Schrödingerekvationen

Noethers teorem: symmetri $\longleftrightarrow$ bevarad storhet

Ex. Tidsinvarians $\longleftrightarrow$ Energi E (Hamiltonoperatorn $\hat{H}$)

Kvantmekaniskt tillståndsrum $\mathcal{H}$

Välj ON-bas $\chi_1, \ldots, \chi_D$ av egentillstånd till $\hat{H}$

$$\hat{H}\chi_i = E_i \chi_i$$

energiegenvärde

Godtyckligt tillstånd $\psi = c_1\chi_1 + \ldots + c_D\chi_D$

$\langle \psi | \psi \rangle = 1$ normerat!

Obs! $c_1, \ldots, c_D \in \mathbb{C}$ (komplexa koeff.)

$P_i = |c_i|^2 = \{$samolikhet för att en energimätning på systemet i tillstånd ψ ger resultat $E_i\}$

Kvantdynamik

En tidsförskjutning Δt verkar enligt ~~Wigens~~ Wigeners teorem genom en unitär operator

$$\hat{U}_{\Delta t} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\Delta t \hat{H}\right)$$

Tillståndet ψ beror av tiden:

$$\psi(t) = c_1(t)\chi_1 + \ldots + c_D(t)\chi_D$$

Det ska gälla att

$$\psi(t+\Delta t) = \hat{U}_{\Delta t}\psi(t)$$

Beräknar tidsderivatan:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\Psi(t+\Delta t) - \Psi(t)}{\Delta t} = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\exp(-\frac{i}{\hbar}\Delta t \hat{H})\Psi(t) - \Psi(t)}{\Delta t}$$

$$= \lim_{\Delta t \to 0} \frac{(\hat{I} - \frac{i}{\hbar}\Delta t \hat{H} + O(\Delta t^2))\Psi(t) - \Psi(t)}{\Delta t} = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Psi(t)$$

Har härlett den tidsberoende (!) schrödinger-ekvationen (SE):

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

Tidsberoendet av koeff. ges av:

$$i\hbar \frac{\partial c_i(t)}{\partial t} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \chi_i | \Psi \rangle$$

SE

$$= \langle \chi_i | \hat{H}\Psi \rangle = \langle \hat{H}\chi_i | \Psi \rangle$$

$\hat{H}$ Hermitesk!

$$= \langle E_i \chi_i | \Psi \rangle = E_i c_i(t)$$

Allmän lösning till denna ODE:

$$c_i(t) = c_i(0) \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_i t\right)$$

godtyckligt begynnelsevärde!

Specialfall: om $\Psi = c_i \chi_i$, dvs alla andra koeff. är noll, så får vi:

$$\Psi(t) = c_i(0) \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_i t\right) \chi_i$$

⟹ En energimätning ger nu garanterat värdet E_i!

När tiden går utvecklas ett sådant tillstånd bara med en (fysikaliskt betydelselös) komplex fasfaktor.

→ Detta kallas för ett stationärt tillstånd

Allmänna fallet:

Varje term i utvecklingen av ψ ~~ett~~ tidsutvecklas med sin egen komplexa fasfaktor.

Ett sådant $\psi(t)$ har olika egenskaper vid olika tider. Betrakta någon annan fysikalisk storhet A med operatorn $\hat{A}$.

Vi kan införa en ny ON-bas $\chi_1', \dots, \chi_D'$ s.a.

$$\hat{A}\chi_i' = A_i \chi_i$$

egenvärde (resultat av A-mätning på χ_i')

Antag att $\psi = c_i \chi_i'$ då $t=0$. En A-mätning ger då säkert resultatet A_i. Tidsutveckla enl. SE.

(Byt bas till $\chi_1, \dots, \chi_D$, använd SE, och byt tillbaka till $\chi_1', \dots, \chi_D'$)

Tillståndet ψ utvecklas då i allmänhet till en linjär kombo. av $\chi_1', \dots, \chi_D'$.

Resultatet av en A-mätning ges av sannolikhetsfördelning.

Vi har beskrivit hur ett tillstånd $\Psi(t)$ utvecklas i tiden enligt SE.

→ Hur utvecklas en fysikalisk storhet A i tiden?

Viktigt om motsvarande operator $\hat{A}$ kommuterar med Hamilton-operatorn $\hat{H}$ eller ej!

(Även viktigt om $\hat{A}$ har ett explicit tidsberoende eller ej.)

Enklaste fallet: $[\hat{A},\hat{H}] \equiv \hat{A}\hat{H} - \hat{H}\hat{A} = 0$ och att

$$\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 0 \qquad (*)$$

Resultat från matristeori: Vi kan välja en ON-bas $\chi_1, \dots, \chi_D$ för $\mathcal{H}$ av gemensamma egenvektorer till $\hat{A}$ och $\hat{H}$:

$$\hat{A}\chi_i = A_i\chi_i \,, \quad \hat{H}\chi_i = E_i\chi_i$$

Allmän lösning till SE:

$$\Psi(t) = \underbrace{\overset{\text{beg. värde}}{c_1}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_1 t\right)}\chi_1 + \dots + c_D\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_D t\right)\chi_D$$

Sannolikhetsamplitud för att få resultat A_1 respektive E_1 vid mätning av A respektive energi.

$\{$ sannolikhet $= |\text{amplitud}|^2 =$ konst i tiden $\}$

En sådan storhet A sägs vara bevarad.

Nödvändiga och tillräckliga villkor för detta är alltså $(*)$

Vad händer för en mer allmän storhet

B med operator $\hat{B}$?

$\rightarrow$ $[\hat{B}, \hat{H}] \neq 0$ och/eller $\frac{\partial \hat{B}}{\partial t} \neq 0$

Sannolikhetsfördelningen för resultatet av B-mätning ändras alltså med tiden då tillståndet $\Psi(t)$ utvecklas enligt SE.

Vi beräknar ~~d~~ tidsderivatan av ~~förväntad~~ förväntansvärdet

$\cancel{\hat{B}}$ $\bar{B} = E(B) = \langle \Psi(t) | \hat{B} | \Psi(t) \rangle$

$\rightarrow$ Inför operatorn $\hat{C} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{B}] + \frac{\partial \hat{B}}{\partial t}$

Vi får

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \Psi(t) | \hat{B} | \Psi(t) \rangle =$$

$$= \langle \frac{\partial \Psi}{\partial t} | \hat{B} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \frac{\partial \hat{B}}{\partial t} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \hat{B} | \frac{\partial \Psi}{\partial t} \rangle =$$

$$= \langle \frac{-i}{\hbar} \hat{H}\Psi | \hat{B} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \frac{\partial \hat{B}}{\partial t} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \hat{B} | -\frac{i}{\hbar} \hat{H}\Psi \rangle$$

komplex. konj.

$$= \frac{i}{\hbar} \langle \Psi | \hat{H}\hat{B}\Psi \rangle + \langle \Psi | \frac{\partial \hat{B}}{\partial t} | \Psi \rangle - \frac{i}{\hbar} \langle \Psi | \hat{B} | \hat{H}\Psi \rangle$$

$$= \langle \Psi | \frac{i}{\hbar} \hat{H}\hat{B} + \frac{\partial \hat{B}}{\partial t} - \frac{i}{\hbar} \hat{B}\hat{H} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{C} | \Psi \rangle$$

$\rightarrow$ Ehrenfests teorem: $\frac{\partial \bar{B}}{\partial t} = \bar{C}$

förväntansvärdet av den storhet C som svarar mot operatorn $\hat{C}$

Ex. Tidsutv. av elektronspinn

$\mathcal{H}$ med ON-bas χ_1, χ_2 {Spinn upp (χ_1) resp. spinn ner (χ_2) vid mätning längs z-axeln}

spinnoperatorer

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x$$
$$\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y$$
$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z$$

{Paulimatriser!}

Placera ett elektronspinn ett ~~yttre~~ yttre magnetfält $\mathbb{B} = \mathbb{B}_x \mathbb{i} + \mathbb{B}_y \mathbb{j} + \mathbb{B}_z \mathbb{k}$

Ham. operatorn för spinnet blir då:

$$\hat{H} = \underbrace{\frac{g\mu_B}{\hbar}}_{\text{numerisk koeff.}} \mathbb{B}\cdot\hat{\mathbb{S}} + E_0 \hat{I}$$

vektor av operatorerna $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$

konst. som bestämmer referensnivån för energin

Spinn operatorerna $\hat{\mathbb{S}}$ har inget explicit tidsberoende men de har nollskilda kommutatorer med $\hat{H}$:

$$[\hat{H}, \hat{\mathbb{S}}] = i g \mu_B \mathbb{B} \times \hat{\mathbb{S}}$$

t.ex. $[\hat{H}, \hat{\mathbb{S}}_x] = i g \mu_B (B_y \hat{S}_z - B_z \hat{S}_y)$ Kolla själv!

$$\| $$

$$[\hat{H}, \hat{\mathbb{S}}]_x$$

Ehrenfests teorem ger

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle \Psi | \hat{\mathbb{S}} | \Psi \rangle = -\frac{g\mu_B}{\hbar}\langle \Psi | \mathbb{B} \times \hat{\mathbb{S}} | \Psi \rangle$$

spinnvektorn $\hat{\mathbb{S}}$ kommer att precessera kring $\mathbb{B}$!