

LINJÄR ALGEBRA

Del III – Abstrakta vektorrum

JOHAN WILD

2019-03-08

©Johan Wild 2014

`johan.wild@europaskolan.se`

Får gärna användas i undervisning, kontakta i så fall författaren.

2019-03-08

Innehåll

1	Inledning	4
2	Notation	4
3	Vektorrum	4
3.1	Inledning	4
3.2	Axiom	4
3.3	Exempel	5
4	Metrik, norm och skalärprodukt	5
4.1	Metrik	6
4.2	Norm	7
4.3	Skalärprodukt	8
4.4	Ordning i strukturen	9
5	Funktionsrum	10
5.1	Vektorstruktur	10
5.2	Norm	10
5.3	Skalärprodukt och metrik	11
6	Basvektorer i funktionsrum	11
6.1	Diracs deltafunktion – En basvektor i varje punkt	11
6.2	Trigonometriska basvektorer – Fourierserier	12
6.2.1	Fyrkantvåg	13
6.2.2	Trigonometriska basfunktioner på komplex form	15
7	Andra basfunktioner	16
8	Beskrivning av vågor	16
8.1	En dimension	16
8.2	Två dimensioner	17
8.2.1	Kartesiska koordinater	17
8.2.2	Polära koordinater	18
8.3	Tre dimensioner	18
8.3.1	Kartesiska koordinater	18
8.3.2	Cylindriska koordinater	18
8.3.3	Sfäriska koordinater	18
9	Icke-Periodiska funktioner	19
10	Operatorer, egenvärden och förväntansvärden	21
10.1	Operatorer och egenvärden	21
10.2	Energivåer i kvantmekaniken	22
10.3	Motivering av Schrödingerekvationen	22
10.4	Partikeln i lådan	23
10.5	Förväntansvärden	25
10.6	Förväntansvärden i kvantmekaniken	25
11	Slutord	25

1 Inledning

Denna text syftar till att introducera abstrakta vektorrum, speciellt funktionsrum. Den är del III i en serie om Linjär algebra där de två första delarna har handlat om vektorer och den andra matriser.

Texten är skriven för kursen Linjär Cirkel vid Europaskolan och är tänkt att dessutom stödja kursen Fysik Specialisering där Fourierserier tillämpas inom vågrörelseläran och där även kvantmekanik tas upp.

Fokus i denna text ligger på att ge en förklaring till de begrepp som tas upp på en konceptuell nivå. Meningen är att man skall se likheter mellan olika begrepp och se en progression i olika strukturer”. Det är inte textens mening att bevisa allt som påstås. Här målas med stora penseln!

Denna text är för närvarande den minst utvecklade av de tre delarna i serien om linjär algebra. Vänligen ha överseende med det vid läsningen.

2 Notation

Här följer en sammanställning av notationen som används i denna text.

\mathcal{V}	Vektorrum anges med detta typsnitt.
\boldsymbol{v}	Vektorer anges i allmänhet med fet stil, men ...
$f(x)$... vektorer i funktionsrum anges som funktioner brukar göra.
a	Skalärer anges med icke-fet stil.
v_x	\hat{x} -komponenten av \boldsymbol{v} .
$\ \boldsymbol{v}\ $	Norm (storlek)
$\langle \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \rangle$	Skalarprodukt.

3 Vektorrum

3.1 Inledning

I första delen i denna serie, den om vektorer, studerade vi vektorrummen \mathbb{R}^2 och \mathbb{R}^3 utan att göra så stor affär av vad som menas med vektorer. Här skall vi göra några förtydliganden av vad som menas med vektorer. I korthet är vektorer element man kan addera med varandra och multiplicera med tal.

3.2 Axiom

Ett **vektorrum** (eng vector space) består av en kropp K och en mängd \mathcal{V} där det finns en operation (addition, $+$) definierad på elementen i \mathcal{V} och en operation (multiplikation, \cdot) definierad på element i K och elementen i \mathcal{V} .

Element i \mathcal{V} benämns **vektorer** och betecknas i denna text med fet stil. Element i K benämns **skalärer**.

Vi säger att vektorrummet \mathcal{V} är **över** K .

Axiom Följande punkter skall gälla för alla $\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w} \in \mathcal{V}$ och för alla $k, l \in K$.

1. Addition är kommutativ: $\mathbf{u} + \mathbf{v} = \mathbf{v} + \mathbf{u}$
2. Addition är associativ: $(\mathbf{u} + \mathbf{v}) + \mathbf{w} = \mathbf{u} + (\mathbf{v} + \mathbf{w})$
3. Existens av nollvektorn:

Det finns ett element $\mathbf{0}$ så att $\mathbf{v} + \mathbf{0} = \mathbf{v}$

4. Existens av invers:

Till varje \mathbf{v} finns ett element \mathbf{u} så att $\mathbf{v} + \mathbf{u} = \mathbf{0}$

5. Multiplikation med skalär är distributiv: $k(\mathbf{u} + \mathbf{v}) = k\mathbf{u} + k\mathbf{v}$
6. Multiplikation med skalär är associativ: $k(l\mathbf{v}) = (kl)\mathbf{v}$
7. Multiplikation med multiplikativt enhetselement i K : $1\mathbf{v} = \mathbf{v}$

Det går inte att utläsa ur axiomen ovan att vi kräver att K skall vara just en kropp. Existensen av en multiplikativ invers till elementen i K används inte, men i praktiken kommer vi kräva att de finns så att vi kan räkna utan att behöva bekymra oss om det.

3.3 Exempel

Självklart gäller att talmängderna \mathbb{Z} , \mathbb{Q} , \mathbb{R} och \mathbb{C} är vektorrum över sig själva (utom över \mathbb{Z} förstås eftersom \mathbb{Z} inte är en kropp).

Vi har tidigare studerat \mathbb{R}^2 och \mathbb{R}^3 som vektorrum över \mathbb{R} . På samma sätt är \mathbb{R}^n ett vektorrum över \mathbb{R} .

Mindre självklara exempel som vi kommer att studera är mänden av olika sorters funktioner. Till exempel utgör mängden av alla polynomfunktioner ett vektorrum över en talkropp. Vi kan också begränsa oss till alla funktioner som är periodiska över ett visst intervall¹.

Ett speciellt viktigt exempel är alla funktioner som är periodiska över intervallet $[0, 2\pi]$.

Vektorrum där elementen är funktioner benämns *funktionsrum* (eng function space).

4 Metrik, norm och skalärprodukt

Matematiken som vetenskap byggs upp axiomatiskt. Det mest grundläggande begreppet är mängdbegreppet som på sätt och vis är mycket abstrakt och konkret på samma gång. En viktig egenskap alla mängder har är att de "från början" så att säga inte har några egenskaper. Bara för att man har en mängd, är det inte självklart hur man till exempel skall kunna addera elementen, avgöra avståndet mellan dem eller elementens storlek.

Begrunda mängden $A = \{2, \text{bil}, \mathbb{R}\}$. Vad kan du göra med denna mängd? Vad menas med $2 + \text{bil}$?

¹I praktiken kan vi lika gärna anse att funktionerna bara är definierade på detta intervall.

Genom att införa struktur på mängder kan vi göra dem mer användbara. Tal-
mängderna har en algebraisk struktur och vektorrum har en ännu mer avancerad
algebraisk struktur.

Den mest fundamentala strukturen man kan införa på en mängd är en **topologi**,
vilket innebär att man definierar hur en mängd kan delas in i delmängder. Vi skall
inte använda topologibegreppet vidare i denna text och lämnar därför detta utan
vidare kommentarer.

4.1 Metrik

En metrik är ett sätt att bestämma avståndet mellan två element i en mängd. Man
använder ofta symbolen d för metrik, som i engelskans *distance*.

Definition 4.1.1. En *metrik* d på en mängd M är en funktion
 $d : M \times M \rightarrow \mathbb{R}^+$ med följande egenskaper.

1. $d(a, b) \geq 0 \quad \forall \quad a, b \in M$ med likhet endast om $a = b$.
2. $d(a, b) = d(b, a) \quad \forall \quad a, b \in M$.
3. $d(a, b) + d(b, c) \geq d(a, c) \quad \forall \quad a, b, c \in M$. (Triangelolikheten)

▲

En metrik och en mängd utgör tillsammans ett **metriskt rum** (eng metric space).
Om mängden har en vektorstruktur säger vi att vi har ett **metriskt vektorrum**.

Observera att det inte är nödvändigt med en vektorstruktur på mängden eftersom
någon addition etc inte används i definitionen. Däremot är det vanligt att man
definierar metriken på en viss mängd med en algebraisk operation som kräver en
vektorstruktur.

Vi har i tidigare texter studerat olika metriker på \mathbb{R}^2 och \mathbb{R}^3 . Speciellt definierade
vi den Euklidiska metriken

$$d(P, Q) = \sqrt{(P_x - Q_x)^2 + (P_y - Q_y)^2}.$$

Definition 4.1.2. Den *Euklidiska metriken* i \mathbb{R}^n ges av

$$d(P, Q) = \sqrt{\sum_{k=1}^n (P_k - Q_k)^2}. \quad (4.1)$$

▲

4.2 Norm

En norm är ett sätt att bestämma storleken av en vektor i ett vektorrum. Man använder ofta skrivsättet $\|\mathbf{v}\|$ för normen av vektorn \mathbf{v} .

Definition 4.2.1. En *norm* $\|\cdot\|$ på ett vektorrum \mathcal{V} (över kropp K) är en funktion $\|\cdot\| : \mathcal{V} \rightarrow \mathbb{R}^+$ med följande egenskaper.

1. $\|\mathbf{v}\| \geq 0 \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{V}$ med likhet endast om $\mathbf{v} = \mathbf{0}$.
2. $\|a\mathbf{v}\| = |a| \cdot \|\mathbf{v}\| \quad \forall a \in K, \mathbf{v} \in \mathcal{V}$.
3. $\|\mathbf{v}\| + \|\mathbf{u}\| \geq \|\mathbf{v} + \mathbf{u}\| \quad \forall \mathbf{v}, \mathbf{u} \in \mathcal{V}$. (Triangelolikheten).

▲

Som du ser innebär det sista kravet att det måste finnas en vektorstruktur (eller i alla fall en addition) definierad. Med denna definition av begreppet norm² är det alltså i allmänhet inte relevant att prata om normen på en mängd.

En norm och en mängd utgör ett **normerat rum** (eng normed space), och vi säger ett **normerat vektorrum** om mängden är ett vektorrum (eng normed vector space).

Exempel 4.2.2. Som norm på de vanliga talkropparna används oftast absolutbeloppet, $\|a\|$ definieras till $|a|$ för $a \in \mathbb{Z}, \mathbb{Q}$ eller \mathbb{R} .

I \mathbb{C} används samma symbol och vi säger ofta "absolutbeloppet av z " då vi menar dess norm. Det kanske kan betraktas som en smaksak om ordet "absolutbelopp" bör reserveras för icke-komplexa tal eller inte. I \mathbb{C} gäller hur som helst

$$\|a + ib\| = \sqrt{a^2 + b^2}.$$

I \mathbb{R}^2 definieras $\|\mathbf{v}\| = \sqrt{v_x^2 + v_y^2}$.

▲

Definition 4.2.3. Den *Euklidiska normen* i \mathbb{R}^n ges av

$$\|\mathbf{v}\| = \sqrt{\sum_{k=1}^n v_k^2}. \quad (4.2)$$

▲

En fin egenskap med normbegreppet är att det inducerar en metrik på ett vektorrum enligt följande sats.

Sats 4.2.4. Om $\|\cdot\|$ är en norm på ett vektorrum, ges en metrik på vektorrummet av $d(\mathbf{v}, \mathbf{u}) = \|\mathbf{v} - \mathbf{u}\|$.

I ett bevis av denna sats måste vi visa att kraven i 4.1.1 är uppfyllda.

Rent geometriskt är satsen naturlig, och likheterna mellan (4.2) och (4.1.2) är uppenbara. Däremot kan denna likhet inte tas som bevis eftersom satsen gäller för alla inre-produktrum, medan dessa uttryck bara gäller för just \mathbb{R}^2 .

²Notera att 4.2.1 är definition av själva begreppet norm, medan uttrycket (4.2) är definition av en viss norm (i detta fall på \mathbb{R}^2).

4.3 Skalarprodukt

En *skalarprodukt* är ett sätt att multiplicera vektorer med varandra så att resultatet är ett tal. En synonym till skalarprodukt är inre produkt eftersom två vektorer i samma vektorrum multipliceras³. Av denna anledning benämns vektorrum där det finns en skalarprodukt *inre produktrum*⁴(eng inner product space).

Definition 4.3.1. En *skalarprodukt* $\langle \cdot, \cdot \rangle$ på ett vektorrum \mathcal{V} är en funktion

$$\langle \cdot, \cdot \rangle : \mathcal{V} \times \mathcal{V} \rightarrow \mathbb{R}$$

med följande egenskaper.

1. $\langle \mathbf{v}, \mathbf{v} \rangle \geq 0 \quad \forall \quad \mathbf{v} \in \mathcal{V}$ med likhet endast om $\mathbf{v} = \mathbf{0}$.
2. $\langle \mathbf{v}, \mathbf{u} \rangle = \langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle^* \quad \forall \quad \mathbf{v}, \mathbf{u} \in \mathcal{V}$ (Konjugatsymmetri⁵)
3. $\langle a\mathbf{v} + b\mathbf{u}, \mathbf{w} \rangle = a\langle \mathbf{v}, \mathbf{w} \rangle + b\langle \mathbf{u}, \mathbf{w} \rangle \quad \forall \quad \mathbf{v}, \mathbf{u}, \mathbf{w} \in \mathcal{V}$.

▲

Mindre tydligt uttryckt är alltså skalarprodukten en positivt definit konjugatsymmetrisk linjär funktion.

Exempel 4.3.2. I \mathbb{R}^2 har vi sett att $\langle \mathbf{v}, \mathbf{u} \rangle = v_x u_x + v_y u_y$ och i \mathbb{R}^n gäller på samma sätt

$$\langle \mathbf{v}, \mathbf{u} \rangle = \sum_{k=1}^n v_k u_k. \quad (4.3)$$

▲

Återigen är det så att en skalarprodukt i någon mening är ett bättre och mer användbart begrepp än norm. Vi kan också nämligen en norm om vi har en skalarprodukt.

Sats 4.3.3. Om $\langle \cdot, \cdot \rangle$ är en skalarprodukt på en mängd, ges en norm av

$$\|\cdot\| = \sqrt{\langle \cdot, \cdot \rangle}.$$

Även här måste det bevisas att denna norm uppfyller kraven i 4.2.1.

Observera återigen att den uppenbara likheten mellan (4.3) och (4.2) inte kan tas som bevis för satsen, då dessa uttryck bara är definierade i \mathbb{R}^n .

Den geometriska tolkningen av begreppet skalarprodukt innebär att två vektorer är ortogonala om deras skalarprodukt är noll. Detta hämtar vi från specialfallet \mathbb{R}^n , men tolkningen gäller generellt. För att ha något att jämföra med listar vi nu några fler egenskaper för skalarprodukten som har en naturlig tolkning i \mathbb{R}^n men som gäller generellt.

³Till skillnad från den yttre produkten där man definierar hur man multiplicerar vektorer från olika vektorrum så att resultatet blir en ny sorts objekt (till exempel en tensor).

⁴Man säger dock inte "skalarproduktrum".

⁵Observera att notationen a^* betyder komplexkonjugatet av a . Detta är relevant om \mathcal{V} är ett vektorrum öve \mathbb{C} , annars reduceras kravet till symmetri, $\langle \mathbf{v}, \mathbf{u} \rangle = \langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle$

En mängd vektorer som kan användas för att beskriva andra vektorer⁶ är praktisk att använda om de parvis är ortogonala och är normerade (har normen 1). Med andra ord, om $\{\mathbf{e}_1 \dots \mathbf{e}_n\}$ är uppsättning basvektorer utgör dessa en ON-bas om

$$\langle \mathbf{e}_k, \mathbf{e}_l \rangle = \begin{cases} 0 & \text{om } k \neq l \\ 1 & \text{om } k = l \end{cases}.$$

Något som vi kommer återkomma till är följande mycket viktiga samband:

$$v_k = \langle \mathbf{v}, \mathbf{e}_k \rangle \quad (4.4)$$

och

$$\mathbf{v} = \sum_{k=1}^n \langle \mathbf{v}, \mathbf{e}_k \rangle \mathbf{e}_k. \quad (4.5)$$

4.4 Ordning i strukturen

Om man skulle ha varit noga med ordningen mellan begreppen skulle vektorbegreppet ha kommit mellan metriskt rum och vektorrum. Därefter skulle begreppet basvektor ha kommit direkt.

Skalarprodukten (den inre produkten) skulle dock inte ha kommit förrän mellan normerat vektorrum och inreproduktrum. Därefter skulle vi ha kunnat definiera ortogonalitet.

Hur begreppshierarkin växer fram illustreras av bilden nedan. Notera hur vi får fler och fler verktyg allt eftersom vi inför mer struktur på mängden. Priset är mindre generellitet på de uttalanden vi gör om rummets egenskaper.

Det som är sant i ett inreproduktrum gäller nödvändigtvis inte i ett normerat vektorrum, men om vi hittar en egenskap för mängder gäller detta för alla typer av rum. Detta sätt att strukturera sina uttalanden är vanligt inom matematiken.

Metrik



Inför metrik för att kunna mäta avstånd mellan elementen i mängden.

Metriskt rum



Inför vektorstruktur, ett sätt att vandra rund i mängden.

Vektorrum



Inför en norm, ett sätt att uttala sig om längden av en vektor.

Normerat vektorrum



Inför skalarprodukt.

Inreproduktrum

⁶Vi återkommer senare till vilka krav som ställs på en sådan uppsättning vektorer.

5 Funktionsrum

Vi har nu sett att det alltså räcker att definiera en skalärprodukt på ett vektorrum för att det dessutom skall finnas en användbar norm och metrik⁷. Detta gäller även fall där den underliggande mängden är en mängd funktioner. Först måste vi dock reda ut att dessa har en naturlig Vektorstruktur.

5.1 Vektorstruktur

För ”vanliga” vektorrum, \mathbb{R}^2 och mer generellt \mathbb{R}^n , är detta mer eller mindre naturligt, men hur blir det i funktionsrum? Först måste vi reda ut att funktionsrum faktiskt är vektorrum.

Givet två funktioner $f(x)$ och $g(x)$ kan vi bilda en ny funktion $h(x) = f(x) + g(x)$. Vi kan också multiplicera en funktion med en konstant, $h(x) = af(x)$ är relevant. Naturligtvis gäller allt detta för alla x i funktionernas definitionsmängd D .

Mänden av alla funktioner utgör alltså ett vektorrum över någon talkropp, vanligen \mathbb{R} eller \mathbb{C} .

5.2 Norm

Bäst känsla för begreppen metrik, norm och skalärprodukt kanske fås genom att först studera normen. En intuitiv förståelse för storleken av en funktion följer ur integralbegreppet.

Vi betraktar fortsättningsvis bara integrerbara funktioner definierade på någon delmängd D av \mathbb{R} . Vi benämner detta vektorrum L_2 .

Givet två funktioner $f(x)$ och $g(x)$ är det kanske naturligt att

$$||f(x)|| > ||g(x)||$$

om

$$\int_D f(x)dx > \int_D g(x)dx.$$

Nu måste man komma ihåg att funktioner kan ha negativa värden, vilket kan göra värdet av en integral negativ. Att bara integrera $f(x)$ är alltså ingen bra ide. Vi skulle kunna försöka med att definiera

$$||f(x)|| = \int_D |f(x)|dx$$

istället. Det visar sig att denna norm (som brukar kallas L_1) uppfyller kraven i definition 4.2.1. Den norm som liknar den Euklidiska normen mest ges i följande definition.

Definition 5.2.1. Normen i L_2 (eller L_2 -normen) ges av

$$||f(x)|| = \sqrt{\int_D |f(x)|^2 dx}. \quad (5.1)$$

▲

⁷En metrik möjliggör på samma sätt en topologi.

Observera att absolutbeloppet i integranden finns för att f mycket väl kan vara en funktion av typen $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$. Då blir det inte bra med $f(x)^2$.

Jämför uttrycken (4.2) och (5.1). Du ser att om man betraktar varje punkt på \mathbb{R} kan betraktas som en dimension, och att antalet dimensioner blivit oändligt blir uttrycken i någon mening lika.

5.3 Skalarprodukt och metrik

Med L_2 -normen som grund kan man vidare jämföra likheterna mellan norm (4.2) och skalarprodukt (4.3) i \mathbb{R}^n för att förstå hur en skalarprodukten i ett funktionsrum kan definieras.

Definition 5.3.1. Skalarprodukten i L_2 ges av

$$\langle f(x), g(x) \rangle = \int_D f(x)g(x)^* dx. \quad (5.2)$$

▲

Observera att man mycket väl skulle kunna definiera andra skalarprodukter i L_2 , men detta är den man brukar mena med skalarprodukten i L_2 .

På detta sätt är det också naturligt att definiera en metrik i L_2 . Jämför (4.2) och (4.1).

Definition 5.3.2. Metriken i L_2 ges av

$$d(f(x), g(x)) = \sqrt{\int_D |f(x) - g(x)|^2 dx}. \quad (5.3)$$

▲

6 Basvektorer i funktionsrum

Precis som i övriga vektorrum kan man i L_2 beskriva vektorer med hjälp av basvektorer. Liksom tidigare är en uppsättning basvektorer en bra bas om de parvis är ortogonala och normerade (har normen 1). De utgör då en ON-bas⁸.

6.1 Diracs deltafunktion – En basvektor i varje punkt

Vi skall utveckla resonemanget i slutet av 5.2 genom att göra följande definition.

Definition 6.1.1. Symoblen $\delta(x)$ beskriver en "funktion" med egenskaperna

$$\delta(x) = \begin{cases} 0 & \text{om } x \neq 0 \\ \infty & \text{om } x = 0 \end{cases}$$

och

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

▲

⁸Se texten Geometrisk vektorer, om vektorrummen \mathbb{R}^2 och \mathbb{R}^3 .

Skrivsättet ovan är lite handviftande, men du kan tänka dig att vi i någon mening använder $\infty \cdot 0 = 1$. Det går naturligtvis att göra en matematiskt korrekt beskrivning⁹ av denna symbol, som ibland benämns Diracs¹⁰ deltafunktion.

Fortsättningsvis benämner vi dem funktioner.

Vidare gäller att alla dessa funktioner

$$\{\delta(x - a) \mid \forall a \in \mathbb{R}\}$$

parvis är ortogonala och att de är normerade eftersom

$$\langle \delta(x - a), \delta(x - b) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - a) \delta(x - b) dx = \begin{cases} 0 & \text{om } a \neq b \\ 1 & \text{om } a = b \end{cases}.$$

Poängen är de kan användas som basvektor som ”beskriver en funktion i en punkt” så att

$$f(a) = \langle f(x), \delta(x - a) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x - a) dx.$$

Hämför detta med (4.4). Motsvarigheten till (4.5) blir

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(a) \delta(x - a) da.$$

Summan över antalet basvektorer har blivit en integral eftersom mängden basvektorer är överuppräknelig.

Definition 6.1.2. Basen av Diracs deltafunktioner benämner vi *koordinatbasen*. ▲

6.2 Trigonometriska basvektorer – Fourierserier

I detta avsnitt studerar vi funktioner där $D = [0, 2\pi]$, alternativt definierade på hela \mathbb{R} men periodiska med perioden 2π .

Det visar sig att basen som ges av funktionerna

$$\left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \right\} \cup \left\{ \frac{\cos(kx)}{\sqrt{\pi}} \mid \forall k \in \mathbb{N} \right\} \cup \left\{ \frac{\sin(kx)}{\sqrt{\pi}} \mid \forall k \in \mathbb{N} \right\}$$

utgör en ON-bas.

Det är en nyttig övning att beräkna dessas skalärprodukt med varandra för att se att den blir noll i alla fall utom då man tar skalärprodukten mellan ett av elementen och samma element. Faktorn $1/\sqrt{\pi}$ finns för att normen av alla element skall bli ett.

Eftersom vi har tre klasser funktioner som bas får vi att en godtycklig funktion går att skriva

$$f(x) = a_0 \frac{1}{\sqrt{2\pi}} + \sum_{k=1}^{\infty} a_k \frac{\cos(kx)}{\sqrt{\pi}} + b_k \frac{\sin(kx)}{\sqrt{\pi}} \quad (6.1)$$

⁹Det är i själva verket ett exempel på en *distribution* som är en slags generaliserade funktioner som går att derivata i en vidare mening än vanliga funktioner.

¹⁰Efter Paul A.M. Dirac

där

$$a_0 = \int_0^{2\pi} f(x) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} dx \quad (6.2)$$

$$a_k = \int_0^{2\pi} f(x) \frac{\cos(kx)}{\sqrt{\pi}} dx \quad (6.3)$$

$$b_k = \int_0^{2\pi} f(x) \frac{\sin(kx)}{\sqrt{\pi}} dx. \quad (6.4)$$

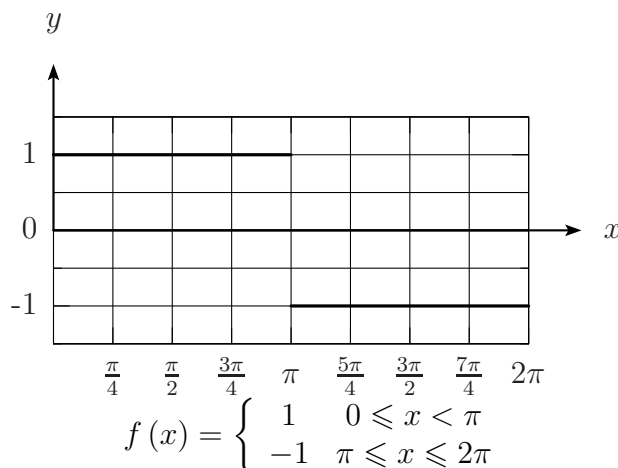
Eftersom mängden basvektorer är uppräknelig får vi en summa ovan.

Observera att $a_0/\sqrt{2\pi}$ representerar funktionens medelvärde på D . Denna term behövs, eftersom alla andra termer "svänger med var sin amplitud".

Uttrycket (6.1) brukar benämnas *Fourierserien* av $f(x)$ och exemplifieras i [här](#)¹¹.

6.2.1 Fyrkantvåg

Låt oss nu ta ett konkret exempel, vi definierar en funktion enligt grafen och uttrycket nedan.



Nu skall vi alltså betrakta f som en vektor i ett funktionsrum, där vi använder basfunktionerna från förra avsnittet för att spänna upp rummet. Den centrala frågan är vad f får för komponenter i denna bas, eller med andra ord hur f "pekar" i de olika riktningarna.

Vi börjar med att undersöka hur mycket f "pekar" i riktningen $\sin(kx)$, eller hur mycket $\sin(kx)$ det finns i f . Detta ges av skalärprodukten mellan f och $\sin(kx)$.

$$\begin{aligned} a_k &= \langle f(x), \sin(kx) \rangle = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} 1 \cdot \sin(kx) dx + \frac{1}{\pi} \int_{\pi}^{2\pi} -1 \cdot \sin(kx) dx = \\ &= \frac{1}{\pi} \left[\frac{\cos(kx)}{k} \right]_0^{\pi} - \frac{1}{\pi} \left[\frac{\cos(kx)}{k} \right]_{\pi}^{2\pi} = \\ &= \frac{1}{k\pi} \left((\cos(k\pi) - \cos(k \cdot 0)) - (\cos(2k\pi) - \cos(k\pi)) \right) = \\ &= \frac{4}{k\pi} (1 - \cos(k\pi)) = \begin{cases} 0 & \text{jämna } k \\ \frac{4}{k\pi} & \text{udda } k \end{cases} \end{aligned}$$

¹¹<http://www.falstad.com/fourier/>

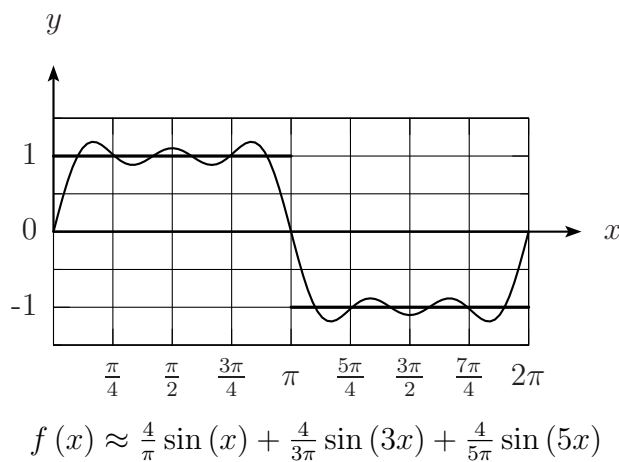
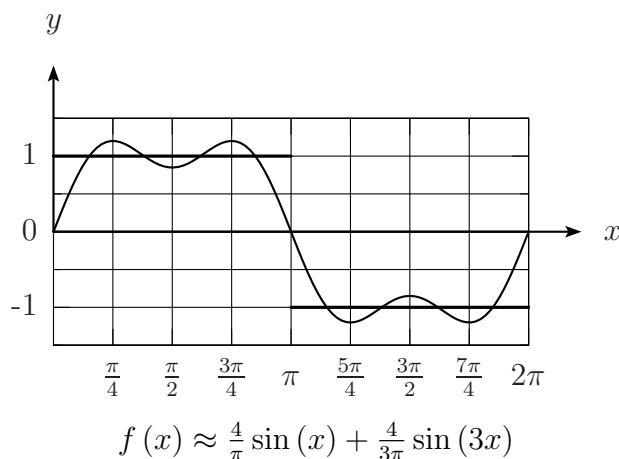
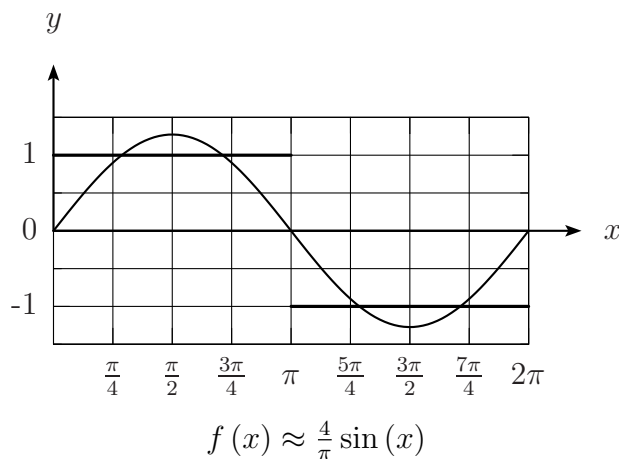
På samma sätt kan man härleda

$$b_k = \langle f(x), \cos(kx) \rangle = 0 \quad \text{för alla } k.$$

Detta ger

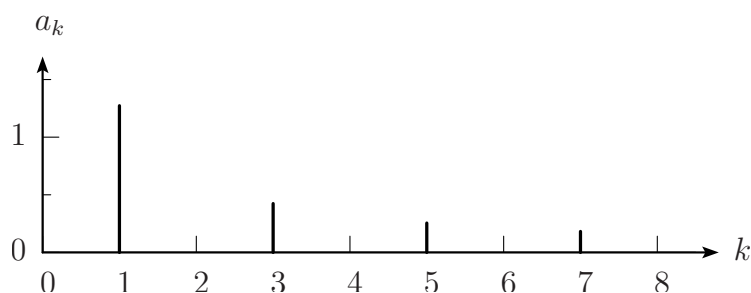
$$f(x) = \sum_{\text{udda } k} \frac{4}{k\pi} \sin(kx).$$

Följande bildserie visar hur vi närmar oss $f(x)$ då vi tar med fler och fler komponenter.



Som synes närmar vi oss $f(x)$ mer och mer för varje komponent vi lägger till. Med den metrik som är definierad på mängden kan vi räkna ut precis hur nära $f(x)$ vi kommer, men det är bara en teknisk övning, så det hoppar vi över.

Nu när vi känner komponenterna för $f(x)$ i rummet kan vi återge f på ett annat sätt än att rita f som funktion av x , vi kan rita a_k för olika k . Detta återges nedan.



Spektrum för $f(x)$.

Denna bild innehåller i princip samma information som grafen för $f(x)$. Just detta fall underlättas av att alla b_k är noll, så vi behöver inte rita dem. Ibland kallas denna information för funktionens **spektrum**.

6.2.2 Trigonometriska basfunktioner på komplex form

Ibland är det smidigt att använda ett komplext tal c_k istället de båda talen a_k och b_k i Fourierserien. Eftersom

$$e^{ix} = \cos(x) + i \sin(x)$$

kan man skriva

$$\begin{aligned}\cos(x) &= \frac{e^{ix} + e^{-ix}}{2} \\ \sin(x) &= \frac{e^{ix} - e^{-ix}}{2i}.\end{aligned}$$

I denna mening säger vi att e^{ix} är en trigonometrisk funktion.

Fourierserien går då att skriva

$$f(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} c_k e^{ikx} \quad (6.5)$$

där

$$c_k = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx}. \quad (6.6)$$

7 Andra basfunktioner

I olika fysikaliska sammanhang dyker det upp klasser av funktioner som kan användas som baser som är praktiska i dessa situationer.

Ett exempel är **Legendrepolynomen** som visas på omslaget till denna text. De är definierade på intervallet $-1 \leq x \leq 1$.

Fler exempel är de **klotytfunktioner** och **Besselfunktioner** av olika slag.

Denna text kan inte visa på alla egenskaper för dessa, men de används på samma sätt som de trigonometriska funktionerna i en Fourierserie, men de passar som sagt bra i olika sammanhang.

På lektionstid visas dessa funktioner med hjälp av olika programvaror.

8 Beskrivning av vågor

8.1 En dimension

En viktig tillämpning av Fourierserier är fall där en sträng eller stav med ändlig längd L vibrerar. Denna situation är matematiskt ekvivalent med en tryckvåg i ett smalt (jämfört med våglängden) rör. En våg som utbreder sig på strängen måste beskrivas med en funktion av två variabler, $f(x, t)$ där $0 \leq x \leq L$.

Om det är frågan om en sträng som sitter fast i sina ändpunkter fås villkoren $f(0, t) = 0$ och $f(L, t) = 0$ för alla t . Grundtonen svänger då enligt

$$f_1(x, t) = a_1 \sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right) \cos\left(\frac{\pi}{L}t\right)$$

där fasen för tidsberoendet är vald så att $f(x, 0)$ får maximal amplitud.

Denna del av texten är ett ihopplock från andra texter. Det kan vara så att vågens utbredningshastighet måste vara 1 för att uttrycket skall stämma.

Nästa ton har dubbelt så stor frekvens och hälften så stor våglängd. Ton nr r ges av

$$f_r(x, t) = a_r \sin\left(\frac{2\pi r}{L}x\right) \cos\left(\frac{\pi r}{L}t\right).$$

Poängen är att rumsdelen (den faktor som beror av x) av dessa uttryck utgör en bas för funktioner $g(x)$ som uppfyller $g(0) = g(L) = 0$.

Antag att strängen vid $t = 0$ formas på något sätt som beskrivs av en funktion $g(x)$. När strängen "släpps" kommer strängens form att förändras i enlighet med vågekvationen (den differentialekvation som beskriver vågor). Teorin för det är spännande i sig, men faller utanför ramen för denna text.

Om vi däremot beskriver $g(x)$ med en Fourierserie

$$g(x) = \sum_{r=1}^{\infty} a_r \sin\left(\frac{2\pi \cdot r}{L}x\right)$$

kommer varje komponent att svänga med "sin vinkelfrekvens". Ett uttryck för $f(x, t)$ blir då

$$f(x, t) = \sum_{r=1}^{\infty} a_r \sin\left(\frac{2\pi r}{L}x\right) \cos\left(\frac{\pi r}{L}t\right).$$

Generellt behöver inte strängen sitta fast i sina ändpunkter, så ett allmänt uttryck blir

$$f(x, t) = \frac{a_0}{2} + \sum_{r=1}^{\infty} \left(a_r \sin\left(\frac{2\pi r}{L}x\right) + b_r \cos\left(\frac{2\pi r}{L}x\right) \right) \cos\left(\frac{\pi r}{L}t\right). \quad (8.1)$$

Observera att dummy-indexet i summan är r istället för k för att inte blanda ihop det med det fysikaliska begreppet **vågtal** som också brukar anges med k .

Rumsdelen av $f(x, t)$ bestäms av de statiska (tidsoberoende) komponenterna a_r och b_r , medan tidsdelen ges av att varje sådan komponent svänger med sin vinkelfrekvens $\frac{\pi r}{L}$.

Ofta väljer man ett koordinatsystem så att $a_0 = 0$. Om strängen sitter fast i $x = 0$ och $x = L$ blir alla $b_r = 0$. Det kan kanske kännas konstigt att detta inte måste vara så, men tänk i så fall först på en pinne som bara sitter fast i en av sina ändpunkter. Exempelvis kan man knäppa till en linjal sticka ut från en bordsskiva så att den vibrerar. Finns ingen gravitation skulle man kunna knäppa till en stång som svävar fritt.

Funktionen $f(x, t)$ kan som sagt även beskriva en lufttrycket i ett rör, och lufttrycket kan ju variera med tiden i rörets ändpunkter.

Denna text kan inte göra rättvisa åt att visualisera vågor beskrivna med (8.1). Detta är dock väldigt bar gjort av [Falstad](#)¹².

På lektionstid visas dessa simuleringar och olika viktiga samband mellan den fysikaliska situationen och den matematiska beskrivningen belyses. Detta gäller även fallen nedan.

8.2 Två dimensioner

I två dimensioner blir motsvarande situation ett trumskinn som spänns upp på en ram. Precis som i det endimensionella fallet behöver egentligen inte skinnet spännas upp på något, men det tillför inget till förståelsen att behandla det allmänna fallet. Skillnaden blir bara cosinus-termer i rumsdelen i uttrycken nedan.

Beroende på ramens form fås olika fall.

8.2.1 Kartesiska koordinater

Om ramen är rektangulär med måtten A och B i x- respektive y-led fås

$$f(x, y, t) = \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \left(a_{mn} \sin\left(\frac{2\pi m}{A}x\right) \sin\left(\frac{2\pi n}{B}y\right) \right) \cos(\omega_{mn}t)$$

där

$$\omega_{mn} = v \sqrt{\left(\frac{2\pi m}{A}\right)^2 + \left(\frac{2\pi n}{B}\right)^2}.$$

Falstad illustrerar även detta fall mycket väl.

¹²www.falstad.com

8.2.2 Polära koordinater

På en cirkel används lämpligen polära koordinater (r, θ) . Cirkeln beskrivs på $[0, R] \times [0, 2\pi]$.

$$f(r, \theta, t) = \sum_{m,n}^{\infty} J_0\left(\frac{\alpha_{0n}}{R}r\right) (a_{mn} \cos(m\theta) + b_{mn} \sin(m\theta)) \cos(\omega_{mn}t)$$

där J_0 är **Besselfunktion** nr 0 och α_{0n} är nollställe n för J_0 .

Besselfunktionerna J_n är också en uppsättning funktioner som parvis är ortogonala och därmed kan användas som en praktisk bas.

Besselfunktionerna finns i flera varianter. Denna variant används också i tre dimensioner i cylindriska koordinater (r, θ, z) och kallas därför ibland *cylindriska Besselfunktioner*.

Se Falstad för illustrationer.

8.3 Tre dimensioner

I tre dimensioner är det svårt att tänka sig en sträng som svänger, men man kan tänka sig en ljudvåg som fortplantar sig i ett slutet rum.

8.3.1 Kartesiska koordinater

Om rummet har formen av ett rätblock med sidorna A , B och C fås en enkel utvidgning av fallet i två dimensioner. Nu fås

$$f(x, y, z, t) = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \left(a_{mnl} \sin\left(\frac{2\pi m}{A}x\right) \sin\left(\frac{2\pi n}{B}y\right) \sin\left(\frac{2\pi l}{C}z\right) \right) \cos(\omega_{mnl}t)$$

där

$$\omega_{mnl} = v \sqrt{\left(\frac{2\pi m}{A}\right)^2 + \left(\frac{2\pi n}{B}\right)^2 + \left(\frac{2\pi l}{C}\right)^2}.$$

8.3.2 Cylindriska koordinater

Om det är frågan om en ljudvåg i ett cylindriskt rör med längden L .

$$f(r, \theta, t) = \sum_{m,n,q}^{\infty} J_0\left(\frac{\alpha_{0n}}{R}r\right) (a_{mn} \cos(m\theta) + b_{mn} \sin(m\theta)) \sin\left(\frac{2\pi q}{L}z\right) \cos(\omega_{mnq}t).$$

8.3.3 Sfäriska koordinater

Sfäriska koordinater (r, θ, ϕ) ger **klotytfunktioner** $Y_{lm}(\theta, \phi)$ för vinkelberoendet och **sfäriska Besselfunktioner** $j_0(r)$ för den radiella delen.

$$f(r, \theta, \phi, t) = \sum_{nlm} a_{nlm} j_0\left(\frac{\alpha_{0n}}{R}r\right) Y_{lm}(\theta, \phi) \cos(\omega_{nlm}t).$$

9 Icke-Periodiska funktioner

Nu återgår vi till att betrakta funktioner definierade på hela \mathbb{R} .

För att beskriva en icke-periodisk funktion $f(x)$ med de trigonometriska funktionerna måste man låta intervallet som studeras gå mot oändligheten. Då övergår summan i (6.1) till en integral och vi får

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{f}(k) e^{ikx} dk \quad (9.1)$$

$$\hat{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx \quad (9.2)$$

Basfunktionerna är

$$\left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} \quad \forall \quad k \in \mathbb{R} \right\} \quad (9.3)$$

vilka är överuppräkneligt många, därför kan komponenterna $\hat{f}(k)$ betraktas som en funktion $\hat{f} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$.

Funktionen $\hat{f}(k)$ brukar benämnas *Fouriertransformen* av $f(x)$.

För att underlätta visualiseringen måste vi komma ihåg att det råder likheter mellan rum-vågtal och tid-frekvens. Vid ett fixt ögoblick (i tiden) beskrivs en våg av uttryck på formen $\sin(kx)$ och vid en fix punkt (i rummet) beskrivs en våg av uttryck på formen $\sin(\omega t)$.

På samma sätt liknar begreppen våglängd (λ) och periodtid (T) varandra matematiskt och fyller samma funktion i rum respektive tid. Vi har också sambanden

$$\begin{aligned} k\lambda &= 2\pi \\ \omega T &= 2\pi. \end{aligned}$$

Begreppet frekvens associeras oftast till svängningar i tiden, men vågtalet beskriver alltså en frekvens i rummet på samma sätt. Vi gör följande definition.

Definition 9.0.1. Basen i (9.3) benämns *frekvensbasen*. ▲

En fysiker skulle invända att det i själva verket är frågan om *vinkel*-frekvensbasen. Det är helt riktigt, men vi tillåter oss att förkorta språkbruket här. Vi gör ingen skillnad i språkbruk mellan frekvens och vinkelfrekvens. Den matematiska skillnaden blir att en faktor $\sqrt{2\pi}$ dyker upp på olika ställen i de båda fallen.

Transformteori brukar ibland betraktas som en egen del av matematiken, ofta ges det som en egen kurs på ca C-nivå. På vissa lärosäten ges denna teori som en del av en kurs i signalanalys etc. Ett huvudsyfte med detta avsnitt är att visa att det i själva verket bara är fråga om ett basbyte. I specialfallet Fouriertransformen mellan basen koordinatbasen och frekvensbasen. Andra transformer använder andra baser.

Ännu så länge i denna texts utveckling har vi inte möjlighet att reda ut alla egenskaper för detta basbyte. Ett mycket viktigt specialfall skall vi i alla fall avhandla.

Tar man hänsyn till både tid och rum beskrivs en våg av uttryck på formen $\sin(kx - \omega t)$, men här nöjer vi oss med att studera en våg vid ett fixt ögonblick eftersom det är lättare att visualisera något som finns i rummet än något som finns i tiden. Vågen kan vara vågfunktionen för en partikel i kvantmekaniken, en akustisk våg, en ljusvåg etc.

Vågen har ett väl definierat vågtal k_0 och beskrivs alltså av

$$\hat{f}(k) = \delta(k - k_0).$$

Om vi byter bas till koordinatbasen med (9.1) får vi

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(k - k_0) e^{ikx} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_0 x}$$

vilket är precis en våg med vågtal k_0 . Poängen är att vågen är oändligt utspridd i rummet.

Omvänt, om vi har en partikel med en väl definierad koordinat x_0 , så att den beskrivs av en funktion

$$f(x) = \delta(x - x_0)$$

blir dess beskrivning i frekvensrummet

$$\hat{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0) e^{-ikx} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx_0}.$$

Denna funktion finns alltså för alla k , vi får en oändlig utspridning i frekvensrummet.

Detta gäller också i tid och rum. Exempelvis finns det vardagliga fenomen där en strömbrytare som slås på eller av kan störa en radiosignal. Det beror på att den väl definierade förändringen i tid (själva tidpunkten för förändringen av strömbrytarens läge) ger en stor spridning av samma signal då den beskrivs i frekvensbasen. Därför kan du ibland höra ett knäpp i en radiomottagare då du slår på ljuset i ett rum.

Detta fenomen kan också orsaka mycket oönskade störningar. Det är alltså långt ifrån ett matematiskt fenomen, trots att det i matematiken bara är frågan om att beskriva samma vektor i två olika baser. Vilken bas som "är den riktiga" är en intressant fråga. Vi är vana med rum och tid, men vågtal och frekvens tycks vara likvärdigt.

10 Operatorer, egenvärden och förväntansvärden

10.1 Operatorer och egenvärden

En avbildning mellan två ändligtdimensionella vektorrum kan beskrivas av en matris. Detta avhandlades i del II av denna serie. Nu skall vi se på motsvarande fall för funktionsrum. Vi måste hantera två problem, dels kan de vara av oändlig dimension, dels kan en överuppräknelig mängd basvektorer behöva användas.

Definition 10.1.1. En *operator* är en avbildning mellan två funktionsrum. ▲

Exempel 10.1.2. Exempel på operatorer är differentialoperatorn $D(f) \equiv \frac{d}{dx}f$ som ger en ny funktion av en funktion, exempelvis $D(x^2) = 2x$.

Ofta sätter man ihop flera termer och benämner även summan av dessa differentialoperator. Operatorn

$$L(f) = (D^2 - D + 6)f \equiv f'' - f' + 6f$$

är exempel på en sådan.

Integraloperatorn $I(f) \equiv \int f dx$ är ett annat exempel, $I(x^2) = \frac{x^3}{3}$. ▲

Låt oss nu betrakta differentialekvationen

$$D^2(y) = -\omega^2 y.$$

Du känner säkert igen den från det fall där en kropp svänger upp och ned hängandes i en fjäder. Kraften från fjädern ges av Hooke's lag, $F = -ky$, och förorsakar en acceleration enligt Newtons andra lag

$$ma \equiv mD^2(y) = -ky$$

vilket ger

$$D^2(y) = -\omega^2 y$$

med $\omega^2 = \frac{k}{m}$.

Att lösa differentialekvationen är inga problem, $y(t) = A \sin(\omega t) + B \cos(\omega t)$ där A och B bestäms från randvillkor.

Nu skall vi istället betrakta den som ett egenvärdesproblem. Jämför med det ändligtdimensionella $A\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}$ där A är en matris, \mathbf{v} en vektor och λ matrisens egenvärde. Vi ser att $-\omega^2$ är ett egenvärde till operatorn D^2 och att funktionerna $A \sin(\omega t)$ respektive $B \cos(\omega t)$ är egenvektorer hörande till detta egenvärde. I funktionsrum används ofta ordet egenfunktioner istället för egenvektorer.

Vi skall inte fördjupa oss i teorin för detta, men följande är viktigt.

För en viss klass differentialoperatorer (som är viktiga i fysiken) fås reella egenvärden och parvis ortogonala egenfunktioner. Genom att normera dem kan man använda dem som en ON-bas.

I avsnitt 8 dök Besselfunktioner och klotytfunktioner upp för beskrivning av vågor i olika situationer. Det är inte bara så att de är praktiska för att beskriva vågor i de situationer de användes.

Det är så att de ”skapas” då man löser vågekvationen, dvs de är egenfunktioner till den operator som vågekvationen representerar. Om man har olika geometriska förutsättningar fås olika utseenden av vågekvationen i de olika fallen. Därför svänger ett trumskinn som trigonometriska funktioner om det är rektangulärt, medan det svänger som Besselfunktioner (radiellt) om skinnet är cirkulärt.

Detta behandlas närmare som en del av vågrärelseläran i kursen Fysikalisk Specialisering.

10.2 Energinivåer i kvantmekaniken

Schrödingerekvationen är en differentialekvation som kan betraktas som ett egenvärdesproblem. Operatoren

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

beskriver till exempel en elektron som befinner sig i någon potential $V(x)$. Denna operator benämns *Hamiltonianen*. Då H verkar på funktionen $\Psi(x)$ fås egenvärdesproblemet

$$H \Psi(x) = E \Psi(x).$$

Egenfunktionerna till H är parvis ortogonala och om elektronen befinner sig i ett tillstånd som beskrivs av en egenvektor är dess energi motsvarande egenvärde.

Ett godtyckligt tillstånd kan beskrivas som en linjärkombination av egenfunktionerna.

10.3 Motivering av Schrödingerekvationen

Kvantmekaniken växte fram ur experiment som gjordes i slutet på 1800-talet, där man kunde påvisa att partiklar både hade partikel- och vågegenskaper. Det tvistades länge om huruvida ljus var partiklar eller vågor, men även till exempel elektroner visade båda egenskaperna. Läs mer om detta i ett läromedel i fysik.

Det enklaste fallet beskriver en partikel som är instängd i en låda. Både partikeln och lådan är i en dimension. Matematiskt kan då partikeln beskrivas som en funktion som brukar betecknas med $\psi(x)$. Denna funktion skall tolkas så att sannolikheten att hitta partikeln inom intervallet $[a, b]$ är

$$\int_a^b |\psi(x)|^2 dx.$$

Funktionen $\psi(x)$ uppfyller differentialekvationen

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi = E \psi$$

där m är partikelns massa, E är partikelns totala energi och $\hbar \equiv \frac{h}{2\pi}$ (utläses h-streck) där h är Plancks konstant. Denna differentialekvation brukar benämnas Schrödingerekvationen, efter fysikern Erwin Schrödinger (1887 - 1961) som bidrog mycket till kvantmekanikens framväxt. Han erhöll Nobelpriset 1933.

Schöringerekvationen kan motiveras på följande sätt. Man hade funnit att partikeln var en våg (eller snarare kunde beskrivas som en våg, vad partikeln faktiskt är vet ingen). Lösningarna borde alltså vara ungefär på formen $\psi \sim \sin(kx)$. Man hade gjort experiment som stödjer att sambandet mellan rörelsemängd p och De Broglie-våglängden λ är

$$\lambda = \frac{h}{p}.$$

Sambandet mellan våglängd och vågtal k är

$$k = \frac{2\pi}{\lambda},$$

vilket ger

$$p = \frac{h}{2\pi}k = \hbar k.$$

Enligt vanlig klassisk fysik gäller sambandet

$$E_k = \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m}.$$

mellan partikelns rörelseenergi E_k och rörelsemängd (via $p = mv$). Med sambandet mellan p och k fås

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

Hur plockar man ut k^2 ur $\sin(kx)$? Jo, genom att derivera två gånger och multiplicerar med -1 ! Det som egentligen uttrycks i ekvation (5) är alltså att

$$E_k = E.$$

För en fri partikel är alltså all energi rörelseenergi. Om det finns potentiell energi $V(x)$ får man en term till i Schrödinger ekvationen:

$$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi}_{\text{Kinetisk energi}} + \underbrace{V(x) \psi}_{\text{Potentiell energi}} = \underbrace{E \psi}_{\text{Total energi}}.$$

10.4 Partikeln i lådan

Tillbaka till partikeln i lådan nu. Detta fall karakteriseras av att partikeln är instängd i en (endimensionell) låda med längden L . Partikeln kan omöjligen ta sig ut ur lådan, vilket betyder att den potentiella energin är

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x \in [0, L] \\ \infty & \text{annars.} \end{cases}$$

Vi behöver dock inte bekymra oss om detta. Partikeln kommer helt enkelt inte att kunna existera utanför lådan, och all energi partikeln har kommer att vara kinetisk energi. Kravet på kontinuitet gör att ψ måste vara noll även på kanten av lådan, det räcker alltså att lösa ekvation (5) med kravet att ψ är noll utanför och på kanten av lådan.

Vi skriver om (5) som

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi = -\frac{2Em}{\hbar^2} \psi$$

vilken har flera lösningar som indexeras med n ,

$$\psi_n(x) = A \sin(k_n x)$$

där

$$k_n^2 = \frac{2Em}{\hbar^2}.$$

Lösningarna kan liknas med att partikeln betraktas som en sträng som sitter fast i lådans ändpunkter. De olika lösningarna kan då liknas med strängens grundton, första överton, andra överton och så vidare. De olika tonerna svarar mot olika energier. Naturligtvis uppfyller även uttryck som innehåller $\cos(k_n x)$ differentialekvationen, men de uppfyller inte att lösningen skall vara noll på lådans kanter, i alla fall inte då $x = 0$, så vi förkastar dessa av fysikaliska skäl. Kravet att $\psi_n(L) = 0$ ger oss de möjliga värden som k_n kan anta enligt

$$k_n = \frac{\pi n}{L}.$$

Används detta i (6) fås likheten

$$k_n^2 = \left(\frac{\pi n}{L}\right)^2 = \frac{2E_n m}{\hbar^2},$$

vilket ger oss de tillåtna värden som energin kan anta:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2L^2 m}.$$

Konstanten A måste väljas så att

$$\int_0^L |\psi(x)|^2 dx = 1$$

eftersom sannolikheten att hitta partikeln i lådan måste vara 1. Detta ger oss

$$\int_0^L A^2 \sin^2(k_n x) dx = \frac{A^2}{2} \int_0^L 1 - \cos(2k_n x) dx = \frac{A^2 L}{2} = 1$$

och

$$A = \sqrt{\frac{2}{L}}.$$

De funktioner som representerar en partikel inneslängd i en låda ges alltså av

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right)$$

för olika n . Jämför detta med basen av harmoniska funktioner som togs upp tidigare. Även dessa kommer att vara parvis ortogonala:

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \begin{cases} 0 & \text{om } n \neq m \\ 1 & \text{om } n = m. \end{cases}$$

10.5 Förväntasvärden

I tidigare texter har vi studerat uttryck på formen $\mathbf{v}^T A \mathbf{v}$ där A är en matris och $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$. Detta tolkade vi som "hur mycket som blir kvar av \mathbf{v} då A verkar på den". Speciellt gäller att om \mathbf{v} är en (normerad) egenvektor till A med egenvärde λ blir $\mathbf{v}^T A \mathbf{v} = \lambda$. För en allmän vektor blir det något annat värde, vilket i någon mening kan betraktas som "det värde man kan förvänta sig av A ", vilket vi också benämnde *förväntansvärdet* av A .

Denna tolkning är inte unik för ändligtdimensionella rum.

Definition 10.5.1. *Förväntansvärdet* av en operator A då den verkar på en (normerad) funktion $f(x)$ är $\langle f(x), Af(x) \rangle$. ▲

10.6 Förväntasvärden i kvantmekaniken

Antag att en elektron befinner sig i ett tillstånd som beskrivs av två egenfunktioner till Hamiltonianen,

$$\Psi(x) = k_1 \hat{\Psi}_1(x) + k_2 \hat{\Psi}_2(x)$$

Detta tillstånd är normerat, så $k_1^2 + k_2^2 = 1$.

Om vi vill mäta vilken energi detta tillstånd har förväntar vi oss att det blir

$$\langle \Psi(x), H \Psi(x) \rangle$$

vilket beräknas till

$$\begin{aligned} \left\langle k_1 \hat{\Psi}_1(x) + k_2 \hat{\Psi}_2(x), H \left(k_1 \hat{\Psi}_1(x) + k_2 \hat{\Psi}_2(x) \right) \right\rangle &= \\ k_1^2 \left\langle \hat{\Psi}_1, H \hat{\Psi}_1 \right\rangle + k_1 k_2 \left\langle \hat{\Psi}_1, H \hat{\Psi}_2 \right\rangle + \\ k_1 k_2 \left\langle \hat{\Psi}_2, H \hat{\Psi}_1 \right\rangle + k_2^2 \left\langle \hat{\Psi}_2, H \hat{\Psi}_2 \right\rangle &= k_1^2 E_1 + k_2^2 E_2 \end{aligned}$$

vilket är precis det viktade medelvärdet av E_1 och E_2 .

11 Slutord

Jag hoppas nu du fått en liten insikt i några begrepp som bygger upp denna del av matematiken, från enkla exempel på metrik till skalärprodukt i oändligtdimensionella vektorrum.

I många tillämpningar av detta studeras dessa delar var för sig, vilket kan röra till det. Det blir lätt så att man inte ser skogen på grund av alla träden. Det finns väldigt många tillämpningar av denna teori, men viktigast¹³ är kanske signalbehandling och kvantmekaniken.

Förhoppningen är att denna text skall hjälpa dig att fortare förstå att många tekniker för problemlösning i själva verket handlar om att byta bas i ett vektorrum.

Det finns dock djupare insikter att sträva efter. Vi upplever koordinatbasen och tiden som naturliga, men i många fall verkar det som att det är i frekvensbasen som saker "händer". Hela kvantmekaniken bygger på att beskriva tillstånd i olika baser. Partiklar finns inte på en plats utan representeras av en vektor i ett funktionsrum. Växelverkarn med omgivningen beskrivs av en operator som förändrar denna vektor.

Att förstå denna gren av matematiken är alltså mycket viktig för att förstå stora delar av "verkligheten", vad nu än som menas med det.

¹³Om man ser till innehållet i många civilingenjörsutbildningar.