Normalisering

For en sannsynlighetstetthet så hadde vi

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x)\,dx = 1$$

Dette kalles normalisering (av sannsynlighet)

Bølgefunksjoner må også normaliseres

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

Hvordan normalisere? Ganger ψ med en konstant A.
Hvis ψ er en løsning av SL, så er også $A\psi$ det.
Kan ikke gjøres dersom $\psi = 0$ eller integralet $(*)$ er uendelig.

Fysiske løsninger av SL er kvadratisk integrerbar

dvs. $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx < \infty$

Forblir $\Psi(x,t)$ normert når vi endrer t? Ja!

Bevis: Må vise at $\displaystyle\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = 0$

$$\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial t}|\Psi(x,t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial t}\left(\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)\right) dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial t}\Psi + \Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial t}\right) dx$$

Hva er $\displaystyle\frac{\partial \Psi}{\partial t}$? Bruker SL.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi = i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} \Rightarrow \quad \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{iV}{\hbar}\Psi$$

$$\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + \frac{iV}{\hbar}\Psi^*$$

$$\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty}\Big[\Big(-\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + \cancel{\frac{iV}{\hbar}\Psi^*}\Big)\Psi$$

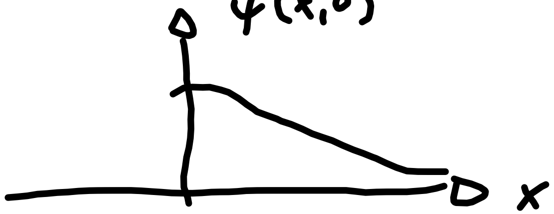
$$+ \Psi^*\Big(\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \cancel{\frac{iV}{\hbar}\Psi}\Big)\Big] dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} -\frac{i\hbar}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\psi - \psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right)dx$$

$$= -\frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\psi - \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)dx$$

$$= -\frac{i\hbar}{2m}\left[\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\psi - \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\right]_{-\infty}^{\infty} = 0$$

fordi: $\psi(x,t) \xrightarrow{x\to\pm\infty} 0$ (hvis ikke er ikke $\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x,t)|^2 < \infty$)



NB! Dersom $A\psi$ gir riktig normalisering, så gir også $-A\psi$ det fordi: $|-A\psi|^2 = |A\psi|^2$

fase faktor — Og $e^{i\theta}\psi$ gir riktig normalisering dersom ψ er normalisert

$$|e^{i\theta}\psi|^2 = \cancel{e^{i\theta}}\psi\,\cancel{e^{-i\theta}}\psi^* = \psi\psi^* = |\psi|^2 \quad (\text{så lenge } \theta \in \mathbb{R})$$

Forventningsverdi til posisjon

Forventet gjennomsnitt av mange posisjonsmålinger på et ensemble av partikler med ψ som bølgefunksjon.

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x\,|\psi(x,t)|^2\,dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,t)\,x\,\psi(x,t)\,dx$$

$$\left(\int_{-\infty}^{\infty} x\,\rho(x)\,dx \right)$$

Forventningsverdi av bevegelsesmengde

Ikke-relativistisk $p = mv$. Hva er $\langle p \rangle$?

Har at $v = \frac{dx}{dt}$. Rimelig å anta at

$$\langle p \rangle = m\frac{d}{dt}\langle x \rangle \quad \text{(Ehrenfests teorem)}$$

Vil undersøke $\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x \underline{\frac{\partial}{\partial t}|\psi(x,t)|^2} dx = \underline{-\frac{i\hbar}{2m}} \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{x}_{u} \underbrace{\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x}\psi - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x}\right)}_{v'} dx$

Ved å bruke $\frac{\partial}{\partial t}|\psi(x,t)|^2 = -\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x}\psi - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x}\right)$

fra tidligere slide.

Delvis integrasjon $\int u v' = uv - \int u' v$

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = -\frac{i\hbar}{2m} \underbrace{\cancel{x\left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x}\psi - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x}\right)\Bigg|_{-\infty}^{\infty}}}_{\psi \to 0 \text{ når } x \to \pm\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} -\frac{i\hbar}{2m}\left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x}\psi - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x}\right) dx$$

$$= -\frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} dx + \frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\frac{\partial \psi^*}{\partial x}}_{v'} \underbrace{\psi}_{u} dx$$

$$= \underline{-\frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} dx} + \underline{\frac{i\hbar}{2m}\left[\cancel{\psi \psi^* \Big|_{-\infty}^{\infty}} - \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} dx\right]}$$

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = -\frac{i\hbar}{m}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}dx$$

Kvantemekanisk bevegelsesmengde:

$$\underline{\langle p\rangle} = m\frac{d}{dt}\langle x\rangle = -i\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}dx = \underline{\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi\, dx}$$

$$\left(\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\, x\, \psi\, dx\right)$$

Størrelsene $\hat{x} = x$ og $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ kalles <u>operatorer</u>.

En operator er noe som gjør noe med funksjoner.

Kanoniske variable

Alle klassiske dynamiske variable kan uttrykkes ved hjelp av posisjon x og bevegelsesmengde p.

Disse kalles kanoniske variable.

Eksempel: kinetisk energi: $K = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$

angulærmoment: $L = rmv = rp$

Forventningsverdien til en størrelse $Q(x,p)$

$$\langle Q(x,p)\rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* Q(\hat{x},\hat{p})\,\psi\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* Q\left(x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi\, dx$$

Dette kalles <u>kanonisk kvantisering.</u>

Eksempel: forventningsverdi til kinetisk energi:

$$\langle K \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* K(\hat{x},\hat{p})\psi \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\hat{p}^2}{2m} \psi \, dx$$

$$= \frac{1}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi \, dx$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \, dx$$