Schrödingerekvationen:

beskriver tidsutvecklingen av tillstånd, som är mycket viktig (utan dynamik inga planetbanor osv).

|| Nästan alla tillstånd / vågfunktioner är tidsberoende!!

Upprepning: tar två nivå system (se nere för exempel), så 2 bastillstånd.

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

$$\langle 1|\psi(t)\rangle \qquad \langle 2|\psi(t)\rangle.$$

$c_j(t)$ $j=1,2$: två komplexa koefficienter.

Anta: vi vet $|\psi(t_1)\rangle$. Vad är $|\psi(t_2)\rangle$ med $t_2 = t_1 + \Delta t$?

$|\psi(t_2)\rangle$ med $t_2 = t_1 + \Delta t$!
Så, vi vill veta $c_1(t_2)$ och $c_2(t_2)$.

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

Så, vi har: $|\psi(t_2)\rangle = U(t_2, t_1)|\psi(t_1)\rangle$.

Vi tittar på koefficienten:

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

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

$$= \sum_{l_1} \underbrace{\langle j|U(t_2,t_1)|l_1\rangle}_{\displaystyle = U_{j,l_1}(t_2,t_1)} \underbrace{\langle l_1|\psi(t_1)\rangle}_{c_{l_1}(t_1)}$$

element av en matris!

Så, vi har:

Så, vi har:

$$c_j(t_2) = \sum_k U_{j,k}(t_2, t_1)\, c_k(t_1)$$

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 är $U(t_1, t_1)$: enhetsmatris

$$U_{j,k}(t_1, t_1) = \delta_{j,k}$$

Om $\Delta t = \delta t$ är liten: avvikelsen från enhetsmatrisen är <u>linjärt</u> i δt.

$i^2 = -1$

$$U_{j,k}(t+\delta t, t) = \delta_{j,k} - \frac{i}{\hbar} H_{j,k}(t)\, \delta t$$

indices

$H_{j,k}(t)$: element av 'Hamiltonianen', $H(t)$ som beskriver tidsutvecklingen!
Har en relation med <u>energi</u> av systemet!

<u>Från F-10</u>: Schrödingerekvationen:

Från F-10: Schrödingerekvationen:

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

($k=1,2$ för system med två bastillstånd)

I Dirac notation:

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

(tidsberoende) Schrödingerekvationen).

$H(t)$: bestämmer $|\psi(t)\rangle$ vid varje tid.
Med $|\psi(t)\rangle$ får vi sannolikheter!
$|c_j(t)|^2$ är sannolikhet att systemet är i tillstånd $|j\rangle$ vid tid t.
Så: $\sum_{\text{alla } j} |c_j(t)|^2 = 1$: normering!
(oberoende av tiden).
Med $\sum_j |c_j(t)|^2 = 1$ och $(*)$ får man:

$$H_{jk} = H_{kj}^* \quad \text{dvs } H \text{ är Hermitisk!}$$

$H_{jk} = H_{kj}^*$, d.v.s H är 'hermitisk':

$H = H^\dagger$: viktig uppgift att visa detta!

Det garanterar att energier är reella!

Exempel: system med bara ett bastillstånd:

$|\psi(t)\rangle = c_1(t)\,|1\rangle$. $\quad (|c_1(t)|^2 = 1)$.

$i\hbar\left(\frac{d}{dt}c_1(t)\right) = H_{11}\,c_1(t)$ (vi antar att H är tidsoberoende).

Lösning av ekvationen (se F-10):

$c_1(t) = \text{konst.}\, e^{-i/\hbar\, H_{11} t}$.

För $t=0$: $c_1(0) = \text{konst.}\, e^0 = \text{konst.}$

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

Så: $c_1(t) = c_1(0)\, e^{\cdots}$.

↑ komplex fas, tidsberoende.

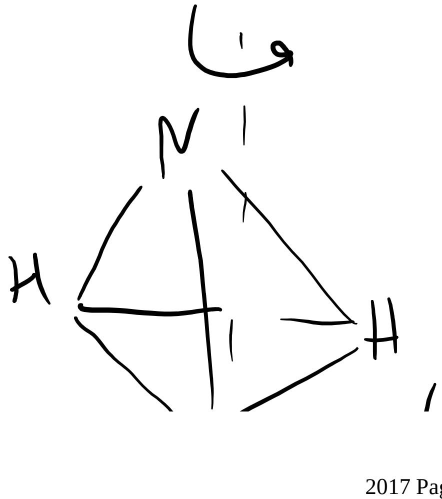
$|c_1(t)|^2 = 1 = |c_1(0)|^2$, så $c_1(0)$ är en fas!.

Tillståndet har energi $E = H_{11}$

System med två bastillstånd:

* Spin-½ partikel: $|1\rangle = |\uparrow\rangle$
($S_z = \pm \hbar/2$) $|2\rangle = |\downarrow\rangle$

* NH_3 molekyl:
↳ kan snurra:



(N under planet).

(N...

N atomen kan vara i två positioner: under ell. över planet med H-atomerna. Vi glömmer bort alla andra egenskaper av NH_3 molekylen: vibrationer, rotation osv).

Bägge system beskrivs av samma SE:

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

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

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

Vi vill veta om N atomen är över eller under planet med H atomerna, eller

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

Så vi behöver veta H_{jk}, sen kan vi lösa ekvationen.

Vi ta H tidsoberoende, och tar först fallet med: $H_{12} = \langle 1 | H | 2 \rangle = 0$

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

Om vi startar i ett system i tillstånd $|1\rangle$ då stannar det i $|1\rangle$.

Samma för tillstånd $|2\rangle$.

Då har vi: $i\hbar \frac{d}{dt} c_1(t) = H_{11} c_1(t)$

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

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

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

Om vi tar $|\psi(0)\rangle = |1\rangle$, då: $c_1(0) = 1$

$$c_2(0) = 0$$

$$|\psi(t)\rangle = c_1(t)|1\rangle + c_2(t)|2\rangle$$
$$= e^{-i/\hbar H_{11} t} |1\rangle + 0 |2\rangle.$$

$= e^{-i/\hbar\,\ldots} |1\rangle + 0\,|2\rangle.$

Tillståndet är <u>tidsberoende</u>

Men: $P(1,t) = |c_1(t)|^2 = 1$
$P(2,t) = |c_2(t)|^2 = 0$ } <u>tidsoberoende</u>

Tillstånd med tidsoberoende <u>sannolikheter</u> kallas stationära, även om tillståndet själv är tids<u>be</u>roende!.

Energi av $|\psi(t)\rangle = e^{-i/\hbar\, H_{11} t} |1\rangle$ är $E = H_{11}$.

Om $|\psi(0)\rangle = |2\rangle$: stationär tillstånd med $E = H_{22}$: $|\psi(t)\rangle = e^{-i/\hbar\, H_{22} t} |2\rangle$

Tillstånd $|1\rangle$ och $|2\rangle$ är relaterad via en spegling i planet med H-atomerna, så vi antar att $|1\rangle$ och $|2\rangle$ har samma energi: $H_{11} = H_{22} = E_0$.