F10

Tidsberoende Schrödinger ekvationen för NH_3 molekylen.

N-atomen kan befinna sig i två lägen, över eller under planet med H atomerna. Så vi behandlar NH_3 som ett två nivå system, och skriver:

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

Vi antar att Hamiltonianen har följande form:

$$H_{11} = H_{22} = E_0\,;$$
$$H_{12} = H_{21} = -A .$$

Schrödinger ekvationen: $i\hbar \frac{d}{dt} c_i(t) = \sum_{j=1}^{2} H_{ij}\cdot c_j(t)$

Allmän lösning:

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

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

a och b är konstanter, och de bestämmer vågfunktionen vid $t=0$:

vågfunktionen vid $t=0$:

$c_1(0) = \frac{1}{2}(a+b)$; $c_2(0) = \frac{1}{2}(a-b)$

Olika fall:

1) $a=0$: då har vi $c_2(t) = -c_1(t)$, och

normering av våg funktionen ger:

$|b|^2 = 2$, till ex. $b=\sqrt{2}$:

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

Sannolikhet att hitta N atomen i läge 1 eller 2:

$P_1(t) = |c_1(t)|^2 = \frac{1}{2}$

$P_2(t) = |c_2(t)|^2 = \frac{1}{2}$

Sannolikheten är tidsoberoende. I det här fallet är $|\psi(t)\rangle$ ett stationärt tillstånd, med energi $E_I = E_0 + A$.

2) Fallet med $b=0$ följer på samma sätt:

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

Igen har vi:

I gen har vi:

$P_1(t) = P_2(t) = \frac{1}{2}$, så ett stationär tillstånd, med energi $E_{II} = E_0 - A$.

OBS $|\psi(t)\rangle$, $c_1(t)$, $c_2(t)$ är tidsberoende!

Vi ser att det finns två stationära tillstånd, med energier $E_0 \pm A$.

Om man gör en mätning av energien av en NH_3 molekyl, får man antingen $E_0 + A$, eller $E_0 - A$. Så det finns två möjliga varden: energi hos NH_3 molekylen är kvantiserat!

Effekten av en mätning.

Vi antar att NH_3 molekylen är i tillstandet I, och vi gör en mätning av N-atomens läge (vid $t=0$).

Som vi såg, har vi $P_1 = P_2 = \frac{1}{2}$. Säg att vi får läget "1". Då vet vi att vågfunktionen just efter $t=0$ ges av $|1\rangle$. Om vi genast just efter $t=0$ ges av $|1\rangle$. Om vi genast gör en mätning av läget igen, får vi '1' med sannolikhet 1. Vi säger vågfunktionen har 'kollapsat'.

Det är ett viktig postulat i kvantmekanik!

Hur ser vågfunktionen ut efter den här mätning?

Vid $t=0$ har vi $c_1(0)=1$; $c_2(0)=0$, så nu måste vi ha: $\frac{a+b}{2}=1$; $(a-b)/2=0$, eller: $a=b=1$.

Så, lösningen av TBSE blir:

$$c_1(t)=\frac{1}{2}e^{-i(E_0-A)t/\hbar}+\frac{1}{2}e^{-i(E_0+A)t/\hbar}$$

$$=e^{-iE_0t/\hbar}\cdot\frac{1}{2}\left(e^{iAt/\hbar}+e^{-iAt/\hbar}\right)$$

$$=e^{-iE_0t/\hbar}\cos(At/\hbar)$$

$$c_2(t)=e^{-iE_0t/\hbar}\frac{i}{2i}\left(e^{iAt/\hbar}-e^{-iAt/\hbar}\right)$$

$$=ie^{-iE_0t/\hbar}\sin(At/\hbar)$$

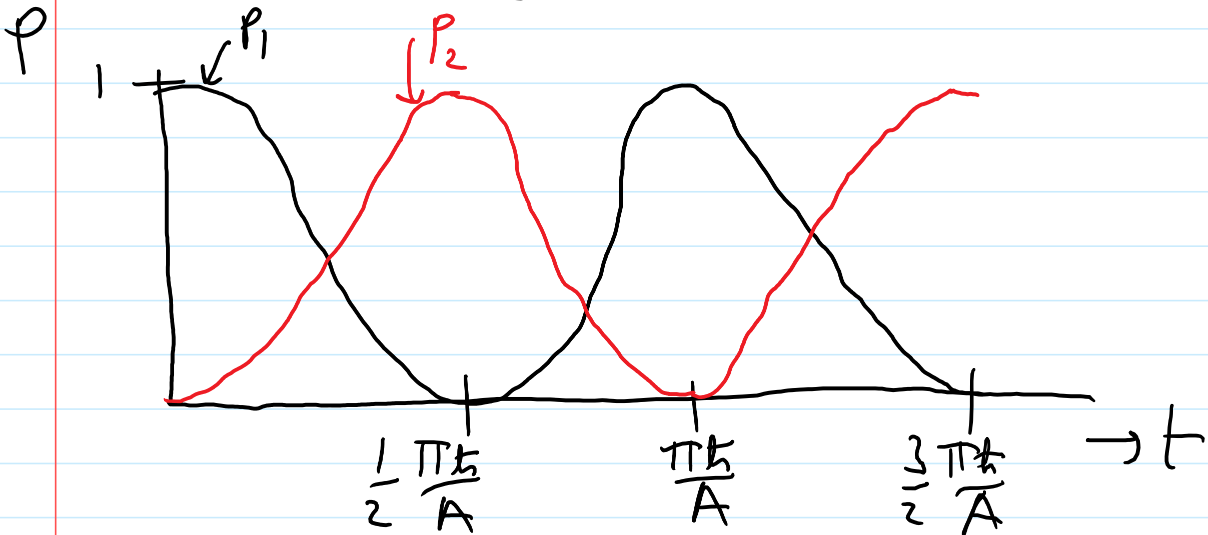
Så, om vi skulle mäta läget igen efter

Så, om vi skulle mäta läget igen efter en viss tid, då får vi följande sannolikheter:

$$P_1(t) = |c_1(t)|^2 = \cos^2(At/\hbar)$$

$$P_2(t) = |c_2(t)|^2 = \sin^2(At/\hbar).$$

Så sannolikheterna är tidsberoende, men $P_1(t) + P_2(t) = 1$, som det ska.



Vi ser att efter ett tag $\left(t = \frac{1}{2}\frac{\pi\hbar}{A}\right)$, att N-atomen är i läge 2, och att den 'bytt plats'.

Det är möjligt p.g.a. 'tunneling'.

Nu vet vi hur $|\psi(t)\rangle$ ser ut efter vi gjorde en mätning av läget vid $t=0$, och gjorde en mätning av läget vid $t=0$, och vi fick '1'. Om vi genast gör en mätning av energi, vad är då sannolikhet att mäta E_I eller E_{II}?

Vid $t=0$ har vi: $|\psi(0)\rangle = |1\rangle$

Vi vet att $|I\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |2\rangle)$ har energi E_I, och $|II\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle)$ har energi E_{II}.

Vi kan skriva: $|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|I\rangle + |II\rangle)$

$$|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|I\rangle - |II\rangle)$$

$|1\rangle, |2\rangle$ är en bas (läge bestämd)

$|I\rangle, |II\rangle$: annan bas, med E bestämd.

Så, vi har: $|\psi(0)\rangle = |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|I\rangle + |II\rangle)$.

Om vi gör en mätning av energi får vi:

$P(E=E_I) = |\langle I|\psi(0)\rangle|^2 = |\frac{1}{\sqrt{2}}|^2 = \frac{1}{2}$, och

$P(E=E_{II}) = |\langle II|\psi(0)\rangle|^2 = |1/\sqrt{2}|^2 = \frac{1}{2}$.