kap 1: **KVANTFYSIK** 110829

räkneövning tis 13-15 i FL62, 63, 64 för F

4 × inlämning, varannan mån senast kl. 13.15

5/9 valfri 1, 2.2, 3.7, 4.4

19/9 5.9, 6.2, 7.4, 8.3

3/10 9.5, 10.4, 11.1, 12.6

17/10 13.1, 14.4, 15.2, 16.3

per uppgift 0-5 poäng

PRESENTERA på rimligt sätt, dvs diagram?
sätta saker i sitt sammanhang osv.
i ett större

eftersamtal (15 min) kan bokas in, 24/10 - 4/11
välj uppgift själv! med rimlig nivå på uppgift

quantum = en viss mängd av något

klassisk fysik — kvantfysik

1687 Newton Principia

1873 Maxwell Treatise

1900 Planck svartkroppsstrålning

1905 Einstein fotoelektrisk effekt

1913 Bohr atommodell

1920-talet kvantmekanik

1925 Schrödinger

1926 Heisenberg

1930 Diracs bok

tid

TIDIG KVANTTEORI

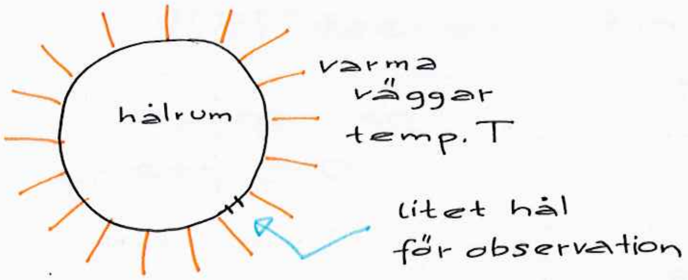
KVANTFYSIK I INGENJÖRSKONSTEN.

transistor (1947)

laser (~1960) Albert förutsåg det redan 1905!

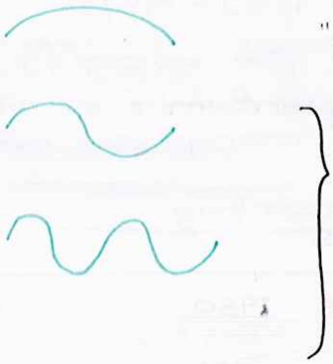
kärnklyvning (1939)

Max Planck ~ (1858 - 1946)



hålrummet fylls av elektromagnetisk värme-strålning (en sorts vågrörelse)

olika svängningsmoder : (i 1 dim)



"grundton" en mod

oändligt många "övertoner" olika moder här då

olika amplitud : olika energiinnehåll i moden

enligt klassisk statistisk fysik har varje mod i genomsnitt energin

$E = k \cdot T$ (*)

Boltzmann's konstant, temp.

om det händer varje mod så blir massor av E

men detta skulle ge oändlig total energi i hålrummet (för att öka temp. då)

för mer komplexa moder funkar det ej så bra!

i verkligheten : (*) stämmer bra för lång-vågiga noder, men kortvågiga noder har mycket mindre E.

⇒ ändlig total energi

Planck införde en ny naturkonstant:

$\boxed{\hbar = \frac{h}{2\pi}}$ → dvs hans ursprungliga konstant

$= 1.05 \cdot 10^{-34}$ Js

$\hbar$ är ju mycket liten! i klassisk fysik, försummas mer, i kvantfysik är den med!

strålning med vinkelfrekvens $\omega = 2\pi\nu$ kan bara absorberas/emitteras i kvanta med energin $\hbar\omega$ $(= h\nu)$

detta ledde till en formel för svartkroppsstrålning med god överensstämmelse med verkligheten.

2.7 K i Universum, rest från tidernas start!

ALBERT EINSTEIN (1879 - 1955)

vågrörelse då ju

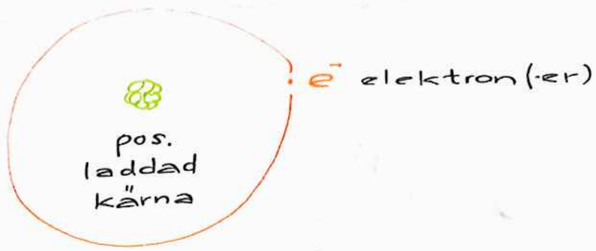
elektromagnetisk strålning med vinkelfrekvens ω kan bara existera som "paket" (fotoner, ljuspartiklar) med energin $\hbar\omega$.

ljus är både en vågrörelse och en ström av partiklar.

läs om honom: Pais, "Subtle is the lord"

NIELS BOHR (1885 - 1961)

vad är en atom? elektrostatisk kraft håller ihop det!



VÄTEATOM

klassiskt: (cirkulära) banor kan ha godtycklig radie ⇒
godtycklig total energi ($E_k + E_p$)
om el. laddning cirkulerar, sänder ut E
dvs borde radie minska då E minskar!
en kollaps efter viss tid

Bohr lade till ett extra postulat:
storleken av elektronens rörelsemängdsmoment m.a.p kärnan
EN VEKTOR JU!!
måste vara en heltalsmultipel av $\hbar$
("ett kvantiseringsvillkor")

⇒ endast vissa radier (alt. totala energier) är möjliga. övergångar mellan dessa nivåer kan ske språngvis under emission/absorption av en foton med rätt energi

$$\Delta E = \hbar\omega$$

överensstämmer mkt väl med uppmätta spektra av ljus från väte

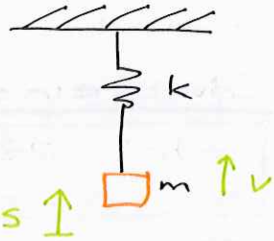
läs om honom:
A. Pais också

kap 3:

EN KLASSISK ÅTERBLICK. 110830

betrakta något avgränsat fysikaliskt system i ett givet tidsögonblick befinner sig detta i ett visst "tillstånd". detta beskrivs av ett antal variabler (lägen, hastigheter för ingående partiklar, el., magn. fält etc.)

ex



systemets tillstånd påverkas i princip inte av att vi observerar det.

vidare antar man gärna att tillstånds-variablernas tidsutveckling är entydigt bestämd av några differentialekvationer (Newton's II, Maxwell's ekv)

NÅGRA HUVUDPUNKTER I DEN KLASSISKA BILDEN:

DETERMINISM

finns slump eller inte? dvs. kan vi beräkna utgång för allt om vi bara har alla var. t.ex.

fysikens lagar verkar bestämma tidsutveckl. helt entydigt.

problem: kanske känner vi inte utgångs-värderna tillräckligt väl.

eller kanske finns det "dolda variabler".

lite svårt att avgöra frågan i praktiken

KAUSALITET

"samband mellan orsak & verkan"

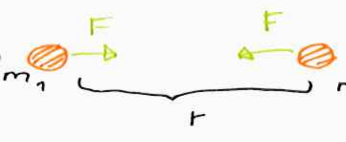
om man inte har friktion elr dyl. så är många fysikaliska lagar invarianta under omkastning av tidsriktningen.

"orsak" behöver inte komma före "verkan".

LOKALITET

(ersätter i viss mening kausalitet, & kallas det ibland)

ex1. Newton's gravitationsteori ser ut att ha en omedelbar påverkan på avstånd.

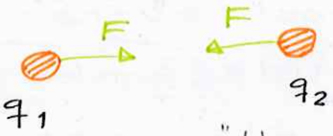


$F = G\dfrac{m_1 m_2}{r^2}$

men de rör ju ej varann?

läs om det: "Physics and Philosophy" d'Espagnat ex2. Maxwell's elektrodynamik.

Störningar utbreder sig som en vågrörelse med ljushastigheten.



$$F = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{q_1 q_2}{r^2}$$

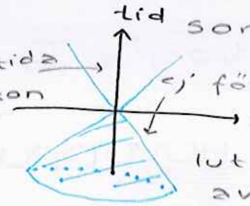
gäller bara i en statisk ekvation

Einsteins relativitetsteori:

$\boxed{\text{ingen påverkan utbreder sig snabbare än ljuset.}}$ Einstein's lokalitets-princip.

för att förutse tidsutvecklingen i en punkt i framtiden, så räcker det att känna till värdena på tillståndsvariablerna inom den "förflutna ljuskonen" (past light cone) dvs. det ljus som hinner hit (ej för långt bort)

omvänt så har en händelse bara inflytande inom sin "framtida ljuskon".



lutn. bestäms av ljushast.

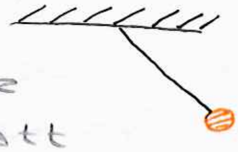
Ny gravitationsteori:

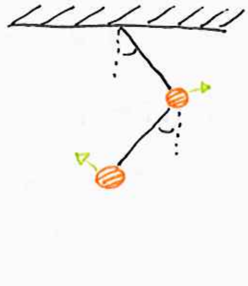
gravitationskraften utbreder sig också som en vågrörelse med ljushastigheten.

NOETHERS TEOREM. Emmy Noether 188? - 1935
Hilbert helped her out!

betrakta ett komplicerat fysikaliskt system det beskrivs av ett antal tillståndsvariabler som utvecklas enligt några differentialekv.
i allmänhet är denna tidsutveckling mkt komplicerad.

ibland finns det dock förenklande omständigheter som hjälper oss att förstå en del av dynamiken.





TVÅ NYA BEGREPP:

1) en symmetri är en regel som kan användas för att från en given lösning till tidsutveckl.-ekvationerna konstruera en ny lösning.

2) en bevarad storhet (konserverad storhet, rörelsekonstant) är ett uttryck i tillståndsvariablerna som inte ändras när dessa utvecklas i tiden.

NOETHERS TEOREM: till varje konserverad storhet svarar en (kontinuerlig) symmetri och vice versa. (teoremet ger även en metod att konstruera symmetrin resp. den bevarade storheten)

ex.

symmetri

kan senarelägga lösning

ett system är tidsinvariant om vi får en ny lösning genom att tidsförskjuta en given lösning. motsvarande beroende storhet kallas för energi E.

ett system är translationsinvariant

— " — rumsförskjuta

kont. symmetrier

storhet då rörelsemängd $\mathbb{P}$. en vektor! rimligt iom translation i 3 variabler!

ett system är rotationsinvariant

— " — rotera

storhet då rörelsemängdsmoment $\mathbb{J}$.

$\mathbb{L}$

ex. på system med bevarade E och/elr $\mathbb{P}$ och/elr $\mathbb{L}$:

partikel med massa m som rör sig i ett konservativt kraftfält $\mathbb{F} = -\nabla V$ potential-fkt'n

nabla operatorn (gradient)

tillståndsvariabler:

$\mathbb{r}$ och $\mathbb{v}$

läge hastighet

rörelseekvationer:

$$\begin{cases} \dot{\mathbb{r}} = \mathbb{v} & \text{(def. av hastighet)} \\ \dot{\mathbb{v}} = -\frac{1}{m}\nabla V & \text{(iom } \mathbb{F} = m\mathbb{a}) \end{cases} \quad (*)$$

fel på s. 14 i 2.2
$|\mathbb{p}|$ istället
$|\mathbb{p}| << mc$

för ett allmänt $V = V(\mathbb{r}, t)$ så finns inga bevarade storheter.

MEN om $V = V(\mathbb{r})$ ej beror på tiden så är systemet invariant under tidskonstanten.

givet en lösning $\begin{cases} \mathbb{r} = \mathbb{r}_0(t) \\ \mathbb{v} = \mathbb{v}_0(t) \end{cases}$ till $(*)$

vissa fkt'r

så är även $\begin{cases} \mathbb{r}(t) = \mathbb{r}_0(t + \Delta t) \\ \mathbb{v}(t) = \mathbb{v}_0(t + \Delta t) \end{cases}$ en lösning för godtyckl konstant Δt

den bevarade energin är

$$E = \frac{m}{2}\mathbb{v}\cdot\mathbb{v} + V(\mathbb{r})$$ potential!

ej explicit tidsberoende i V

inre

kontroll: $\frac{dE}{dt} = m\,\mathbb{v}\cdot\dot{\mathbb{v}} + \nabla V(\mathbb{r})\cdot\dot{\mathbb{r}}$

enligt $(*)$ $= m\cdot\mathbb{v}\cdot\left(-\frac{1}{m}\nabla V\right) + \nabla V\cdot\mathbb{v}$ COOLT

$= 0$ så E konstant i tiden!

om $V = V(t)$ ej beror på $\mathbb{r}$, dvs translations rumsinvariant.

kolla själv att man kan förskjuta lösn. i rummet, och att $\mathbb{P} = m\cdot\mathbb{v}$ bevarad!

om $\mathbb{r}\times\nabla V = 0$ är system rotationsinvariant (kring origo)

kolla! och $\mathbb{L}$ m.a.p origo bevarat!

$$\mathbb{L} = \mathbb{r}\times m\mathbb{v}$$

kap 4: NÅGRA TANKEEXPERIMENT. 110905

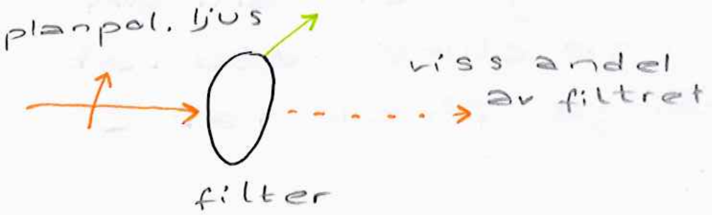
- experiment med fotoner (ljuspartiklar) som har polarisation. ($\underbrace{\text{fotoner}}_{\text{masslösa}}$)
- experiment med elektroner som har spinn. ($\underbrace{\text{elektroner}}_{\text{massiva}}$)
- experiment av "Bell typ" som visar att den klassiska fysiken inte räcker till.

KLASSISKT:

ljus är en elektromagnetisk vågrörelse. givet vågvektorn för en sådan våg, t.ex. i z-axelns riktning, finns det två linjärt oberoende lösningar. dessa kallas för polarisationer. dvs. rör sig på visst sätt i planet ⊥ mot propagationen.

t.ex. kan vi välja en bas av planpolariserade vågor med det elektriska fältet i x-axeln eller y-axelns riktning.

om planpolariserat ljus träffar ett polaroidfilter så passerar bara en viss andel $P = \cos^2\theta$ ← vinkel mellan ljusets & filtrets polariseringsriktningar



efter filtret kommer den andel som passerade att vara pol. i filtrets pol. riktn.

KVANTFYSIKALISKT:

ljus är en ström av fotoner. dessa är odelbara och har energin $E = \hbar\omega$ ← ljusets vinkelfrek.

när en polariserad foton träffar ett polarisationsfilter så passerar den (odelad) med sannolikhet p och stoppas med sannolikhet $1-p$

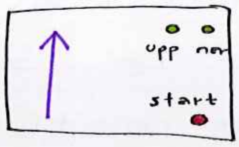
om den passerar så har den filtrets pol. riktn.

ELEKTRONER.

det finns inte någon riktigt bra klassisk motsvarighet till "spinn".
(ungefär "inre rörelsemängdsmoment")

vi konstruerar en "spinnprojektionsmätare" denna har en viss mätriktning $\hat{n}$ (en enhetsvektor) och två indikatorlampor markerade "spinn upp" och "spinn ner" samt en startknapp.

en mätning på en elektron ger alltså endera av resultaten ↑ eller ↓.



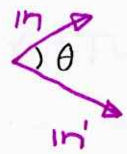
upprepade mätningar med samma mätriktning $\hat{n}$ ger samma resultat ↑ eller ↓. (om e^- ej påverkats under mellantiden)

John Bell kallade detta för en "moralisk mätning" dvs. vill ju ej ha nåt som stör när det mäter, ej påverkan!

men en förnyad mätning i en annan mätriktning $\hat{n}'$ kan ge olika resultat.
man finner efter många försök (av 2 mätningar vardera) i $\hat{n}$ och $\hat{n}'$

$$P_{\text{samma resultat}} = \cos^2 \frac{\theta}{2}$$

$$P_{\text{olika resultat}} = \sin^2 \frac{\theta}{2}$$



där θ är vinkeln mellan $\hat{n}$ och $\hat{n}'$.
en följd av mätningar i riktningarna $\hat{n}, \hat{n}', \hat{n}'', \ldots$ behandlas på samma sätt.

Fråga: kan det inte finnas någon slags "dolda variabler" i fotoner och elektroner som förklarar allt detta på ett deterministiskt sätt?

Svar: jo, i princip, vänta bara... ⇦ CLIFFHANGER

EXPERIMENT MED TVÅ PARTIKLAR.

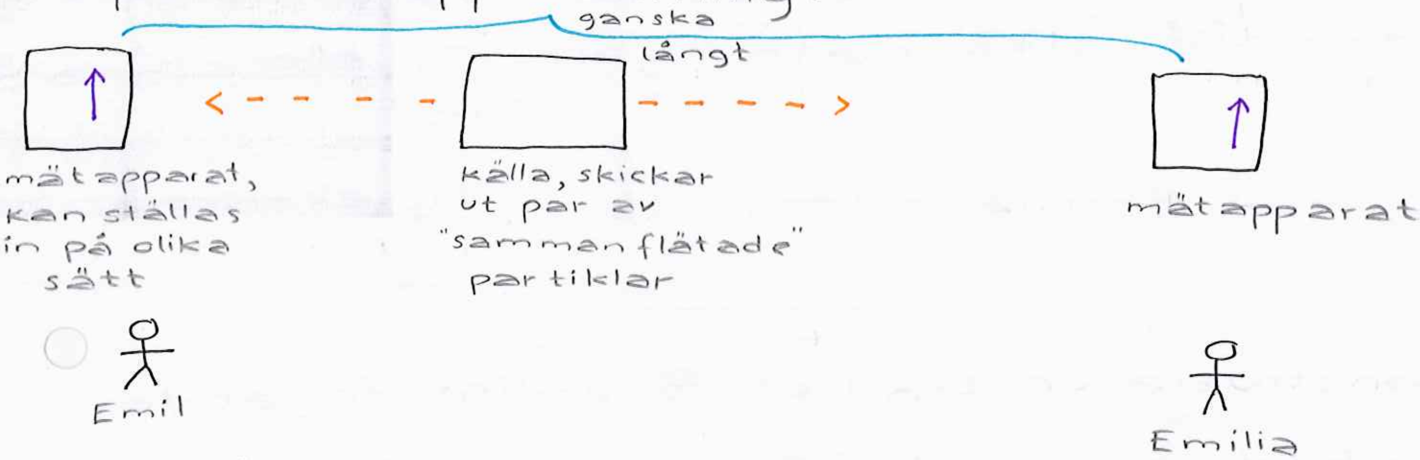
EPR (Einstein, Podolsky, Rosen) 1935

David Bohm 1950-talet använde e^- spinn.

John Bell 1964 konstruerade viss olikhet som måste uppfyllas om klassiskt fysik gäller, men som ej nödvändigtvis uppfylls i kvantfysik.

riktiga försök har gjorts (med fotoner) av bl.a. Alain Aspect.

experimentuppställning:



inställningarna görs precis innan respektive mätning så att informationen därom inte kommer fram till andra mätesplatsen.

ENLIGT KLASSISK FYSIK:

finns uppsättning "dolda variabler" λ, vi kan dock ej avläsa dem. men de följer ngn (okänd) sannolikhetsfördelning $\rho(\lambda)d\lambda$ så att $\int_\Lambda \rho(\lambda)d\lambda = 1$.

Emils sannolikheter för olika mätresultat (↑ eller ↓) beror bara på Emils mätriktning m_1, och på λ men inte på m_2 (Emilia's mätriktn.)

beteckna dessa med $P^{(1)}_{\uparrow}(m_1, \lambda)$ och $\mathbb{P}^{(1)}_{\downarrow}(m_1, \lambda)$, med summan 1.

Emilia har pss. $\mathbb{P}^{(2)}_{\uparrow}(m_2, \lambda)$ och $\mathbb{P}^{(2)}_{\downarrow}(m_2, \lambda)$

för givna m_1 och m_2 kan vi införa korrelationen mellan Emil och Emilias mätresultat.

+ bidrag om samma

− bidrag om olika!

$$E(m_1, m_2) = P_{\uparrow\uparrow}(m_1, m_2) + \mathbb{P}_{\downarrow\downarrow}(m_1, m_2) - P_{\uparrow\downarrow}(m_1, m_2) - P_{\downarrow\uparrow}(m_1, m_2)$$

EMIL UPP
EMILIA NER

EMIL NER
EMILIA UPP

vi har t.ex

$$P_{\uparrow\downarrow}(m_1, m_2) = \int_{\Lambda} P_{\uparrow}(m_1, \lambda) \cdot \mathbb{P}_{\downarrow}(m_2, \lambda)\, \rho(\lambda)$$

för enkelhetens skull låt Emil välja mellan bara två olika mätningar m_1 eller m_1'

— " — Emilia — " — m_2 eller m_2'

konstruera en storhet B enligt följande

$$B = B(m_1, m_1', m_2, m_2') = |E(m_1, m_2) + E(m_1', m_2) + E(m_1, m_2') - E(m_1', m_2')|$$

man visar enkelt att $B \leq 2$ (triangelolikhet etc)

"Bells teorem"

VAD HÄNDER I KVANTFYSIKEN?

jo vi kommer senare i kursen att finna att

$$P_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2) = \frac{1}{2}\sin^2\frac{\theta}{2}$$

θ vinkel mellan $\mathbf{n}_1$, $\mathbf{n}_2$

$$P_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2) = \frac{1}{2}\sin^2\frac{\theta}{2}$$

summan = 1

$$P_{\uparrow\downarrow} = \frac{1}{2}\cos^2\frac{\theta}{2}$$

$$P_{\downarrow\uparrow} = \frac{1}{2}\cos^2\theta$$

ger oss

$$E(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2) = -\cos\theta$$

välj nu $\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_1', \mathbf{n}_2, \mathbf{n}_2'$ lämpligt.

man kan faktiskt få $B(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_1', \mathbf{n}_2, \mathbf{n}_2') = 2\sqrt{2}$ > 2!

dvs. Bell's olikhet gäller ej, något är fel på klassisk fysik!

Aspects experiment bekräftar kvantfysik och falsifierar alltså klassisk fysik

110906 kap 5: KVANTTILLSTÅND lite annorlunda än vanliga tillstånd

ett givet fysikaliskt system har ett visst tillståndsrum $\mathcal{H}$.

detta är ett linjärt rum (vektorrum) över de komplexa talen $\mathbb{C}$.

detta betyder: om ψ och ψ' är två godtyckliga element i $\mathcal{H}$ och c och c' är två godtyckliga komplexa tal så kan man bilda ett nytt element i $\mathcal{H}$ genom linjärkombination

$$c\psi + c'\psi'$$

diverse "självklara" räkneregler gäller.

Linjärt oberoende: låt $\chi_1, \chi_2, \ldots \chi_D$ vara givna element i $\mathcal{H}$.

ekvationen $c_1\chi_1 + c_2\chi_2 + \ldots + c_D\chi_D = 0$

med obekanta komplexa tal $c_1, \ldots c_D$ har alltid den triviala lösningen

$c_1 = \ldots = c_D = 0$

om detta är den enda lösningen så ~~säger~~ vi att $\chi_1, \ldots \chi_D$ är linjärt oberoende.

en maximal uppsättning linjärt oberoende element $\chi_1, \ldots \chi_D$ kallas för en bas för $\mathcal{H}$ som då har dimensionen D.

(vi antar $0 < D < \infty$ till vidare)

ett godtyckligt element ψ i $\mathcal{H}$ kan entydigt utvecklas i denna bas

$$\psi = c_1\chi_1 + \ldots + c_D\chi_D$$

unika koeff.

Skalärprodukten: $\mathcal{H}$ är försedd med en komplexvärd skalärprodukt som till två element i $\mathcal{H}$ ordnar ett komplext tal.

vi använder Paul Diracs "duala" notation: ett och samma element i $\mathcal{H}$ kan skrivas

jmf. reell skalärproduct $\mathbb{A} \cdot \mathbb{B} = \mathbb{B} \cdot \mathbb{A} \in R$ mellan vektorer i vanliga rummet

- antingen som en "bra" $\langle \psi |$
- eller som en "ket" $| \psi \rangle$

skalärprodukten mellan $\langle \psi |$ och $| \psi \rangle$ skrivs då $\langle \psi | \psi' \rangle$.

det gäller att $\langle \psi | \psi' \rangle = \overline{\langle \psi' | \psi \rangle}$ måste komplex-konjugera

OBS att $\langle \psi | \psi \rangle$ är reellt.

det gäller att $\langle \psi | \psi \rangle \geq 0$ med likhet OMM $\psi = 0$

"normen av ψ"

(dvs. nollelement i $\mathcal{H}$)

korrespondensen mellan "bra" och "ket" är "antilinjär"

$c | \psi \rangle + c' | \psi' \rangle$ svarar mot $\bar{c} \langle \psi | + \bar{c}' \langle \psi' |$

OBS att skalärprodukten inte är bilinjär som den "vanliga".
utan "seskvilinjär" = halvannan, 1.5 typ

$$\langle \chi | c \psi + c' \psi' \rangle = c \langle \chi | \psi \rangle + c' \langle \chi | \psi' \rangle$$

linjär i ket-faktorn

$$\langle c \psi + c' \psi' | \chi \rangle = \bar{c} \langle \psi | \chi \rangle + \bar{c}' \langle \psi' | \chi \rangle$$

antilinjär i bra-faktorn

en bra-c-ket $\langle \psi | c | \chi \rangle$

läs om Dirac:
Farmello
"The Strangest Man"

ψ är normerat om $\langle \psi | \psi \rangle = 1$

ψ och χ är ortogonala om $\langle \psi | \chi \rangle = 0$

en bas $\chi_1, \ldots \chi_n$ för $\mathcal{H}$ väljs gärna ortonormerad $\langle \chi_i | \chi_j \rangle = \delta_{ij} = \begin{cases} 0 & i \neq j \\ 1 & i = j \end{cases}$

Underrum:

låt $\mathcal{H}$ vara ett linjärt rum över $\mathbb{C}$.
$\mathcal{H}$ kan naturligtvis betraktas som en mängd.
en delmängd $\mathcal{H}_1$ av $\mathcal{H}$ säges vara ett (linjärt) underrum till $\mathcal{H}$ om den i sig är ett linjärt rum.
detta betyder att de linjära operationerna inte tar oss ut ur $\mathcal{H}_1$.
om $\mathcal{H}_1$ är ett sådant underrum till $\mathcal{H}$ så kan vi på ett naturligt sätt konstruera ytterligare ett underrum till $\mathcal{H}$:

$\mathcal{H}_1^\perp$ = $\mathcal{H}_1$'s ortogonalkomplement map $\mathcal{H}$ = $\{$alla element i $\mathcal{H}$ som är $\perp$ mot alla element i $\mathcal{H}\}$

tillståndsrum $\mathcal{H}$ med komplementära underrum $\mathcal{H}_1$ och $\mathcal{H}_1^\perp$.

man kan visa att ett godtyckligt element ψ i $\mathcal{H}$ på ett entydigt sätt kan uppdelas enligt $\psi = \psi_1 + \psi_1^\perp$

element i $\mathcal{H}_1$ element i $\mathcal{H}_1^\perp$

detta faktum uttrycks ofta som att "$\mathcal{H}$ är den direkta summan av $\mathcal{H}_1$ och $\mathcal{H}_1^\perp$".
i formler skriver vi $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_1^\perp$

vi kan fortsätta:

$\mathcal{H}_1^\perp$ är ett linjärt rum, låt $\mathcal{H}_2$ vara ett underrum av $\mathcal{H}_1^\perp$.

låt $\mathcal{H}_2^\perp$ vara ortogonalkomplementet (map $\mathcal{H}_1^\perp$ dvs rummet som är större)

vi kan då skriva:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_1^\perp = \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 \oplus \mathcal{H}_2^\perp$$

mer allmän ortogonal uppdelning av $\mathcal{H}$:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 \oplus \dots \oplus \mathcal{H}_N$$ alla är ortogonala mot varann!

detta betyder: ett godtyckligt element ψ : $\mathcal{H}$ kan entydigt uppdelas enligt

$$\psi = \psi_1 + \psi_2 + \dots + \psi_N$$

där $\psi_i \in \mathcal{H}_i$ och $\mathcal{H}_i$ $i = 1, \dots N$ inbördes ortogonala

$\langle \psi_i | \psi_j \rangle = 0$ om $i \neq j$

KVANTTILLSTÅND:

ett fysikaliskt tillstånd för vårt system kan representeras med ett element $\psi \neq 0$ i $\mathcal{H}$.

MEN det går lika bra med en multipel $c\psi$ ($c \neq 0$ godtyckligt komplext tal)

skilt från ψ sett som element i $\mathcal{H}$ (om ej $c = 1$)

men representerar samma fysik

OBS att givet $\psi \neq 0$ så utgör elementen $c\psi$ (om man inkluderar $c = 0$) ett linjärt underrum till $\mathcal{H}$ med dimension 1.

(kallas stråle)

alltså: givet tillståndsrummet $\mathcal{H}$ så svarar fysikaliskt inekvivalenta tillstånd mot olika strålar i $\mathcal{H}$

underrum dim 1

en stråle kan specificeras genom att vi ger ett element $\psi \neq 0$ i den.
ofta väljer vi detta representerande ψ så att det är normerat:

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1$$

OBS att då är även $e^{i\phi}\psi$ normerat

$$\langle e^{i\phi}\psi | e^{i\phi}\psi \rangle \qquad (\phi \text{ reell})$$

$$= e^{-i\phi} e^{i\phi} \langle \psi | \psi \rangle = 1$$

komplex-konjugera på bra-et

ex. polarisation hos foton

en foton som rör sig t.ex längs positiva z-axeln har en "inre" polarisationsfrihetsgrad. motsvarande tillståndsrum $\mathcal{H}$ är 2-dimensionellt.
vi kan införa en ON bas χ_1, χ_2 så att nollskilja multipler $c\chi_1$ svarar mot polarisation längs x-axeln

—"— $c\chi_2$ —"— längs y-axeln

ett godtyckligt element ψ i $\mathcal{H}$ kan nu skrivas entydigt

$$\psi = c_1 \chi_1 + c_2 \chi_2$$

om inte både c_1, c_2 är noll definerar detta ett nollskijt element och alltså ett fysikaliskt tillstånd.

OBS att endast förhållandet $c_1 : c_2$ (det komplexa talet c_1/c_2 elr ∞ om $c_2 = 0$ (men $c_1 \neq 0$)) är viktigt för att bestämma fysikaliskt inekvivalenta tillstånd.

$$c\Psi = c(c_1\chi_1 + c_2\chi_2) = cc_1\chi_1 + cc_2\chi_2$$

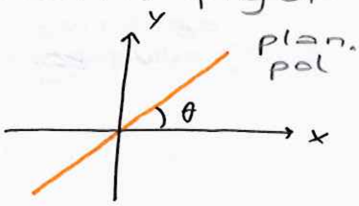
samma fysik

nya koeff, samma förhållande

NÅGRA SPECIALFALL:

$c_1 : c_2$ reellt så har vi planpol. ljus

t.ex $\underline{\underline{\Psi}} = \cos\theta\,\chi_1 + \sin\theta\,\chi_2$ pol. enl. figur



$c_1 : c_2 = \pm i$ så har vi cirkulär-polariserat ljus

t.ex $\underline{\underline{\Psi}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\pm i\,\chi_1 + \chi_2)$

vänster/höger cirkulärpol.

VALDA S.A. DE ÄR NORMERADE!

i allmänhet har vi elliptisk polarisation:

$c_1 : c_2$ är ett godtyckligt komplext tal.

Ex. spinn hos elektron (läs själva)

tillståndsrum $\mathcal{H}$ 2-dim.

hur väljer vi en bas i $\mathcal{H}$?

jo, om $\mathbf{n}$ är en "mätriktning" (enhets vektor i det vanliga rummet)

kan vi införa en bas

$\Psi_{\mathbf{n}}^{\uparrow}, \Psi_{\mathbf{n}}^{\downarrow}$ för $\mathcal{H}$.

en annan riktning $\mathbf{n}'$ ger annan ON-bas.

$\Psi_{\mathbf{n}}^{\uparrow}$ svarar mot fys. tillstånd $\uparrow$ vid mätn. i rikt $\mathbf{n}$

$\Psi_{\mathbf{n}}^{\downarrow}$ the same!

110912 kap 6: MÄTNINGAR.

enligt "Köpenhamnstolkningen"
- "shut up and calculate!"

system — beskrivs med kvantfysik

mätapparatur (in; 1 2 ..... N) — beskrivs med klassisk fysik

får dra gräns nånstans,
kan flytta lite beroende på.
hellre mer i system om osäker!

systemet har ett tillståndsrum $\mathcal{H}$ och i visst ögonblick befinner det sig i ett visst tillstånd $\psi \in \mathcal{H}$ $\psi \neq 0$ i $\mathcal{H}$

ψ och $c\psi$ $(c \neq 0)$ beskriver samma fysik.

en mätning med viss inställning (in) av mätapparaturen kan ge N olika mätresultat.

en sån mätning svarar mot en ortogonaluppdelning av $\mathcal{H}$,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 \oplus \dots \oplus \mathcal{H}_N$$

N tänkbara resultat hos mätning

(en annan mätning skulle ge annan uppdelning
$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1' \oplus \mathcal{H}_2' \oplus \dots \oplus \mathcal{H}_{N'}'$ dvs. den kanske har olika antal utfall etc.)

om vrider om t.ex blir $N' = N$ men ej alltid.

en sån uppdelning betyder att vi entydigt kan skriva:

$$\psi = \underset{\in \mathcal{H}_1}{\psi_1} + \psi_2 + \dots + \underset{\in \mathcal{H}_N}{\psi_N} \qquad \langle \psi_i | \psi_j \rangle = 0 \quad i \neq j$$

dvs. ortogonala!

vid en mätning på tillståndet ψ får vi de olika resultaten $1, 2, \dots, N$ med sannolikheterna

$$\boxed{P_1 = \frac{\langle \psi_1 | \psi_1 \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}}$$

osv.

BORNS REGEL.

efter mätningen (den påverkar tillståndet) [mätningen]
är systemet i det nya tillståndet φ_i
där i är det tal $1, \dots, N$ som svarar mot det mätresultatet vi fick.

om vi vill arbeta med normerade tillstånd kan vi istället ta:

$$\frac{\varphi_i}{\sqrt{\langle \varphi_i | \varphi_i \rangle}}$$

OBS $\langle \varphi_i | \varphi_i \rangle \neq 0$ ty då hade P_i varit noll.

en mätning till?

vi upprepar resonemanget, startar med φ_i istället för φ.
skriv som summa, men då fås ju $P_i = 1$.

mätningen är moralisk.

men om vi gör annan mätning t.ex. som ovan, då får vi dela upp φ_i på nytt.
annat resultat då! (kan bli)

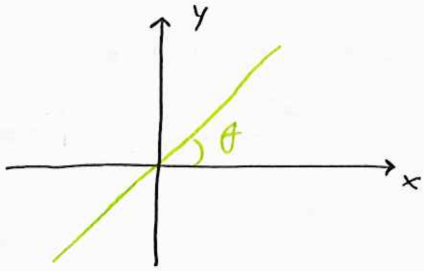
$$\varphi_i = \varphi_1' + \varphi_2' + \dots + \varphi_N'$$

$$P_j' = \frac{\langle \varphi_j' | \varphi_j' \rangle}{\langle \varphi_i | \varphi_i \rangle}$$

övning: visa $P_1 + P_2 + \dots + P_N = 1$ bra och ket? $\langle \, |$ $| \, \rangle$

ex. foton längs positiva z-axeln
dim $\mathcal{H} = 2$, inför ON-bas χ_1, χ_2

vi mäter genom att placera ett pol. filter i fotonens väg



två tänkbara utfall:

$\begin{cases} \text{foton passerar} \\ \text{foton stoppas} \end{cases}$

vi ska alltså ha en uppdelning

$$\underset{}{\mathcal{H}} = \underset{\text{dim}=1}{\mathcal{H}_{pass}} \oplus \underset{\text{dim}=1}{\mathcal{H}_{stopp}}$$

i själva verket

$\mathcal{H}_{passerar} = \{ c\psi_\theta ; c \in \mathbb{C} \}$

$\mathcal{H}_{stoppas} = \{ c'\psi_{\theta+\frac{\pi}{2}} , c' \in \mathbb{C} \}$

$$\left.\begin{aligned} \psi_\theta &= \cos\theta\, x_1 + \sin\theta\, x_2 \\ \psi_{\theta+\frac{\pi}{2}} &= -\sin\theta\, x_1 + \cos\theta\, x_2 \end{aligned}\right\} \text{ utgör tillsammans en ON-bas}$$

betrakta nu en foton i ett godtyckligt normerat tillstånd $\psi \in \mathcal{H}$, $\langle \psi | \psi \rangle = 1$

kan då dela upp enligt

$$\psi = \psi_{pass} + \psi_{stopp} = \underset{\mathcal{H}_{pass}}{\underset{\cap}{c\psi_\theta}} + \underset{\mathcal{H}_{stopp}}{\underset{\cap}{c'\psi_{\theta+\frac{\pi}{2}}}}$$

där $|c|^2 + |c'|^2 = 1$ ty ψ normerat.

sannolikheterna är

$$P_{pass} = \frac{\langle c\psi_\theta | c\psi_\theta \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = |c|^2 \qquad P_{stopp} = \frac{\langle c'\psi_{\theta+\frac{\pi}{2}} | c'\psi_{\theta+\frac{\pi}{2}} \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = |c'|^2$$

antag: foton passerar.

nytt tillstånd $c\psi_\theta$, eller normerat ψ_θ.

utsätt den för nytt filter, vinkeln θ'

uppdelning då: $\psi_\theta = \underbrace{a\psi_{\theta'} + a'\psi_{\theta'+\frac{\pi}{2}}}_{\text{en bas ju } \mathcal{H}}$ övning!

$$\psi_\theta = \cos(\theta-\theta')\,\psi_{\theta'} + \sin(\theta-\theta')\,\psi_{\theta'+\frac{\pi}{2}}$$

sannolikheterna blir nu

$$P'_{pass} = |\cos(\theta-\theta')|^2 = \cos^2(\theta-\theta')$$

$$P'_{stopp} = |\sin(\theta-\theta')|^2 = \sin^2(\theta-\theta')$$

stämmer klassiskt !!

ex. elektronspinn

2-dim $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{n}^{\uparrow} \oplus \mathcal{H}_{n}^{\downarrow}$, med ON-bas χ_1, χ_2

n enhetsvektor i "vanliga" rummet $\mathbb{R}^3$

$n = x\,\hat{i} + y\,\hat{j} + z\,\hat{k}$ dvs $x^2+y^2+z^2=1$
$x, y, z \in \mathbb{R}$

vi gör en spinnprojektionsmätning i rikt n,
resultat $\uparrow$ eller $\downarrow$.

en sådan mätning svarar mot en uppdelning enligt ovan, där riktning n alltså är med.

$\dim \mathcal{H}_{n}^{\uparrow} = \dim \mathcal{H}_{n}^{\downarrow} = 1$

$\mathcal{H}_{n}^{\uparrow} = \{\text{multipler av } \psi_{n}^{\uparrow}\}$ osv. för $\psi_{n}^{\downarrow}$

$\psi_{n}^{\uparrow}, \psi_{n}^{\downarrow}$ ON-bas för $\mathcal{H}$.

vi skall beskriva $\psi_{n}^{\uparrow}$ och $\psi_{n}^{\downarrow}$,
utveckla dem i χ_1, χ_2 basen.

$$\begin{cases} \psi_{n}^{\uparrow} = \dfrac{x-iy}{\sqrt{2(1-z)}}\chi_1 + \sqrt{\dfrac{1-z}{2}}\,\chi_2 \\[2ex] \psi_{n}^{\downarrow} = \sqrt{\dfrac{1-z}{2}}\,\chi_1 - \dfrac{x+iy}{\sqrt{2(1-z)}}\chi_2 \end{cases}$$

känslan för detta kommer 👍

men kan ju kolla $\psi_{n}^{\uparrow}, \psi_{n}^{\downarrow}$ en ON-bas

$\langle \psi_{n}^{\uparrow} | \psi_{n}^{\downarrow} \rangle = 0 \quad \langle \psi_{n}^{\uparrow} | \psi_{n}^{\uparrow} \rangle = 0$ osv. DO IT!!

glöm ej det ovan, och $x^2+y^2+z^2=1$ även bra-ket regler!

låt oss mäta i riktning n på
ett kvanttillstånd.
antag resultat blev $\uparrow$.

efter mätning är system i tillstånd
$\psi = \psi_{n}^{\uparrow}$ (ekvivalent $c\psi_{n}^{\uparrow}$, $c \neq 0$).

vi gör nu en mätning i någon annan riktning
$n' = x'\,\hat{i} + y'\,\hat{j} + z'\,\hat{k}$.

svarar då mot annan uppdelning

$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{n'}^{\uparrow} \oplus \mathcal{H}_{n'}^{\downarrow}$

där $\mathcal{H}_{n'}^{\uparrow} = \{\text{multipler av } \psi_{n'}^{\uparrow}\}$ osv för $\mathcal{H}_{n'}^{\downarrow}$

$\psi_{n'}^{\uparrow}$ = uttryck enligt tidigare men med x', y', z'

vi skall alltså dela upp

$\psi = c_\uparrow \psi_{in'}^{\uparrow} + c_\downarrow \psi_{in'}^{\downarrow}$ med baser i den nya riktningen

dvs

$\psi_{in}^{\uparrow}$ dvs. bör tolkas som $|\psi\rangle = c_\uparrow |\psi_{in'}^{\uparrow}\rangle + c_\downarrow |\psi_{in'}^{\downarrow}\rangle$

med lite pyssel beräknar vi

$$c_\uparrow = \langle \psi_{in'}^{\uparrow} | \psi \rangle = \ldots = \frac{1}{2} \frac{(x' + iy')(x - iy)}{\sqrt{(1-z')(1-z)}} + \frac{1}{2}\sqrt{(1-z')(1-z)}$$

$$c_\downarrow = \langle \psi_{in'}^{\downarrow} | \psi \rangle = \ldots = \frac{x - iy}{2}\sqrt{\frac{1-z'}{1-z}} - \frac{(x - iy')}{2}\sqrt{\frac{1-z}{1-z'}}$$

TRY IT!

denna andra mätning ger alltså

$\uparrow$ med sannolikhet $P_{\uparrow\uparrow} = |c_\uparrow|^2 = \ldots = \cos^2\frac{\theta}{2}$

$\downarrow$ — " — $P_{\downarrow\downarrow} = |c_\downarrow|^2 = \ldots = \sin^2\frac{\theta}{2}$

stämmer med experimentella resultat!

Kap 7: OPERATORER 110913

tillståndsrum $\mathcal{H}$ (ett linjärt rum över $\mathbb{C}$)

en operator är en fkt'n

$$\hat{A} : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$$
$$\psi \longrightarrow \hat{A}\psi$$

$$f : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$$
$$x \longmapsto f(x)$$

som är linjär dvs.

linjärt

$$c\psi + c'\psi' \longmapsto \hat{A}(c\psi + c'\psi') = c\hat{A}\psi + c'\hat{A}\psi'$$

linjäriteten betyder att $\hat{A}$ är fullständigt bestämd av hur den verkar på elementen $x_1, \dots x_n$: en ON-bas för $\mathcal{H}$

tänk på som $|x_1\rangle$ osv.

bilderna $\hat{A}|x_1\rangle, \dots \hat{A}|x_n\rangle$

kan i sin tur utvecklas i basen $|x_1\rangle, \dots |x_n\rangle$

$$\hat{A}|x_j\rangle = \sum_{i=1}^{n} A_{ij} |x_i\rangle$$

komplexa koefficienter, kallas $\hat{A}$'s matriselement, m.a.p basen $x_1, \dots x_n$

operatorn $\hat{A}$ har matrisen map $x_1, \dots x_n$

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1n} \\ A_{21} & \dots\dots & & \\ & & & \\ & & & A_{nn} \end{pmatrix}$$

OBS $A_{ij} = \langle x_i | \hat{A} x_j \rangle$ ty $\langle x_i | x_j \rangle = \delta_{ij}$ (ON bas)

$= \langle x_i | \hat{A} | x_j \rangle$ ($\hat{A}$ verkar åt höger)

givet $\hat{A} : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$ så definerar vi dess Hermitekonjugat $\hat{A}^{\dagger}$ ("dagger") $: \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$

def. är att dess matriselement ges av

$$\langle \psi | \hat{A}^{\dagger} | \psi' \rangle \equiv \overline{\langle \psi' | \hat{A} | \psi \rangle}$$ komplexkonj.

godtyckliga element i $\mathcal{H}$

eller

$$\langle \psi | \hat{A}^{\dagger} \psi' \rangle \equiv \langle \hat{A}\psi | \psi' \rangle$$

motsvarande matriser A och A^+ är varandras Hermitekonjugat.

$$A^+ = (\bar{A})^T$$ transponera

matriser

TVÅ VIKTIGA KLASSER AV OPERATORER

$\hat{A} : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$ är Hermitesk om $\hat{A}^+ = \hat{A}$
"självadjungerad"

$\hat{U} : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$ är unitär om $\hat{U}^+\hat{U} = \mathbb{1}$ enhets-operatorn

allt kan översättas till matriser.

kul samband:

om $\hat{A}$ är Hermitesk så är

$\hat{U} = \exp(i\hat{A})$ unitär

Taylor ju!

$$= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!}(i\hat{A})^k = 1 + i\hat{A} + \frac{1}{2}(i\hat{A})^2 + \ldots$$

fysikaliska storheter vars måtvärden är reella tal brukar motsvaras av Hermiska operatorer.

unitära operatorer har ett nära samband med symmetrier.

Wigners teorem:

till varje symmetri hör en unitär operator $\hat{U}$. symmetritransformationen verkar på tillståndsrummet $\mathcal{H}$ enligt $\psi \longmapsto \hat{U}\psi$

man flyttar det.

om symmetrin är kontinuerlig så är $\hat{U}$ av formen $\hat{U} = \exp(i\alpha\hat{A})$

reell parameter för den kont. symmetrin.

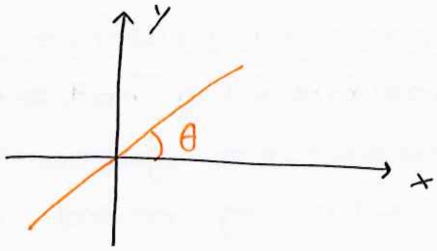
Hermitesk operator, svarar mot fysikalisk storhet som bevaras i klassisk fysik enligt Noether.

KVANTVERSIONEN av "NOETHERS TEOREM"

$$(\hat{A}+\hat{B})\Psi = \underbrace{\hat{A}\Psi}_{\in \mathcal{H}} + \underbrace{B\Psi}_{\in \mathcal{H}}$$

$\hat{A}+\hat{B}$: $\in \mathcal{H}$

ex. polarisation för foton längs pos. z-axeln
tillståndsrum $\mathcal{H}$ med on-bas χ_1, χ_2
$\Psi_\theta = \cos\theta\, \chi_1 + \sin\theta\, \chi_2$ svarar mot polarisation enligt figur



symmetritransformation:
rotation med vinkel θ' kring z-axeln.

jag påstår att motsvarande unitära operator $\hat{U}_{\theta' lk}$ har matrisen m.a.p χ_1, χ_2-basen

$$U_{\theta' lk} = \begin{array}{c} \begin{pmatrix} \cos\theta' & \sin\theta' \\ -\sin\theta' & \cos\theta' \end{pmatrix} \end{array} \begin{array}{l} |\chi_1\rangle \\ |\chi_2\rangle \end{array}$$

dvs. att
$$\hat{U}_{\theta' lk}|\chi_1\rangle = \cos\theta'|\chi_1\rangle + \sin\theta'|\chi_2\rangle$$
$$\hat{U}_{\theta' lk}|\chi_2\rangle = -\sin\theta'|\chi_1\rangle + \cos\theta'|\chi_2\rangle$$

rimligt?
vi undersöker verkan av $\hat{U}_{\theta' lk}$ på Ψ_θ:

$$\hat{U}_{\theta' lk}|\Psi_\theta\rangle = \hat{U}_{\theta' lk}(\cos\theta|\chi_1\rangle + \sin\theta|\chi_2\rangle)$$
$$= \cos\theta\,\hat{U}|\chi_1\rangle + \sin\theta\,\hat{U}|\chi_2\rangle$$
$$= \cos\theta(\cos\theta'|\chi_1\rangle + \sin\theta'|\chi_2\rangle) + \sin\theta(-\sin\theta'|\chi_1\rangle + \cos\theta'|\chi_2\rangle)$$
$$= (\cos\theta\cos\theta' - \sin\theta\sin\theta')|\chi_1\rangle + (\cos\theta\sin\theta' + \cos\theta'\sin\theta)|\chi_2\rangle$$
$$= \cos(\theta+\theta')|\chi_1\rangle + \sin(\theta+\theta')|\chi_2\rangle$$
$$= \Psi_{\theta+\theta'}$$ polarisation i den riktningen!
dvs. gött, en vridning av pol. riktning en vinkel θ'.

undersök själva: $\hat{U}_{\theta' lk}|\Psi_\pm\rangle$
dvs cirk pol ljus

ex. elektronspinn

tillståndsrum $\mathcal{H}$ med ON-baser $\psi_{\mathbf{n}}^{\uparrow}, \psi_{\mathbf{n}}^{\downarrow}$

där $\mathbf{n}$ = godtycklig enhetsvektor i "vanliga" rummet $\mathbb{R}^3$.

vi konstruerade dessa uttryckta i en "fix" ON-bas χ_1, χ_2.

symmetritransformation:

godtycklig rotation kring en axel i rummet.
beskrivs genom en vektor $\boldsymbol{\Omega}$ i rotationsaxelns riktning med storlek $\Omega = |\boldsymbol{\Omega}|$ = vridningsvinkeln.

hur ser matris $U_{\boldsymbol{\Omega}}$ för motsvarande unitära operator $\hat{U}_{\boldsymbol{\Omega}}$ ut?

relativt χ_1, χ_2-basen.

$U_{\boldsymbol{\Omega}}$ fås genom exp. av i gånger viss Hermitesk matris.

för att beskriva denna inför vi Paulis sigma-matriser (spinnmatriser)

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

tillsammans med enhetsmatrisen
$\mathbb{1} = I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ spänner de samtliga Hermiteska 2×2 matriser.

givet en rotationsvektor

$$\boldsymbol{\Omega} = \Omega_x \hat{\mathbf{i}} + \Omega_y \hat{\mathbf{j}} + \Omega_z \hat{\mathbf{k}}$$

så bildar vi en Hermitesk matris:

$$\boldsymbol{\Omega}\cdot\vec{\sigma} = \Omega_x\sigma_x + \Omega_y\sigma_y + \Omega_z\sigma_z$$

$$= \begin{pmatrix} \Omega_z & \Omega_x - i\Omega_y \\ \Omega_x + i\Omega_y & -\Omega_z \end{pmatrix}$$

jag påstår att $U_{\boldsymbol{\Omega}} = \exp\left(\frac{i}{2}\boldsymbol{\Omega}\cdot\vec{\sigma}\right)$ är vår sökta rotationsmatris.

eller $\mathbb{1}$

$$U_\Omega = \exp\left(\frac{i}{2}\Omega\cdot\vec{\sigma}\right) = \ldots = I\cdot\cos\frac{\Omega}{2} + \Omega\cdot\vec{\sigma}\,\frac{i}{\Omega}\sin\frac{\Omega}{2}$$

se 7.26

detta är lite omständigt att kontrollera, se sid 69.

det gäller att övertyga sig om att

$$\hat{U}_\Omega\,|\psi_{in}^{\uparrow}\rangle = e^{i\phi\uparrow}|\psi_{in'}^{\uparrow}\rangle$$

nu vrider vi det alltså!

tillstånd som med 100% sannolikhet ger ↑ vid mätning i riktning in

ointressant fasfaktor, påverkar ej fysiken.

den riktning man får genom Ω-rotation av in se 7.28

och även $\hat{U}_\Omega|\psi_{in}^{\downarrow}\rangle = e^{i\phi\downarrow}|\psi_{in'}^{\downarrow}\rangle$

dvs. kolla att det blir såhär, lurigt !!

i allmänhet:

$$\mathcal{H} = \underbrace{\mathcal{H}_1 \oplus \ldots\ldots \oplus \mathcal{H}_N}$$

ett underrum för varje tänkbart utfall av experiment.

riktigt exempel på experiment:

ej matris direkt

att mäta ngn reellvärd storhet $A \in \mathbb{R}$

detta svarar mot Hermitesk operator $\hat{A}: \mathcal{H} \to \mathcal{H}$

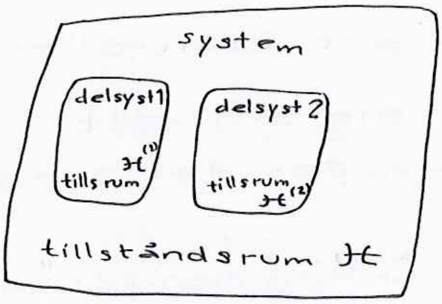
denna har olika egenvärden

$A_1, \ldots A_N$. dessa är de tänkbara resultaten vid en A-mätning.

motsvarande underrum $\mathcal{H}_1, \ldots \mathcal{H}_N$ ges av motsv. egenvektor

$$\hat{A}|\varphi_i\rangle = A_i|\varphi_i\rangle \qquad \varphi_i \in \mathcal{H}_i$$

110914 kap 8: SAMMANFLÄTNING



kanske består systemet av olika delsystem

vad är relation mellan $\mathcal{H}$, $\mathcal{H}^{(1)}$, $\mathcal{H}^{(2)}$?
(alla är linjära rum över $\mathbb{C}$)

svar: $\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$

tensorprodukt

en konkret beskrivning av detta genom att införa ON-baser för $\mathcal{H}^{(1)}$ och $\mathcal{H}^{(2)}$, ger oss en ON-bas för $\mathcal{H}$.

nämligen: ON-baser
$$\begin{cases} \chi_1^{(1)}, \dots \chi_{D_1}^{(1)} & \dim \mathcal{H}^{(1)} = D_1 \\ \chi_1^{(2)}, \dots \chi_{D_2}^{(2)} & \dim \mathcal{H}^{(2)} = D_2 \end{cases}$$

det gäller att $\dim \mathcal{H} = \dim \mathcal{H}^{(1)} \cdot \dim \mathcal{H}^{(2)}$
$$= D_1 D_2$$

vi betecknar en ON-bas för $\mathcal{H}$ enligt

$$\chi_1^{(1)} \otimes \chi_1^{(2)}, \quad \chi_1^{(1)} \otimes \chi_2^{(2)}, \quad \dots \quad \chi_1^{(1)} \otimes \chi_{D_2}^{(2)}$$
$$\chi_2^{(1)} \otimes \chi_1^{(2)}, \quad \dots \quad \chi_{D_1}^{(1)} \otimes \chi_{D_2}^{(2)}$$

ett godtycklig element i $\mathcal{H}$ kan nu entydigt skrivas som en linjär kombination

$$\psi = c_{11} \chi_1^{(1)} \otimes \chi_1^{(2)} + \dots + c_{D_1 D_2} \chi_{D_1}^{(1)} \otimes \chi_{D_2}^{(2)}$$

godtyckliga komplexa koefficienter

vissa element $\psi \in \mathcal{H}$ är produkttillstånd:

$\psi = \psi_1 \otimes \psi_2$ där $\psi_1 \in \mathcal{H}^{(1)}$
$\psi_2 \in \mathcal{H}^{(2)}$

detta gäller t.ex. för de $D_1 D_2$ baselementen ovan, men mer generellt för

ETT PRODUKT-TILLSTÅND

$$\psi = \underbrace{\left(c_1 \chi_1^{(1)} + \ldots + c_{D_1} \chi_{D_1}^{(1)}\right)}_{\psi_1 \in \mathcal{H}^{(1)}} \otimes \underbrace{\left(a_1 \chi_1^{(2)} + \ldots + a_{D_2} \chi_{D_2}^{(2)}\right)}_{\psi_2 \in \mathcal{H}^{(2)}}$$

dvs. de existerar som produkt då.

EJ LIKA UPPENBART ATT PRODUKTTILLSTÅND

$$= c_1 a_1 \chi_1^{(1)} \otimes \chi_1^{(2)} + c_1 a_2 \chi_1^{(1)} \otimes \chi_2^{(2)} + \ldots + c_{D_1} a_{D_2} \chi_{D_1}^{(1)} \otimes \chi_{D_2}^{(2)}$$

linjär kombination av baselementen ovan alltså.

men de flesta $\psi \in \mathcal{H}$ är sammanflätade tillstånd: de kan INTE skrivas på formen $\psi = \psi_1 \otimes \psi_2$, $\psi_i \in \mathcal{H}^{(i)}$

$\otimes$ först för rum, sen element då.

Ex. på konstruktion av operatorer på $\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$

$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2$
$\psi = \psi_1 + \psi_2$

Hermiteska operatorer representerar ofta reellvärda fysikaliska storheter.
om en sådan storhet är additiv och vi bortser från växelverkan mellan systemen så har vi:

$$\underset{\substack{\uparrow\\ \text{operator}\\ \text{på } \mathcal{H}}}{\hat{A}} = \underset{\substack{\uparrow\\ \text{på } \mathcal{H}^{(1)}}}{\hat{A}^{(1)}} \otimes \underset{\substack{\uparrow\\ \text{enhets}\\ \text{på } \mathcal{H}^{(2)}}}{\mathbb{1}^{(2)}} + \underset{\substack{\uparrow\\ \text{enhets}\\ \text{på } \mathcal{H}^{(1)}}}{\mathbb{1}^{(1)}} \otimes \underset{\substack{\uparrow\\ \text{på } \mathcal{H}^{(2)}}}{\hat{A}^{(2)}} \qquad \left(= \hat{A}^{(1)} + \hat{A}^{(2)}\right)$$

$\otimes$ även för att mult. operatorer!

dess verkan på ett produkttillstånd $\psi = \psi_1 \otimes \psi_2$ är

$$\hat{A}\psi = \underbrace{\left(\hat{A}^{(1)} \psi_1\right)}_{\mathcal{H}^{(1)}} \otimes \underbrace{\left(\mathbb{1}^{(2)} \psi_2\right)}_{\mathcal{H}^{(2)}} + \left(\mathbb{1}^{(1)} \psi_1\right) \otimes \left(\hat{A}^{(2)} \psi_2\right)$$

$\hat{A}$'s verkan på ett sammanflätat tillstånd följer av linjäritet:

$$\hat{A}(c\Psi + c'\Psi') = c\hat{A}\Psi + c'\hat{A}\Psi'$$

ex.

$\hat{A}$, $\hat{A}^{(1)}$, $\hat{A}^{(2)}$ kan t.ex representera energier för de olika systemen.

Unitära operatorer representerar ofta symmetritransformationer, t.ex rotationer.

här kan vi bilda:

$$\underset{\substack{\uparrow \\ \text{unitär} \\ \text{operator} \\ \text{på } \mathcal{H}}}{\hat{U}} = \hat{U}^{(1)} \otimes \hat{U}^{(2)}$$

unitära operatorer på $\mathcal{H}^{(1)}$, $\mathcal{H}^{(2)}$

dess verkan på ett produkttillstånd $\Psi = \Psi_1 \otimes \Psi_2$ är:

$$\hat{U}\Psi = \underbrace{(\hat{U}^{(1)}\Psi_1)}_{\in \mathcal{H}^{(1)}} \otimes \underbrace{(\hat{U}^{(2)}\Psi_2)}_{\in \mathcal{H}^{(2)}}$$

liten utmaning: visa att

$$\exp(i(\hat{A}^{(1)} \otimes \mathbb{1}^{(2)} + \mathbb{1}^{(1)} \otimes \hat{A}^{(2)})) = \exp(i\hat{A}^{(1)}) \otimes \exp(i\hat{A}^{(2)})$$

om 7.4

vanligt tal

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar}\theta \hat{J}_z\right) = \hat{U}_{\theta\, lk}$$

finn denna matris

given matris enligt 7.15 som beror på vinkel θ

ex. system som består av två elektronspinn.

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$$

där $\mathcal{H}^{(1)} = \mathcal{H}_{spinn}$ med ON-bas χ_1, χ_2

$\mathcal{H}^{(2)} = \mathcal{H}_{spinn}$

mer generell ON-bas för $\mathcal{H}_{spinn}$ är $\varphi_{\mathbf{n}}^{\uparrow}, \varphi_{\mathbf{n}}^{\downarrow}$

ger ↑ resp ↓ med 100% sannolikhet vid mätn. rikt. $\mathbf{n}$

$\mathbf{n} \in \mathbb{R}^3$

$|\mathbf{n}| = 1$

vid en rotation i $\mathbb{R}^3$ beskriven av en vektor Ω så påverkas ett tillstånd $\psi \in \mathcal{H}_{spinn}$ enligt $\psi \longrightarrow \hat{U}_{\Omega}\psi$ där $\hat{U}_{\Omega}$ har matrisen

$$U_{\Omega} = \underbrace{I}_{\text{enhetsmatrisen } I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}} \cos\frac{\Omega}{2} + \Omega \cdot \underbrace{\vec{\sigma}}_{\text{Paulimatriserna.}} \frac{i}{\Omega} \sin\frac{\Omega}{2} \qquad (☆)$$

en ON-bas för $\mathcal{H}$ ges t.ex. av:

$\chi_1 \otimes \chi_1, \ \chi_1 \otimes \chi_2, \ \chi_2 \otimes \chi_1, \ \chi_2 \otimes \chi_2$

eller motsvarande konstruktion med $\varphi_{\mathbf{n}}^{\uparrow}, \varphi_{\mathbf{n}}^{\downarrow}$.

vi vill undersöka verkan av en rotation på $\mathcal{H}$. unitär operator $\hat{U}_{\Omega} = \hat{U}_{\Omega}^{(1)} \otimes \hat{U}_{\Omega}^{(2)}$

unitära rotationsoperatorer på $\mathcal{H}^{(j)}$ $j = 1, 2$ konstruerade enligt (☆)

skriv upp matrisen för $\hat{U}_{\Omega}$ m.a.p basen.

$$U_{\Omega} = \begin{pmatrix} \langle \chi_1 \otimes \chi_1 | \hat{U}_{\Omega} | \chi_1 \otimes \chi_1 \rangle \ \ 8.18 & \\ \text{iom vill ta ut koeff} & \\ & \\ \text{4×4 matris} & \\ & \end{pmatrix}$$

varje enskilt matriselement är ganska komplicerat se t.ex 8.19

det finns en bättre bas för $\mathcal{H}$, baselementen är inte produkttillstånd utan ges av (8.20)

$$\chi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\chi_1^{(1)} \otimes \chi_2^{(2)} - \chi_2^{(1)} \otimes \chi_1^{(2)}\right)$$

$$\chi_x = -\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\chi_1^{(1)} \otimes \chi_1^{(2)} - \chi_2^{(1)} \otimes \chi_2^{(2)}\right)$$

$$\chi_y = -\frac{i}{\sqrt{2}}\left(\chi_1^{(1)} \otimes \chi_1^{(2)} + \chi_2^{(1)} \otimes \chi_2^{(2)}\right)$$

$$\chi_z = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\chi_1^{(1)} \otimes \chi_2^{(2)} + \chi_2^{(1)} \otimes \chi_1^{(2)}\right)$$

övning: övertyga dig om att det är en ON-bas

vad blir matrisen för $\hat{U}_\Omega$ m.a.p denna bas?

man finner att

$\hat{U}_\Omega |\chi_0\rangle = \dots = |\chi_0\rangle$ dvs χ_0 är invariant (en singlett) under rotation.

låt

$$|\psi_{\mathbf{v}}\rangle = v_x|\chi_x\rangle + v_y|\chi_y\rangle + v_z|\chi_z\rangle$$

godtyckliga koeff.

$$\mathbf{v} = v_x\hat{\imath} + v_y\hat{\jmath} + v_z\hat{k}$$

då är $\hat{U}_\Omega|\psi_{\mathbf{v}}\rangle = |\psi_{\mathbf{v}'}\rangle$ där $\mathbf{v}'$ = resultatet av en rotation Ω på vektorn $\mathbf{v}$

$|\chi_x\rangle, |\chi_y\rangle, |\chi_z\rangle$ är en triplett under rotationer.

vi har konstruerat en ortogonaluppdelning av $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{spinn} \otimes \mathcal{H}_{spinn}$.

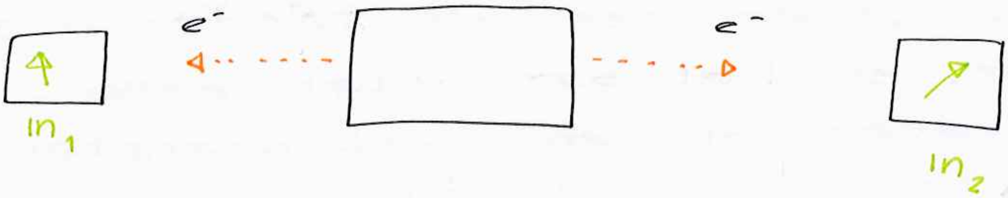
$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{singlet} \oplus \mathcal{H}_{triplett}$$

dim = 1 — spänns av χ_0

dim = 3 — spänns av χ_x, χ_y, χ_z

dim $\mathcal{H}$ = 4 dvs 2×2

åter till tankeexperimentet:



paret av elektroner är i det sammanflätade tillståndet χ_0 dvs

$$\chi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_1 \otimes \chi_2 - \chi_2 \otimes \chi_1)$$

"högra elektronen"

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{\text{in}}^{\uparrow} \otimes \psi_{\text{in}}^{\downarrow} - \psi_{\text{in}}^{\downarrow} \otimes \psi_{\text{in}}^{\uparrow})$$ för ngt godtyckligt in

"vänstra elektronen"

detta är alltså tillstånd som paret elektroner är i, ett väldefinerat tillstånd i $\mathcal{H}$.

MEN t.ex den vänstra (eller högra) elektronen är inte i något väldefinerat individuellt tillstånd.

110919 kap 9: SCHRÖDINGEREKVATIONEN.

fysikaliskt system med tillståndsrum $\mathcal{H}$.
observabel storhet som antar reella värden, svarar mot hermitesk operator
$\hat{A} : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$

egenvärdena $A_1, \dots A_n$ svarar mot tänkbara mätresultat. motsvarande ortogonaluppdelning av $\mathcal{H}$ är
DVS. EJ DELSYSTEM DÅ.

$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \oplus \dots \oplus \mathcal{H}_n$ där $\mathcal{H}_i = \{$multipler av $x_i\}$

$\hat{A}|x_i\rangle = A_i|x_i\rangle$

det viktigaste exemplet på en sådan observabel storhet:
ENERGI
operatorn kallas för Hamiltonoperatorn $\hat{H}$
vi inför gärna en bas $x_1, \dots x_n$ i $\mathcal{H}$ av egentillstånd till $\hat{H}$:

$\hat{H}|x_i\rangle = E_i|x_i\rangle$

energiegenvärde

kan vara så att till ett egenvärde har flera egentillstånd till sig.
antag för enkelhets skull att alla E_i är olika, dvs. icke-degenererade egenvärden.

för många typer av system är energin bevarad.
Noethers teorem säger då: det finns en symmetri (tidsinvariant)
i kvantteorin verkar en tidstranslation Δt på $\mathcal{H}$ genom en unitär operator

$$\hat{U}_{\Delta t} = \exp\left(\frac{-i\Delta t \hat{H}}{\hbar}\right)$$

detta betyder att ett system som vid $t=0$ är i tillståndet $|\psi(t)\rangle$ vid tiden $t+\Delta t$ kommer att vara i tillståndet

$$|\psi(t+\Delta t)\rangle = \hat{U}_{\Delta t}|\psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\Delta t \hat{H}\right)|\psi(t)\rangle$$

vi kan skriva detta som en ODE för tidsutvecklingen av $|\psi(t)\rangle$

$$\boxed{\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle} = \lim_{\Delta t \to 0} \underbrace{\frac{1}{\Delta t}\left(|\psi(t+\Delta t)\rangle - |\psi(t)\rangle\right)}_{}$$

glöm ej: finns i $\mathcal{H}$, linjärt rum ju!

OBS $|\psi(t)\rangle \in \mathcal{H}$ alltså därför ok att sub/dividera etc.

$$= \lim_{\Delta t \to 0} \frac{1}{\Delta t}\left(e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta t \hat{H}}|\psi(t)\rangle - |\psi(t)\rangle\right)$$

vill alltså serieutveckla!

$$= \lim_{\Delta t \to 0} \frac{1}{\Delta t}\left(\left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\Delta t \hat{H} + \mathcal{O}((\Delta t)^2)\right)|\psi(t)\rangle - |\psi(t)\rangle\right)$$

$$= \lim_{\Delta t \to 0}\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}|\psi(t)\rangle + \mathcal{O}(\Delta t)\right) = \boxed{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}|\psi(t)\rangle}$$

vi har funnit den tidsberoende Schrödingerekvationen:

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi}$$

(den tidsoberoende Schrödingerekvationen:)

$$\boxed{\hat{H}|x_i\rangle = E_i|x_i\rangle}$$

→ vi skriver upp den allmänna lösningen, utveckla $\psi(t)$ i ON-basen $x_1, \ldots, x_D$

$$|\psi(t)\rangle = c_1(t)|x_1\rangle + \ldots + c_D(t)|x_D\rangle$$

som vanligt har vi t.ex

$$c_1(t) = \langle x_1|\psi(t)\rangle, \ldots\ldots, c_D(t) = \langle x_D|\psi(t)\rangle$$

sätt in denna utveckling i SE och multiplicera med $\langle x_i|$ för $i = 1, \ldots, D$

ON bas ↓ SE ↓

$$i\hbar \frac{\partial c_1}{\partial t} = \langle \chi_1 | i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \rangle = \langle \chi_1 | \hat{H} \Psi \rangle$$

$$= \langle \chi_1 | \hat{H}(c_1 \chi_1 + \ldots + c_n \chi_2) \rangle$$

$$= \langle \chi_1 | c_1(t) E_1 \chi_1 + \ldots + c_n(t) E_n \chi_n \rangle$$

bas av E-tillstånd

$$= c_1(t) E_1$$

ON bas — dvs. alla andra ex. $\langle \chi_1 | \chi_n \rangle = 0$

$$i\hbar \frac{\partial c_2(t)}{\partial t} = c_2(t) E_2 \quad \text{etc.}$$

$y' = k \cdot y$

allmänna lösningen till dessa ODE:

$$\begin{cases} c_1(t) = c_1(0) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_1 t\right) \\ c_2(t) = c_2(0) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_2 t\right) \\ \text{etc.} \end{cases}$$

in i Ψ alltså

$$|\Psi(t)\rangle = c_1(0) e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} |\chi_1\rangle + \ldots + c_n(0) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} |\chi_n\rangle$$

gadtyckliga begynnelsevärden.

allmän lösning till SE.

intressant specialfall:

$$|\Psi(t)\rangle = c_i(0) e^{-\frac{i}{\hbar}E_i t} |\chi_i\rangle \quad \text{(endast)}$$

detta är ett egentillstånd till $\hat{H}$ med egenvärde E_i för alla t.

t påverkar bara förfaktorn, rent fysikaliskt gör det ej skillnad.

detta är ett stationärt tillstånd m. energi E_i.

låt $\hat{A}$ vara operatorn som svarar mot en viss observabel storhet.

vi har två naturliga ON-baser:

$x_1, \dots x_n$ egentillstånd till $\hat{H}$ med egenvärden $E_1, \dots, E_n$

$x_1', \dots x_n'$ egentillstånd till $\hat{A}$ med egenvärden $A_1, \dots, A_n$

mät storheten $\hat{A}$ vid tid t=0. om resultatet blir A_i så är systemet omedelbart därefter i tillståndet $|x_i'\rangle = \psi(0)$ egentillstånd till $\hat{A}$.

för att bestämma den fortsatta tidsutvecklingen så får vi dela upp

$$|\psi(0)\rangle = c_1(0)|x_1\rangle + \dots\dots + c_n(0)|x_n\rangle$$

i egentillstånd till $\hat{H}$.

den fortsatta tidsutvecklingen är

$$|\psi(t)\rangle = c_1(0)e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t}|x_1\rangle + \dots + c_n(0)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}|x_n\rangle$$

naturligtvis kan $\psi(t)$ sedan utvecklas i basen $|x_1'\rangle, \dots, |x_n'\rangle$.

i allmänhet är då många koeff $\neq 0$ dvs iom att tiden har gått sen sist!! ändrats

$$|\psi(t)\rangle = a_1^{(t)}|x_1'\rangle + \dots + a_n^{(t)}|x_n'\rangle$$

gör en ny $\hat{A}$ mätning. sannolikheterna för resultaten $A_1, \dots, A_n$ är

$P_1 = |a_1|^2$, $P_2 = |a_2|^2$, osv. dvs. e J moraliskt!

vad betyder det att en storhet är "bevarad" i kvantfysik?

jo, en sådan storhet $\hat{A}$ kommuterar med Hamiltonoperatorn $\hat{H}$ drs.

$$\underbrace{[\hat{A},\hat{H}]}_{\text{kommutatorn mellan } \hat{A},\hat{H}} = \hat{A}\hat{H} - \hat{H}\hat{A} = 0$$

man kan då välja en bas $x_1, \dots, x_D$
som diagonaliserar både $\hat{A}$ och $\hat{H}$.

$$\hat{A}|x_i\rangle = A_i|x_i\rangle$$
$$\hat{H}|x_i\rangle = E_i|x_i\rangle \qquad i = 1, \dots, D$$

om kommuterar alltså.

betrakta den allmänna tidsutvecklingen:

$$|\psi(t)\rangle = \underbrace{c_1(0)\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t}}_{\text{sannolikhets-amplituden för mätresultat } A_1 \text{ vid mätn. av } \hat{A}} |x_1\rangle + \dots + c_D(0)\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_D t} |x_D\rangle$$

osv.

dvs de får samma värden som koeff!

OBS sannolikhetsamplituderna är tidsberoende men sannolikheterna är tidsoberoende. $|\text{amplitud}|^2$ ju.

detta är krantmotsvarigheten till en bevarad storhet.

vad händer med en icke bevarad storhet $\hat{B}$?

antag $[\hat{H}, \hat{B}] \neq 0$ och/eller

$\frac{\partial \hat{B}}{\partial t} \neq 0$ (explicit tidsberoende i $\hat{B}$)

inför operatorn $\hat{C} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{B}] + \frac{\partial \hat{B}}{\partial t}$ (Hermitesk om $\hat{B}, \hat{H}$ är det)

vi vill beräkna statistiska väntevärdet $\bar{B}$ dvs $\mathbb{E}[B]$ av en B-mätning på $|\psi(t)\rangle$:

$$\mathbb{E}[B] = \langle \psi(t)|\hat{B}|\psi(t)\rangle$$

normerat!

(allmänt: låt $|\psi\rangle = c_1|x_1\rangle + \dots + c_D|x_D\rangle$

bas av $\hat{B}$ egentillstånd med egenvärden $B_1, \dots B_D$

sannolikheter för $B_1, B_2, \ldots$ är $|c_1|^2, \ldots, |c_n|^2$

vi får då

$$\mathbb{E}[B] = B_1|c_1|^2 + \ldots + B_n|c_n|^2$$

$$= \langle c_1 x_1 + \ldots + c_n x_n | \hat{B} | c_1 x_1 + \ldots + c_n x_n \rangle$$

$$= \langle \psi | B | \psi \rangle$$

$$= \bar{B}$$

hur utvecklas $\mathbb{E}[B]$ med tiden?

$$\frac{\partial \bar{B}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \langle \psi | \hat{B} | \psi \rangle = \langle \frac{\partial \psi}{\partial t} | \hat{B} | \psi \rangle + \langle \psi | \frac{\partial \hat{B}}{\partial t} | \psi \rangle$$

$$= \langle \psi | \hat{B} | \frac{\partial \psi}{\partial t} \rangle$$

SE

$$= \langle -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \psi | \hat{B} | \psi \rangle + \langle \psi | \frac{\partial \hat{B}}{\partial t} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{B} | -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \psi \rangle$$

$$= \frac{i}{\hbar} \langle \psi | \hat{H} \hat{B} | \psi \rangle + \langle \psi | \frac{\partial \hat{B}}{\partial t} | \psi \rangle - \frac{i}{\hbar} \langle \psi | \hat{B} \hat{H} | \psi \rangle$$

seskvilinjär
hermitesk

$$= \langle \psi | \frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{B} - \frac{i}{\hbar} \hat{B} \hat{H} + \frac{\partial \hat{B}}{\partial t} | \psi \rangle$$

$$= \langle \psi | \hat{C} | \psi \rangle = \bar{C}$$ dvs förväntansvärdet av $\hat{C}$ i tillståndet ψ.

<u>Ehrenfests teorem:</u>

$$\frac{\partial \bar{B}}{\partial t} = \bar{C} \quad \text{där} \quad \hat{C} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{B}] + \frac{\partial \hat{B}}{\partial t}$$

vid tidsutveckling enligt SE.

110920 kap 10: DEN HARMONISKA OSCILLATORN.

Klassiskt:

ett system med 2 fysikaliska storheter A och B som uppfyller rörelseekvationerna

$$\begin{cases} \frac{dA}{dt} = \omega B \\ \frac{dB}{dt} = -\omega A \end{cases}$$

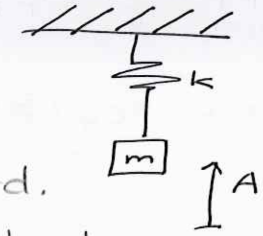
ω = konstant vinkelhastighet

allmän lösning till dessa kopplade ODE:

$$\begin{cases} A(t) = c_1 \cos \omega t + c_2 \sin \omega t \\ B(t) = -c_1 \sin \omega t + c_2 \cos \omega t \end{cases}$$

$c_1, c_2 \in \mathbb{R}$

massor av exempel:



1) massa och fjäder

$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$

A = multipel av lägeskoord.

B = multipel av hastighet

kraft $\propto$ läge osv.

2) (elektromagnetisk) vågrörelse

varje stående svängningsmod är en harmonisk oscillator

A = komponenter av EM-fältet

B = — " —

dvs E och B t.ex Maxwell's

∞ många harmoniska oscillatorer

ekvationerna är tidsinvarianta

Noether: bevarad storhet, energi E.

vi har $E = \frac{\omega}{2}(A^2 + B^2)$ (eller en multipel därav)

$\frac{dE}{dt} = 0$ alltså, enligt rörelseekvationerna.

krantfysikaliskt:

vi antar att det finns ett tillståndsrum $\mathcal{H}$ varpå verkar 3 Hermiteska operatorer $\hat{A}, \hat{B}, \hat{H}$ (Hamilton)

ett godtyckligt tidsberoende krant-tillstånd $\psi(t)$ utvecklas enligt Schrödingerekvationen $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$

$\hat{A}, \hat{B}$ har tidsberoende statistiska förväntansvärden.

$$\begin{cases} \bar{A}(t) = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle \\ \bar{B}(t) = \langle \psi(t) | \hat{B} | \psi(t) \rangle \end{cases} \quad (1)$$

så räknar vi ut förväntansvärdet.

vi antar att dessa uppfyller ekvationer

$$\begin{cases} \frac{d\bar{A}}{dt} = w\bar{B} \\ \frac{d\bar{B}}{dt} = -w\bar{A} \end{cases} \quad (2)$$

vi förväntar att A, B blir $\bar{A}, \bar{B}$ så kan byta!

men Ehrenfests teorem säger att

inget explicit tidsberoende i $\hat{A}, \hat{B}$

$$\begin{cases} -i\hbar \frac{d\bar{A}}{dt} = \langle \psi(t) | [\hat{H}, \hat{A}] + \cancel{\frac{\partial \hat{A}}{\partial t}} | \psi(t) \rangle \\ -i\hbar \frac{d\bar{B}}{dt} = \langle \psi(t) | [\hat{H}, \hat{B}] + \cancel{\frac{\partial \hat{B}}{\partial t}} | \psi(t) \rangle \end{cases} \quad (3)$$

kombinera (1) (2) (3)

om detta ska fungera ober. av $\psi(t)$ måste vi ha:

$$\begin{cases} [\hat{H}, \hat{A}] = -i\hbar w \hat{B} \\ [\hat{H}, \hat{B}] = i\hbar w \hat{A} \end{cases}$$

krantversionen av det innan.

listigt resonemang:

inför (de icke Hermiteska) operatorerna

$$\begin{cases} \hat{\alpha} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\hat{A} + i\hat{B}) \\ \hat{\alpha}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\hat{A} - i\hat{B}) \end{cases}$$

jämför:

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(A + iB)$$

$$\alpha^* = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(A - iB)$$

komplex klassisk storhet alltså.

man finner då att

$$[\hat{H}, \hat{\alpha}] = -\hbar\omega\hat{\alpha}$$

$$[\hat{H}, \hat{\alpha}^{\dagger}] = \hbar\omega\hat{\alpha}^{\dagger}$$

de handlar enbart om sig själva då!

antag att $\psi \in \mathcal{H}$ är ett energiegentillstånd med egenvärde E:

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

betrakta nu tillståndet

$\hat{\alpha}|\psi\rangle$, detta är också ett energitillstånd!

$$\hat{H}\hat{\alpha}|\psi\rangle = (\underbrace{\hat{H}\hat{\alpha} - \hat{\alpha}\hat{H}}_{\text{kommutatorn } \hat{H},\hat{\alpha}\ [\hat{H},\hat{\alpha}]} + \hat{\alpha}\hat{H})|\psi\rangle$$

$$= (-\hbar\omega\hat{\alpha} + \hat{\alpha}\hat{H}|\psi\rangle$$

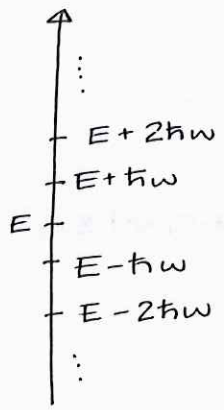
$$= (-\hbar\omega\hat{\alpha} + \hat{\alpha}E)|\psi\rangle$$

$$= \underbrace{(E - \hbar\omega)}_{\text{egenvärde}}\hat{\alpha}|\psi\rangle$$

pss:

$$\hat{H}\hat{\alpha}^{\dagger}|\psi\rangle = \ldots\ldots = \underbrace{(E + \hbar\omega)}_{\text{egenvärde}}\hat{\alpha}^{\dagger}|\psi\rangle$$

energiegenvärden



oändligt höga och låga energier ?

rörelse med minst energi : stilla !

klassiskt: energin kan ta godtyckligt värde $E \geq 0$ (likhet för system i vila)

Räddningen:

antag att då vi verkar med $\hat{\alpha}$ många gånger så kommer vi såsmåningom till ett tillstånd (normerat) $|\psi_0\rangle$ som är sådant att $\hat{\alpha}|\psi_0\rangle = 0$ (inte ett normerbart tillstånd)

dvs. begränsad nedåt men ej uppåt, men det är ok !

VÅRT OÄNDLIGT-DIMENSIONELLA HILBERTRUM $\mathcal{H}$:

GRUNDTILLSTÅNDET

ON-bas $\psi_0, \psi_1, \psi_2, \ldots$ $\quad \langle \psi_n, \psi_{n'} \rangle = \delta_{nn'}$

av energiegentillstånd $\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$

med egenvärden $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ $\quad$ ibland $E_n = \hbar\omega n$

konventionellt vald nollpkt energi

skapelse och förintelseoperatorer verkar enligt

$\hat{\alpha}^{+}|\psi_n\rangle = \sqrt{n+1}\,|\psi_{n+1}\rangle$ flyttar upp 1 steg!

$\hat{\alpha}|\psi_n\rangle = \sqrt{n}\,|\psi_{n-1}\rangle$ $\quad$ med $\hat{\alpha}|\psi_0\rangle = 0$ dvs. som vi ville !

ett godtyckligt tillstånd $|\psi\rangle$ i $\mathcal{H}$ kan skrivas

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |\psi_n\rangle$$

tämligen godtyckliga komplexa koeff.

vi måste ha ändlig norm :

$$\langle \psi|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{n'=0}^{\infty} \bar{c}_n c_{n'} \langle \psi_n|\psi_{n'}\rangle$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 < \infty$$

det mesta fungerar som i det ändlig-dimensionella fallet..

funktionalanalys handlar mycket om sådana här rum.

det är lite lurigt, kan finnas motsägelser!

uttryck $\hat{H}$ med hjälp av $\hat{\alpha}$ och $\hat{\alpha}^{+}$:

$$\hat{H} = \hbar\omega(\underbrace{\alpha^{+}\alpha}_{\text{antals-operatorn}} + \tfrac{1}{2}) = \hbar\omega(\hat{N} + \tfrac{1}{2})$$

nollpktsenergin

antalsoperatorn

använd $\hat{\alpha} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\hat{A} + i\hat{B})$

$\hat{N}|\psi_n\rangle = n|\psi_n\rangle$

$$= \frac{\omega}{2}(\hat{A}^2 + \hat{B}^2)$$

jämför med "klassiskt" uttryck för energi

FOTONER.

varje svängningsmod i det elektromagnetiska fältet är en harmonisk oscillator.

t.ex ljus med vågvektor $\frac{2\pi}{\lambda}\hat{n}$ och vinkelhastighet ω.

i utbredningsriktningen

våglängd

$$\omega = \frac{2\pi \cdot c}{\lambda}$$

ljusfarten

tillståndet $|\psi_n\rangle$ med energi

$E_n = \hbar\omega n$ (nollpktsenergi = 0)

svarar mot n stycken fotoner som vardera har energin $E_{foton} = \hbar\omega$.

endast krantiserade energinivåer.

KOHERENTA TILLSTÅND.

åter till den klassiska fysiken.
tillståndet i ett visst ögonblick beskrivs av A och B.

antag att dessa har vissa givna värden.
hur ser motsvarande kvanttillstånd ut?
inför storheten $\mu = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(A + iB)$ (tidigare α)
och kvanttillståndet

grund tillståndet.

$$\psi^{\mu}_{\text{koherent}} \equiv \exp\left(-\tfrac{1}{2}|\mu|^2\right) \underbrace{\exp(\mu \hat{\alpha}^{+})}_{\text{defineras genom serieutveckling}} |\psi_0\rangle$$

man finner följande trevliga egenskaper:

$$\langle \psi^{\mu}_{\text{koherent}} | \psi^{\mu}_{\text{koherent}} \rangle = 1 \quad \text{(normerad)}$$

$$\hat{\alpha} |\psi^{\mu}_{\text{koherent}}\rangle = \mu |\psi^{\mu}_{\text{koherent}}\rangle$$

icke Hermitesk (→ har alltid reella egenvärden)

komplext egenvärde

hur fungerar tidsutveckling enligt SE?

jo, $\psi(t) = \underbrace{e^{i\phi(t)}}_{\text{fys. betydelselös fasfaktor}} \cdot \psi^{\mu(t)}_{\text{koherent}}$ iom A, B ändras med t, μ gör't!

(vi ska dock räkna ut den!)

hur ser tidsberoendet $\mu(t)$ ut?

precis som i klassisk fysik:

$\mu(t) = \mu(0) \cdot e^{-i\omega t}$

godtyckl. beg. värde

jämför med klassiska rörelse ekv.

$$\boxed{\frac{d\mu}{dt}} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\frac{dA}{dt} + i\frac{dB}{dt}\right)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\omega B - i\omega A)$$

$$= -\frac{i\omega}{\sqrt{2\hbar}}(A + iB)$$

$$= \boxed{-i\omega\mu}$$

LÖS SEN PÅ!!

energin diskret!
mest annorlunda!

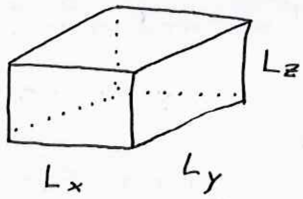
110926. kap 11: TRANSLATIONER.

system med tillståndsrum $\mathcal{H}$.
vad händer vid rumslig translation
$\mathbb{r} \longrightarrow \mathbb{r} + \Delta\mathbb{r}$?
förskjutning

enligt Wigner & Noether bör det finnas en unitär operator $\hat{U}_{\Delta\mathbb{r}} : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$ av formen
$\hat{U}_{\Delta\mathbb{r}} = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\Delta\mathbb{r}\cdot\hat{\mathbb{P}}\right)$ där $\hat{\mathbb{P}} = \hat{P}_x\,\mathbb{i} + \hat{P}_y\,\mathbb{j} + \hat{P}_z\,\mathbb{k}$

operatorer svarande mot rörelsemängd
$\mathbb{P} = P_x\,\mathbb{i} + P_y\,\mathbb{j} + P_z\,\mathbb{k}$

för enkelhets skull:
antag att det "vanliga" rummet är en låda med kantlängder L_x, L_y, L_z och periodiska randvillkor



det betyder:
en translation med parameter av formen

$$\Delta\mathbb{r} = n_x L_x\,\mathbb{i} + n_y L_y\,\mathbb{j} + n_z L_z\,\mathbb{k} \quad (☆) \quad n_x, n_y, n_z \in \mathbb{Z}$$

är trivial så att motsvarande $\hat{U}_{\Delta\mathbb{r}} = \mathbb{1}$
enhetsoperatorn

antag att $\hat{P}_x, \hat{P}_y, \hat{P}_z$ kommuterar med varandra, $[\hat{P}_x, \hat{P}_y] = \hat{P}_x\hat{P}_y - \hat{P}_y\hat{P}_x = 0$ etc.
låt ψ vara ett gemensamt egentillstånd till dem med egenvärden P_x, P_y, P_z.
(kan diagonaliseras)
då har vi:

$$\hat{U}_{\Delta\mathbb{r}}\psi = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\Delta\mathbb{r}\cdot\hat{\mathbb{P}}\right)\psi = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\Delta\mathbb{r}\cdot\mathbb{P}\right)\psi$$

dvs är

⇓

$$\mathbb{1}\cdot\psi = \psi \quad \text{för } \Delta\mathbb{r} \text{ av formen } (☆) \qquad e^{2\pi i n} = 1 \quad n \in \mathbb{Z}$$

härav följer ett kvantiseringsvillkor på de tillåtna värdena på rörelsemängden:

$$\frac{1}{\hbar}\Delta\mathbb{r}\cdot\mathbb{P} \in 2\pi\mathbb{Z} \quad \text{dvs} \quad P_x = 2\pi\hbar\frac{l_x}{L_x} \quad \text{etc.} \quad l_x \in \mathbb{Z}$$

P_x en heltalsmultipel av $\frac{2\pi\hbar}{L_x}$

P_y — " — $\frac{2\pi\hbar}{L_y}$

P_z — " — $\frac{2\pi\hbar}{L_z}$

större låda → mindre steg mellan multiplerna.
alltså kvantiserade rörelsemängder i kvant.

ytterligare ett förenklande antagande:

för varje tillåtet $\mathbb{P} = 2\pi\hbar\left(\frac{l_x}{L_x}\mathbb{i} + \frac{l_y}{L_y}\mathbb{j} + \frac{l_z}{L_z}\mathbb{k}\right)$
finns bara 1 kvanttillstånd

$\varphi_{\mathbb{P}}$ i $\mathcal{H}$, som väljes normerade. $l_x, l_y, l_z \in \mathbb{Z}$

dessa utgör en ON-bas för $\mathcal{H}$ dvs

ett godtyckligt element i $\mathcal{H}$ $\langle \varphi_{\mathbb{P}'} | \varphi_{\mathbb{P}} \rangle = \delta_{\mathbb{P}'\mathbb{P}}$
kan alltså skrivas:

$$\varphi = \sum_{\mathbb{P}} c_{\mathbb{P}} \varphi_{\mathbb{P}}$$

↑ godtyckliga koeff

dvs. summera över de tillåtna $\mathbb{P}$'na!

givet ett sådant element $\varphi \in \mathcal{H}$ kan vi definiera en komplexvärd funktion i det "vanliga" (periodiska) rummet.

$$\varphi : \mathbb{R}^3 \longrightarrow \mathbb{C}$$

$\varphi(\mathbb{r}) = \varphi(\mathbb{r} + \Delta\mathbb{r})$ för alla $\Delta\mathbb{r}$ av formen (☆)

vi har

$$\varphi(\mathbb{r}) = \sum_{\mathbb{P}} c_{\mathbb{P}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbb{P}\cdot\mathbb{r}\right)$$

(periodisk fkt'n av x, y, z)

kolla själv att det är en periodisk fkt'n

i själva verket kan vi identifiera kvantfysikaliska tillståndsrummet

$$\mathcal{H} = \left\{ \begin{array}{l} \text{mängden av komplexvärda periodiska fkt'r} \\ \varphi \text{ som är } L^2 \end{array} \right\}$$

$$\langle \psi | \psi \rangle \equiv \int d^3 r \, \overline{\psi(r)} \, \psi(r) = \int d^3 r \, | \psi(r) |^2 < \infty$$

en låda

skalärprodukt blir precis denna L^2 normen.

detta är ok, $VL = HL = \sum_{p} |c_p|^2$

koeff

låt $\psi = \sum_{p} c_p \psi_p$ vara ett godtyckligt element i $\mathcal{H}$.

hur verkar operatorerna $\hat{p} = \hat{p}_x i + \hat{p}_y j + \hat{p}_z k$ på detta?

$$\hat{p}_x \psi = \sum_{p} c_p \hat{p}_x \psi_p = \sum_{p} c_p p_x \psi_p \quad \text{osv för } y, z.$$

koeff.

vad svarar tillståndet $\hat{p}_x \psi$ mot för komplexvärd funktion?

funktionen $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi$ osv. för y, z

rörelsemängdsoperatorn $\hat{p}$ på $\mathcal{H}$ svarar alltså mot $-i\hbar \nabla$ (nabla) verkande på vågfunktioner.

uppg 11.1 visa att Hermitepolynomen enl. (11.46) är precis de fkt'r som dyker upp i (11.45) (11.44)

egentillstånd ψ_p till rörelsemängd $\hat{p}$,

$\hat{p}_x \psi_p = p_x \psi_p$, ... osv.

svarar mot vågfunktioner $\psi_p(r) = e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot r}$

som är planvågor.

partikel med rörelsemängd $p \longleftrightarrow$ planvåg med våglängd $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{|p|}$ dvs. t.ex e^- kan också ses som våg/partikel

VÅG-PARTIKEL DUALITET.

OÄNDLIG VOLYM.

låt $L_x, L_y, L_z \longrightarrow \infty$

tillåtna rörelsemängder $\mathbb{P} = 2\pi\hbar \left(\frac{l_x}{L_x} \mathbb{i} + \frac{l_y}{L_y} \mathbb{j} + \frac{l_z}{L_z} \mathbb{k} \right)$ bildar då ett kontinuum, alla $\mathbb{P}$ tillåtna.

$\sum_{\mathbb{P}}$ övergår i $\int\limits_{\text{alla tänkbara } \mathbb{P}} d^3\mathbb{P}$

fortfarande har vi $\hat{\mathbb{P}} \longleftrightarrow -i\hbar\nabla$ verkande på vågfkt'n ψ

$\hat{\mathbb{r}} \longleftrightarrow$ multiplikation m. komponenter av $\mathbb{r}$

genom derivering

$$\begin{cases} (\hat{\mathbb{P}}\psi)(\mathbb{r}) = (-i\hbar \underline{\underline{\nabla\psi}})(\mathbb{r}) \\ (\hat{\mathbb{r}}\psi)(\mathbb{r}) = \underline{\underline{\mathbb{r}}}\,\psi(\mathbb{r}) \end{cases}$$

mult. alltså.

vad är kommutatorn mellan $\hat{\mathbb{P}}$ och $\hat{\mathbb{r}}$?

$$[\hat{p}_x, \hat{r}_x]\psi = (\hat{p}_x\hat{r}_x - \hat{r}_x\hat{p}_x)\psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(x\psi) - x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi\right)$$

testar

$$= -i\hbar \cdot 1 \cdot \psi$$

alltså är $[\hat{p}_x, \hat{r}_x] = -i\hbar\mathbb{1}$ KANONISKA KOMMUTERINGS-RELATIONER.

däremot har vi t.ex.

$[\hat{p}_x, \hat{r}_y] = 0$ och naturligtvis

$[\hat{p}_x, \hat{p}_y] = 0 \quad [\hat{r}_x, \hat{r}_y] = 0$ etc.

x-komponent av $\hat{\mathbb{P}}$ och av $\hat{\mathbb{r}}$ kommuterar EJ med varann.

DVS.

de kan ej diagonaliseras samtidigt.

DVS.

det finns inga tillstånd som både har välbestämt läge <u>och</u> rörelsemängd.

Heisenbergs osäkerhetsrelation:

se bok för def.

låt Δx = osäkerhet i x-koordinat för partikel
Δp_x = — " — x-komponent för dess rörelsemängd

då gäller att

$$\Delta x \, \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad \text{för alla tillstånd } \psi$$

jmf Fourieranalys,

smalt blir brett i F-rum.

mäta läge noggrannt
ex. m. ljus förstör
rörelsemängdsmätning

även $\Delta E \, \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$

osäkerhet i energibestämn. för tillstånd

tid som mätning får ta

STONE - VON NEUMANN TEOREMET.

låt $\hat{A}$ och $\hat{B}$ vara två operatorer som uppfyller kanoniska kommuteringsrelationer:

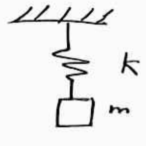
$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hbar \mathbb{1}$ (och naturligtvis $[\hat{A}, \hat{A}] = 0$, $[\hat{B}, \hat{B}] = 0$)

teoremet säger att tillståndsrummet $\mathcal{H}$ då alltid kan tänkas som rummet av funktioner av en variabel A (elr alt B).

operatorerna $\hat{A}$ och $\hat{B}$ verkar då genom derivering respektive multiplikation (elr vice versa). alternativen är relaterade genom Fouriertransformation.

ex. $\hat{A} = \hat{p}_x$, $\hat{B} = \hat{r}_x$ verkar på $\psi(\mathbf{r})$

ex. $\hat{A}$ och $\hat{B}$ är operatorerna för en harmonisk oscillator



vågfunktioner $\psi(A)$ ← klassisk

$$\begin{cases} \hat{A} \longleftrightarrow \text{multiplikation med } A \\ \hat{B} \longleftrightarrow -i\hbar \dfrac{\partial}{\partial A} \end{cases}$$

vi har även operatorerna

$$\hat{\alpha} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\hat{A} + i\hat{B})$$

så att $\hat{\alpha}\psi = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(A + \hbar\frac{\partial}{\partial A}\right)\psi$ ← fkt'n av A

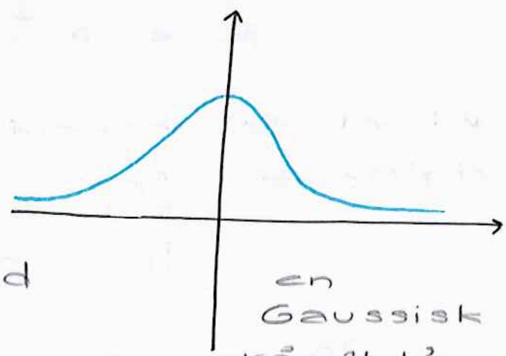
$$\hat{\alpha}^{+} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\hat{A} - i\hat{B})$$

vad svarar grundtillståndet ψ_0 för den harmoniska oscillatorn mot för vågfkt'n $\psi_0(A)$?

jo, $0 = \hat{\alpha}\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(A + \hbar\frac{\partial}{\partial A}\right)\psi_0(A)$

ger oss då

$$\psi_0(A) \sim e^{-\frac{1}{2\hbar}A^2}$$



en Gaussisk vågfkt'n

(vi)

ni ska undersöka vågfkt'r $\psi_n(A)$ svarande mot tillstånd ψ_n, fås genom verka m.

$\sim (\hat{\alpha}^{+})^n \psi_0$ normera också.

110927

lite "repetition":

en spinnlös partikel rör sig i det "vanliga" rummet. tillståndsrum $\mathcal{H}$ varpå verkar Hermiteska operatorer $\hat{\mathbb{r}}$ och $\hat{\mathbb{P}}$

läge   rörelsemängd.

vi kan identifiera:

$\mathcal{H} = \{L^2$ funktioner $\psi(\mathbb{r})$ av läget$\}$

$\hat{\mathbb{r}} \longleftrightarrow$ mult. m. $\hat{\mathbb{r}}$

$\hat{\mathbb{P}} \longleftrightarrow -i\hbar\nabla$ ← gradient i $\mathbb{r}$-rummet

eller alternativt:

Fouriertransform

$\mathcal{H} = \{L^2$ funktioner $\tilde{\varphi}(\mathbb{P})$ av rörelsemängden$\}$

$\hat{\mathbb{r}} \longleftrightarrow i\hbar\nabla$ ← gradient i $\mathbb{P}$-rummet

$\hat{\mathbb{P}} \longleftrightarrow$ mult. m $\mathbb{P}$

i vilket fall har vi kanoniska kommuteringsrelationer $[\hat{r}_x, \hat{p}_x] = i\hbar\mathbb{1}$

$[\hat{r}_x, \hat{p}_y] = 0$ etc.

kap 12: PARTIKELRÖRELSE i POTENTIALFÄLT.

klassiskt:

en partikel med massa m rör sig under inflytande av en konservativ kraft som beskrivs av en potentiell energi $V(\mathbb{r})$

tidsinvarians ⇒ bevarad (total mekanisk) energi

$$E = \frac{1}{2m}\mathbb{P}\cdot\mathbb{P} + V(\mathbb{r})$$

för ett givet värde på E så kan partikeln bara befinna sig i områden i rummet där $V(\mathbb{r}) < E$ (eftersom kinetisk energi ≥ 0)

Krantfysik :

tillståndsrum $\mathcal{H}$ enligt "repetitionen"
på detta verkar operatorer $\hat{\mathbb{r}}$, $\hat{\mathbb{P}}$ och
även Hamiltonoperatorn

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{\mathbb{P}} \cdot \overset{\text{låt verka!}}{\hat{\mathbb{P}}} + V(\hat{\mathbb{r}})$$ (inspirerad av klassisk fysik)

1a tolkn. av $\mathcal{H}$ dvs som fkt'n av läget

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbb{r})$$

Laplace $\nabla^2 = \nabla \cdot \nabla$ — dvs. mult sen

Schrödingerekvationen $i\hbar \dfrac{\partial \psi(\mathbb{r},t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(\mathbb{r},t)$
lyder alltså:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right)}_{\hat{H} \text{ alltså.}} \psi$$

en intressant tolkning av vågfkt'n ψ:

$\underbrace{|\psi(\mathbb{r},t)|^2}_{\rho \text{ sannolikhetstäthet}} \underset{dxdydz \text{ alltså}}{d^3\mathbb{r}}$ = sannolikheten att påträffa partikeln inom volymen $d^3\mathbb{r}$ i närheten av $\mathbb{r}$ (vid tiden t)

OBS att ρ uppfyller en kontinuitetsekvation
samma här

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbb{j} = 0$$ visa själv att det följer från SE!

$\mathbb{j}$ sannolikhetsström

där $\mathbb{j} = -\dfrac{i\hbar}{2m}\left(\bar{\psi}\nabla\psi - \psi\nabla\bar{\psi}\right)$ — komplexkonjugatet.

$\boxed{\text{den stora frågan:}}$ givet potentialen V
och alltså Hamiltonoperatorn $\hat{H}$,
vad är dess spektrum (ungefär dess egenvärden)
dvs. vad är de tänkbara resultaten
av en energimätning?

vi söker alltså alla reella tal E (energiegenvärden)
sådana att det finns ett $\psi \in \mathcal{H}$ för vilket
$\hat{H}\psi = E\psi$ (ekvivalent med $(\hat{H} - E\hat{\mathbb{1}})\psi = 0$)

något mer allmän def. av spektrumvärde E (behöver ej vara egenvärde):
$\hat{H} - E\hat{\mathbb{1}}$ är inte inverterbar (med begränsad invers)
se kurs i funktionalanalys.

egenvärdesproblemet är alltså

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right)\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

måste vara L^2 s.a den tillhör $\mathcal{H}$

svårlöst partiell diff.ekv. för ψ även om man råkar känna E.

mycket bättre i en rumslig dimension x där vi får en ODE:

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\psi(x) = E\psi(x)$$

nästa inlämning: tisdag morgon

antag att E är känt, denna (linjära) ODE har då två linj. ober. lösningar

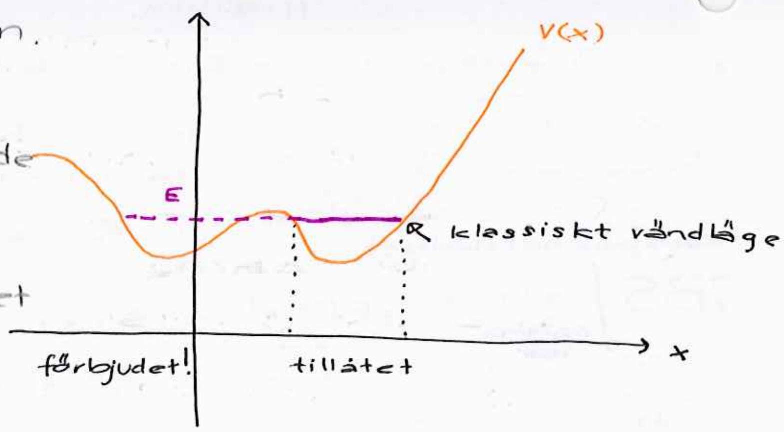
antag vidare att $V(x) \approx V \approx$ konstant i ett område

två olika områden:

$V < E$: klassiskt tillåtet

två linjärt oberoende lösn. är $e^{\pm i\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)}\,x}$

de harmoniskt oscillerande funktionerna.



$V > E$: klassiskt förbjudet

exponentiellt växande elr avtagande lösningar

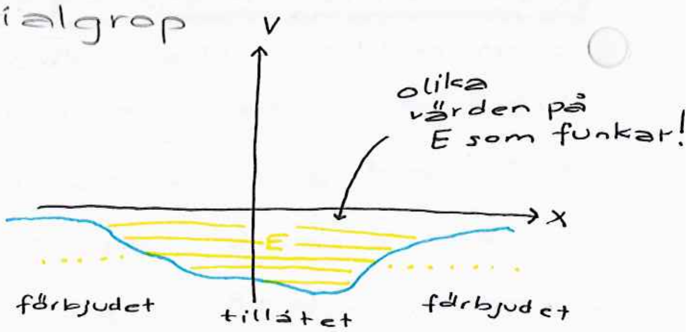
$$e^{\pm\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V-E)}\,x}$$

TVÅ TYPISKA PROBLEMSTÄLLNINGAR.

I. bundna tillstånd i potentialgrop

antag $V(x) \longrightarrow 0 \quad x \to \pm\infty$

vi är intresserade av $E < 0$. för ett sådant E, kan vi konstruera en bra lösning till ODE?



(klassiskt sett)

i vänstra området

$\psi(x)$ = linjär kombination av lösning som växer exponentiell åt höger kan ej vara L^2!!

och avtar —11— höger endast denna är ok!! med multipler

denna unika lösning blir en linjärkomb. av de två oscillerande lösningarna i mellanområdet.
i det högra området blir det en linj. komb.
av exp. väx HUH!
exp. avt PUH!

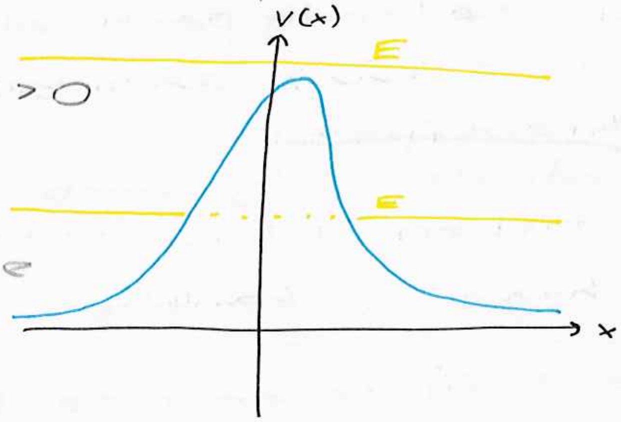
i allmänhet ingår båda termerna, ☹

MEN för vissa speciella värden på $E < 0$ så blir lösningen L^2 även till höger.
dessa är Hamiltonoperatorns energi-egenvärden. energin är alltså kvantiserad precis som för den harmoniska oscillatorn.

$E = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ $n = 0, 1, 2, \ldots$

II. spridning mot potentialbarriär

$V(x) \longrightarrow 0 \quad x \longrightarrow \pm\infty$



vi är intresserade av $E > 0$
långt till vänster eller höger är lösningarna linjärkomb. av oscillerande fkt'r, $e^{\pm i\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)}\,x}$

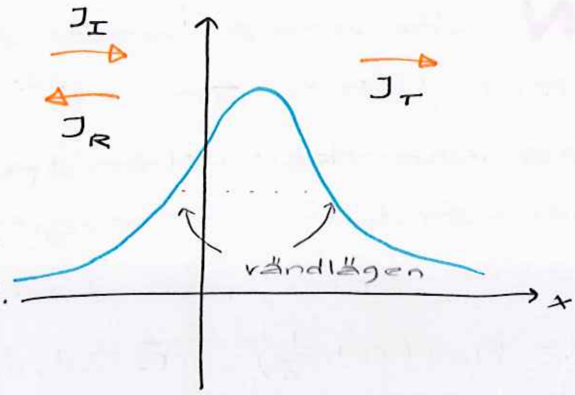
en sån är inte L_2 !

ty $|\ldots|^2 = 1$ och sen integrera långt $\to \infty$
dvs $\int_{-\infty}^{\infty} dx\, 1 = \infty$

antingen gör vi vågpaket med lite spridning i E som är L^2
eller så tolkar vi det som ett kont. flöde av partiklar.
i vilket fall svarar de två lösningarna $e^{\pm\sqrt{}\,x}$ mot höger resp. vänstergående sannolikhetsström.

a) E > barriärhöjden. klassiskt skulle en från vänster infallande partikel med 100% sannolikhet passera barriären.
kvantfysik: rent högergående våg i högra området blir linjär kombination av höger och vänstergående vågor i vänstra området

en infallande sannolikhets ström J_I delas upp i en reflekterad ström J_R och en transmitterad ström J_T.



$J_I = J_T + J_R$

b) klassiskt så skulle en från vänster infallande partikel vända där V = E med 100% sannolikhet.
kvantfysik:
vänster: linj. komb. av vänster & högergående vågor
mitten: –"– exp. väx & avt
höger: kanske rent högergående våg.
det finns en viss liten sannolikhet för TUNNLING genom barriären

$$\sim \exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int_{\text{vänd}}^{\text{vänd}} dx \sqrt{2m(V(x)+E)}\right)$$

kap 13: CENTRALRÖRELSE. 110928

partikel m. massa m i pot. $V(\mathbf{r})$.

lös egenvärdesproblemet $\hat{H}\psi = E\psi$

där $\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{\mathbf{p}}\cdot\hat{\mathbf{p}} + V(\hat{\mathbf{r}})$

$= -\frac{\hbar}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})$ verkande på vågfunktion $\psi(\mathbf{r})$

SVÅRT! i mer än 1 dimension.

vi inskränker oss idag till centralkrafts-potentialen $V(\mathbf{r}) = V(r)$ där $|\mathbf{r}| = r$ = avstånd till origo

<u>klassisk fysik</u>:

förutom energi E är nu även rörelsemängdsmomentet m.a.p. origo bevarat.

$\mathbb{L} = \mathbf{r} \times \mathbb{P}$

visa själv att $\dot{\mathbb{L}} = 0$ när rörelseekv. är uppfyllda.

skriv om uttrycket för energi

$E = \frac{1}{2m}\mathbb{P}\cdot\mathbb{P} + V(\mathbf{r})$ i termer av $\mathbb{L}$ och $P_r = \frac{1}{r}\mathbf{r}\cdot\mathbb{P}$

$\dot{\mathbb{L}} = 0$ dvs $\mathbb{L}$ konstant

(rörelsemängd's radiella komponent)

man finner att

$$E = \frac{1}{2m}P_r^2 + \underbrace{\frac{L^2}{2m}\frac{1}{r^2} + V(r)}_{V_{effektiv}(r)}$$

$L = |\mathbb{L}|$

beskriver energi (för ett givet värde på $\mathbb{L}$) för partikel med massa m i 1 dimension (☆) med koordinat r och potential $V_{eff}(r)$.

mycket lättare än i 3 dimensioner!

<u>krantfysik</u>:

$\langle\psi|\psi'\rangle = \int d^3\mathbf{r}\,\bar{\psi}(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})$

tillståndsrum $\mathcal{H} = \{L^2\text{-fkt'r } \psi(\mathbf{r}) \text{ av läget } \mathbf{r}\}$

använd "separation av variabler"

$\psi(\mathbf{r})$ kan skrivas som (Σ av) produkter av radiella fkt'r $R(r)$ och vinkelberoende fkt'r $Y(\theta,\phi) = Y(\mathbf{n})$ $\mathbf{n} = \frac{1}{r}\mathbf{r}$ enhetsvektor i $\mathbf{r}$'s riktning

$\psi(\mathbf{r}) = \sum_i R_i(r)Y_i(\theta,\phi)$

mer abstrakt: $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{radiell} \otimes \mathcal{H}_{vinkel}$

L^2-fkt'r av r L^2-fkt'r av θ, ϕ

$$d^3\mathbb{r} = dx\,dy\,dz = r^2 dr \sin\theta\, d\theta\, d\phi$$

$$\langle R|R'\rangle = \int dr\, r^2\, \overline{R(r)}R(r) \qquad \langle Y|Y'\rangle = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta\, \overline{Y(\theta,\phi)}\, Y(\theta,\phi)$$

Laplace operatorn separerar i sfäriska koord.

$$\underbrace{\nabla^2}_{\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}}(R(r)Y(\theta,\phi)) = (\nabla^2 R(r))\,Y(\theta,\phi) + R(r)(\nabla^2 Y(\theta,\phi)) \quad (13.13)$$

där $\nabla^2 R(r) = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r}\right)$

$$\nabla^2 Y(\theta,\phi) = \frac{1}{r^2}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right)$$

Hamiltonoperatorn kan nu skrivas (verkande på $\mathcal{H}_{radiell} \otimes \mathcal{H}_{vinkel}$)

$$\boxed{\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}_r^{\,2} \otimes \mathbb{1} + \frac{1}{2m}\frac{1}{\hat{r}^2} \otimes \hat{\mathbb{L}}^2 + V(\hat{r}) \otimes \mathbb{1}}$$

där $\hat{p}_r^{\,2} = -\frac{\hbar^2}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)$

$$\hat{\mathbb{L}}^2 = -\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)$$

nästa vecka:

vi bestämmer alla egenfkt'r och egenvärden till $\hat{\mathbb{L}}^2$:

$$\hat{\mathbb{L}}^2 Y(\theta,\phi) = \underbrace{L^2}_{\text{egenvärde}} \underbrace{Y(\theta,\phi)}_{\text{egenfkt'n}}$$

givet ett sådant egenvärde L^2, låt (egenvärdet i fråga)

$$\hat{H}_{radiell} = \frac{1}{2m}\hat{p}_r^{\,2} + \underbrace{V(r) + \frac{L^2}{2m}\frac{1}{r^2}}_{V_{eff}(r)}$$

motsvarande egenfkt'n $Y(\theta,\phi)$.

vi har nu att

$$\hat{H}(\underbrace{R(r)}_{\text{godtycklig fkt'n}} \otimes \underbrace{Y(\theta,\phi)}_{\text{egenfkt'n}}) = (\hat{H}_{radiell}\, R(r)) \otimes Y(\theta,\phi)$$

vi kan alltså lösa egenvärdesproblemet för $\hat{H}$ (i 3 dim) genom att lösa det för $\hat{H}_{radiell}$ (i 1 dim!)

skriv $R(r) = r^{-1}\tilde{R}(r)$

skalärprodukten blir "den vanliga"

$$\langle R | R' \rangle = \int dr\, r^2\, \overline{R(r)} R'(r) = \int dr\, \overline{\tilde{R}(r)}\, \tilde{R}'(r)$$

OCH:

$$\hat{H}_{radiell} R(r) = \ldots = r^{-1}\underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2} + V_{eff}(r)\right)}_{\text{ser precis ut som Hamilton-operator för }(\star)}\tilde{R}(r)$$

kapitel $11\frac{1}{2}$: OÄNDLIG VOLYM.

- "oändlig volym är något mycket stort" Sara Nilsson

en (spinnlös) partikel (massa m) rör sig i det "vanliga" rummet $\mathbb{R}^3$.

tillståndsrum $\mathcal{H}$ varpå verkar operatorerna

$$\hat{\mathbf{r}} = \hat{r}_x \mathbf{i} + \hat{r}_y \mathbf{j} + \hat{r}_z \mathbf{k} \qquad [\hat{r}_x, \hat{r}_y] = [\hat{p}_x, \hat{p}_y] = 0 \text{ etc.}$$

$$\hat{\mathbf{p}} = \hat{p}_x \mathbf{i} + \hat{p}_y \mathbf{j} + \hat{p}_z \mathbf{k} \qquad [\hat{r}_x, \hat{p}_y] = 0$$

$$[\hat{r}_x, \hat{p}_x] = i\hbar \mathbb{1}$$

2 konkreta realiseringar:

$$\mathcal{H} = \{L^2\text{-fkt'r } \psi(\mathbf{r})\} \quad \begin{cases} \hat{\mathbf{r}}\psi(\mathbf{r}) = \mathbf{r}\psi(\mathbf{r}) \\ \hat{\mathbf{p}}\psi(\mathbf{r}) = -i\hbar\nabla\psi(\mathbf{r}) \end{cases}$$

eller $\updownarrow$ FOURIER-TRANSFORM

$$\mathcal{H} = \{L^2\text{-fkt'r } \tilde{\psi}(\mathbf{p})\} \quad \begin{cases} \hat{\mathbf{r}}\tilde{\psi}(\mathbf{p}) = +i\hbar\nabla\tilde{\psi}(\mathbf{p}) \\ \hat{\mathbf{p}}\tilde{\psi}(\mathbf{p}) = \mathbf{p}\tilde{\psi}(\mathbf{p}) \end{cases}$$

vad är dimension av $\mathcal{H}$?
kan vi hitta trevliga ON-baser?
kan vi bestämma spektrum (egenvärden) till $\hat{\mathbf{r}}$ och $\hat{\mathbf{p}}$?

svaren är lite subtila.

$\hat{\mathbf{r}}$ (el $\hat{\mathbf{p}}$) har inga riktiga egenvärden.

en egenfkt'n $\psi(\mathbf{r})$ till $\hat{\mathbf{r}}$ med egenvärden $\mathbf{r}_0$ borde se ut som $\psi(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$

ty $\hat{\mathbf{r}}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0) = \mathbf{r}\,\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)$ bara skilt från noll då $\mathbf{r} = \mathbf{r}_0$!

$= \mathbf{r}_0\, \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)$ ← egenfkt'n

"egenvärde"

men $\delta(\mathbb{r}-\mathbb{r}_0)$ är inte L^2! kvadrera blir ju enorm

dvs. alltså inte element i $\mathcal{H}$. $\int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbb{r}\, |\delta(\mathbb{r}-\mathbb{r}_0)|^2 = \infty$

försök istället göra egenfkt'n $\psi(\mathbb{r})$ till

$\hat{\mathbb{P}}$ med egenvärde $\mathbb{P}_0$.

svaret borde vara $\psi(\mathbb{r}) = e^{\frac{i}{\hbar}\mathbb{P}_0\cdot\mathbb{r}}$ ty

$$\hat{\mathbb{P}}\, e^{\frac{i}{\hbar}\mathbb{P}_0\cdot\mathbb{r}} = -i\hbar\nabla e^{\frac{i}{\hbar}\mathbb{P}_0\cdot\mathbb{r}}$$

$$= \mathbb{P}_0\, e^{\frac{i}{\hbar}\mathbb{P}_0\cdot\mathbb{r}}$$

"egenvärde" egenfkt'n

inte heller L^2 iom $\int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbb{r}\, \left|e^{\frac{i}{\hbar}\mathbb{P}_0\cdot\mathbb{r}}\right|^2 (=\infty)$ divergerar

spektrum av $\hat{\mathbb{r}}$ = { "tänkbara egenvärden" }

= { alla $\mathbb{r}_0 \in \mathbb{R}^3$ }

$\hat{\mathbb{P}}$ = { alla $\mathbb{P}_0 \in \mathbb{R}^3$ }

kontinuerlig spektrum

diskret spektrum = { riktiga egenvärden }

(tomt för $\hat{\mathbb{r}}$ eller $\hat{\mathbb{P}}$)

VARNING:

ofta ser man tillstånd som betecknas $|\mathbb{r}_0\rangle$ eller $|\mathbb{P}_0\rangle$ svarande mot vågfkt'r $\psi(\mathbb{r}) = \delta(\mathbb{r}-\mathbb{r}_0)$ respektive $\psi(\mathbb{r}) = e^{\frac{i}{\hbar}\mathbb{P}_0\cdot\mathbb{r}}$.

inte riktigt bra tillstånd iom ej bra vågfkt'r!

glöm ej att de egentligen inte finns i $\mathcal{H}$.

$\psi(\mathbb{r}) = e^{\frac{i}{\hbar}\mathbb{P}_0\cdot\mathbb{r}}$ ← planvåg svarande mot partikel m. rörelsemängd $\mathbb{P}_0$.

kanske bättre m. vågpaket / kont. flöde av partiklar

dessa utgör inte ON-baser, men är delta-funktionsnormerade:

$$\langle\mathbb{r}_0|\mathbb{r}_0'\rangle = \int d^3\mathbb{r}\, \overline{\delta(\mathbb{r}-\mathbb{r}_0)}\,\delta(\mathbb{r}-\mathbb{r}_0') = \delta(\mathbb{r}_0-\mathbb{r}_0')$$

$$\langle\mathbb{P}_0|\mathbb{P}_0'\rangle = \int d^3\mathbb{r}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbb{P}_0\cdot\mathbb{r}}\, e^{+\frac{i}{\hbar}\mathbb{P}_0'\cdot\mathbb{r}} \sim \delta(\mathbb{P}_0-\mathbb{P}_0')$$

JÄMFÖR on-bas

$$\langle x_i|x_j\rangle = \delta_{ij} \qquad \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-ikx} \sim \delta(k)$$

de är baser men ej ON-normerade

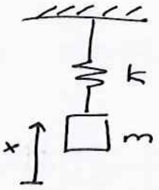
tillstånden $|\mathbf{r}_0\rangle$ för alla $\mathbf{r}_0 \in \mathbb{R}^3$ är icke-uppräkneligt oändligt många.

är detta dimensionen av $\mathcal{H}$?

nej, dim $\mathcal{H}$ är "bara" uppräkneligt oändligt många.

en trevlig familj av ON-baser (i ett 1-dim rum $\mathbb{R}$ istället för $\mathbb{R}^3$):

tänk på en harmonisk oscillator med koordinat x och någon egen-frekvens $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$



vi har en ON-bas $|\psi_n\rangle$ för $\mathcal{H}$ $n = 0, 1, 2 \ldots$ av energitillstånd.

uppräkneligt oändligt många!!

111003 kap 14: **ROTATIONER.**

system med tillståndsrum $\mathcal{H}$.

hur verkar en rotation med rotationsvektor $\boldsymbol{\Omega}$? $\Omega = |\boldsymbol{\Omega}|$ = rotationsvinkel

$\boldsymbol{\Omega}$ pekar i rotationsaxelns riktning.

svar (Noether & Wigner):

det finns Hermiteska operatorer $\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$ på $\mathcal{H}$ så att rotationen ges av den unitära operatorn

$$\hat{U}_{\boldsymbol{\Omega}} = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{\Omega}\cdot\hat{\mathbb{J}}\right) \qquad \hat{\mathbb{J}} = \hat{J}_x \mathbb{i} + \hat{J}_y \mathbb{j} + \hat{J}_z \mathbb{k}$$

operatorerna måste uppfylla kommuteringsreglerna:

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar \hat{J}_z$$
$$[\hat{J}_y, \hat{J}_z] = i\hbar \hat{J}_x$$
$$[\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hbar \hat{J}_y$$

(✿)

p.g.a. "geometri för rotationer" (samband mellan följder av rotationer mellan olika axlar)

men precis hur $\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$ konstrueras beror på systemet.

ex 1.

ett elektronspinn med $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{spinn}$ av dim = 2.

här är

$$\hat{J}_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x$$
$$\hat{J}_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y$$
$$\hat{J}_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z$$

Paulimatriserna

ex 2.

en spinnlös partikels banrörelsemängdsmoment

$$\underset{\text{banrörelsemängdsmoment}}{\hat{\mathbb{L}}} = \underset{\text{läge}}{\hat{\mathbb{r}}} \times \underset{\text{rörelsemängd}}{\hat{\mathbb{P}}} = \hat{L}_x \, \mathbb{i} + \hat{L}_y \, \mathbb{j} + \underbrace{\hat{L}_z}_{= \hat{r}_y \hat{P}_x - \hat{r}_x \hat{P}_y} \mathbb{k}$$

sätt $\hat{J}_x = \hat{L}_x$, $\hat{J}_y = \hat{L}_y$, $\hat{J}_z = \hat{L}_z$ de uppfyller kommuteringsreglerna.

kolla själva!

använd $[\hat{r}_x, \hat{P}_x] = i\hbar \mathbb{1}$

$[\hat{r}_x, \hat{r}_y] = 0$

Måns ångrar (14.2),(14.3)!

rotationer kommer alltid att fungera på det här viset!

det följer från (☆) att operatorn

$\hat{\mathbb{J}} \cdot \hat{\mathbb{J}} = \hat{\mathbb{J}}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_y^2$ kommuterar med

$\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_y$ dvs $[\hat{\mathbb{J}}^2, \hat{J}_x] = 0$ osv.

ex 3. (synergi av ex 1 och ex 2)

en elektron har $\mathcal{H} = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{härpå verkar} \\ \hat{\mathbb{L}}}}{\mathcal{H}_{\text{banrörelse}}} \otimes \underset{\substack{\uparrow \\ \text{härpå verkar} \\ \frac{\hbar}{2}\sigma_x, \text{ etc.}}}{\mathcal{H}_{\text{spinn}}}$

på $\mathcal{H}$ verkar

$\hat{\mathbb{J}} = \hat{\mathbb{L}} \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \mathbb{S}$

$\mathbb{S} = \left(\frac{\hbar}{2}\sigma_x, \frac{\hbar}{2}\sigma_y, \frac{\hbar}{2}\sigma_z\right)$

spinnvektorn

så roterar man ngt med banrörelse och spinn!

vad är mest allmänna uppsättning operatorer $\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$ verkande på ett rum $\mathcal{H}$ som uppfyller (☆)?

vi söker lösningar till (☆) som "inte kan delas upp i mindre bitar", dvs irreducibla representationer.

svar:

varje sådan representation karakteriseras av sitt "spin" j (ett tal)

låt $\mathcal{H}_j$ vara motsvarande tillståndsrum.

vi inför en ON-bas med tillstånd φ_m för $\mathcal{H}_j$.

går över antal värden.

dessa kan väljas som egentillstånd till de kommuterande operatorerna $\hat{\mathbb{J}}^2$ och $\hat{J}_z$ (inlämning: välja godtycklig riktning som l.k. av $\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$?)

$$\hat{\mathbb{J}}^2 \varphi_m = j^2 \varphi_m$$

egenvärde, samma för alla tillstånd i $\mathcal{H}_j$

detta då $\hat{\mathbb{J}}^2$ kommuterar med "allt" dvs alla operatorer vi pratat om.

$$\hat{J}_z \varphi_m = \underbrace{\hbar \cdot m}_{\text{egenvärde}} \cdot \varphi_m$$

ännu ej klart vad m antar för olika värden! i $\mathcal{H}_j$

inför stegoperatorerna

$$\begin{cases} \hat{J}_+ = \hat{J}_x + i\hat{J}_y \\ \hat{J}_- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y \end{cases}$$

OBS: $\hat{J}_+^\dagger = \hat{J}_-$

(✿) är ekvivalent med:

$$[\hat{J}_z, \hat{J}_+] = \hbar \hat{J}_+$$

$$[\hat{J}_z, \hat{J}_-] = -\hbar \hat{J}_-$$

$$[\hat{J}_+, \hat{J}_-] = 2\hbar \hat{J}_z$$

kolla detta!

anlag att vi har ett sådant tillstånd φ_m.
vi undersöker tillståndet $\hat{J}_+\varphi_m$

$$\hat{\mathbb{J}}^2(\hat{J}_+\varphi_m) = \hat{J}_+\hat{\mathbb{J}}^2\varphi_m = \hat{J}_+ j^2\varphi_m = j^2(\hat{J}_+\varphi_m)$$

kommuterar med allt

egenvärde

$$\hat{J}_z(\hat{J}_+\varphi_m) = (\hat{J}_+\hat{J}_z + \underbrace{\hat{J}_z\hat{J}_+ - \hat{J}_+\hat{J}_z}_{=\hbar\hat{J}_+})\varphi_m$$

$$= \hat{J}_+\hat{J}_z\varphi_m + \hbar\hat{J}_+\varphi_m = \hat{J}_+\hbar\cdot m\varphi_m + \hbar\hat{J}_+\varphi_m$$

$$= \underbrace{\hbar(m+1)}_{\text{egenvärde}}(\hat{J}_+\varphi_m)$$

känns igen från harmonisk oscillator!

P.S.S.

$$\hat{J}_z(\hat{J}_-\varphi_m) = \underbrace{\hbar(m-1)}_{\text{egenvärde}}(\hat{J}_-\varphi_m)$$

det är OGÖTT att ha godtyckligt stora eller små egenvärden till $\hat{J}_z$. (se bok)

det måste finnas ett maximalt värde $m=j$ så att $\hat{J}_+\varphi_{m=j} = 0$.

man finner så småningom följande:

tänkbara spinvärden är $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \ldots$

för ett givet j så ges en ON-bas för tillståndsrummet $\mathcal{H}_j$ av φ_m där

$$m = \underbrace{-j, -j+1, -j+2, \ldots, +j}_{2j+1 \text{ tillstånd}}$$

utantill

dim $\mathcal{H}_j = 2j+1$

också utantill

$$\hat{\mathbb{J}}^2\varphi_m = j^2\varphi_m \quad \text{där } j^2 = \boxed{\hbar^2 j(j+1)}$$

$$\hat{J}_z\varphi_m = \boxed{\hbar m}\varphi_m$$

$$\hat{J}_+\varphi_m = \hbar\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\,\varphi_{m+1}$$

$$\hat{J}_-\varphi_m = \hbar\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\,\varphi_{m-1}$$

OBS: $\hat{J}_+\varphi_{m=j} = 0$

$\hat{J}_-\varphi_{m=-j} = 0$

ex

elektronspinn dim $\mathcal{H}_{spinn} = 2$

dvs $j = \frac{1}{2}$

m-värden då

$-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

$-j, +j$

egentillstånd $\psi_{m=+\frac{1}{2}} = \psi^{\uparrow}_{in=lk}$

$\psi_{m=-\frac{1}{2}} = \psi^{\downarrow}_{in=lk}$

mätriktning är x-axeln.

spin $j=0$ singlett, $j=1$ triplett } se kapitel 8.

KLOTYTEFUNKTIONER. (spherical harmonics)

kom ihåg $\mathcal{H}_{vinkel} = \{ L^2\text{-funktioner } Y(\theta, \phi) \text{ på enhetssfären} \}$

rotationer vrider på $\mathcal{H}_{vinkel}$. men detta är en reducibel representation, dvs. $\mathcal{H}_{vinkel}$ kan skrivas som en direkt summa av (oändligt många) underrum.

rotationer verkar inom varje sådant underrum separat utan att blanda dem.

i själva verket har vi (kanske inte uppenbart)

$$\mathcal{H}_{vinkel} = \bigoplus_{\substack{j=0 \\ \text{heltal}}}^{\infty} \mathcal{H}_j = \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 \oplus \dots$$

$l = 0, 1, 2, \dots$ oftast heltal

det finns alltså en ON-bas $Y_l^m(\theta, \phi)$ för $\mathcal{H}_{vinkel}$. $m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$

för fixt $l = j$ så är $Y^m_{l=j}$ en ON-bas för underrummet $\mathcal{H}_j$ av $\mathcal{H}_{vinkel}$.

klotytefunktionerna $Y_l^m(\theta, \phi)$ är nära relaterade till funktioner $\tilde{Y}_l^m(x, y, z)$.

de senare funktionerna är

1. homogena polynom av gradtal l i x, y, z
2. harmoniska, dvs $\nabla^2 \tilde{Y}(x,y,z) = 0$

∇^2 dvs $\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$

se bok för mer om detta!

DE FÖRSTA EXEMPLEN:

restriktion till enhetssfären

$$\tilde{Y}^{m=0}_{l=0}(x,y,z) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \Rightarrow Y^0_0(\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

dvs $\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} |Y_0^0|^2 1^2 d\theta \sin\theta \, d\phi = 1$

$$\tilde{Y}^{m=1}_{l=1} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}(x+iy) \qquad Y^1_1 = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta \, e^{i\phi}$$

$$\tilde{Y}^{m=0}_{l=1} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} z \Rightarrow Y^0_1 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta$$

$$\tilde{Y}^{m=-1}_{l=1} = +\sqrt{\frac{3}{8\pi}}(x-iy) \qquad Y^{-1}_1 = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta \, e^{i\phi}$$

111004 kap 15: COULOMBPOTENTIALEN.

next week:
mån : experiment
tis : störningsteori

en partikel med massa m rör sig i en central-kraftspotential $V(r)$.
inför sfäriska koordinater r, θ, ϕ
Laplace operatorn separerar:

$$\nabla^2 = \nabla^2_{radiell} + \nabla^2_{vinkel} \qquad (13.13 - 13.14)$$

vi har löst egenvärdesproblemet för vinkel-delen.
egenfunktionerna kallas för klotytefunktioner $Y_l^m(\theta, \phi)$ där $l = 0, 1, 2, \ldots$
$m = -l, -l+1, \ldots, +l$

egenvärdena är $l(l+1)$
egenvärdesproblemet för den fullständiga Hamiltonoperatorn $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)$
är då ekvivalent med
egenvärdesproblemet för

repulsiv "centrifugal potential term"

$$\hat{H}_{radiell} = \hat{H}_l = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + \underbrace{\frac{\hbar^2 l(1+l)}{2mr^2}}_{V_{effektiv}(r)} + V(r)$$

vi söker alltså $E, \tilde{R}(r)$
så att

$$\hat{H}_l \tilde{R}(r) = E \tilde{R}(r)$$

i allmänhet kan detta problem inte lösas exakt!

men det går om $V(r) = -\frac{K}{r}$ ← positiv konstant

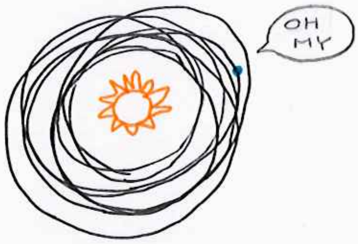
ex. elektrostatisk kraft mellan laddade partiklar / kroppar

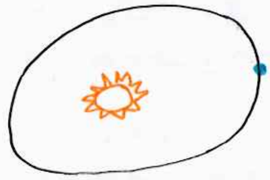
$$K = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} q_1 q_2$$

klassiskt:

förutom energi E och rörelsemängdsmoment $\mathbb{L}$ är även excentricitetsvektorn $\mathbb{e}$ bevarad dvs. planetbanor är slutna kurvor

allmänt $V(r)$:





krantfysik:

"Schrödingers faktoriseringsmetod"
(inte jätteriktigt men ganska instruktivt)

inför operatorer

$$\boxed{\hat{a}_l} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\frac{d}{dr} + \frac{\hbar l}{\sqrt{2m}}\frac{1}{r} - \sqrt{\frac{m}{2}}\frac{k}{\hbar l}$$

derivera: ingen hermitesk operation

$$\boxed{\hat{a}_l^+} = \frac{-\hbar}{\sqrt{2m}}\frac{d}{dr} + \frac{\hbar l}{\sqrt{2m}}\frac{1}{r} - \sqrt{\frac{m}{2}}\frac{k}{\hbar l}$$

$\mathbb{P} = -i\hbar\nabla$ hermitesk

och skriv

$$\hat{H}_l = \hat{a}_l^+\hat{a}_l - \frac{mk^2}{2\hbar^2 l^2}$$

eller

$$\hat{H}_l = \hat{a}_{l+1}\hat{a}_{l+1}^+ - \frac{mk^2}{2\hbar^2(1+l)^2}$$

KOLLA SJÄLVA!

$$\begin{cases} \hat{H}_{l+1}a_{l+1}^+ = a_{l+1}^+\hat{H}_l \\ \hat{H}_{l-1}\hat{a}_l = \hat{a}_l\hat{H}_l \end{cases}$$

vad kan $\hat{H}_l$ ha för egenvärden E och egenfunktioner $\tilde{R}(r)$?

antag att $\hat{H}_l\tilde{R}(r) = E\tilde{R}(r)$ samt $\langle\tilde{R}|\tilde{R}\rangle = 1$

en olikhet för E:

$$E = \langle\tilde{R}|\hat{H}_l|\tilde{R}\rangle = \langle\tilde{R}|\hat{a}_{l+1}\hat{a}_{l+1}^+|\tilde{R}\rangle - \langle\tilde{R}|\frac{mk^2}{2\hbar^2(1+l)^2}|\tilde{R}\rangle$$

$$= \underbrace{\langle\hat{a}_{l+1}^+\tilde{R}|\hat{a}_{l+1}^+\tilde{R}\rangle}_{\geq 0} - \frac{mk^2}{2\hbar^2(l+1)^2} \geq -\frac{mk^2}{2\hbar^2(1+l)^2}$$

ett tillstånd, skalärprodukt m. sig själv.

med likhet OMM $\hat{a}^{+}_{l+1}\tilde{R} = 0$ vill lösa den ODE'N!

får alltså:

$\tilde{R}(r) = \tilde{R}_{l+1,\, l(r)} = \ldots$ (15.17)

för givet l är alltså det lägsta energi-egenvärdet $\boxed{E_n = -\frac{mK}{2\hbar^2 n^2}}$ där $n = l+1$

övriga egenvärden?

antag $\hat{H}_l \tilde{R} = E\tilde{R}$

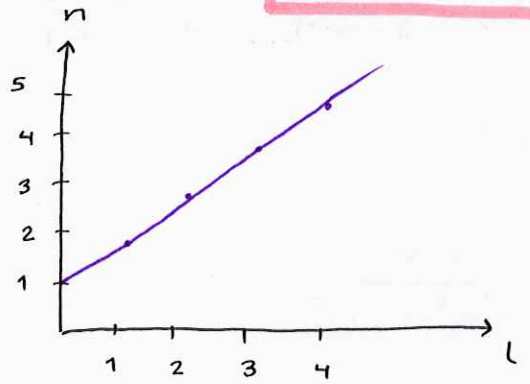
betrakta tillståndet $\hat{a}^{+}_{l+1}\tilde{R}$

$\hat{H}_{l+1}\hat{a}^{+}_{l+1}\tilde{R} = \hat{a}^{+}_{l+1}\hat{H}_l\tilde{R} = \hat{a}^{+}_{l+1}E\tilde{R} = E\hat{a}^{+}_{l+1}\tilde{R}$

OBS ett egentillstånd till $\hat{H}_{l+1}$-operatorn.

Liknande resonemang för $\hat{a}_l\tilde{R}$.

spektrum för alla $\hat{H}_l$-operatorer består av olika $\boxed{E_n\text{-värden}}$ enligt figuren.



se fig 15.1

tänkbara värden i figuren då

$n \geq l+1$

DET BERÖMDA EXEMPLET:

en atom med en elektron (laddn. $-e$) och Z protoner (laddn. $+e$) samt neutroner

$K = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}$ $Z = 1, 2, 3, \ldots$

H, He^{+}, Li^{++}

tillståndsrum (för elektronen) $\mathcal{H} = \underbrace{\mathcal{H}_{\text{banrörelse}}}_{\infty\text{-dim}} \otimes \underbrace{\mathcal{H}_{\text{spin}}}_{\text{2 dimensionellt}}$

$= \mathcal{H}_{\text{radiell}} \otimes \mathcal{H}_{\text{vinkel}} \otimes \mathcal{H}_{\text{spinn}}$

energiegentillstånden till $\hat{H}$ karakteriseras av kvanttalen

$$\begin{cases} n = 1, 2, 3, \ldots & \text{huvudkvanttal} \\ l = 0, 1, 2, \ldots, n-1 & \text{azimutalt kvanttal} \\ m = -l, \ldots, +l & \text{magnetiskt kvanttal} \\ s = \uparrow \; \downarrow & \text{spinkvanttal} \end{cases}$$

energin beror bara på n:

$$E_n = -\frac{m Z^2 e^4}{32\pi^2\hbar^2\varepsilon_0^2}\cdot\frac{1}{n^2} = \frac{Z^2}{n^2}\left(-13{,}6\ \text{eV}\right)$$

elektronens reducerade massa

dvs E_0 ju! för en elektron då elr.

för ett givet värde på n (och alltså på energin E_n) finns det flera degenererade tillstånd:

$$\sum_{l=0}^{n-1}\sum_{m=-l}^{l}\sum_{s=\uparrow}^{\downarrow} = 2n^2$$

egentillstånden är av formen:

$$\underbrace{r^{-1}\tilde{R}_{n,l}}_{R_{n,l}} \otimes Y_l^m(\theta,\phi) \otimes \psi_{lk}^{\downarrow\uparrow}$$

argumentet är $\frac{Z}{n}\cdot\frac{r}{a_0}$ $\quad a_0 = \frac{4\pi\hbar^2\varepsilon_0}{me^2} \approx 5\cdot 10^{-11}\ \text{m}$

Bohr-radien dyker alltså upp här

SPEKTROSKOPISKA BETECKNINGAR FÖR TILLSTÅND.

l kodas med en bokstavsbeteckning:

$l = 0, 1, 2, 3, 4, \ldots$

$\quad\ \ s, p, d, f, \ldots$

tillstånd skrivs enligt

$n=1,\ l=0:$ $\quad 1s$

$n=2,\ l=0:$ $\quad 2s$

$\qquad\ l=1:$ $\quad 2p_{1/2},\ 2p_{3/2}$

det totala rörelsemängdsmomentet (ban + spinn)

$$\begin{cases} j = l + \frac{1}{2} \\ j = l - \frac{1}{2} \end{cases} \quad \text{dvs} \quad \begin{matrix} 1+\frac{1}{2} \\ 1-\frac{1}{2} \end{matrix}$$

osv.

dessa tillstånd karakteriserade av n, l, m, s är nästan energiegentillstånd.

ta hänsyn till kopplingen till EM-fältet

⇨ övergångar mellan tillstånd.

SIDOSPÅR

$\hat{H}\chi_i = E_i\chi_i$

godtyckligt tillstånd

$\psi(t) = \sum c_i(t)\chi_i$ $\qquad c_i(t) = c_i(0)\cdot e^{-i\frac{E_i}{\hbar}t}$

$E_i = \hbar\omega_i$ (vinkelfrekvens)

ett egentillstånd till $\hat{H}$ är "stationärt" (utvecklas bara m. fasfaktor $e^{-\frac{i}{\hbar}E_i t}$)

över (under) skott av energi emitteras (absorberas) i form av ljus (fotoner) med vinkelfrekvens ω så att $\hbar\omega = \Delta E$ = energiskillnad

$= E_n - E_{n'}$

det finns vissa urvalsregler:

n, l, m, s kan övergå till n', l', m', s' med en foton

fotonen har helicitet ± 1 och kopplar inte till elektronens spinn.

$l - l' = \pm 1$

$m - m' = 0, \pm 1$

$s = s'$

$E_{foton} = \hbar\omega = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda}$ skall vara lika med

$E_n - E_{n'}$ = viss konstant $\cdot \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2}\right)$

härur fås:

Rydbergs formel för spektrallinjer 1888

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{mZ^2e^4}{64\pi^3 c\hbar^3 \varepsilon_0^2} \cdot \left|\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2}\right|$$

"förklarades" av Bohr 1913

Rydbergs konstant.

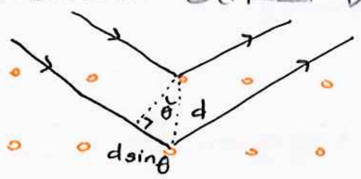
systematisk teori = kvant mekanik

EXPERIMENT.

111010

ELEKTRONDIFFRAKTION.

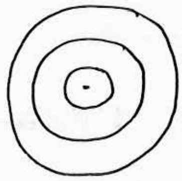
Kap 11: en elektron m. rörelsemängd $p = m \cdot v$
har en planvågs fkt'n m. våglängd
$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}$, kan ses genom optiska fenomen
dvs konstruktiv/destruktiv interferens
mellan olika vågor, se sid 112



vågskillnad = $2d\sin\theta$

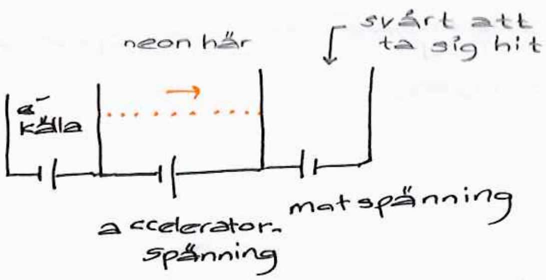
$2d\sin\theta = n \cdot \lambda$ vid konstruktiv interferens

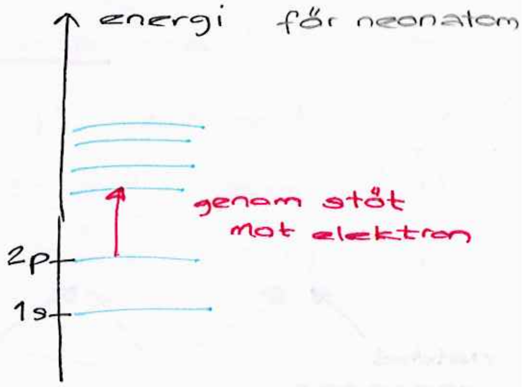
fast ämne ju
kan istället ta ett pulver av en kristall
avlänkningsvinkel = 2θ
preparat (grafit) i pulverform ger oss
koncentriska cirklar



FRANK-HERZ STÖTFÖRSÖK.

en atom (t.ex. neon) kan befinna
sig i olika energitillstånd





strömmen av elektroner ökar m. ökande
accelerationsspänning,
ända tills energin är tillräcklig
för att excitera neon. inelastisk process
i visst läge har neon-atomer
nog m. energi för att emittera
ljus. kan hinna m det 2 eller 3 ggr!

dvs om e^- precis nog m. E för att stöta Ne-atom till ny nivå, förlorar då den energin.

exciterad neongas alltså, faller sedan tillbaka.
den hittar nån och krockar rätt fort!
Ne-atom går upp i högre tillstånd.

Kapitel 16: STÖRNINGSTEORI

kan användas på massa olika! ej bara kvant!

vi har studerat idealiserade, exakt lösbara exempel, t.ex

- harmoniska oscillatorn
- system m. exakt rotationssymmetri
- Coulombpotentialen

hur löser man mer generella problem?

en metod är störningsteori.

kan användas för problem som ligger "nära" ett exakt lösbart problem.

liten parameter λ som talar om avståndet till ett exakt lösbart system.

alla storheter skrivs som serieutvecklingar i λ. skriv upp ekvationer som relaterar dessa, och lös ordning för ordning i λ.

viktigaste tillämpningen i kvantfysik: bestäm egenvärden E_n och egenfunktioner ψ_n till en given Hamilton-operator $\hat{H}$.

vi betraktar $\hat{H}$ som ligger nära en operator $\hat{H}^{(0)}$ med känt spektrum.

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \lambda \hat{H}^{(1)} + \lambda^2 \hat{H}^{(2)} + \dots$$

ostörd operator

kända operatorer

störning av 1a ordn.

vi antas ha löst egenvärdesproblemet för $\hat{H}^{(0)}$

$$\hat{H}^{(0)} \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)}$$

ostörda egenfkt'r

ostörda egenvärden.

vi vill lösa egenvärdesproblemet

$$\hat{H}\psi_n = E_n \psi_n$$

exakt(a) egentillstånd

exakt(a) egenvärde(n)

vi gör't genom att ansätta potensserier:

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \ldots$$

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \lambda \psi_n^{(1)} + \lambda^2 \psi_n^{(2)} + \ldots$$

sätt in ansatz för E_n och ψ_n i egenvärdes-ekvationen för $\hat{H}$.

jämför koefficienter i VL och HL för olika potenser av λ.

λ^0 : $\hat{H}^{(0)}\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}$ visste vi redan!

λ^1 : $\hat{H}^{(1)}\psi_n^{(0)} + \hat{H}^{(0)}\psi_n^{(1)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(1)} + E_n^{(1)}\psi_n^{(0)}$

λ^2 : $\hat{H}^{(2)}\psi_n^{(0)} + \hat{H}^{(1)}\psi_n^{(1)} + \hat{H}^{(0)}\psi_n^{(2)} = E_n^{(2)}\psi_n^{(0)} + E_n^{(1)}\psi_n^{(1)} + E_n^{(0)}\psi_n^{(2)}$

vi betraktar dem som ket-ekvationer.

antag att alla E_n är olika, och välj $\psi_n^{(0)}$ så att de utgör en ON-bas.

$$\langle \psi_n^{(0)} | \psi_{n'}^{(0)} \rangle = \delta_{nn'}$$

om de är bas kan ju utveckla alla tillstånd i den basen!

korrektionerna

$\psi_n^{(1)}, \psi_n^{(2)}, \ldots$ kan utvecklas i denna bas:

1

$$\psi_n^{(1)} = \sum_{n' \neq n} c_{nn'}^{(1)} \psi_{n'}^{(0)}$$

$$\psi_n^{(2)} = \sum_{n' \neq n} c_{nn'}^{(2)} \psi_{n'}^{(0)}$$

vi utesluter termer med $n' = n$, se detta som ett normeringsvillkor.

osv.

$$\psi_n = 1\psi_n^{(0)} + \text{linjärkomb. av övriga bastillstånd } \psi_{n'}^{(0)}$$

normering, att vi bestämt att är en 1a här framför

OBS $\langle \psi_n | \psi_n \rangle \neq 1$

lös ekvationerna ordn. för ordn. i λ:

man finner den linjära korrektionen till energin E_n,

diagonala matriselement för $\hat{H}^{(1)}$ m.a.p $\psi_n^{(0)}$

$$E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \psi_n^{(0)} \rangle$$

ostört egentillstånd nr. n

linjär term i $\hat{H}$

korrektionen till egentillståndet är som i 1

$$\overline{c_{nn'}} = \frac{1}{E_n^{(0)} - E_{n'}^{(1)}} \langle \psi_{n'}^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \psi_n^{(0)} \rangle$$

differens mellan ostörda energier

avdiagonala matriselement för $\hat{H}^{(1)}$ m.a.p basen $\psi_n^{(0)}$

läs igenom s.167-168 själva.

vi känner $\hat{H}$ alltså, men vad är dess egenvärden?

mer om: **STÖRNINGSTEORI.** 111011

system m. tillståndsrum $\mathcal{H}$.

inför ON-bas $\chi_n = \psi_n^{(0)}$ för $\mathcal{H}$ av egentillstånd till ostörd Hamiltonoperator $\hat{H}^{(0)}$

$$\hat{H}^{(0)}\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}$$

ostört energiegenvärde.

betrakta samma tillståndsrum $\mathcal{H}$ men en "störd" Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \lambda\hat{H}^{(1)} \quad (+\text{ h.o.t})$$

liten parameter

första ordn. störning

$\hat{H}^{(0)}$, $\hat{H}^{(1)}$ är givna operatorer på $\mathcal{H}$

vad är egenvärden E_n och egentillstånd ψ_n för $\hat{H}$?

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n \quad (\star)$$

utveckla dessa i potensserier i λ:

trots $\hat{H}$ polynom! (har ändå ∞ många termer, iom kopplar tillbaka på komplext sätt!)

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \ldots$$

koeff. som vi vill bestämma

tillståndet $\psi_n \in \mathcal{H}$ kan utvecklas i basen $\chi_n = \psi_n^{(0)}$ av ostörda egentillstånd.

$c\psi_n$ är också ett egentillstånd $(c \neq 0)$

använd denna frihet så här:

koefficienten för $\psi_{n'=n}^{(0)}$ då ψ_n utvecklas som linjärkomb. av alla $\psi_{n'}^{(0)}$ skall vara 1.

$$\psi_n = 1\cdot\psi_n^{(0)} + \sum_{n\neq n'} c_{nn'}\psi_{n'}^{(0)}$$

koeff. som ska beräknas.

utveckla $c_{nn'}$ i potensserie i λ:

$$c_{nn'} = c_{nn'}^{(1)}\cdot\lambda + c_{nn'}^{(2)}\cdot\lambda^2 + \ldots$$

(i allmänhet oändligt många termer)

man finner genom att undersöka (☆) ordning för ordning i λ att:

$$E_n^{(1)} = \underbrace{\langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \psi_n^{(0)} \rangle}_{\text{diagonala matris-element av } \hat{H}^{(1)}} = \text{det statistiska förväntansvärdet av storheten som hör till } \hat{H}^{(1)} \text{ när den utvärderas i ett system i tillst. } \psi_n^{(0)}$$

intuitiv förklaring ψ_n är fortf. ungefär $\psi_n^{(0)}$

räcker att beräkna bidrag från $\hat{H}^{(1)}$-term i detta tillstånd

man finner också att $c_{nn'}^{(1)}$ är relaterat till av diagonala matriselement $\langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \psi_{n'}^{(0)} \rangle$.

detta påverkar i sin tur energiberäkningen:

$E_n^{(2)} = \ldots$ se bak (16.10)

TILLÄMPNING (bl.a. inlämningsuppgiften):

partikel m. massa m rör sig i potential $V(\mathbb{r})$

Hamiltonoperator $\hat{H} = \frac{\hat{\mathbb{P}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbb{r}})$

rörelsemängdsoperator

lägesoperator

tillståndsrummet $\mathcal{H}$ kan t.ex. identifieras med $\{L^2\text{-funktioner } \psi(\mathbb{r})\}$

$$\langle \psi | \tilde{\psi} \rangle = \int d^3\mathbb{r}\, \overline{\psi(r)}\, \tilde{\psi}(r)$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla + V(r)$$

egenvärdesproblemet för $\hat{H}$ är exakt lösbart i vissa fall t.ex. då $V(\mathbb{r})$ är harmonisk oscillatorpotential $\frac{k}{2}x^2$ i 1 dimension eller $V(\mathbb{r})$ = coulombpotential.

låt nu istället $V(\mathbb{r}) = V^{(0)}(\mathbb{r}) + \lambda \cdot V^{(1)}(\mathbb{r})$

t.ex harm. osc. pot

en tillagd term t.ex. $\propto$ mot x^4

godtycklig fkt'n av läget

vi har löst problemet exakt för det ostörda, dvs vi har egenenergier $E_n^{(0)}$ och motsv. vågfunktioner $\psi_n^{(0)}(\mathbb{r})$ så att

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V^{(0)}(\mathbb{r})\right)\psi_n^{(0)}(\mathbb{r}) = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}(\mathbb{r})$$

hur ändras egenvärdena av störningen?

jo, $E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + O(\lambda^2)$

$\tilde{\psi}$ alltså.

där $E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} | V^{(1)} | \psi_n^{(0)} \rangle = \int \overline{\psi_n^{(0)}} V^{(1)}(\mathbb{r}) \psi_n^{(0)} \, d^3\mathbb{r}$

WOOW!

störning i potentialen

multiplicera

alla de är kända!

DIAGNOSISKA TESTET.

4. Paulimatriserna

$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ egentillstånd $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \psi_{\mathbb{k}}^{\uparrow}$ $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \psi_{\mathbb{k}}^{\downarrow}$

gjort mätning, fått

$\psi_{\mathbb{k}}^{\uparrow} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \psi_{\hat{\imath}}^{\uparrow}$ $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \psi_{\hat{\imath}}^{\downarrow}$

sen dela upp i $\psi_{\hat{\imath}}$

dvs $\psi_{\mathbb{k}}^{\uparrow} = \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_{\hat{\imath}}^{\uparrow} \quad \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_{\hat{\imath}}^{\downarrow}$

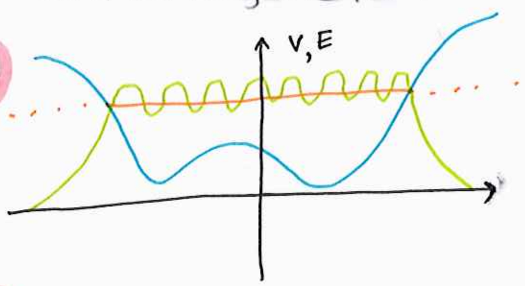
sannolikheter dvs $\left|\frac{1}{\sqrt{2}}\right|^2 = \frac{1}{2}$ $\left|\frac{1}{\sqrt{2}}\right|^2 = \frac{1}{2}$

5. $|\langle \psi | \chi \rangle|^2 \geq 0$ visserligen sant.

$\underbrace{|\langle \psi | \chi \rangle|^2}_{=0} \leq \underbrace{\langle \psi | \psi \rangle \langle \chi | \chi \rangle}_{=1}$ t.ex om normerade

om ortogonala!

12.



15 13,6 eV är jonisationsenergin för H-atom

måndag in! utanför kontoret!