Kvantemekanikk: Supplement 2*

I. EIGENFUNKSJONAR OG EIGENVERDIAR TIL OPERATORAR SOM REPRESENTERER FYSISKE OBSERVABLAR

Einkvar operator $\hat{F}$ som representerer ein fysisk observabel F har eit sett eigenfunksjonar $\Theta_\alpha(x)$ med tilhøyrande eigenverdiar f_α. Dette betyr per definisjon at

$$\hat{F}\Theta_\alpha(x) = f_\alpha\Theta_\alpha(x) \qquad \text{(ein slik likning for kvar } \alpha) \tag{1}$$

Denne likninga kallast ein *eigenverdilikning*. Den seier følgjande: Resultatet av å verke på funksjonen $\Theta_\alpha(x)$ med operatoren $\hat{F}$ er simpelthen proporsjonalt med funksjonen $\Theta_\alpha(x)$, der eigenverdien f_α er proporsjonalitetskonstanten. Nokre kommentarar:

- Eigenfunksjonar er i ein viss forstand "utypiske" funksjonar, fordi det ein "typisk" får når ein verkar på ein funksjon med ein operator er ein heilt annan funksjon! F.eks. dersom vi verkar på funksjonen $\sin x$ med operatoren $\partial/\partial x$ får vi $\cos x$, som *ikkje* er lik ein konstant multiplisert med $\sin x$. To forskjellige operatorar vil generelt ha heilt forskjellige sett av eigenfunksjonar (men det finst viktige unntak; vi kjem tilbake til dette punktet under).
- Merk at til einkvar eigenfunksjon $\Theta_\alpha(x)$ høyrer det ein eigenverdi f_α. Subskriptet α er berre ein "merkelapp" som vi bruker for identifisere eigenfunksjonen/eigenverdien. I systema vi skal sjå på har alle operatorar $\hat{F}$ uendeleg mange eigenfunksjonar og tilhøyrande eigenverdiar.
- Eigenverdiane f_α er konstantar mens eigenfunksjonane $\Theta_\alpha(x)$ er funksjonar av x.
- Eigenverdiane f_α er *reelle*. Dette har samanheng med **målepostulatet** i kvantemekanikk, som vi skal introdusere seinare.

Eksempel 1: Eigenverdiane til bevegelsesmengd og kinetisk energi. Planbølgjene $\psi_k(x) \propto e^{ikx}$ er eigenfunksjonar til bevegelsesmengdoperatoren $\hat{p}$ med eigenverdi $p_k = \hbar k$. (Her spelar altså bølgjetalet k rollen som "merkelappen" α). Bevis:

$$\hat{p}\, e^{ikx} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}e^{ikx} = \frac{\hbar}{i}(ik)e^{ikx} = \hbar k\; e^{ikx}. \tag{2}$$

Desse planbølgjene er også eigenfunksjonar av kinetisk-energi-operatoren $\hat{K}$, med eigenverdiar $K_k = \hbar^2k^2/(2m)$:

$$\hat{K}e^{ikx} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}e^{ikx} = \frac{\hbar^2k^2}{2m}e^{ikx}. \tag{3}$$

Her ser vi altså at to forskjellige operatorar, $\hat{p}$ og $\hat{K}$, har same sett av eigenfunksjonar (men forskjellige eigenverdiar). Dette er fordi $\hat{K}$ kun er ein funksjon av $\hat{p}$ (og ikkje også av $\hat{x}$). At eigenfunksjonane da blir identiske ser ein kanskje lettast ved å skrive

$$\hat{K}e^{ikx} = \frac{1}{2m}\hat{p}\hat{p}\, e^{ikx} = \frac{1}{2m}\hat{p}p_k\, e^{ikx} = \frac{p_k^2}{2m}\, e^{ikx}. \tag{4}$$

Merk at for ein fri partikkel er $\hat{H} = \hat{K}$, så planbølgjene er eigenfunksjonar av $\hat{H}$ for ein fri partikkel. Men for ein partikkel som ikkje er fri, dvs. $U(x) \neq$ konstant, er $\hat{H}$ ein funksjon både av $\hat{p}$ og av $\hat{x}$, og da er eigenfunksjonane til $\hat{H}$ ikkje lenger planbølgjer. Eigenfunksjonane og eigenverdiane til $\hat{H}$ avheng av forma på potensialenergifunksjonen $U(x)$.

Eksempel 2: Den tidsuavhengige Schrödingerlikninga (TUSL) kan skrivast

$$\hat{H}\psi_\alpha(x) = E_\alpha\psi_\alpha(x). \tag{5}$$

---

* Desse notatane inneheld materiale som ikkje er dekka i læreboka. Dei er difor eit essensielt supplement til læreboka.

Den er difor ei eigenverdilikning. (Her har vi putta på subscriptet α som vi ikkje gjorde tidlegare.) Eigenverdiane til Hamiltonoperatoren $\hat{H}$ er difor energiane E_α, og funksjonane $\psi_\alpha(x)$ (dvs. den x-avhengige delen av dei stasjonære tilstandene av forma $\psi_\alpha(x)e^{-iE_\alpha t/\hbar}$) er eigenfunksjonane.

Desse eksempla indikerer (eller er iallfall konsistent med) at eigenverdiane f_α til ein operator $\hat{F}$ representerer verdiar som den tilsvarande fysiske storleiken F kan ta. Dette utsagnet er ein del av målepostulatet, som vi kjem til snart. Men først litt meir motivasjon. Vi treng då litt meir kunnskap om eigenfunksjonane til ein slik operator $\hat{F}$. Vi vil i det følgjande anta at $\hat{F}$ har kun diskrete eigenverdiar. (Dersom dette ikkje er tilfelle må nokre av uttrykka under modifiserast litt.) Eit eksempel på ein slik operator er Hamilton-operatoren $\hat{H}$ for partikkel-i-boks systemet.

Det kan visast at settet av eigenfunksjonar $\{\Theta_\alpha(x)\}$ til operatoren $\hat{F}$ er (i) **ortonormalt** og (ii) **komplett**. At settet er ortonormalt betyr at

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\ \Theta_\alpha^*(x)\Theta_\beta(x) = \delta_{\alpha\beta}, \tag{6}$$

der $\delta_{\alpha\beta}$, kalla Kronecker-deltaet, er definert som

$$\delta_{\alpha\beta} = \begin{cases} 1 & \text{dersom } \alpha = \beta \\ 0 & \text{dersom } \alpha \neq \beta. \end{cases} \tag{7}$$

(Merk at tilfellet $\alpha = \beta$ i (6) svarer til normeringskravet $\int_{-\infty}^{\infty} dx\ |\Theta_\alpha(x)|^2 = 1$.) At settet er komplett betyr at einkvar normaliserbar funksjon $g(x)$ kan skrivast som ein lineærkombinasjon av eigenfunksjonane $\Theta_\alpha(x)$, m.a.o. vi kan skrive

$$g(x) = \sum_\alpha a_\alpha \Theta_\alpha(x) \tag{8}$$

der a_α er x-uavhengige koeffisientar. For å finne desse koeffisientane ser vi på

$$\int dx\ \Theta_\alpha^*(x)g(x) \;=\; \int dx\ \Theta_\alpha^*(x)\sum_\beta a_\beta\Theta_\beta(x) = \sum_\beta \int dx\ \Theta_\alpha^*(x)\Theta_\beta(x) = \sum_\beta a_\beta\delta_{\alpha\beta} = a_\alpha. \tag{9}$$

M.a.o.

$$a_\alpha = \int dx\ \Theta_\alpha^*(x)g(x). \tag{10}$$

La oss no anta at partikkelen er i ein tilstand gitt av bølgjefunksjonen $\Psi(x,t)$. Dersom vi ser på ei bestemt (men vilkårleg) tid t er dette ein funksjon av x mens t er ein parameter. Likningane (8) og (10) gir då

$$\Psi(x,t) = \sum_\alpha a_\alpha(t)\Theta_\alpha(x) \tag{11}$$

med

$$a_\alpha(t) = \int dx\ \Theta_\alpha^*(x)\Psi(x,t). \tag{12}$$

Normaliseringskravet for bølgjefunksjonen $\Psi(x,t)$ er

$$\int dx\ |\Psi(x,t)|^2 = 1. \tag{13}$$

Venstresida i denne likninga kan skrivast

$$\int dx\ (\sum_\alpha a_\alpha^*(t)\Theta_\alpha^*(x))(\sum_\beta a_\beta(t)\Theta_\beta(x)) = \sum_{\alpha,\beta} a_\alpha^*(t)a_\beta(t)\int dx\ \Theta_\alpha^*(x)\Theta_\beta(x) = \sum_{\alpha,\beta} a_\alpha^*(t)a_\beta(t)\delta_{\alpha\beta} = \sum_\alpha |a_\alpha(t)|^2. \tag{14}$$

M.a.o. vi har vist at

$$\sum_\alpha |a_\alpha(t)|^2 = 1. \tag{15}$$

Vidare er openbart $|a_\alpha(t)|^2 \geq 0$. Det er da naturleg å tolke $|a_\alpha(t)|^2$ som sannsynlegheiter (dei er større eller lik 0 og summerer til 1). Denne tolkinga er ein del av målepostulatet i kvantemekanikk.

II. MÅLEPOSTULATET

Målepostulatet i kvantemekanikk kan formulerast som følgjer:

(i) Dei einaste mogelege verdiane som ei måling av den fysiske observabelen F kan gi er ein av eigenverdiane f_α til $\hat{F}$.
(ii) Dersom partikkelen er i ein tilstand gjeven av bølgjefunksjonen $\Psi(x,t)$ er sannsynlegheiten for å måle verdien f_α lik $|a_\alpha(t)|^2$, der $a_\alpha(t)$ er gjeven i likning (12).
(iii) Umiddelbart etter målinga av F er partikkelen i ein tilstand gjeven av eigenfunksjonen $\Theta_\alpha(x)$ til $\hat{F}$ tilhøyrande eigenverdien f_α som var måleresultatet.

Eit par kommentarar:

- Del (iii) av målepostulatet blir ofte referert til som "kollaps av bølgjefunksjonen" og er ein del av standardtolkinga av kvantemekanikk som blir kalla "the Copenhagen interpretation". Sjølv om del (iii) av målepostulatet er bekrefta av eksperiment, er den filosofisk kontroversiell, fordi den representerer ein heilt annan type endring av bølgjefunksjonen enn den som er gjeven av den tidsavhengige Schrödingerlikninga. Dette har ført til forsking på alternative tolkingar av kvantemekanikk der kollaps av bølgjefunksjonen ved målingar ikkje er ein fundamental eigenskap men kun ein tilsynelatande eigenskap.

- Merk at dersom vi gjer ei måling av F på ein generell tilstand er utfallet usikkert, sidan sannsynlegheiten for å måle ein viss verdi er mindre enn 1. Men dersom vi umiddelbart etter den første målinga gjer ein ny måling av F vil vi med sikkerheit måle den same verdien som første gong. Det følgjer fra (iii) og (ii): sannsynlegheiten $|a_\alpha|^2$ er 1 for eigenverdien som var måleresultatet i den første målinga og 0 for alle andre eigenverdiar.

- Ved å bruke målepostulatet kan ein også utleie uttrykket vi ga tidlegare (utan bevis) for forventningsverdien $\langle F\rangle$ for den fysiske observabelen. Anta at vi gjer eit stort antal målingar av observabelen F for eit system i tilstanden $\Psi(x,t)$. (Vi kan f.eks. tenkje oss at ein gjer målingar på ein kolleksjon av identisk preparerte system, der alle målingane blir gjort for same t.) Eit naturleg spørsmål er: Kva er *middelverdien* av målingane? Sidan sannsynlegheiten for å måle f_α er $P_\alpha = |a_\alpha(t)|^2$ er det naturleg å forvente at i grensa av veldig mange målingar burde middelverdien nærme seg

$$\langle F\rangle = \sum_\alpha f_\alpha P_\alpha = \sum_\alpha f_\alpha |a_\alpha(t)|^2. \tag{16}$$

  Ved å bruke eigenskapane til eigenfunksjonane til $\hat{F}$ kan ein vise at dette kan skrivast

$$\langle F\rangle = \int dx\ \Psi^*(x,t)\hat{F}\Psi(x,t) \tag{17}$$

  som er nettopp uttrykket vi ga tidlegare for denne forventningsverdien.

Eksempel: Anta at ein partikkel i ein boks er i ein tilstand gjeven av bølgjefunksjonen

$$\Psi(x,t) = 0.8\Psi_1(x,t) + 0.6\Psi_2(x,t), \tag{18}$$

der $\Psi_n(x,t) = \psi_n(x)e^{-iE_nt/\hbar}$ er den stasjonære tilstanden til systemet med kvantetal n $(n = 1,2,3,\ldots)$.
(1) Kva er sannsynlegheiten for å måle energien til å vere E_n $(n = 1,2,3,\ldots)$?
(2) Anta at resultatet av ei slik måling er verdien E_2. Dersom vi umiddelbart etter gjer ei ny måling av energien for det same systemet, kva er då sannsynlegheiten for å måle verdien E_n $(n = 1,2,3,\ldots)$?

Svar: (1) Her er det snakk om å måle energien. Måleutfallet må difor vere ein av eigenverdiane E_n til Hamilton-operatoren $\hat{H}$ for partikkel-i-boks systemet, dvs. $\hat{F} = \hat{H}$ i dette tilfellet, så eigenfunksjonane $\Theta_\alpha(x) = \psi_n(x)$ (dvs. $\alpha = n$). Vi ser då at (18) er allereie på forma (11) med

$$a_1(t) = 0.8e^{-iE_1t/\hbar}, \quad a_2(t) = 0.6e^{-iE_2t/\hbar}, \quad a_n(t) = 0 \text{ for } n \geq 3. \tag{19}$$

Sannsynlegheiten $P(E_n)$ for å måle verdien E_n er difor, iflg. del (ii) av målepostulatet,

$$P(E_1) = |a_1(t)|^2 = 0.64, \quad P(E_2) = |a_2(t)|^2 = 0.36, \quad P(E_n) = |a_n(t)|^2 = 0 \text{ for } n \geq 3. \tag{20}$$

Ein kan også sjekke at (15) er tilfredsstilt:

$$\sum_n |a_n(t)|^2 \left(= \sum_n P(E_n) \right) = 0.8^2 + 0.6^2 + 0 + 0 + 0 + \cdots = 0.64 + 0.36 = 1. \tag{21}$$

(2) Iflg. del (iii) av målepostulatet er tilstanden til systemet like etter målinga gjeven av $\psi_2(x)$. Eit kort svar på spørsmålet er då at ei ny måling av energien i denne tilstanden må gi med vissheit (dvs. sannsynlegheit 1) eigenverdien E_2 som tilhøyrer denne eigenverdien. Eit litt meir detaljert svar: Dersom vi definerer tida umiddelbart etter målinga til å vere t_0, har systemet ved denne tida bølgjefunksjonen $\Psi(x, t_0) = \psi_2(x)$. Bølgjefunksjonen er difor på forma (11) med $a_2(t_0) = 1$ og $a_n(t_0) = 0$ for $n \neq 2$. Dermed blir $P(E_2) = |1|^2 = 1$ og $P(E_n) = |0|^2 = 0$ for $n \neq 2$.

Sjå også oppgåve 3 i øving 11 for nokre relaterte problemstillingar.