Prinsipper i kvantemekanikk

February 25, 2022

Paritetsoperatoren

Vi har allerede sett på Hamilton-, posisjons- og bevegelsesmengde-operatorene. Nå skal vi introdusere en ny operator, nemlig paritetsoperatoren. Paritetsoperatoren er en operator som gjør transformasjonen $x \to -x$, vi definerer den som

$$\hat{\Pi}\psi(x) = \psi(-x) \tag{1}$$

Vi har da følgende eigenverdiligning

$$\hat{\Pi}\psi_\lambda(x) = \lambda\psi_\lambda(x) \tag{2}$$

Vi kan løse denne ligningen ved å merke oss at $\hat{\Pi}^2 = 1$ siden hvis vi transformerer $x \to -x$ to ganger er tilbake der vi startet. Vi har

$$\hat{\Pi}^2\psi_\lambda = \hat{\Pi}\lambda\psi_\lambda = \lambda^2\psi_\lambda \tag{3}$$

som gir

$$\lambda^2 = 1 \tag{4}$$

$$\Rightarrow \lambda = \pm 1 \tag{5}$$

Dvs. eigentilstandene til paritetsoperatoren med eigenverdi $+1$ er jevne tilstander og -1 eigenverdier har odde tilstander. Vi har sett at for symmetriske potensialer $V(x) = V(-x)$ er energi eigentilstandene også symmetriske, enten jevne eller odde. Så vi har derfor generelt at energi eigentilstander er også paritets eigentilstander.

Det er enkelt å vise at alle tilstander kan skrives som en lineærkombinasjon av jevne og odde tilstander. Som vi kan se ved å skrive om en arbitrær $\psi(x)$ på følgende måte

$$\psi(x) = \frac{1}{2}(\psi(x) + \psi(-x)) + \frac{1}{2}(\psi(x) - \psi(-x)) \tag{6}$$

hvor vi nå ser at det første leddet er jevnt mens det andre er odde. Det betyr at også eigentilstandene til paritetsoperatoren danner et komplett sett.

Hermitiske operatorer og observable

Vi starter med litt notasjon; vi innfører notasjonen hvor vi skriver en kvante tilstand som $|\psi\rangle = \psi$ (dette kaller vi en ket) og vi lar den kompleks konjugert være $\langle\psi| = \psi^*$ (som vi kaller en bra). Fordelen med en slik notasjon er at vi kan nå har en veldig kompakt måte å skrive indreproduktet mellom tilstandene ψ_n og ψ_m som $\langle\psi_n|\psi_m\rangle$, dvs vi har

$$\langle\psi_n|\psi_m\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*\psi_m dx \tag{7}$$

Dette indreproduktet kalles nå en braket. Vi har også for en operator $\hat{O}$ at

$$|\hat{O}\psi\rangle = \hat{O}|\psi\rangle = \hat{O}\psi \tag{8}$$

$$(|\hat{O}\psi\rangle)^* = \langle\hat{O}\psi| = \langle\psi|\hat{O}^* = \hat{O}^*\psi^* \tag{9}$$

Denne notasjonen stammer fra Paul Dirac og kalles Dirac notasjon, eller bra-ket notasjon, og er en veldig effektiv måte å uttrykke kvantetilstander på.

Videre sier vi at en operator $\hat{O}$ er **hermitisk** hvis vi har

$$\langle\phi|\hat{O}\psi\rangle = \langle\hat{O}\phi|\psi\rangle \qquad \Leftrightarrow \qquad \int_{-\infty}^{\infty}\phi^*\hat{O}\psi dx = \int_{-\infty}^{\infty}(\hat{O}\phi)^*\psi dx \tag{10}$$

Vi har videre at om vi har to distinkte eigenverdier til en hermitisk operator så er eigentilstandene deres ortogonal, som vi ser fra

$$\langle\psi_{\lambda_1}|\hat{O}\psi_{\lambda_2}\rangle = \langle\hat{O}\psi_{\lambda_1}|\psi_{\lambda_2}\rangle \tag{11}$$

$$\Rightarrow \langle\psi_{\lambda_1}|\lambda_2|\psi_{\lambda_2}\rangle = \langle\psi_{\lambda_1}|\lambda_1|\psi_{\lambda_2}\rangle \tag{12}$$

$$\Rightarrow (\lambda_2 - \lambda_1)\langle\psi_{\lambda_1}|\psi_{\lambda_2}\rangle = 0 \tag{13}$$

Som gir

$$\langle\psi_{\lambda_1}|\psi_{\lambda_2}\rangle = 0 \qquad \lambda_1 \neq \lambda_2 \tag{14}$$

at hermitiske operatorer har ortogonale tilstander. Vi har allerede sett at dette gjelder for eigentilstandene til Hamilton operatoren, men nå har vi at dette gjelder helt generelt for hermitiske oepratorer. Siden vi også krever at tilstandene er normaliserte har vi at eigentilstander utgjør et ortonormalt sett tilstander $\{|\psi_n\rangle\}$ slik at

$$\langle\psi_n|\psi_m\rangle = \delta_{n,m} \tag{15}$$

Vi ar også at $|\psi_n\rangle$ er et komplett sett

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n|\psi_n\rangle \tag{16}$$

for en hvilken som helst tilstand $|\psi\rangle$. Når vi antar at $|\psi\rangle$ er normalisert får vi da

$$1 = \langle\psi|\psi\rangle \tag{17}$$

$$= \Big(\sum_{m=1}^{\infty} c_m^*\langle\psi_m|\Big)\sum_{n=1}^{\infty} c_n|\psi_n\rangle \tag{18}$$

$$= \sum_{m=1}^{\infty}\sum_{n=1}^{\infty} c_m^* c_n\langle\psi_m|\psi_n\rangle \tag{19}$$

$$= \sum_{m=1}^{\infty}\sum_{n=1}^{\infty} c_m^* c_n\delta_{n,m} \tag{20}$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty}|c_n|^2 \tag{21}$$

hvor vi har at $|c_n|^2$ er sannsynligheten for å måle eigenverdien λ_n til operatoren $\hat{O}$.

Vi har igjen at vi kan finne vektene til lineærkombinasjonen ved

$$\langle\psi_n|\psi\rangle = \ \langle\psi_n|\Big(\sum_{m=1}^{\infty} c_m|\psi_m\rangle\Big) \tag{22}$$

$$= \sum_{m=1}^{\infty} c_m\langle\psi_n|\psi_m\rangle \tag{23}$$

$$= \sum_{m=1}^{\infty} c_m\delta_{n,m} = c_n \tag{24}$$

Siden $|C_n|^2$ er sannsynligheten for å måle eigenverdi λ_n har vi

$$\langle O \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 \lambda_n \tag{25}$$

Som gir generelt for hermitiske operatorer at

$$\langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle = \Big(\sum_{n=1}^{\infty} c_n \ \langle \psi_n | \Big) \hat{O} \Big(\sum_{m=1}^{\infty} c_m | \psi_m \rangle \Big) \tag{26}$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} c_n^* c_m \langle \psi_n | \hat{O} | \psi_m \rangle \tag{27}$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} c_n^* c_m \lambda_m \langle \psi_n | \psi_m \rangle \tag{28}$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} c_n^* c_m \lambda_m \delta_{n,m} \tag{29}$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} |c_m|^2 \lambda_m \tag{30}$$

Slik at vi har

$$\langle O \rangle = \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle \tag{31}$$

Vi får da videre at når vi bruker at $\hat{O}$ er hermitisk

$$\langle O \rangle = \langle \psi | \hat{O} \psi \rangle = \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle = \langle \hat{O} \psi | \psi \rangle = \ \langle O \rangle^* \tag{32}$$

Med andre ord forventningsverdien til observable som representeres av hermitiske operatorer er reelle. Dvs. vi har at alle observerbare størrelser representeres av hermitiske operatorer og de vil alltid ha reelle forventningsverdier. Hvis vi videre antar at vi har en eigenverdiligning for en hermitisk operator

$$\hat{O} \psi_\lambda = \lambda \psi_\lambda \tag{33}$$

Så får vi da at

$$\langle O \rangle = \langle \psi_\lambda | \hat{O} \psi_\lambda \rangle = \lambda \langle \psi_\lambda | \psi_\lambda \rangle = \lambda \tag{34}$$

hvor vi antar at eigentilstandene er normalisert. Dette gir da

$$\langle O \rangle = \ \langle O \rangle^* \qquad \Rightarrow \qquad \lambda = \lambda^* \tag{35}$$

altså hermitiske operatorer har alltid reelle eigenverdier.

Til slutt nevner vi at vi kan skrive uskarpheten til en hvilken som helst observabel som

$$(\Delta O)^2 = \langle \psi | \hat{O}^2 | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle^2 \tag{36}$$

Kommuterende operatorer

Vi vet at om vi multipliserer to reelle tall med hverandre så spiller rekkefølgen ingen rolle

$$ab = ba \qquad \forall a, b \in \mathbb{R} \tag{37}$$

mens vi også vet at for to matriser spiller rekkefølgen en veldig viktig rolle når vi multipliserer de med hverandre og vi har generelt at

$$\mathbf{M_1 M_2} \neq \ \mathbf{M_2 M_1} \tag{38}$$

når $\mathbf{M_1}$ og $\mathbf{M_2}$ er generelle matriser og det er ikke nødvendigvis tilfellet at $\mathbf{M_2M_1}$ eksisterer selv om $\mathbf{M_1M_2}$ gjør det. Vi sier at reelle tall kommuterer mens matriser generelt ikke gjør det. Vi skal se på det for generelle operatorer i det følgende. og vi definerer nå den såkalte **kommutatoren** som

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \tag{39}$$

Vi har da at to operatorer kommuterer når kommutatoren forsvinner

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \tag{40}$$

$$\Rightarrow \hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} \tag{41}$$