Kvantemekanikk: Supplement 1*

I. FYSISKE OBSERVABLAR OG DEIRA OPERATOR-REPRESENTASJON

Ein fysisk målbar storleik for ein partikkel, f.eks. posisjon (x), bevegelsesmengd (p), og energi (E), blir i kvantemekanikk ofte kalla ein fysisk *observabel.* I kvantemekanikk er einkvar fysisk observabel F representert av ein matematisk *operator* $\hat{F}$. La oss skrive dette som $F \to \hat{F}$, der $\to$ betyr "representert av". "Hatten" (dvs. symbolet $\hat{}$) blir altså brukt til å indikere ein operator. For hhv. posisjon og bevegelsesmengd har vi da følgjande reglar:

$$\text{Posisjon } x \quad \to \quad \hat{x} = x \tag{1}$$

$$\text{Bevegelsesmengd } p \quad \to \quad \hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} \tag{2}$$

Alle andre fysiske observablar kan uttrykkjast som funksjonar av posisjon og bevegelsesmengd, slik at vi generelt kan skrive $F = F(x, p)$. Den tilsvarande operatoren kan ein da finne ved å erstatte x og p i uttrykket for F med hhv. $\hat{x} = x$ og $\hat{p} = (\hbar/i)(\partial/\partial x)$, dvs.[1]

$$F = F(x, p) \quad \to \quad \hat{F} = F(\hat{x}, \hat{p}). \tag{3}$$

Døme på slike observablar og deira operator-representasjon:

- Kinetisk energi:

$$K = K(p) = \frac{p^2}{2m} \quad \to \quad \hat{K} = K(\hat{p}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}, \tag{4}$$

- Potensiell energi:

$$U = U(x) \quad \to \quad \hat{U} = U(\hat{x}) = U(x). \tag{5}$$

- Total energi:

$$E = K + U \quad \to \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \equiv \hat{H}. \tag{6}$$

I det siste dømet over, merk at operatoren for totalenergien blir tradisjonelt kalla $\hat{H}$, ikkje $\hat{E}$. (H står for Hamilton[2], og energioperatoren $\hat{H}$ blir vanlegvis kalla Hamilton-operatoren.) Merk også at den tidsavhengige Schrödingerlikninga kan skrivast som

$$\hat{H}\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) \tag{7}$$

og den tidsavhengige Schrödingerlikninga som

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x). \tag{8}$$

II. FORVENTNINGSVERDI OG USIKKERHEIT FOR FYSISKE OBSERVABLAR

Anta at vi preparerer eit visst antal system i same tilstand, gitt av bølgjefunksjonen $\Psi(x,t)$. Dersom vi ved tida t måler verdien av den fysiske observabelen F i kvart system, får vi same måleresultat i alle systema? For ei generell tilstand $\Psi(x,t)$ er svaret nei. Ein vil i staden typisk få forskjellige verdiar.[3] Dette er ein konsekvens av at bølgjefunksjonen $\Psi(x,t)$ gir opphav til ein sannsynlegheitsfordeling $P(F)$ (merk at generelt er $P(F)$ også avhengig av tida t), slik at $P(F)$ er sannsynlegheiten for å måle verdien F. Her har vi antatt at F kun kan ta diskrete

---

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

verdiar, som f.eks. i tilfellet $F = E$ (energi) for partikkel i boks. Dersom F kan ta eit kontinuerleg sett verdiar, er $P(F)$ ein sannsynlegheits*tettleik*, og $P(F)dF$ er sannsynlegheiten for å måle ein verdi i det infinitesimale intervallet $(F, F + dF)$. Vi har allereie sett eit døme på sistnemnde type observabel, nemleg $F = x$; da er $P(x) = |\Psi(x,t)|^2$. For andre observablar vil det vere ein annan samanheng mellom $P(F)$ og Ψ, men det viktige her er at det finst ein slik samanheng mellom alle bølgjefunksjonar $\Psi(x,t)$ og alle fysiske observablar F for eit system. Kun dersom sannsynlegheitsfordelinga $P(F)$ er "skarp" ved ein verdi F_0, dvs. $P(F) = 0$ for alle $F \neq F_0$, vil vi måle den same verdien ($F = F_0$) i alle system.

Ein interessant storleik er *forventningsverdien* $\langle F \rangle$, gitt som

$$\langle F \rangle \equiv \begin{cases} \sum_F F\ P(F) & \text{dersom } F \text{ tek diskrete verdiar} \\ \int dF\ F\ P(F) & \text{dersom } F \text{ tek kontinuerlege verdiar} \end{cases} \tag{9}$$

Forventningsverdien $\langle F \rangle$ svarer til "tyngdepunktet" i sannsynlegheitsfordelinga. Dersom ein gjer eit stort antal N målingar av F, med resultata F_i ($i = 1, 2, \ldots, N$) ventar ein at middelverdien $\bar{F}(N) \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} F_i$ vil vere nær $\langle F \rangle$. I grensa $N \to \infty$ vil $\bar{F}(N) \to \langle F \rangle$.

Meir generelt er forventningsverdien av ein funksjon $g(F)$ gitt som

$$\langle g(F) \rangle \equiv \begin{cases} \sum_F g(F)\ P(F) & \text{dersom } F \text{ tek diskrete verdiar} \\ \int dF\ g(F)\ P(F) & \text{dersom } F \text{ tek kontinuerlege verdiar} \end{cases} \tag{10}$$

La oss no sjå på ein annan interessant storleik for å karakterisere ei sannsynlegheitsfordeling $P(F)$, nemleg standardavviket ("usikkerheiten") $\Delta F = \sqrt{\langle (F - \langle F \rangle)^2 \rangle}$. Motivasjonen bak denne definisjonen er at ein ynskjer eit mål på kor langt fra $\langle F \rangle$, i middel, ei måling av F er. Det mest naive forslaget på eit slikt mål er det midlere avviket fra $\langle F \rangle$, dvs. $\langle F - \langle F \rangle \rangle$. Men det er ubrukeleg fordi det er null:[4]

$$\langle F - \langle F \rangle \rangle = \langle F \rangle - \langle \langle F \rangle \rangle = \langle F \rangle - \langle F \rangle = 0. \tag{11}$$

Dette er ein konsekvens av at negative avvik kansellerer positive avvik. Definisjonen av standardavviket ΔF unngår slike kansellasjonar, sidan i ΔF kvadrerer ein først avviket før ein midlar. Men da må ein deretter ta kvadratrota for å få ein storleik med same dimensjon som F. På engelsk kallast standardavviket "root-mean-square-deviation" (rms-avviket), eit dekkande namn som kan illustrerast som følgjer:

$$\Delta F = \underbrace{\sqrt{\underbrace{\Big\langle \underbrace{\underbrace{(F - \langle F \rangle)}_{\text{deviation}}{}^2}_{\text{square}} \Big\rangle}_{\text{mean}}}}_{\text{root}}\,. \tag{12}$$

Ved å bruke at

$$(\Delta F)^2 = \langle (F - \langle F \rangle)^2 \rangle = \langle F^2 - 2F\langle F \rangle + \langle F \rangle^2 \rangle = \langle F^2 \rangle - 2\langle F \rangle^2 + \langle F \rangle^2 = \langle F^2 \rangle - \langle F \rangle^2, \tag{13}$$

kan ein alternativt skrive standardavviket ΔF som

$$\Delta F = \sqrt{\langle F^2 \rangle - \langle F \rangle^2}. \tag{14}$$

For å finne ΔF treng ein altså kun å rekne ut $\langle F^2 \rangle$ i tillegg til $\langle F \rangle$.

Eksempel: Sannsynlegheiten for å få n auge ved terningkast ($n = 1, 2, 3, 4, 5, 6$) er $P(n) = 1/6$, dvs. sannsynlegheiten er i dette tilfellet **uniform**. Rekn ut $\langle n \rangle$ og Δn og teikn inn $\langle n \rangle$ og $n \pm \Delta n$ på ein graf av $P(n)$.

I kvantemekanikk blir usikkerheiten/standardavviket ΔF til ein fysisk observabel F også kalla uskarpheiten til F. Vi seier også at F er skarpt bestemt i ein tilstand dersom $\Delta F = 0$ i den tilstanden.

Korleis reknar vi ut storleikar som $\langle F \rangle$ og ΔF for ein gitt tilstand, definert av ein bølgjefunksjon $\Psi(x,t)$? Svar: Ved å bruke følgjande formel (som vi kanskje får tid til å utleie seinare fra dei kvantemekaniske postulata):

$$\langle A \rangle = \int dx\ \Psi^*(x,t)\ \hat{A}\ \Psi(x,t). \tag{15}$$

Her er $\hat{A}$ den kvantemekaniske operatoren som svarer til observabelen A. Merk at plasseringa av operatoren $\hat{A}$ i denne formelen er viktig dersom $\hat{A}$ inneheld differensialoperatorar $\partial/\partial x$: $\hat{A}$ verkar på faktoren $\Psi(x,t)$. Fra denne formelen får ein umiddelbart

$$\langle F\rangle = \int dx\ \Psi^*(x,t)\ \hat{F}\ \Psi(x,t) \qquad \text{og} \qquad \langle F^2\rangle = \int dx\ \Psi^*(x,t)\ \hat{F}^2\ \Psi(x,t) \tag{16}$$

der $\hat{F}^2 = \hat{F}\hat{F}$ som vanleg.

Eit viktig teorem i kvantemekanikk, Heisenbergs uskarpheitsrelasjon (eller usikkerheitsrelasjon) uttrykkjer at for visse par av observablar har produktet av usikkerheitene deira ei nedre grense som er større enn null. M.a.o. det er ein fundamental begrensing på kor små usikkerheitene av dei to observablane kan vere samtidig. Den mest kjende uskarpheitsrelasjonen er mellom usikkerheitene i posisjon og bevegelsesmengd, som er

$$\Delta x\ \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}. \tag{17}$$

For å rekne ut Δx og Δp treng ein da

$$\langle x\rangle = \int dx\ \Psi^*(x,t)\ \hat{x}\ \Psi(x,t) = \int dx\ \Psi^*(x,t)\ x\ \Psi(x,t) = \int dx\ x|\Psi(x,t)|^2, \tag{18}$$

$$\langle x^2\rangle = \int dx\ \Psi^*(x,t)\ \hat{x}^2\ \Psi(x,t) = \int dx\ \Psi^*(x,t)\ x^2\ \Psi(x,t) = \int dx\ x^2|\Psi(x,t)|^2, \tag{19}$$

$$\langle p\rangle = \int dx\ \Psi^*(x,t)\ \hat{p}\ \Psi(x,t) = \int dx\ \Psi^*(x,t)\ \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\ \Psi(x,t) = \frac{\hbar}{i}\int dx\ \Psi^*(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x,t), \tag{20}$$

$$\langle p^2\rangle = \int dx\ \Psi^*(x,t)\ \hat{p}^2\ \Psi(x,t) = \int dx\ \Psi^*(x,t)\ \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\ \Psi(x,t) = -\hbar^2\int dx\ \Psi^*(x,t)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t), \tag{21}$$

Nokre kommentarar:

- Merk at i uttrykka for $\langle x\rangle$ og $\langle x^2\rangle$ kunne vi flytte hhv. x og x^2 sidan desse kun multipliserer funksjonen $\Psi(x,t)$ og dermed er plasseringa deira i integralet likegyldig. I kontrast kunne vi i uttrykka for $\langle p\rangle$ og $\langle p^2\rangle$ ikkje flytte plasseringa til differensialoperatorane på tilsvarande måte sidan det ville ha endra resultatet.
- Merk at uttrykka for $\langle x\rangle$ og $\langle x^2\rangle$ er på forma $\langle g(F)\rangle = \int dF\ g(F)P(F)$ gitt i (10).

Ein meir generell kommentar: Dersom tilstanden er stasjonær, dvs. på forma $\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$, vil tidsavhengigheiten fra $\Psi^*(x,t)$ og $\Psi(x,t)$ simpelthen kansellere i (22), som difor forenklar seg til

$$\langle A\rangle = \int dx\ \psi^*(x)\ \hat{A}\ \psi(x). \tag{22}$$

M.a.o. i ei stasjonær tilstand er forventningsverdiar av fysiske observablar stasjonære (ikkje så veldig overraskande).

---

[1] Her hoppar vi bukk over ein subtilitet ang. *rekkjefølgja* av operatorane $\hat{x}$ og $\hat{p}$ i ledd i ein generell $\hat{F}$, fordi denne subtiliteten ikkje kjem opp med mindre både x og p inngår i same ledd i F, som ikkje er tilfelle for dei døma vi ser på her.

[2] Etter den irske fysikaren og matematikaren Sir William Rowan Hamilton (1805-1865).

[3] Kva verdiar som er generelt mogelege måleresultat for ein observabel F er eit viktig spørsmål vi skal komme tilbake til seinare.

[4] Her bruker vi at $\langle F\rangle$ er berre eit tal og difor kan takast utanfor midlinga: $\langle\langle F\rangle\rangle = \langle F\rangle\langle 1\rangle = \langle F\rangle\cdot 1 = \langle F\rangle$.