

Sammanfattning av SI1155 Teoretisk fysik

Yashar Honarmandi
yasharh@kth.se

21 mars 2019

Sammanfattning

Innehåll

1	Teoretisk fysik	1
2	Grunderna i kvantmekanik	1
3	Diracnotation	6

1 Teoretisk fysik

Teorir En teori i fysik är ett matematiskt ramverk av naturlagar som ger samband mellan krafter och rörelse. Dessa baseras på resultat från experiment.

Modeller En modell är en beskrivning av ett system som innehåller vissa antaganden om vilka frihetsgrader systemet har och vilka krafter som verkar på dets komponenter.

2 Grunderna i kvantmekanik

Newtons mekanik I newtonsk mekanik beskrivs en partikel i ett inertialsystem av

$$\mathbf{F} = m\mathbf{a},$$

där \mathbf{F} är summan av alla krafter på partikeln. Med givna initialvillkor kan partikelns bana beskrivas exakt.

Om partikeln endast påverkas av konservativa krafter, är dens energi konstant. För en sådan partikel är dens energi alltid större än potentialens minimum.

Analytisk mekanik Alternativt till newtonsk mekanik kan man formulera mekaniken med Lagranges och Hamiltons formaliser. Dessa utgår från att beskriva partikelns bana med generaliserade koordinater q_i och hastigheter \dot{q}_i (totala tidsderivator av koordinaterna), och hitta en bana som minimerar verkansintegralen

$$S = \int dt L$$

där $L = T - V$ och T är kinetiska energin. Dessa leder till ekvationer på formen

$$\partial_{q_i} L - \frac{d}{dt} \partial_{\dot{q}_i} L = 0.$$

Detta är Lagranges formalism.

Alternativt kan man införa generaliserade rörelsemängder $p_i = \partial_{\dot{q}_i} L$ och Hamiltonfunktionen $H = \dot{q}_i p_i - L = T + V$. Denna transformationen ger dig

$$\dot{q}_i = \partial_{p_i} H, \quad \dot{p}_i = -\partial_{q_i} H.$$

Detta är Hamiltons formalism.

Om systemet är symmetriskt i q_i -riktningen, beror H ej av denna koordinaten, vilket ger att $\dot{p}_i = 0$ och p_i är konstant. En sådan koordinat kallas för en cyklisk koordinat. Detta är ett specialfall av Nöethers sats, som säger att till varje symmetri hör en konserverad storhet.

En fråga är om man kan göra ett variabelbyte så att alla variabler är cykliska. För att diskutera detta, måste vi prata om kanoniska transformationer. En kanonisk transformation är ett variabelbyte som bevarar formen på Hamiltons ekvationer. Efter ett sådant variabelbyte fås en ny Hamiltonfunktion

$$H(Q, P, t) = H(q, p, t) + \partial_t S(q, P, t).$$

Vi vill nu gärna veta om denna nya storheten S är verkan. Dens totala tidsderivata ges av

$$\dot{S} = \partial_{q_i} S \dot{q}_i + \partial_{P_i} S \dot{P}_i + \partial_t S.$$

Om detta är en transformation så att alla koordinater är cykliska, fås

$$\dot{S} = \partial_{q_i} S \dot{q}_i + \partial_t S.$$

Vi noterar enligt ovan att $\partial_t S = -H(q, p, t)$. Om nu S skall vara verkan, måste denna totala tidsderivatan vara lika med Lagrangefunktionen. Definitionen av Hamiltonfunktionen ger då

$$\partial_{q_i} S = p_i, \quad \partial_{P_i} S = Q_i.$$

Vi får då Hamilton-Jacobis ekvation

$$H(q, \partial_p S, t) + \partial_t S = 0.$$

Behov för ny beskrivning I början av 1900-talet upptäcktes det via olika experiment att partiklar på små längdskalor visade beteende som ej samsvarade med klassiska teorier. Detta skapade ett behov för en ny teori.

Våg-partikel-dualitet Det första steget togs av Max Planck år 1900. I ett desperat försök på att beskriva svartkroppsstrålning antog han att elektromagnetisk strålning upptas och avges i diskreta kvanta av energin $\hbar\omega$, där \hbar är en helt ny konstant. Försöket lyckades.

Senare förstod Einstein att ljus bestod av diskreta enheter med energi $E = pc$, där p är enhetens rörelsemängd.

de Broglie kombinerade dessa två resultaten till sin hypotes: Att alla partiklar har vågegenskaper, och kan beskrivas av en våglängd som ges av

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

Vi har använt vågtalet $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ och introducerat Plancks konstant $h = 2\pi\hbar$.

de Broglie antog även att alla partiklar kan beskrivas av en vågfunktion som ges av $\Psi = Ae^{i(kx - \omega t)}$ för en fri partikel. Vid att sätta in resultaten ovan kan denna vågfunktionen skrivas som

$$\Psi = Ae^{i(\frac{p}{\hbar}x - \frac{E}{\hbar}t)}.$$

Motivation av Schrödingerekvationen Givet resultaten ovan, noterar vi

$$i\hbar\partial_t\Psi = E\Psi, -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\Psi = \frac{p^2}{2m}\Psi.$$

Vi kommer ihåg den klassiska Hamiltonfunktionen $H = T + V$. För en fri partikel ges denna av $H = \frac{p^2}{2m} + V$. Vi ser nu att de två derivationsoperatorerna ovan ersätter totala respektive kinetiska energin, och Hamiltonsk mekanik inspirerar oss nu att skriva

$$i\hbar\partial_t\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\Psi + V\Psi.$$

Efter detta kommer Schrödingerekvationen att behandlas som en naturlag. I mer allmänna fall kommer vi även skriva detta som

$$i\hbar\partial_t\Psi = H\Psi,$$

där H är en operator som representerar systemets Hamiltonfunktion.

Sannolikhet Den fysikaliska tolkningen av vågfunktionen är att $|\Psi|^2 dV = \Psi^*\Psi dV$ är sannolikheten för att hitta partikeln i en mycket liten volym. Vi kräver då

$$\int d^3x |\Psi|^2 = 1.$$

Med denna tolkningen refereras Ψ till som sannolikhetsamplituden.

Operatorer Vi har redan sett att det finns en koppling mellan operatorer på vågfunktionen och fysikaliska storheter. Baserad på detta definierar vi väntevärdet av en observabel q som

$$\langle q \rangle = \int d^3x \Psi^* \hat{q} \Psi.$$

Här är \hat{q} operatören som motsvarar q . Denna distinktionen kommer inte göras mycket vidare i sammanfattningen.

Vi kan tolka denna integralen som en inreprodukt, och med den tolkningen kräver vi att alla operatorer som representerar fysikaliska storheter är självadjungerade eller Hermiteska.

Osäkerhetsprincipen Bandbräddsteori ger oss för x och p att

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{1}{2}\hbar.$$

Här är Δx standardavvikelsen för x .

Kontinuitetsekvationen för sannolikhet Man kan visa att

$$\partial_t |\Psi|^2 + \vec{\nabla} \cdot \mathbf{j} = 0,$$

där \mathbf{j} är sannolikhetsströmmen

$$\mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m}(\Psi^* \vec{\nabla} \Psi - \Psi \vec{\nabla} \Psi^*).$$

Ehrenfests sats Man kan visa att

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{1}{m} \langle p \rangle, \quad \frac{d\langle p \rangle}{dt} = -\langle \vec{\nabla} V \rangle.$$

Vägintegraler Även kvantmekaniken kan formuleras med hjälp av verkansintegralen. I denna formalismen ger sannolikheten för att en partikel väljer en bana mellan två punkter ges av

$$\sum e^{i\frac{S}{\hbar}},$$

där summationen görs över alla möjliga banor mellan de två punkterna.

Koppling till klassisk mekanik För att se kopplingen till klassisk fysik, är vi intresserade av att se vad som händer när $\hbar \rightarrow 0$. I detta fallet förväntar vi att de Broglie-våglängden blir liten, och att vågfunktionen därmed kommer oscillera mycket. Vi gör då ansatsen $\Psi = Ae^{i\frac{S}{\hbar}}$, där S är någon funktion. Vi antar att A varierar försumbart i rummet jämförd med S .

Kinetisk energi-operatorn tillämpad på detta ger

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \Psi &= -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x \left(\partial_x A e^{i\frac{S}{\hbar}} + iA \frac{1}{\hbar} \partial_x S e^{i\frac{S}{\hbar}} \right) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\partial_x^2 A e^{i\frac{S}{\hbar}} + i\partial_x A \frac{1}{\hbar} \partial_x S e^{i\frac{S}{\hbar}} + i\frac{1}{\hbar} \partial_x A \partial_x S e^{i\frac{S}{\hbar}} + iA \frac{1}{\hbar} \partial_x^2 S e^{i\frac{S}{\hbar}} - A \frac{1}{\hbar^2} (\partial_x S)^2 e^{i\frac{S}{\hbar}} \right). \end{aligned}$$

Observera att i gränsen kommer endast en term att överleva. Vi får även

$$i\hbar \partial_t \Psi = i\hbar \left(\partial_t A e^{i\frac{S}{\hbar}} + iA \frac{1}{\hbar} \partial_t S e^{i\frac{S}{\hbar}} \right).$$

Även här kommer endast en term överleva i gränsen. Insatt i Schrödingerekvationen och evaluerad i gränsen fås

$$\left(\frac{1}{2m} (\partial_x S)^2 + V \right) \Psi = -\partial_t S \Psi,$$

vilket implicerar

$$\frac{1}{2m} (\partial_x S)^2 + V + \partial_t S = 0.$$

De två första termerna motsvarar Hamiltonfunktionen i klassisk mekanik, där i har gjort transformationen $p \rightarrow \partial_x S$. Med denna tolkningen ser vi att detta motsvarar Hamilton-Jacobis ekvation.

Separation av Schrödingerekvationen Betrakta Schrödingerekvationen för en statisk potential. Då verkar Hamiltonoperatorn endast på rumliga koordinater. Vi gör då produktansatsen $\Psi = \psi\phi$, där ψ endast beror av rumliga koordinater och ϕ endast av tiden. Detta ger

$$H\Psi = \phi H\psi = i\hbar \partial_t \Psi = i\hbar \psi \frac{d\phi}{dt}.$$

Vi kan nu dividera med Ψ för att få

$$\frac{1}{\psi} H\psi = \frac{i\hbar}{\phi} \frac{d\phi}{dt}.$$

Eftersom varje sida beror av olika koordinater, måste de vara lika med en konstant. Av ingen anledning alls väljer vi att kalla denna konstanten för E . Vi löser först tidsdelen för att få

$$\frac{d\phi}{dt} = -\frac{iE}{\hbar}\phi,$$

med lösning

$$\phi = Ce^{-i\frac{E}{\hbar}t}.$$

Vi ser att E måste motsvara systemets totala energi. Insatt i den andra ekvationen ger detta

$$H\psi = E\psi.$$

För stationära fall är alltså vågfunktionen ett egentillstånd till Hamiltonoperatoren.

Betrakta vidare väntevärdet av en observabel som representeras av en operator som ej verkar på tidskoordinaten. Detta ger

$$\begin{aligned}\langle q \rangle &= \int d^3x \Psi^* q \Psi \\ &= \int d^3x \psi^* \phi q \psi \\ &= \int d^3x \psi^* \phi q \psi \\ &= \int d^3x \psi^* |q| \psi \\ &= \int d^3x \psi^* q \psi.\end{aligned}$$

Alltså är väntevärdet fullständigt tidsberoende. Speciellt gäller för energin att

$$\begin{aligned}\langle q \rangle &= \int d^3x \Psi^* H \Psi \\ &= \int d^3x \psi^* H \psi \\ &= \int d^3x \psi^* E \psi \\ &= E \int d^3x \psi^* \psi \\ &= E.\end{aligned}$$

På samma sättet fås $\langle E^2 \rangle = E^2$ och $\Delta E = \sqrt{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2} = 0$.

Vi kan även skriva en allmän lösning som en superposition

$$\Psi = \sum c_n \psi_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$$

där $H\psi_n = E_n\psi_n$ och summationen görs över hela systemets energispektrum.

Partikel i oändlig låda För att få en känsla för vilken sorts fysik som kommer ut av kvantmekaniken, betraktar vi en partikel i en oändlig lådpotential, dvs.

$$V = \begin{cases} 0, & 0 < x < a, \\ \infty, & \text{annars.} \end{cases}$$

Detta motsvarar en låda med oändligt starka väggar.

Vi noterar först att Schrödingerekvationen ger

$$\partial_x^2 \Psi = -\frac{2m(E - V)}{\hbar^2} \psi.$$

Alltså är vågfunktionens krökning proportionell mot $\sqrt{E - V}$. Detta implicerar om att $E - V < 0$ avtar beloppet av vågfunktionen exponentiellt i detta området. Om detta gäller överallt, kan det ej existera lösningar för $E < V_{\min}$. Vi kommer därför anta att detta är sant härifrån.

Vi observerar även att argumentet implicerar att eftersom potentialen är oändlig utanför lådan, måste vågfunktionen endast vara nollskild inuti lådan, och det återstår att lösa Schrödingerekvationen i denna regionen. Här fås.

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x \partial_x \psi &= E\psi, \\ \partial_x \partial_x \psi &= -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi. \end{aligned}$$

Vi definierar nu

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

och får

$$\partial_x \partial_x \psi = -k^2 \psi.$$

Detta har lösningar

$$\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}.$$

För att få mer information, behövs randvillkor. Vi kräver att vågfunktionen är kontinuerlig, vilket ger $\psi(0) = \psi(a) = 0$. Första randvillkoret ger

$$\begin{aligned} A + B &= 0, \\ \psi &= A \sin kx. \end{aligned}$$

Observera att detta inte kan uppfyllas för $k = 0$, varför denna möjligheten kan försummas.

Andra randvillkoret ger

$$ka = n\pi.$$

Nu kan energin bestämmas enligt

$$\begin{aligned} \frac{n^2 \pi^2}{a^2} &= \frac{2mE}{\hbar^2}, \\ E &= \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2}. \end{aligned}$$

Slutligen ger normaliseringsvillkoret

$$\int_0^a dx |B|^2 \sin^2 kx = 1.$$

Integralen på vänstersidan är

$$|B|^2 \int_0^a dx \frac{1 - \cos 2kx}{2}.$$

Den andra termen ger inget bidrag eftersom den har period a , och detta ger

$$\begin{aligned} |B|^2 \frac{a}{2} &= 1, \\ |B| &= \sqrt{\frac{2}{a}}. \end{aligned}$$

Observera att vi endast skriver absolutbeloppet eftersom B kan innehålla en komplex fas utan att det ändrar fysiken.

3 Diracnotation

Kvantmekaniska tillstånd och tillståndspostulatet Vi utvidgar nu konceptet vågfunktion till ett allmänt kvantmekaniskt tillstånd $|\Psi\rangle$. Detta är en så kallad ketvektor i ett Hilbertrum. Ett fundamentalt postulat i kvantmekaniken är att $|\Psi\rangle$ beskriver systemet fullständigt.

Till ketvektorerna hör även bravektorerna $\langle\Psi|$, som bildar dualrummet till Hilbertrummet som alla ketvektorer finns i.

Inreprodukt och ortogonalitet Till dessa hör en inreprodukt

$$\langle\Psi|\Phi\rangle = \int d^3\mathbf{x} \Psi^*\Phi.$$

Denna inreprodukten uppfyller $\langle\Psi|\Phi\rangle = \langle\Phi|\Psi\rangle^*$.

Baserad på detta kan vi införa ortogonalitet och normerbarhet. Vi säger att en vektor är normerad om $\|\Psi\|^2 = \langle\Psi|\Psi\rangle = 1$. Vi kommer förutsätta att vektorerna vi ser är normerade. Vi säger även att $|\Psi_1\rangle$ och $|\Psi_2\rangle$ är ortonormala om $\langle\Psi_i|\Psi_j\rangle = \delta_{ij}$.

Operatorer och operatorpostulatet Ett annat fundamentalt postulat i kvantmekaniken är att observabler representeras av Hermiteska operatorer med en fullständig mängd av egenvektorer. Och vad betyder detta?

Att representera en observabel med en operator innebär att det till varje klassiska observabel A som kan skrivas som $A(x, p)$ tillhör en operator $\hat{A}(\hat{x}, \hat{p})$. Om det ej finns en klassisk motsvarighet till A , fås operatoren från experiment.

Med Diracnotation kan vi även skriva en operatoren som $A = |\Psi_1\rangle\langle\Psi_2|$. Vi använder i bland begreppet c-nummer om $\langle| \rangle$ och q-nummer om $|\rangle\langle|$. Med detta kan vi även skriva $\langle A \rangle = \langle\Psi|A|\Psi\rangle$.

För att prata om Hermiteska operatorer, måste vi först prata om adjungerade operatorer. Den adjungerade operatoren A^\dagger till A definieras som den operatoren så att

$$\int d^3\mathbf{x} \Psi^* A\Phi = \int d^3\mathbf{x} A\Psi^* \Phi.$$

Med Diracnotation kan detta skrivas som $\langle\Phi|A|\Psi\rangle = \langle\Psi|A^\dagger|\Phi\rangle^*$. En Hermitesk operator är en operator som uppfyller $A^\dagger = A$. Det visar sig att operatorer som x, p och H uppfyller detta, och det är ju trevligt.

Några viktiga räkneregler för adjungerade operatorer är:

- $(c_1A + c_2B)^\dagger = c_1^*A^\dagger + c_2^*B^\dagger$.
- $(A^\dagger)^\dagger = A$.
- $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$.
- Normen i kvadrat av $A|\Psi\rangle$ ges av $\langle A^\dagger A|\Psi\rangle$.

Det kommer visa sig att vi är intresserade av att studera egenvärdesproblem för självdjungerade operatorer. Därför vill vi veta lite om egenvärdena och egenfunktionerna till såna operatorer.

Betrakta först ett egentillstånd $|\Psi_n\rangle$ med egenvärde a_n . Vi får:

$$\langle A \rangle = \langle\Psi_n|A|\Psi_n\rangle = (\langle\Psi_n|A|\Psi_n\rangle)^*,$$

vilket implicerar att $a_n = a_n^*$, och vi drar slutsatsen att självdjungerade operatorer har reella egenvärden.

Betrakta vidare två olika egentillstånd. Vi får

$$\langle\Psi_n|A|\Psi_m\rangle = a_m \langle\Psi_n|\Psi_m\rangle = \langle\Psi_m|A|\Psi_n\rangle^* = a_n^* \langle\Psi_n|\Psi_m\rangle^* = a_n^* \langle\Psi_n|\Psi_m\rangle,$$

och drar slutsatsen att $\langle\Psi_n|\Psi_m\rangle = \delta_{nm}$. Observera att om samma egenvärde har flera egenfunktioner, kan man använda Gram-Schmidts metod för att få ortogonala egenfunktioner.

Att bevisa att dessa egenvektorerna är fullständiga är allmänt bara möjligt för ändligdimensionella vektorrum. Vi kommer baka detta in i postulatet, och postulera att operatorerna vi vill betrakta är konstruerade så att detta är sant.

Diracnotation och operatorer Med fullständighetspostulatet kan vi nu skriva ett allmänt tillstånd som $|\Psi\rangle = c_i |\Psi_i\rangle$, och vi ser även att $c_i = \langle \Psi_i | \Psi \rangle$. Vilken bas har vi utvecklat $|\Psi\rangle$ i? Jo, det är godtyckligt. Oftast kommer det vara egenbasen till en operator.

För att en utgångspunkt, startar vi med identitetsoperatoren I . Med resonemanget ovan kan vi skriva

$$I |\Psi\rangle = |\Psi\rangle = |\Psi_i\rangle \langle \Psi_i | |\Psi\rangle,$$

vilket implicerar $I = |\Psi_i\rangle \langle \Psi_i|$.

Nu kan vi betrakta en godtycklig operator Q och skriva

$$Q = IQI = |\Psi_i\rangle \langle \Psi_i| Q |\Psi_j\rangle \langle \Psi_j|.$$

Vi kan definiera $Q_{ij} = \langle \Psi_i | Q | \Psi_j \rangle$, och får då

$$Q = Q_{ij} |\Psi_i\rangle \langle \Psi_j|.$$

Sannolikhetstolkning Med hjälp av detta kan vi skriva

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \langle \Psi | I | \Psi \rangle = \langle \Psi | \Psi_i \rangle \langle \Psi_i | \Psi \rangle = c_i^* c_i = 1.$$

Vi tolkar detta som att $|c_i|^2$ är sannolikheten att systemet är i tillståndet $|\Psi_i\rangle$.

Vi kan även skriva väntevärdet av en observabel

$$\langle A \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle = \langle \Psi | A I | \Psi \rangle = \langle \Psi | A | \Psi_i \rangle \langle \Psi_i | \Psi \rangle = a_i \langle \Psi | \Psi_i \rangle \langle \Psi_i | \Psi \rangle = a_i |c_i|^2.$$

Notera hur snyggt detta blir när vi använder operatorpostulatet. Detta resultatet tolkar vi som att väntevärdet ges av en summa av produkter av egenvärden och sannolikheten för att systemet är i det motsvarande egen-tillståndet.

Mätpostulatet Ett annat fundamentalt postulat i kvantmekaniken är följande:

Om ett system befinner sig i ett tillstånd $|\Psi\rangle$ ger en mätning av storheten A något av egenvärdena a_i till A som resultat med sannolikhet $\langle \Psi_i | \Psi \rangle$. Mätningen ändrar även systemets tillstånd från $|\Psi\rangle$ till $|\Psi_i\rangle$, och vi säger att tillståndet kollapsar.

Schrödingerekvationen Det sista postulatet i kvantmekaniken är att tillståndets tidsutveckling ges av

$$H |\Psi\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi\rangle.$$