Tampereen yliopisto

Saijad Ahmadi

EHRENFESTIN TEOREEMA

Kandidaatintyö
Tekniikan ja luonnontieteiden tiedekunta
Maaliskuu 2020

TIIVISTELMÄ

Saijad Ahmadi: Ehrenfestin teoreema
Kandidaatintyö
Tampereen yliopisto
Tekniikan ja luonnontieteiden koulutusohjelma
Ohjaaja: Prof. Tapio Rantala
Maaliskuu 2020

Tässä työssä tutkitaan Ehrenfestin teoreemaa ja sen fysikaalista merkitystä. Ehrenfestin teoreeman mukaan kvanttimekaniikan operaattorien odotusarvot noudattavat klassisen mekaniikan liikeyhtälöitä. Työssä tarkastellaan yksiulotteisessa avaruudessa ja ajasta riippumattomassa potentiaalissa $V = V(x)$ olevaa hiukkasta. Työn yksi tavoite on selvittää, millä ehdoilla kvanttimekaniikan operaattorien odotusarvot noudattavat klassisen mekaniikan liikeyhtälöitä.

Työ jakautuu neljään osaan. Aluksi luvussa 2 määritellään käsitteitä ja niiden keskinäisiä riippuvuuksia, jonka jälkeen luvussa 3 perehdytään kvanttimekaniikan perusteisiin. Tässä osiossa esitellään kvanttimekaniikan postulaatit, kerrataan klassisen mekaniikan liikeyhtälöt ja tarkastellaan yhden hiukkasen aaltofunktion aikakehitystä yksiulotteisessa avaruudessa ja ajasta riippumattomassa potentiaalissa $V = V(x)$. Lisäksi tässä osiossa esitellään ajasta riippuvan Schrödingerin yhtälön yleinen ratkaisu sekä tarkastellaan stationääristen ja ei-stationääristen tilojen ominaisuuksia.

Seuraavaksi luvussa 4 tarkastelun kohteena on harmoninen värähtelijä. Aloitetaan klassisesta harmonisesta värähtelijästä, jonka jälkeen siirrytään kvanttimekaaniseen harmoniseen värähtelijään. Kvanttimekaanisen harmonisen värähtelijän energian ominaisarvoyhtälöt ja ominaisarvot tullaan ratkaisemaan ajasta riippumattomasta Schrödingerin yhtälöstä käyttämällä Frobeniuksen sarjamenetelmää. Lisäksi tarkastellaan kvanttimekaanisen harmonisen värähtelijän paikan ja liikemäärän odotusarvoja stationaarisille ja ei-stationaarisille tiloille. Nähdään myös, että harmonisen värähtelijän operaattorien odotusarvot noudattavat klassisen mekaniikan liikeyhtälöitä.

Lopuksi luvussa 5 tutustutaan Ehrenfestin teoreemaan. Aluksi tullaan todistamaan Ehrenfestin teoreema lähtemällä liikkeelle ajasta riippumattoman operaattorin odotusarvon aikaderivaatasta. Päädytään siihen tulokseen, että paikka- ja liikemääräoperaatoreiden odotusarvot voidaan liittää toisiinsa. Tämän jälkeen tutkitaan, milloin operaattoreiden odotusarvot noudattavat klassisen mekaniikan liikeyhtälöitä.

ALKUSANAT

Haluan kiittää professori Tapio Rantalaa kandidaatintyöni ohjaamisesta ja tarkastamisesta sekä parannusehdotuksista.

SISÄLLYSLUETTELO

1. JOHDANTO 1
2. MATEMAATTISIA KÄSITTEITÄ 3
3. KVANTTIMEKANIIKAN PERUSTEET 6
3.1 Kvanttimekaniikan postulaatit 6
3.2 Klassiset liikeyhtälöt ja tärkeimmät operaattorit 7
3.3 Aaltofunktion aikakehitys 8
3.4 Yleinen ratkaisu 9
4. HARMONINEN OSKILLAATTORI 11
4.1 Klassinen harmoninen värähtelijä 11
4.2 Kvanttimekaaninen harmoninen värähtelijä 12
4.3 Stationäärisen tilan odotusarvot 15
4.4 Ei-stationäärisen tilan odotusarvot 16
5. EHRENFESTIN TEOREEMA 20
6. YHTEENVETO 24
LÄHTEET 26

LYHENTEET JA MERKINNÄT

MATLAB	Numeerinen laskentaohjelma
$\boldsymbol{a}$	kiihtyvyysvektori
E	energia
$\boldsymbol{F}$	voimavektori
H	Hamiltonin funktio
$\hat{H}$	Hamilton operaattori
i	imaginaariyksikkö
m	massa
$\hat{A}$ ja $\hat{B}$	mielivaltaiset operaattorit
$P(x,t)$	todennäköisyystiheys
$\boldsymbol{p}$	liikemäärävektori
$\hat{\boldsymbol{p}}$	liikemääräoperaattori
t	aika
$\boldsymbol{v}$	nopeusvektori
V	potentiaali
$\boldsymbol{r}$	paikkavektori
x	paikka yksiulotteisessa avaruudessa
$\mathbb{C}$	Kompleksilukujen joukko
$\mathbb{R}$	Reaalilukujen joukko
$\hbar$	redusoitu Planckin vakio
π	pii
ψ_E	energian ominaisfunktio
ψ_p	liikemäärän ominaisfunktio
$\Psi(x,t)$	aaltofunktio
$\langle\hat{A}\rangle$	Operaattorin $\hat{A}$ odotusarvo
$[\hat{A},\hat{B}]$	Operaattoreiden $\hat{A}$ ja $\hat{B}$ kommutaattori
$\boldsymbol{\nabla}$	Gradientti

1. JOHDANTO

Historian saatossa monet fysiikan lait on jouduttu korjaamaan tai niiden käyttötarkoitusta rajaamaan tiettyyn alueeseen. Uutta teoriaa tarvitaan, kun tehdään mittauksia, joiden tuloksia ei voida selittää sen hetken teorian avulla. Yleisesti on huomattu, että kun vanha teoria korvataan uudella teorialla, antaa uusi teoria samat tulokset vanhan teorian toimivuusalueella. Esimerkiksi kvanttimekaniikka sisältää klassisen mekaniikan rajatapauksena [1].

Kvanttimekaniikan mukaan atomaarisen mittakaavan hiukkasen tiettyjen dynaamisten suureiden arvoa ei voida määrittää tarkkaan, vaan ainoastaan tietyllä todennäköisyydellä [2]. Kvanttimekaniikan ja klassisen mekaniikan välinen yhteys voidaan nähdä esimerkiksi tietyin ehdoin Ehrenfestin teoreemasta [2,3]. Kun tarkasteltavan hiukkassysteemin koko ja energia ovat suuret, tulee siihen liittyvä epämääräisyys merkityksettömän pieneksi ja sitä voidaan tarkastella klassisen mekaniikan lakien avulla [2].

Tämän tutkielman tarkoituksena on tarkastella Ehrenfestin teoreemaa ja sen fysikaalista merkitystä. Työssä tarkastellaan yksiulotteisessa avaruudessa ja ajasta riippumattomassa potentiaalissa $V = V(x)$ olevaa hiukkasta. Työ aloitetaan käsittelemällä matemaattisia määritelmiä ja tuloksia, joita tarvitaan kvanttimekaniikan kuvailemisessa. Tämän jälkeen perehdytään kvanttimekaniikan perusteisiin. Tässä osiossa esitellään kvanttimekaniikan postulaatit, kerrataan klassisen mekaniikan liikeyhtälöitä ja tarkastellaan yhden hiukkasen aaltofunktion aikakehitystä yksiulotteisessa avaruudessa ja ajasta riippumattomassa potentiaalissa $V = V(x)$. Tärkeiksi tarkastelukohteiksi nousevat ajasta riippuvan Schrödingerin yhtälön yksittäinen ja yleinen ratkaisu sekä stationääristen ja ei-stationääristen tilojen todennäköisyystiheydet.

Luvussa neljä tutkitaan harmonista värähtelijää esimerkkinä. Luku aloitetaan tutkimalla klassista harmonista värähtelijää. Samalla osoitetaan, että pieniamplitudista värähtelyä potentiaalin minimin ympäristössä voidaan approksimoida harmonisen värähtelijän potentiaalilla [4]. Muuttamalla klassisen harmonisen värähtelijän Hamiltonin funktio Hamiltonin operaattoriksi saadaan kvanttimekaanisen harmonisen värähtelijän Schrödingerin yhtälö. Kvanttimekaanisen harmonisen värähtelijän energian ominaisyhtälöt ja ominaisarvot ratkaistaan ajasta riippumattomasta Schrödingerin yhtälöstä käyttämällä Frobeniuksen sarjamenetelmää. Ratkaisujen avulla tarkastellaan kvanttimekaanisen harmonisen värähtelijän odotusarvoja stationäärisille ja ei-stationäärisille tiloille. Tarkastelemalla näiden odotusarvojen muutosnopeuksia huomataan, että harmonisen värähtelijän odotusarvoille pätevät klassisen mekaniikan liikeyhtälöt.

Luvussa viisi tutustutaan Ehrenfestin teoreeman. Luku aloitetaan todistamalla Ehrenfestin teoreema lähtemällä liikkeelle ajasta riippumattoman operaattorin odotusarvon aikaderivaatasta. Tästä nähdään miten paikka- ja liikemääräoperaattoreiden odotusarvot liittyvät toisiinsa. Lisäksi tutkitaan, milloin operaattoreiden odotusarvot noudattavat klassisen mekaniikan liikeyhtälöitä.

2. MATEMAATTISIA KÄSITTEITÄ

Tässä luvussa perehdytään lineaarialgebraan ja muihin matemaattisiin menetelmiin, joita tarvitaan kvanttimekaniikan kuvailemisessa. Kvanttimekaniikassa fysikaalisia suureita edustavat operaattorit. Operaattorit on tapana esittää kirjaimilla, joiden päällä on hattu; esimerkiksi paikkaoperaattori yksiulotteisessa avaruudessa kirjoitetaan $\hat{x}$. Kvanttimekaniikassa operaattori kohdistuu aaltofunktioon $\Psi(x,t)$. [4,5,6]

Määritelmä 2.1 (lineaarinen operaattori) [5,6,7]. $\hat{A}$ on lineaarinen operaattori funktioavaruudessa, jos kaikille funktioille Ψ on voimassa

$$\hat{A}(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2) = c_1\big(\hat{A}\Psi_1\big) + c_2(\hat{A}\Psi_2), \tag{1}$$

missä c_1 ja c_2 ovat kompleksisia vakioita.

Seuraavat laskusäännöt ovat voimassa lineaarisille operaattoreille:

- Operaattorin $\hat{A}$ kertominen mielivaltaisella vakiolla c:
  $$\big(c\hat{A}\big)\Psi = c(\hat{A}\Psi), \tag{2}$$
  missä $c \in \mathbb{C}$.
- Kahden operaattorin summa $\hat{A} + \hat{B}$:
  $$\big(\hat{A} + \hat{B}\big)\Psi = \hat{A}\Psi + \hat{B}\Psi \tag{3}$$
- Kahden operaattorin tulo $\hat{A}\hat{B}$:
  $$\hat{A}\hat{B}\,\Psi = \hat{A}(\hat{B}\Psi). \tag{4}$$

Määritelmä 2.2 (ominaisfunktiot ja ominaisarvot) [8]. Funktio ψ on operaattorin $\hat{A}$ ominaisfunktio, jos

$$\hat{A}\psi = a\psi, \tag{5}$$

missä a on operaattorin $\hat{A}$ ominaisarvo.

Operaattorin $\hat{A}$ ominaisfunktiot $\{\psi_n\}$ muodostavat täydellisen joukon. Mielivaltainen toinen funktio voidaan esittää näiden ominaisfunktioiden lineaarikombinaationa

$$\Psi = \textstyle\sum_n c_n\psi_n, \tag{6}$$

missä $c_n \in \mathbb{C}$ ovat vakioita.

Määritelmä 2.3 (kommutaattori) [2,7]. Operaattoreiden $\hat{A}$ ja $\hat{B}$ välinen kommutaattori on

$$\big[\hat{A},\hat{B}\big] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}, \tag{7}$$

missä usein $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$.

Kommutaattoreiden yleisiä ominaisuuksia:

- $[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}]$
- $[\hat{A}, (\hat{B} + \hat{C})] = [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}]$
- $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]$
- $[\hat{A}\hat{B}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\hat{B} = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{B}$
- $[\hat{A}^2, \hat{B}] = \hat{A}[\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{A} = \hat{A}^2\hat{B} - \hat{B}\hat{A}^2$.

Määritelmä 2.4 (Funktioiden normitus) [8]. Kvanttimekaniikan yhtälöissä tulee usein vastaan funktioiden ja operaattoreiden integraaleja

$$I = \int \Psi^* \hat{A}\, \Psi \,\mathrm{d}V, \tag{8}$$

missä Ψ^* on funktion Ψ kompleksikonjugaatti ja $\mathrm{d}V$ on tilavuuselementti. Funktioiden pelkkää skalaarituloa

$$S = \int \Psi^* \Psi \;\mathrm{d}V \tag{9}$$

sanotaan peittointegraaliksi. Kun integrointi tapahtuu koko avaruuden yli, on funktiot normitettu, jos kaikille Ψ on voimassa

$$\int \Psi^* \Psi \;\mathrm{d}V = 1. \tag{10}$$

Määritelmä 2.5 (Hermiittinen operaattori) [8]. Kvanttimekaniikassa hermiittiset operaattorit ovat erityisessä asemassa. Operaattori $\hat{A}$ on hermiittinen, jos

$$\int \Psi_m{}^* \hat{A}\, \Psi_n \mathrm{d}V = \int (\hat{A}\Psi_m)^* \,\Psi_n \mathrm{d}V \tag{11}$$

kaikille aaltofunktioille Ψ_m ja Ψ_n.

Määritelmä 2.6 (Ortogonaalisuus ja ortonormaalisuus) [8]. Jos

$$\int \Psi_n{}^* \Psi_m \,\mathrm{d}V = 0, \tag{12}$$

ovat funktiot $\Psi_n{}^*$ ja Ψ_m ortogonaalisia keskenään.

Funktiojoukkoa $\Psi_1, \Psi_2 \ldots \Psi_n$ sanotaan ortonormitetuksi, jos

$$\int \Psi_n{}^* \Psi_m \,\mathrm{d}V = \delta_{nm}, \tag{13}$$

missä $\mathrm{d}V$ on tilavuuselementti ja δ_{nm} on Kronckerin deltafunktio.

Hermiten polynomit 2.7 [1,2,9,10]. Kvanttimekaniikan kannalta yksi tärkeä toisen kertaluvun differentiaaliyhtälö on Hermiten yhtälö

$$y'' - 2xy' + 2my = 0, \tag{14}$$

joka esiintyy harmonisen värähtelijän käsittelyssä seuraavasti

$$H_n''(\xi) - 2\xi H_n'(\xi) + 2nH_n(\xi) = 0, \qquad n = 0,1,2,\dots\,. \tag{15}$$

Hermiten polynomeja saadaan yllä olevan differentiaaliyhtälön ratkaisuna.

Hermiten polynomien perusominaisuuksia:

- Ortogonaalisuus

  $$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(\xi)H_m(\xi)e^{-\xi^2}\mathrm{d}\xi = \delta_{nm}2^n n!\sqrt{\pi},$$

  missä δ_{nm} on Kronckerin deltafunktio.

- Rodriquesin kaava

  $$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}\xi^n}e^{-\xi^2}$$

- Palautuskaavat

  $$H_n'(\xi) = 2nH_{n-1}\,;\ H_{n+1} = 2\xi H_n - 2nH_{n-1}$$

Taylorin sarja 2.8 [11]. Jos funktiolla $f(x)$ on pisteessä $x = x_0$ kaikkien kertalukujen derivaatat $f^k(x_0)$, niin potenssisarjaa

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{f^k(x_0)}{k!}(x - x_0)^k = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f^{(2)}(x_0)}{2!}(x - x_0)^2$$

$$+\frac{f^{(3)}(x_0)}{3!}(x - x_0)^3 + \cdots \tag{16}$$

kutsutaan funktion f Taylorin sarjaksi pisteen x_0 suhteen.

Eulerin kaavat 2.9 [7].

$$\sin(\theta) = \frac{e^{\mathrm{i}\theta} - e^{-\mathrm{i}\theta}}{2\mathrm{i}}, \tag{17}$$

$$\cos(\theta) = \frac{e^{\mathrm{i}\theta} + e^{-\mathrm{i}\theta}}{2}. \tag{18}$$

3. KVANTTIMEKANIIKAN PERUSTEET

1800-luvun loppupuolella ja 1900-luvun alkupuolella tehdyt havainnot, kuten mustan kappaleen säteily, valosähköinen ilmiö ja Stern–Gerlachin koe, osoittivat että klassisen fysiikan lait ovat riittämättömiä kuvailemaan atomaarisen mittakaavan ilmiöitä. Pyrkimys selittää mittauksista saatuja tuloksia, synnytti kokonaan uuden fysiikan teorian, jota kutsutaan kvanttimekaniikaksi. Kvanttimekaniikka sai muodollisen matemaattisen muotonsa vuosina 1925–30 monen fyysikon (de Broglie, Heisenberg, Born, Schrödinger, Pauli, Dirac ...) työn tuloksena. [2,4,6]

3.1 Kvanttimekaniikan postulaatit

Yhden hiukkasen ajasta riippuva Schrödingerin yhtälö kolmessa ulottuvuudessa ja ajasta riippumattomassa potentiaalissa on

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2\Psi(\boldsymbol{r},t)+V(\boldsymbol{r})\Psi(\boldsymbol{r},t)=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{r},t), \tag{19}$$

missä m on massa ja $V(\boldsymbol{r})$ on potentiaali. Matemaattiselta kannalta Schrödingerin yhtälö on toisen kertaluvun lineaarinen differentiaaliyhtälö. Scrödingerin yhtälö voidaan vaihtoehtoisesti joko postuloida tai johtaa Lagrangen funktiosta. Kvanttimekaniikan teoria perustuu seuraaviin postulaatteihin [2,6,8]:

1. Fysikaalisen systeemin tilaa kuvaa täysin sen aaltofunktio $\Psi(\boldsymbol{r},t)$. Jos aaltofunktio on normalisoitu, ilmaisee $|\Psi(\boldsymbol{r},t)|^2\mathrm{d}V$ todennäköisyyttä löytää hiukkanen paikasta $\boldsymbol{r}$ tilavuuselementistä $\mathrm{d}V$.
2. Systeemin jokaista havaittavaa suuretta vastaa hermiittinen operaattori $\hat{A}$. Kyseinen operaattori saadaan, kun korvataan kyseisen havaittavan suureen klassisessa lausekkeessa esiintyvä liikemäärä $\boldsymbol{p}$ operaattorilla $\frac{\hbar}{i}\boldsymbol{\nabla}$.
3. Systeemin ollessa tilassa $\psi(\boldsymbol{r})$, on mitatun suureen keskiarvo sama kuin suuretta vastaavan operaattorin $\hat{A}$ odotusarvo $\langle\hat{A}\rangle$. Jos aaltofunktio on normalisoitu, operaattorin odotusarvo saadaan yhtälöstä

$$\langle\hat{A}\rangle=\int\psi^*(\boldsymbol{r})\hat{A}\psi(\boldsymbol{r})\,\mathrm{d}V. \tag{21}$$

4. Aaltofunktion aikakehitys määräytyy ajasta riippuvasta Schrödingerin yhtälöstä

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2\Psi(\boldsymbol{r},t)+V(\boldsymbol{r},t)\Psi(\boldsymbol{r},t)=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{r},t).$$

5. Jos mitataan suuretta A, mahdollisia mittaustuloksia ovat vain tätä suuretta vastaavan operaattorin $\hat{A}$ ominaisarvot a_n. Jos suuren A mittauksesta saadaan tulokseksi ominaisarvo a_n, romahtaa aaltofunktio tätä ominaisarvoa vastaavaksi ominaisfunktioksi ψ_n.

3.2 Klassiset liikeyhtälöt ja tärkeimmät operaattorit

Klassisessa mekaniikassa hiukkasen mielivaltainen tila kolmiulotteisessa avaruudessa voidaan määrittää paikan $\boldsymbol{r}$ ja liikemäärän $\boldsymbol{p}$ avulla. Tämän hiukkasen aikakehitys määräytyy Newtonin liikeyhtälöstä

$$m\frac{d\boldsymbol{v}}{dt} = m\boldsymbol{a} = \frac{d}{dt}(m\boldsymbol{v}) = \frac{d\boldsymbol{p}}{dt} = \boldsymbol{F}. \tag{20}$$

Voimakentän ollessa konservatiivinen, voidaan voima $\boldsymbol{F}$ laskea potentiaalifunktiosta $V = V(\boldsymbol{r})$,

$$\boldsymbol{F} = -\boldsymbol{\nabla}\mathrm{V}(\mathbf{r}). \tag{21}$$

Klassisen hiukkasen liikeyhtälö konservatiivisessa voimakentässä on

$$m\frac{d^2\boldsymbol{r}}{d^2t} = -\boldsymbol{\nabla}\mathrm{V}(\mathbf{r}). \tag{22}$$

Kun potentiaalifunktio on ainoastaan paikasta riippuvainen, säilyy systeemin mekaaninen kokonaisenergia

$$E = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(\boldsymbol{r}) = \text{vakio}, \tag{23}$$

missä $\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}$ on kineettinen energia ja $V(\boldsymbol{r})$ on potentiaalienergia. [2] Kokonaisenergia voidaan esittää Hamiltonin funktion avulla seuraavasti

$$H(\boldsymbol{p},\boldsymbol{r}) = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(\boldsymbol{r}). \tag{24}$$

Soveltamalla postulaattia 2 saadaan näitä klassisia suureita vastaavat operaattorit

$$\hat{\boldsymbol{p}} = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\boldsymbol{\nabla} \tag{25}$$

$$\hat{\boldsymbol{r}} = \boldsymbol{r} \tag{26}$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2 + V(\boldsymbol{r}). \tag{27}$$

Yhtälössä (27) $\hat{H}$ kutsutaan Hamiltonin operaattoriksi. [2] Käyttämällä Hamiltonin operaattoria voidaan Schrödingerin yhtälö (19) esittää seuraavalla tavalla

$$\hat{H}\Psi(\boldsymbol{r},t) = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{r},t).$$

3.3 Aaltofunktion aikakehitys

Tarkastellaan yksiulotteisessa avaruudessa olevaa hiukkasta, joka on ajasta riippumattomassa potentiaalissa $V = V(x)$. Tämän hiukkasen tilaa kuvaavan aaltofunktion $\Psi(x,t)$ aikakehitys määräytyy Schrödingerin yhtälöstä

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial^2 \mathrm{x}}\Psi(x,t) + V(x)\Psi(x,t) = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t). \tag{28}$$

Potentiaalifunktion ollessa ajasta riippumaton, $V = V(x)$, säilyy klassisen mekaniikan mukaan kokonaisenergia E. [1,2,4] Tällöin voidaan osoittaa aaltofunktion koostuvan kahdesta osasta: paikasta ja ajasta riippuvaisista osista seuraavalla tavalla

$$\Psi(x,t) = \psi(x)f(t). \tag{29}$$

Aaltofunktion ollessa tätä muotoa, voidaan Schrödingerin yhtälö esittää yhtälönä, missä muuttujat ovat erottuneet yhtälön eri puolille seuraavasti

$$\frac{\mathrm{i}\hbar}{f(t)}\frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\psi(x)}[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\psi(x)] = \text{vakio} = E. \tag{30}$$

Tästä saadaan kaksi tavallista differentiaaliyhtälöä

$$\frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t} = -\frac{iE}{\hbar}f(t) \tag{31}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}^2\mathrm{x}}\psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x). \tag{32}$$

Yhtälöstä (31) voidaan ratkaista ajasta riippuva osa, joka on

$$f(t) = e^{-\frac{\mathrm{i}E}{\hbar}t}. \tag{33}$$

Toinen differentiaaliyhtälö (32) on niin sanottu ajasta riippumaton Schrödingerin yhtälö [2], joka voidaan Hamiltonin operaattorin (27) avulla kirjoittaa muotoon

$$\widehat{H}\psi(x) = E\psi(x).$$

Ratkaisemalla tämä ominaisarvoyhtälö saadaan energian ominaisarvot $E_n = E_0, E_1, E_2, \ldots$ ja niitä vastaavat energian ominaisfunktiot $\psi_n(x) = \psi_0(x), \psi_1(x), \psi_2(x), \ldots$. Nyt voidaan aaltofunktio (29) esittää energian ominaisfunktion avulla seuraavasti

$$\Psi(x,t) = \psi_n(x)e^{-\frac{\mathrm{i}E_n}{\hbar}t}. \tag{34}$$

On saatu aaltofunktio, jonka vaihe riippuu ainoastaan ajasta. Tutkitaan tällaisessa tilassa olevan hiukkasen todennäköisyystiheyttä

$$|\Psi(x,t)|^2 = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t) = {\psi_n}^*(x)\psi_n(x). \tag{35}$$

Huomataan, että mitattavissa olevan suureen todennäköisyystiheys ei riipu lainkaan ajasta. Tällaista tilaa kutsutaan stationääriseksi tilaksi. [1,4,12]

3.4 Yleinen ratkaisu

Scrödingerin yhtälö (19) on ensimmäisen kertaluvun lineaarinen differentiaaliyhtälö ajan suhteen. Matemaattiselta kannalta tämä tarkoittaa, että alkuhetken aaltofunktio $\Psi(x, t_0)$ määrittää tulevaisuuden täysin mittaustapahtumaan saakka. [13] Ajasta riippumattoman Schrödingerin yhtälön (32) ratkaisut muodostavat Hamiltonin operaattorin täydellisen joukon $\{\psi_n(x)\}$. Tällöin mielivaltainen paikasta riippuva aaltofunktio voidaan esittää näiden ominaisfunktioiden lineaarikombinaationa (2.2)

$$\Psi(x) = \sum c_n \psi_n(x), \tag{36}$$

missä $c_n \in \mathbb{C}$ ovat vakioita. Aaltofunktion ollessa normitettu, saadaan vakiotermit yhtälöstä

$$c_n = \int \psi_n{}^*(x)\Psi(x)\,\mathrm{d}x. \tag{37}$$

Jokainen stationäärinen tila (34) on Scrödingerin yhtälön (28) ratkaisu. Koska Schrödingerin yhtälö on lineaarinen yhtälö myös stationääristen tilojen lineaarikombinaatio

$$\Psi(x,t) = \sum c_n \psi_n(x) e^{-\frac{\mathrm{i}E_n}{\hbar}t}, \tag{38}$$

on ratkaisu. Tämä on Scrödingerin yhtälön yleinen ratkaisu. Schrödingerin yhtälön ratkaisuja, jotka ovat vähintään kahden eri stationäärisen tilan lineaarikombinaatioita kutsutaan ei-stationäärisiksi tiloiksi. [1,4,12,13]

Olkoon hiukkanen ei-stationäärisessä tilassa

$$\Psi(x,t) = c_n\psi_n(x)e^{-\frac{\mathrm{i}E_n}{\hbar}t} + c_m\psi_m(x)e^{-\frac{\mathrm{i}E_m}{\hbar}t}. \tag{39}$$

Tutkitaan tämän tilan todennäköisyystiheyttä

$$P(x,t) = |\Psi(x,t)|^2$$

$$= |c_n\psi_n(x)|^2 + |c_m\psi_m(x)|^2 + c_n{}^*c_m\psi_n{}^*(x)\psi_m(x)e^{\frac{\mathrm{i}(E_n-E_m)}{\hbar}t}$$

$$+c_m{}^*c_n\psi_m{}^*(x)\psi_n(x)e^{\frac{-\mathrm{i}(E_n-E_m)}{\hbar}t}.$$

Kaksi ensimmäistä termiä kuvaavat stationaarisia tiloja, jotka eivät riipu ajasta. Tutkitaan tarkemmin kahta viimeistä termiä

$$c_n{}^*c_m\psi_n{}^*(x)\psi_m(x)e^{\frac{\mathrm{i}(E_n-E_m)}{\hbar}t} + c_m{}^*c_n\psi_m{}^*(x)\psi_n(x)e^{\frac{-\mathrm{i}(E_n-E_m)}{\hbar}t}.$$

Ominaisfunktioiden ja vakiotermien ollessa reaalisia, voidaan tämä kirjoittaa muotoon

$$2c_n c_m \psi_n(x)\psi_m(x)\left(e^{\frac{\mathrm{i}(E_n - E_m)}{\hbar}t} + e^{\frac{-\mathrm{i}(E_n - E_m)}{\hbar}t}\right).$$

Käyttämällä Eulerin kaava (2.9) voidaan tämä esittää muodossa

$$4c_n c_m \psi_n(x)\psi_m(x)\cos\left(\frac{E_n - E_m}{\hbar}t\right).$$

Tällöin todennäköisyystiheydeksi saadaan

$$P(x,t) = {c_n}^2{\psi_n}^2(x) + {c_m}^2{\psi_m}^2(x) + 4c_n c_m \psi_n(x)\psi_m(x)\cos\left(\frac{E_n - E_m}{\hbar}t\right). \tag{40}$$

Eli todennäköisyystiheys on ajasta riippuva funktio. Tämä tarkoittaa, että aaltofunktio ja todennäköisyystiheys oskilloivat sallitulla välillä. [12,14]

4. HARMONINEN OSKILLAATTORI

Luonnossa monet systeemit värähtelevät, jonkin tasapainoaseman ympärillä. Näitä voidaan kuvata harmonisen värähtelijän avulla. Tässä luvussa perehdytään harmoniseen värähtelijään, jolla on tärkeä merkitys kvanttimekaniikan sovelluksissa. Tämän luvun kaikki kuvat on laadittu MATLAB-sovelluksella. Kuvien saamiseksi on käytetty I. Coopererin tekemiä valmiita MATLAB-skriptejä [15], joita on muokattu omaan käyttöön.

4.1 Klassinen harmoninen värähtelijä

Tarkastellaan yksiulotteista tapausta, missä m massainen kappale on kiinnitetty jouseen, jonka jousivakio on k. Olkoon tämä kappale sidottu liikkumaan tietyn x-akselin pisteen ympäristössä ilman kitka- ja pakkovoimaa. Tällöin tasapainosta matkan x verran poikkeutettu jousi-massasysteemi kokee palauttavan voiman

$$F = -kx. \tag{41}$$

Kappaleen aikakehitys määräytyy Newtonin liikeyhtälöstä

$$m\frac{\mathrm{dx}}{\mathrm{d}t^2} = F = -kx. \tag{42}$$

Käyttämällä relaatiota $\omega^2 = \frac{k}{m}$, voidaan tämä yhtälö kirjoittaa muotoon

$$\frac{\mathrm{dx}}{\mathrm{d}t^2} + \omega^2 x = 0, \tag{43}$$

missä ω on värähtelyn kulmataajuus. Tämän differentiaaliyhtälön yleinen ratkaisu on

$$x = A\cos(\omega t + \varphi), \tag{44}$$

missä A on amplitudi ja φ vaihe, jotka määritetään alkuehdosta. Koska voima on konservatiivinen, saadaan potentiaalienergia voiman integraalista seuraavasti

$$V(x) = -\int_0^x F(x)\mathrm{d}x = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2. \tag{45}$$

Harmonisen värähtelijän Hamiltonin funktioksi saadaan

$$H(p, x) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2. \tag{46}$$

Energian säilymislain mukaan värähtelijän kokonaisenergia on vakio. [4,16] Tällöin ääriasemassa värähtelijän kokonaisenergia on kokonaan potentiaalienergiaa

$$E = \frac{1}{2}kA^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 A^2. \tag{47}$$

Tästä yhtälöstä voidaan määrittää värähtelijän käännepisteet

$$x = \pm A = \pm\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} = \pm\sqrt{\frac{2E}{k}}. \tag{48}$$

Käytännössä mikä tahansa pieniamplitudinen värähtely potentiaalin minimin ympäristössä voidaan approksimoida harmonisen värähtelijän potentiaalilla (45) [4]. Olkoon hiukkanen tasapainossa pisteessä x_0. Jos hiukkanen poikkeutetaan tasapainopisteestä, voidaan sen potentiaalienergiaa arvioida kehittämällä sille Taylorin sarja (2.8) tasapainopisteen x_0 suhteen

$$V(x) = V(x_0) + V'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2 + \cdots . \tag{49}$$

Sarjan ensimmäinen termi $V(x_0)$ voidaan hylätä pois, sillä se asettaa ainoastaan energian vertailutason. Myös toinen termi häviää, sillä tasapainopisteessä energia on minimikohta ja $V'(x_0) = 0$. Poikkeaman ollessa pieni, voidaan hylätä toista kertalukua korkeammat termit ja siten approksimoida potentiaali

$$V(x) \approx \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2. \tag{50}$$

Nyt jos merkitään $k = V''(x_0)$ saadaan

$$V(x) \approx \frac{1}{2}k(x - x_0)^2,$$

eli potentiaali on likimain harmonisen värähtelijän potentiaali (45). [4]

4.2 Kvanttimekaaninen harmoninen värähtelijä

Kvanttimekaniikassa yksiulotteisen harmonisen värähtelijän Hamiltonin funktiota (46) vastaa Hamilton operaattori

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2. \tag{51}$$

Tällöin hiukkasen energian ominaisarvot voidaan ratkaista ajasta riippumattomasta Schrödingerin yhtälöstä

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\psi(x) + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\psi(x) = E\psi(x). \tag{52}$$

Helpotetaan tämän yhtälön käsittelyä käyttämällä dimensiottomia muuttujia

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x \tag{53}$$

$$K = \frac{2E}{\hbar\omega}. \tag{54}$$

Tällöin yhtälö (52) on uusien muuttujien avulla lausuttuna

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}\psi(\xi) = (\xi^2 - K)\psi(\xi). \tag{55}$$

Suurilla ξ:n arvoilla voidaan tämä yhtälö approksimoida muotoon

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}\psi(\xi) \approx \xi^2\psi(\xi), \tag{56}$$

Jonka approksimatiivinen fysikaalinen ratkaisu on

$$\psi(\xi) \approx e^{-\frac{1}{2}\xi^2}. \tag{57}$$

Schrödingerin yhtälön (52) tarkan ratkaisun löytämiseksi tehdään yrite, jolla on tämä approksimatiivinen ominaisuus

$$\psi(\xi) = h(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2}, \tag{58}$$

missä $h(\xi)$ on vielä toistaiseksi tuntematon funktio. Sijoittamalla tämä Schrödingerin yhtälöön (52), saadaan differentiaaliyhtälö funktiolle $h(\xi)$

$$h''(\xi) - 2\xi h'(\xi) + (K-1)h(\xi) = 0. \tag{59}$$

Yksi tapa ratkaista tämä differentiaaliyhtälö on käyttää Frobeniuksen sarjamenetelmää, missä h:lle tehdään sarjakehitelmän muotoinen yrite

$$h(\xi) = a_0 + a_1\xi + a_2\xi^2 + \cdots = \sum_{j=0}^{\infty} a_j\xi^j. \tag{60}$$

Tällöin voidaan yhtälö (59) kirjoittaa muodossa

$$\sum_{j=0}^{\infty}\left[(j+1)(j+2)a_{j+2} - 2ja_j + (K-1)a_j\right]\xi^j = 0. \tag{61}$$

Tämä on voimassa kaikille muuttujan ξ arvoille, jos

$$(j+1)(j+2)a_{j+2} - 2ja_j + (K-1)a_j = 0. \tag{62}$$

Tästä ehdosta saadaan rekursioyhtälö

$$a_{j+2} = \frac{(2j+1-K)}{(j+1)(j+2)}a_j. \tag{63}$$

Kun a_0 ja a_1 tunnetaan, voidaan kaikki termit lausua näiden avulla seuraavasti

$$h_{even}(\xi) = a_0 + a_2\xi^2 + a_4\xi^4 \ldots \tag{64}$$

$$h_{odd}(\xi) = a_1\xi + a_3\xi^3 + a_5\xi^5 + \cdots. \tag{65}$$

Tällöin voidaan koko ratkaisu kirjoittaa näiden parillisten ja parittomien funktioiden summana

$$h(\xi) = h_{even}(\xi) + h_{odd}(\xi). \tag{66}$$

Ongelmana on se, että kaikki ratkaisut, jotka on saatu tällä tavalla eivät ole normalisoituvia ja näin ollen eivät ole myöskään fysikaalisesti hyväksyttäviä. Nimittäin suurilla j:n arvoilla

$$\psi(\xi) \longrightarrow e^{\xi^2}, \text{kun } \xi \to \infty, \tag{67}$$

jolloin aaltofunktio hajaantuu. Ongelma voidaan ratkaista, katkaisemalla funktion h potenssisarjaesitys (60) jollain indeksin j arvolla siten, että termi $a_{j+2} = 0$. Tästä seuraa, että

$$K = 2n + 1 \longrightarrow E_n = (n + \tfrac{1}{2})\hbar\omega, \quad n = 0,1,2, \dots . \tag{68}$$

Sijoittamalla $K = 2n + 1$ differentiaaliyhtälöön (59), saadaan yhtälö

$$H_n''(\xi) - 2\xi H_n'(\xi) + 2nH_n(\xi) = 0, \qquad n = 0,1,2, \dots , \tag{69}$$

jota kutsutaan Hermiten yhtälöksi. Fysikaalisesti hyväksyttäviä ratkaisuja ovat siis äärelliset potenssisarjat, eli Hermiten polynomit (2.7). Tällöin normalisoidut aaltofunktiot ovat muotoa

$$\psi_n(x) = C_n H_n(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x)e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}, \tag{70}$$

missä C_n on normitustekijä ja H_n on Hermiten polynomi. [1,2,4]

Harmonisen värähtelijän stationaariset tilat ovat

$$\Psi(x,t) = \psi_n(x)e^{\frac{-\mathrm{i}E_n}{\hbar}t}. \tag{71}$$

Ja yleinen ratkaisu on

$$\Psi(x,t) = \sum c_n\, \psi_n(x)e^{-\frac{\mathrm{i}E_n}{\hbar}t} . \tag{72}$$

Kahden ensimmäisen Hermiten polynomin arvoksi saadaan:

$$H_0(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x) = 1$$

$$H_1(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x) = 2\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$$

Käyttämällä Hermiten polynomien ortogonaalisuutta (2.7), saadaan normitustekijän [2,17] yhtälöksi

$$C_n = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\sqrt{\frac{1}{2^n n!}}, \quad n = 0,1,2, \dots . \tag{73}$$

Kahden ensimmäisen tilan normitustekijäksi saadaan:

$$C_0 = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}}$$

$$C_1 = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\frac{1}{2}}$$

Listataan vielä lopuksi harmonisen värähtelijän kahden alimman tilan ominaisfunktiot ja niitä vastaavat energian ominaisarvot [2,17]:

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \qquad E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \tag{75}$$

$$\psi_1(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \sqrt{2}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \qquad E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega \tag{76}$$

4.3 Stationäärisen tilan odotusarvot

Olkoon hiukkanen harmonisen värähtelijän stationäärisessä tilassa

$$\Psi_n(x,t) = \psi_n(x) e^{\frac{-\mathrm{i}E_n}{\hbar}t},$$

missä $\psi_n(x)$ on reaalinen ominaisfunktio (70). Tämän tilan paikan- ja liikemäärän odotusarvot saadaan yhtälöistä

$$\langle\hat{x}\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n{}^*(x) e^{\frac{\mathrm{i}E_n}{\hbar}t} \hat{x}\psi_n(x) e^{\frac{-\mathrm{i}E_n}{\hbar}t}\,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(x) x \psi_n(x)\,\mathrm{d}x, \tag{77}$$

$$\langle\hat{p}\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(x) \left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi_n(x)\right)\mathrm{d}x = -\mathrm{i}\frac{\hbar}{2}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(\psi_n(x))^2\,\mathrm{d}x. \tag{78}$$

Tällöin symmetrian perusteella

$$\langle\hat{x}\rangle = 0,$$

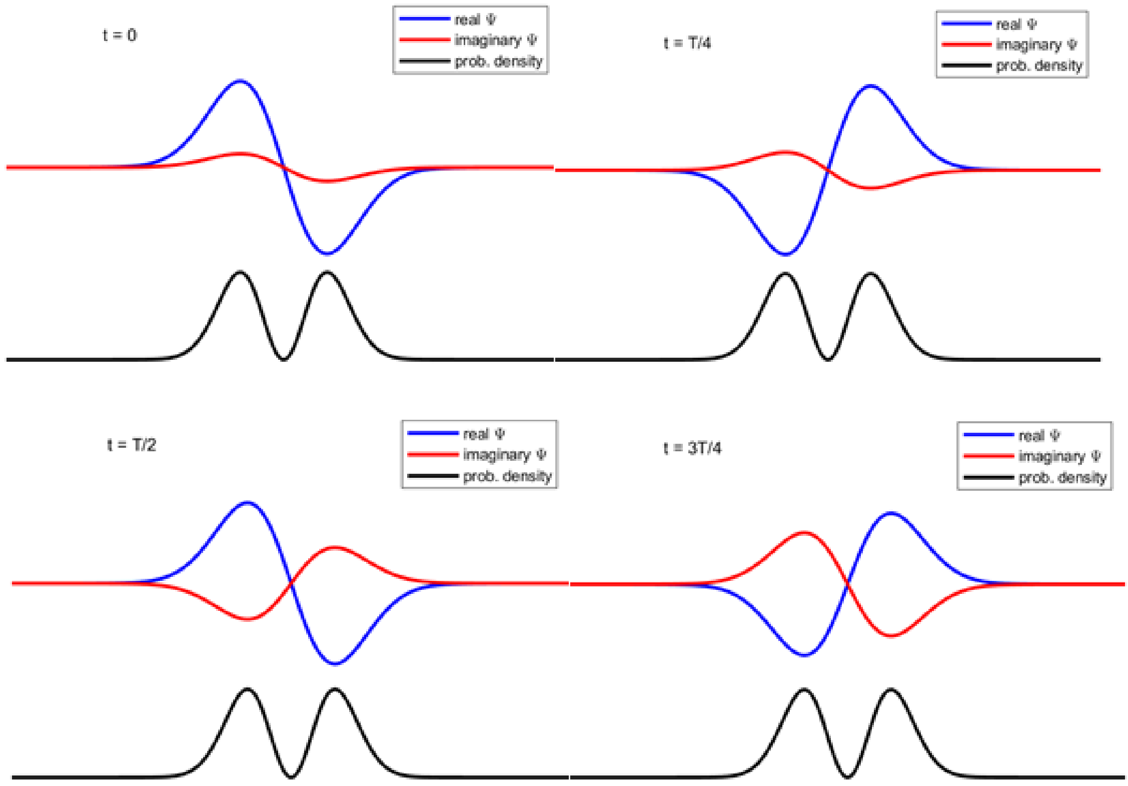
$$\langle\hat{p}\rangle = 0.$$

Näiden odotusarvojen aikaderivaataksi saadaan

$$\frac{\mathrm{d}\langle\hat{x}\rangle}{\mathrm{d}t} = 0,$$

$$\frac{\mathrm{d}\langle\hat{p}\rangle}{\mathrm{d}t} = 0.$$

Kuva 1 esittää harmonisen värähtelijän stationäärisen tilan $\Psi_1(x,t)$ reaali- ja imaginaari osien ja todennäköisyystiheyden aikakehityksen ajanhetkillä $t = 0,\ t = T/4, t = T/2, t = 3T/4$, missä T on aaltofunktion värähtelyn jakson aika. Kuvasta nähdään, että reaali- ja imaginaariosien vaiheet muuttuvat ajan suhteen, kun taas todennäköisyystiheys pysyy samana. Koska todennäköisyystiheys ei muutu ajan suhteen, eivät myöskään paikan ja liikemäärän odotusarvot muutu ajan suhteen. [18,19]



Kuva 1: Harmonisen värähtelijän stationäärisen tilan $\boldsymbol{\Psi_1(x,t)}$ reaali- ja imaginaariosien ja todennäköisyystiheyden aikakehitys.

4.4 Ei-stationäärisen tilan odotusarvot

Olkoon hiukkanen harmonisen värähtelijän ei-stationäärisessä tilassa

$$\Psi_{0,1}(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_0 e^{-\mathrm{i}\frac{1}{2}\omega t} + \psi_1 e^{-\mathrm{i}\frac{3}{2}\omega t}\right). \tag{79}$$

Tämän tilan paikan odotusarvo on

$$\langle\hat{x}\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{0,1}{}^{*}(x,t)\hat{x}\Psi_{0,1}(x,t)\,\mathrm{d}x.$$

$$= \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\left[\psi_0 e^{\mathrm{i}\frac{1}{2}\omega t} + \psi_1 e^{\mathrm{i}\frac{3}{2}\omega t}\right]\hat{x}\left[\psi_0 e^{-\mathrm{i}\frac{1}{2}\omega t} + \psi_1 e^{-\mathrm{i}\frac{3}{2}\omega t}\right]\mathrm{d}x$$

$$= \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\left[\psi_0 x\psi_0 + \psi_0 x\psi_1 e^{-\mathrm{i}\omega t} + \psi_1 x\psi_0 e^{\mathrm{i}\omega t} + \psi_1 x\psi_1\right]\mathrm{d}x \tag{80}$$

Symmetrian perusteella

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_0 x\psi_0\,dx = \int_{-\infty}^{\infty}\psi_1 x\psi_1\,dx = 0,$$

joten

$$\langle\hat{x}\rangle = \frac{1}{2}\left[e^{-\mathrm{i}\omega t}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_0 x\psi_1\,dx + e^{\mathrm{i}\omega t}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_0 x\psi_1\,dx\right]. \tag{81}$$

Soveltamalla Eulerin kaava (2.9) voidaan tämä kirjoittaa muotoon

$$\langle \hat{x} \rangle = \cos(\omega t) \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0 x \psi_1 \, dx. \tag{82}$$

Sijoittamalla harmonisen värähtelijän perustilan (75) ja ensimmäisen virittyneen tilan (76) ominaisfunktiot ja laskemalla integraali, saadaan paikan [12,18,19,20] odotusarvoksi

$$\langle \hat{x} \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \cos(\omega t). \tag{83}$$

Samanlaisella periaatteella saadaan liikemäärän odotusarvo

$$\langle \hat{p} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{0,1}(x,t) \hat{p} \Psi_{0,1}(x,t) \, \mathrm{d}x$$

$$= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\psi_0 e^{\mathrm{i}\frac{1}{2}\omega t} + \psi_1 e^{\mathrm{i}\frac{3}{2}\omega t} \right] \hat{p} \left[\psi_0 e^{-\mathrm{i}\frac{1}{2}\omega t} + \psi_1 e^{-\mathrm{i}\frac{3}{2}\omega t} \right] \mathrm{d}x$$

$$= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\psi_0 \left(-\mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \psi_0 \right) + \psi_0 \left(-\mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \psi_1 \right) e^{-\mathrm{i}\omega t} + \psi_1 \left(-\mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \psi_0 \right) e^{\mathrm{i}\omega t} + \psi_1 \left(-\mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \psi_1 \right) \right] \mathrm{d}x$$

$$= -\mathrm{i}\hbar \frac{1}{2} \left[e^{-\mathrm{i}\omega t} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0 \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \psi_1 \right) dx + e^{\mathrm{i}\omega t} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1 \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \psi_0 \right) dx \right]$$

$$= -\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \sin(\omega t). \tag{84}$$

Poiketen stationäärisistä tiloista, ei-stationääristen tilojen odotusarvot ovat nollasta poikkeavia ja riippuvat ajasta. [18,19,20]

Tarkastellaan paikan odotusarvon muutosnopeutta

$$\frac{\mathrm{d}\langle \hat{x} \rangle}{\mathrm{d}t} = -\omega \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sin(\omega t) = -\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2m}} \sin(\omega t). \tag{85}$$

Verrataan tätä liikemäärän odotusarvoon

$$\langle \hat{p} \rangle = -\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \sin(\omega t) = m \frac{\mathrm{d}\langle \hat{x} \rangle}{\mathrm{d}t}. \tag{86}$$

Huomataan, että

$$\frac{\mathrm{d}\langle \hat{x} \rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{\langle \hat{p} \rangle}{m}. \tag{87}$$

Tarkastellaan vielä liikemäärän odotusarvon muutosnopeutta

$$\frac{\mathrm{d}\langle \hat{p} \rangle}{\mathrm{d}t} = -\omega \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \cos(\omega t) = -m\omega^2 \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \cos(\omega t) = -m\omega^2 \langle \hat{x} \rangle. \tag{88}$$

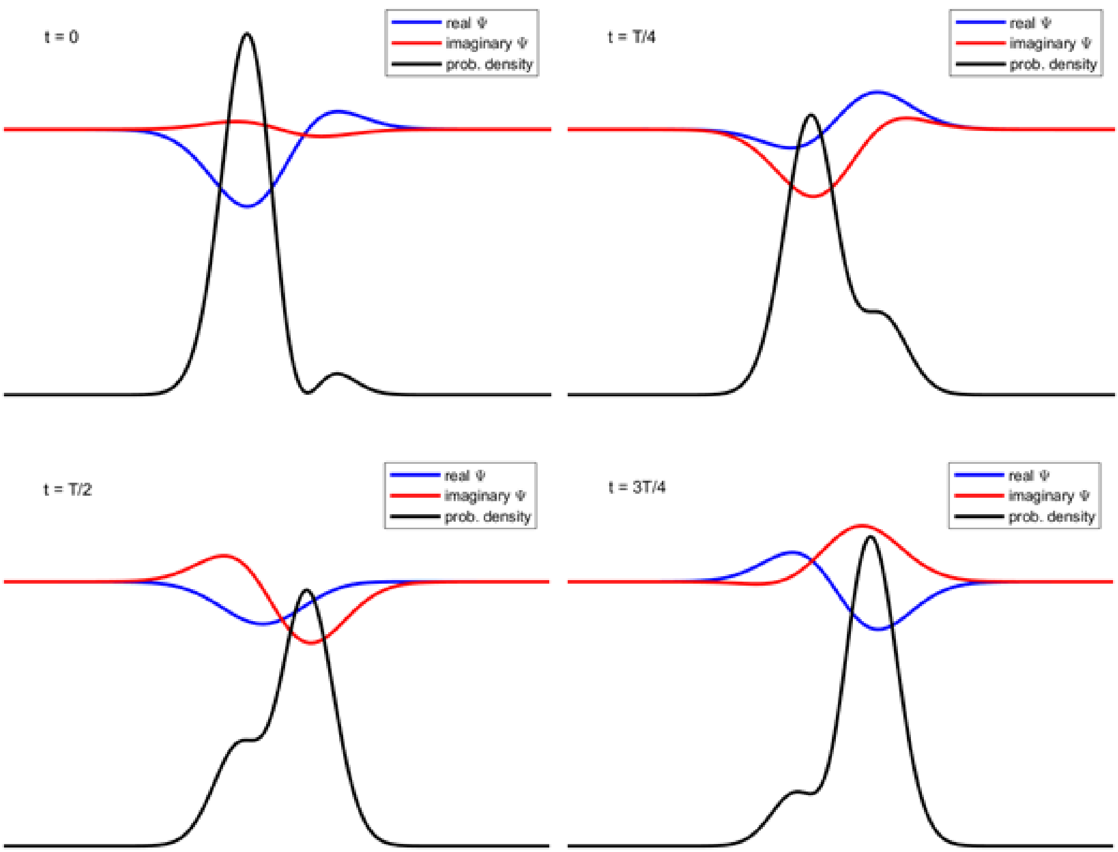
Verrataan tätä harmonisen värähtelijän potentiaalin (45) derivaatan odotusarvoon

$$-\langle \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} V(x) \rangle = -m\omega^2 \langle \hat{x} \rangle. \tag{89}$$

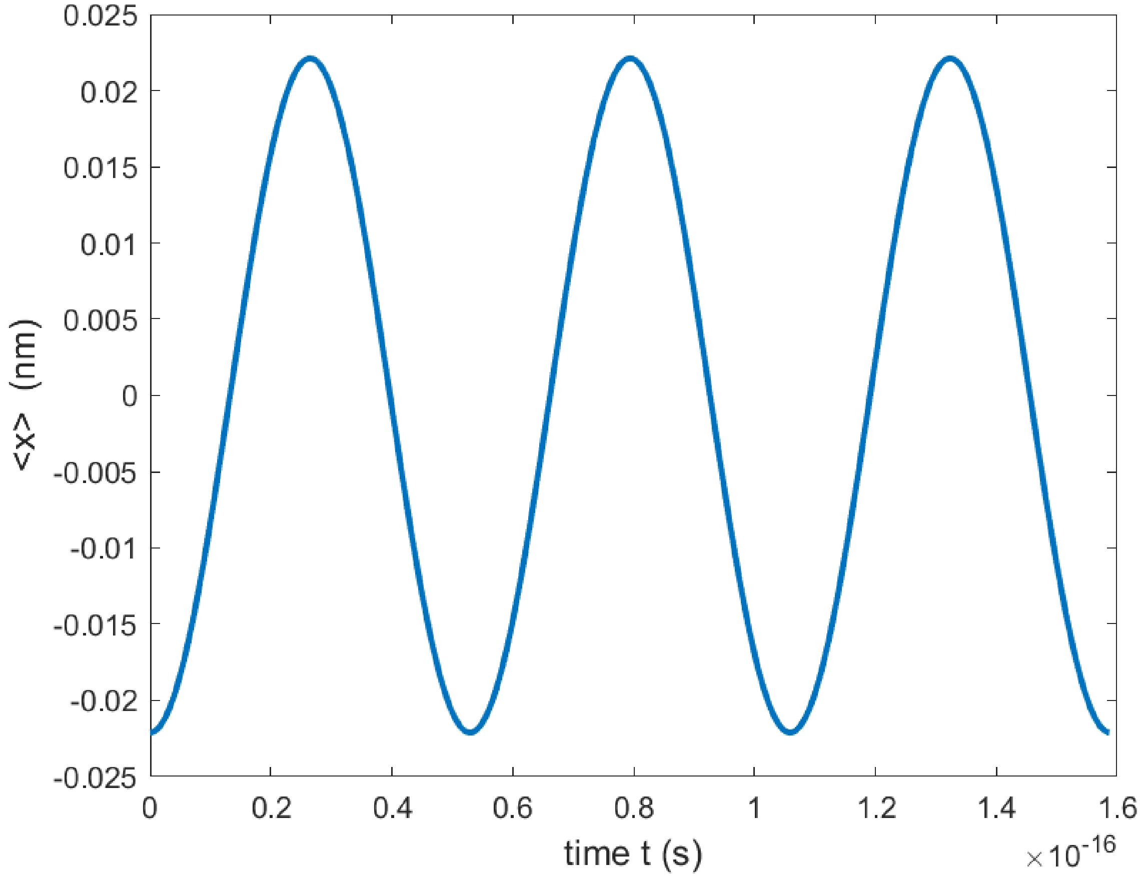
Huomataan, että

$$\frac{\mathrm{d}\langle \hat{p} \rangle}{\mathrm{d}t} = -\langle \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} V(x) \rangle = \langle \boldsymbol{F}(x) \rangle. \tag{90}$$

Yhtälöistä (87) ja (88) nähdään, että harmonisen värähtelijän operaattorien odotusarvot noudattavat klassisen mekaniikan liikeyhtälöitä. Tulos tunnetaan Ehrenfestin teoreemana, mistä tulemme puhumaan tarkemmin seuraavassa luvussa. Kuva 2 esittää harmonisen värähtelijän ei-stationäärisen tilan $\Psi_{0,1}(x,t)$ reaali- ja imaginaariosien ja todennäköisyystiheyden aikakehityksen ajanhetkillä $t = 0,\ t = T/4, t = T/2, t = 3T/4$, missä T on aaltofunktion värähtelyn jakson aika. Kuvasta nähdään, että poiketen stationäärisistä tiloista, ei-stationääristen tilojen todennäköisyystiheys muuttuu ajan suhteen. Todennäköisyystiheys värähtelee edestakaisin harmonisen värähtelijän potentiaalivallin välissä jaksonajalla T. Tällöin myös operaattoreiden odotusarvot värähtelevät edestakaisin sallitulla välillä. Kuva 3 esittää paikkaoperaattorin odotusarvot ajan funktiona, mistä nähdään odotusarvon klassinen käyttäytyminen. Paikkaoperaattorin odotusarvolla on liikerata, kuten klassisella kappaleella. [18,19,20,21]



Kuva 2: Harmonisen värähtelijän ei-stationäärisen tilan $\boldsymbol{\Psi_{0,1}}$ reaali- ja imaginaariosien ja todennäköisyystiheyden aikakehitys.



Kuva 3: Hiukkasen paikan odotusarvot ajan funktiona harmonisen värähtelijän ei-stationääriselle tilalle $\boldsymbol{\Psi}_{\mathbf{0,1}}$.

5. EHRENFESTIN TEOREEMA

Paul Ehrenfest oli ensimmäinen fyysikko, joka kirjoitti kvanttimekaniikan ja klassisen mekaniikan välisestä yhteydestä. Hän julkaisi vuonna 1927 artikkelin "Bemerkung über die angenäherte Gültigkeit der klassischen Mechanik innerhalb der Quantenmechanik", missä hän näyttää, että kvanttimekaniikan operaattorien odotusarvot noudattavat klassisen mekaniikan liikeyhtälöitä. Tulokseensa hän oli päättynyt, olettamalla

$$\left\langle \frac{dV}{dx} \right\rangle \approx \frac{dV(\langle x \rangle)}{d\langle x \rangle},$$

mitä hän ei kuitenkaan mainitse artikkelissaan. [22]

Viime luvussa päädyttiin Ehrenfestin teoreemaan tarkastelemalla harmonisen värähtelijän odotusarvojen muutosnopeuksia. Tässä luvussa todistamme Ehrenfestin teoreeman yleisesti ja perehdytään sen fysikaaliseen merkitykseen. Lisäksi tutkimme, milloin kvanttimekaniikan operaattorien odotusarvot noudattavat klassisen mekaniikan liikeyhtälöitä.

Tarkastellaan hiukkasta, jonka normalisoitu aaltofunktio on $\Psi(x,t)$. Ajasta riippumattoman operaattorin $\hat{A}$ odotusarvo on postulaatin 3 mukaan

$$\langle \hat{A} \rangle = \int \Psi^*(x,t)\hat{A}\Psi(x,t)\,\mathrm{d}x. \tag{91}$$

Operaattorin odotusarvon aikaderivaatta on

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \hat{A} \rangle = \int \left[\left(\frac{\mathrm{d}\Psi^*(x,t)}{\mathrm{d}t} \right) \hat{A}\Psi(x,t) + \Psi^*(x,t)\hat{A} \left(\frac{\mathrm{d}\Psi(x,t)}{\mathrm{d}t} \right) \right] \mathrm{d}x, \tag{92}$$

joka voidaan Schrödingerin yhtälön (28) avulla kirjoittaa muotoon

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \hat{A} \rangle = \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \int \left[\left(\widehat{H}\Psi(x,t) \right)^* \hat{A}\Psi(x,t) - \Psi^*(x,t)\hat{A} \left(\widehat{H}\Psi(x,t) \right) \right] \mathrm{d}x \tag{93}$$

Hermiittisyyden (2.5) ja kommutaattorin (2.3) perusteella tämä voidaan esittää muodossa

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \hat{A} \rangle = \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \int \Psi^*(x,t)\left(\widehat{H}\hat{A} - \hat{A}\widehat{H}\right)\Psi(x,t)\mathrm{d}x = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left\langle \left[\widehat{H}, \hat{A}\right] \right\rangle. \tag{94}$$

Sovelletaan saatua yhtälöä paikka- ja liikemääräoperaattorille. [3]

Paikkaoperaattorin odotusarvon aikaderivaatta on

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \hat{x} \rangle = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left\langle \left[\widehat{H}, \hat{x}\right] \right\rangle = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left\langle \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}), \hat{x} \right] \right\rangle. \tag{95}$$

Soveltamalla kommutaattorin ominaisuuksia (2.3), saadaan seuraavat tulokset [2]:

$$[V(\hat{x}), \hat{x}] = 0$$

$$[\hat{p},\hat{x}] = -\mathrm{i}\hbar$$

$$[p^2,\hat{x}] = \hat{p}[\hat{p},\hat{x}] + [\hat{p},\hat{x}]\hat{p} = \frac{2\hbar}{\mathrm{i}}\hat{p}.$$

Näiden avulla, saadaan paikkaoperaattorin aikaderivaataksi

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{x}\rangle = \left\langle\frac{\hat{p}}{m}\right\rangle. \tag{96}$$

Liikemääräoperaattorin aikaderivaatta on

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{p}\rangle = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\langle[\hat{H},\hat{p}]\rangle = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left\langle\left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}),\hat{p}\right]\right\rangle. \tag{97}$$

Soveltamalla kommutaattorin ominaisuuksia (2.3), saadaan seuraavat tulokset [2]:

$$[\hat{p}^2,\hat{p}] = 0$$

$$[V(\hat{x}),\hat{p}] = -[\hat{p},V(\hat{x})].$$

Näiden avulla voidaan liikemääräoperaattorin aikaderivaatta kirjoittaa muodossa

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{p}\rangle = -\frac{i}{\hbar}\langle[\hat{p},V(\hat{x})]\rangle = -\frac{i}{\hbar}\langle\hat{p}V(\hat{x}) - V(\hat{x})\hat{p}\rangle$$

$$= -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int\Psi^*(x,t)(\hat{p}V(\hat{x}) - V(\hat{x})\hat{p})\Psi(x,t)\mathrm{d}x. \tag{98}$$

Tarkastelemalla tämän yhtälön integrandia tarkemmin, huomataan että

$$(\hat{p}V(\hat{x}) - V(\hat{x})\hat{p})\Psi(x,t) = \hat{p}V(\hat{x})\Psi(x,t) - V(\hat{x})\hat{p}\Psi(x,t)$$

$$= \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left[\frac{\partial}{\partial x}\big(V(\hat{x})\Psi(x,t)\big) - V(\hat{x})\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x,t)\right]$$

$$= \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial V(\hat{x})}{\partial x}\Psi(x,t). \tag{99}$$

Sijoittamalla saatu tulos yhtälöön (98) saadaan liikemääräoperaattorin [3] aikaderivaataksi

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{p}\rangle = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int\Psi^*(x,t)\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial V(\hat{x})}{\partial x}\Psi(x,t)\mathrm{d}x = -\left\langle\frac{\partial V(\hat{x})}{\partial\hat{x}}\right\rangle \tag{100}$$

Yhdistämällä yhtälöt (96) ja (100) saadaan

$$m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\langle\hat{x}\rangle = -\left\langle\frac{\partial V(\hat{x})}{\partial\hat{x}}\right\rangle, \tag{101}$$

joka on hyvin samannäköinen, kuin Newtonin liikeyhtälö (22) klassiselle hiukkaselle potentiaalissa $V(x)$. Tulos (101) tunnetaan Ehrenfestin teoreemana. Potentiaalin ollessa konservatiivinen, on potentiaalin negatiivinen paikkaderivaatta yhtä suuri kuin systeemiin kohdistuva voima, eli

$$\boldsymbol{F}(\hat{x}) = -\frac{\mathrm{d}V(\hat{x})}{\mathrm{d}\hat{x}}.$$

Tällöin yhtälö (101) voidaan kirjoittaa vaihtoehtoisesti muodossa

$$m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}^2 t}\langle\hat{x}\rangle = \langle\boldsymbol{F}(\hat{x})\rangle. \tag{102}$$

Jos

$$\left\langle\frac{\partial V(\hat{x})}{\partial\hat{x}}\right\rangle \approx \frac{\partial V(\langle\hat{x}\rangle)}{\partial\langle\hat{x}\rangle} \;\leftrightarrow\; \langle\boldsymbol{F}(\hat{x})\rangle \approx \boldsymbol{F}(\langle\hat{x}\rangle), \tag{103}$$

noudattavat paikan- ja liikemäärän odotusarvot Newtonin liikeyhtälöitä. Ehrenfestin teoreema vahvistaa sen, että operaattoreiden odotusarvot ovat lähempänä klassista konseptia, kuin itse operaattorit. [2,3,6,12,21,23]

Yleisesti ottaen

$$\langle\boldsymbol{F}(\hat{x})\rangle \neq \boldsymbol{F}(\langle\hat{x}\rangle). \tag{104}$$

Tarkastellaan milloin approksimaatio (103) on voimassa. Kehitetään voimalle Taylorin sarja (2.8) pisteen $\langle\hat{x}\rangle$ suhteen

$$F(\hat{x}) = \boldsymbol{F}(\langle\hat{x}\rangle) + (\hat{x} - \langle\hat{x}\rangle)\boldsymbol{F}'(\langle\hat{x}\rangle) + \frac{1}{2!}(\hat{x} - \langle\hat{x}\rangle)^2\boldsymbol{F}^{(2)}(\langle\hat{x}\rangle) + \cdots, \tag{105}$$

missä $\boldsymbol{F}^{(2)}$ on voiman toinen derivaatta. Kehitelmän odotusarvoksi saadaan

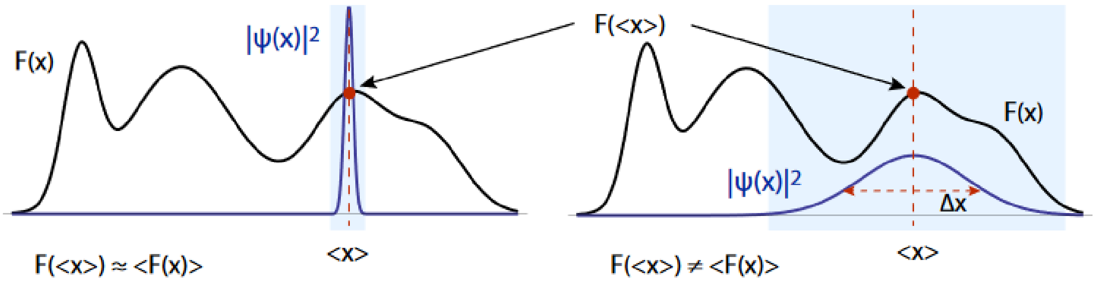
$$\begin{aligned}\langle\boldsymbol{F}(\hat{x})\rangle &= \boldsymbol{F}(\langle\hat{x}\rangle) + \langle\hat{x} - \langle\hat{x}\rangle\rangle\boldsymbol{F}'(\langle\hat{x}\rangle) + \frac{1}{2!}\langle(\hat{x} - \langle\hat{x}\rangle)^2\rangle\boldsymbol{F}^{(2)}(\langle\hat{x}\rangle) + \cdots \\ &= \boldsymbol{F}(\langle\hat{x}\rangle) + \frac{1}{2!}\langle(\hat{x} - \langle\hat{x}\rangle)^2\rangle F^{(2)}(\langle\hat{x}\rangle) + \cdots.\end{aligned} \tag{106}$$

Tämän kehitelmän ensimmäinen termi on klassinen voima, joka kohdistuu paikan odotusarvoon. [2,3,5,21,23] Jos epämääräisyys $(\Delta x)^2 = \langle(\hat{x} - \langle\hat{x}\rangle)^2\rangle$ on pieni ja sarjan kolmas ja sitä korkeammat termit merkityksettömiä, on voiman odotusarvo

$$\langle\boldsymbol{F}(\hat{x})\rangle \approx \boldsymbol{F}(\langle\hat{x}\rangle).$$

Epämääräisyys $(\Delta x)^2 = \langle(\hat{x} - \langle\hat{x}\rangle)^2\rangle$ on pieni, kun aaltofunktio on tarpeeksi lokalisoitunut. Kuvasta 4 nähdään, että lokalisoituneen aaltofunktion todennäköisyystiheys on suurin paikan odotusarvon kohdalla ja tippuu jyrkästi mentäessä pois tästä pisteestä. Todennäköisyystiheyden jakauman leveys on hyvin pieni ja näin ollen myös epämääräisyys $(\Delta x)^2 = \langle(\hat{x} - \langle\hat{x}\rangle)^2\rangle$ on pieni. Voiman arvo jakauman leveyden sisällä pysyy lähes samana, joten voiman odotusarvolle pätee approksimaatio (103). Lokalisoituneen aaltofunktion todennäköisyystiheyden jakaumafunktio on siis kapea normaalijakauma, joka lähestyy klassista rajaa ja jonka aikakehitys noudattaa klassista liikerataa. Yleisesti approksimaatio (103) pätee vain potentiaaleille, jotka ovat korkeintaan neliöllisiä muuttujan

x suhteen. [2,21,23] Esimerkki tällaisesta potentiaalista on viime luvussa käydyn harmonisen värähtelijän potentiaali (45).



Kuva 4: Lokalisoituneen aaltofunktion (vasen) ja levinneen aaltofunktion (oikea) todennäköisyystiheydet samanlaisessa voimakentässä $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})$. Siniset tausta-alueet kuvaavat todennäköisyystiheyden jakaumafunktion leveyttä. [21]

Yleisesti Ehrenfestin teoreemasta ei seuraa odotusarvojen klassinen käyttäytyminen. Ehrenfestin teoreemasta kuitenkin nähdään, että jos ”hiukkaseen” liittyvät epämääräisyydet Δx ja Δp ovat samanaikaisesti pieniä, noudattavat operaattoreiden odotusarvot klassisia liikeyhtälöitä. Heisenbergin epämääräisyysperiaate $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ kuitenkin estää liikemäärän ja paikan epämääräisyyden olla pieniä samanaikaisesti. Jos aaltofunktio on lokalisoitunut eli paikan epämääräisyys Δx on pieni, on liikemäärän epämäärisyys Δp suuri. Liikemäärän epämäärisyys on suhteellisen pieni, jos itse liikemäärän arvo p on suuri, eli jos ”hiukkasen” massa on makroskooppinen. Makroskooppisille kappaleille paikan ja liikemäärän epämääräisyydeksi tulee klassisena suureena tällä rajalla deltafunktio. Tällä rajalla tyypillisen klassisen voiman odotusarvo on yhtä suuri kuin voiman arvo paikan odotusarvossa ja silloin paikka ja liikemääräoperaattorin odotusarvot toteuttavat klassiset liikeyhtälöt. Klassisessa mittakaavassa voidaan ajatella hiukkasen omaavan täysin määrätyt paikka ja liikemäärän arvot. [23]

6. YHTEENVETO

Tässä työssä perehdyttiin Ehrenfestin teoreemaan, sen fysikaaliseen merkitykseen ja siihen, milloinka se toteuttaa klassisen mekaniikan yhtälöt. Työssä tarkasteltiin yksiulotteisessa avaruudessa ja ajasta riippumattomassa potentiaalissa olevan yhden hiukkasen aaltofunktion aikakehitystä, joka postulaatin 4 mukaan määräytyy Schrödingerin yhtälöstä. Kun potentiaali on ajasta riippumaton $V = V(x)$, voidaan aaltofunktio esittää muodossa $\Psi(x,t) = \psi(x)f(t)$. Tällöin Schrödingerin yhtälö voidaan separoida, jolloin saadaan kaksi tavallista differentiaaliyhtälöä. Paikkaosan differentiaaliyhtälöksi saadaan energian ominaisarvoyhtälö, jota kutsutaan ajasta riippumattomaksi Schrödingerin yhtälöksi. Tämän ominaisarvoyhtälön ratkaisusta saadaan energian ominaisfunktiot ja ominaisarvot. Saadut energian ominaisfunktiot muodostavat Hamilton operaattorin täydellisen joukon $\{\psi_n(x)\}$. Näiden ominaisfunktioiden avulla määritetään stationääriset tilat ja ei-stationääriset tilat. Lisäksi tutkittiin näiden tilojen eroa tarkastamalla näiden tilojen todennäköisyystiheyksiä.

Seuraavaksi tarkasteltiin kvanttimekaanista harmonista värähtelijää. Ajasta riippumaton Schrödingerin yhtälö ratkaistiin Frobeniuksen sarjamenetelmän avulla. Tarkastelu kohdistui erityisesti harmonisen värähtelijän paikka- ja liikemääräoperaattoreiden odotusarvoihin ja niiden muutosnopeuksiin. Kun muutosnopeudet eli derivaatat lasketaan, huomataan, että nämä toteuttavat klassisen mekaniikan liikeyhtälöt.

Lopuksi tutkittiin Ehrenfestin teoreemaa. Luku aloitettiin todistamalla teoreema, lähtemällä liikkeelle ajasta riippumattoman operaattorin odotusarvon aikaderivaatasta. Päädytään siihen tulokseen, että paikka ja liikemäärä operaatoreiden odotusarvot toteuttavat liikeyhtälöt.

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{x}\rangle = \left\langle\frac{\hat{p}}{m}\right\rangle$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{p}\rangle = -\left\langle\frac{\partial V(\hat{x})}{\partial\hat{x}}\right\rangle.$$

Yleisesti Ehrenfestin teoreemasta ei seuraa suoraan operaattoreiden odotusarvojen klassinen käyttäytyminen. Jotta odotusarvot noudattaisivat klassisen mekaniikan liikeyhtälöitä, on seuraavan ehdon toteuduttava

$$\left\langle\frac{\partial V(\hat{x})}{\partial\hat{x}}\right\rangle \approx \frac{\partial V(\langle\hat{x}\rangle)}{\partial\langle\hat{x}\rangle} \quad\leftrightarrow\quad \langle\boldsymbol{F}(\hat{x})\rangle \approx \boldsymbol{F}(\langle\hat{x}\rangle).$$

Lisäksi tutkittiin, milloin tämä ehto toteutuu. Tultiin siihen tulokseen, että ehto toteutuu potentiaaleille, jotka ovat korkeintaan neliöllisiä muuttujan x suhteen, [2] kuten esimerkiksi harmonisen värähtelijän potentiaali. Tällaiset potentiaalit pakottavat aaltofunktion lokalisoitumaan pienelle alueelle, jolloin paikan epämääräisyys on pieni suhteessa potentiaalin arvon vaihteluun. Tämän takia aaltofunktion todennäköisyystiheys on kapea normaalijakauma, joka lähestyy klassista rajaa ja jonka aikakehitys noudattaa klassista liikerataa.

LÄHTEET

[1] D.J. Griffiths, Introduction to Quantum Mechanics, USA, 409p, Saatavissa (viitattu 4.4.2020): https://www.fisica.net/mecanica-quantica/Griffiths%20-%20Introduction%20to%20quantum%20mechanics.pdf

[2] M. Saarela, KVANTTIMEKANIIKKA I Johdatus alkuaineiden jaksolliseen järjestelmään 763312A/S, Suomi, 2012, 169 s. Saatavissa (viitattu 27.3.2020): https://www.oulu.fi/tf/kvmI/luennot/moniste.pdf

[3] S. Gasiorowicz, Quantum Physics Third Edition, USA, 454p, Saatavissa (viitattu 4.4.2020): https://docs.google.com/viewer?a=v&pid=sites&srcid=ZGVmYXVsdGRvbWFpbnxkcmF6ZWV6YmFyemluanl8Z3g6NGQyMDU4YjI1MDg5NjZkYw

[4] J. Tuorila, Kvanttimekaniikka I 763312A/S, Suomi, 59s, Saatavissa (viitattu 5.4.2020): https://docplayer.fi/29216215-Kvanttimekaniikka-i-a-s-jani-tuorila-fysiikan-laitos-oulun-yliopisto.html

[5] A. Messiah, QUANTUM MECHANICS volume I, Ranska, 1967, 504 p, Saatavissa (viitattu 4.4.2020): https://archive.org/details/QuantumMechanicsVolumeI/page/n261/mode/1up

[6] F. Schwabl, Quantum Mechanics 4th Edition, USA, 425p, Saatavissa (viitattu 4.4.2020): https://link-springer-com.libproxy.tuni.fi/content/pdf/10.1007%2F978-3-540-71933-5.pdf

[7] M.L. Boas, MATHEMATICAL METHODS IN THE PHYSICAL SCIENCES Third Edition, USA, 859p, Saatavissa (viitattu 4.4.2020): file:///C:/Users/R.A/AppData/Local/Temp/0a187866618ca3049030ec5014860ae8-original.pdf

[8] T.T Rantala, Molekyylien ja nanorakenteiden kvanttiteoria MNQT-15, Suomi, 23s, Saatavissa (viitattu 13.4.2020): http://iki.fi/trantala/opetus/files/MNQT-7206020.Molekyylien.ja.nanorakenteiden.kvanttiteoria/MNQT-15.ss001-044.pdf

[9] S.Heikkilä, M. Kumpulainen, J. Oinas, 800346A Differentiaaliyhtälöt II, Suomi, 116s, Saatavissa (viitattu 5.5.2020): http://cc.oulu.fi/~jaoinas/DY1/DY2luentorunko3.pdf

[10] Wikipedia, Hermiten polynomi, Suomi, saatavissa (viitattu 5.5.2020): https://fi.wikipedia.org/wiki/Hermiten_polynomi

[11] J. Kauhanen, Matemaattinen analyysi, opintomoniste 2018, Suomi, 188s.

[12] Tuntematon, Aaltodynamiikka, Suomi, 28 s, Saatavissa (viitattu 27.3.2020): https://docplayer.fi/33861060-Aineaaltodynamiikka-105.html

[13] R. Shankar, PHYSICS 201b Quantum notes, Yale University, USA, 47p, Saatavissa (viitattu 27.3.2020): https://oyc.yale.edu/sites/default/files/notes_quantum_12.pdf7

[14] W. Trischuk, PHY293 Lecture #18, University of Toronto, USA, 9p, saatavissa (viitattu 3.6.2020): https://www.physics.utoronto.ca/~william/courses/phy293/phy293_l18.pdf

[15] I. Cooper, MATLAB SCRIPTS, 2019, saatavissa (viitattu 3.6.2020): https://drive.google.com/drive/folders/1j09aAhfrVYpiMavajrgSvUMc89ksF9Jb

[16] Wikipedia, Harmoninen värähtelijä, Suomi, saatavissa (viitattu 6.5.2020): https://fi.wikipedia.org/wiki/Harmoninen_v%C3%A4r%C3%A4htelij%C3%A4

[17] Wikipedia, Kvanttimekaaninen harmoninen värähtelijä, Suomi, saatavissa (viitattu 6.5.2020): https://fi.wikipedia.org/wiki/Kvanttimekaaninen_harmoninen_v%C3%A4r%C3%A4htelij%C3%A4

[18] J. Franklin, Harmonic Oscillator Physics, Lecture 9, Physics 342 Quantum Mechanics I, USA, 10p, saatavissa (viitattu 3.6.2020): https://www.reed.edu/physics/courses/P342.S10/Physics342/page1/files/Lecture.9.pdf

[19] I. Cooper, Time evolution of the wavefunction - stationary and compound states, USA, saatavissa (viitattu 3.6.2020): https://d-arora.github.io/Doing-Physics-With-Matlab/mpDocs/qp_se_time.htm

[20] S. Carlip, The harmonic oscillator, USA, 4p, saatavissa (viitattu 3.6.2020): http://physics.ucdavis.edu/Classes/Physics115A/harmonic.pdf

[21] P. Cappellaro, 6. Time Evolution in Quantum Mechanics, USA, 11p, saatavissa (viitattu 3.6.2020): https://ocw.mit.edu/courses/nuclear-engineering/22-02-introduction-to-applied-nuclear-physics-spring-2012/lecture-notes/MIT22_02S12_lec_ch6.pdf

[22] H. Arodz, EHRENFEST'S THEOREM REVISITED, Poland, 15p, Saatavissa (viitattu 18.4.2020): https://arxiv.org/pdf/1907.02354.pdf

[23] R. Shankar, Principles of Quantum Mechanics second edition, USA, 453p, saatavissa (viitattu 3.6.2020): https://www.fisica.net/mecanica-quantica/Shankar%20-%20Principles%20of%20quantum%20mechanics.pdf