

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	12
2.1	Stationære tilstande	12
2.1.1	Resultater fra problem 2.1 og 2.2	13
2.2	Den uendelig potentialbrønd	14
2.3	Den harmonisk oscillator	15
2.4	Den fri partikel	15
2.5	Deltafunktionspotentiallet	15
2.6	Den endelige potentialbrønd	15

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	$-E_1$	$= \frac{\hbar^2}{2m_e a^2} = \frac{\alpha^2 m_e c^2}{2}$	$= 13.6057 \text{ eV}$
Grundstadiet	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.

Forelæsningsnoter

man 5/12

Sidste gang: Generel kvant: kommutatorer:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (1.33)$$

kanonisk kommutator

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \quad (1.34)$$

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)

$$\int (\hat{a}_-\psi_n)^* (\hat{a}_-\psi_n) dx = \int (d_n\psi_n)^* (d_n\psi_n) dx = |d_n|^2 \quad (1.35)$$

$$\int \psi_n^* \hat{a}_+ \hat{a}_- \psi_n dx = n \int |\psi_n|^2 dx = n, \quad (1.36)$$

$$|d_n|^2 = n, \quad \Rightarrow \quad d_n = \sqrt{n}, \text{ vælger positiv rod} \quad (1.37)$$

- Fri partikel kompakt:

$$\psi_k = A_k \exp [i (kx - \hbar k^2 t \cdot \text{snask})] \quad (1.38)$$

screw it. Det står også i bogen

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. Mere om det i afsnit 2.5

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 (igen, mere om det i afsnit 2.5). 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

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

2.3 Den harmonisk oscillator

2.4 Den fri partikel

2.5 Deltafunktionspotential

2.6 Den endelige potentialbrønd