KVANT 9/9 - 2015

Föreläsning 5

"Föreläsningen avslutas med Scrödingerekvationen för väteatomen!

Kap 5 - Kvantformalism, Ohlén.

Schrödingerekvationen:

$$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi}_{\substack{\text{kinetiska energin.} \\ \hat{T}}} + \underbrace{V(\bar{r})}_{\substack{\text{potentiella energin} \\ \hat{V}}}\phi = \underbrace{E}_{\text{Totala energin}}\phi$$

DEFINITION

$$\boxed{\text{Hamiltonoperatorn} \quad \hat{H} = \hat{T} + \hat{V}}$$

Vi kan nu skriva SE mha Hamiltonoperatorn:

$H\phi = E\phi$ (tolkas som egenvärdesproblem för operatorn $\hat{H}$)

Klassiskt: $T = \frac{p^2}{2m}$

Kvantmekaniskt: $\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 = \frac{(i\hbar\nabla)^2}{2m} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$

DEFINITION

$$\boxed{\hat{p} = i\hbar\nabla}$$

Test på planvågor

$$\psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)}$$

$$\hat{p}\psi(x,t) = (-i\hbar)ik\psi = \hbar k\psi$$

Från Broigles relation $p = \hbar k \Rightarrow \boxed{\hat{p}\psi = p\psi}$

DEFINITION

$$\boxed{\hat{x}\,\phi(x') = x'\,\phi(x')}$$

Mha x och p kan vi bilda nya operatorer:

$$\hat{r} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) \;,\; \hat{p} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z) \;,\; \boxed{\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p}}$$

DEFINITION

Vi kommer att använda ett par Hilbert rum snart.

Postulat

I kvantmekaniken representeras fysikaliska storheter av operatorer.

Vid mätning erhålles egenvärden till operatorerna

Exempel: Brunn med oändligt höga väggar.

— S.E.: $\hat{H}\phi = E\phi$, möjliga energier är egenvärden till $\hat{H}$.

Operatorer verkar på vågfunktioner & mängden av viktfunktioner bildar ett Hilbertrum.

Hilbertrum (och mer)

Skalärprodukt: $\langle u|v\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} u^*(x)\cdot v(x)\,dx$

Egenskaper:

$$\langle u|v\rangle = \langle v|u\rangle^*$$
$$\langle u|\lambda v\rangle = \lambda\langle u|v\rangle$$
$$\langle \lambda u|v\rangle = \lambda^*\langle u|v\rangle$$
$$\langle u|v_1+v_2\rangle = \langle u|v_1\rangle + \langle u|v_2\rangle$$

Normen: $\|u\| = \sqrt{\langle u|u\rangle} = 1$ för normerade funktioner.

Operatorer i kvantmekaniken är linjära och ofta Herimitiska.

Linjär: $\hat{A}(\lambda_1 u + \lambda_2 v) = \lambda_1 \hat{A}u + \lambda_2 \hat{A}v$

Hermitsk: $\hat{A}^+ = \hat{A}$, $\hat{A}^+$ kallas adjungerande operatorn

$\langle u|\hat{A}v\rangle = \langle A^+ u|v\rangle$

Är $\hat{p}$ hermitsk?

$$\langle u|pv\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} u^* \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right) v \, dx = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} u^* v' dx = [\text{Partialint}] =$$

$$= (-i\hbar)\underbrace{\left[u^* v\right]_{-\infty}^{\infty}}_{\substack{=0 \text{ ty} \\ u,v \to 0 \\ \text{då } x \to \pm\infty}} - (-i\hbar)\int_{-\infty}^{\infty} u^{*\prime} v \, dx = i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} u^{*\prime} v \, dx =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \left(-i\hbar \frac{d}{dx} u\right)^* v \, dx = \langle pu|v\rangle$$

$$\boxed{\langle u|pv\rangle = \langle pu|v\rangle \Rightarrow \hat{p} \text{ är Hermitsk!}}$$

Sats

Alla operatorer som motsvarar observerbara variabler är Hermitska. Alla Hermitska operatorer har reella egenvärden

Ex

Visa att Hermitska operatorer har reella egenvärden och ortogonala egenfunktioner. Egenvärden olika, ingen degeneration.

Givet: $\hat{A} = \hat{A}^{+}$ och $\hat{A}\phi_i = \lambda_i \phi_i$

$$\langle \phi_i | \hat{A}\phi_j \rangle = \langle \phi_i | \lambda_j \phi_j \rangle = \lambda_j \langle \phi_i | \phi_j \rangle \qquad (1)$$

$$\langle \hat{A}\phi_i | \phi_j \rangle = \langle \lambda_i \phi_i | \phi_j \rangle = \lambda_i^* \langle \phi_i | \phi_j \rangle \qquad (2)$$

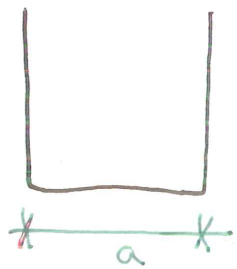
$$(1) = (2) \Rightarrow (\lambda_j - \lambda_i^*) \langle \phi_i | \phi_j \rangle = 0$$

om $i = j \Rightarrow \langle \phi_i | \phi_j \rangle \neq 0 \Rightarrow \boxed{\lambda_i = \lambda_j}$

om $i \neq j \Rightarrow \underbrace{(\lambda_j - \lambda_i)}_{\neq 0} \underbrace{\langle \phi_i | \phi_j \rangle}_{=0} = 0 \Rightarrow \phi_i$ och ϕ_j är ortogonala.

$\boxed{\text{Dessutom bildar egenfunktionerna ett fullständigt rum.}}$

EX Brunn med oändligt höga väggar.



$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\hat{p}^2$ i brunnen.

Randvillkor: $\phi(0) = \phi(a) = 0$

$$\hat{H}\phi = E\phi \Rightarrow \begin{cases} \phi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi n x}{a}\right) \\ E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \cdot n^2, \quad n = 1, 2, 3, \ldots \end{cases}$$

Mängden $\{\phi_1, \phi_2, \phi_3, \ldots\}$ utgör en bas för ett H.rum.

En godtycklig vågfunktion ψ som är 0 utanför brunnen kan utvecklas i basfunktionen.

$$\boxed{\psi = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \cdot \phi_n(x) \quad , \quad c_n \in \mathbb{C}}$$

ortonormala.
$\langle \phi_n | \phi_m \rangle = \delta_{n,m}$

Koefficienterna c_n kan beräknas som:

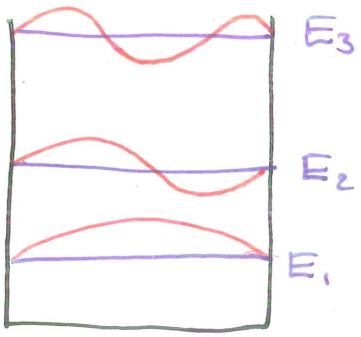
$$c_m = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_m^*(x)\, \psi(x)\, dx \quad * \quad (*)$$

Bevis: $(*) = \langle \phi_m | \psi \rangle = \langle \phi_m | \sum_{n=1}^{\infty} c_n \phi_n \rangle =$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} c_n \underbrace{\langle \phi_m | \phi_n \rangle}_{= \delta_{n,m}} = c_m \qquad \square$$

Antag att en partikel är i en oändlig låda och beskrivs av vågfunktionen ψ.

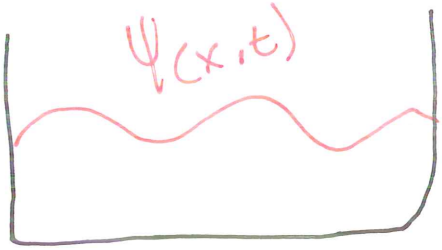
Vilka energier kan vi mäta?



* Sannolikhet att mäta energin E_n ges av:

$$P_n = |c_n|^2 = |\langle \phi_n | \psi \rangle|^2 , \quad (\text{där } \hat{H}\phi_n = E_n \phi_n)$$

* Vid mätning på ψ erhåller man $E = E_n$, då kollapsar vågfunktionen $\Rightarrow \psi \rightarrow \phi_n$.



$\psi(x) = c_1 \phi_1 + c_2 \phi_2 + \ldots$

Vad blir medelvärdet av många mätningar?

$$\text{medelvärde} = \sum_{n=1}^{\infty} P_n E_n = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 E_n$$

Medelvärdet kallas förväntningsvärde och givet $A = A^+$, $A\phi = \lambda\phi$:

Förväntningsvärdet: $\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | A \psi \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi \, dx \quad (*)$

Bevis

$$(*) = \langle \Psi | A\Psi \rangle = \langle \sum_m c_m \phi_m | \hat{A} \sum_n c_n \phi_n \rangle =$$

$$= \langle \sum_m c_m \phi_m | \sum_n c_n \lambda_n \phi_n \rangle =$$

$$= \sum_{n,m} c_m c_n \lambda_n \overbrace{\langle \phi_m | \phi_n \rangle}^{\delta_{m,n}} =$$

$$= \sum_n |c_n|^2 \lambda_n = \boxed{\sum_n P_n \lambda_n} \qquad \square$$

Klassiskt kan vi ha vilken energi som helst men i kvant tillåts bara egenvärden till Hamilton-operatorn som energitillstånd.

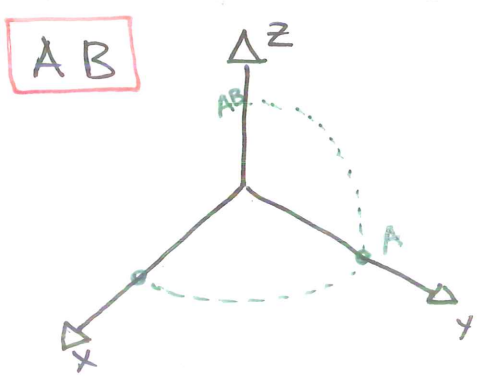
"Summan måste vara 100%"

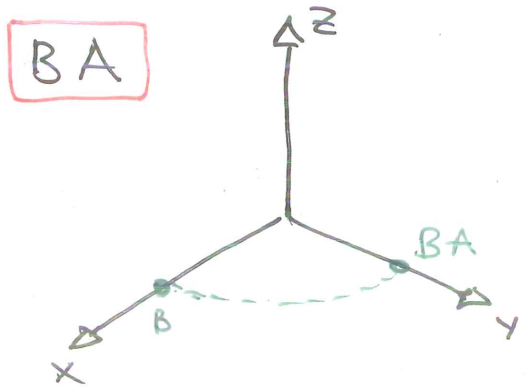
$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \langle \sum c_n \phi_n | \sum c_m \phi_m \rangle = \sum_{n,m} c_n^* c_m \overbrace{\langle \phi_n | \phi_m \rangle}^{\delta_{n,m}} =$$

$$= \sum_n |c_n|^2 = 1 .$$

Kommutatorer

Antag att vi har två operatorer A och B.
A: rotera 90° kring z-axeln
B: rotera 90° kring x-axeln.





Rotation kommuterar INTE
Translation kommuterar.

I kvant. kommuterar operatorer ibland.

Allmänt

DEFINITION

$$\boxed{[A, B] = AB - BA}$$

$[A, B] = 0 \Rightarrow$ A och B kommuterar.