Två nivå system:

* spin-$\frac{1}{2}$ $\left(s_z = \pm\frac{1}{2}\hbar\right)$

* NH_3 molekyl: N-atomen kan vara i två lägen: 'under' eller över planet med H-atomerna.

Om vi har fallet med $H_{12} = \langle 1|H|2\rangle = 0$, och $H_{21} = \langle 2|H|1\rangle = 0$, då kan N-atomen inte byta läge:

$|\psi(t)\rangle = c_1(t)\,|1\rangle + c_2(t)\,|2\rangle$, och lösningen till SE var:

$c_1(t) = c_1(0)\, e^{-i/\hbar\, H_{11} t}$; $c_2(t) = c_2(0)\, e^{-i/\hbar\, H_{22} t}$.

om $|\psi(0)\rangle = |1\rangle$, då är $c_1(0) = 1$
$c_2(0) = 0$, så

$i/\hbar\, H_{11} \cdot t$

$c_2(0) = 0$, så

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

Tillstånd: tids<u>be</u>roende; med bestämd energi $E = H_{11}$.

$$\left.\begin{aligned} P(1,t) &= |c_1(t)|^2 = 1 \\ P(2,t) &= |c_2(t)|^2 = 0 \end{aligned}\right\}$$ Tids<u>obe</u>roende!

Vi säger att de här tillstånden är 'stationära'.

* Bestämd energi
* Sannolikheterna är tidsoberoende.

Eftersom $|1\rangle$ och $|2\rangle$ är relaterade via en spegling i planet med H-atomerna, antar vi att tillstånden:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i/\hbar\, H_{11} t}\,|1\rangle$$ och

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i/\hbar\, H_{22} t}\,|2\rangle$$ har <u>samma</u> energi: $H_{11} = H_{22} = E_0$.

I verklighet kan N-atomen byta mellan de två positionerna!
När N-atomen är vid "H-planet" är energi högre, så om NH_3 atomen hade varit klassiskt, då skulle det inte ha skett.

I kvantfysik finns det en amplitud för den här processen!
Vi säger att N-atomen kan 'tunnla' mellan position 1 och 2.

Tunnling: amplitud för en process där en partikel "tar sig genom" ett område där den inte kan vara i ett klassiskt system (för liten energi).
Radio-aktivt sönderfall är ett annat exempel.

Så, nu antar vi att $\langle 1|H|2\rangle = H_{12} \neq 0$.

Vi tar $H_{12} = H_{21} = -A$ (reell konstant).
(tecknet är konvention).

Nu vill vi lösa SE (med $H_{11} = H_{22} = E_0$).

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

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

Ekvationen är 'kopplade'. Hur gör vi?
Ta summan och skillnaden:

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

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

Nu är ekvationen på samma form som tidigare: $\frac{d}{dt} f(t) = \alpha f(t)$.

$$-\frac{i}{\hbar}(E_0 - A)t$$

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

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

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

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

a och b beror på hur systemet ser ut vid (till ex.) $t = 0$.

Låt oss titta på olika fall.

1) $a = 0 \rightarrow c_1 + c_2 = 0$, så

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

Normalisering: $1 = |c_1(t)|^2 + |c_2(t)|^2$

$= |b/2|^2 + |-b/2|^2$

$= \frac{1}{4}|b|^2 + \frac{1}{4}|b|^2 = \frac{1}{2}|b|^2$

$$= \frac{1}{4}|b|^2 + \frac{1}{4}|b|^2 = \frac{1}{2}|b|^2.$$

Vi kan ta $b = \sqrt{2}$ (eller $b = \sqrt{2}\, e^{i\varphi}$)

Då får vi:

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

$|\psi(0)\rangle = |I\rangle$; $c_1(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}$; $c_2(0) = -\frac{1}{\sqrt{2}}$, men sannolikheterna är också tidsoberoende:

$|c_1(t)|^2 = |c_2(t)|^2 = \frac{1}{2}$ så

$|\psi(t)\rangle$ är ett stationärt tillstånd, med energi $E_I = E_0 + A$.

2) Fallet $b = 0$ görs på samma sätt:

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

tidsberoende!

tidsberoende!   := $|\text{II}\rangle$

$|\psi(t)\rangle$ är ett tillstånd med bestämmd energi:
$E = E_{\text{II}} = E_0 - A$
Igen har vi: $|c_1(t)|^2 = |c_2(t)|^2 = 1/2$.

Tillstånd $|\text{I}\rangle$ och $|\text{II}\rangle$: kallas 'energi' tillstånd, eller stationära tillstånd, med bestämd energi, och $P(1,t)$ & $P(2,t)$ är tidsoberoende ($|\psi(t)\rangle_{\text{I}}$; $|\psi(t)\rangle_{\text{II}}$ är tidsberoende!).
I det här fallet har vi: $P(1,t) = P(2,t) = \frac{1}{2}$

Om vi gör en mätning av energi av NH_3 molekylen: får antingen E_{I} eller E_{II}: energin är kvantiserad!