

Kvantemekanikk: Eit supplement til læreboka

John Ove Fjærestad

November 26, 2013

Abstract

Desse notata omhandlar emne som ikkje er diskuterte i læreboka (Young & Freedman, vol. 2).

Contents

1	Introduksjon til sannsynlegheitsrekning	1
2	Fysiske storleikar (observablar) i kvantemekanikk	5
3	Forventningsverdi og standarddávvik (uvisse) for posisjon	5
4	Forventningsverdi og standarddávvik (uvisse) for bevegelsesmengd	6
5	Heisenbergs uvisserelasjon for posisjon og bevegelsesmengd	7
6	Fysiske observablar og deira operator-representasjon	7
7	Forventningsverdi og usikkerheit for generelle fysiske observablar	8
8	Ehrenfests teorem og samanhengen mellom kvantemekanikk og klassisk mekanikk	9
9	Meir om stasjonære tilstander	10
10	Korleis finne $\Psi(x, t)$, gitt $\Psi(x, 0)$	11
11	Målingar av energien	12
12	Eigenfunksjonar og eigenverdiar til operatorar	14
13	Målepostulatet	15
A	Utrekning av $d\langle x \rangle/dt$ og $d\langle p \rangle/dt$	17
A.1	$d\langle x \rangle/dt$	17
A.2	$d\langle p \rangle/dt$	18
B	Ein vektoranalogi til (49), (51) og (53)	18
C	Eigenfunksjonar og eigenverdiar til posisjonsoperatoren	19
D	Korleis tolkinga av bølgefunksjonen følgjer frå målepostulatet	20

1 Introduksjon til sannsynlegheitsrekning

Kvantemekanikk involverer sannsynlegheitsrekning. Vi skal difor her byrje med å gi ein introduksjon til dei relevante konseptar som trengst frå denne disiplinen: sannsynlegheiter og sannsynlegheitsfordelingar,

forventningsverdiar og standardavvik. Men sidan desse konseptar på ingen måte er begrensa til kvantemekanikk, skal vi illustrere konseptar vha. eksempel som involverer betydeleg meir familiære ting, som terningkast!

Anta at vi har ein *diskret* variabel F , dvs. dei mogelege verdiane F kan ta utgjer eit diskret sett $\{F_1, F_2, \dots\}$. For eksempel, for eit terningkast er $F = a$, antalet auge på terningen, som kan ta verdier i settet $\{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$. La $P(F)$ vere sannsynlegheiten for verdien F , m.a.o. dersom vi gjer ei måling¹ av variabelen, er $P(F)$ sannsynlegheiten for å få måleresultatet F . Funksjonen $P(F)$ kallast sannsynlegheitsfordelinga for F . Den er ei diskret fordeling sidan variabelen F er diskret. Vi har då

$$\boxed{\sum_F P(F) = 1} \quad (1)$$

der summen går over dei mogelege verdiane av F . Denne likninga seier at summen av sannsynlegheitene for alle mogelege måleresultat for F er 1, dvs. ei måling av variabelen F må med sikkerheit (dvs. sannsynlegheit 1) gi ein av dei mogelege verdiane.

Gitt sannsynlegheitsfordelinga $P(F)$ kan ein sjå på forskjellige storleikar som karakteriserer forskjellige aspekt ved denne. Ein interessant storleik er *forventningsverdien* $\langle F \rangle$, definert som

$$\langle F \rangle \equiv \sum_F F P(F). \quad (2)$$

Forventningsverdien $\langle F \rangle$ svarer til “tyngdepunktet” i sannsynlegheitsfordelinga. Dersom ein gjer N målingar av F , med resultata F_i ($i = 1, 2, \dots, N$) ventar ein at middelveien $\bar{F}(N) \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N F_i$ vil vere nær $\langle F \rangle$ dersom N er tilstrekkeleg stor, og i grensa $N \rightarrow \infty$ vil $\bar{F}(N) \rightarrow \langle F \rangle$. Meir generelt kan ein sjå på forventningsverdien av ein funksjon $g(F)$:

$$\boxed{\langle g(F) \rangle \equiv \sum_F g(F) P(F).} \quad (3)$$

Merk at (2) kan sjåast på som spesialtilfellet $g(F) = F$ i (3).

Det er vidare av interesse å ha eit mål på kor langt frå $\langle F \rangle$, i middel, eit måleresultat for 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 dette er eit ubrukeleg mål fordi det er null:²

$$\langle F - \langle F \rangle \rangle = \langle F \rangle - \langle \langle F \rangle \rangle = \langle F \rangle - \langle F \rangle = 0. \quad (4)$$

Dette er ein konsekvens av at negative avvik kansellerer positive avvik. For å omgå dette problemet kan ein i staden bruke som mål det sokalla *standardavviket* ΔF , definert som

$$\Delta F \equiv \sqrt{\langle (F - \langle F \rangle)^2 \rangle}. \quad (5)$$

Merk at kansellasjonar mellom avvik med motsett forteikn no ikkje oppstår, fordi i ΔF bidreg alle avvik positivt sidan avviket kvadrerast før midlinga. Sidan det midla uttrykket $\langle (F - \langle F \rangle)^2 \rangle$ har dimensjon $[F]^2$, tek vi kvadratrotar for å ende opp med ein storleik som har same dimensjon som F sjølv. På engelsk kallast standardavviket “root-mean-square-deviation” (rms-avviket), eit dekkjande namn som kan illustrerast som følgjer:

$$\Delta F = \underbrace{\sqrt{\underbrace{\underbrace{\langle (F - \langle F \rangle)^2 \rangle}_{\text{deviation}}}_{\text{square}}}_{\text{mean}}}_{\text{root}}. \quad (6)$$

¹Vi snakkar her om målingar sidan vi etterkvart vil vere mest interessert i situasjonar der F er ein fysisk storleik som ein kan måle verdien av i eit eksperiment. I vårt enklare eksempel med $F = a$, antal auge i eit terningkast, betyr ei “måling” simpelthen at ein kastar terningen og ser kva a blir.

²I (4) brukte vi at $\langle F \rangle$ er ein konstant og difor kan takast utanfor midlinga: $\langle \langle F \rangle \rangle = \langle F \rangle \langle 1 \rangle = \langle F \rangle \cdot 1 = \langle F \rangle$. Dersom utleiinga (4) er litt for “slick” for din smak, er kanskje følgjande utleiing klarare: $\langle F - \langle F \rangle \rangle = \sum_F (F - \langle F \rangle) P(F) = \sum_F F P(F) - \langle F \rangle \sum_F P(F) = \langle F \rangle - \langle F \rangle \cdot 1 = 0$.

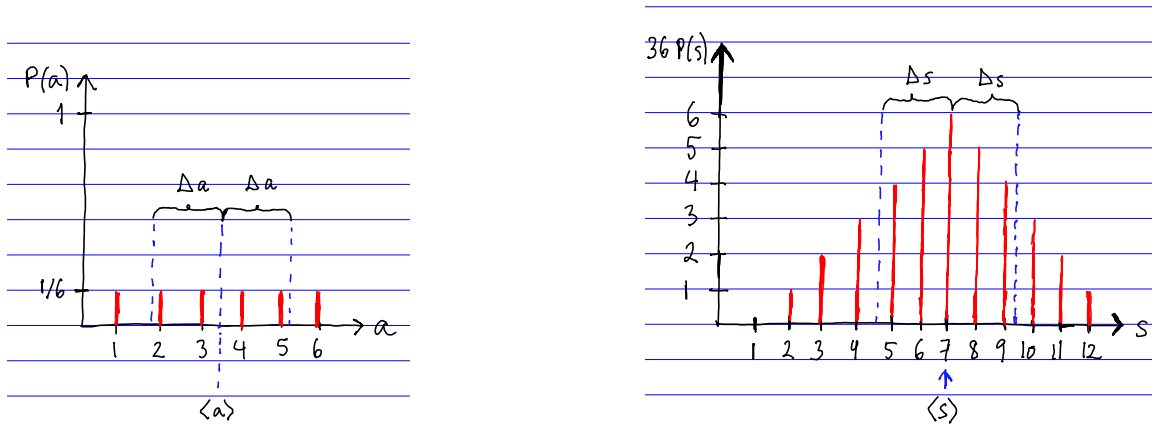


Figure 1: To eksempel på diskrete sannsynlegheitsfordelingar. Til venstre: Sannsynlegheitsfordeling $P(a)$ for a i auge i eit terningkast. Til høgre: Sannsynlegheitsfordeling $P(s)$ for summen s av auge i to terningkast. Forventningsverdiar og standardavvik til den aktuelle variabelen (hhv. a og s) er også indikerte.

Ved å bruke at

$$(\Delta F)^2 = \langle (F - \langle F \rangle)^2 \rangle = \langle F^2 - 2F\langle F \rangle + \langle F \rangle^2 \rangle = \langle F^2 \rangle - 2\langle F \rangle^2 + \langle F \rangle^2 = \langle F^2 \rangle - \langle F \rangle^2, \quad (7)$$

kan ein alternativt skrive standardavviket ΔF som

$$\Delta F = \sqrt{\langle F^2 \rangle - \langle F \rangle^2}. \quad (8)$$

For praktiske utrekningar er dette uttrykket nyttigare enn definisjonen (5), sidan det tillet ein å finne ΔF ved å kun rekne ut éin ny storleik, nemleg $\langle F^2 \rangle$, i tillegg til forventningsverdien $\langle F \rangle$.

La oss ta nokre eksempel som involverer terningkast, sidan dette er noko alle er kjende med.

Eksempel 1: Auge for 1 terningkast. Det enklaste eksempelet er kast av 1 terning. Antalet auge a kan ta dei 6 verdiane $\{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$. La $P(a)$ vere sannsynlegheiten for å få a auge. La oss anta ein ideell terning, slik at alle verdiane av a er like sannsynlege, dvs. $P(a) = P$ uavhengig av a (sannsynlegheitsfordelinga $P(a)$ seiest difor å vere *uniform*). Set vi dette inn i (1) får vi $P \sum_{a=1}^6 1 = P \cdot 6 = 1$, dvs. $P(a) = 1/6$. Forventningsverdien til a blir

$$\langle a \rangle = \sum_{a=1}^6 aP(a) = \frac{1}{6}(1 + 2 + 3 + 4 + 5 + 6) = \frac{21}{6} = 3.5. \quad (9)$$

For å finne standardavviket Δa treng vi også forventningsverdien til a^2 :

$$\langle a^2 \rangle = \sum_{a=1}^6 a^2 P(a) = \frac{1}{6}(1^2 + 2^2 + 3^2 + 4^2 + 5^2 + 6^2) = \frac{91}{6}. \quad (10)$$

Standardavviket blir då

$$\Delta a = \sqrt{\langle a^2 \rangle - \langle a \rangle^2} = \sqrt{91/6 - 3.5^2} \approx 1.71. \quad (11)$$

Sannsynlegheitsfordelinga $P(a)$ er plotta i Fig. 1(venstre plott), og $\langle a \rangle$ og Δa er også indikerte.

Eksempel 2: Sum av auge for 2 terningkast. Vi ser på følgjande “eksperiment”: Kast ein terning to gonger. Utfallet av dette eksperimentet kan skrivast (a_1, a_2) der a_1 er antal auge i første kast og a_2 er antal auge i andre kast. Summen av auge er $s = a_1 + a_2$. Ein ser lett at dei mogelege verdiane av s er $\{2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12\}$. Kva er sannsynlegheiten $P(s)$ for at eit slikt eksperiment gir verdien s for summen av auge? For å finne $P(s)$ set vi opp ein tabell som viser alle mogelege utfall (a_1, a_2) av

eit eksperiment og verdien s for kvart utfall (s er talet i posisjon (a_1, a_2) i tabellen). Det totale antalet moglege utfall er $N = 6 \cdot 6 = 36$.

Sidan alle utfall (a_1, a_2) er like sannsynlege, kan vi finne $P(s)$ som $P(s) = N(s)/N$, der $N(s)$ er antalet utfall med sum s . Frå tabellen finn vi ved teljing at $N(s) = 6 - |s - 7|$, som gir

$$P(s) = \begin{cases} \frac{6-|s-7|}{36} & \text{for } s = \{2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12\} \\ 0 & \text{ellers} \end{cases} \quad (12)$$

Fordelinga er ikkje-uniform og symmetrisk omkring $s = 7$. La oss sjekke at (1) er oppfylt:

$a_1 \backslash a_2$	1	2	3	4	5	6
1	2	3	4	5	6	7
2	3	4	5	6	7	8
3	4	5	6	7	8	9
4	5	6	7	8	9	10
5	6	7	8	9	10	11
6	7	8	9	10	11	12

$$\sum_s P(s) = \frac{1}{36} [2(1 + 2 + 3 + 4 + 5) + 6] = \frac{36}{36} = 1. \quad (13)$$

Forventningsverdien $\langle s \rangle$ er

$$\langle s \rangle = \sum_{s=2}^{12} s P(s) = \frac{1}{36} [(2+12) \cdot 1 + (3+11) \cdot 2 + (4+10) \cdot 3 + (5+9) \cdot 4 + (6+8) \cdot 5 + 7 \cdot 6] = \frac{252}{36} = 7. \quad (14)$$

Vidare blir

$$\begin{aligned} \langle s^2 \rangle &= \sum_{s=2}^{12} s^2 P(s) = \frac{1}{36} [(4 + 144) \cdot 1 + (9 + 121) \cdot 2 + (16 + 100) \cdot 3 + (25 + 81) \cdot 4 \\ &\quad + (36 + 64) \cdot 5 + 49 \cdot 6] = \frac{1974}{36} \approx 54.8333 \end{aligned} \quad (15)$$

som gir standardavviket

$$\Delta s = \sqrt{\langle s^2 \rangle - \langle s \rangle^2} \approx \sqrt{54.8333 - 49} \approx 2.42. \quad (16)$$

Sannsynlegheitsfordelinga $P(s)$ er plotta i Fig. 1(høgre plott), og $\langle s \rangle$ og Δs er også indikerte.

Nokre kommentarar:

- I begge desse eksempla ligg forventningsverdien til variabelen (som er hhv. a og s) midt i sannsynlegheitsfordelinga for variabelen. Dette er ein konsekvens av at sannsynlegheitsfordelinga er symmetrisk i desse eksempla. Dersom sannsynlegheitsfordelinga ikkje er symmetrisk vil forventningsverdien generelt ikkje liggje midt i fordelinga.
- I eksempel 1 er $\langle a \rangle = 3.5$, ein verdi som a sjølv ikkje kan ta (du kan ikkje kaste ein terning og få 3.5 auge). Dette illustrerer at generelt treng ikkje $\langle F \rangle$ vere lik ein mogleg verdi for F .
- I eksempel 2 er $\langle s \rangle$ lik den mest sannsynlege verdien for s (dvs. den verdien av s som maksimerer $P(s)$). Dette er ein konsekvens av at i dette eksempelet er sannsynlegheitsfordelinga $P(s)$ (i) symmetrisk og (ii) maksimal i midtpunktet. Men for generelle sannsynlegheitsfordelingar $P(F)$ er det ingen samanheng mellom forventningsverdien $\langle F \rangle$ og verdien av F som maksimerer $P(F)$. Merk også at det er fullt mogleg at $\langle F \rangle$ t.d. kan vere lik den *minst* sannsynlege verdien av F . Dette vil f.eks. vere tilfelle dersom $P(F)$ er symmetrisk og minimal i midtpunktet.

Vi har så langt sett på diskrete variablar F . Dersom F i staden kan ta verdier i eit kontinuum kallast den ein *kontinuerleg* variabel. Eit eksempel er posisjonen til ein partikkel. For kontinuerlege variablar gir det ikkje mening å snakke om sannsynlegheiten for at F kan ta ein viss verdi, i staden kan ein berre snakke om sannsynlegheiten for at F kan ta ein verdi i eit visst intervall. Ein definerer då $P(F)dF$ som sannsynlegheiten for at F tek ein verdi i det infinitesimale intervallet mellom F og $F + dF$. For kontinuerlege variablar er altså funksjonen $P(F)$ ikkje ein sannsynlegheit, men ein sannsynlegheits*tettleik*. Analogien til (1) for kontinuerlege variablar blir

$$\boxed{\int P(F)dF = 1} \quad (17)$$

der integralet går over alle intervall F kan ta verdier i. Uttrykket for forventningsverdier blir tilsvarende modifisert i forhold til det diskrete tilfellet (3):

$$\langle g(F) \rangle = \int g(F)P(F)dF. \quad (18)$$

Ved å anvende denne formelen på hhv. $g(F) = F$ og $g(F) = F^2$ får ein $\langle F \rangle = \int FP(F)dF$ og $\langle F^2 \rangle = \int F^2P(F)dF$, som kan brukast til å finne standardavviket ΔF frå (8).

Merk at $\langle g(F) \rangle$ har same dimensjon som $g(F)$. Når du har gjort ein utrekning av ein forventningsverdi $\langle g(F) \rangle$ er det ein god vane å sjekke at svaret har rett dimensjon! Når F er ein diskret variabel, er $P(F)$ ein sannsynlegheit og dermed dimensjonslaus. Når F er kontinuerleg er $P(F)$ ein sannsynlegheitstettleik med dimensjon $[F]^{-1}$ (her står $[F]$ for dimensjonen til F) slik at sannsynlegheiten $P(F)dF$ er dimensjonslaus.

2 Fysiske storleikar (observablar) i kvantemekanikk

Ein fysisk målbar storleik for ein partikkel, f.eks. posisjon (x), bevegelsesmengd (p), og energi (E), blir i kvantemekanikk ofte kalla ein fysisk *observabel*. Eit naturleg spørsmål er: Kva er verdien av ein fysisk observabel F ved tida t , når systemet er i tilstanden gitt av bølgefunksjonen $\Psi(x, t)$?

For ein generell tilstand $\Psi(x, t)$ og ein generell observabel F er verdien av observabelen i tilstanden ikkje bestemt (den eksisterer rett og slett ikkje) før ein gjer ei måling av observabelen. La oss difor sjå på slike målingar. La oss anta at vi har eit visst antal identiske system, alle i same tilstand $\Psi(x, t)$, og at ved tida t gjer vi ei måling av observabelen F i kvart system. Ein vil då typisk få forskjellige måleresultat i dei forskjellige systema.³ Dette er ein konsekvens av at bølgefunksjonen $\Psi(x, t)$ gir opphav til ein sannsynlegheitsfordeling $P(F, t)$ for observabelen F . Dersom F kun kan ta diskrete verdier, som f.eks. i tilfellet $F = E$ (energi) for partikkel i boks, er $P(F, t)$ sannsynlegheiten for at ei måling av observabelen ved tida t gir måleresultat F . Dersom F kan ta eit kontinuerleg sett verdier, er $P(F, t)$ ein sannsynlegheitstettleik, og $P(F, t)dF$ 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 $F = x$; då er $P(x, t) = |\Psi(x, t)|^2$. Funksjonen $P(F, t)$ vil ha forskjellig form for forskjellige observablar, men for alle observablar er den unikt bestemt av tilstanden $\Psi(x, t)$.

I dei neste avsnitta skal vi forklare korleis ein kan rekne ut forventningsverdien $\langle F \rangle$ og standardavviket ΔF for målingar av observabelen F i ein gitt tilstand. I kvantemekanikk blir standardavviket ΔF også kalla *uvissa* til F . For det generelle tilfellet vi hittil har diskutert vil *uvissa* $\Delta F > 0$.

Dersom $\Delta F = 0$ har vi ein “utypisk” situasjon som ikkje er dekkja av diskusjonen over, som var for ein generell tilstand og ein generell observabel. At $\Delta F = 0$ betyr at sannsynlegheitsfordelinga $P(F)$ er “skarp” ved ein viss verdi av F . Kallar vi denne verdien F_0 har vi då $P(F) = 0$ for alle $F \neq F_0$. I ein slik tilstand vil ein alltid få same måleresultat $F = F_0$ når ein måler observabelen. Vi seier då at F er skarpt bestemt i den tilstanden. Eit døme på denne situasjonen er stasjonære tilstander for observabelen energi: I ei stasjonær tilstand vil ei måling av energien alltid gi same resultat E (som er gitt av parameteren E i tidsavhengigheita $e^{-iEt/\hbar}$ av den stasjonære tilstanden), slik at *uvissa* $\Delta E = 0$. Energien er altså skarpt bestemt i ein stasjonær tilstand. (Men andre observablar er generelt ikkje skarpt bestemte i stasjonære tilstander, dvs. dei har *uviss* som er større enn 0).

3 Forventningsverdi og standardddavvik (uvisse) for posisjon

Vi har lært tidlegare at $|\Psi(x, t)|^2 dx$ er sannsynlegheiten for at ei måling av posisjonen til partikkelen ved tida t gir eit måleresultat i det infinitesimale posisjonsintervallet mellom x og $x + dx$. Dette betyr

³Kva verdier som er generelt moglege måleresultat for ein observabel F er eit viktig spørsmål vi skal komme tilbake til seinare.

at sannsynlegheitstettleiken for posisjonen x er $P(x, t) = |\Psi(x, t)|^2$. Likning (17) blir då

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi(x, t)|^2 = 1} \quad (19)$$

som er normeringskravet til bølgefunksjonen. Dersom tilstanden $\Psi(x, t)$ er stasjonær, dvs. på forma $\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$, blir $P(x, t) = |\psi(x)|^2$, dvs. uavhengig av t , men for ein generell tilstand vil sannsynlegheitstettleiken P altså også endre seg med tida i tillegg til å vere ein funksjon av posisjonsvariabelen x . Vi finn då forventningsverdien $\langle x \rangle$ ved tida t ved å bruke (18) med $g(x) = x$ og $P(x, t) = |\Psi(x, t)|^2$. Dette gir⁴

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx x |\Psi(x, t)|^2. \quad (20)$$

Vidare finn vi, ved å setje $g(x) = x^2$ i (18), at forventningsverdien $\langle x^2 \rangle$ ved tida t blir⁵

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 |\Psi(x, t)|^2. \quad (21)$$

Standardavviket (uvisse) Δx for posisjonen ved tida t kan då finnast på vanleg vis som $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$.

4 Forventningsverdi og standardavvik (uvisse) for bevegelsesmengd

Det er også av interesse å finne forventningsverdien og standardavviket (uvisse) for andre fysiske observablar, som f.eks. bevegelsesmengd. Det er t.d. mogeleg å finne forventningsverdiane $\langle p \rangle$ og $\langle p^2 \rangle$ (og dermed også uvisse $\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}$) vha. uttrykk som $\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp p P(p, t)$ og $\langle p^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp p^2 P(p, t)$ der $P(p, t)$ er sannsynlegheitstettleiken for bevegelsesmengda ved tida t . Men for å kunne evaluere desse integrala må vi vite kva funksjonen $P(p, t)$ er. Den er bestemt av tilstanden $\Psi(x, t)$, men av pedagogiske grunnar er det ikkje hensiktsmessig å gå inn på kva $P(p, t)$ er enno (vi kjem tilbake til dette seinare i diskusjonen av det sokalla målepostulatet). I staden skal vi no sjå at det går an å finne alternative formlar for forventningsverdier som $\langle p \rangle$ og $\langle p^2 \rangle$ som er uttrykte *direkte* vha. tilstanden $\Psi(x, t)$ i staden for å måtte gå vegen om $P(p, t)$. Men desse formlane ser nok litt “rare” ut når ein ser dei for første gong, så i staden for å trekkje dei opp av ein hatt og berre be dykk om å akseptere dei, er det kanskje betre å “dedusere” dei vha. litt ekstra informasjon, nemleg at

$$\langle p \rangle = m \frac{d\langle x \rangle}{dt}. \quad (22)$$

Denne relasjonen burde få deg til å sperre opp augene litt, pga. den slående likskapen til relasjonen $p = m \frac{dx}{dt}$ i klassisk mekanikk (dvs. uttrykket $p = mv$ for bevegelsesmengd, sidan $v = dx/dt$ i klassisk mekanikk)! På den andre sida: ein burde ikkje vere for overraska over at visse likskapar og samanhengar mellom klassisk mekanikk og kvantemekanikk eksisterer, sidan vi veit at vi effektivt kan bruke klassisk mekanikk til å beskrive makroskopiske lekamar, sjølv om lekamen består av partiklar som adlyder kvantemekaniske lover.

Strategien er no som følgjer: Vi reknar ut $d\langle x \rangle/dt$ ved å tidsderivere uttrykket (20) for $\langle x \rangle$. Dette gir, via (22), eit uttrykk for $\langle p \rangle$. I denne utrekninga bruker ein den tidsavhengige Schrödingerlikninga (TASL) og at $\Psi(x, t)$ går tilstrekkjeleg raskt mot 0 når $x \rightarrow \pm\infty$ (dette er ein naudsynt eigenskap dersom $\Psi(x, t)$ skal kunne tilfredsstille normeringskravet (19)); resten er matematikk. Ein finn (sjå Appendiks A.1 for detaljane)

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, t) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(x, t). \quad (23)$$

⁴I dette og seinare uttrykk skriv eg ofte integrasjonsmålet (dvs. dx i dette tilfellet) like etter integralteiknet $\int$ i staden for på slutten av integralet. Plasseringa av integrasjonsmålet har inga betydning, m.a.o. $\int f(x) dx = \int dx f(x)$.

⁵I (20) og (21) burde ein strengt tatt ha skrive venstresida som hhv. $\langle x \rangle(t)$ og $\langle x^2 \rangle(t)$ for å presisere at desse forventningsverdiane er generelt tidsavhengige, som reflektert i t -avhengigheita på høgresida av likningane (unntaket er, som nemnt over, dersom tilstanden $\Psi(x, t)$ er stasjonær, men det er jo ikkje generelt tilfelle). Men det er vanleg å ikkje eksplisitt indikere ei eventuell tidsavhengigheit i forventningsverdiane; tidsavhengigheita er altså underforstått.

Det er interessant å samanlikne dette uttrykket med uttrykket (20) for $\langle x \rangle$, som kan omskrivast

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, t) x \Psi(x, t). \quad (24)$$

Merk at både i (23) og (24) har høgresidene forma $\int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, t)(\dots)\Psi(x, t)$; den einaste skilnaden er at i uttrykket for $\langle x \rangle$ er $(\dots) = x$ mens i uttrykket for $\langle p \rangle$ er $(\dots) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$. På same vis kan uttrykket (21) omskrivast som

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, t) x^2 \Psi(x, t). \quad (25)$$

Dette er igjen på forma $\int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, t)(\dots)\Psi(x, t)$, med $(\dots) = x^2$. Altså: i $\langle x \rangle$ er $(\dots) = x$, mens i $\langle x^2 \rangle$ er $(\dots) = x^2$. Det er då ikkje urimeleg å gjette følgjande generalisering: Sidan $\langle p \rangle$ er på same form $\int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, t)(\dots)\Psi(x, t)$ men med $(\dots) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$, er også (gjettar vi) $\langle p^2 \rangle$ på same form men med $(\dots) = (\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x})^2$, som også kan skrivast $(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x})(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}) = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}$. Med andre ord,

$$\langle p^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, t) \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \Psi(x, t). \quad (26)$$

Denne gjetninga er rett! Og sidan vi no har uttrykk for både $\langle p \rangle$ og $\langle p^2 \rangle$ kan vi finne standardavviket (uvissa) Δp ved å bruke at $\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}$.

5 Heisenbergs uvisserelasjon for posisjon og bevegelsesmengd

I kvantemekanikk finst det eit teorem som seier at

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (27)$$

Med andre ord: Produktet av uvisnene i posisjon og bevegelsesmengd for ein tilstand kan ikkje vere mindre enn $\hbar/2$. Dette teoremet, som kallast Heisenbergs uvisserelasjon for posisjon og bevegelsesmengd, seier altså at det er ei fundamental begrensing i kor små uvisnene i posisjon og bevegelsesmengd kan vere i ei og same tilstand. Så dersom Δx er lite må Δp vere tilsvarende stor for å tilfredsstille (27), og dersom Δp er lite må Δx vere tilsvarende stor.

6 Fysiske observablar og deira operator-representasjon

I kvantemekanikk er einkvar fysisk observabel F representert av ein matematisk *operator* $\hat{F}$ (kva dette impliserer meir konkret skal vi kome tilbake til). La oss skrive dette som $F \rightarrow \hat{F}$, der $\rightarrow$ betyr “er representert av”. “Hatten” (dvs. symbolet $\hat{}$) blir altså brukt til å indikere ein operator. For hhv. posisjon og bevegelsesmengd har vi da følgjande reglar:

$$\text{posisjon } x \rightarrow \hat{x} = x \quad (28)$$

$$\text{bevegelsesmengd } p \rightarrow \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad (29)$$

Andre fysiske observablar kan uttrykkjast som funksjonar av posisjon og bevegelsesmengd,⁶ slik at vi generelt kan skrive $F = F(x, p)$. For alle observablar F vi skal sjå på kan då den tilhøyrande operatoren $\hat{F}$ finnast ved å erstatte x og p i uttrykket for F med hhv. $\hat{x} = x$ og $\hat{p} = (\hbar/i)(\partial/\partial x)$, dvs.

$$F = F(x, p) \rightarrow \hat{F} = F(\hat{x}, \hat{p}). \quad (30)$$

Nokre viktige døme på slike observablar og deira operator-representasjon er:

⁶Vi skal seinare sjå at partiklar også kan ha eit slags eigenspinn, som imidlertid ikkje har å gjere med partikkelen sin bevegelse i rommet. Dette eigenspinnet kan difor ikkje uttrykkjast som ein funksjon av posisjon og bevegelsesmengd og er difor eit unntak frå regelen vi beskriv her.

- Kinetisk energi:

$$K = K(p) = \frac{p^2}{2m} \quad \rightarrow \quad \hat{K} = K(\hat{p}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}, \quad (31)$$

- Potensiell energi:

$$U = U(x) \quad \rightarrow \quad \hat{U} = U(\hat{x}) = U(x). \quad (32)$$

- Total energi:

$$E = K + U \quad \rightarrow \quad \boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \equiv \hat{H}.} \quad (33)$$

I det siste dømet over, merk at operatoren for totalenergien blir tradisjonelt kalla $\hat{H}$, ikkje $\hat{E}$. (H står for Hamilton⁷, og energioperatoren $\hat{H}$ blir vanlegvis kalla Hamilton-operatoren.) Merk også at den tidsavhengige Schrödingerlikninga (TASL) kan skrivast som

$$\boxed{\hat{H}\Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t)} \quad (34)$$

og den tidsavhengige Schrödingerlikninga (TUSL) som

$$\boxed{\hat{H}\psi(x) = E\psi(x).} \quad (35)$$

7 Forventningsverdi og usikkerheit for generelle fysiske observablar

Forventningsverdien $\langle F \rangle$ til ein observabel F i tilstanden $\Psi(x, t)$ er gitt som

$$\langle F \rangle = \int dx \Psi^*(x, t) \hat{F} \Psi(x, t) \quad (36)$$

der $\hat{F}$ er operatoren som representerer observabelen F . Meir generelt er forventningsverdien av ein funksjon $g(F)$ av observabelen F gitt som

$$\boxed{\langle g(F) \rangle = \int dx \Psi^*(x, t) g(\hat{F}) \Psi(x, t).} \quad (37)$$

Merk at (36) er spesialtilfellet $g(F) = F$ av (37). Set vi i staden $g(F) = F^2$ i (37) får vi

$$\langle F^2 \rangle = \int dx \Psi^*(x, t) \hat{F}^2 \Psi(x, t) \quad (38)$$

der $\hat{F}^2 \equiv \hat{F}\hat{F}$, dvs. operatoren $\hat{F}$ anvendt to gonger etter kvarandre. Vha. (36) og (38) kan ein då rekne ut uvissa $\Delta F = \sqrt{\langle F^2 \rangle - \langle F \rangle^2}$.

Nokre kommentarar:

- Uttrykka (24), (25), (23) og (26) som vi tidlegare har funne for hhv. $\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$, $\langle p \rangle$ og $\langle p^2 \rangle$ er også det ein får dersom ein set inn $F = x$ (dvs. $\hat{F} = x$) og $F = p$ (dvs. $\hat{F} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$) i dei meir generelle uttrykka (36) og (38). Så desse generelle uttrykka er konsistente med alt vi har funne tidlegare!
- I uttrykka (24) og (25) for $\langle x \rangle$ og $\langle x^2 \rangle$ kan ein flytte funksjonane x og x^2 sidan desse kun multipliserer funksjonen $\Psi(x, t)$ og dermed er plasseringa deira i integralet likegyldig. Dette gir dei alternative uttrykka (20) og (21). I kontrast kan vi i uttrykka (23) og (26) for $\langle p \rangle$ og $\langle p^2 \rangle$ ikkje flytte differensialoperatorane $\partial/\partial x$ og $\partial^2/\partial x^2$, fordi differensialoperatorane verkar på funksjonen

⁷Etter den irske fysikaren og matematikaren Sir William Rowan Hamilton (1805-1865).

som står til høgre for dei; dersom vi endrar plasseringa til differensialoperatorane endrast også kva som står til høgre for dei og dermed endrast resultatet! Oppsummert: dersom $\hat{F}$ inneheld differensialoperatorar kan desse ikkje flyttast i integralet,⁸ men ellers kan ein flytte faktorar/ledd som ein ynskjer.

- Dersom tilstanden er stasjonær, dvs. på forma $\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$, vil tidsavhengigheitene fra $\Psi^*(x, t)$ og $\Psi(x, t)$ kansellere i (37), som difor forenkler seg til

$$\langle g(F) \rangle = \int dx \psi^*(x) g(\hat{F}) \psi(x). \quad (39)$$

M.a.o. i ei stasjonær tilstand er forventningsverdiar av fysiske observablar *tidsuavhengige*.

- (Ein kommentar som kan vere av interesse for dei som vil ha ei djupare forståing:) Ein observant student kan innvende at det generelle uttrykket (37) er ikkje på forma (3) eller (18). Dette er korrekt; i motsetning til (3) og (18) let (37) ein rekne ut forventningsverdiar *direkte* frå bølgefunksjonen $\Psi(x, t)$, *utan* å måtte gå (om)vegen om sannsynlegheitsfordelinga $P(F, t)$ for observabelen F , ei sannsynlegheitsfordeling som vi uansett ikkje har snakka om enno, bortsett frå for posisjonsobservabelen, som har $P(x, t) = |\Psi(x, t)|^2$. [Merk at uttrykka (20) og (21) for $\langle x \rangle$ og $\langle x^2 \rangle$ er faktisk på forma $\langle g(F) \rangle = \int dF g(F)P(F)$ gitt i (3).]

8 Ehrenfests teorem og samanhengen mellom kvantemekanikk og klassisk mekanikk

I kvantemekanikk gjeld følgjande likningar for tidsutviklinga til forventningsverdiane for posisjon og bevegelsesmengd:

$$\boxed{\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{\langle p \rangle}{m}}, \quad (40)$$

$$\boxed{\frac{d\langle p \rangle}{dt} = - \left\langle \frac{dU}{dx} \right\rangle} \quad (41)$$

Her er $\langle dU/dx \rangle$ gitt vha. standardformelen (37) med $\hat{F} = dU/dx$ (sidan dU/dx er ein funksjon av x), dvs. $\langle dU/dx \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, t)(dU/dx)\Psi(x, t)$. Likningsparet (40)-(41) kallast Ehrenfests teorem. Beviset for teoremet er gitt i Appendix A. Desse likningane kan vere nyttige for praktiske utrekningar. For eksempel, dersom ein allereie kjenner $\langle x \rangle$ som funksjon av tida, er det lettare å finne $\langle p \rangle$ vha. (40) enn ved å gjere ei direkte utrekning av uttrykket (23). For ei stasjonær tilstand er $\langle x \rangle$ tidsuavhengig, så $\langle p \rangle = 0$ i det tilfellet.

Vi har allereie stifta bekjentskap med likning (40) i (22) der vi også påpeika likskapen med relasjonen $p = mv$ i klassisk mekanikk. Likning (41) har også ein klassisk analog, nemleg Newtons 2. lov på forma $F = dp/dt$, der $F = -dU/dx$ er den konservative krafta gitt av den potensielle energien $U(x)$. Reint formelt kan vi få dei klassiske likningane frå dei kvantemekaniske ved å fjerne forventningsverdiklammene $\langle \text{og} \text{ } \rangle$ i (40)-(41), som altså gir

$$\frac{dx}{dt} = \frac{p}{m}, \quad (42)$$

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{dU}{dx}. \quad (43)$$

Ved å setje (42) inn i (43) ser ein at dette likningssettet (2 differensiallikningar av 1. orden i tida) er ekvivalent med Newtons 2. lov på forma $F = m d^2x/dt^2$ (1 differensiallikning av 2. orden i tida).

Sjølv om kvantemekanikk og klassisk mekanikk er veldig forskjellige teoriar med svært ulik struktur, er likskapen mellom dei kvantemekaniske likningane (40)-(41) og dei klassiske likningane (42)-(43) ein

⁸Unntaket er dei flyttingane som resulterer frå bruk av delvis integrasjon; sjå evt. Appendix A for eksempel på dette.

indikasjon på samanhengen som tross alt eksisterer mellom kvantemekanikk og klassisk mekanikk, og som tillet ein å bruke *klassiske* lover til å beskrive lekamar som består av eit makroskopisk antal partiklar som følgjer *kvantemekaniske* lover. Men vi har ikkje høve til å gå meir inn på dette her.

9 Meir om stasjonære tilstander

Vi har tidlegare diskutert løysingar til TASL på forma

$$\boxed{\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}} \quad (44)$$

der funksjonen $\psi(x)$ tilfredsstiller den tidsuavhengige Schrödingerlikninga (TUSL)

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x). \quad (45)$$

Fordi tilstandene (44) gir *tidsuavhengige* sannsynlegheitstettleikar ($|\Psi(x, t)|^2 = |\psi(x)|^2$) og forventningsverdiar ($\langle F \rangle = \int dx \psi^*(x) \hat{F} \psi(x)$) blir dei kalla *stasjonære tilstander*. Vi har også sagt tidlegare at ein partikkel i ein stasjonær tilstand har ein “skarpt definert” energi som er lik parameteren E . Dette betyr at eikvar måling av energien i den stasjonære tilstanden vil alltid gi same måleresultat, nemleg E . M.a.o. standardavviket/uvissa i energien er null: $\Delta E = 0$. La oss no vise dette. Vi har

$$\langle E \rangle = \int dx \psi^*(x) \underbrace{\hat{H}\psi(x)}_{=E\psi(x)} = E \underbrace{\int dx \psi^*(x)\psi(x)}_{=1} = E, \quad (46)$$

$$\begin{aligned} \langle E^2 \rangle &= \int dx \psi^*(x) \hat{H}^2 \psi(x) = \int dx \psi^*(x) \hat{H} \underbrace{\hat{H}\psi(x)}_{=E\psi(x)} = E \int dx \psi^*(x) \underbrace{\hat{H}\psi(x)}_{=E\psi(x)} \\ &= E^2 \underbrace{\int dx \psi^*(x)\psi(x)}_{=1} = E^2. \end{aligned} \quad (47)$$

Dermed blir $(\Delta E)^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = E^2 - E^2 = 0$, slik at

$$\boxed{\text{standardavviket (uvissa) } \Delta E = 0 \text{ i ein stasjonær tilstand.}} \quad (48)$$

I eksempelet med partikkel i boks såg vi at TUSL hadde løysingar $\psi_n(x)$ med tilhøyrande energiar E_n , og vi fann forma på desse. Vi fekk uendeleg mange løysingar ($n = 1, 2, 3, \dots$). Dette er generisk for alle system vi skal sjå på: TUSL ($\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$) har uendeleg mange løysingar. I partikkel-i-boks-systemet representerer alle løysingane *bundne tilstander*. I ei bunden tilstand går (per definisjon) sannsynlegheiten $|\psi(x)|^2 \rightarrow 0$ for $|x| \rightarrow \infty$. Bundne tilstander har diskrete energinivå; dvs. TUSL har løysing kun for bestemte, diskrete verdiar av E . Vi kan også ha system med ubundne tilstander, noko vi har sett i fri-partikkel-systemet. Men for å vere konkret antar vi no at alle tilstander i systemet er bundne. Vi skal no diskutere nokre viktige eigenskapar som settet av løysingar $\{\psi_n(x)\}$ av TUSL har.

- Dei oppfyller

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_n^*(x) \psi_m(x) = \delta_{m,n}} \quad (49)$$

der vi har definert Kroneckers delta-funksjon (“Kronecker-deltaet”)

$$\delta_{m,n} \equiv \begin{cases} 1 & m = n \\ 0 & m \neq n. \end{cases} \quad (50)$$

Likningane med $m = n$ i (49) er rett og slett normeringsbetingelsen for kvar løysing, mens likningane med $m \neq n$ seier at forskjellige løysingar er “ortogonale”. Pga. eigenskapen (49) kallast settet av funksjonane $\psi_n(x)$ ($n = 1, 2, 3, \dots$) “ortonormalt” (som er eit ord samansett av “ortogonale” og “normerte”).

- Einkvar⁹ funksjon $f(x)$ kan uttrykkjast som ein lineærkombinasjon av løysingar av TUSL:

$$f(x) = \sum_n c_n \psi_n(x). \quad (51)$$

Pga. denne eigenskapen kallast settet av løysingar av TUSL *komplett*. I (51) er $\{c_m\}$ eit sett av numeriske koeffisientar som kan finnast ved å multiplisere (51) med $\psi_m^*(x)$ og så integrere over x . Ved å byte om rekkjefølgja på summasjonen og integrasjonen på høgresida gir dette, for ein vilkårleg m ,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_m^*(x) f(x) = \sum_n c_n \underbrace{\int dx \psi_m^*(x) \psi_n(x)}_{=\delta_{nm}} = \sum_n c_n \delta_{nm} = c_m. \quad (52)$$

Merk at summen som følgjer etter å ha brukt ortonormalitetslikninga (49) er veldig enkel: pga. faktoren δ_{nm} er bidraget null for alle verdiar av n som er forskjellig frå m , mens bidraget frå $n = m$ er $c_m \delta_{mm} = c_m \cdot 1 = c_m$. Dermed får vi altså

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_n^*(x) f(x). \quad (53)$$

Som eit konkret døme på ortonormaliteten (49) kan vi ta partikkel-i-boks systemet, der vi tidlegare fann at $\psi_n(x) = \sqrt{2/L} \sin(n\pi x/L)$ for $0 \leq x \leq L$ og 0 ellers. Ein kan vise at

$$\frac{2}{L} \int_0^L dx \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) = \delta_{m,n} \quad (54)$$

som er (49) for dette systemet. I Appendix B diskuterer vi ein analogi til (49), (51) og (53) for vanlege vektorar som kanskje kan vere nyttig for å få ei meir intuitiv forståing.

10 Korleis finne $\Psi(x, t)$, gitt $\Psi(x, 0)$

Eit viktig problem i mekanikk er: Gitt tilstanden til systemet ved ei viss initiell tid t_0 , kva er tilstanden ved ei vilkårleg seinare tid $t > t_0$? I klassisk mekanikk er tilstanden til ein partikkel i 1 dimensjon ved ei bestemt tid t gitt ved posisjonen $x(t)$ og hastigheiten $v(t)$, ekvivalent $x(t)$ og $p(t) = mv(t)$. For å finne $x(t)$ og $p(t)$ integrerer ein Newtons 2. lov $m d^2x/dt^2 = -dU/dx$ med initialbetingelsane $x(t_0)$ og $p(t_0)$ (sidan N2 er 2. orden i tida trengst 2 initialbetingelsar). I kvantemekanikk derimot er tilstanden til ein partikkel i 1 dimensjon ved ei bestemt tid t gitt av bølgefunksjonen $\Psi(x, t)$. For å finne $\Psi(x, t)$ integrerer ein den tidsavhengige Schrödingerlikninga (TASL) $i\hbar \partial \Psi(x, t) / \partial t = \hat{H} \Psi(x, t)$ med initialbetingelsen $\Psi(x, t_0)$ (sidan TASL er 1. orden i tida trengst kun 1 initialbetingelse). Sidan nullpunktet for tidsvariabelen kan veljast fritt set vi $t_0 = 0$ heretter.

Dersom vi kjenner dei stasjonære tilstandene $\Psi_n(x, t)$ for systemet, dvs. dei ortonormale funksjonane $\psi_n(x)$ og dei tilhøyrande energiane E_n som løysar TUSL, er uttrykket for $\Psi(x, t)$ gitt $\Psi(x, 0)$ forholdsvis enkelt:

$$\Psi(x, t) = \sum_n c_n \Psi_n(x, t) \quad \left(= \sum_n c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} \right) \quad (55)$$

$$c_n = \int dx \psi_n^*(x) \Psi(x, 0) \quad (56)$$

Bevis: Ein kan uttrykkje $\Psi(x, 0)$ vha. løysingane $\psi_n(x)$ av TUSL, jf. (51): $\Psi(x, 0) = \sum_n c_n \psi_n(x)$. For å finne koeffisientane c_n bruker vi difor (53) med $f(x) = \Psi(x, 0)$; det gir likning (56). For ein generell $t \geq 0$

⁹Meir presist: Einkvar funksjon $f(x)$ som kan vere ein bølgefunksjon for systemet ved ei gitt tid. For “partikkel i boks”-systemet vil det seie at funksjonen $f(x)$ må vere normaliserbar og vere lik 0 utanfor brønnen.

blir då løysinga (55). Det er ikkje vanskeleg å sjå at (55) er ei løysing av TASL (kvar funksjon $\Psi_n(x, t)$ er ei løysing av TASL, og sidan TASL er lineær og homogen er ein lineærkombinasjon av løysingar også ei løysing) og den tilfredsstillar også initialbetingelsen ved $t = 0$.

11 Målingar av energien

Vi skal sjå at koeffisientane $\{c_n\}$ i (55)-(56) har følgjande tolking:

$$\boxed{|c_n|^2 \text{ er sannsynlegheiten for at ei måling av energien i tilstanden } \Psi(x, t) \text{ gir resultatet } E_n.} \quad (57)$$

(I tillegg er sannsynlegheiten for å måle andre verdier for energien enn ein av verdiane E_n lik 0.) For at denne tolkinga skal vere rett må (i) $|c_n|^2 \geq 0$, (ii) $\sum_n |c_n|^2 = 1$, (iii) $\langle E \rangle = \sum_n E_n |c_n|^2$. (i) og (ii) er nødvendige for at $\{|c_n|^2\}$ skal kunne tolkast som sannsynlegheiter, mens (iii) er nødvendig for at $\{|c_n|^2\}$ skal kunne tolkast som sannsynlegheiter for å måle *energiane* $\{E_n\}$. (i) er openbart oppfylt. (ii) følgjer frå normeringa av bølgefunksjonen, som vi no skal vise. Bølgefunksjonen $\Psi(x, t)$ må vere normert for alle tider t . Det er imidlertid nok å normere den for initialtida $t = 0$, fordi det kan visast at TASL sørgjer for at den forblir normert også ved alle seinare tider. La oss difor sjå på normeringsbetingelsen for $t = 0$:

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi(x, 0)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, 0) \Psi(x, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\sum_n c_n^* \psi_n^*(x) \right) \left(\sum_m c_m \psi_m(x) \right) \\ &= \sum_n \sum_m c_n^* c_m \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_n^*(x) \psi_m(x)}_{=\delta_{mn}} = \sum_n \sum_m c_n^* c_m \delta_{mn} = \sum_n c_n^* c_n = \sum_n |c_n|^2. \end{aligned} \quad (58)$$

M.a.o.

$$\boxed{\sum_n |c_n|^2 = 1} \quad (59)$$

som vi skulle vise. La oss no sjå på forventningsverdien til energien, $\langle E \rangle$. Vi har

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, t) \hat{H} \Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\sum_n c_n^* \psi_n^*(x) e^{iE_n t/\hbar} \right) \hat{H} \left(\sum_m c_m \psi_m(x) e^{-iE_m t/\hbar} \right) \\ &= \sum_n \sum_m c_n^* c_m e^{i(E_n - E_m)t/\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_n^*(x) \underbrace{\hat{H} \psi_m(x)}_{=E_m \psi_m(x)} \\ &= \sum_n \sum_m c_n^* c_m e^{i(E_n - E_m)t/\hbar} E_m \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_n^*(x) \psi_m(x)}_{=\delta_{mn}} \\ &= \sum_n \sum_m c_n^* c_m e^{i(E_n - E_m)t/\hbar} E_m \delta_{mn} = \sum_n c_n^* c_n e^{i(E_n - E_n)t/\hbar} E_n, \end{aligned} \quad (60)$$

dvs.

$$\boxed{\langle E \rangle = \sum_n E_n |c_n|^2} \quad (61)$$

som skulle visast. Sidan koeffisientane c_n er tidsuavhengige, følgjer det frå (61) at også $\langle E \rangle$ er tidsuavhengig, dvs.

$$\boxed{\langle E \rangle \text{ er bevart.}} \quad (62)$$

Dette resultatet er den kvantemekaniske analogien til energibevaringa i det klassiske tilfellet. Som for Ehrenfests teorem (40)-(41) ser vi at det klassiske resultatet kan formelt fåast frå den kvantemekaniske analogien ved å fjerne forventningsverdisymbolet $\langle \dots \rangle$ rundt den aktuelle storleiken.

Tilstanden $\Psi(x, t)$ i (55) er generelt ikkje ei stasjonær tilstand, så med unntak av $\langle E \rangle$ vil forventningsverdiar (som t.d. $\langle x \rangle$ og $\langle p \rangle$) generelt vere tidsavhengige. Det er kun dersom alle koeffisientar c_n utanom ein er 0 at tilstanden er stasjonær.

Eksempel: Anta at ein partikkel i boks har følgjande bølgefunksjon ved $t = 0$:

$$\Psi(x, 0) = \begin{cases} Ax(L - x) & \text{for } 0 \leq x \leq L, \\ 0 & \text{ellers} \end{cases} \quad (63)$$

Her er konstanten A ikkje oppgitt, men den kan bestemmast frå normeringskravet:

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi(x, 0)|^2 = |A|^2 \int_0^L dx x^2 (L - x)^2 = |A|^2 \int_0^L dx (L^2 x^2 - 2Lx^3 + x^4) \\ &= |A|^2 \left[L^2 \frac{1}{3} x^3 - 2L \frac{1}{4} x^4 + \frac{1}{5} x^5 \right] \Big|_0^L = |A|^2 L^5 \left[\frac{1}{3} - \frac{1}{2} + \frac{1}{5} \right] = |A|^2 \frac{L^5}{30} \Rightarrow A = \sqrt{\frac{30}{L^5}}, \end{aligned} \quad (64)$$

der vi valde A reell. Bølgefunksjonen ved ei seinare tid kan iflg. (55) og (56) skrivast vha. dei stasjonære tilstandene for dette systemet som

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} \quad (65)$$

der koeffisientane

$$\begin{aligned} c_n &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_n^*(x) \Psi(x, 0) = \int_0^L dx \overbrace{\sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)}^{\psi_n^*(x)} \cdot \overbrace{\sqrt{\frac{30}{L^5}} x(L - x)}^{\Psi(x, 0)} \\ &= (\text{mellomrekningar...}) = \frac{4\sqrt{15}}{(n\pi)^3} [\cos(0) - \cos(n\pi)] = \begin{cases} \frac{8\sqrt{15}}{(n\pi)^3} & \text{for } n = 1, 3, 5, \dots \\ 0 & \text{for } n = 2, 4, 6, \dots \end{cases} \end{aligned} \quad (66)$$

Ved å setje inn dette resultatet, samt uttrykka for energiar og bølgefunksjonar for partikkel i boks, blir¹⁰

$$\Psi(x, t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \frac{8\sqrt{15}}{\pi^3} \sum_{n=1,3,5,\dots}^{\infty} \frac{1}{n^3} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) e^{-i\hbar^2 \pi^2 n^2 t/(2mL^2)}. \quad (67)$$

La oss sjekke at (59) er oppfylt:

$$\sum_n |c_n|^2 = \left(\frac{8\sqrt{15}}{\pi^3} \right)^2 \underbrace{\sum_{n=1,3,5,\dots}^{\infty} \frac{1}{n^6}}_{\pi^6/960} = 1. \quad (68)$$

(Her slo eg opp summen.) Dersom vi måler energien i tilstanden $\Psi(x, t)$ er $|c_n|^2$ sannsynlegheiten for å måle verdien E_n . Vi ser då frå (66) at det er null sannsynlegheit for å måle verdiane E_n som tilhøyrer like n , mens for verdiane E_n for odde n avtek sannsynlegheiten svært raskt med n (som $1/n^6$), med $|c_1|^2$ veldig nær 1: $|c_1|^2 = (8\sqrt{15})^3 \approx 0.99855 \dots$. I denne tilstanden er det difor overveldande sannsynleg at ei måling av energien vil gi den lågast mogelege verdien E_1 .¹¹

¹⁰Merk at det er kun odde verdiar av n som bidreg. Grunnen har med symmetri å gjere. Bølgefunksjonen $\Psi(x, 0)$ er symmetrisk om midtpunktet i brønnen. Det er også funksjonane $\psi_n(x)$ for n odde, mens funksjonane for n like er antisymmetriske. Dermed blir integralet (56) lik 0 for n like (fordi integranden er ein odde funksjon (produktet av ein like og ein odde funksjon blir ein odde funksjon) om midtpunktet av integrasjonsområdet).

¹¹At $|c_1|^2$ er så dominant i dette eksempelet kan også forståast grafisk ved å samanlikna funksjonane $\psi_1(x)$ og $\Psi(x, 0)$, som er veldig like. Integralet (56) for $n = 1$ blir dermed nær 1. Merk ellers at det er kun absoluttverdien av dette integralet som er av betydning for $|c_n|^2$, så om vi t.d. hadde valt A negativ ville vi ha fått same svar for $|c_n|^2$.

Til slutt ser vi på forventningsverdien $\langle E \rangle$:

$$\langle E \rangle = \sum_n E_n |c_n|^2 = \sum_{n=1,3,5,\dots} \left(\frac{8\sqrt{15}}{\pi^3} \right)^2 \left(\frac{1}{n^3} \right)^2 \cdot \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 = \frac{\hbar^2}{2mL^2} \frac{(8\sqrt{15})^2}{\pi^4} \underbrace{\sum_{n=1,3,5,\dots} \frac{1}{n^4}}_{\pi^4/96} = \frac{5\hbar^2}{mL^2} \quad (69)$$

der eg igjen slo opp summen. Er svaret rimeleg? Merk at $\langle E \rangle$ må vere større enn E_1 sidan også tilstander med $n > 1$ bidreg i summen. Men $\langle E \rangle$ kan ikkje vere mykje større enn E_1 fordi tilstander med $n > 1$ har så lita vekt her (gitt av $|c_n|^2$). Dette stemmer med svaret, som kan skrivast $\langle E \rangle = (10/\pi^2)E_1 \approx 1.013 E_1$, dvs. berre ørlite grann større enn E_1 .

12 Eigenfunksjonar og eigenverdiar til operatorar

Vi har hittil diskutert målingar av dei to observablane posisjon og energi. Vi har lært at sannsynlegheiten for å måle posisjonen til å ha ein verdi mellom x og $x + dx$ (med dx eit infinitesimalt lengdeintervall) er lik $|\Psi(x, t)|^2 dx$. Vi har vidare lært at i system med kun diskrete energinivå E_n er det kun desse diskrete verdiane som er mogelege måleresultat for energien, og at sannsynlegheiten for å måle verdien E_n er lik $|\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_n^*(x) \Psi(x, 0)|^2$ (dette er uttrykket for $|c_n|^2$ frå (56)).

Men posisjon og energi er ikkje dei einaste observablane ein kan måle, det finst også andre, som t.d. bevegelsesmengd. Det er difor naturleg å spørje seg kva som er dei mogelege resultatene ein kan få når ein måler ein generell observabel F , og kva som er sannsynlegheiten for å få dei forskjellige måleresultatene i ein gitt tilstand. Når ein ser på den betydelege skilnaden i uttrykka over for sannsynlegheitene for posisjons- og energimålingar, kan ein kanskje tru at uttrykket for slike sannsynlegheiter avheng sterkt av kva observabel vi ser på. Men som vi skal sjå er den skilnaden til ein viss grad kun tilsynelatande; det finst nemleg ein underliggjande struktur i teorien som gjer at ein kan gi generelle uttrykk for desse sannsynlegheitene som tek essensielt same form for alle observablar. Denne strukturen involverer såkalla eigenfunksjonar og eigenverdiar til operatorar, som vi difor må lære litt om først.

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

$$\boxed{\hat{F}\Theta_\alpha(x) = f_\alpha \Theta_\alpha(x)} \quad (\text{ein slik likning for kvar } \alpha) \quad (70)$$

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. Eigenverdiene f_α er *reelle konstanter*. Til kvar eigenfunksjon $\Theta_\alpha(x)$ høyrer det ein eigenverdi f_α . Subskriptet α er ein "merkelapp" som vi bruker for å identifisere kva eigenfunksjon/eigenverdi vi snakkar om. I systema vi skal sjå på har alle operatorar $\hat{F}$ uendeleg mange eigenfunksjonar og tilhøyrande eigenverdiar. 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 det ein "typisk" får når ein verkar på ein funksjon med ein operator er ikkje proporsjonalt med den opprinnelege funksjonen! F.eks. dersom vi verkar på funksjonen x^2 med operatoren $\partial/\partial x$ får vi $2x$, som *ikkje* er lik ein konstant multiplisert med x^2 : $\frac{d}{dx}x^2 = 2x \neq c \cdot x^2$. I denne forstanden er eigenfunksjonar "sjeldne": dei "fleste" funksjonar ein operator kan verke på er ikkje eigenfunksjonar til den operatoren.

Eksempel 1: Eigenfunksjonar og eigenverdiar til operatorane for bevegelsesmengd og kinetisk energi.

Operatoren for bevegelsesmengd er $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$. Eksponensialfunksjonane e^{ikx} er eigenfunksjonar til $\hat{p}$, med tilhøyrande (reell) eigenverdi $p_k = \hbar k$ (her spelar altså bølgetalet k rollen som "merkelappen" α). Bevis:

$$\hat{p} e^{ikx} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} e^{ikx} = \frac{\hbar}{i} (ik) e^{ikx} = \hbar k e^{ikx} = p_k e^{ikx}. \quad (71)$$

Operatoren for kinetisk energi, $\hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$, har dei same eigenfunksjonane som $\hat{p}$, med tilhøyrande eigenverdiar $K_k = \hbar^2 k^2 / (2m)$:

$$\hat{K} e^{ikx} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{ikx} = -\frac{\hbar^2}{2m} (ik)^2 e^{ikx} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} e^{ikx} = K_k e^{ikx}. \quad (72)$$

Her ser vi altså at dei operatorane $\hat{p}$ 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 $\hat{x}$): $\hat{K} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$. Ein eigenfunksjon av $\hat{p}$ blir då automatisk også ein eigenfunksjon av $\hat{K}$, med eigenverdiane relaterte på same vis som operatorane: $K_k = \frac{p_k^2}{2m}$.

Eksempel 2: Eigenfunksjonar og eigenverdiar for energi-operatoren (Hamilton-operatoren).

Operatoren for energi er $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)$. Den tidsuavhengige Schrödingerlikninga (TUSL) er

$$\hat{H} \psi_\alpha(x) = E_\alpha \psi_\alpha(x). \quad (73)$$

TUSL er difor ei eigenverdilikning. Eigenverdiane til Hamiltonoperatoren $\hat{H}$ er difor energiane E_α , og funksjonane $\psi_\alpha(x)$ (dvs. den x -avhengige delen av dei stasjonære tilstandene $\Psi_\alpha(x, t) = \psi_\alpha(x) e^{-iE_\alpha t/\hbar}$) er eigenfunksjonane til $\hat{H}$. Merk at for ein fri partikkel ($U(x) = 0$) er $\hat{H} = \hat{K}$, så eksponensialfunksjonane e^{ikx} er eigenfunksjonar av $\hat{H}$ for ein fri partikkel, med eigenverdiar $E_k = \hbar^2 k^2 / (2m)$. I dette tilfellet spelar altså bølglengda k rollen som indeksen α . Sidan k kan ta alle mogelege reelle verdiar er eigenverdiane kontinuerlege. 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 gitt av eksponensialfunksjonane e^{ikx} . Eigenfunksjonane og eigenverdiane til $\hat{H}$ avheng av forma på potensialenergifunksjonen $U(x)$. “Partikkel i boks” er eit eksempel: Vi fann at eigenfunksjonane er $\psi_n(x) = \sqrt{2/L} \sin(n\pi x/L)$ inne i brønnen og 0 utanfor, mens eigenverdiane var $E_n = \hbar^2 \pi^2 n^2 / (2mL^2)$. I dette problemet spelar altså n rollen som indeksen α . Sidan n er begrensa til å vere eit positivt heiltal, er eigenverdiane til $\hat{H}$ (dvs. energiane) diskrete (dvs. ikkje kontinuerlege) i dette tilfellet.

Eigenfunksjonane og eigenverdiane til posisjonsoperatoren er diskuterte i Appendix C.

13 Målepostulatet

Utfallet av målingar av observablar i kvantemekanikk er beskrive i det såkalla *målepostulatet*, som kan formulerast i 3 punkt som følgjer:

(1) Dei einaste mogelege verdiane som ei måling av den fysiske observabelen F kan gi er ein av eigenverdiane f_α til operatoren $\hat{F}$.

(2) Dersom partikkelen ved tida t er i ein tilstand gitt av bølgefunksjonen $\Psi(x, t)$, er:

- (dersom eigenverdiane er diskrete) sannsynlegheiten for å måle verdien f_α lik $|a_\alpha(t)|^2$
- (dersom eigenverdiane er kontinuerlege) sannsynlegheiten for å måle ein verdi mellom f_α og $f_\alpha + df$ lik $|a_\alpha(t)|^2 df$

der

$$a_\alpha(t) = \int dx \Theta_\alpha^*(x) \Psi(x, t). \quad (74)$$

(3) Ved tida umiddelbart *etter* målinga av F er partikkelen i ein tilstand gjeven av:

- (dersom eigenverdiane er diskrete) eigenfunksjonen $\Theta_\alpha(x)$ til $\hat{F}$ tilhøyrande eigenverdien f_α som var måleresultatet
- (dersom eigenverdiane er kontinuerlege) ein linærkombinasjon av eigenfunksjonar tilhøyrande eigenverdiar i eit lite intervall omkring måleresultatet, der storleiken på intervallet avheng av presisjonen av målinga.

Merk at formuleringane i punkt 2 og 3 er litt forskjellige avhengig av om eigenverdiane til observabelen er diskrete eller kontinuerlege.

Punkt (3) impliserer at ei måling generelt vil *endre* tilstanden (bølgjefunksjonen som funksjon av x) til systemet. Ein konsekvens av dette er at dersom ein ynskjer å gjere mange målingar av ein observabel F (f.eks. posisjon) i ein gitt tilstand (f.eks. for å bruke målingane til å estimere forventningsverdien $\langle F \rangle$ og/eller uvisse ΔF i tilstanden), kan ein ikkje gjere dette ved å gjere mange målingar etter kvarandre på same partikkel. Grunnen er at allereie etter den første målinga er tilstanden endra, så seinare målingar vil måle posisjonen i andre tilstander enn den opprinnelege. I staden kan ein (iallfall i teorien) preparere mange identiske system, alle med ein partikkel i den gitte tilstanden, og så gjere (kun) ein måling på kvart system. Alternativt, dersom ein kun har eitt system tilgjengeleg, må ein etter kvar måling preparere systemet på nytt i den opprinnelege tilstanden før ein kan gjere ei ny måling.

La oss sjekke at for energimålingar i system med kun diskrete energinivå gir punkt (2) i målepostulatet det same resultatet som vi fann i Sec. 11. Sidan observabelen vi ser på er energien er eigenfunksjonane $\Theta_\alpha(x)$ lik funksjonane $\psi_n(x)$ som løyser TUSL: $\hat{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x)$. Dermed gir (74), når vi set inn uttrykket (55) for tilstanden og bruker (49),

$$\begin{aligned} a_n(t) &= \int dx \psi_n^*(x) \Psi(x, t) = \int dx \psi_n^*(x) \sum_m c_m \psi_m(x) e^{-iE_m t/\hbar} \\ &= \sum_m c_m e^{-iE_m t/\hbar} \underbrace{\int dx \psi_n^*(x) \psi_m(x)}_{\delta_{nm}} = c_n e^{-iE_n t/\hbar}. \end{aligned} \quad (75)$$

Dermed blir sannsynlegheiten for å måle verdien E_n lik $|a_n(t)|^2 = |c_n e^{-iE_n t/\hbar}|^2 = |c_n|^2$, som er same svaret vi fann i Sec. 11.

Anta at vi gjer ei måling av energien i tilstanden $\Psi(x, t)$ og får ein viss energi E_n , f.eks. E_5 . Sannsynlegheiten for å få dette resultatet er $|c_5|^2$. Dersom vi gjer ei ny måling av energien like etter den første, kva blir då sannsynlegheiten for å måle dei forskjellige energiane? Det følgjer frå punkt (3) og (2) i målepostulatet at ved tida umiddelbart etter den første målinga er tilstanden til systemet lik $\psi_5(x)$. Sannsynlegheiten for å måle energien E_n i den andre målinga er då, frå punkt (2) i målepostulatet (set inn $\psi_5(x)$ for tilstanden $\Psi(x, t)$ i (74))

$$\left| \int dx \psi_n^*(x) \psi_5(x) \right|^2 = |\delta_{n,5}|^2 = \delta_{n,5} = \begin{cases} 1 & \text{for } n = 5, \\ 0 & \text{for } n \neq 5, \end{cases} \quad (76)$$

m.a.o. i den andre målinga gjort umiddelbart etter den første vil vi måle det same resultatet E_5 med *sikkerheit* (sannsynlegheit 1)! Dette er eit generelt resultat, også gyldig for andre observablar enn energien: Dersom vi umiddelbart etter ei måling av ein observabel gjer ein måling til av den same observabelen (i det same systemet) vil vi med sikkerheit få same måleresultat som i første måling. (Energien er faktisk ein spesiell observabel i den forstand at sjølv om den andre målinga ikkje blir gjort umiddelbart etter den første, men ei vilkårlig tid seinare, vil vi likevel måle same energi som i første måling. Kan du forstå kvifor? Hint: det har med stasjonære tilstander å gjere.)

Målepostulatet spelar ei fundamental rolle i kvantemekanikk. I Appendix D viser vi at tolkinga av bølgjefunksjonen følgjer frå å anvende målepostulatet på posisjonsobservabelen. Det kan også visast at det generelle uttrykket (37) følgjer frå målepostulatet og eigenskapar til eigenfunksjonane til operatoren $\hat{F}$. I dette kurset er punkt (1) og (3) i målepostulatet viktigast; punkt (2) er mindre viktig for oss sidan vi tidlegare har lært ekvivalente men enklare måtar å rekne ut sannsynlegheitene for posisjons- og energimålingar, som er dei typar målingar vi i praksis begrensar oss til i dette kurset.

Appendiks

A Utrekning av $d\langle x \rangle/dt$ og $d\langle p \rangle/dt$

A.1 $d\langle x \rangle/dt$

Vi startar frå uttrykket

$$\langle x \rangle = \int dx \Psi^*(x, t) x \Psi(x, t). \quad (77)$$

Tidsavhengigheiten på høgresida ligg utelukkande i $\Psi(x, t)$ og $\Psi^*(x, t)$. Dermed, vha. regelen for den deriverte av eit produkt får vi (for å redusere lengda på uttrykka droppar vi i det følgjande å skrive argumenta til Ψ og Ψ^* , og vi droppar også ofte grensene på integralet, som alltid er $-\infty$ og ∞)

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{d}{dt} \int dx \Psi^* x \Psi = \int dx \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} x \Psi + \int dx \Psi^* x \frac{\partial \Psi}{\partial t}. \quad (78)$$

Vi har at

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U(x) \Psi \right], \quad (79)$$

$$\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + U(x) \Psi^* \right]. \quad (80)$$

Den første likninga her får ein frå TASL, den andre likninga får ein ved å komplekskonjugere den første. Set ein desse likningane inn i (78), ser ein at ledda med $U(x)$ i integranden kansellerer, så vi står igjen med

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = -\frac{i\hbar}{2m} \int dx \left[\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} x \Psi - \Psi^* x \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \right]. \quad (81)$$

Vi bruker no delvis integrasjon,

$$\int_a^b dx u'(x) v(x) = u(x) v(x) \Big|_a^b - \int_a^b dx u(x) v'(x), \quad (82)$$

på kvart av dei to ledda i (81). For kvart ledd vel vi funksjonane u og v slik at vi “reduserer” den andrederiverte til den førstederiverte. Første ledd blir då

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \underbrace{\left(\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \right)}_{u'(x)} \underbrace{(x \Psi)}_{v(x)} = \underbrace{\left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right)}_{u(x)} \underbrace{(x \Psi)}_{v(x)} \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} dx \underbrace{\left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right)}_{u(x)} \underbrace{\left(\frac{\partial}{\partial x} (x \Psi) \right)}_{v'(x)} \quad (83)$$

“Overflateleddet” (som er det generelle namnet på det første leddet på høgresida i (82)) blir 0 fordi $\Psi \rightarrow 0$ for $x \rightarrow \pm\infty$.¹² Når vi også bruker at $\frac{\partial}{\partial x} (x \Psi) = \Psi + x \frac{\partial \Psi}{\partial x}$ får vi altså

$$\int dx \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} x \Psi = - \int dx \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \left(\Psi + x \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right). \quad (84)$$

Likeleis, ved å bruke delvis integrasjon på det andre leddet i (81) får ein

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \underbrace{(\Psi^* x)}_{v(x)} \underbrace{\left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \right)}_{u'(x)} = \underbrace{(\Psi^* x)}_{v(x)} \underbrace{\left(\frac{\partial \Psi}{\partial x} \right)}_{u(x)} \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} dx \underbrace{\left(\frac{\partial}{\partial x} (\Psi^* x) \right)}_{v'(x)} \underbrace{\left(\frac{\partial \Psi}{\partial x} \right)}_{u(x)} \quad (85)$$

Overflateleddet er igjen 0 (det er det komplekskonjugerte av overflateleddet i (83)). Dermed blir

$$\int dx \Psi^* x \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = - \int dx \left(\Psi^* + \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} x \right) \frac{\partial \Psi}{\partial x}. \quad (86)$$

¹² $\Psi(x)$ må gå mot 0 raskare enn $1/|x|$ for at $\Psi(x)$ skal vere normaliserbar. Dermed vil produktet $x\Psi \rightarrow 0$ for $x \rightarrow \pm\infty$. Dessutan går også $\partial\Psi^*/\partial x$ mot 0 i dei same grensene.

Set vi no uttrykka (84) og (86) inn i (81) ser ein at ledda med integrand $\frac{\partial \Psi^*}{\partial x} x \frac{\partial \Psi}{\partial x}$ kansellerer. Dermed blir

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = -\frac{i\hbar}{2m} \int dx \left(-\frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi + \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) \quad (87)$$

La oss no bruke delvis integrasjon på første ledd her, med $u' = \partial \Psi^* / \partial x$ og $v = \Psi$. Overflateleddet $\Psi^* \Psi|_{-\infty}^{\infty}$ blir openbart 0, og det gjenståande integralet blir identisk med andre ledd. Dermed blir

$$\begin{aligned} \frac{d\langle x \rangle}{dt} &= -\frac{i\hbar}{m} \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \\ &= \frac{1}{m} \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi. \end{aligned} \quad (88)$$

Iflg. (22) skal dette uttrykket vere lik $\langle p \rangle / m$, som dermed gir

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi. \quad (89)$$

A.2 $d\langle p \rangle / dt$

Vi går litt mindre i detalj her enn i utrekninga av $d\langle x \rangle / dt$, sidan metodane er dei same. Vi startar frå

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t). \quad (90)$$

Derivasjon mhp. tida t gir

$$\frac{d\langle p \rangle}{dt} = \frac{\hbar}{i} \int dx \left[\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \frac{\partial}{\partial x} \Psi + \Psi^* \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right], \quad (91)$$

der vi i andre ledd har brukt at vi kan endre rekkjefølgja av partiellderivasjonane: $\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial}{\partial x} \Psi = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial t} \Psi$. Vi bruker no (79)-(80) til å omskrive dette som

$$\frac{d\langle p \rangle}{dt} = \int dx \left[(\hat{H} \Psi^*) \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial}{\partial x} (\hat{H} \Psi) \right] \quad (92)$$

der $\hat{H}$ er gitt i (33). Den delen av høgresida som ikkje involverer $U(x)$ er

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int dx \left[\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial^3 \Psi}{\partial x^3} \right]. \quad (93)$$

Men dette uttrykket er 0, som ein kan sjå ved å bruke delvis integrasjon to gonger (begge gongene forsvinn overflateleddet). Vi står difor igjen med

$$\begin{aligned} \frac{d\langle p \rangle}{dt} &= \int dx \left[U \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial}{\partial x} (U \Psi) \right] = \int dx \left[U \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi^* U \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial U}{\partial x} \Psi \right] \\ &= - \int dx \Psi^* \frac{\partial U}{\partial x} \Psi = - \left\langle \frac{\partial U}{\partial x} \right\rangle. \end{aligned} \quad (94)$$

Sidan vi ser på eit éin-dimensjonalt system er den potensielle energien U kun ein funksjon av x . Vi kan dermed skrive $\partial U / \partial x = dU / dx$. Vi har dermed vist likning (41).

B Ein vektoranalogi til (49), (51) og (53)

Sjå på vanlege vektorar i 3 dimensjonar. I staden for å kalle basisvektorane langs x -, y - og z -aksen for $\mathbf{i}$, $\mathbf{j}$, og $\mathbf{k}$, skal vi i staden kalle dei hhv. $\mathbf{e}_1$, $\mathbf{e}_2$, og $\mathbf{e}_3$. Basisvektorane har lengd 1: $\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{e}_n = 1$, så ein kan seie at dei er normaliserte til 1. I tillegg er forskjellige basisvektorar ortogonale: $\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{e}_m = 0$ for $n \neq m$. Desse to eigenskapane (normalisering og ortogonalitet) kan kombinert skrivast

$$\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{e}_m = \delta_{n,m} \quad (95)$$

og refererast til som ortonormalitet. Ein vilkårleg vektor $\mathbf{v}$ kan dekomponerast vha. basisvektorane som

$$\mathbf{v} = \sum_n v_n \mathbf{e}_n \quad (96)$$

der v_n er komponenten av $\mathbf{v}$ langs $\mathbf{e}_n$. For å finne desse komponentane ser vi på

$$\mathbf{e}_m \cdot \mathbf{v} = \sum_n v_n \underbrace{\mathbf{e}_m \cdot \mathbf{e}_n}_{\delta_{mn}} = \sum_n v_n \delta_{mn} = v_m, \quad (97)$$

m.a.o.

$$v_n = \mathbf{e}_n \cdot \mathbf{v}. \quad (98)$$

Det er ein nær analogi mellom vektorane her og funksjonane diskuterte i (49)-(53):

$$\mathbf{e}_n \leftrightarrow \psi_n(x), \quad (99)$$

$$\mathbf{v} \leftrightarrow f(x), \quad (100)$$

$$v_n \leftrightarrow c_n. \quad (101)$$

Likningane (95), (96), (97), og (98) er difor analogiar til hhv. (49), (51), (52) og (53). Funksjonane $\psi_n(x)$ spelar rolla som basisfunksjonar som generelle funksjonar $f(x)$ kan utviklast i. Koeffisienten c_n er “komponenten av $f(x)$ langs $\psi_n(x)$.” Ein definerer eit skalarprodukt $\int_{-\infty}^{\infty} dx g^*(x) f(x)$ mellom to funksjonar $g(x)$ og $f(x)$ som er analogt skalarproduktet $\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}$ mellom to vektorar $\mathbf{u}$ og $\mathbf{v}$.

C Eigenfunksjonar og eigenverdiar til posisjonsoperatoren

Her gir vi ein kort diskusjon av eigenverdioproblemet for posisjonsoperatoren. Eigenverdiane består av dei mogelege målte verdiane for posisjonen til partikkelen, som dannar eit kontinuum. Eigenverdilikninga (70) blir

$$\hat{x} \theta_{x_0}(x) = x_0 \theta_{x_0}(x), \quad (102)$$

der x_0 er eigenverdien og der vi har brukt eigenverdien sjølv som “merkelappen” til eigenfunksjonen. Men sidan $\hat{x} = x$ blir dette

$$x \theta_{x_0}(x) = x_0 \theta_{x_0}(x). \quad (103)$$

Frå denne likninga ser ein at eigenfunksjonen $\theta_{x_0}(x)$ som tilhøyrer eigenverdien x_0 må tilfredsstille

$$\theta_{x_0}(x) = 0 \quad \text{for } x \neq x_0. \quad (104)$$

Ein ynskjer vidare at arealet under eigenfunksjonen er endeleg (dvs. ikkje 0); ellers blir funksjonen “for svak”. For å konstruere ein slik eigenfunksjon, la oss først sjå på følgjande funksjon:

$$\delta_\epsilon(x - x_0) \equiv \begin{cases} \frac{1}{\epsilon} & \text{for } |x - x_0| < \frac{\epsilon}{2}, \\ 0 & \text{for } |x - x_0| > \frac{\epsilon}{2}, \end{cases} \quad (105)$$

der ϵ er ein positiv storleik med dimensjon lengde. Funksjonen er null utanfor eit intervall av lengde ϵ sentrert i $x = x_0$, mens innanfor dette intervallet har funksjonen verdien $1/\epsilon$. Funksjonen er vist i Figur 2. Den tek form som ein “rektangulær spiss” sentrert ved $x = x_0$; spissen er tynnare og høgare jo mindre ϵ er. Merk at arealet under funksjonen, $\int_{-\infty}^{\infty} dx \delta_\epsilon(x - x_0) = 1$ uavhengig av verdien av ϵ . La oss definere

$$\delta(x - x_0) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \delta_\epsilon(x - x_0). \quad (106)$$

Denne funksjonen er altså 0 overalt bortsett frå ein “uendeleg tynn og uendeleg høg” spiss i $x = x_0$ som er slik at

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x - x_0) = 1. \quad (107)$$

Vi ser at $\delta(x - x_0)$ tilfredsstiller våre krav til eigenfunksjonen $\theta_{x_0}(x)$, så vi tek $\theta_{x_0}(x) = \delta(x - x_0)$. Den oppfyller altså

$$x \delta(x - x_0) = x_0 \delta(x - x_0). \quad (108)$$

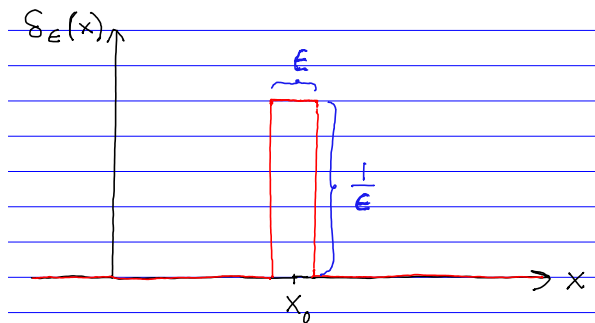


Figure 2: Funksjonen $\delta_\epsilon(x)$ definert i (105).

Ein kan også vise at dersom $f(x)$ er ein vilkårleg funksjon som er kontinuerleg i $x = x_0$, så er

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x - x_0) f(x) = f(x_0). \quad (109)$$

Dette følgjer ved å setje inn (106); for små nok ϵ er integralet då approksimativt lik $\epsilon \cdot \frac{f(x_0)}{\epsilon} = f(x_0)$, ein approksimasjon som blir eksakt i grensa $\epsilon \rightarrow 0$.

Funksjonen $\delta(x - x_0)$ går under namnet *Diracs delta-funksjon*. Måten den er definert den på gjer at den er ikkje ein vanleg funksjon i matematisk rigorøs forstand,¹³ men den kan likevel behandlast som ein vanleg funksjon for vårt bruk. Den kan sjåast på som ein kontinuumsversjon av Kronecker-delta-funksjonen (50) for det diskrete tilfellet.

Merk at integralet $\int_{-\infty}^{\infty} dx |\delta(x - x_0)|^2$ er divergent. Så i likskap med eigenfunksjonane til bevegelsesmengd-operatoren er heller ikkje eigenfunksjonane til posisjonsoperatoren normaliserbare.

D Korleis tolkinga av bølgefunksjonen følgjer frå målepostulatet

Vi har no lært nok kvantemekanikk til å kunne vise at tolkinga av bølgefunksjonen er berre eit spesialtilfelle av målepostulatet! Meir presist, tolkinga av bølgefunksjonen følgjer frå å anvende målepostulatet på posisjonsobservabelen.

Som vist i Appendiks C er $\delta(x - x_0)$ eigenfunksjonen til posisjonsoperatoren tilhøyrande posisjonen x_0 . Ifølgje del (2) av målepostulatet er dermed sannsynlegheitstettleiken for måling av posisjonen x_0 lik

$$\left| \int_{-\infty}^{\infty} dx (\delta(x - x_0))^* \Psi(x, t) \right|^2 = \left| \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x - x_0) \Psi(x, t) \right|^2 = |\Psi(x_0, t)|^2 \quad (110)$$

som nettopp er resultatet vi tidlegare har postulert for denne sannsynlegheitstettleiken (her brukte vi at $\delta(x - x_0)$ er ein reell funksjon i første overgang og deretter (109) for å rekne ut integralet).

¹³I staden er den eit døme på det matematikarane kallar ein *generalisert funksjon*.