Höfum jöfnu Schrödingers í einni vídd

$$\boxed{i\hbar\,\partial_t \psi(x,t) = H\,\psi(x,t)}$$

Viljum fyrst skoða kerfi með einni eind sem hafa sígilda Hamilton fallið

$$H = \frac{p^2}{2m} + V$$

Skammta virkinn verður þá

$$\boxed{H = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V}$$

Við sjáum betur ~~síðar~~ hvernig og hvers vegna

Skoðum samt æðeins

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

hvernig er væntigildið á x háð tíma?

↑ hlýtur að tengjast straumþunga

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \; x \cdot \left[\frac{\partial}{\partial t}|\psi(x,t)|^2\right]$$

x er óháð tíma hér

verðum að nota jöfnu Schrödingers

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[x\left\{\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(x,t)\right\}\psi(x,t) + x\psi^*(x,t)\cdot\left\{\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)\right\}\right]$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dx \; x \left[\psi^*(x,t)\left\{H\psi(x,t)\right\} - \left\{H\psi^*(x,t)\right\}\psi(x,t)\right]$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dx \; x \left[-\psi^*(x,t)\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi(x,t) + \frac{\hbar^2}{2m}\left\{\partial_x^2\psi^*(x,t)\right\}\psi(x,t)\right]$$

$$= \frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} dx \; x \; \partial_x \left[\psi^* \{\partial_x \psi\} - \{\partial_x \psi^*\} \psi \right] \longrightarrow \text{hlutheildun}$$

$$= -\frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\psi^* (\partial_x \psi) - (\partial_x \psi^*) \psi \right] + \underbrace{x\left[\psi^*(\partial_x\psi) - (\partial_x\psi^*)\psi\right]\Big|_{-\infty}^{\infty}}_{=0}$$

eftir hlutheildun

$$= -\frac{i\hbar}{m}\int_{-\infty}^{\infty} dx \; \psi^*(x,t)\, \partial_x \psi(x,t)$$

$\frac{d}{dt}\langle x \rangle$ er meðalhraðinn $\langle v \rangle$

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

Við höfum því

$$\boxed{\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int \psi^* \cdot x \cdot \psi \, dx \\ \langle p \rangle &= \int \psi^* \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} \psi \, dx \end{aligned}}$$

í staðarrúminu
(x, t)

x : staðsetningarvirkinn

$p = -i\hbar\partial_x$: skriðþungavirkinn

og þessvegna var skömmtunin

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

Því lítur út fyrir að skömmtun felist í því að (5)

$$\boxed{\langle Q(x,p)\rangle = \int dx\ \psi^* \, Q\left(x, -i\hbar\partial_x\right) \psi}$$

Við gerum þetta betur síðar og athugum viðbóter-skilyrði

Staðsetning og skriðþungi
eru reiknaðst á eins sem
væntigildi eða meðaltöl

$\rightarrow$ Óvissa í staðsetningu og skriðþ.

Óvissa

Skoðum aftur bylgjufallið

$$\psi(x) = \left(\frac{2}{\sqrt{\pi}\,a}\right)^{1/2} \left(\frac{x}{a}\right) e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{a}\right)^2}$$

$$p\psi(x) = -i\hbar\partial_x\psi(x) = -i\hbar\left(\frac{2}{\sqrt{\pi}\,a}\right)^{1/2}\left\{\frac{1}{a} - \frac{1}{a}\left(\frac{x}{a}\right)\left(\frac{x}{a}\right)\right\} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{a}\right)^2}$$

$$= +\frac{i\hbar}{a}\left(\frac{2}{\sqrt{\pi}\,a}\right)^{1/2}\left\{\left(\frac{x}{a}\right)^2 - 1\right\} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{a}\right)^2}$$

og

$$p^2\psi(x) = -\hbar^2\partial_x^2\psi = +\frac{\hbar^2}{a}\left(\frac{2}{\sqrt{\pi}\,a}\right)^{1/2}\left[2\frac{x}{a^2} + \left\{\left(\frac{x}{a}\right)^2 - 1\right\}\left(-\frac{x}{a^2}\right)\right] \cdot e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{a}\right)^2}$$

$$\rightarrow\ p^2\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{a^2}\left(\frac{2}{\sqrt{\pi}\,a}\right)^{1/2}\left\{\left(\frac{x}{a}\right)^3 - 3\left(\frac{x}{a}\right)\right\} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{a}\right)^2}$$

Reiknum því

$$\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \psi^* p\ \psi = \frac{i\hbar}{a}\ \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} du\ \{u^3 - u\}\, e^{-u^2} = 0$$

oddstætt fall

$$\langle p^2\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \psi^* p^2 \psi$$

$$= -\frac{\hbar^2}{a^2}\ \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} du\ \left\{u^4 - 3u^2\right\} e^{-u^2} = -\frac{\hbar^2}{a^2}\,\frac{2}{\sqrt{\pi}}\left\{\frac{3}{4}\sqrt{\pi} - \frac{3}{2}\sqrt{\pi}\right\}$$

$$\rightarrow \quad \langle p^2 \rangle = + \frac{\hbar^2}{a^2} \frac{3}{2}$$

og því fæst að

$$\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\hbar}{a}$$

og

$$\boxed{\Delta x \cdot \Delta p = \left\{ a\sqrt{\frac{3}{2}} \right\} \left\{ \frac{\hbar}{a} \sqrt{\frac{3}{2}} \right\} = \hbar \frac{3}{2}}$$

Síðar sjáum við óvissu lögmál Heisenbergs

$$\boxed{\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}}$$

sem við greinilega uppfyllum hér

Við eigum eftir að kanna eiginleika jöfnu Schrödingers betur

skoða afleiðingar hennar

Bæta við staðreyndum um mælingar og mælistærðir

Koma skammtafræðinni á hennar almennara form

Menn notast við línulega virkja á fallarúm,
Hilbert rúm (með vídd ∞)

Jafna Schrödingers birtist í ýmsum myndum
í staðarrúmi $(\bar{x}, t)$, í skriðþungarúmi $(\bar{k}, \omega)$
Eins getur hún verið í fallarúmi

línuleg afleiðujafna, heildisjafna, afleiðuheildisjafna
línulegar jöfnur . . . . .