



...  $H_{ij} = H_{ji}^*$ , dvs,  $H$  är 'hermitisk',  $H = H^\dagger$

$$H_{ij} = H_{ji}^*, \text{ dvs, } H \text{ är 'hermitisk', } H = H^\dagger$$

Dek är en viktig uppgift att visa det!

$H = H^\dagger$  : leder till att energi är reell.

Lösning för TBS E, om vi bara har ett bas tillstånd:

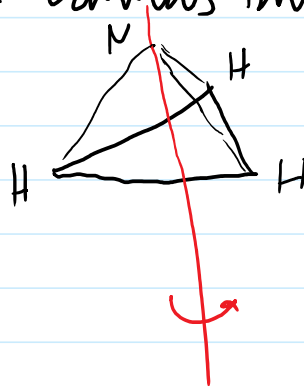
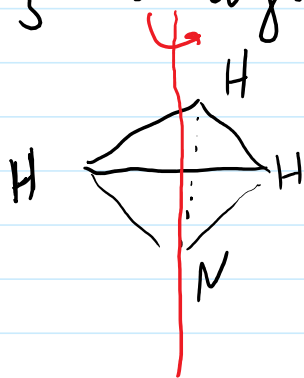
$$c_1(t) = e^{-i H_{11} t / \hbar}, \text{ med } H_{11} = E, \text{ energi av systemet.}$$

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

ett system med två tillstånd:

$\text{NH}_3$  molekyl.

$\text{NH}_3$  molekylen kan tankas snurra,



Så, N kan vara i två positioner: under eller över de tre atomerna H skapade D

... eller över planet med H atomerna!

Vi glömmet alla andra detaljer av  $\text{NH}_3$  molekylen (vibrationer, rotationer, osv)

Så, vi beskriver  $\text{NH}_3$  molekylen som ett 2 nivå - system:  $| \psi(t) \rangle = c_1(t) | 1 \rangle + c_2(t) | 2 \rangle$

$$\text{TISE: } i\hbar \frac{d c_1(t)}{dt} = H_{11} c_1(t) + H_{12} c_2(t)$$

$$i\hbar \frac{d c_2(t)}{dt} = H_{21} c_1(t) + H_{22} c_2(t)$$

Vi vill få fram om N molekylen är över  $| 1 \rangle$  eller under  $| 2 \rangle$  planet med H atomerna:

$$P(1, t) = | c_1(t) |^2; \quad P(2, t) = | c_2(t) |^2.$$

För att få fram  $c_1(t)$ ,  $c_2(t)$  måste vi veta  $H_{ij}$ . Vad är de?

Vi tar dem tids oberoende, och tittar på situation med  $H_{12} = \langle 1 | H | 2 \rangle = 0$ ,

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

Så, om vi startar med ett system i tillstånd

117, då skannar systemet i 117.

Då får vi:

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

$$\text{Lösning: } c_1(t) = c_1(0) e^{-i/\hbar H_{11} t}$$

$$c_2(t) = c_2(0) e^{-i/\hbar H_{22} t}$$

Vi antar att  $|4(0)\rangle = |1\rangle$ , så  $c_1(0) = 1$ ,  
 $c_2(0) = 0$

$$\begin{aligned} \text{Så vi har: } |4(t)\rangle &= c_1(t) |1\rangle + c_2(t) |2\rangle \\ &= e^{-i/\hbar H_{11} t} |1\rangle + 0 |2\rangle \end{aligned}$$

Väg funktionen  $|4(t)\rangle$  är tidsberoende.

$$\text{Men: } \left. \begin{aligned} P(1,t) &= |c_1(t)|^2 = 1 \\ P(2,t) &= |c_2(t)|^2 = 0 \end{aligned} \right\} \text{ tids} \underline{\text{oberoende}}$$

Ett tillstånd med tidsoberoende sannolikheter kallas 'stationär', (OBS: amplituder är tidsberoende!)

Energi av  $|4(t)\rangle = e^{-i/\hbar H_{11} t} |1\rangle$  är bestämd:  $E_1 = H_{11}$ .

Om  $|4(0)\rangle = |2\rangle$ : då får vi ett stationär tillstånd med  $E_2 = H_{22}$ .

Eftersom  $|1\rangle$  och  $|2\rangle$  är relaterad i en

Eftersom 11) och 12) är relaterad via en symmetri (spegling i planet med H atomerna), har vi att  $E_1 = E_2$ , eller:

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

I en  $\text{NH}_3$  molekyl kan N-atomerna byta mellan 11) och 12). Energi av molekylerna är högre när N är vid 'H-planet', så om  $\text{NH}_3$  var klassisk, skulle det inte ske. Kvantmekaniskt finns det en amplitud för den här processen: en sådant process kallas tunnelning.

Tunnelning process: amplitud att en partikel 'tar sig genom' ett område där den inte kann finnas klassiskt. Annat exempel: sönderfall.

$$\text{Så: } \langle 1 | H | 2 \rangle = H_{12} \neq 0.$$

$$\text{Vi kan anta: } H_{12} = H_{21} = -A \quad \rightarrow \text{reell konstant.}$$

Vi blir TBSE:

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_1(t) = E_- c_1(t) - A c_2(t)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_1(t) = E_0 c_1(t) - A c_2(t)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_2(t) = -A c_1(t) + E_0 c_2(t)$$

Hur löser vi det? Addera och subtrahera:

$$\text{add. } i\hbar \frac{d}{dt} (c_1 + c_2) = (E_0 - A)(c_1 + c_2)$$

$$\text{sub: } i\hbar \frac{d}{dt} (c_1 - c_2) = (E_0 + A)(c_1 - c_2)$$

$$\text{Så: } c_1 + c_2 = a e^{-i/\hbar (E_0 - A)t}$$

$$c_1 - c_2 = b e^{-i/\hbar (E_0 + A)t}$$

, eller:

$$c_1(t) = \frac{a}{2} e^{-i/\hbar (E_0 - A)t} + \frac{b}{2} e^{-i/\hbar (E_0 + A)t}$$

$$c_2(t) = \frac{a}{2} e^{-i/\hbar (E_0 - A)t} - \frac{b}{2} e^{-i/\hbar (E_0 + A)t}$$

$a, b$ : beror på hur systemet ser ut vid  $t=0$

Nu kan vi titta på olika fall:

$$1) \quad a = 0 \Rightarrow c_1 + c_2 = 0,$$

$$c_1(t) = -c_2(t) = \frac{b}{2} e^{-i/\hbar (E_0 + A)t}$$

$$\begin{aligned} \text{Normalisering: } |c_1(t)|^2 + |c_2(t)|^2 &= \left| \frac{b}{2} \right|^2 + \left| -\frac{b}{2} \right|^2 \\ &= \frac{1}{4} |b|^2 + \frac{1}{4} |b|^2 = |b|^2/2, \text{ så} \end{aligned}$$

$$b = \sqrt{2} \quad (\text{eller } \sqrt{2} e^{i\phi}).$$

$$\text{Så: } |\psi(t)\rangle = e^{-i/\hbar (E_0 + A)t} \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle - |2\rangle)$$

$$\text{Så: } |\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}(E_0+A)t} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |2\rangle)}_{\equiv |I\rangle}$$

$$|\psi(0)\rangle = |I\rangle, \text{ och}$$

$$c_1(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}; c_2(0) = -\frac{1}{\sqrt{2}}, \text{ men vi har också:}$$

$$|c_1(t)|^2 = |c_2(t)|^2 = \frac{1}{2}, \text{ så } |\psi(t)\rangle \text{ är ett stationär tillstånd. (} |\psi(t)\rangle \text{ själv beror på } t \text{! )}$$

Energi är väl definierad:  $E_I = E_0 + A$ .

2) Fallet  $b=0$  görs på samma sätt:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}(E_0-A)t} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle)}_{\equiv |II\rangle}$$

$|II\rangle$ : tillstånd med bestämd energi

$$E_{II} = E_0 - A$$

Tillstånd  $|I\rangle$  och  $|II\rangle$  kallas 'energi' tillstånd, eller 'stationära tillstånd'.

De har bestämd energi, och  $P(1,t)$  &  $P(2,t)$  är tidsoberoende, nämligen  $P(1,t) = P(2,t) = \frac{1}{2}$ .

är tidsoberoende, nämligen  $P(1,t) = P(2,t) = \frac{1}{2}$ .  
OBS:  $\langle U(t) \rangle$  är tidsberoende

Om vi mäter energin hos en  $\text{NH}_3$  molekyl:  
får antingen  $E_I$ , eller  $E_{II}$ , så energi är  
kvantiserat!