2\hbar m\omega}[\hat{p}^2 + (m\omega\hat{x})^2 - im\omega(\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})] \quad (2.44)$$

Den sidste parentes i parentesen er den kanoniske kommutator, og produktet kan da skrives ved denne:

$$\hat{a}_- \hat{a}_+ = \frac{1}{2\hbar m\omega} [p^2 + (m\omega\hat{x})^2] + \frac{1}{2i\hbar} [\hat{x}, \hat{p}] \quad (2.45)$$

$$= \frac{1}{\hbar\omega} \hat{H} + \frac{1}{2} \quad (2.46)$$

På lige vis fås produktet $\hat{a}_+ \hat{a}_-$

$$\hat{a}_+ \hat{a}_- = \frac{1}{\hbar\omega} \hat{H} - \frac{1}{2} \quad (2.47)$$

Dette giver da kommutatoren $[\hat{a}_+, \hat{a}_-] = 1$, og \hat{H} kan skrives ved

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}_- \hat{a}_+ - \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left(\hat{a}_+ \hat{a}_- + \frac{1}{2} \right). \quad (2.48)$$

og Schrödingerligningen er da

$$\hat{H}\psi = \hbar\omega \left(\hat{a}_\pm \hat{a}_\mp \pm \frac{1}{2} \right) \psi = E\psi. \quad (2.49)$$

Så nu kan Schrödingerligningen opskrives ved *to* operatorer, i stedet for kun én. Woop de fucking do! Men vent, for vi har jo ikke navngivet \hat{a}_+ og \hat{a}_- endnu! Vi kalder dem nemlig for henholdsvis *hæve*- og *sænke*-operatorerne (I bet you didn't see that coming). De har dette navn, fordi det viser sig, at hvis $\hat{H}\psi = E\psi$, så er $\hat{H}\hat{a}_+\psi = (E + \hbar\omega)\psi$ og $\hat{H}\hat{a}_-\psi = (E - \hbar\omega)\psi$. De to operatorer **hæver** og **sænker** altså energiniveauet af en given løsning! Men vi er jo stadig ikke tættere på nogen løsning. Nu ved vi bare at der er flere end én...

Det er dog sådan, at hvis man bruger sænkeoperatoren nok gange, må man nødvendigvis nå en negativ energi, hvilket ikke kan lade sig gøre i følge problem 2.2. Dermed må der være en **grundtilstand** med

$$\hat{a}_-\psi_0 = 0. \quad (\text{læg mærke til nul-indekseringen}) \quad (2.50)$$

(det kunne også være, at dens kvadratintegral var uendeligt, men normalt er det ikke sådan). Ud fra dette fås en differentialligning og medfølgende løsning

$$\frac{d\psi_0}{dx} = -\frac{m\omega}{\hbar} x\psi_0, \quad \Rightarrow \quad \psi_0(x) = Ae^{-m\omega x^2/2\hbar}. \quad (2.51)$$

Og A fås ved normalisering til $A^2 = \sqrt{m\omega/\pi\hbar}$. Da er grundtilstanden:

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/4} e^{-m\omega x^2/2\hbar}. \quad (2.52)$$

Denne tilstand har energien $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$. Hvilket man får fra Schrödingerligningen og at $\hat{a}_-\psi_0 = 0$. Hermed er det bare at bruge hæveoperatoren for at få alle de næste tilstande.

$$\psi_n = A_n (\hat{a}_+)^n \psi_0, \quad A_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}, \quad E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega. \quad (2.53)$$

Normaliseringsfaktoren A_n kan fås ud fra den egenskab at $\hat{a}_\pm \psi_n \propto \psi_{n\pm 1}$ og at \hat{a}_+ er den **hermitisk konjugerede** til \hat{a}_- (og omvendt):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f^*(\hat{a}_\pm g) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} (\hat{a}_\mp f)^* g dx \quad (2.54)$$

Ud fra dette, fås også følgende nyttige egenskaber

$$\hat{a}_+\psi_n = \sqrt{n+1} \psi_{n+1}, \quad \hat{a}_-\psi_n = \sqrt{n} \psi_{n-1}. \quad (2.55)$$

Ydermere er løsningerne til den harmoniske oscillator ortonormale. Dette vil sige, at vi kan bruge Fouriers trick, og at $|c_n|^2$ igen er sandsynligheden for at partiklen måles til at have energien E_n :

$$\Psi(x, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}_+)^n \psi_0, \quad c_n = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n(x)^* \Psi(x, 0) dx \quad (2.56)$$

Og igen skal den karakteristiske tidsfaktor bare smækkes på hvert led, for at få løsningen til den tidsafhængige Schrödingerligning.

Der er yderligere et par smarte resultater fra disse hæve/sænkeoperatorer. Man kan nemlig udtrykke \hat{x} og \hat{p} ved dem:

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}_+ + \hat{a}_-), \quad (2.57)$$

$$\hat{p} = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(\hat{a}_+ - \hat{a}_-), \quad (2.58)$$

$$\hat{x}^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} [\hat{a}_+^2 + \hat{a}_+\hat{a}_- + \hat{a}_-\hat{a}_+ + \hat{a}_-^2], \quad (2.59)$$

$$\hat{p}^2 = \frac{-\hbar m\omega}{2} [\hat{a}_+^2 - \hat{a}_+\hat{a}_- - \hat{a}_-\hat{a}_+ + \hat{a}_-^2]. \quad (2.60)$$

Dette gør det meget nemt at udregne forventningsværdier, idet man bare kan udnytte hæve/sænkeoperatorerne og ortonormaliteten af de stationære tilstande til at evaluere integralerne.

2.4 Den fri partikel

I dette og de resten af afsnittene af dette kapitel, gider jeg ikke at skrive »den tidsafhængige Schrödingerligning«, så jeg skriver bare Schrödingerligningen. Hvis jeg mener den tidsafhængige ligning, så skriver jeg det eksplicit.

For den frie partikel er $V(x) = 0$ over det hele, og Schrödingerligningen er da den samme som for den uendelige potentialbrønd.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi, \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} > 0. \quad (2.61)$$

Det er dog mere vanligt at skrive løsningen op på eksponentiel form, i stedet for trigonometrisk form:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}. \quad (2.62)$$

Og med tidsfaktoren på

$$\Psi(x, t) = Ae^{ik(x - \hbar k t / 2m)} + Be^{-ik(x + \hbar k t / 2m)}. \quad (2.63)$$

I tilfældet af en fri partikel, er der ingen randbetingelser, der putter restriktioner på den tilladte energi, og denne udgør da et kontinuert spektrum.

Løsningen svarer til superpositionen af én bølge der bevæger sig i positiv x -retning, og én der bevæger sig i negativ x -retning. Hvis man lader k også være negativ, kan man skrive den som

$$\Psi_k(x, t) = Ae^{i(kx - \hbar k^2 t / 2m)}, \quad k \equiv \pm \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad (2.64)$$

hvor $k > 0$ er en bølge der bevæger sig mod højre, og $k < 0$ er en bølge, der bevæger sig mod venstre.

Disse løsninger har ét problem: de er ikke normaliserbare. Til gengæld kan superpositionen af dem stadig normaliseres (nogle gange). I dette tilfælde er det dog ikke en sum over diskrete værdier af k , men rettere et integral:

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{i(kx - \hbar k^2 t / 2m)} dk, \quad (2.65)$$

hvor $(1/\sqrt{2\pi})\phi(k) dk$ svarer til c_n for de diskrete tilfælde. Dette integral kan normaliseres for nogle værdier af $\phi(k)$.

Som normalt, får man givet $\Psi(x, 0)$, og vi skal så finde $\Psi(x, t)$. Da skal $\phi(k)$ findes. $\Psi(x, 0)$ er da givet ved

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{ikx} dk, \quad (2.66)$$

hvilket jo bare er den Fouriertransformerede af $\phi(k)$! Dermed kan den inverse Fouriertransformation bruges til at finde $\phi(k)$:

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x, 0) e^{-ikx} dx. \quad (2.67)$$

så er det jo klaret! Men hvad *er* $\phi(k)$ egentlig? Det er en funktion, der beskriver spredningen i k for bølgen. Og da k er relateret til impulsen gennem bølgelængden λ og de Broglieformlen, svarer $\phi(k)$ også til *spredningen i impuls*.

Hvis man ser på hastigheden af de enkelte bølger Ψ_k (koefficienten af x over koefficienten af t) får man

$$v_{\text{kvantum}} = \frac{\hbar|k|}{2m} = \sqrt{\frac{E}{2m}}, \quad (2.68)$$

mens den klassiske hastighed for en fri partikel ($E = mv^2/2$) er

$$v_{\text{klassisk}} = \sqrt{\frac{2E}{m}} = 2v_q \quad (2.69)$$

hvilket er jo er ret spøjst. Til gengæld, fordi $\Psi(x, k)$ er opbygget af en linearkombination af en masse bølger, alle med forskellige værdier af k , giver dette anledning til et interferensmønster, og man kalder den samlede bølgefunktion for en **bølgepakke**.

Den samlede bølgefunktion er givet ved

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{i(kx - \omega t)} dk, \quad (2.70)$$

med $\omega = \hbar k^2/2m$. Med lidt fancy matematik og nogle koordinatskifte, får man, at den samlede bølgepakke bevæger sig med en bestemt hastighed (kaldet for **gruppeshastigheden**). Denne er givet ved

$$v_{\text{gruppe}} = \frac{d\omega}{dk}, \quad (2.71)$$

(denne differentialkvotient skal evalueres i punktet k_0 , der er det »typiske« bølgetal. Normalt tales der om en skarpt peaket funktion $\phi(k)$ med centrum i k_0 , ellers giver udtrykket bølgepakke heller ikke meget mening, grundet spredningen i impuls) og de enkelte bølger bevæger sig med **fasehastigheden**

$$v_{\text{fase}} = \frac{\omega}{k} \quad (2.72)$$

I dette tilfælde fås

$$v_{\text{fase}} = \frac{\hbar k}{2m} = v_{\text{kvantum}}, \quad v_{\text{gruppe}} = \frac{\hbar k}{m} = 2v_{\text{fase}} = v_{\text{klassisk}}. \quad (2.73)$$

Og dermed ses det, at bølgepakken, som beskriver partiklen, netop bevæger sig med den forventede hastighed.

2.5 Deltafunktionspotential

I dette og de resten af afsnittene af dette kapitel, gider jeg ikke at skrive »den tidsuafhængige Schrödingerligning«, så jeg skriver bare Schrödingerligningen. Hvis jeg mener den *tidsafhængige* ligning, så skriver jeg det eksplicit.

2.5.1 Bundne og ubundne tilstande

Indtil videre er der to typer af løsninger til Schrödingerligningen: normaliserbare løsninger, der er en sum over den diskrete variabel n (uendelig brønd, harmonisk oscillator), og ikkenormaliserbare løsninger, der er et integral over den kontinuerte variabel k (fri partikel).

Dette svarer også til to forskellige typer problemer i klassisk mekanik. Hvis vi har en partikel med energien E , og potentialet V overstiger partiklens energi på hver sin side af partiklen, så vil partiklen oscillere mellem disse to punkter (kaldet vendepunkter). Dette kaldes for en **bunden tilstand**. Hvis E derimod overstiger V på den ene side (eller begge) af partiklen, så vil denne komme ind fra uendelighed, og vende tilbage til uendelighed (enten den samme, eller modsatte, alt efter om der er ét eller nul vendepunkter). Dette kaldes for **ubundne tilstande**.

I kvantemekanik svarer de normaliserbare løsninger over n til bundne tilstande, mens de unormaliserbare løsninger over k svarer til ubundne tilstande. Nogle potentialer, som den harmoniske oscillator, tillader kun bundne tilstande, mens andre, som den frie partikel, tillader kun ubundne tilstande. Og andre

igen (som deltafunktionspotential og den endelige potentialbrønd), tillader begge, alt efter partiklens energi.

I kvantemekanik kan partikler ydermere godt overstige et lokalt maksimum i potential (et fænomen, der kaldes tunnelering), hvilket betyder, at det kun er potential i uendeligt, der er vigtigt:

$$\begin{cases} E < [V(-\infty) \text{ og } V(+\infty)] \Rightarrow \text{bunden tilstand,} \\ E > [V(-\infty) \text{ eller } V(+\infty)] \Rightarrow \text{ubunden tilstand.} \end{cases} \quad (2.74)$$

Og idet alle »virkelige« potentialer går mod 0 i uendeligt fås

$$\begin{cases} E < 0 \Rightarrow \text{bunden tilstand,} \\ E > 0 \Rightarrow \text{ubunden tilstand.} \end{cases} \quad (2.75)$$

2.5.2 Deltafunktionsbrønden

Forestil dig en potentialbrønd af formen

$$V(x) = -\alpha\delta(x), \quad \alpha > 0 \quad (2.76)$$

Altså en uendeligt dyb brønd i origo. Her er Schrödingerligningen

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} - \alpha\delta(x)\psi = E\psi, \quad (2.77)$$

og den tillader både bundne og ubundne tilstande ($E < 0$ og $E > 0$ henholdsvis). For **bundne** tilstande, med $E < 0$, er der altid én løsning, givet ved

$$\psi(x) = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} e^{-m\alpha|x|/\hbar^2}, \quad E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} \quad (2.78)$$

Denne fås således: Schrödingerligningen i området $x < 0$ lyder:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \kappa^2\psi, \quad \kappa \equiv \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}, \quad (2.79)$$

hvor κ er positiv og reel, idet E er negativ og reel. Da er løsningen summen af to eksponentialfunktioner: $\psi(x) = Ae^{-\kappa x} + Be^{\kappa x}$, hvor A nødvendigvis må være 0, idet dette led går mod uendeligt for $x \rightarrow -\infty$. Da

$$\psi(x) = Be^{\kappa x}. \quad (2.80)$$

Og for $x > 0$ fås per samme argument

$$\psi(x) = Fe^{-\kappa x}. \quad (2.81)$$

Disse skal da bare sættes sammen med de normale randbetingelser: ψ skal altid være kontinuert, og $d\psi/dx$ skal være kontinuert, ud over i punkter, hvor potential er uendeligt. Den første randbetingelse giver at $F = B$, men hvad med den anden? Den giver nødvendigvis at differentialkvotienten i $x = 0$ er diskontinuert, men vi ved ikke med hvor meget, og for den sags skyld, hvilken værdi κ har.

For at finde ud af dette (og hvorfor differentialkvotienten ikke er kontinuert i uendelige potentialer), tager man og integrerer Schrödingerligningen fra $-\epsilon$ til $+\epsilon$, og tager grænsen hvor $\epsilon \rightarrow 0$:

$$-\frac{\hbar}{2m} \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \frac{d^2\psi}{dx^2} dx + \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} V(x)\psi(x) dx = E \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \psi(x) dx. \quad (2.82)$$

I grænsen $\epsilon \rightarrow 0$ er første led bare nogle konstante ganget med $d\psi/dx$. Højresiden er 0, idet det er et integral fra 0 til 0. Dermed fås

$$\Delta \left(\frac{d\psi}{dx} \right) \equiv \left. \frac{\partial\psi}{\partial x} \right|_{+\epsilon} - \left. \frac{\partial\psi}{\partial x} \right|_{-\epsilon} = \frac{2m}{\hbar} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} V(x)\psi(x) dx. \quad (2.83)$$

Typisk er højresiden 0 (igen fordi det er et integral fra 0 til 0), og differentialkvotienten er kontinuert. Men når potential er uendeligt i punktet, er dette ikke tilfældet. Specielt for deltafunktionsbrønden er $\psi(x)V(x) = -\alpha\psi(0)$ og integralet er

$$\Delta \left(\frac{d\psi}{dx} \right) = -\frac{2m\alpha}{\hbar} \psi(0). \quad (2.84)$$

De to differentialkvotienter er

$$\left. \frac{\partial \psi}{\partial x} \right|_{+\epsilon} = -B\kappa, \quad \left. \frac{\partial \psi}{\partial x} \right|_{-\epsilon} = +B\kappa \quad (2.85)$$

Sættes dette ind, får man værdien for κ

$$-2B\kappa = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}, \quad \Leftrightarrow \quad \kappa = \frac{m\alpha}{\hbar^2} \quad (2.86)$$

Dermed er energien

$$E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}. \quad (2.87)$$

Og ved normalisering fås $B = \sqrt{\kappa} = \sqrt{m\alpha}/\hbar$, hvor man vælger den positive, reelle rod. Dermed har deltafunktionsbrønden altid én bunden tilstand:

$$\psi(x) = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} e^{-m\alpha|x|/\hbar^2}, \quad E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} \quad (2.88)$$

2.6 Den endelige potentialbrønd

Forelæsningsnoter

man 5/12

Sidste gang: Generel kvant: kommutatorer:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (2.89)$$

kanonisk kommutator

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \quad (2.90)$$

Nu:

- \hat{a}_+ og \hat{a}_- er *ikke* hinandens kompleks konjugerede. Men de er hinandens hermitisk konjugerede (adjungerede fra LinAlg). Eksempel. få d_n fra $\hat{a}_-\psi_n = d_n\psi_n$ (står også i bogen)

$$\int (\hat{a}_-\psi_n)^* (\hat{a}_-\psi_n) dx = \int (d_n\psi_n)^* (d_n\psi_n) dx = |d_n|^2 \quad (2.91)$$

$$\int \psi_n^* \hat{a}_+ \hat{a}_- \psi_n dx = n \int |\psi_n|^2 dx = n, \quad (2.92)$$

$$|d_n|^2 = n, \quad \Rightarrow \quad d_n = \sqrt{n}, \text{ vælger positiv rod} \quad (2.93)$$

- Fri partikel kompakt:

$$\psi_k = A_k \exp [i (kx - \hbar k^2 t \cdot \text{snask})] \quad (2.94)$$

screw it. Det står også i bogen