Kvantemekanikkens formalisme

Vi skal oppsummere kvantemekanikken i fem postulat.

Postulat 1

Tilstanden til et system bestemmes av en bølgefunksjon $\Psi(x,t)$ som er en løsning av Schrödingerligningen (SL)

$$\hat{H}\Psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi$$

hvor $\hat{H}$ er systemets Hamiltonoperator. $\Psi(x,t)$ inneholder all informasjon om systemet.

Kommentarer: 1) Vi står fritt til å multiplisere $\Psi(x,t)$ med et vilkårlig (komplekst) tall, gjerne for normering slik at

$$\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*\Psi\,dx = 1$$

vektor

2) Løsningene av SL er abstrakte vektorer $|\psi\rangle$ i et komplekst (uendeligdimensjonalt) indreproduktrom, med indreprodukt

$$\underbrace{\langle\psi_i|}_{\text{bra}}\underbrace{|\psi_j\rangle}_{\text{ket}} \equiv \int_{-\infty}^{\infty}\psi_i^*\psi_j\,dx$$

Alternativ:
bevegelsesmengdebasis
energibasis

Vårt valg av basis for bølgefunksjoner er koordinatbasis (x)

$$\Psi(x,t) = \langle x|\Psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\delta(x-y)\,\Psi(y,t)\,dy$$

Postulat 2

Til enhver observabel Q svarer det en lineær hermitisk operator $\hat{Q}$.

Kommentarer: 1) Lineær

$$\hat{Q}(a\psi_i + b\psi_j) = a\hat{Q}\psi_i + b\hat{Q}\psi_j$$

$$\hat{Q}(a|\psi_i\rangle + b|\psi_j\rangle) = a\hat{Q}|\psi_i\rangle + b\hat{Q}|\psi_j\rangle$$

2) Hermitisk

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^* \hat{Q}\psi_j \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{Q}\psi_i)^* \psi_j \, dx$$

$$\langle \psi_i | \hat{Q}\psi_j\rangle = \langle \hat{Q}\psi_i | \psi_j\rangle$$

3) De kanonisk variable x og p har operatorer

$\hat{x} = x$ og $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$. Operatoren til $F(x,p)$ er $F(\hat{x},\hat{p})$.

4) Operatorer er lineærtransformasjoner på vektorer (tilstandene), i en diskret basis så kan de skrives som matriser.

Eksempler: $\hat{H} = H(\hat{x},\hat{p}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(\hat{x})$ i en dimensjon

$$\hat{K} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

$$\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

Postulat 3

De eneste mulige resultat av en måling av observabler Q er en av egenverdiene q_n til operatoren $\hat{Q}$:

$$\hat{Q}\psi_n = q_n \psi_n$$

$$\hat{Q}|\psi_n\rangle = q_n|\psi_n\rangle$$

hvor ψ_n ($|\psi_n\rangle$) er egenfunksjonen (egentilstanden).

Kommentarer: 1) Umiddelbart etter måling av q_n vil systemet være i tilstanden ψ_n.
„kollaps av bølgefunksjon"

2) $\{q_n\}$ kalles operatorens spektrum, og kan være endelig, uendelig, eller kontinuerlig.

3) Hvis flere egentilstander har samme egenverdi er egenverdien degenerert.

4) Sannsynligheten for å måle den n-te egenverdien q_n for en tilstand $\psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x)$ er $|c_n|^2$

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n|\psi_n\rangle$$

5) Operatorer som kommuterer ($[\hat{A},\hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$) har felles egenfunksjoner og kalles kompatible variable.

settene av egenf. kan skrives som linearkomb. av hverandre $\longrightarrow$

b) To operatorer $\hat{A}$ og $\hat{B}$ som ikke kommuterer er inkompatible og har en uskarphetsrelasjon for de observable

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right)^2$$

Eksempel: La oss se på $\hat{p}$ og $\hat{x}$, og la $\psi(x) = e^{ikx}$.

$\hat{p}\psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} e^{ikx} = -i\hbar\, ik\, e^{ikx} = \hbar k \psi$

ψ er en egenfunksjon til $\hat{p}$ og egenverdien er $\hbar k$ (kontinuerlig spektrum)

$\hat{x}\psi = x e^{ikx} \neq a\psi \Rightarrow \psi$ er ikke en egenfunksjon til $\hat{x}$

- Ingen overraskelse da $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ så $\hat{p}$ og $\hat{x}$ er inkompatible.

Postulat 4

Et ensamble av systemer preparert i tilstanden ψ vil ha forventningsverdi for observabel Q på

$$\langle Q \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{Q} \psi \, dx$$

$$\langle Q \rangle = \langle \psi | \hat{Q} \psi \rangle$$

Kommentarer: 1) Variansen til Q defineres som

$$\sigma_Q^2 \equiv \langle (Q - \langle Q \rangle)^2 \rangle = \langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2$$

2) Dersom $\sigma_Q = 0$ er størrelsen Q <u>skarpt bestemt.</u>

Q er skarpt bestemt hvis og bare hvis ψ er en egentilstand til $\hat{Q}$.

Eksempel: Stasjonære tilstander $\Psi(x,t) = \psi(x)\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ (separable løsninger av SL)

har skarpt bestemt energi:

$$\hat{H}\Psi = \hat{E}\Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\left(\psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\right) = i\hbar\left(-\frac{i}{\hbar}E\right)\Psi = E\,\Psi$$

$$\langle \hat{H} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{H} \Psi \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* E \Psi \, dx = E$$

$$\langle \hat{H}^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{H}^2 \Psi \, dx = E^2$$

$$\sigma_H^2 = \langle \hat{H}^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle^2 = E^2 - E^2 = 0$$

Postulat 5

Hvis $\hat{Q}$ er en hermitisk operator til en observabel Q og $\{\psi_n\}$ er settet av alle egentilstander til $\hat{Q}$ så er dette settet komplett, dvs. en vilkårlig tilstand ψ kan skrives som

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n$$

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle$$

Kommentarer: 1) Summasjonstegnet må tolkes symbolsk, for kontinuerlige egenverdier erstattes det med et integral

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} c(k)\, \psi_k \, dk \quad \text{(Dirac-komplett)}$$

2) For diskret egenverdier er egentilstandssettet ortonormalt

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n \, dx = \delta_{mn} \quad \text{hvor} \quad \delta_{mn} = \begin{cases} 1 & \text{hvis } m = n \\ 0 & \text{ellers} \end{cases}$$

For kontinuerlige egenverdier er settet Dirac-ortonormalt

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_k^* \psi_{k'} \, dx = \delta(k-k') \quad \text{hvor } \delta \text{ er } \delta\text{-funksjonen.}$$