Tidsutveckling: Schrödinger ekvationen.

Om vi har ett tillstånd, hur ändras det med tiden?

Vi har ett system med N bastillstånd,

$$|\psi(t)\rangle = c_1(t)\,|1\rangle + c_2(t)\,|2\rangle + \cdots + c_N(t)\,|N\rangle$$

$$c_1(t) \rightarrow \langle 1|\psi(t)\rangle \qquad c_2(t) \rightarrow \langle 2|\psi(t)\rangle \quad \cdots$$

$c_j(t)$: N stycken komplexa koefficienter.

Säg: vi vet tillståndet $|\psi(t)\rangle$ vid $t=t_1$.

Vad är $|\psi(t)\rangle$ vid $t = t_2 = t_1 + \Delta t$?

(eller, vad är $c_j(t_2)$).

Vi inför 'en apparat': "vänta", som vi kallar U; $U(t_2, t_1)$ 'väntar' från $t=t_1$ till $t=t_2$:

Då har vi: $|\psi(t_2 = t_1 + \Delta t)\rangle = U(t_2, t_1)|\psi(t_1)\rangle$

I termer av bastillstånd:

$$c_j(t_2) = \langle j|\psi(t_2)\rangle$$

$$= \langle j|U(t_2, t_1)|\psi(t_1)\rangle$$

$$= \langle j|U(t_2, t_1)\mathbb{1}|\psi(t_1)\rangle$$

$$= \sum_k \langle j|U(t_2, t_1)|k\rangle \underbrace{\langle k|\psi(t_1)\rangle}_{c_k(t_1)}$$

Vi skriver $\langle j|U(t_2, t_1)|k\rangle = U_{j,k}(t_2, t_1)$

(är element av en matris!)

Nu kan vi skriva: $c_j(t_2) = U_{j,k}(t_2, t_1)\, c_k(t_1)$

element av en matris

element

element
av en vektor

eller: $c_j(t_1+\Delta t) = \sum_k U_{j,k}(t_1+\Delta t, t_1)\, c_k(t_1)$

Om $\Delta t = 0$, då måste $U_{j,k}(t_1,t_1)$ vara enhetsmatrisen: $U_{j,k}(t_1, t_1) = \delta_{j,k}$

Nu antar vi att avvikelsen från enhetsmatrisen är <u>linjärt</u> i Δt.
Så, för $\Delta t = \delta t$ liten:

$$U_{j,k}(t+\delta t, t) = \delta_{j,k} + K_{j,k}(t)\,\delta t,$$

men vi skriver detta som

$$U_{j,k}(t+\delta t, t) = \delta_{j,k} - \overset{\overset{i^2=-1}{\uparrow}}{i}/\hbar\; H_{j,k}(t)\,\delta t$$

indices

$H_{j,k}(t)$ är element av en matris som

$H_{j,k}(t)$ är element av en matris som kallas 'Hamiltonianen'.
(eller i Hamiltonmatris, Hamiltonoperator.)

Det är hamiltonianen som beskriver tidsutvecklingen av ett kvantsystem. Den är relaterat till <u>energin</u> av systemet (se nere).

Vi får en 'differential ekvation' för $c_j(t)$ genom att ta gränsen $\delta t \to 0$.

$$c_j(t+\delta t) = \sum_k U_{jk}(t, t+\delta t)\, c_k(t)$$

$$= \sum_k \left(\delta_{j,k} - \tfrac{i}{\hbar} H_{jk}(t)\right) c_k(t)$$

$$= c_j(t) - \tfrac{i}{\hbar} \sum_k H_{jk}(t)\, c_k(t)$$

Så, vi har: $-\tfrac{i}{\hbar} \sum_k H_{jk}(t)\, c_k(t) = \dfrac{c_j(t+\delta t) - c_j(t)}{\delta t}$

Högerled blir $\frac{dc_j(t)}{dt}$ i gränsen $\delta t \to 0$, så vi får resultatet

$$\frac{d}{dt} c_j(t) = -i/\hbar \sum_k H_{jk}(t)\, c_k(t) \quad \text{, eller}$$

$$i\hbar \frac{dc_j(t)}{dt} = \sum_k H_{jk}(t)\, c_k(t)$$

I Dirac notation blir det:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t)\, |\psi(t)\rangle$$

Så: $H(t)$ bestämmer hur $|\psi(t)\rangle$ ändras i tid. Om vi vet $|\psi(t_i)\rangle$, och $H(t)$, så vet vi $|\psi(t)\rangle$ för alla tider!

Med $|\psi(t)\rangle$ får vi sannolikheter för varje tid!

$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle$ kallas (tidsberoende) Schrödinger ekvationen.

Exempel med ett bastillstånd: $|1\rangle$.
Då har vi: $|\chi\rangle = c_1(t) |1\rangle$, med
$|c_1(t)|^2 = 1$ ($|\chi\rangle$ är normerat).

$$* \quad i\hbar \left(d/dt \, c_1(t) \right) = H_{11} \, c_1(t)$$

(vi antar att H_{11} är tidsoberoende).

Lösning till (*): $c_1(t) = \text{konstant} \cdot e^{-i/\hbar \, H_{11} t}$

Om vi sätter $t=0$: $\underbrace{c_1(0)}_{=\text{konstant}} = \text{konstant} \cdot e^0$

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

$$|c_1(t)|^2 = |c_1(0)|^2 \, e^{-i/\hbar \, H_{11} t} \cdot e^{+i/\hbar \, H_{11} t}$$
$$= |c_1(0)|^2 = 1,$$

så $c_1(0)$ är en godtycklig fas $e^{i\varphi}$ (med $\varphi \in \mathbb{R}$).

Det här tillståndet har en bestämd energi $E = H_{11}$.

För att förstå det, tittar vi på en våg med energi $E = \hbar\omega$ och $p = \hbar k$:

$$e^{i(kx-\omega t)} = e^{ikx} e^{-i\omega t} = e^{ikx} e^{-i/\hbar \, Et},$$

så vi kan interpretera H_{11} som energi av tillståndet $|1\rangle$.