2 - 11 - SCHRÖDINGERLIKNINGEN

Komplekse indreprodukt tar litt tid å venne seg til. Men det har en anvendelse som er ekstremt viktig, nemlig kvantefysikk. Alle må kunne litt om kvantefysikk. Kvantedatamaskinen er på vei. [1]. Et moderne studium av kjemi er selvfølgelig utenkelig uten kvantefysikk, og det er umulig å forstå en transistor uten kvantefysikk. Det sies at ingen forstår kvantefysikk. Akkurat nå er jeg den eneste her som ikke forstår kvantefysikk, og etter eksamen kommer heller ikke dere til å forstå kvantefysikk, og så kan dere gå ut i verden og spre deres uvitenhet. Kvantefysikk er litt abstrakt, så det kan være lurt å lese litt om de forskjellige historiske eksperimentene som ledet frem til teorien. [2]

Kvantefysikk bygger på postulatet at alt som er verdt å vite om en partikkel kan hales ut av partikkelens komplekse **partikkelbølgefunksjon**. [3] Denne kalles Ψ (uttales "psi") og finnes ved å løse den berømte **schrödingerlikningen**:

$$i\hbar\dot{\Psi}(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi''(x,t) + V(x,t)\Psi(x,t)$$

Her er m er partikkelens masse og $\hbar = 1.054571817... \cdot 10^{-34}$ Plancks reduserte konstant. Funksjonen V er et energipotensiale. Schrödingerlikningen kan utledes, men det er for komplisert for oss. [4]

Partikkelbølgefunksjonen Ψ har ingen direkte fysiske tolkinger, men

$$|\Psi(x,t)|^2 = \overline{\Psi(x,t)}\Psi(x,t)$$

tolkes som **sannsynlighetstettheten for partikkelens posisjon**. Dette kalles bornfortolkningen, etter Max Born. Dersom partikkelen kan befinne seg et sted langs x-aksen, er sannsynligheten for at den befinner seg mellom a og b gitt ved

$$\int_a^b |\Psi(x,t)|^2 \, dx,$$

og dersom vi antar at partikkelen må befinne seg et sted på x-aksen, må vi ha

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

for alle t. Hvis dette kravet er oppfylt, sier vi at Ψ er **normalisert**.

[1] https://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_computing
[2] https://en.wikipedia.org/wiki/History_of_quantum_mechanics
[3] https://en.wikipedia.org/wiki/Wave_function
[4] https://en.wikipedia.org/wiki/Path_integral_formulation

Tidlig i semesteret løste vi det endimensjonale varmeledningsproblemet og den endimensjonale vibrerende strengen ved separasjon av variable. Dette skal vi gjøre for schrödingerlikningen også. Men i kvantefysikk separerer de variable på en helt spesifikk måte. La oss ta unna dette først. For enkelhets skyld skal vi anta at V kun avhenger av x.

$\boxed{1}$ Sett $\Psi(x,t) = f(t)\psi(x)$ inn i schrödingerlikningen og vis at

$$i\hbar\frac{\dot{f}(t)}{f(t)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\psi''(x)}{\psi(x)} + V(x)$$

Akkurat som for bølge- og varmelikningen, er det slik at

$$i\hbar\frac{\dot{f}(t)}{f(t)} \qquad \text{og} \qquad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\psi''(x)}{\psi(x)} + V(x)$$

må være konstante.

$\boxed{2}$ Hva slags benevning har denne konstanten?
(Hint: Benevningen til Ψ kan utledes fra at $|\Psi|^2$ er en sannsynlighetstetthet, men det er ikke nødvendig å vite for å løse oppgaven.)

Hvis du ikke skjønte oppgaven over, er det et hint at vi kaller separasjonskonstanten E:

$$i\hbar\frac{\dot{f}(t)}{f(t)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\psi''(x)}{\psi(x)} + V(x) = E$$

$\boxed{3}$ Bruk likningen over til å vise at

$$f(t) = e^{-Eit/\hbar}$$

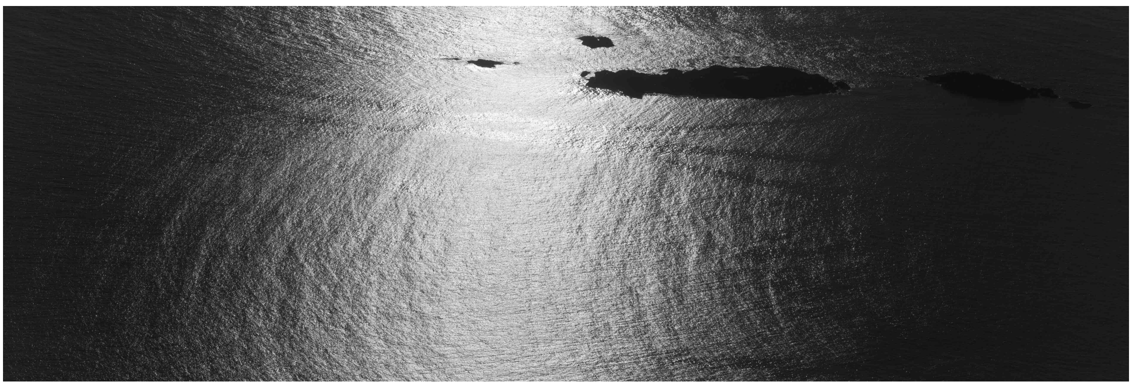
samt utlede den **tidsuavhengige Schrödingerlikningen**

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\psi = E\psi$$

Den tidsuavhengige schrödingerlikningen er en egenvektorlikning, der

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

er lineæroperatoren (denne kalles **hamiltonoperatoren**) og E er egenverdien. Energien til en bitteliten partikkel er visst alltid egenverdien til en eller annen linæroperator.



Det endimensjonale varmeledningsproblemet og det vibrerende-streng-problemet har en fetter i kvantefysikken, kalt **partikkel-i-boks**:

$$i\hbar\dot{\Psi}(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi''(x,t) \qquad \Psi(0,t) = \Psi(\pi,t) = 0 \qquad \int_0^\pi |\Psi(x,t)|^2 \, dx = 1$$

Den fysiske tolkningen til partikkel-i-boks er at du har en partikkel som lever på intervallet $[0,\pi]$. Inne på intervallet kan den gjøre som den vil så lenge den respekterer schrödingerlikningen, men i $x = 0$ og $x = \pi$ står det vegger den ikke kan passere. I en typisk fysikkbok vil dette være formulert som $V(0) = V(\pi) = \infty$, men jeg har oversatt det til randkravene

$$\Psi(0,t) = \Psi(\pi,t) = 0$$

slik at det skal bli forståelig for oss. Hele situasjonen fremstår selvfølgelig som litt corny om man ikke har sett det før, men realistiske differensiallikninger kan sjelden løses, og vi må alltid starte med et eller annet problem som er så enkelt at vi i det hele tatt kan regne ut noe som helst.

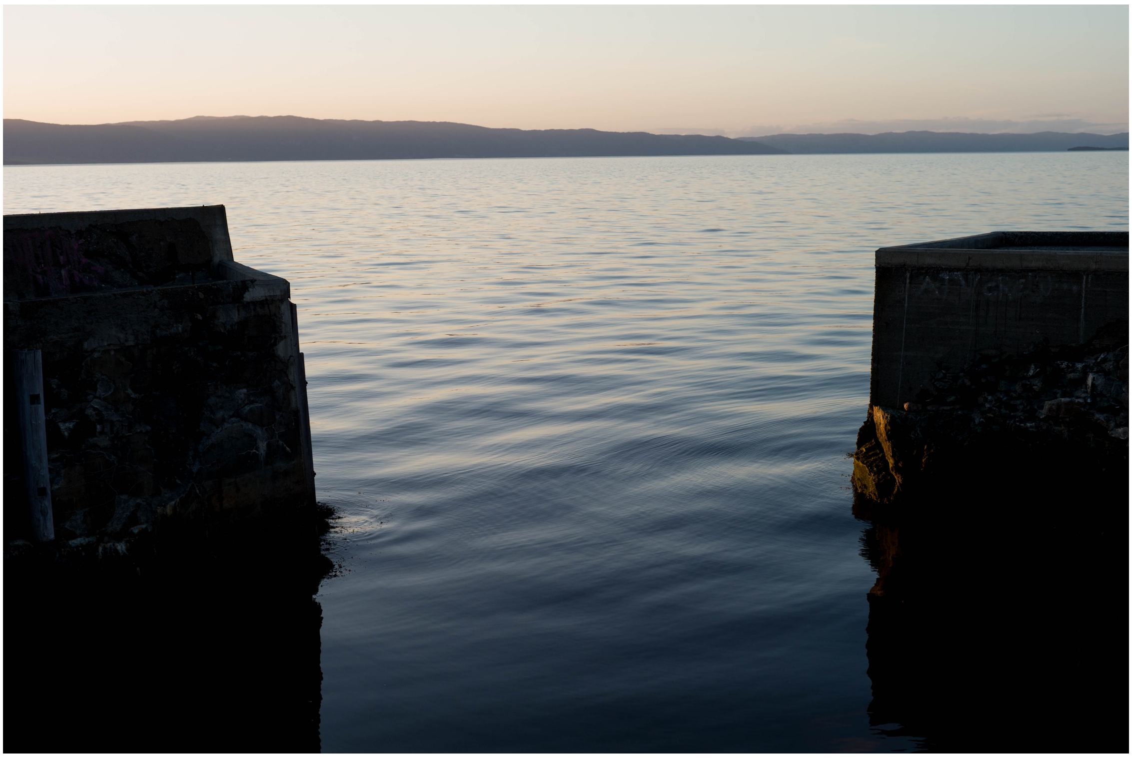
$\boxed{4}$ Bestem de tillatte energinivåene E_n ved å bruke randkravene og løsningene til den tidsuavhengige schrödingerlikningen, som blir

$$\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + E\psi = 0$$

og bruk bornfortolkningen til å vise at løsningene til partikkel-i-boks-problemet er

$$\Psi_n(x,t) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-E_n it/\hbar} \sin nx = \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-i\frac{\hbar}{2m}n^2 t} \sin nx.$$

(Hint: Det meste av arbeidet i denne oppgaven har du faktisk allerede gjort. Hvis du ser nøye på varmelikningen og schrödingerlikningen, vil du se at det i bunn og grunn er samme likning dersom $V = 0$. Det er kun normaliseringen som gjenstår.)



Her kan det være verdt å merke seg at den berømte kvantifiseringen av energinivåer er en konsekvens av kombinasjonen av randkrav og differensiallikning. Dette skjedde for varmeledningsproblemet og vibrerende-streng-problemet også, men da var ikke separasjonskonstanten energi, og du tenkte kanskje ikke så mye over det. De forskjellige løsningene Ψ_n er bølgefunksjoner som korresponderer til partikkelens forskjellige tillatte energinivåer. Du lurer sikkert nå på hvorfor alt dette er en naturlig fortsettelse av økten om komplekse indreprodukter. Grunnen er at kvantefysikkfolk er så opptatt av indreprodukter at Paul Dirac laget en egen notasjon for det:

$$\langle \psi | \phi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\psi} \phi \, dx$$

Merk at Dirac har valgt motsatt konvensjon i forhold til fourieranalysen hva angår linearitet - dette indreproduktet er lineært i andre faktor. Dette er grunnen til at jeg plaget deg så mye med at indreproduktet kan være lineært i *enten* første eller andre faktor.

$\boxed{5}$ Vis at bølgefunksjonene til de forskjellige energinivåene til partikkel-i-boks er ortonormale:

$$\langle \Psi_k | \Psi_n \rangle = \begin{cases} 1 & k = n \\ 0 & k \neq n \end{cases}$$

(Hint: Merk at

$$\overline{f(t)} f(t) = e^{Eit/\hbar} e^{-Eit/\hbar} = 1$$

så lenge E er reell, så denne kansellerer alltid. Vi kommer tilbake til hvorfor E alltid er reell.)

Vi kan verifisere direkte at partikkel-i-boks tilfredsstiller

$$\langle \Psi_n | \Psi_n \rangle = 1$$

for alle energinivåer og for alle t. Men uttrykket $\langle \Psi | \Psi \rangle$ er faktisk en invariant for schrödingerlikningen, på samme måte som totalenergien

$$m\frac{1}{2}\left(l\dot{\theta}\right)^2 - mgl\cos\theta$$

er en invariant til pendellikningen

$$\ddot{\theta} + \frac{g}{l}\sin\theta = 0.$$

Dette er kanskje bittelitt for hardt å utlede selv, så vi gjør det heller slik at jeg gir det utledningen, og så må du kunne den til eksamen. Anta at V er reell (samme grunn som E, vi kommer tilbake til dette). Vi beregner:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 \, dx &= \int_{-\infty}^{\infty} \dot{\Psi}(x,t)\overline{\Psi(x,t)} + \Psi(x,t)\overline{\dot{\Psi}(x,t)} \, dx \\
&= \frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} \Psi''(x,t)\overline{\Psi(x,t)} - \Psi(x,t)\overline{\Psi''(x,t)} \, dx \qquad \text{(bruk schrödingerlikningen)} \\
&= \frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x}\left(\Psi'(x,t)\overline{\Psi(x,t)} - \Psi(x,t)\overline{\Psi'(x,t)}\right) dx \qquad \text{(delvis integrasjon)} \\
&= \frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi'(x,t)\overline{\Psi(x,t)} - \Psi(x,t)\overline{\Psi'(x,t)}\right)\Big|_{x=-\infty}^{x=\infty} = 0
\end{aligned}$$

Dette betyr at altså at normaliseringen ikke ødelegges over tid; har du normalisert løsningene for ett tidspunkt, vil de fortsette å være korrekt normaliserte også i fremtiden.

$\boxed{6}$ Dette kan komme på eksamen.

Vi kan nå spinne videre på dette og oppgave 1. Forventet posisjon er

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

Informasjon om hvordan den forventede posisjonen flytter seg i tid, finnes antagelig i den tidsderiverte av denne. Så la oss derivere (har stort sett brukt de samme triksene som i forrige beregning):

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty} x|\Psi|^2\,dx &= \int_{-\infty}^{\infty} x\left(\dot{\Psi}\overline{\Psi}+\Psi\overline{\dot{\Psi}}\right)\,dx \\
&= \frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} x\left(\Psi''\overline{\Psi}-\Psi\overline{\Psi''}\right)\,dx \\
&= -\frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} \left(\Psi'\overline{\Psi}-\Psi\overline{\Psi'}\right)\,dx \\
&= -\frac{i\hbar}{m}\int_{-\infty}^{\infty} \Psi'\overline{\Psi}\,dx = -\frac{i\hbar}{m}\int_{-\infty}^{\infty} \overline{\Psi}\frac{\partial}{\partial x}\Psi\,dx
\end{aligned}$$

Vi kan nå gange med m for å få bevegelsesmengde og herje litt med uttrykket:

$$m\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty} x|\Psi|^2\,dx = \int_{-\infty}^{\infty}\overline{\Psi}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi\,dx$$

La oss til slutt skrive forventet posisjon slik:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\overline{\Psi}x\Psi\,dx$$

Nå ser vi at både x i forventet posisjon og $-i\hbar\partial/\partial x$ den tidsderiverte av forventet posisjon er klemt inne mellom $\overline{\Psi}$ og Ψ i et indreprodukt. Paul Dirac har selvfølgelig laget notasjon for dette også; kvantefysikkfolk liker best å skrive det slik:

$$\langle\Psi|L|\Psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\overline{\psi}L\psi\,dx$$

Jammen santen, kvadratisk form her óg! De to ovennevnte lineæroperatorene er gitt ved

$$\hat{x}\Psi = x\Psi \qquad \text{og} \qquad \hat{p}\Psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\Psi.$$

Kvantefysikkbøker begynner gjerne her uten særlig forklaring - de sier at kan det måles i lab er det egenverdien til en hermittisk lineæroperator. Dette er et fundamentalt postulat i kvantefysikk.

$\boxed{7}$ Bruk dette til å forklare at E og $V(x)$ må være reelle.

Merkelig. Men vi som kan fourieranalyse har noen ess i ermet som ikke andre mennesker har.

$\boxed{8}$ Se nå nøye på $\hat{x}$ og $\hat{p}$ og så litt på regnereglene for fourieromvending.
(Forvirrende nok har hattene i $\hat{x}$ og $\hat{p}$ ingenting med fourieromvending å gjøre.)

Helt riktig, **bevegelsesmengde er koblet til fourieromvendingen til posisjon**. Dette er ikke så veldig overraskende for den som husker de Broglies partikkelbølgeformel:

$$p = \frac{h}{\lambda} = h\xi = \hbar k$$

der λ er bølgelengde og

$$\xi = \frac{1}{\lambda}$$

er romlig frekvens og

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

er bølgetall. Merk at $k = 2\pi\xi$. Nå er det slik at når man fourieromvender i rom, er det vanlig å omvende med hensyn på bølgetall:

$$\widehat{\Psi}(k,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x,t)e^{-ikx}\, dx \qquad \Psi(x,t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \widehat{\Psi}(k,t)e^{ikx}\, dk$$

eller med hensyn på romlig frekvens:

$$\widehat{\Psi}(\xi,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x,t)e^{-2\pi i\xi x}\, dx \qquad \Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \widehat{\Psi}(\xi,t)e^{2\pi i\xi x}\, d\xi$$

Den første av disse er matematisk identisk med den vi er vant til i tid (bølgetallet k og vinkelfrekvensen ω er analoge størrelser i henholdsvis rom og tid), men akkurat for kvantefysikk er det mer praktisk å fourieromvende med hensyn på romlig frekvens ξ. Det er imidlertid slik at formlene for denne varianten er litt annerledes enn vi er vant til, så jeg tror det er enklest å fourieromvende med hensyn på bølgetall k og så harrymekke litt på slutten. La oss først bruke Plancherel, og se at

$$\begin{aligned} 1 = & \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2\, dx \\ = & \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \left|\widehat{\Psi}(k,t)\right|^2 dk \\ = & \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \left|\widehat{\Psi}(2\pi\xi,t)\right|^2 2\pi d\xi = \int_{-\infty}^{\infty} \left|\widehat{\Psi}(2\pi\xi,t)\right|^2 d\xi \end{aligned}$$

så det er ikke helt urimelig å tolke $\left|\widehat{\Psi}(2\pi\xi,t)\right|^2$ som en sannsynlighetstetthet. Dersom vi bruker Plancherel og litt fourieromvendingsregneregler på tidsendringen av forventet posisjon, får vi

$$\begin{aligned} m\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty} x|\Psi(x,t)|^2\, dx = & \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\Psi}(x,t)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi(x,t)\, dx && \text{fra forrige side} \\ = & \ \hbar\int_{-\infty}^{\infty} \overline{\Psi}(x,t)\left(-i\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi(x,t)\, dx \\ = & \ \frac{\hbar}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \overline{\widehat{\Psi}}(k,t)k\widehat{\Psi}(k,t)\, dk && \text{plancherel og } \widehat{\Psi'} = ki\widehat{\Psi} \\ = & \ \frac{\hbar}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \overline{\widehat{\Psi}}(2\pi\xi,t)(2\pi\xi)\widehat{\Psi}(2\pi\xi,t)\, 2\pi d\xi = \ h\int_{-\infty}^{\infty} \overline{\widehat{\Psi}}(2\pi\xi,t)\xi\widehat{\Psi}(2\pi\xi,t)\, d\xi. \end{aligned}$$

Det siste integralet kan tolkes som forventet romlig frekvens, og siden det er ganget med h, må vi vel tolke hele greia som forventet bevegelsesmengde på grunn av de Broglie.

$\boxed{9}$ Eksamen.

Til slutt skal vi se på et annet klassisk problem vi har det som trengs for å takle, nemlig den **kvanteharmoniske oscillatoren**. Dette er schrødingerlikningen med potensialet

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

slik at vi får

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)\psi = E\psi.$$

I en typisk kvantefysikkbok vil man gjerne finne mye stoff om denne likningen, men vi skal kjøre en litt minimalistisk utgreining av det aller viktigste. Det er ofte en grei strategi å se voldsomt nøye på en differensiallikning, bruke intuisjonen man har bygget opp etter mange år med matematikkslit, og så bare gjette på løsningen. Eller spørre en matematiker, som Atkins faktisk foreslår.

$\boxed{10}$ En av løsningene er faktisk en skalarmultippel av normalfordelingsfunksjonen

$$\psi_0(x) = e^{-cx^2}.$$

Sett inn og finn c.

Når Dirac fant ut av dette, laget han seg en trapp basert på operatoren

$$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2m}}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} + im\omega x\right).$$

Den er ganske lur.

$\boxed{11}$ Vis at dersom ψ løser den likningen over med energi E, løser $a_+\psi$ den samme likningen, men med energi $E + \hbar\omega$.

Nå er det bare å churne ut løsninger. Du kan resonnere fysisk for at ψ_0 over er grunntilstanden, og at de andre tilstandene er gitt ved

$$\psi_n(x) = a_+^n \psi_0(x).$$

Dersom du fortsetter å påføre a_+ n ganger, får du løsninger som er normalfordelingesfunksjonen ganger en skalar ganger de berømte **hermitepolynomene**.[5] Hermitepolynomene er ortogonale, men med hensyn på et litt rart indreprodukt:

$$(f, g) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)g(x)e^{-x^2}\,dx$$

$\boxed{12}$ Vis at dette er et reelt indreprodukt.

[5] https://en.wikipedia.org/wiki/Hermite_polynomials

UKENS NØTTER

Heisenbergs usikkerhetsprinsipp kan nå utledes. Dette er en matematisk lov som forteller noe om en minste skranke for produktet av standardavvikene til $|\Psi|^2$ og $|\widehat{\Psi}|^2$:

$$
\begin{aligned}
1 &= \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 \, dx \\
&= \left| \int_{-\infty}^{\infty} x \frac{\partial}{\partial x} |\Psi|^2 \, dx \right| && \text{delvis integrasjon} \\
&= \left| \int_{-\infty}^{\infty} x \left(\Psi' \overline{\Psi} + \Psi \overline{\Psi'} \right) \, dx \right| \\
&\leq \int_{-\infty}^{\infty} |x| \left(|\Psi' \overline{\Psi}| + |\Psi \overline{\Psi'}| \right) \, dx \\
&= 2 \int_{-\infty}^{\infty} |x| |\Psi| |\Psi'| \, dx \\
&\leq 2 \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\Psi|^2 \, dx} \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi'|^2 \, dx} && \text{cauchy-schwarz} \\
&= 2 \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\Psi|^2 \, dx} \sqrt{\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} |\widehat{\Psi'}|^2 \, dk} && \text{plancherel} \\
&= 2 \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\Psi|^2 \, dx} \sqrt{\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} k^2 |\widehat{\Psi}|^2 \, dk} && \text{derivasjonsregel for fourieromvending} \\
&= 4\pi \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\Psi|^2 \, dx} \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 |\widehat{\Psi}|^2 \, d\xi}
\end{aligned}
$$

$\boxed{11}$ Hm.