Egenskaper av bas tillstånd:

$|i\rangle$ komplett bas $(S=1:\ |+\rangle;\ |0\rangle;\ |-\rangle)$

* $\langle j | i \rangle = \delta_{i,j}$

* $\mathbb{1} = \sum_{\text{alla } i} |i\rangle\langle i|$ enhetsoperatorn.

$$|x\rangle = \mathbb{1}|x\rangle = \sum_i |i\rangle \underbrace{\langle i|x\rangle}_{a_i} = \sum_i a_i |i\rangle$$

* $\langle x|\varphi\rangle = \langle \varphi | x\rangle^*$

$$\langle x|\mathbb{1} = \sum_i \langle x|i\rangle\langle i| = \sum_i \langle i|x\rangle^* \langle i| = \sum_i a_i^* \langle i|$$

Anknytning med linjär algebra (i bas 'i')

$$|x\rangle \leftrightarrow \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} \qquad \langle x| \leftrightarrow (a_1^*, a_2^*, a_3^*)$$

$$\langle \varphi | x \rangle = \sum_i \langle \varphi|i\rangle\langle i|x\rangle = \sum_i b_i^* a_i \Leftrightarrow (b_1^*, b_2^*, b_3^*)\cdot\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}$$

En apparat: tar ett tillstånd, ger en ny!

$$\xrightarrow{|x\rangle} \underset{\text{App}}{\boxed{}} \xrightarrow{A|x\rangle} = |\varphi\rangle$$

Hur beskriver vi A?

$$\langle \varphi | A | \chi \rangle = \sum_{i,j} \langle \varphi | i \rangle \langle i | A | j \rangle \langle j | \chi \rangle$$

A beskrivs av $\langle i | A | j \rangle = A_{ij} \longleftrightarrow \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{pmatrix}$

$\uparrow$ element av en matris!

A 'ensam':

$$A = 1A1 = \sum_{i,j} |i\rangle\langle i | A | j \rangle \langle j |$$

$$= \sum_{i,j} A_{ij} |i\rangle\langle j|$$

$$|\varphi\rangle = A|\chi\rangle \longleftrightarrow \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & \cdots & \\ \vdots & A_{22} & \\ \vdots & & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11}a_1 + A_{12}a_2 + A_{13}a_3 \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Om vi har flera apparater i rad:

$$\xrightarrow{|\chi\rangle} \boxed{A} \xrightarrow{A|\chi\rangle} \boxed{B} \xrightarrow{B(A|\chi\rangle)}$$

Obs ordning $BA \neq AB$

BA: matris multiplikation!

Övning: $\langle \varphi | BA | \chi \rangle = \sum_{i,j,k} \langle \varphi | i \rangle \langle i | B | j \rangle \langle j | A | k \rangle \langle k | \chi \rangle$

Mätning: vi har en partikel i tillstånd $|\chi\rangle = \sum_i a_i |i\rangle$ $\uparrow$ s_z bas

Vi gör en mätning av s_z. Vad är $P(s_z = +\hbar)$? $|\chi\rangle = \frac{i}{2}|+\rangle - \frac{\sqrt{3}}{2}|-\rangle + 0|0\rangle$

$$P(s_z = +\hbar) = |\langle + | \chi \rangle|^2 = \left|\tfrac{i}{2}\right|^2 = \tfrac{1}{4}$$

$$P(s_z = -\hbar) = \left|-\tfrac{\sqrt{3}}{2}\right|^2 = \tfrac{3}{4}$$

$$P(s_z = 0\hbar) = 0$$

Vilken bas ska man använda?

För varje mätvärde finns det ett bastillstånd.

Spin $\frac{1}{2}$ partikel: $s_z = +\hbar/2, -\hbar/2$: $|\uparrow\rangle ; |\downarrow\rangle$.

Läge, ~~eller som~~ i en dimension: alla värde x, så $|x\rangle$

∞ många. bastillstånd.

För en elektron: behöver spin, och läge (ell. spin och rörelsemängd).

Så vitt vi vet, behövs inget mer!

Tids utveckling: hur ändrar tillstånd med tid?

Säg att vi har $|\psi(t)\rangle$, vad är $|\psi(t+\Delta t)\rangle$?

Vi inför en 'apparat' 'vänta', från tid t_1 till $t_2 = t_1 + \Delta t$:

$$|\psi(t+\Delta t)\rangle = U(t+\Delta t, t)\,|\psi(t)\rangle$$

Vi uttrycker det i en bas $|i\rangle$:

$$\underbrace{\langle i|\psi(t+\Delta t)\rangle}_{c_i(t+\Delta t)} = \langle i|\,U(t+\Delta t,t)\,\mathbb{1}\,|\psi(t)\rangle$$

$$= \sum_j \underbrace{\langle i|U(t+\Delta t)|j\rangle}_{U_{ij}(t+\Delta t,t)} \underbrace{\langle j|\psi(t)\rangle}_{c_j(t)}$$

Så, vi kan skriva det som:

$$c_i(t+\Delta t) = U_{ij}(t+\Delta t, t)\, c_j(t)$$

Vi tittar på liten Δt, eller δt.

$\Delta t = 0$, då är ~~*~~ $U_{ij} = \delta_{ij}$ enhetsmatris.

~~Effekt a~~ Avvikelsen från enhetsmatrisen är linjärt i δt (om än liten):

$$U_{ij}(t+\delta t, t) = \delta_{ij} + K_{ij}(t)\,\delta t \quad \text{men vi skriver}$$

$$= \delta_{ij} - \frac{i}{\hbar} H_{ij}(t)\,\delta t$$

OBS: index "$\sqrt{-1}$"

$H_{ij}(t)$: element av matris $H(t)$: kallas hamiltonianen (hamilton matris, hamilton operator).

Den beskriver tidsutvecklingen, och är kopplad till energi av systemet.

Vi kan skriva en diff. ekvation för $c_i(t)$ i termer av H:

$$\frac{dc_i(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \sum_j H_{ij}(t)\, c_j(t)$$

ell. $i\hbar \frac{dc_i(t)}{dt} = \sum_j H_{ij}(t)\, c_j(t) \quad \overset{}{\underset{\text{dirac}}{\longleftrightarrow}} \quad i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = H(t)|\psi(t)\rangle$

* $H(t)$: bestämmer (deterministiskt sätt) hur $|\psi(t)\rangle$ ändras med tid.

* ~~[illegible]~~ Med $|\psi(t)\rangle$ kan vi få fram sannolikheter

* Ekv. är en tidsberoende Schrödinger ekvation!

Ex: System med bara ett tillstånd: $|1\rangle$:

då har vi: $i\hbar \frac{dc_1}{dt} = H_{11} c_1$, och vi har:

$$c_1(t) = \text{konst.}\; e^{-iH_{11}t/\hbar}$$

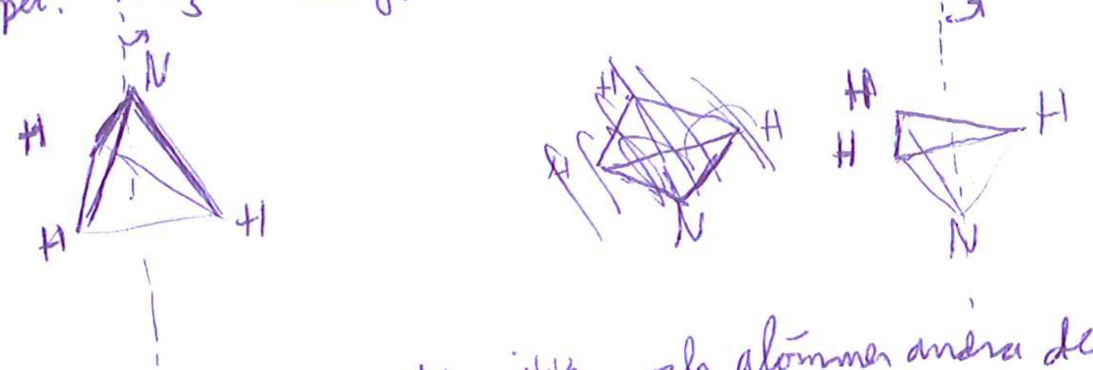
Detta är ett tillstånd med bestämd energi $E = H_{11}$

Jämför våg: $e^{ikx - i\omega t} = e^{ikx} e^{-i\omega t} = e^{ikx} e^{-iEt/\hbar}$,

bestämd $p = \hbar k$, och $E = \hbar\omega$

System med två bastillstånd: $|1\rangle$ och $|2\rangle$:

Exempel: NH_3 molekyl:



Vi tittar bara på var N sitter, och glömmer andra detaljer.

Ekvationen blir: $i\hbar \frac{dc_1}{dt} = H_{11} c_1 + H_{12} c_2$

$$i\hbar \frac{dc_2}{dt} = H_{21} c_1 + H_{22} c_2$$

Allmänt tillstånd för molekylen:

$$\mathbb{1}|\psi(t)\rangle = |1\rangle\underbrace{\langle 1|\psi(t)\rangle}_{c_1(t)} + |2\rangle\underbrace{\langle 2|\psi(t)\rangle}_{c_2(t)}$$

$$= c_1(t)|1\rangle + c_2(t)|2\rangle$$

Sannolikh. att hitta ~~att~~ molekylen i tillstånd 1:

$$P(1,t) = |c_1(t)|^2$$

$$P(2,t) = |c_2(t)|^2.$$

För att få fram $c_1(t)$, $c_2(t)$ behöver vi H_{ij}, så vad är de?

Vi tittar först på situationen med:

$$H_{12} = \langle 1|H|2\rangle = 0$$
$$H_{21} = \langle 2|H|1\rangle = 0$$

Så, om vi sitter i $|1\rangle$ på en viss tid, då stannar man i $|1\rangle$

N ~~...~~ atomen ~~bryter inte~~ sitter kvar!

nu har vi:

$$i\hbar \frac{d c_1(t)}{dt} = H_{11} c_1(t) \qquad i\hbar \frac{d c_2(t)}{dt} = H_{22} c_2(t)$$

Så: $c_1(t) = c_1(0)\, e^{-iH_{11}t/\hbar}$ $\qquad c_2(t) = c_2(0)\, e^{-iH_{22}t/\hbar}$

Antar att $|\psi(0)\rangle = |1\rangle$, så $c_1(0) = 1$; $c_2(0) = 0$

då har vi $|\psi(t)\rangle = c_1(t)|1\rangle + 0\cdot|2\rangle = e^{-iH_{11}t/\hbar}|1\rangle$

Vi har ett "stationärt" tillstånd, med bestämd energi $E_1 = H_{11}$ $\quad |c_1(t)|^2 = 1$, $|c_2(t)|^2 = 0$

Om $|\psi(0)\rangle = |2\rangle$: ~~Stationärt~~ stationärt tillstånd med energi $E_2 = H_{22}$

$|1\rangle$ och $|2\rangle$ är likvärdig (symmetri!), så $E_1 = E_2$, eller

$$H_{11} = H_{22} =: E_0$$