

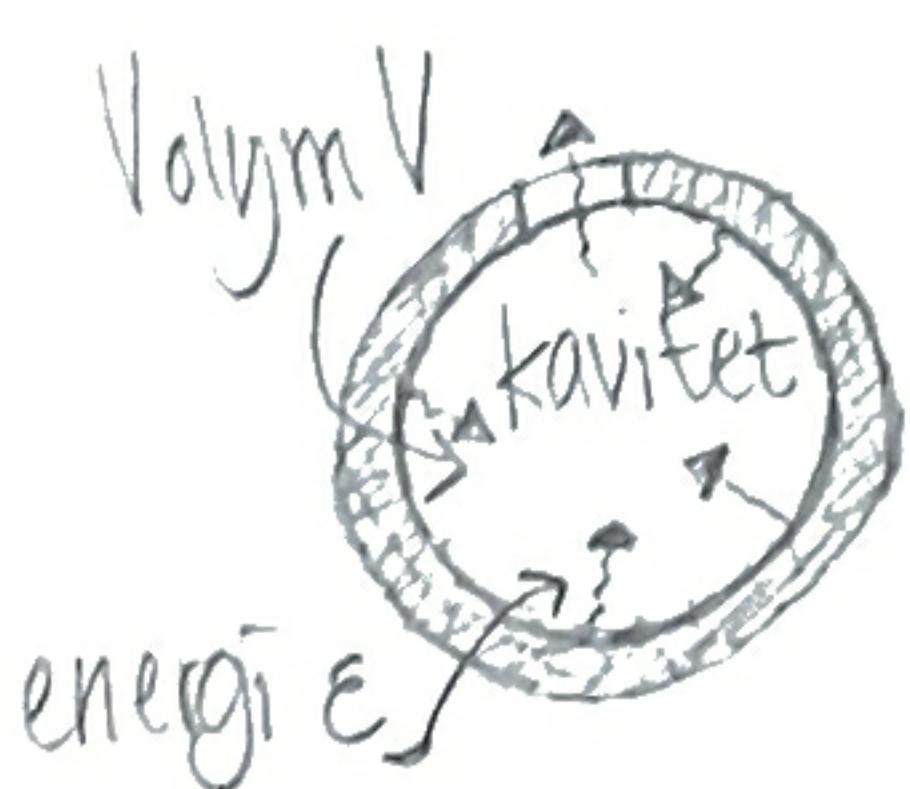
2018 09 03

Mån Lv1

Grundläggande experiment

- Thomas Youngs dubbelspaltesperiment
- Henri Becquerel: radioaktivitet
- Svartkroppsstrålning (1850-1900)
 - Boltzmann
 - Planck (kvanthypotesen)
- Fotoelektrisk effekt
- Stern-Gerlach-experimentet

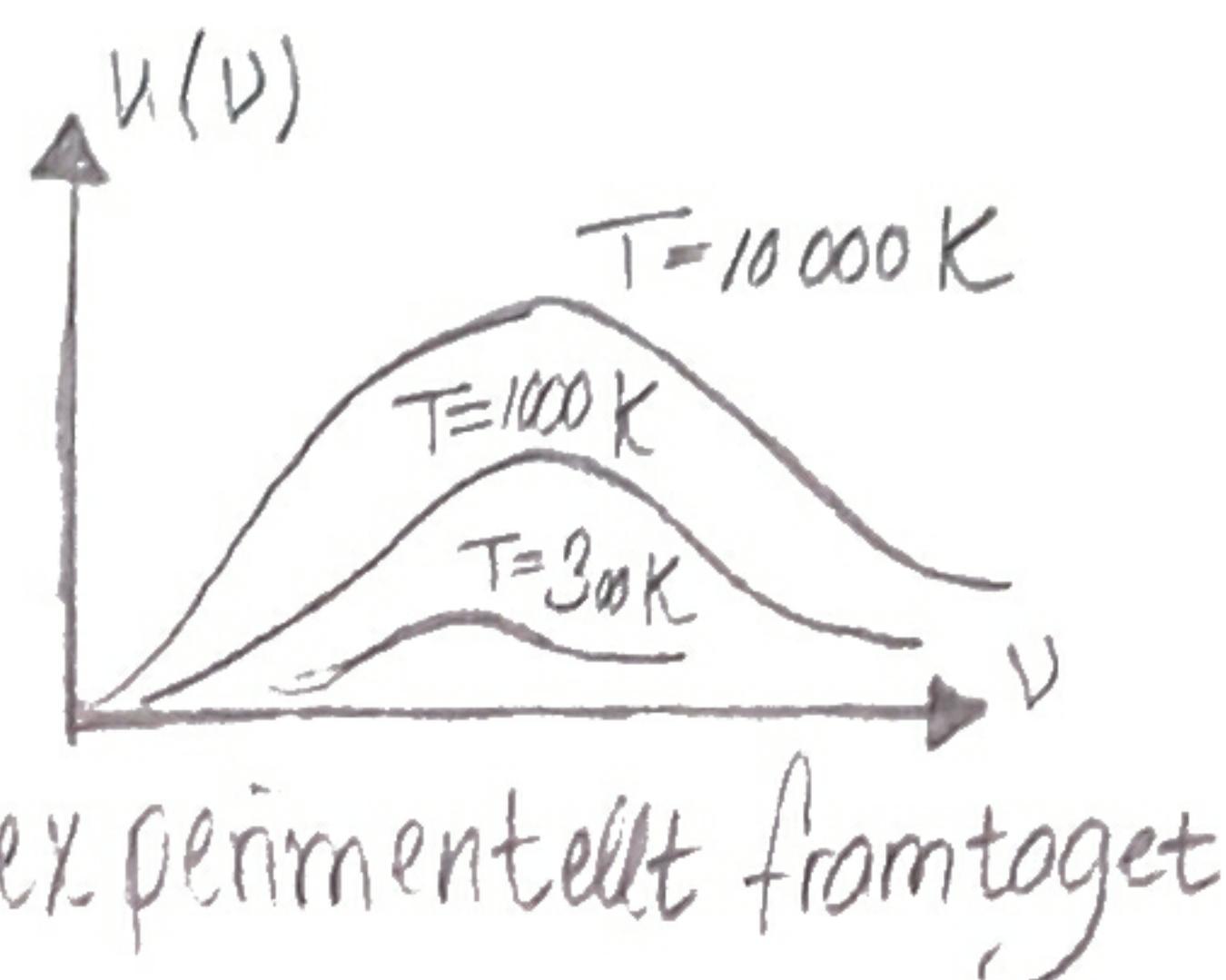
Svartkroppsstrålning



Värmt upp till dess den är i jämvikt med omgivningen. Om tillräckligt varmt, skickas synligt ljus.

$$\text{Energitäthet } U = \epsilon/V.$$

Hur mkt av energitätheten ligger i frekvensintervallet $[v, v+dv]$? Vi kallar denna storhet $U(v)$, s.a. $U = \int_0^\infty u(v)dv$.



Klassisk teori

- Rayleigh-Jeans-approximationen

$$U_{RJ}(v) = \frac{8\pi v^3}{c^3} k_B T$$

$U_{RJ} \rightarrow \infty, v \rightarrow \infty$

Boltzmann konst.

- Wiens lag

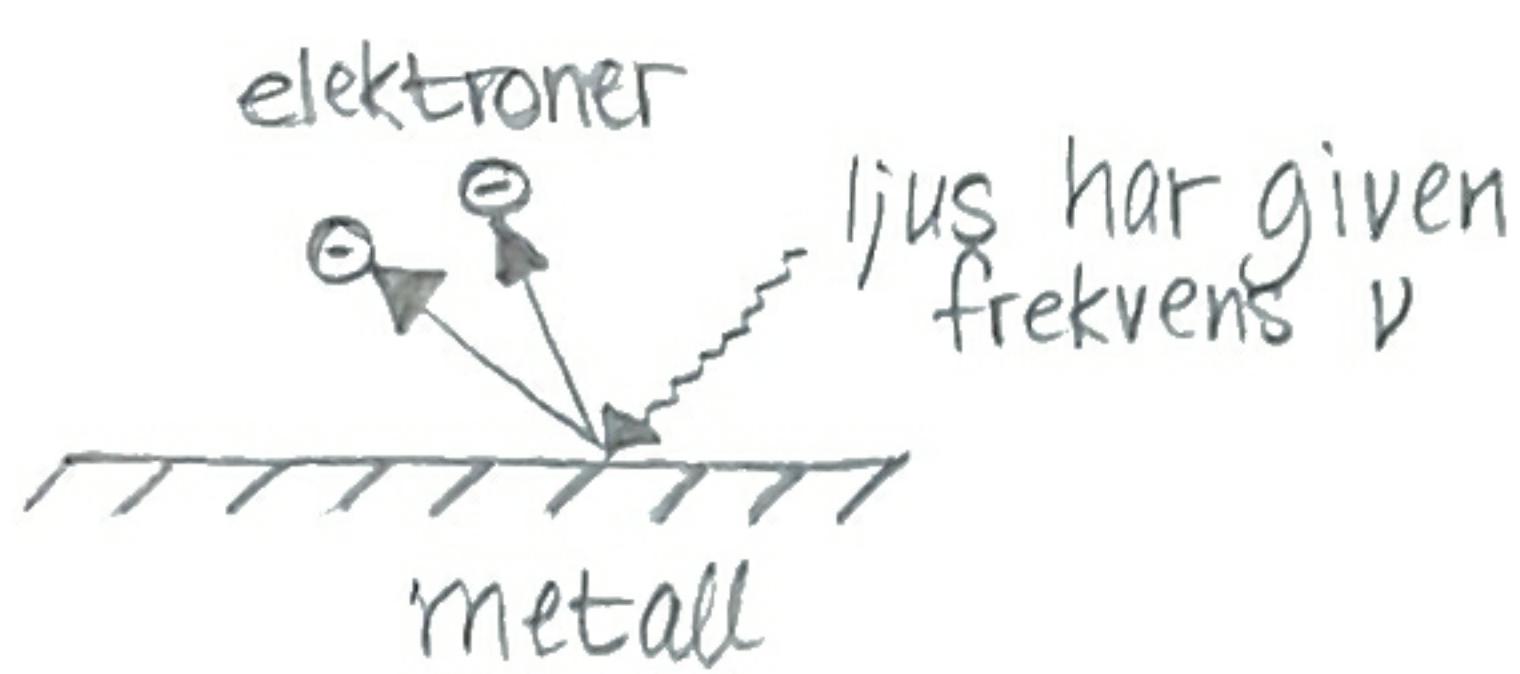
$$U_W(v) = \underbrace{W(\frac{T}{v})}_{\text{okänd funk.}} v^5$$

• Planck

Vi säger att ljus med en viss frekvens ν kan bara ha energin $E = h\nu$, $h = 6,6 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$ = Plancks konst.
 \Rightarrow Man kan hitta formen på $W(T/\nu)$ (se torsdag 6/9)

$$U(\nu) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/k_B T} - 1}$$

Fotoelektrisk effekt

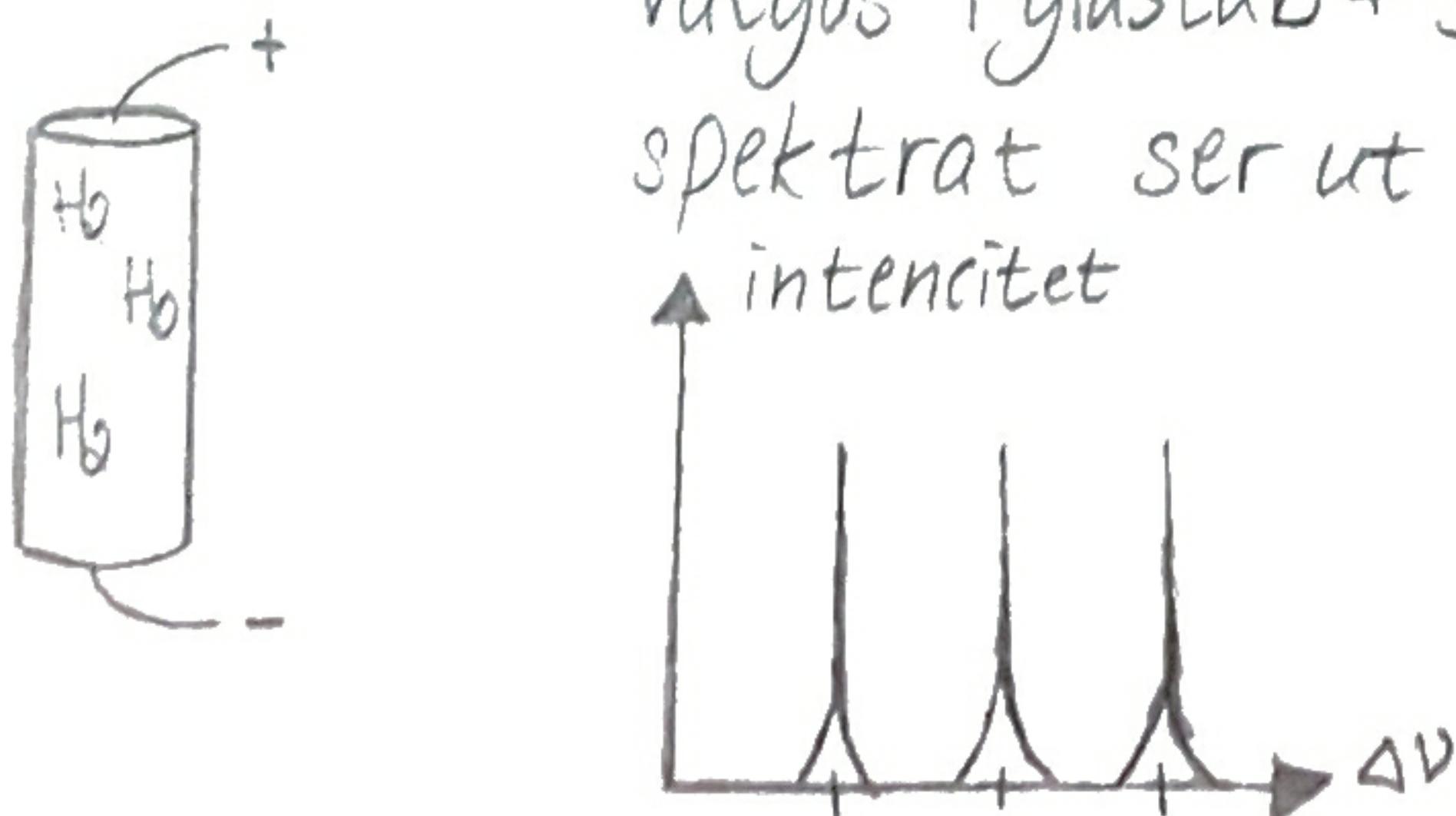


Om frekvensen ν är under ett visst värde så kommer inga e^- !
 $(Ej$ högre intensitet $\rightarrow e^-!)$
 När ν överskridet ett visst värde
 \rightarrow en ström kan mätas.

Detta antyder att energin från ljus enkelt kan lämnas över till elektronen i en given mängd.

Plancks hypotes: $E = h\nu$, Einstein 1905 (fick Nobelpris).
 \rightarrow konceptet foton var skapat.

Bohrs atommodell



Vätgas i glastub + spänning: gasen börjar glöda, spektrat ser ut enl. fig, linjespektrum.

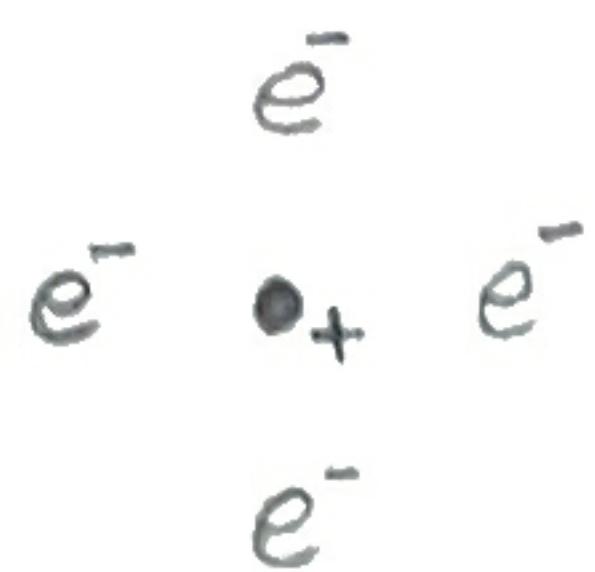
- Klassiskt
 Stabilitetsproblem,
 laddningar som accelereras
 skickar ut EM-strålning,
 strålning \rightarrow energiförlust

Thomson



Plum pudding,
+ fördelad idmt
över volymen,
e⁻ spridda i volymen

Rutherford



täkt kärna,
e⁻ på avstånd

Pastulat 1 ger diskreta energin → nivåer i atomen.

Bohrs lösning

Pastulat

1. Rörelsemängdsmomentet för e⁻ antar diskreta värden,

$$\oint L_\theta d\theta = nh$$

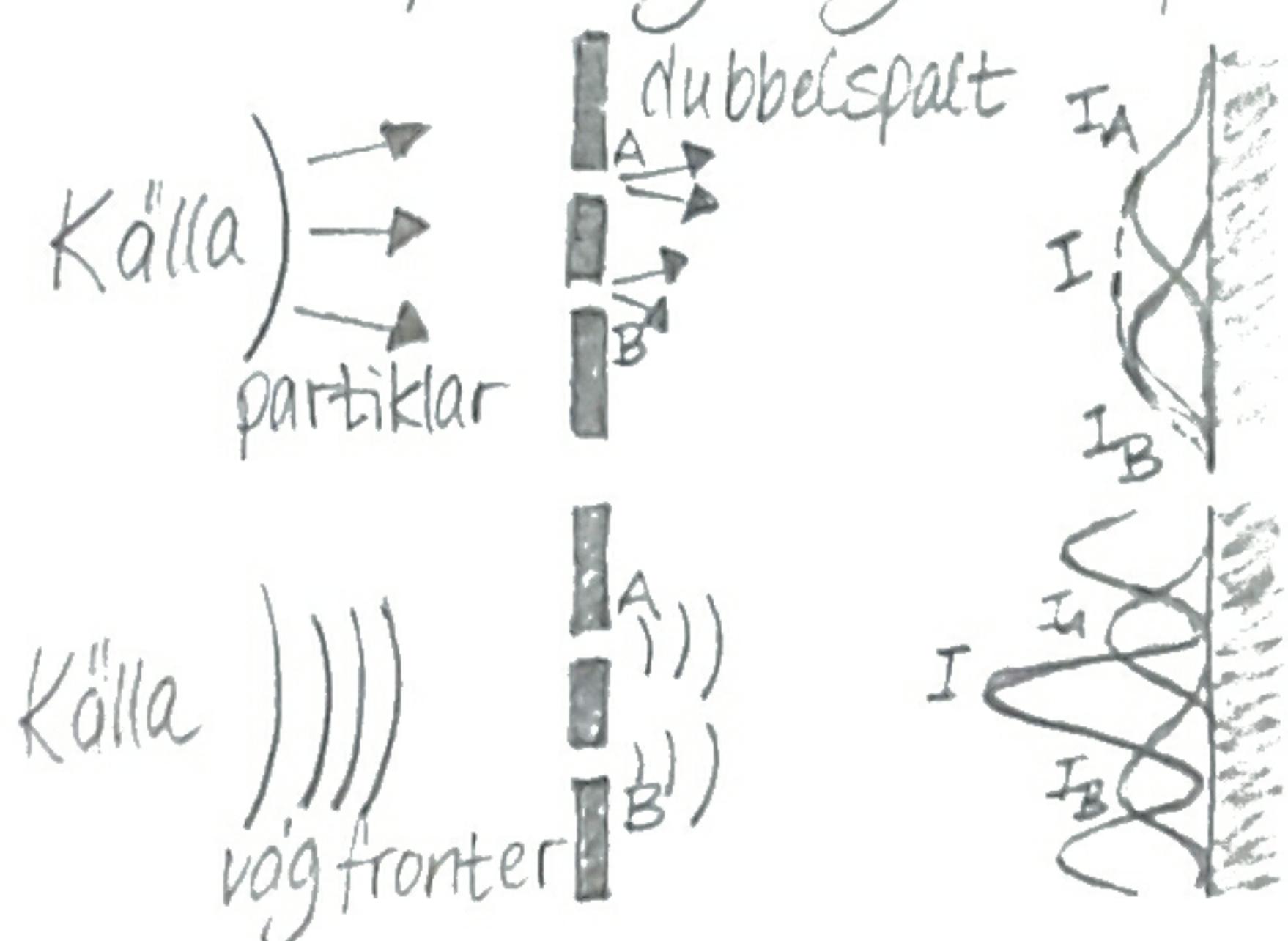
$n=1, 2, 3, \dots$, $h = \text{Plancks.}$

2. När en atom genomgår en energiförändring från energin E_m till E_n , skickas ljus ut med en frekvens ν som ges

$$h\nu = E_m - E_n.$$

Vägor & partiklar

Hur skiljer sig vägor & partiklar åt?



Gör man experiment med elektroner får man att elektroner har vågegenskaper.

Elektronen $\Leftrightarrow \psi$

För partiklar gäller att

$$I = I_A + I_B$$

för intensiteten I .

Vägor bestäms av sin amplitud ψ & intensiteten ges av $I = |\psi|^2$
 $\rightarrow I \neq I_A + I_B$

$$I = |\psi_A + \psi_B|^2 = (\psi_A + \psi_B)(\psi_A^* + \psi_B^*) = \\ = |\psi_A|^2 + |\psi_B|^2 + \psi_A \psi_B^* + \psi_A^* \psi_B$$

interferensstermer

de Broglies hypotes "All materia har vågegenskaper"

Foton: $E = h\nu$.

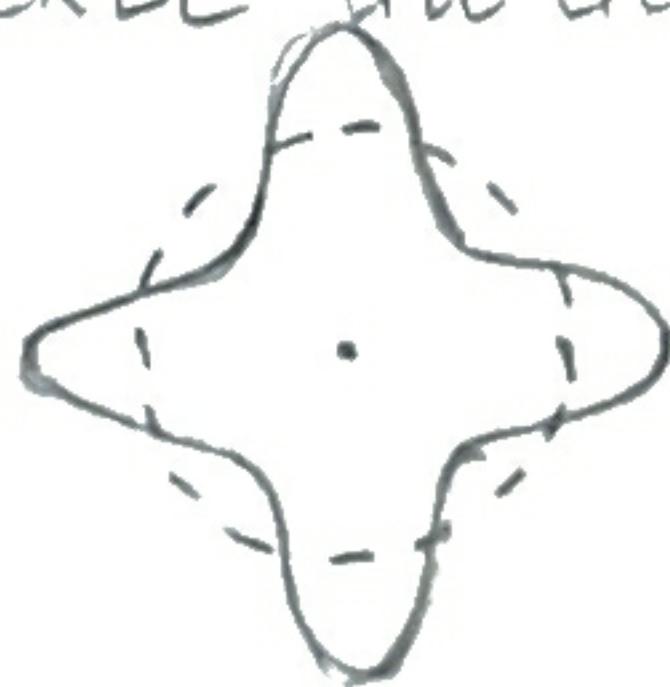
Vet också att $p = E/c = h\nu/c$.

Men $\nu = c/\lambda$ & $\lambda = 2\pi/k$, $k = \text{vågtal}$

$$p = h\nu/c = h/\lambda = \frac{hk}{2\pi} = \hbar k \quad \text{där } \hbar = \frac{h}{2\pi} \quad [\text{h bar}]$$

$$\omega = \frac{\nu}{2\pi} \Rightarrow E = \hbar\omega \quad \& \quad p = \hbar k$$

de Broglie tyckte att detta gäller så klart även massiva partiklar.



Q018 09 06

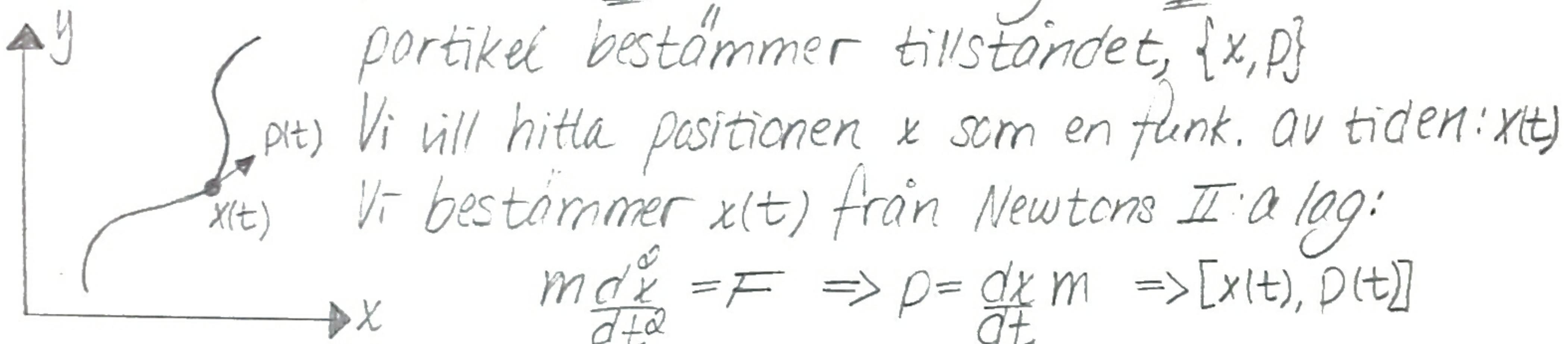
Tors Lv1

Vägfunktionen & Schrödinger~~ekvationen~~^{ekvationen}

Tillstånd

Klassisk mekanik $\rightarrow \{x, v\}$

Positionen x & rörelsemängden p hos en partikel bestämmer tillståndet, $\{x, p\}$



pt) Vi vill hitta positionen x som en funkt. av tiden: $x(t)$
Vi bestämmer $x(t)$ från Newtons II:a lag:

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = F \Rightarrow p = \frac{dx}{dt} m \Rightarrow [x(t), p(t)]$$

Kvantmekanik $\Psi(x, t)$.

Tidsutvecklingen av $\Psi(x, t)$: $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - V\Psi = 0$,
där V är yttre potential

= Schrödingerrekvationen

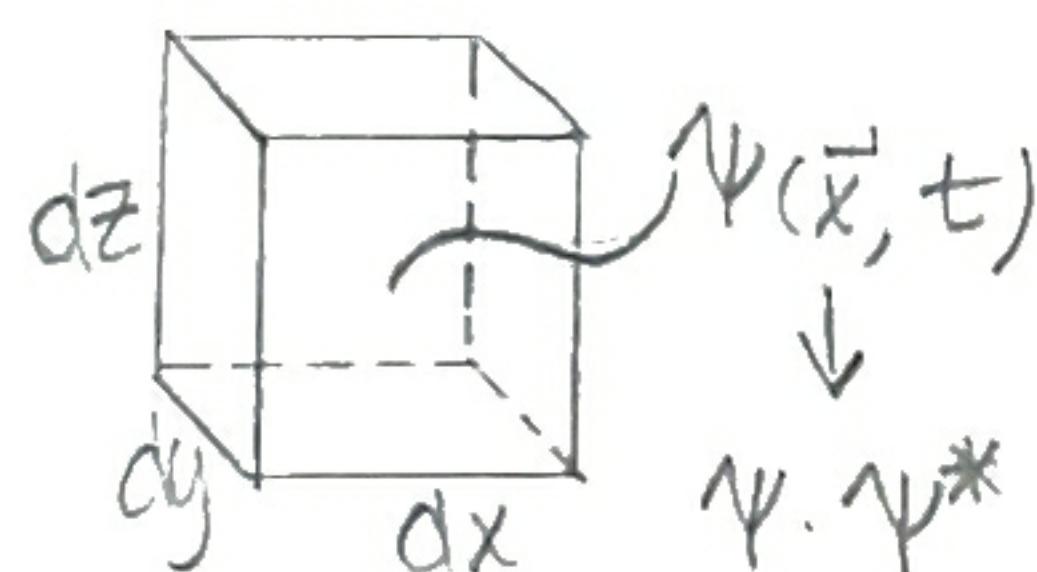
Linjär vågrelation Om Ψ_A & Ψ_B är lösningarna till SE
 $\Rightarrow a\Psi_A + b\Psi_B$ lösning till SE (a, b konstanter).
Givet $\Psi(x, 0)$ \Rightarrow SE ger oss lösningen $\Psi(x, t)$.

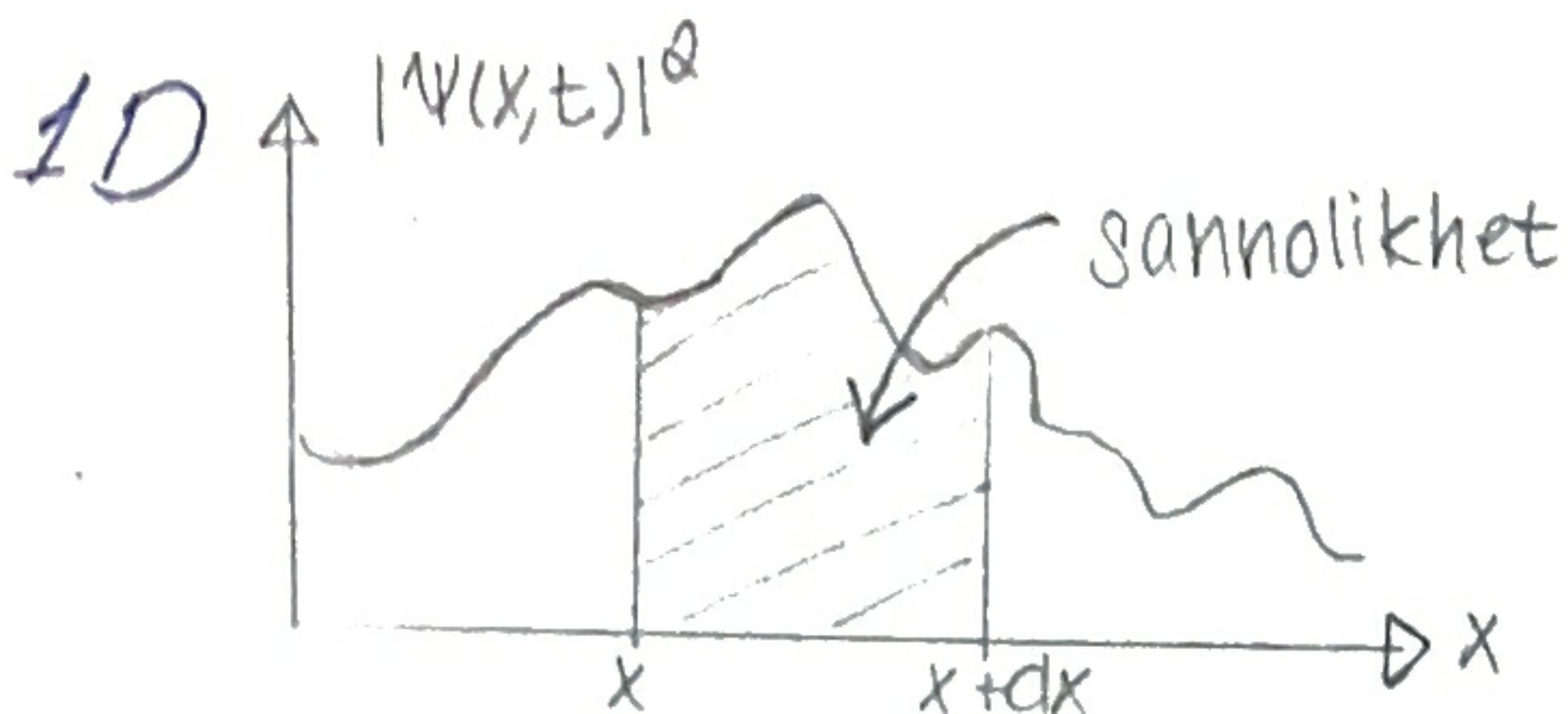
$\{x(t), p(t)\} \leftrightarrow \Psi(x, t)$? Hur kan $\Psi(x, t)$ beskriva en partikel?

Borns statistiska tolkning

$|\Psi(x, t)|^2 dx =$ sannolikheten att hitta partikeln i intervallet

$[x, x+dx]$

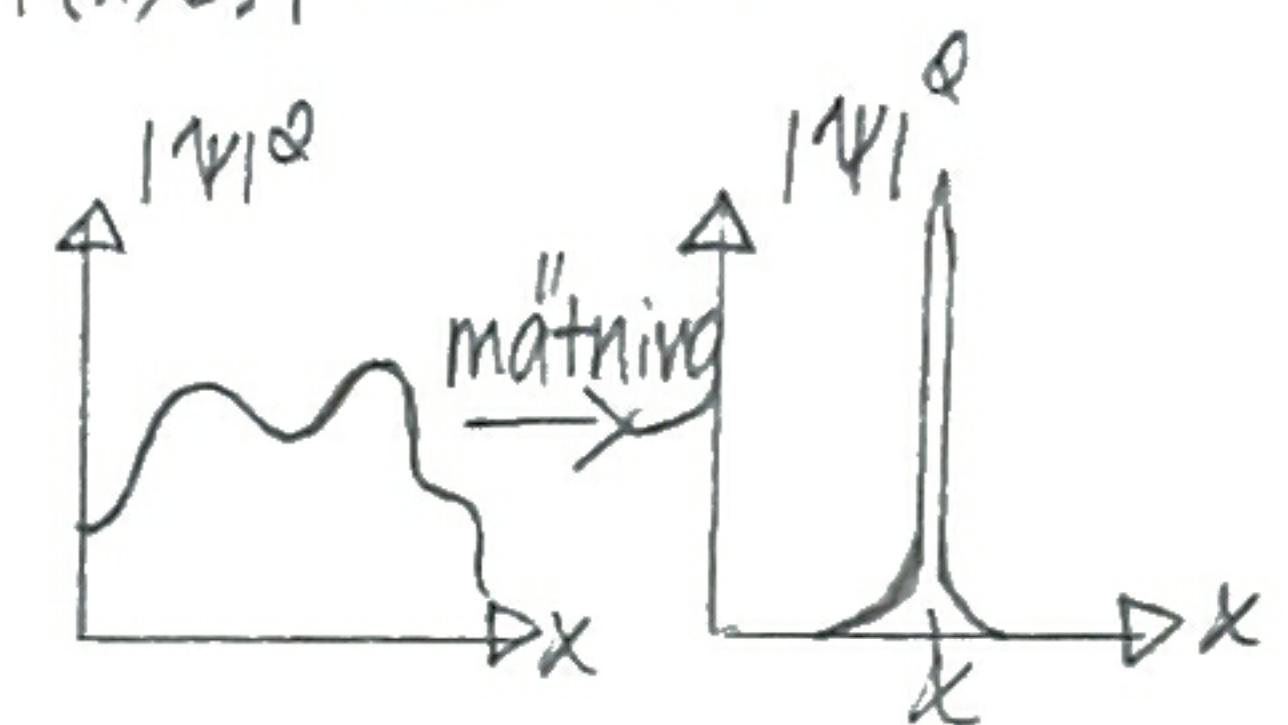




Normera $\psi(x,t)$ s.d.
 $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = 1.$

När vi möter en partikels position:
 Sannolikheten måste bevaras!

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = 0 ?$$



$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial t} |\psi(x,t)|^2 dx, \quad \frac{\partial}{\partial t} |\psi(x,t)|^2 = \frac{\partial}{\partial t} (\psi \cdot \psi^*) = \frac{\partial \psi}{\partial t} \psi^* + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t}$$

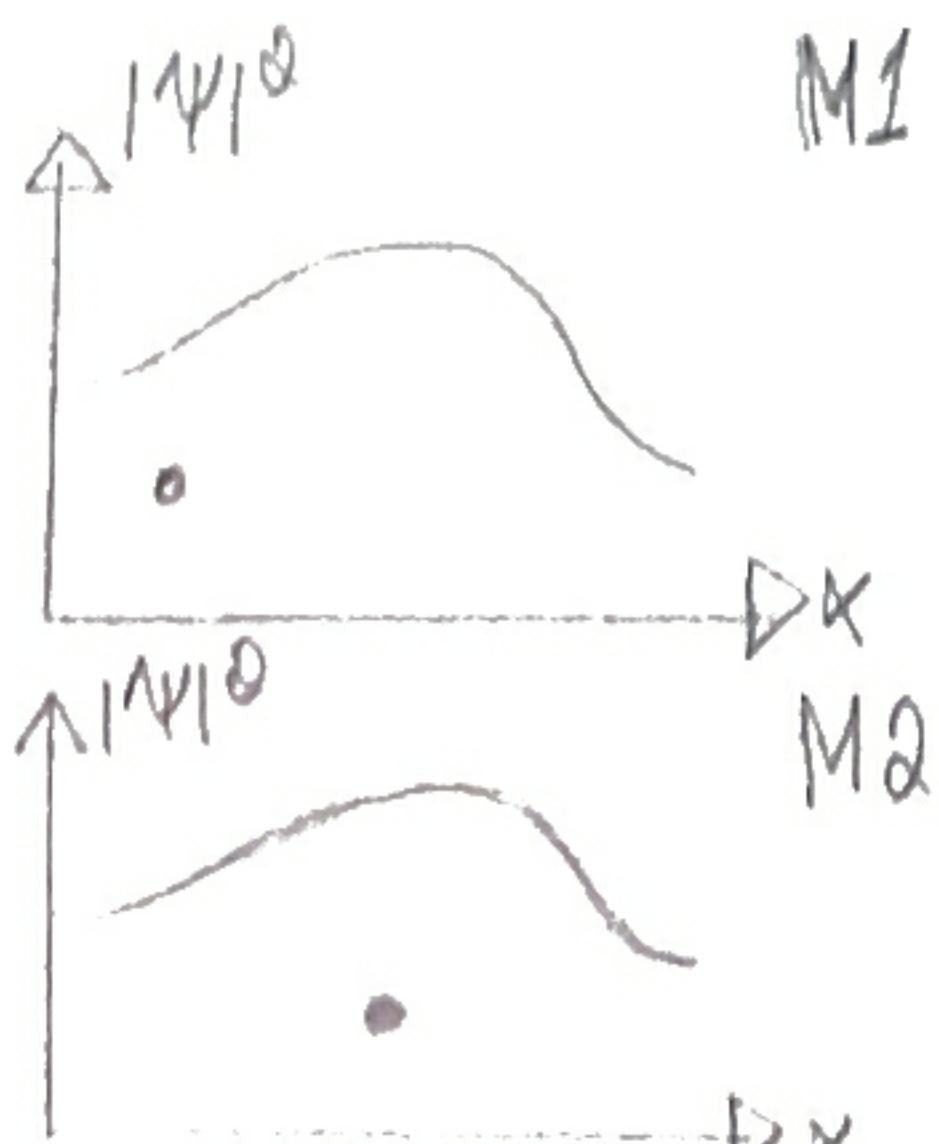
Schrödingerekvationen

$$\begin{cases} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{\partial m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar} V \psi \\ \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{\partial m} \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} + \frac{i}{\hbar} V \psi^* \end{cases}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 = \frac{\partial \psi}{\partial t} \psi^* + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \frac{i\hbar}{\partial m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \psi^* - \psi \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} \right) \\ = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{i\hbar}{\partial m} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi \right) \right]$$

$$\rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{i\hbar}{\partial m} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi \right) \right] dx = \frac{i\hbar}{\partial m} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi \right) \Big|_{-\infty}^{\infty} = 0$$

Väntevärde! Givet en funktion f säges dess väntevärde av
 $\langle f \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f |\psi|^2 dx.$



$\langle f \rangle$ är ett ensambelmedelvärde.

Väntevärdet av en funk. f är medelvärdet av ett stort antal mätningar på identiska system

Väntevärdet av positionen:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x |\psi|^2 dx \Rightarrow \frac{d \langle x \rangle}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} x |\psi|^2 dx =$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x \frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} dx \stackrel{SE}{=} i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} x \frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) dx \stackrel{P.I.}{=} -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) dx.$$

Väntevärde av rörelsemängden:

$$\langle p \rangle = m \frac{d \langle x \rangle}{dt} = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx.$$

Skriv detta som $\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x \Psi dx$

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi dx.$$

x & p är operatorer: $x \rightarrow x$ & $p \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$.

Alla klassiska dynamiska variabler, t.ex. kinetisk energi, kan skrivas som funktioner av (x, p) .

\Rightarrow Metod att beräkna väntevärdet för alla klassiska dynamiska storheter.

Klassisk dynamisk variabel: $F = F(x, p)$

$$\langle F \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* F(x, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) \Psi dx.$$

Ex: kinetisk energi $T = \frac{1}{2} mv^2 = \frac{p^2}{2m}$

$$\Rightarrow \langle T \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \Psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \left(-i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) dx$$

$$\langle T \rangle = \frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \left(-i\hbar \right)^2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) dx = \frac{-\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} dx.$$

Newton's II:a lag: $\frac{dp}{dt} = F \neq -\frac{\partial V}{\partial x}$ \star = konservativa krafter

$$\langle p \rangle = -i\hbar \int \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx, \quad \frac{d \langle p \rangle}{dt} = -i\hbar \frac{d}{dt} \int \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx =$$

$$= -i\hbar \int \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t}) dx = -i\hbar \int \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \frac{\partial \psi}{\partial x} + \psi^* \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \right) dx =$$

$$= -i\hbar \int \left(-i\hbar \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} + \frac{i}{\hbar} V \psi^* \right) \frac{\partial \psi}{\partial x} dx - i\hbar \int \psi^* \frac{\partial}{\partial x} \left(i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{i}{\hbar} V \psi \right) dx$$

$$\frac{d\langle \rho \rangle}{dt} = \frac{-i\hbar}{\partial m} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} dx}_{\rightarrow 0, x \rightarrow \pm \infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial V}{\partial x} |\psi|^2 dx$$

$$\Rightarrow \frac{d\langle \rho \rangle}{dt} = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial V}{\partial x} |\psi|^2 dx = - \langle \frac{\partial V}{\partial x} \rangle$$

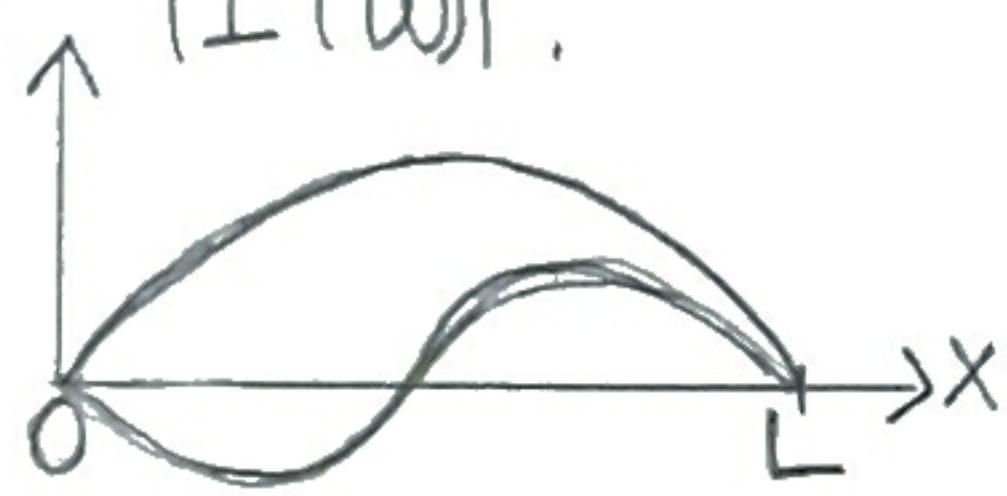
2018 09 06

Tors Lv1 Räkneövning

Plancks strålningslag: energitäthet i svartkroppsstrålning
Stående vågor med frekvens ω .

Energitäthet $|I(\omega)|^2$.

1D exempel



$$P(E, \omega) = \frac{1}{Z} e^{-E/kT}, \quad \text{temp. } T, \text{ Boltzmanns konst. } k$$

$$Z \text{ normeringsfaktor s.a. } \int P(E, \omega) dE = 1 \\ \Rightarrow Z = kT \quad \& \quad P = \frac{e^{-E/kT}}{kT}$$

$$\text{Väntevärde } \bar{E}(\omega) = \int E P(E, \omega) dE = \int_{kT}^{\infty} E e^{-E/kT} dE = kT.$$

$$E_{\text{tot}} = \sum_{\omega} \bar{E}(\omega) = \sum_{\omega} kT = kT \sum_{\omega} = \infty, \text{ klassiskt}$$

"Kvant", $E_n = \hbar \omega n$, $n = 0, 1, 2, \dots$

$$P(E_n, \omega) = \frac{e^{-E_n/kT}}{Z}, \quad 1 \equiv \sum_n P(E_n, \omega) = \frac{1}{Z} \sum_n e^{-\frac{\hbar \omega n}{kT}}$$

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\hbar \omega n / kT} = \sum_0^{\infty} (e^{-\hbar \omega / kT})^n = \{\text{geom. summa}\} = \frac{1}{1 - e^{-\hbar \omega / kT}}$$

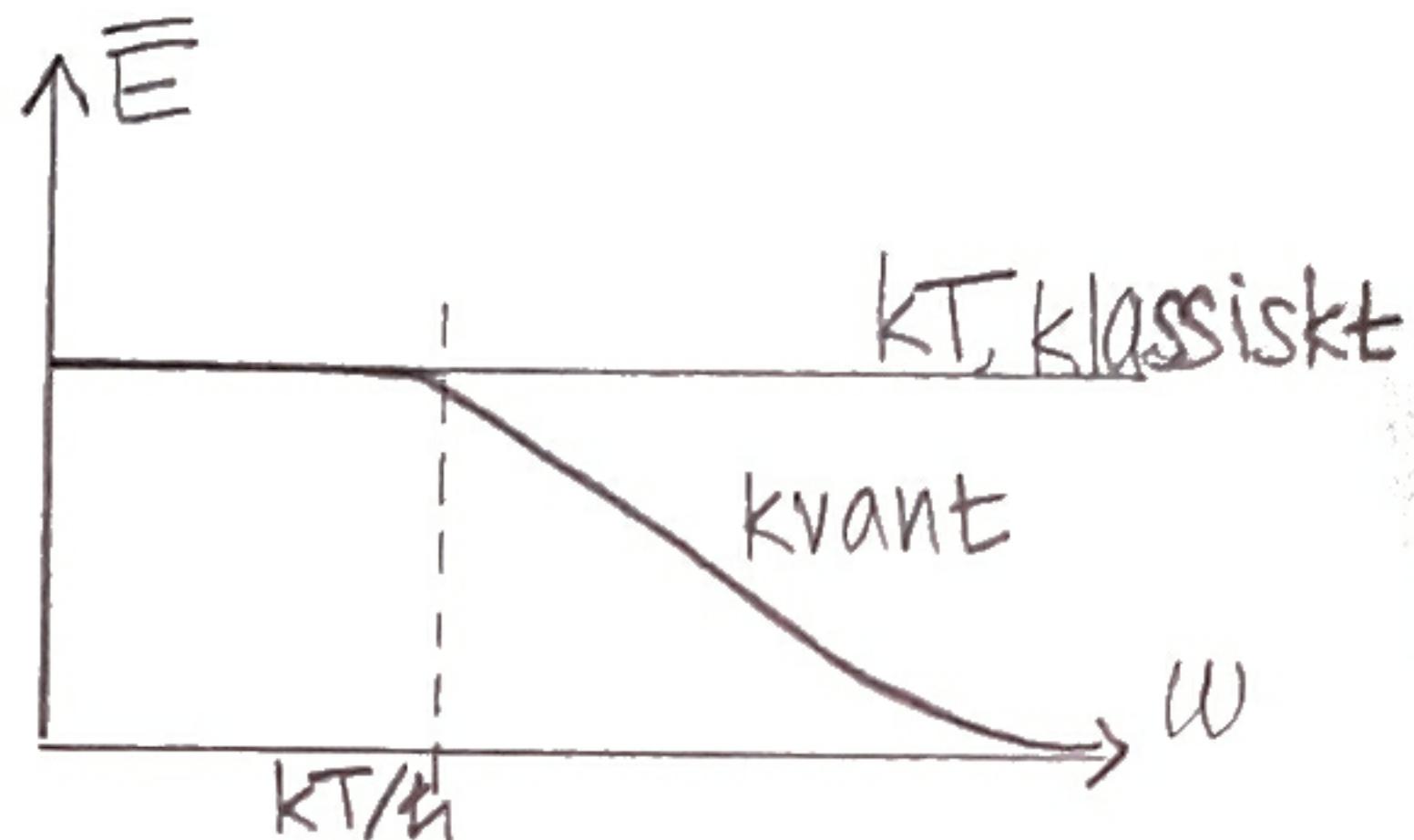
$$\Rightarrow P(E_n, \omega) = (1 - e^{-\hbar \omega / kT}) e^{-\hbar \omega n / kT}$$

$$\bar{E}(\omega) = \sum_{n=0}^{\infty} E_n P(E_n, \omega) = \sum_{n=0}^{\infty} \hbar \omega n (1 - e^{-\hbar \omega / kT}) e^{-\hbar \omega n / kT}$$

$$\beta = \frac{1}{kT} \Rightarrow \bar{E}(\omega) = (1 - e^{-\beta \hbar \omega}) \underbrace{\sum_{n=0}^{\infty} \hbar \omega n e^{-\beta \hbar \omega n}}_{= -\frac{\partial}{\partial \beta} e^{-\beta \hbar \omega n}} = (1 - e^{-\beta \hbar \omega}) \frac{\partial}{\partial \beta} \frac{1}{1 - e^{-\beta \hbar \omega}} =$$

$$= \frac{\hbar \omega n e^{-\hbar \omega / kT}}{1 - e^{-\hbar \omega / kT}}.$$

$$E_{\text{tot}} = \sum_{\omega} \bar{E}(\omega) = \sum_{\omega} \hbar \omega / (e^{\hbar \omega / kT} - 1)$$



Bohrs atommodell

$$J = \hbar n, \quad n=0, 1, 2, \dots$$



$$E = -\frac{ze}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r^3}$$

$$F = -eE = -\frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r^3} = -K \frac{1}{r^3}$$

$$\text{Centralrörelse: } |F| = \frac{mv^2}{r} = \frac{K}{r^2}$$

$$\Rightarrow v = \sqrt{\frac{K}{mr}}$$

$$\text{Rörelsemängdsmoment } \hbar n = J = mvr = \sqrt{mKr}$$

$$\sqrt{mKr} = \hbar n \Rightarrow r = r_n = \frac{\hbar^2 n^2}{mK} \text{ (dvs. de olika e-skalen)}$$

Introducera potential $F = -\nabla V$, $V = -K/r$.

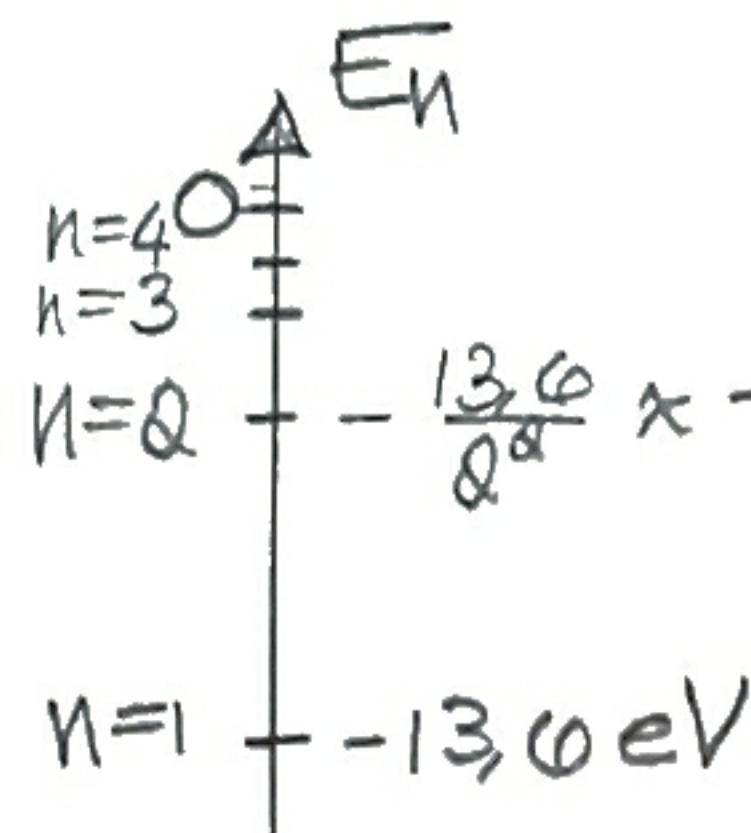
$$E = \frac{mv^2}{2} + V(r) = \frac{mv^2}{2} - \frac{K}{r} = -\frac{K}{2r} \quad (\text{ty } v = \sqrt{\frac{K}{mr}})$$

$$E_n = -\frac{K}{2r_n} = -\frac{mK^2}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -E_0 \frac{Z^2}{n^2}, \quad E_0 = \frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} \approx 13,6 \text{ eV}$$

ioniseringssenergin för värde

Vätgas

$$z=1, \quad E_n = -\frac{13,6}{n^2}, \quad n=1, 2, 3, \dots$$



Tillåtna frekvenser

$$\omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar} = \frac{13,6}{\hbar} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad \text{synligt ljus: } m=2, \quad \omega_n = \frac{13,6}{\hbar} \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

2018 09/10

Män LvQ

Kvantmekanik

$$p \rightarrow \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

Schrödingerkv.

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) \rightarrow \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

Väntevärden

$$\langle f \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) |\Psi|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* f(x) \Psi dx$$

Ehrenfest teorem

$$\frac{d\langle p \rangle}{dt} = \langle -\frac{\partial V}{\partial x} \rangle$$

Ett annat sätt att se kvantmekaniken

Postulat 1 för varje väldef. observabel A så finns en operator \hat{A} .

Postulat 2 mätningar av obeservabeln A som ger värdet a lämnar systemet i ett tillstånd Ψ_a , där Ψ_a är egenfunktionen till \hat{A} , med egenvärde a .

Postulat 3 tillståndet hos ett system kan representeras av en vågfunktion Ψ som innehåller all info om systemet.

Postulat 4 tillståndet hos ett system följer tidsutv. som ges av $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi$.

$$\text{Ex: } \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)$$

Väntevärde $\langle f \rangle$, $|ψ|^2 dx$ sannolikheten att systemet befinner sig i intervallet $[x, x+dx]$

Ett möjligt mått på avvikelsen vi kan förvänta oss från väntevärdet.

$$\langle f \rangle \quad \langle \Delta f \rangle = \langle f - \langle f \rangle \rangle = \int (f - \langle f \rangle) |ψ|^2 dx = \int f |ψ|^2 dx - \langle f \rangle \int |ψ|^2 dx = 0.$$

$$(\Delta f)^2 = (f - \langle f \rangle)^2 = f^2 + \langle f \rangle^2 - 2f \langle f \rangle$$

$$\langle (\Delta f)^2 \rangle = \langle f^2 + \langle f \rangle^2 - 2f \langle f \rangle \rangle = \int (f^2 + \langle f \rangle^2 - 2f \langle f \rangle) |ψ|^2 dx = \langle f^2 \rangle + \langle f \rangle^2 - 2f \int f |ψ|^2 dx = \langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2$$

Standardavvikelsen $\sigma = \sqrt{\langle (\Delta f)^2 \rangle}$

En första titt på osäkerhetsrelationen

Våg 1  • väldef. våglängd
• okänd position

Våg 2  • okänd våglängd
• väldef. position

Inversa sambandet mellan våglängd & position?

Enl. de Broglie: $p = \frac{h}{\lambda}$, sambandet ser därför ut som

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{h}{2}$$

$$\sigma_x = \sqrt{\langle (\Delta x)^2 \rangle}, \quad \sigma_p = \sqrt{\langle (\Delta p)^2 \rangle}$$

Skrivs ofta som $\Delta x \Delta p \geq \frac{h}{2}$ Heisenbergs osäkerhetsrelation

För partikel $E = \frac{p^2}{2m}$, differentialet $\Delta E = \frac{\partial E \Delta p}{\partial m} = \frac{p \Delta p}{m} = v \Delta p$.

$$\text{Men } v = \frac{\Delta x}{\Delta t} \Leftrightarrow \Delta t = \frac{\Delta x}{v}, \quad \Delta x \geq \frac{h}{\Delta p} \Rightarrow \Delta t \geq \frac{h}{\Delta p v} \geq \frac{h}{Q \Delta E} \Rightarrow \underline{\underline{\Delta E \Delta t \geq h/2}}$$

Den tidsberoende Schrödingerekvationen

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi = \frac{p^2}{2m} \Psi + V\Psi.$$

$$\text{Låt } \Psi = \psi(x) e^{-iEt/\hbar} \Rightarrow \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar} \Psi.$$

Sätt in i Schrödingerekvationen

$$E\Psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x), \text{ den stationära S.E.}$$

$$1. |\Psi|^2 = \Psi^* \Psi = \psi^*(x) e^{iEt/\hbar} \psi(x) e^{-iEt/\hbar} = \psi^*(x) \psi(x) = |\psi|^2$$

Stationära lösningar har tidsbero. sannolikhet. Väntevärden är tidsbero.

$$\text{Observabel } F(x, p) \Rightarrow \langle F \rangle = \int \Psi^* F \Psi dx$$

$$\langle F \rangle = \int \psi^*(x) F(x, -i\hbar/2m) \psi(x) dx$$

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = 0 \Rightarrow \langle p \rangle = m \frac{d\langle x \rangle}{dt} = 0$$

2. Energin

$$\langle H \rangle = \int \Psi^* \hat{H} \Psi dx = \int \psi^* E \psi dx = E \int |\psi(x)|^2 dx = E.$$

Väntevärdet kontra standardavvikelsen

$$\hat{H}^2 \Psi = \hat{H}(\hat{H}\Psi) = \hat{H}(E\Psi) = E(\hat{H}\Psi) = E^2 \Psi \Rightarrow \langle H^2 \rangle = E^2$$

$$\Rightarrow \sigma_H = \sqrt{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2} = \sqrt{E^2 - E^2} = 0$$

3. Lösningen till tidsberöende SE kan skrivas

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$$

$\psi_n(x)$ är lösning till stationära SE, randenergin E_n .

Uppgift 2.2

$$\text{Stationära SE } \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{-2m}{\hbar^2} (V(x) - E) \psi(x)$$

$V(x) > V_{\min}$, men antag $E < V_{\min}$.

$$\Rightarrow V(x) - E > 0 \quad \forall x \Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} > 0$$

- $\Rightarrow \frac{d\psi}{dx}$ är en strikt växande funktion,
- $\Rightarrow \psi$ ej begränsad! Ej normaliseras!
- $\Rightarrow E > V_{\min} \ H(x)$

Uppgift Q.1 Hur vet vi att E är reell?

$$\Psi(x,t) = \psi(x) e^{-iEt/\hbar}$$

Antag $E = E_0 + iT$, E_0, T reella.

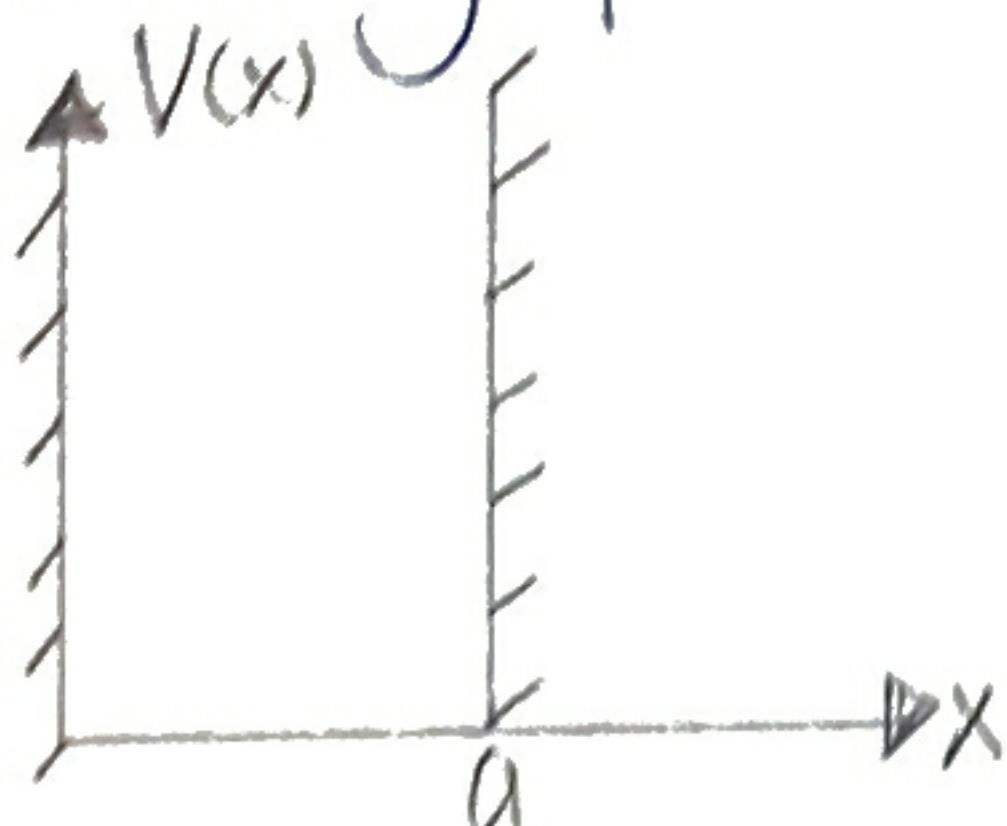
$$\tilde{\Psi}(x,t) = \psi(x) e^{-iE_0 t/\hbar} e^{-Tt/\hbar}$$

$$|\tilde{\Psi}(x,t)|^2 = |\psi(x)|^2 e^{2Tt/\hbar}$$

$$\text{Krav } \int_{-\infty}^{\infty} |\tilde{\Psi}(x,t)|^2 dx = 1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 e^{2Tt/\hbar} dx$$

\Rightarrow ej begränsad!

Oändlig potential



$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x < a \\ \infty & -\infty < x < 0, a < x < \infty \end{cases}$$

Sannol. att hitta potentialen utanför $[0, a]$ är 0. $\rightarrow \psi(x) = 0$ för x utanför $[0, a]$

Innanför potentialväggarna

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi, \quad \underline{\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0 \quad \text{där } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}}$$

Lösningar på formen $\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$.

$\psi(x)$ ska vara 0 på $x = 0$ & $x = a$

$$\psi(0) = B = 0, \quad \psi(a) = A \sin(ka) = 0 \Rightarrow \sin(ka) = 0$$

$$ka = 0, \pm \pi, \pm 2\pi, \dots$$

$$k_n = \frac{n\pi}{a}, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

2018 09/13

Tors Lv2

Stationära Schrödingerekvationen

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V \Psi$$

$$\Psi(x, t) = \psi(x) e^{-iEt/\hbar}$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi}{dx^2} = (V-E)\Psi$$

1. $|\Psi|^2 = |\psi(x)|^2$ tidsoblig.

2. $\langle H \rangle = \left\langle \frac{P^2}{2m} + V \right\rangle = E$, konstant. $\sigma_H = 0$

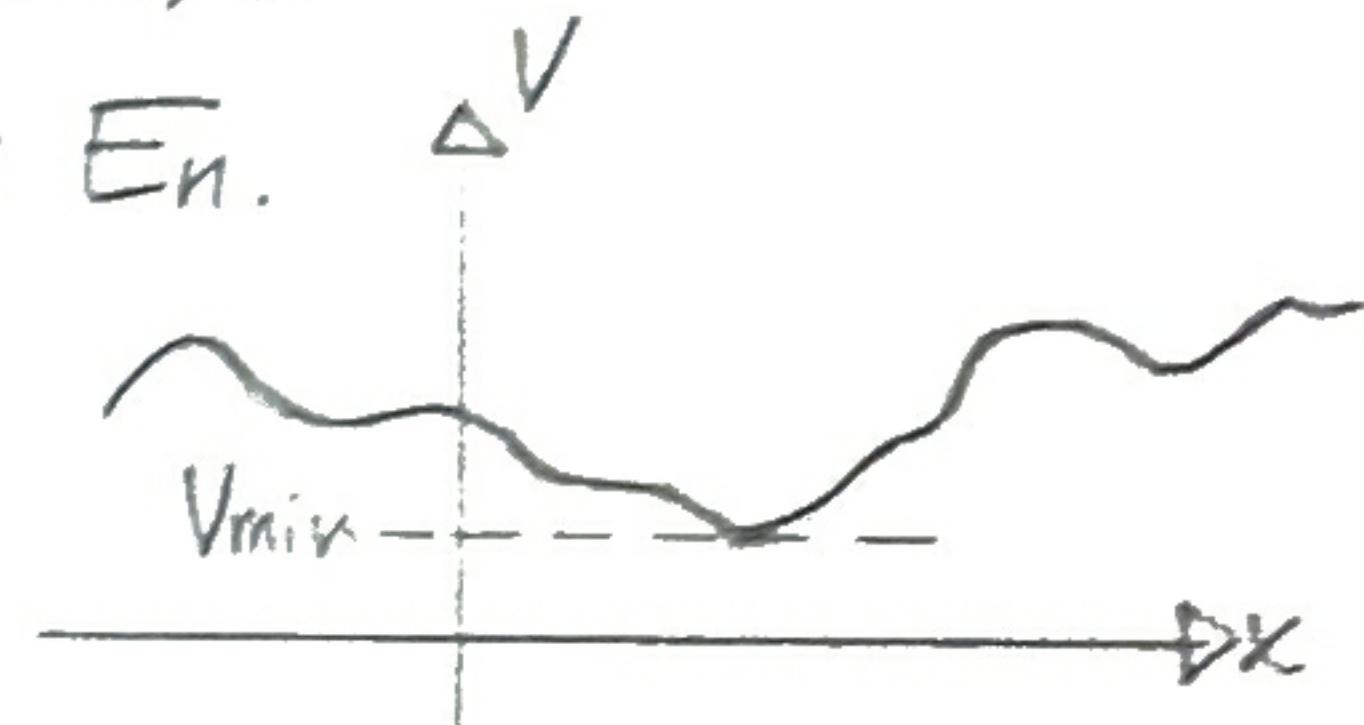
3. Lösningar till SE kan skrivas som en linj. komb. av stationära lösningar: $\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$
 $|C_n|^2$: sannolikheten att mäta energin E_n .

a) Energin är alltid reell, $E \in \mathbb{R}$

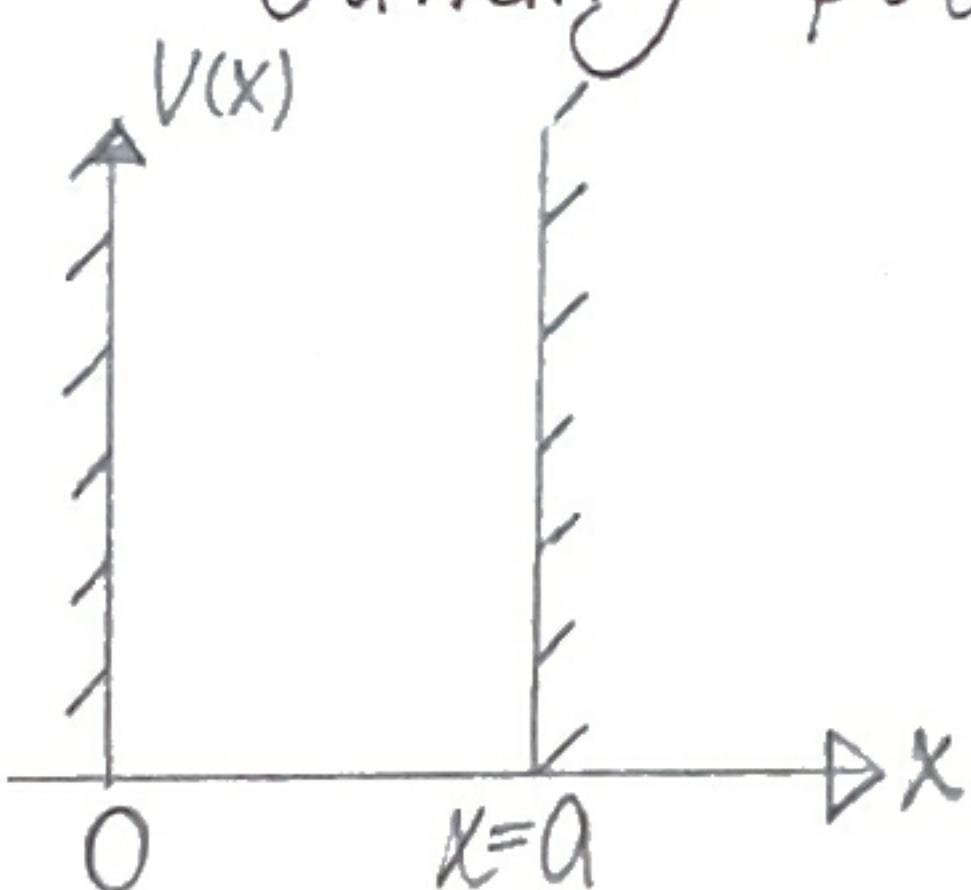
b) $E > V_{\min}$, $\frac{d^2 \Psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E) \Psi$.

Antag att $E < V_{\min}$.

$\Rightarrow \frac{d^2 \Psi}{dx^2} & \text{ & } \Psi \text{ har samma tecken } \forall x \Rightarrow \Psi(x) \text{ kan ej vara begränsad!}$



Oändlig potentialbrunn



$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq a \\ \infty, & -\infty < x < 0, a < x < \infty \end{cases}$$

Sannolikheten att hitta partikeln i $-a < x < 0$, $a < x < \infty$ är noll

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi, \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\Psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx).$$

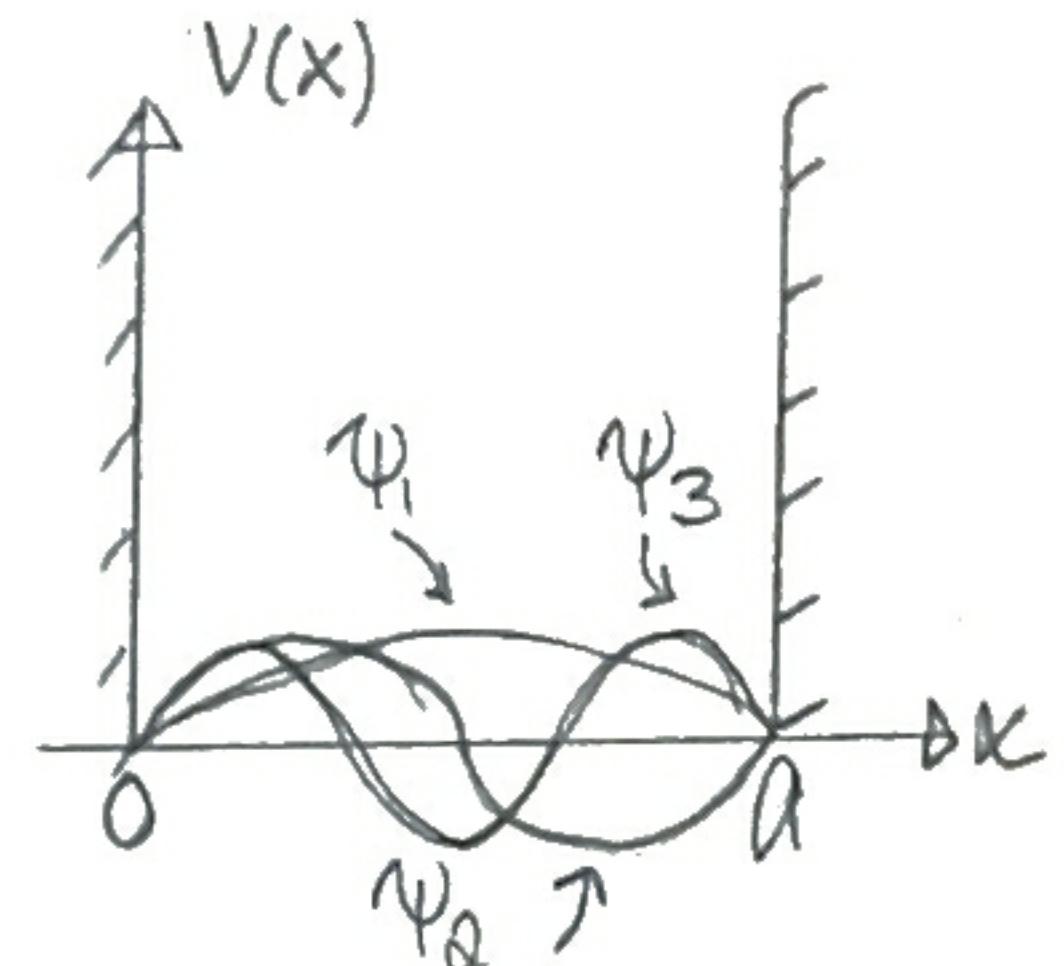
Rönd tillkoret Ψ kontinuerlig $\Rightarrow B=0$, $k_n = n\pi/a$ $n=1, 2, \dots$

$$\Rightarrow E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dx = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{a}} \quad \text{Normalisering.}$$

$$\Rightarrow \Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right)$$

$$\text{Grundtillstånd} \text{ då } n=1, \quad E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

$$\text{Ortogonalitet} \quad \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_m^*(x) \Psi_n(x) dx = 0 \text{ om } m \neq n$$



$$\begin{aligned} \int \Psi_m^*(x) \Psi_n(x) dx &= \int \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{m\pi}{a} x\right) \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) dx \\ &= \frac{2}{a} \int \sin\left(\frac{m\pi}{a} x\right) \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) dx = \frac{1}{a} \int \cos\left(\frac{m-n}{a} \pi x\right) - \cos\left(\frac{m+n}{a} \pi x\right) dx \\ &= \left[\frac{\sin\left(\frac{\pi x}{a} (m-n)\right)}{(m-n)\pi} - \frac{\sin\left(\frac{\pi x}{a} (m+n)\right)}{(m+n)\pi} \right]_0^a = 0 \end{aligned}$$

Vi har också att $\int |\Psi|^2 dx = 1 \Rightarrow \int \Psi_m^* \Psi_n dx = \delta_{mn}$, $\{\Psi_n\}$ utgör en orthonormerad bas.

\Rightarrow Alla andra funktioner $f(x)$ kan skrivas som $f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n(x)$
där $c_n = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^*(x) f(x) dx$.

$$(\text{Dirichlets sats}) \quad \Psi_n(x, t) = \Psi_n(x) e^{-i E_n t / \hbar}$$

$$\Rightarrow \Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n(x, t), \quad \Psi(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n(x)$$

$$\Rightarrow c_n = \int \Psi_n^*(x) \Psi(x, 0) dx$$

$$\text{Normalisering:} \quad \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1 \quad \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, 0)|^2 dx = 1$$

$$\Rightarrow 1 = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\sum_{n=1}^{\infty} c_n^* \Psi_n^*(x) \right) \left(\sum_{m=1}^{\infty} c_m \Psi_m(x) \right) dx = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} c_n^* c_m \int \Psi_n^*(x) \Psi_m(x) dx$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} c_n^* c_m \delta_{mn} = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2$$

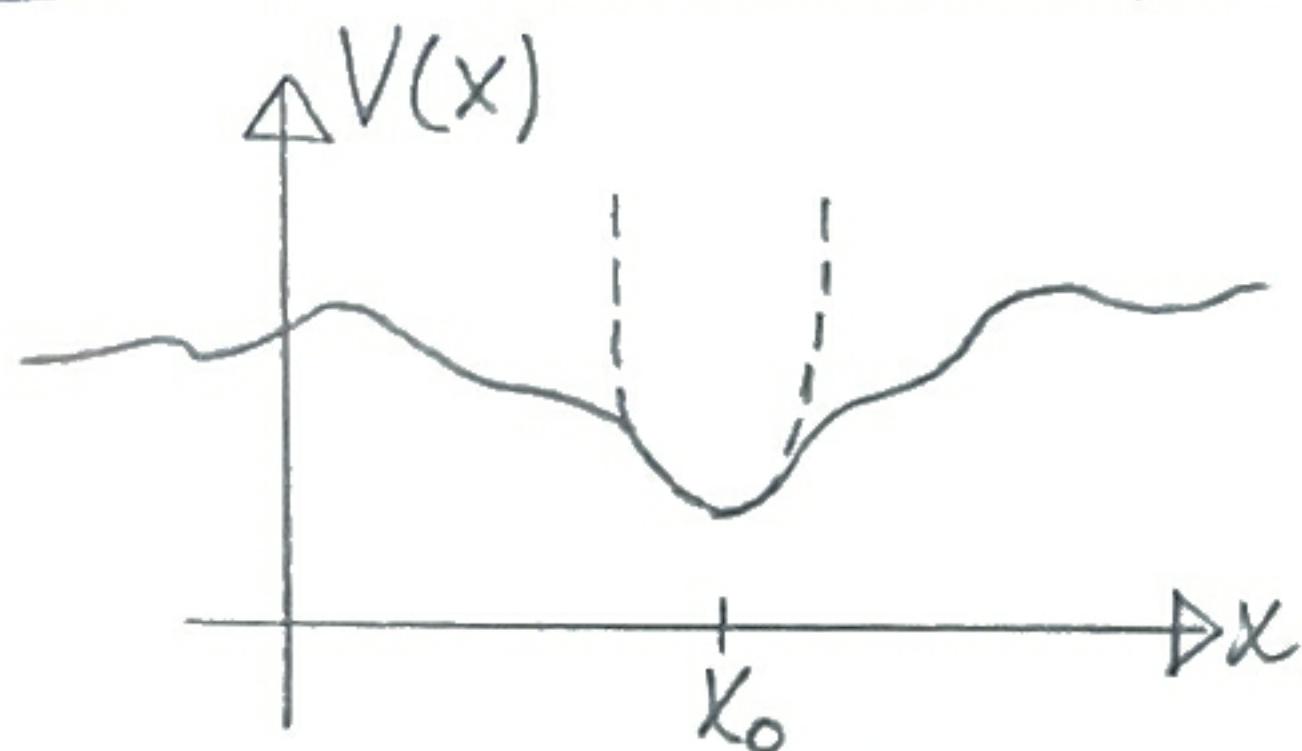
Väntevärdet på energin

$$\langle H \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{H} \Psi dx.$$

$$\langle H \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\sum C_m^* \psi_m^* \right) \hat{H} \left(\sum C_n \psi_n \right) dx. \quad Vi \text{ vet att } \hat{H} \psi_n = E_n \psi_n$$

$$\Rightarrow \langle H \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\sum_m C_m^* \psi_m^* \right) \left(\sum_n C_n E_n \psi_n \right) dx = \sum_m \sum_n C_m^* C_n E_n \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n dx = \\ = \sum_m \sum_n \delta_{mn} C_m^* C_n E_n = \sum_n |C_n|^2 E_n$$

Den harmoniska oscillatorn



$$V(x) = V(x_0) + \frac{dV}{dx} \Big|_{x_0} (x - x_0) + \frac{1}{2} \frac{d^2V}{dx^2} \Big|_{x_0} (x - x_0)^2 + O(x^3)$$

$$V(x_0) \text{ minima} \Rightarrow \frac{dV}{dx} \Big|_{x_0} = 0 \\ \Rightarrow V(x) \approx \frac{1}{2} \frac{d^2V}{dx^2} \Big|_{x_0} (x - x_0)^2$$

Kvadrat i x \Rightarrow harmonisk oscillator.

Skriv potentialen som $V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$.

Stationära SE: $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \psi = E \psi$.

Eftersom $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Rightarrow \frac{1}{2m} (\hat{p}^2 + (m\omega x)^2) \psi = E \psi$.

Kvadratiskt i \hat{p} & $H \Rightarrow$ produkt mellan operatorer som beror på \hat{p}, x . $\hat{p}x \neq x\hat{p}$.

$$\text{Först: } (x\hat{p} - \hat{p}x) f(x) = f(x) i\hbar \frac{d}{dx} + i\hbar \frac{df}{dx} \\ = i\hbar \left(-x \frac{df}{dx} + f(x) + x \frac{df}{dx} \right) = i\hbar f(x).$$

Låt $[x, \hat{p}] \equiv x\hat{p} - \hat{p}x \Rightarrow [x, \hat{p}] = i\hbar \quad (x \text{ operator})$

$$\text{Bilda: } \hat{a}_{\pm} \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (\mp i\hat{p} + m\omega x)$$

Kvadraten av \hat{a}_\pm

$$\begin{aligned}\hat{a}_- \hat{a}_+ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi m\omega}} (i\hat{p} + m\omega x) \frac{1}{\sqrt{2\pi m\omega}} (-i\hat{p} + m\omega x) = \\ &= \frac{1}{2\pi m\omega} (\hat{p}^2 - i m\omega x \hat{p} + i \hat{p} m\omega x + (m\omega x)^2) = \frac{1}{2\pi m\omega} (\hat{p}^2 - i m\omega [x, \hat{p}] + (m\omega x)^2)\end{aligned}$$

$$\hat{a}_- \hat{a}_+ = \frac{1}{2\pi m\omega} [\hat{p}^2 + (m\omega x)^2] - \frac{i}{2\pi m\omega} [x, \hat{p}] = \frac{1}{\hbar\omega} \hat{H} + \frac{1}{2},$$

$$\text{dvs. } \hat{H} = \hbar\omega (\hat{a}_- \hat{a}_+ - \frac{1}{2})$$

$$\text{P.S.S. } \hat{H} = \hbar\omega (\hat{a}_+ \hat{a}_- + \frac{1}{2}).$$

$$\text{Station\"ara } \delta E \Rightarrow \hbar\omega (\hat{a}_\pm \hat{a}_\mp \pm \frac{1}{2}) \psi = E \psi$$

Egenskaper hos \hat{a}_\pm

Tillstånd ψ med energi E : $\hat{H}\psi = E\psi$. Vad är då $\hat{a}_+ \psi$ för tillstånd? $\Rightarrow \hat{H}(\hat{a}_+ \psi) = \hbar\omega (\hat{a}_+ \hat{a}_- + \frac{1}{2})(\hat{a}_+ \psi) = \hat{a}_+ [\hbar\omega (\hat{a}_- \hat{a}_+ + \frac{1}{2})] \psi =$
 $= \{\hat{a}_- \hat{a}_+ - \hat{a}_+ \hat{a}_- = 1\} = \hat{a}_+ [\hbar\omega (\hat{a}_+ \hat{a}_- + 1 + \frac{1}{2})] \psi = \hat{a}_+ [\hbar\omega (\hat{a}_+ \hat{a}_- + \frac{1}{2}) + \hbar\omega] \psi =$
 $= \hat{a}_+ [\hat{H} + \hbar\omega] \psi.$

$$\hat{H}(\hat{a}_+ \psi) = \hat{a}_+ (E + \hbar\omega) \psi = (E + \hbar\omega) \hat{a}_+ \psi.$$

Om ψ har energin $E \Rightarrow \hat{a}_+ \psi$ har energin $E + \hbar\omega$.

$$\text{P.S.S. } \hat{H}(\hat{a}_- \psi) = (E - \hbar\omega) \hat{a}_- \psi.$$

\hat{a}_+ kreationsoperator

\hat{a}_- annihilationsoperator

Q018 09/13

Tora Lv& Räkneövning

$$1.9 \quad \Psi = A e^{-\alpha \left(\frac{m x^2}{\hbar} + it \right)}$$

- a) $A = ?$ b) $V(x) = ?$ c) $\langle x \rangle, \langle x^2 \rangle, \langle p \rangle, \langle p^2 \rangle ?$ d) $\sigma_x, \sigma_p, \sigma_x \sigma_p \geq 5/2 ?$

d) a) $1 - \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dx = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{2amx^2}{\hbar}} dx = \left\{ z = \sqrt{\frac{2am}{\hbar}} x, dz = \sqrt{\frac{2am}{\hbar}} dx \right\}$
 $= A^2 \sqrt{\frac{\hbar}{2am}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} dz = A^2 \sqrt{\frac{\pi \hbar}{2am}} \Rightarrow A = \left(\frac{2am}{\pi \hbar} \right)^{1/4}$

b) Schrödinger $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x)\Psi$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -ia\Psi, \quad \frac{\partial \Psi}{\partial x} = -\frac{2am}{\hbar} x\Psi, \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{2am}{\hbar} (\Psi + x\Psi) = -\frac{2am}{\hbar} \left(1 - \frac{2am}{\hbar} x^2\right) \Psi$$

$$i\hbar(-ia)\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{2am}{\hbar}\right) \left(1 - \frac{2am}{\hbar} x^2\right) \Psi + V(x)\Psi$$

$$\Rightarrow V(x) = 2amx^2$$

Klassiskt $F = -\frac{\partial V}{\partial x} = 4amx = -kx, \quad k = 4am$

c) $\langle x \rangle = \int dx x |\Psi|^2 = \text{konst.} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} z e^{-z^2} dz = 0$

$$\langle x^2 \rangle = \int dx x^2 |\Psi|^2 \stackrel{*}{=} \underbrace{\frac{\hbar}{2am} \int_{-\infty}^{\infty} s^2 e^{-s^2} ds}_{=\pi/2} = \frac{\hbar}{4am} \quad * A^2 \left(\frac{\hbar}{2am}\right)^{3/2}, \quad A^2 = \sqrt{\frac{2am}{\pi \hbar}}$$

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \underbrace{\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi}_{= 2amx\Psi} dx = 2am \int_{-\infty}^{\infty} x |\Psi|^2 dx = 0$$

$$P^2 = (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x} (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x} = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}, \quad \langle P^2 \rangle = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} dx =$$

$$= 2am \hbar \int_{-\infty}^{\infty} \left(1 - \frac{2am}{\hbar} x^2\right) |\Psi|^2 dx = 2am \hbar - 4am^2 \langle x^2 \rangle = am \hbar$$

d) $\sigma_x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\hbar}{am}}$

$$\sigma_p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} = \sqrt{am \hbar}$$

$$1.14 \quad a) \quad P_{ab} = \int_a^b |\Psi|^2 dx, \quad \frac{dP_{ab}}{dt} = ?$$

b) J med Ψ från 1.9 (J -ström)

$$\text{L} \quad \frac{dP_{ab}}{dt} = \int_a^b \frac{d|\Psi|^2}{dt} dx, \quad g(t,x) = |\Psi|^2 = \Psi^* \Psi.$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x) \Psi \right), \quad \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + V(x) \Psi^* \right)$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} + \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Psi \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x) \Psi^* \Psi - V(x) \Psi \Psi^* \right) =$$

$$= -\frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} - \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \right) = -\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) = -\frac{\partial J}{\partial x}$$

$$J = \frac{-i\hbar}{2m} \left(\Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) \Rightarrow \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial x} = 0$$

$$\Rightarrow \frac{\partial P_{ab}}{\partial t} = \int_a^b \frac{\partial S}{\partial t} dx = - \int_a^b \frac{\partial J}{\partial x} dx = J(a) - J(b).$$

$$b) \quad \Psi(t,x) = u(x) e^{-i\omega t}, \quad u \text{ reell}$$

$$J = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\underbrace{e^{-i\omega t} e^{i\omega t}}_1 u \frac{\partial u}{\partial x} - \underbrace{e^{i\omega t} e^{-i\omega t}}_1 u \frac{\partial u}{\partial x} \right) = 0$$

$$1.17 \quad V = V_0 - i\Gamma, \quad \frac{\partial S}{\partial t} = ?$$

$$\text{L} \quad \text{Från 1.14} \quad \frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) + \frac{i}{\hbar} (V^* - V) S \stackrel{=2i\Gamma}{=} 0$$

$$= -\frac{\partial J}{\partial x} - \frac{\partial \Gamma}{\hbar} S$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial S}{\partial t} dx = J(-\infty) - J(\infty) - \frac{\partial \Gamma}{\hbar} P$$

$$\Rightarrow \frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{\partial \Gamma}{\hbar} P \Rightarrow P(t) = P(0) e^{-\frac{\partial \Gamma t}{\hbar}}$$

Qo18 09 17

Mån Lv3

Rep: Den harmoniska oscillatorn

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2. \quad \text{Stationära S.E. } \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \psi = E \psi$$

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx} \Rightarrow \frac{1}{2m} (\hat{p}^2 + (m\omega x)^2) \psi = E \psi$$

Skriva på kvadratisk form \Rightarrow Kommutationsrelationen mellan \hat{x} & \hat{p} $\Rightarrow [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$.

$$\text{Introducerar } \hat{a}_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (\mp i\hat{p} + m\omega \hat{x}) \Rightarrow \hat{H} = \hbar\omega (\hat{a}_- \hat{a}_+ - \frac{1}{2}) = \hbar\omega (\hat{a}_+ \hat{a}_- + \frac{1}{2})$$

$$[\hat{a}_-, \hat{a}_+] = 1.$$

$$\text{Stationära S.E. för harm. oscillator } \hbar\omega(\hat{a}_+ \hat{a}_- \pm \frac{1}{2}) \psi = E \psi$$

Egenskaper hos \hat{a}_+

Om vi vet att $\hat{H}\psi = E\psi$, vad är då $\hat{a}_+ \psi$ för tillstånd?

$$\Rightarrow \hat{H}(\hat{a}_+ \psi) = \hat{a}_+ (\hat{H} + \hbar\omega) \psi = \hat{a}_+ (E + \hbar\omega) \psi = (E + \hbar\omega)(\hat{a}_+ \psi).$$

$$\text{P.S.S. } \hat{H}(\hat{a}_- \psi) = (E - \hbar\omega)(\hat{a}_- \psi).$$

- \hat{a}_+ höjer energin för tillståndet ψ med $\hbar\omega$.
- \hat{a}_- sänker energin -/-
- \hat{a}_{\pm} kallas för stegoperatorer; \hat{a}_+ kallas kreations- eller skapelseoperatörn, \hat{a}_- kallas annihilationssoperatörn.

Det måste finnas en botten! ψ_0 är det längsta energitillståndet om $\hat{a}_- \psi_0(x) = 0$.

$$\text{Diff. ekv. } \hat{a}_- \psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(\hbar \frac{d}{dx} + m\omega x \right) \psi_0 = 0 \Rightarrow \frac{d\psi_0}{dx} = -\frac{m\omega x}{\hbar} \psi_0$$

$$\Rightarrow \psi_0(x) = A \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right).$$

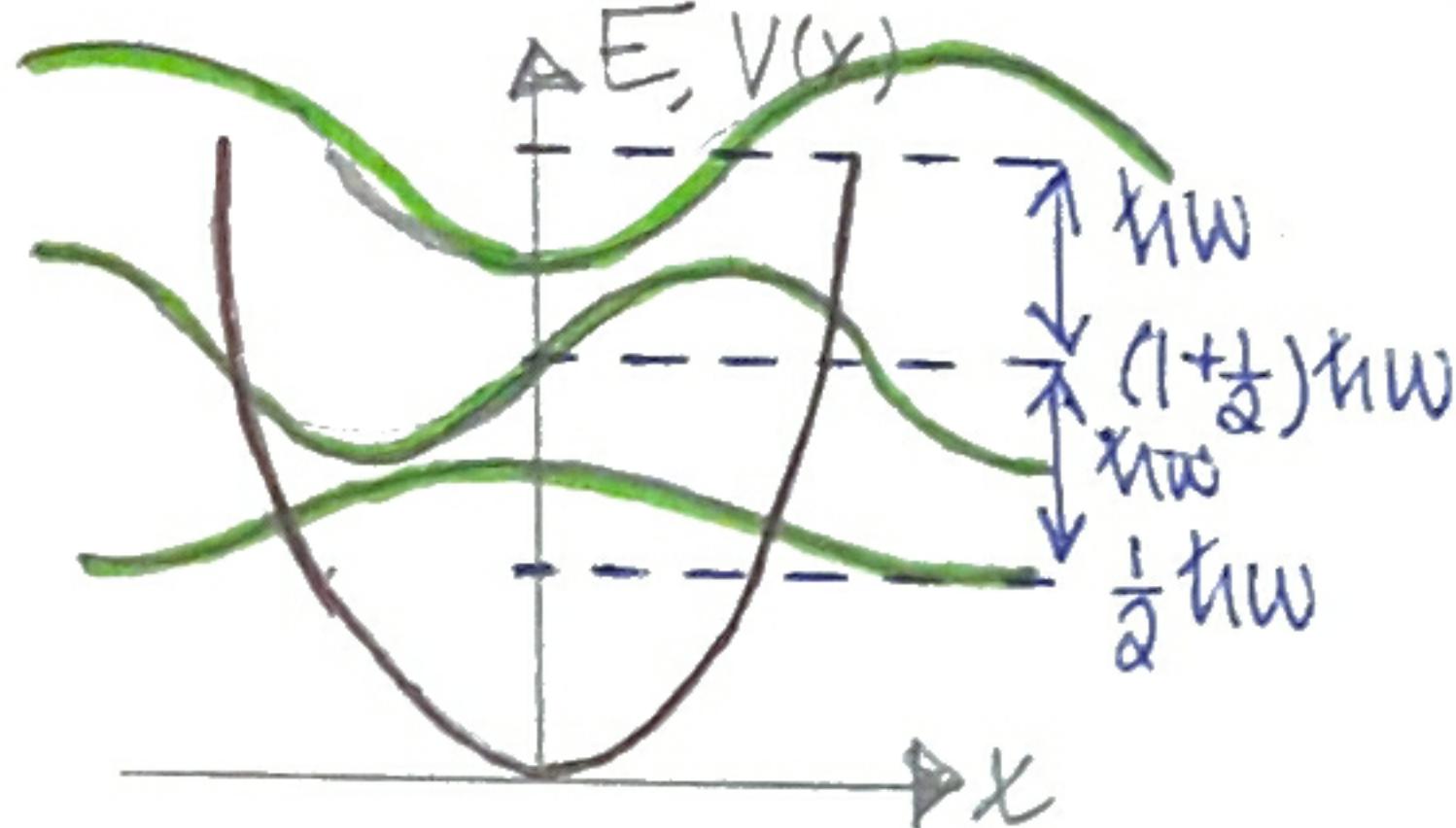
Detta svarar mot en energi via S.E. $\hat{H}\psi_0 = \hbar\omega(\hat{a}_+ \hat{a}_- + \frac{1}{2}) \psi_0 = E \psi_0$

$$\Rightarrow E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega \quad (\hat{a}_- \Psi_0 = 0), \text{ grundtillståndet!}$$

Varije operation med \hat{a}_+ höjer energin med $\hbar \omega$

$$\Rightarrow E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega \quad (n \text{ st } \hat{a}_+).$$

Vi kan skapa alla Ψ_n via $\Psi_n(x) = A_n (\hat{a}_+)^n \Psi_0(x)$, $A_n = \text{normaliseringskonstant}$



$$\text{Vi vet: } \hat{a}_+ \Psi_n(x) = \alpha_n \Psi_{n+1}(x)$$

$$\cdot \hat{a}_- \Psi_n(x) = \beta_n \Psi_{n-1}(x)$$

$$\cdot \hbar \omega (\hat{a}_+ \hat{a}_- \pm \frac{1}{2}) \Psi_n = E_n \Psi_n$$

$$\cdot E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega$$

$$\text{Omskrivning ger } \hat{a}_+ \hat{a}_- \Psi_n = (-\frac{1}{2} + n + \frac{1}{2}) \Psi_n = n \Psi_n.$$

För två funktioner $f(x), g(x)$ gäller

$$\int f^*(x) (\hat{a}_\pm g(x)) dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi m\omega}} \int f^*(x) \left[\mp \hbar \frac{d}{dx} + m\omega x \right] g(x) dx = \text{partial integr.}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi m\omega}} \int \left[(\mp \hbar \frac{d}{dx} + m\omega x) f(x) \right]^* g(x) dx = \int (\hat{a}_\mp f(x))^* g(x) dx$$

$$\Rightarrow \int (\hat{a}_\pm \Psi_n)^* (\hat{a}_\pm \Psi_n) dx = \int (\hat{a}_\mp (\hat{a}_\pm \Psi_n))^* \Psi_n dx$$

$$\Rightarrow \int (\hat{a}_+ \Psi_n)^* (\hat{a}_+ \Psi_n) dx = \int (\hat{a}_- \hat{a}_+ \Psi_n)^* \Psi_n dx = \int ((n+1) \Psi_n)^* \Psi_n dx = (n+1) \int |\Psi_n|^2 dx.$$

$$\text{Samtidigt } \int (\hat{a}_+ \Psi_n)^* (\hat{a}_+ \Psi_n) dx = \int (\alpha_n \Psi_{n+1})^* (\alpha_n \Psi_{n+1}) dx = |\alpha_n|^2 \int |\Psi_{n+1}|^2 dx$$

$$\therefore |\alpha_n|^2 \int |\Psi_{n+1}|^2 dx = (n+1) \int |\Psi_n|^2 dx. \quad \text{P.S.S. } |\beta_n|^2 \int |\Psi_{n-1}|^2 dx = n \int |\Psi_n|^2 dx.$$

$$\Psi_n \text{ normaliseras } \forall n \Leftrightarrow \int |\Psi_n|^2 dx = 1$$

$$\Rightarrow |\alpha_n|^2 = n+1 \quad \& \quad |\beta_n|^2 = n \quad \Rightarrow \hat{a}_+ \Psi_n = \sqrt{n+1} \Psi_{n+1} \quad \& \quad \hat{a}_- \Psi_n = \sqrt{n} \Psi_{n-1}$$

$$\Psi_n = A_n (\hat{a}_+)^n \Psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}_+)^n \Psi_0(x)$$

Tillstånden för en harm. oscillator är \perp :

$$\int \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx = \delta_{mn} = \int \left(\frac{1}{m} (\hat{a}_+ \hat{a}_- \psi_m) \right)^* \psi_n(x) dx = \\ = \frac{1}{m} \int (\hat{a}_- \psi_m)^* (\hat{a}_- \psi_n) dx = \frac{1}{m} \int \psi_m^* (\hat{a}_+ \hat{a}_- \psi_n) dx = \frac{n}{m} \int \psi_m^* \psi_n dx$$

Exempel Väntevärdet för potentiella energin $V(x)$ för harm. oscillator. $V = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$

$$\Rightarrow \langle V \rangle = \langle \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \rangle = \frac{m \omega^2}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* x^2 \psi_n dx.$$

Vi vet att $\hat{a}_+ = \frac{1}{\sqrt{2\pi m \omega}} (-i\hat{p} + m\omega x)$
 $\hat{a}_- = \frac{1}{\sqrt{2\pi m \omega}} (i\hat{p} + m\omega x)$

$$\Rightarrow \hat{a}_+ - \hat{a}_- = \frac{-2i\hat{p}}{\sqrt{2\pi m \omega}} \Rightarrow \hat{p} = i\sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}} (\hat{a}_+ - \hat{a}_-)$$

$$\hat{a}_+ + \hat{a}_- = \frac{\partial m \omega x}{\sqrt{2\pi m \omega}} \Rightarrow x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a}_+ + \hat{a}_-) \Rightarrow x^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} (\hat{a}_+^2 + \hat{a}_-^2 + \hat{a}_+ \hat{a}_- + \hat{a}_- \hat{a}_+)$$

$$\hat{a}_+^\dagger \psi_n \propto \psi_{n+1}$$

$$\hat{a}_-^\dagger \psi_n \propto \psi_{n-1}$$

$\psi_n \perp \psi_{n \pm 1} \Rightarrow$ bidrar ej till väntevärdet för V .

$$\hat{a}_+^\dagger \hat{a}_- \psi_n = n \psi_n$$

$$\hat{a}_-^\dagger \hat{a}_+ \psi_n = (n+1) \psi_n$$

$$\Rightarrow \langle V \rangle = \frac{1}{2} m \omega^2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \left[\frac{\hbar}{2m} (\hat{a}_+^\dagger \hat{a}_- + \hat{a}_-^\dagger \hat{a}_+) \right] \psi_n dx$$

$$= \frac{1}{4} \hbar \omega \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* (n+n+1) \psi_n dx = \frac{\hbar \omega}{2} (n+n+1)$$

hälften av den totala energin E .

2018 09 00

Tors Lv 3

Harmoistiskt potential $V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$

Kommunationsrelation $[x, \hat{p}] = i\hbar \Rightarrow \hat{a}_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} [\mp i\hat{p} + m\omega x]$

Stegoperatorer \hat{a}_+ kreationsop.

\hat{a}_- annihilationssop.

$$\Rightarrow \hat{H}\Psi_n = E_n \Psi_n$$

$$\hat{H}(\hat{a}_+ \Psi_n) = (E_n + \hbar\omega) \hat{a}_+ \Psi_n, \quad \hat{a}_+ \Psi_n = \sqrt{n+1} \Psi_{n+1} \Rightarrow |\hat{a}_+ \Psi_n|^2 = (n+1) |\Psi_{n+1}|^2$$

$$\hat{H}(\hat{a}_- \Psi_n) = (E_n - \hbar\omega) \hat{a}_- \Psi_n$$

$\Psi_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right)$ grundtillståndet för harm. oscillatorer

Grundenergi $E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega$.

$$E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad \Psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}_+)^n \Psi_0$$

$$\text{Ortonormerade tillstånd } \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_m^* \Psi_n dx = \delta_{mn}$$

Fri partikel

Stationära Schrödinger-ekvationen för $V(x) = 0$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi, \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0 \quad k = \pm \frac{\sqrt{2Em}}{\hbar}.$$

Fulla lösningen till Schrödinger-ekvationen

$$\Psi_k(x, t) = \Psi_k(x) e^{-iE_k t / \hbar} = A e^{ik(x - \frac{\hbar k t}{2m})}$$

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_k(x, t)|^2 dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \rightarrow \infty$$

$\Psi_k(x, t)$ planvåg med given energi \Rightarrow superposition av Ψ_k för många $k \Rightarrow$ begränsad lösning.

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k) \exp\left(i k \left(x - \frac{\hbar k t}{2m}\right)\right) dk$$

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k) e^{ikx} dk, \Rightarrow \phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, 0) e^{-ikx} dx$$

Skriver detta som

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k) e^{i(kx - w(k)t)} dk$$

$w(k)$ kallas för dispersionsrelation - relaterar en given frekvens (energi) till ett vägtal (våglängd)

$$\Rightarrow \text{fashastighet } v_{\text{fas}} = \frac{w}{k} = \frac{\hbar k}{\partial m}$$

de Broglie $p = \hbar k \Rightarrow v_{\text{fas}} = \frac{p}{\partial m}$ (men klassiskt $v = p/m$)

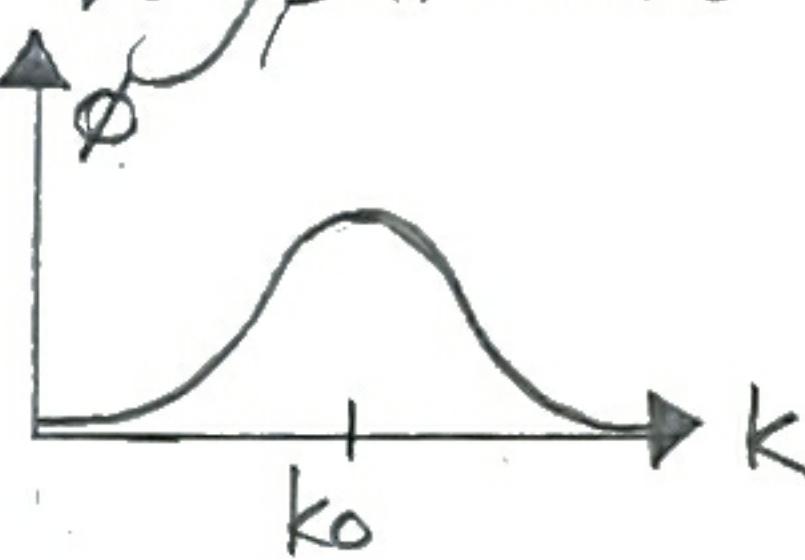
ok, ty v_{fas} säger inget om hur vågpaketet, dvs var partikel, rör sig. $\phi(k)$ bestämmer hur vågpaketet är format.

Antag att ϕ centrerad kring k_0 .

Inte allt för stor bredd.

Expandera $w(k)$ kring k_0 :

$$w(k) = w(k_0) + \left. \frac{dw}{dk} \right|_{k_0} (k - k_0) + \dots = w_0 + w'_0 (k - k_0)$$



$$\text{Låt nu } k = s + k_0 \Rightarrow \Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k_0 + s) e^{i[(k_0 + s)x - (w_0 + w'_0 s)t]} ds$$

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \underbrace{\exp(i(k_0 x - w_0 t))}_{\text{bärvägen}} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \phi(k_0 + s) \exp(is(x - w'_0 t)) ds}_{\text{envelop}}$$

Bärvägen rör sig med hastighet $v_{\text{fas}} = \frac{w_0}{k_0}$.

Envelopen rör sig med hastighet $v_{\text{grupp}} = w'_0 = \left. \frac{dw}{dk} \right|_{k_0}$

$$\text{I vårt fall } w(k) = \frac{\hbar k}{\partial m} \Rightarrow \frac{dw}{dk} = \frac{\partial \hbar k}{\partial m} = \frac{\hbar k}{m}$$

$$\text{de Broglie } p = \hbar k \Rightarrow \frac{dw}{dk} = \frac{p}{m}$$

Deltafunktionspotential

Diracs deltafunk. $\delta(x)$, $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1, \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x - x_0) dx = f(x_0)$

Vi ska titla på kvanttilstånd i potentialen $V(x) = -\alpha \delta(x)$
konst.

Stationär S.E. $\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \alpha \delta(x) \psi(x) = E \psi(x)$

Regionen $x \neq 0$ $\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi, E < 0 \Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{E}{\hbar^2}\psi$

där \mathcal{K} (kappa) = $\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$.

$$\psi(x) = A e^{-\mathcal{K}x} + B e^{\mathcal{K}x}, \quad x < 0 \quad \psi(x) = B e^{\mathcal{K}x}, \quad x > 0 \quad \psi(x) = A e^{-\mathcal{K}|x|}$$

$\psi(x)$ kont. i $x=0 \Rightarrow A=B$ dvs. $\psi(x) = B e^{-\mathcal{K}|x|}$.

Vad händer med $\psi(x)$ kring $x=0$? Integrera S.E. över $[-\varepsilon, \varepsilon]$, $\varepsilon \ll 1$,

$$-\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} dx - \int \alpha \delta(x) \psi(x) dx = E \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \psi(x) dx =$$

$$= -\frac{\hbar}{2m} \frac{d\psi}{dx} \Big|_{-\varepsilon}^{\varepsilon} - \alpha \psi(0).$$

Tag $\varepsilon \rightarrow 0$ $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{d\psi}{dx} \Big|_{-\varepsilon}^{\varepsilon} = -\frac{\partial m\alpha}{\hbar^2} \psi(0)$ men $\frac{d\psi}{dx} = \begin{cases} \mathcal{K}B e^{\mathcal{K}x} & x \leq 0 \\ -\mathcal{K}B e^{-\mathcal{K}x} & x > 0 \end{cases}$

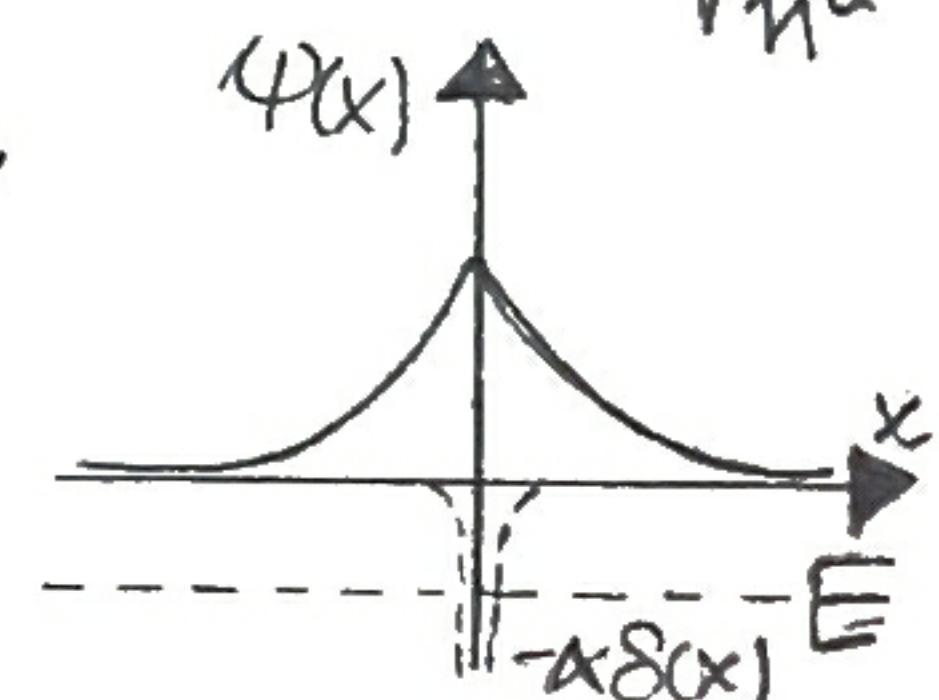
$$\Rightarrow \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (-B\mathcal{K}e^{-\mathcal{K}\varepsilon} - B\mathcal{K}e^{\mathcal{K}\varepsilon}) = -\frac{\partial m\alpha}{\hbar^2} \psi(0)$$

$$-\partial B\mathcal{K} = -\frac{\partial m\alpha}{\hbar^2} \frac{\psi(0)}{-B} \Rightarrow \mathcal{K} = m\alpha/\hbar^2 \Rightarrow E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$$

B tas genom normalisering

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^0 |B|^2 e^{2\mathcal{K}x} dx + \int_0^{\infty} |B|^2 e^{-2\mathcal{K}x} dx = \frac{|B|^2}{\mathcal{K}} \Rightarrow B = \sqrt{\mathcal{K}} = \sqrt{m\alpha} / \sqrt{\hbar^2}$$

$$\Rightarrow \psi(x) = \sqrt{\frac{m\alpha}{\hbar^2}} \exp(-m\alpha|x|/\hbar^2) \quad \text{Bundet tillstånd } E < 0$$



Spredningstillstånd
 $E > 0$

$$x \neq 0 \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = -\mathcal{K}^2 \psi, \quad \mathcal{K} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$x < 0 \quad \psi(x) = A_- e^{ikx} + B_- e^{-ikx}$$

$$x > 0 \quad \psi(x) = A_+ e^{ikx} + B_+ e^{-ikx}$$

Kontinuitet i $x=0$

$$\Rightarrow A_+ + B_+ = A_- + B_-$$

Integrera vår stationära S.E.
över $[-\varepsilon, \varepsilon]$, $\varepsilon \ll 1$

$$\frac{d\psi}{dx} = ik A_{\pm} e^{ikx} - ik B_{\pm} e^{-ikx}.$$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\frac{\hbar^2}{am} \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{-\epsilon}^{\epsilon} \right) = -\alpha \psi(0) \Rightarrow ik(A_+ - B_+ - A_- + B_-) = -\frac{2ma}{\hbar^2}(A_- + B_-)$$

$$\Rightarrow A_+ - B_+ = A_- (1 + 2i\beta) = B_- (1 - 2i\beta), \quad \beta = \frac{ma}{\hbar k}$$

$\psi(x)$ ej normalisierbar!

$$B_+ = 0, \quad B_- = \frac{i\beta}{1-i\beta} A_- \quad \text{reflekterad}$$

$$A_+ = \frac{1}{1-i\beta} A_- \quad \text{transmitterad}$$

$$\text{Reflektionskoeff. } R = \frac{|B_-|^2}{|A_-|^2} = \frac{\beta^2}{1+\beta^2}$$

$$\text{Transmissionskoeff. } T = \frac{|A_+|^2}{|A_-|^2} = \frac{1}{1+\beta^2}$$

$$R+T=1 \quad \text{ty } \beta = \frac{mx}{\hbar k} = \frac{mx}{\hbar \sqrt{2mE}}$$

2018 09 24
Mån Lv 4

Formalism

Hej Vektorrum!

En mängd V med en linjär struktur över en kropp F .

Addition (+) s.a. om $a, b \in V \Rightarrow a+b \in V$

Multiplikation (\cdot) s.a. om $\alpha \in F$ & $a \in V \Rightarrow \alpha \cdot a \in V$

Addition

Associativitet $(a+b)+c = a+(b+c) \quad \forall a, b, c \in V$

Kommutativitet $a+b = b+a \quad \forall a, b \in V$

Enhetselement $\exists 0 \in V$ s.a. $0+a=a \quad \forall a \in V$

Invers $\forall a \in V \exists \bar{a} \in V$ s.a. $a+\bar{a}=0$

Multiplikation

$\alpha, \beta \in F, a \in V \Rightarrow \alpha \cdot (\beta \cdot a) = (\alpha \beta) a \in V$

Distributivitet $(\alpha+\beta)a = \alpha a + \beta a \quad \forall \alpha, \beta \in F, a \in V$ $\alpha(a+b) = \alpha a + \alpha b$

Enhetselement $\exists 1 \in F$ s.a. $1 \cdot a = a \quad \forall a \in V$

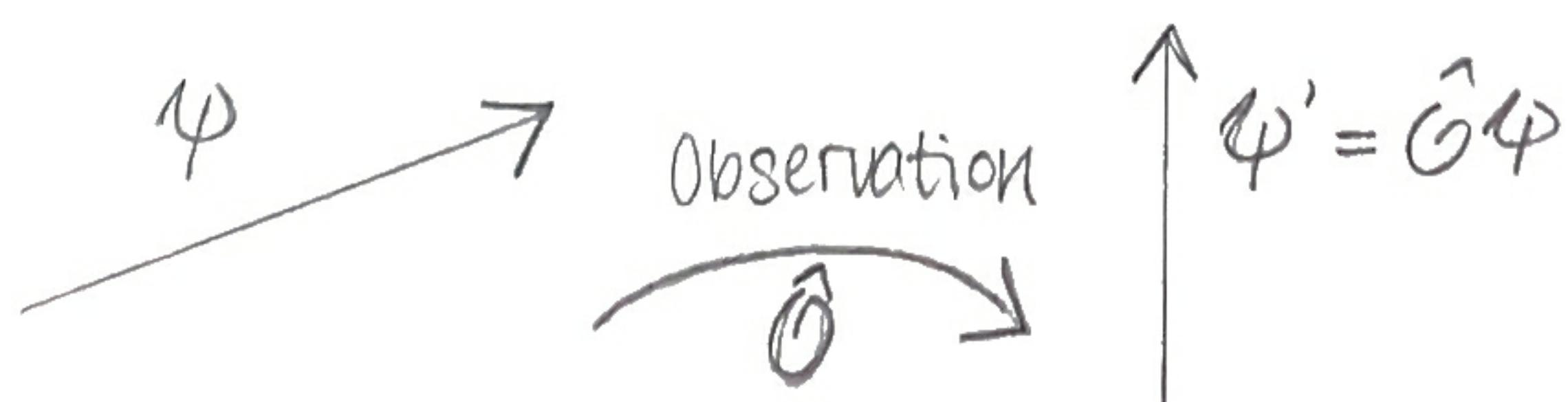
Kvantmekaniken är uppbyggd på

1 Tillstånd (vågfunktioner)

2 Observabler (operatorer)

Tolkning tillstånd är vektorer i ett vektorrum (funktionsrum)

Observabler, dvs operatorer, kan ses som linjära transformationer av dessa tillståndsvektorer.



Mängden av alla kvadratintegrabla funktioner $f(x)$ på intervallet $[a,b]: \int_a^b |f(x)|^2 dx < \infty$ är ett vektorrum som kallas L^2 eller Hilbertrummet.

Våra vågfunktioner är alltså vektorer i ett Hilbertrum.

Inre produkten i vårt Hilbertrum

För varje funk. $f(x)$ så svarar en vektor $|f\rangle$, & för varje vektor $|f\rangle$ svarar en "dual" $\langle f|$

$$\Rightarrow \text{inre produkten } \langle f|g\rangle = \int_a^b f^*(x)g(x)dx$$

$$\text{Via Schwarz olikhet } \left| \int_a^b f^*g dx \right| \leq \sqrt{\int_a^b |f|^2 dx} \sqrt{\int_a^b |g|^2 dx}$$

$\Rightarrow \langle f|g\rangle$ alltid begränsad.

För varje $f(x)$ finns ett $|f\rangle$

& en dual $\langle f|$ s.a. om

$$\alpha|f\rangle \rightarrow \alpha^* \langle f|$$

$f(x) \rightarrow |f\rangle$ "ket"

$\langle f|$ "bra"

- Bracketnotationen

Ändligt vektorrum $|f\rangle \rightarrow (f_1, f_2, \dots)$, $\langle f| \rightarrow \begin{pmatrix} f_1^* \\ f_2^* \\ \vdots \end{pmatrix}$

Transponatet + komplex konjugatet

$$\Rightarrow \text{hermit konjugatet } \langle f|f\rangle = |f_1|^2 + |f_2|^2 + \dots$$

Egenskaper hos inre produkt

$$\langle f|g\rangle^* = \left(\int_a^b f^*(x)g(x)dx \right)^* = \int_a^b f(x)g^*(x)dx = \int_a^b g^*(x)f(x)dx = \langle g|f\rangle$$

$$\langle f|f\rangle = \int_a^b f^*(x)f(x)dx = \int_a^b |f|^2 dx \geq 0$$

$$\langle f|f\rangle = 0 \Rightarrow f(x) = 0$$

Normalisering $\int f^*(x)f(x)dx = 1$, dvs. $\langle f|f\rangle = 1$

Ortogonalitet $\int f^*(x)g(x)dx = 0$, dvs. $\langle f|g\rangle = 0$

Ortonormala tillstånd

$\{f_n\}$ s.a. $\int f_n^*(x) f_m(x) dx = \delta_{mn}$, dvs $\langle f_n | f_m \rangle = \delta_{mn}$

$\{f_n\}$ kallas fullständig om alla andra funktioner i Hilbertrummet kan skrivas som en linjär komb. av dessa

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n f_n(x), \text{ dvs. } |f\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n |f_n\rangle \text{ där } c_n = \langle f_n | f \rangle$$

Hur kopplar detta till observabler?

Väntevärde av en observabel $O(x, p)$

$$\langle O \rangle = \int \Psi^*(\hat{O}\Psi) dx = \langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle \quad (\text{i nissa böcker } \langle \Psi | O | \Psi \rangle)$$

Observabel $\langle O \rangle = \langle O \rangle^*$ (fysikalisk storhet $\in \mathbb{R}$)

$$\langle O \rangle = \int \Psi^*(\hat{O}\Psi) dx, \quad \langle O \rangle^* = (\int \Psi^*(O\Psi) dx)^* = \int \Psi(\hat{O}\Psi)^* dx = \int (\hat{O}\Psi)^* \Psi dx = \langle \hat{O}\Psi | \Psi \rangle$$

Observabel uppfyller villkoret $\langle \Psi | \hat{O}\Psi \rangle = \langle \hat{O}\Psi | \Psi \rangle$

Mer allmänt $\langle f | \hat{O}g \rangle = \langle \hat{O}f | g \rangle$.

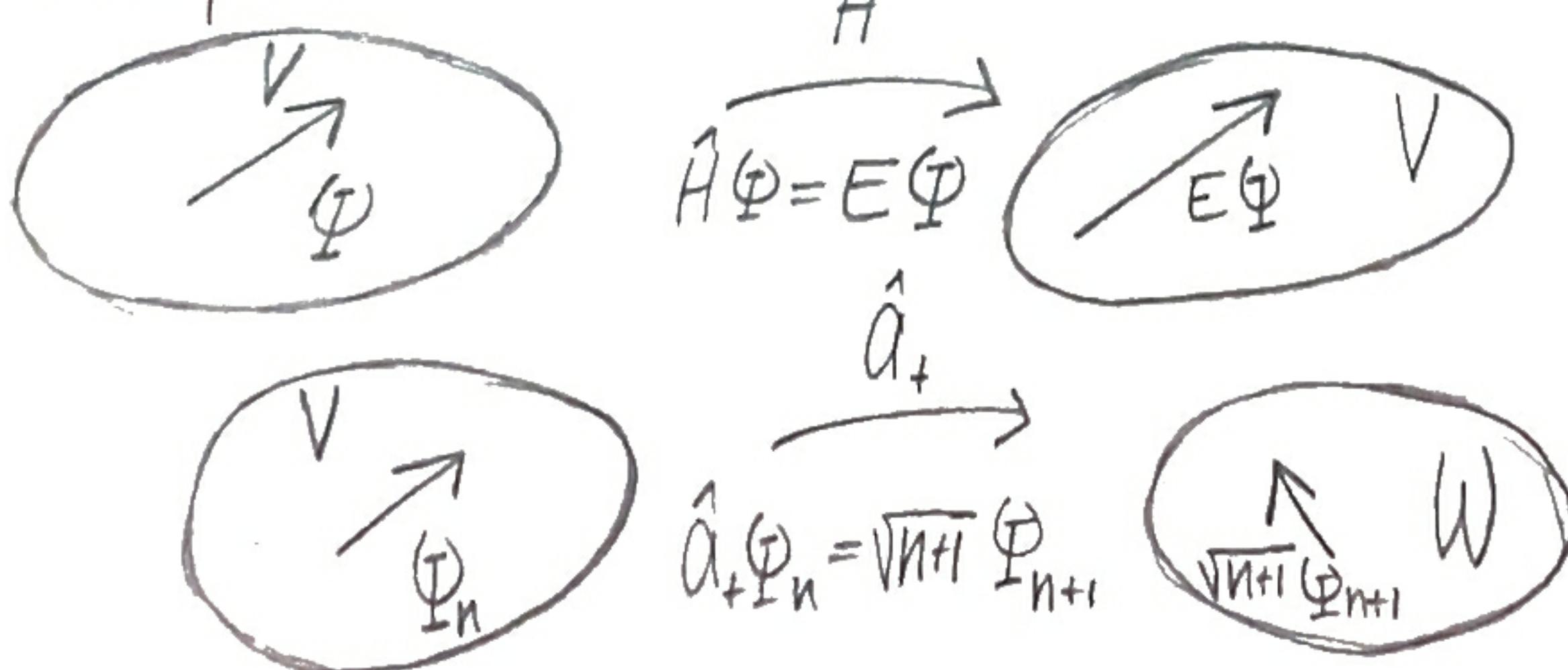
Operatorer som uppfyller detta kallas hermitska.

Observabler \leftrightarrow hermitska operatorer.

Utvikning

Operatorer i kvantmekanik: linjära avbildningar mellan två vektorrum: $T: V \rightarrow W$ s.a. $T(u_1 + u_2) = T(u_1) + T(u_2)$ & $T(\alpha u) = \alpha T(u)$ där $u \in V, T(u) \in W$

Exempel



Basvektorer i Hilbertrummet $\{e_i\} \rightarrow \{|e_i\rangle\}$.

Bilda matriselement av våra operatorer i \hat{A}
 $A_{ij} = \langle e_i | \hat{A} | e_j \rangle$

⇒ Matrismekanik

Egenvärden $\hat{A}\Psi = a\Psi \Rightarrow \langle e_i | \hat{A}\Psi \rangle = \langle e_i | a\Psi \rangle = a\langle e_i | \Psi \rangle$
 $\Rightarrow |\Psi\rangle = \sum_i |\Psi_i\rangle = a|\Psi_i\rangle \Rightarrow \sum_j A_{ij}|\Psi_j\rangle = a|\Psi_i\rangle$

Hermitkonjugatet på en operator

$$\langle f | \hat{O} g \rangle \equiv \langle \hat{O}^+ f | g \rangle \quad \forall f, g. \quad \hat{O}^+ \text{ konjugat av } \hat{O}.$$

En hermitisk operator har därför $\hat{O} = \hat{O}^+$ $\begin{pmatrix} O_{11} & O_{12} & \dots \\ O_{21} & O_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} O_{11}^* & O_{12}^* & \dots \\ O_{21}^* & O_{22}^* & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$

Problem 3.4

a) Summan av två hermitiska operatorer är hermitisk.

$$\begin{aligned} \langle f | (\hat{O}_1 + \hat{O}_2) g \rangle &= \int f^*(x) (\hat{O}_1 + \hat{O}_2) g(x) dx = \int f^*(x) \hat{O}_1 g(x) dx + \int f^*(x) \hat{O}_2 g(x) dx \\ &= \int (\hat{O}_1^+ f)^* g(x) dx + \int (\hat{O}_2^+ f)^* g(x) dx = \int (\hat{O}_1 f)^* g dx + \int (\hat{O}_2 f)^* g dx = \\ &= \int ((\hat{O}_1 + \hat{O}_2) f)^* g dx = \langle (\hat{O}_1 + \hat{O}_2) f | g \rangle \end{aligned}$$

b) \hat{O} hermitisk, $\alpha \in \mathbb{C}$. När är $\alpha \hat{O}$ hermitisk?

$$\langle f | \hat{O} g \rangle = \langle \hat{O} f | g \rangle.$$

$$\langle f | \alpha \hat{O} g \rangle = \int f^*(x) \alpha \hat{O} g(x) dx = \int (\alpha^* \hat{O}^+ f)^* g(x) dx = \langle \alpha^* \hat{O}^+ f | g \rangle$$

$\Rightarrow \alpha \hat{O}$ är hermitisk endast om $\alpha^* = \alpha \Rightarrow \alpha \in \mathbb{R}$

c) När är produkten av två hermitiska operatorer \hat{O}_1, \hat{O}_2 också hermitisk?

$$\langle f | \hat{O}_1 \hat{O}_2 g \rangle = \langle f | \hat{O}_1 (\hat{O}_2 g) \rangle = \langle \hat{O}_1 f | \hat{O}_2 g \rangle = \langle \hat{O}_2 \hat{O}_1 f | g \rangle$$

$$\Rightarrow \hat{O}_2 \hat{O}_1 = \hat{O}_1 \hat{O}_2 \quad \text{dvs. } [\hat{O}_1, \hat{O}_2] = 0 \quad (\text{jmf. } [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar)$$

Bestämda tillstånd

Tillstånd s.a. varje mätning av observabeln \hat{O} ger värde ω

$$\hat{O}\Psi = \Omega \Psi \quad \text{egenvärdes ekvation.}$$

Alla mätningar ger värdet $\Omega \Rightarrow \langle O \rangle = \Omega$
 $\Rightarrow \sigma^2 = \langle (\hat{O} - \langle O \rangle)^2 \rangle$

2018 09 27
Tors Lu4

Hermitska operatorer & deras egenfunktioner

Egenfunk. till hermitska operatorer representerar tillstånd.

Normaliserbara tillstånd \rightarrow diskret spektrum.

Icke-normaliserbara tillstånd \rightarrow kont. spektrum.

Normaliserbara egenfunktioner till hermitska operatorer

1) Deras egenvärden är reella!

Beweis \hat{O} hermitisk operator, f dess egenfunk. m egenvärde $\Omega \Leftrightarrow \hat{O}f = \Omega f$
 $\Rightarrow \langle f | \hat{O}f \rangle \stackrel{\text{herm.}}{=} \langle \hat{O}f | f \rangle$
 $\langle \hat{O}f | \hat{O}f \rangle = \int f^*(x) \hat{O}f(x) dx = \int f^*(x) \Omega f(x) dx = \Omega \int f^*(x) f(x) dx =$
 $= \Omega \langle f | f \rangle.$

$$\text{Men } \langle \hat{O}f | f \rangle = \int (\hat{O}f(x))^* f(x) dx = \int (\Omega f(x))^* f(x) dx =$$
 $= \Omega^* \int f^*(x) f(x) dx = \Omega^* \langle f | f \rangle \Rightarrow \underline{\Omega = \Omega^* \text{ dvs. } \Omega \in \mathbb{R}}$

Viktigt ty vi vill mäta reella storheter!

2) Egenfunk. som har diskreta egenvärden är ortogonala!

Beweis $\hat{O}f(x) = \Omega f(x)$, $\hat{O}g(x) = \Omega' g(x)$.

$$\text{Då gäller } \langle f | \hat{O}g \rangle = \langle \hat{O}f | g \rangle.$$

kplx konj. men
 $\Omega = \Omega^* \in \mathbb{R}$

$$\langle f | \hat{O}g \rangle = \langle f | \Omega' g \rangle = \Omega' \langle f | g \rangle, \langle \hat{O}f | g \rangle = \langle \Omega f | g \rangle = \Omega \langle f | g \rangle$$

$$\text{Om } \underline{\Omega \neq \Omega'} \Rightarrow \underline{\langle f | g \rangle = 0}$$

Degenererade tillstånd ($\Omega = \Omega'$) \Rightarrow ortogonaliseringprocess.

KRAV våra hermitska operatorer genererar en fullständig
 mängd egenfunktioner (som svarar mot observabler)
 \Rightarrow en godt. funk. i vårt Hilbertrum kan uttryckas

som en linjärkomb. av egenfunktionerna.

Delmängd

Hermitiska op.

Observabler

Kontinuerliga spektra

Kont. spektrum till hermitisk operator \rightarrow ej normaliserabara egenfunktioner! Sats 1 & 2 för diskreta spektra gäller ej för kont. spektra!

Exempel 3:2 Egenfunktioner &- värden till rörelsemängdsop.

$\hat{P} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$. Låt $f_p(x)$ vara egenfunk. till \hat{P} m. egenv. p :

$$\hat{P} f_p(x) = p f_p(x) \Leftrightarrow -i\hbar \frac{\partial f_p}{\partial x} = p f_p(x) \Rightarrow f_p(x) = A e^{ipx/\hbar} \quad \square$$

$$\langle f_p | f_{p'} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f_p^*(x) f_{p'}(x) dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p-p')x/\hbar} dx$$

Krav per f_p .

$$\langle f_p | f_p \rangle = 2\pi\hbar |A|^2 \delta(p-p'), \quad \delta(p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx} dx$$

"Normalisera" s.a. $|A|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar}$

$$\Rightarrow \langle f_p | f_p \rangle = \delta(p-p')$$

$\{f_p\}$ är Diracortonormalisade

\therefore Egenfunktioner med reella egenvärden är också fullständiga \Rightarrow alla kvadratintegrabla funktioner $f(x)$ kan skrivas som en integral av f_p över spektrat/ \mathbb{R}

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(p) f_p(x) dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} c(p) e^{ipx/\hbar} dp \quad \text{där } c(p) = \langle f_p | f \rangle$$

$f(x)$ är ett vågspaket.

de Broglie våglängd $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}$ (för varje vågkompl.)

Exempel 3:3 Låt $g_y(x)$ vara en egenfunk. till positionsop. \hat{x} med egenv. y

$$\hat{\lambda}g_y(x) = yg_y(x) \Rightarrow g_y(x) = AS(x-y).$$

$$\text{Diracortonormalitet } \langle g_y | g_y \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} g_y^*(x) g_y(x) dx =$$

$$= |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-y') \delta(x-y) dx = |A|^2 \delta(y-y')$$

$$A=1 \rightarrow g_y(x) = \delta(x-y).$$

$$\text{Godt. tillstånd } f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(y) g_y(x) dy \quad \text{där } c(y) = f(y) \quad \square$$

Hilbertrum $\Leftrightarrow L^2$

kvadratintegrabla tillstånd. Egenfunk. med kontinuerliga spektra bör ej i Hilbertrummet! Ej fysikaliska tillstånd!

Dock - reella egenvärden

- Diracortonormala
- fullständiga.

Generalisering statistisk tolkning

Sannolikhetstolkningen, eller statistiska tolkningen, av kvantmekaniken kan uttryckas med våra nya verktyg $|f\rangle$, $\langle f|$, $\langle f|g\rangle$.

1) Givet en observabel $\hat{O}(x, p)$ & ett tillstånd $\Psi(x, t)$ kommer varje mätning av $\hat{O}(x, p)$ att resultera i ett av egenv. till operatorn $\hat{O}(x, -i\hbar\partial/\partial x)$

$$\hat{O}\Psi = \Omega\Psi$$

2) Om spektrat till \hat{O} är diskret är sanno. att erhålla egenv. Ω , för funken $f_n(x)$, givet av $|C_n|^2$ där $C_n = \langle f | \Psi \rangle$

3) Om spektrat till \hat{O} är kont. m reella egenv. $\Omega(z)$ & Diracortonormerade egenfunk. $f_z(x)$ så ges sanno. att mäta $\Omega(z)$ i intervallet $[z, z+dz]$ av $|C(z)|^2 dz$ där $C(z) = \langle f_z | \Psi \rangle$.

$|C_n|^2$ är sanno. att mäta Ω_n .

Då vill vi att $\sum_n |C_n|^2 = 1$.

Check: $1 = \langle \Psi | \Psi \rangle = \left\langle \sum_m C_m f_m \mid \sum_n C_n f_n \right\rangle = \sum_m \sum_n C_m^* C_n \langle f_m | f_n \rangle =$
 $= \sum_m \sum_n C_m^* C_n \delta_{mn} = \sum_n |C_n|^2$

Väntevärdet: observabel $O \rightarrow$ operator \hat{O} .

$$\begin{aligned} \langle O \rangle &= \langle \Psi | \hat{O} \Psi \rangle = \left\langle \sum_m C_m f_m \mid \hat{O} \sum_n C_n f_n \right\rangle = \left\langle \sum_m C_m f_m \mid \sum_n C_n \hat{O} f_n \right\rangle = \\ &= \sum_m \sum_n C_m^* C_n \Omega_n \langle f_m | f_n \rangle = \sum_n |C_n|^2 \underset{\substack{\nearrow \\ \text{egenv. för } f_n}}{\underset{\nwarrow}{\Omega_n}} \text{ sanno. att mäta } \Omega_n \end{aligned}$$

Q018 10 01 Män L15

Repetition

Hermitska operatorer & deras egenfunktioner

Normaliserabara egenfunktioner

1) Reella egenvärden

2) Egenfunktioner med distinkta egenvärden är ortogonala. (Diskreta spektrat.)

Kontinuerliga spektra

→ ej normaliserabara \Rightarrow 1) & 2) gäller ej.

Kräver reella egenvärden \Rightarrow Diracortonormala

Ex: $f_z(x) \rightarrow |f_z\rangle$, $z = \text{kvanttal}$

$$\langle f_{z'} | f_z \rangle = \delta(z' - z)$$

∴ Egenfunktionerna för kontinuerliga spektra lever ej i Hilbertrummet. Däremot reella egenvärden \Rightarrow Diracortonormalitet, fullständiga.

Generalisering statistisk tolkning

1) $\begin{cases} \text{Observabel } \hat{O}(x,p) \\ \text{Tillstånd } \Psi(x,t) \end{cases}$ Mätning av $\hat{O}(x,p) \Rightarrow$ ett egenvärde till $\hat{O}(x, -i\hbar \partial/\partial x)$

2) Diskret spektra till $\hat{O} \Rightarrow$ sanno. att mäta Ω_n (egenv.) ges av $|C_n|^2$ där $C_n = \langle f_n | \Psi \rangle$ där $\hat{O}f_n = \Omega_n f_n$.

3) Spektrat kont.: Krav reella egenv. \Rightarrow Diracortonormaliseraade tillstånd $f_z(x)$ & sanno. att mäta $\Omega(z)$ i intervallet $[z, z+dz]$ ges av $|C(z)|^2$ där $C(z) = \langle f_z | \Psi \rangle$ & $\hat{O}f_z = \Omega(z)f_z$.

Väntevärden $\langle \Psi \rangle = \sum_n c_n f_n$

$$\Rightarrow \langle O \rangle \equiv \langle \Psi | \hat{O} \Psi \rangle = \left\langle \sum_m c_m f_m \right| \hat{O} \sum_n c_n f_n \rangle =$$

$$= \sum_m \sum_n c_m^* c_n \langle f_m | \hat{O} f_n \rangle = \sum_m \sum_n c_m^* c_n \langle f_m | \Omega_n f_n \rangle = \sum_m \sum_n c_m^* c_n \Omega_n \langle f_m | f_n \rangle$$

$$= \sum_m \sum_n c_m^* c_n \Omega_n \delta_{mn} = \sum_n |c_n|^2 \Omega_n \quad \text{slut repetition!}$$

Exempel rörelsemängd

Eigenfunktionerna till $\hat{p} = -i\hbar \partial/\partial x$ med reella egenv. ges
av $f_p = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$ där $\hat{p}f_p = pf_p$

$$\Rightarrow C(p) = \langle f_p | \Psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, t) e^{-ipx/\hbar} dx.$$

$C(p, t)$ kallas för rörelsemängdsvägfunktionen, brukar benämnas $\Phi(p, t)$.

$$\begin{cases} \Phi(p, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, t) e^{-ipx/\hbar} dx \\ \Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(p, t) e^{ipx/\hbar} dp. \end{cases}$$

Sanno. att mäta rörelsemängden i intervallet $[p, p+dp]$ ges av $|\Phi(p, t)|^2 dp$.

Jmfr. med sannolikheten att mäta partikeln i läge $[x, x+dx]$ $|\Psi(x, t)|^2 dx$.

Osäkerhetsrelationen (eller obestämmbarhetsrelationen)

Variansen av en observabel A för ett tillstånd Ψ ges av

$$\sigma_A^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle \Psi | (A - \langle A \rangle)^2 \Psi \rangle = \langle (A - \langle A \rangle \Psi) | (A - \langle A \rangle \Psi) \rangle = \langle f | f \rangle, \quad \text{där } |f\rangle = |(A - \langle A \rangle) \Psi\rangle.$$

För varje annan observabel B gäller $\sigma_B^2 = \langle g | g \rangle$ där $|g\rangle = |(B - \langle B \rangle) \Psi\rangle$

Schwarz olikhet

$$\langle f|f \rangle \langle g|g \rangle \geq |\langle f|g \rangle|^2.$$

$$\langle f|g \rangle = z = \operatorname{Re}(z) + i\operatorname{Im}(z) \Rightarrow |z|^2 = |\operatorname{Re}(z)|^2 + |\operatorname{Im}(z)|^2 \geq |\operatorname{Im}(z)|^2$$

$$\operatorname{Im}(z) = \frac{1}{2i} (z - z^*) = \frac{1}{2i} (\langle f|g \rangle - \langle g|f \rangle)$$

$$\Rightarrow \langle f|f \rangle \langle g|g \rangle = \sigma_A \sigma_B \geq |\langle f|g \rangle|^2 = |z|^2 \geq \left[\frac{1}{2i} (\langle f|g \rangle - \langle g|f \rangle) \right]^2$$

$$\begin{aligned} \langle f|g \rangle &\equiv \langle (A - \langle A \rangle) \Psi | (B - \langle B \rangle) \Psi \rangle \stackrel{\text{herm op.}}{=} \langle \Psi | (A - \langle A \rangle)(B - \langle B \rangle) \Psi \rangle = \\ &= \langle \Psi | (AB - A\langle B \rangle - \langle A \rangle B + \langle A \rangle \langle B \rangle) \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{A} \hat{B} \Psi \rangle - \\ &- \langle B \rangle \langle \Psi | \hat{A} \Psi \rangle - \langle A \rangle \langle \Psi | \hat{B} \Psi \rangle + \langle A \rangle \langle B \rangle \underbrace{\langle \Psi | \Psi \rangle}_{=1} = \\ &= \langle AB \rangle - \langle B \rangle \langle A \rangle \end{aligned}$$

$$\langle g|f \rangle = \langle f|g \rangle^* = \langle BA \rangle - \langle B \rangle \langle A \rangle$$

$$\Rightarrow \langle f|g \rangle - \langle g|f \rangle = \langle AB \rangle - \langle BA \rangle = \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle$$

$$\text{ddr } [\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A} \hat{B} - \hat{B} \hat{A}$$

$$\Rightarrow \sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right)^2 \text{ osäkerhetsrelationen.}$$

Exempel

$$\hat{A} = \hat{x}, \hat{B} = \hat{p}, \text{ kommutator } [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

$$\Rightarrow \langle [\hat{x}, \hat{p}] \rangle = i\hbar$$

$$\Rightarrow \sigma_x^2 \sigma_p^2 \geq \left(\frac{1}{2i} \langle [\hat{x}, \hat{p}] \rangle \right)^2 = \left(\frac{1}{2i} i\hbar \right)^2 = \frac{\hbar^2}{4}, \quad \sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}$$

Ofta låter man $\sigma_x \rightarrow \Delta x$, $\sigma_p \rightarrow \Delta p$, $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$

Alla observabler med icke-triviala kommutatorer ger upphov till icke-triviala osäkerhetsrelationer. Sådana observabler kallas för inkompatibla.

"Osäkerhetsrelationen" för tid & energi

Tid ej observabel \rightarrow ingen operator.

Vad betyder $\Delta t \Delta E \geq \hbar/2$??

Tid är mått på förändring. Titta på tidsutv. av vänte värdet.

$$\text{Observabeln } O, \text{ tillstånd } \Psi \Rightarrow \frac{d}{dt} \langle O \rangle = \frac{d}{dt} \langle \Psi | \hat{O} \Psi \rangle = \\ = \langle \frac{\partial \Psi}{\partial t} | \hat{O} \Psi \rangle + \langle \Psi | \hat{O} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \rangle + \langle \Psi | \hat{O} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \rangle.$$

Schrödingerekvationen

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi.$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} \langle O \rangle = -\frac{1}{i\hbar} \langle \hat{H} \Psi | \hat{O} \Psi \rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle \Psi | \hat{O} \hat{H} \Psi \rangle + \langle \frac{\partial O}{\partial t} \rangle$$

$$\hat{H} \text{ hermitisk} \Rightarrow \frac{d}{dt} \langle O \rangle = -\frac{1}{i\hbar} \langle \Psi | \hat{H} \hat{O} \Psi \rangle + \langle \frac{\partial O}{\partial t} \rangle = \\ = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{O}] \rangle + \langle \frac{\partial O}{\partial t} \rangle.$$

$$\text{Om } \hat{O} \text{ ej funkt. av tiden} \Rightarrow \frac{d}{dt} \langle O \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{O}] \rangle.$$

Låt $\hat{A} = \hat{H}$ & $\hat{B} = \hat{O}$ i vår osäk. rela.

$$\Rightarrow \sigma_H^2 \sigma_O^2 \geq \left[\frac{1}{2i} \langle [\hat{H}, \hat{O}] \rangle \right]^2 = \left[\frac{1}{2i} \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dt} \langle O \rangle \right]^2 = \frac{\hbar^2}{4} \left(\frac{d \langle O \rangle}{dt} \right)^2.$$

$$\sigma_H \sigma_O \geq \frac{\hbar}{2} \left| \frac{d \langle O \rangle}{dt} \right|. \text{ Låt } \sigma_H \equiv \Delta E, \Delta t \equiv \frac{\sigma_O}{|d \langle O \rangle / dt|} \Rightarrow \Delta t \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}$$

Vägfunktioner & tillståndsvektorer

Tillstånd i ett system ges av vektorer i Hilbertrummet: $|S(t)\rangle$

Vägfunk. är då projektionen av $|S(t)\rangle$ på $|x\rangle$: $\Psi(x,t) \equiv \langle x | S(t) \rangle$.

Rörelsemängdsvägfunktionen ges då av $\Phi(p,t) \equiv \langle p | S(t) \rangle$.

Ψ & Φ är samma tillstånd i olika representationer. De innehåller lika mkt info.

Observabler \rightarrow operatorer, dvs linj. transf. av tillståndsvektorer

$$|\beta\rangle = \hat{O}|\alpha\rangle, |\alpha\rangle, |\beta\rangle \in L^2$$

Vektorerna kan skrivas i en bas $\{|e_n\rangle\}$

$$\text{dvs. } |\alpha\rangle = \sum_n a_n |e_n\rangle \text{ där } a_n = \langle e_n | \alpha \rangle.$$

Operatorer kan skrivas i termer av basen $\{|e_n\rangle\}$:

$$O_{mn} = \langle e_m | \hat{O} | e_n \rangle = \langle e_m | \hat{O} | e_n \rangle$$

$$\Rightarrow |\beta\rangle = \hat{O} |\alpha\rangle \Rightarrow b_m = \langle e_m | \beta \rangle = \sum_m O_{mn} a_n$$

Diracrelationen

För varje $|\alpha\rangle$ finns en dual $\langle \alpha |$ def. via $\langle \alpha | f \rangle = \int \alpha^* f dx$

Operatorer kan bildas av bras & kets.

Exempel

Projektionsoperatorn $\hat{P} = |\alpha\rangle \langle \alpha|$. Tar ut komponenter längs $|\alpha\rangle$ även vektor $|\beta\rangle$,

$$\hat{P}|\beta\rangle = (|\alpha\rangle \langle \alpha|) |\beta\rangle = |\alpha\rangle \langle \alpha | \beta \rangle = \underbrace{(\langle \alpha | \beta \rangle)}_{\text{komp. av } |\beta\rangle \text{ längs } |\alpha\rangle} |\alpha\rangle$$

$\{|e_n\rangle\}$ ortonormerad bas.

Enhetsoperatorn $\hat{I} = \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n|$

$$\Rightarrow \hat{I}|\alpha\rangle = \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n | \alpha \rangle = \sum_n (\langle \psi_n | \alpha \rangle) |\psi_n\rangle = \sum_n a_n |\psi_n\rangle = |\alpha\rangle$$

P.S.S. för kont. spektra

position $\hat{x} = \int |x\rangle \langle x| dx$

rörelsemängd $\hat{I} = \int |p\rangle \langle p| dk$

energi $\hat{I} = \sum_n |n\rangle \langle n|$

2018 10 04

Tors Lv5

Kvantmekanik i 3D

Schrödingerekvationerna i 3D

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi \quad \text{där } \hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{P}_x^2 + \hat{P}_y^2 + \hat{P}_z^2) + V(\vec{r})$$

$$\& \hat{P} = -i\hbar \vec{\nabla} = -i\hbar (\partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z)$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi = V(\vec{r}) \Psi$$

$$\nabla^2 = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$$

Sannolikhets tolkningen i 3D

Sannol. att hitta partikeln i en volym $dx dy dz$ kring (x, y, z) ges av $| \Psi(x, y, z) |^2 dx dy dz \equiv |\Psi(\vec{r})|^2 d\vec{r}$.

För $V(\vec{r}) = V$ \Rightarrow fullständig mängd stationära tillstånd s.a.

$$\Psi_n(\vec{r}, t) = \Phi_n(\vec{r}) \exp(-iE_n t/\hbar) \quad \text{där } -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Phi_n + V \Phi_n = E_n \Phi_n.$$

Sfäriska system

Centralpotential: $V(\vec{r}) = V(r)$

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

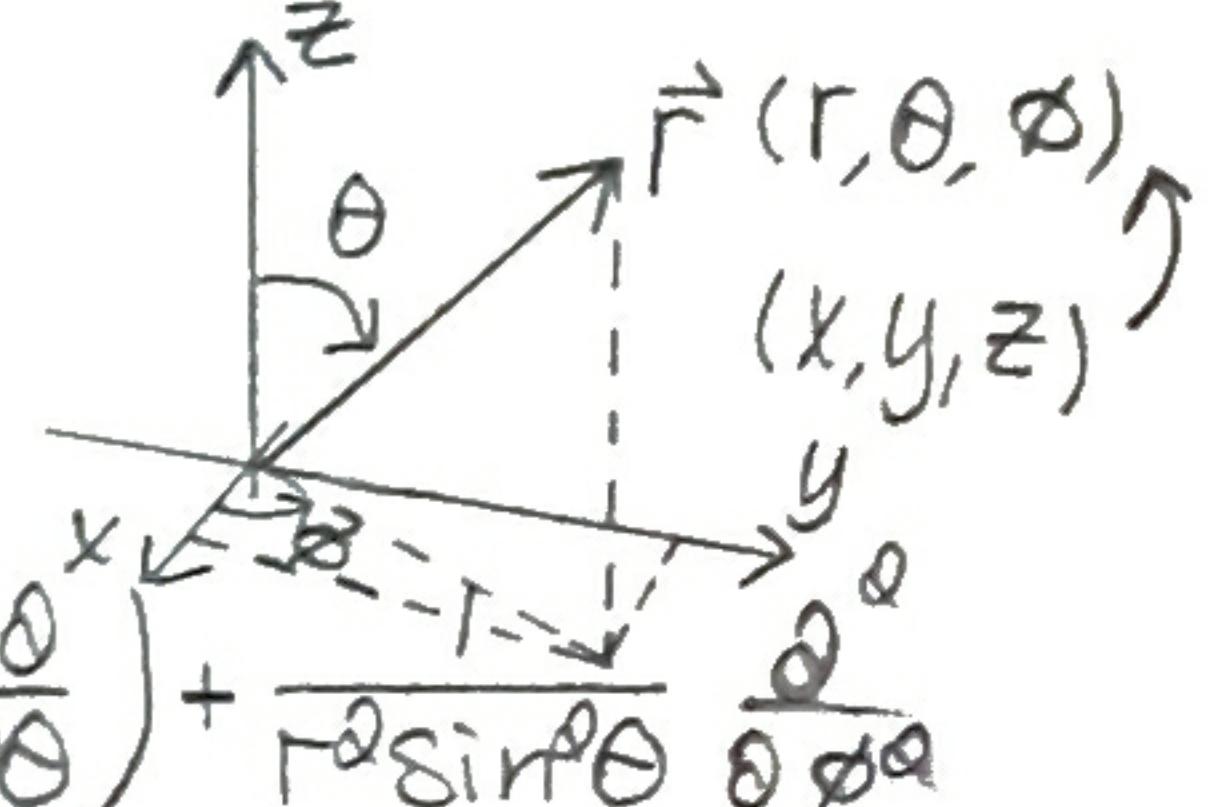
Lös stationära S.E. $\Psi(\vec{r}) = \Psi(r, \theta, \phi) \equiv R(r)Y(\theta, \phi)$

$$\Rightarrow \text{S.E. } -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right] + V(r)R Y = E R Y$$

Dividera med RY & med $-\hbar^2/2mr^2$)

$$\Rightarrow \frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} (V(r) - E) + \frac{1}{Y} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right] = 0$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} (V(r) - E) = C \\ \frac{1}{Y} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right] = -C \end{cases} \quad \begin{array}{l} \text{kallar } C \text{ för } C = l(l+1) \\ \left(\vec{P}^2 = P_r^2 + \frac{l^2}{r^2} \right) \end{array}$$



Vinkelekvationen

$$\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial Y}{\partial\theta} \right) + \frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2} = -l(l+1) \sin^2\theta Y$$

Ansats $Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta) \Phi(\phi)$.

$$\frac{1}{\Theta} \left[\sin\theta \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) \right] + l(l+1) \sin\theta + \frac{1}{\Phi} \frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = 0$$

Separationskonst $c = m^2$

$$\Rightarrow \begin{cases} \sin\theta \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + l(l+1) \sin^2\theta \Theta = m^2 \Theta \\ \frac{1}{\Phi} \frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = -m^2 \end{cases}$$

$$\Rightarrow \Phi(\phi) = e^{im\phi}, \quad m \text{ kan vara pos. eller neg.}$$

Av symmetri skål $\Phi(\phi + \delta\pi) = \Phi(\phi) \Rightarrow e^{i\delta\pi m} = 1 \Rightarrow m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Lösningen $\Theta(\theta) = A P_l^m(\cos\theta)$

där $P_l^m(x) \equiv (-1)^m (1-x^2)^{m/2} (d/dx)^m P_l(x)$ där de associerade

Legendre polynomen & $P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \left(\frac{d}{dx} \right)^l (x^2 - 1)^l$ där lite
Legendre polynomet.

$$m = -l, -l+1, \dots, -1, 0, 1, \dots, l$$

Normaliseringssiffer

$$d^3F = r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi = r^2 dr d\Omega \leftarrow \text{rymdvinkelelement}$$

$$1 = \int |\psi|^2 d^3F = \int |\psi|^2 r^2 dr d\Omega = \underbrace{\int r^2 dr}_{=1} \underbrace{\int |\psi|^2 d\Omega}_{=1}$$

$$\therefore \int_0^\infty r^2 dr = 1$$

$$\therefore \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |\psi|^2 \sin\theta d\theta d\phi = 1 \quad \text{Oppg. 4.63} \Rightarrow Y_l^m(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}}$$

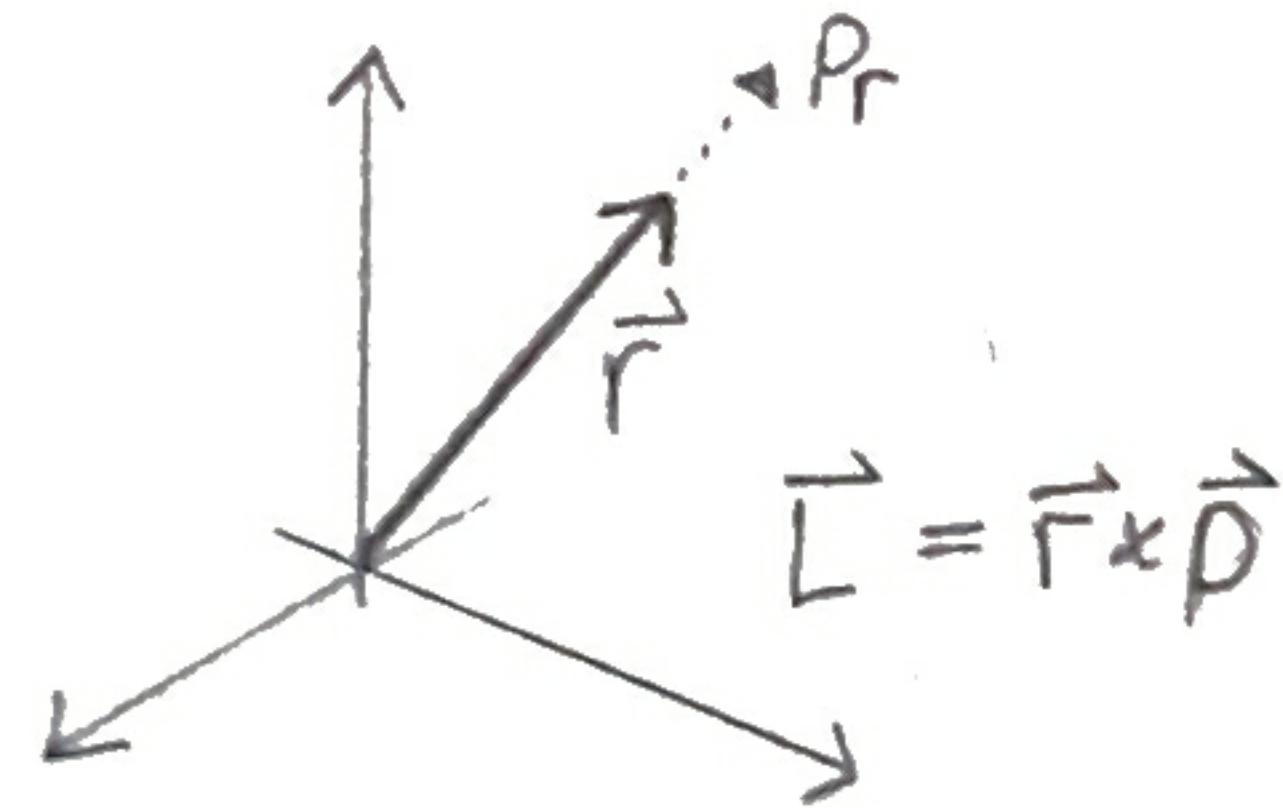
Klotytfunktion

Egenskaper $\int_0^\pi \int_0^{2\pi} (Y_l^m(\theta, \phi))^* (Y_{l'}^{m'}(\theta, \phi)) d\Omega = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$

$$\text{Passus} \quad H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V$$

$$\vec{p}^2 = \vec{p}_r^2 + L^2/r^2$$

$$H = \frac{\vec{p}_r^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2} + V$$



Radiella ekvationer

$$\text{Def: } U(r) = rR(r) \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2U}{dr^2} + (V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2}) U(r) = EU$$

$$\text{Normaliseringsskillkor } \int_0^\infty |U(r)|^2 dr = 1$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2U}{dr^2} + V_{\text{eff}}(r) U(r) = EU(r) \quad (V_{\text{eff}} = V + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2})$$

Väteatomen

$$\text{Coulombpotential } V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$\text{S.E. } -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2U}{dr^2} + \left(-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right) U = EU$$

Bundet tillstånd $E < 0$.

$$\mathcal{K} = \sqrt{-2mE/\hbar^2}, \quad s = \mathcal{K}r, \quad s_0 = \frac{me^2}{2\pi\epsilon_0\hbar^2\mathcal{K}}$$

$$\frac{d^2U}{ds^2} - \left[1 - \frac{s}{s_0} + \frac{l(l+1)}{s_0^2} \right] U(s) = 0$$

$\begin{matrix} s \\ E \\ \text{Coulomb} \end{matrix}$ $\begin{matrix} s_0 \\ \text{mm} \end{matrix}$

$$s \rightarrow \infty \Rightarrow \frac{dU}{ds} \approx U(s), \quad \text{Begränsad lösning } U(s) = Ae^{-s}$$

$$s \rightarrow 0 \Rightarrow \frac{dU}{ds} = \frac{l(l+1)}{s_0^2} U(s), \quad \text{Begränsad lösning } U(s) = Bs^{l+1}$$

$$\text{Ansats } U(s) = V(s) s^{l+1} e^{-s}$$

$$R(r) \rightarrow U(r) = rR(r) \rightarrow U(s) \rightarrow V(s) = U(s) e^s s^{-l-1}$$

$$\text{Vår radiella S.E blir då } s \frac{d^2V(s)}{ds^2} + l(l+1-s) \frac{dV}{ds} + [s_0 - s(l+1)] V = 0$$

Egenvärdesekv. för $V(s)$, med egenvärde $\underline{s_0}$.

$s_0 \rightarrow \mathcal{K} \rightarrow E \Rightarrow \text{energi egenvärdesekv. !}$

Fysiskt system $\Rightarrow V(s)$ ändlig Vs

Ansats $V(s) = \sum_{j=0}^{\infty} c_j s^j$ (potensserie)

$$\Rightarrow c_{j+1} = \frac{2(l+j+1) - s_0}{(j+1)(j+2l+2)} c_j.$$

För höga potenser j : $c_{j+1} \approx \frac{2c_j}{j+1} \Rightarrow \frac{c_{j+1}}{c_j} \approx \frac{2}{j+1}$.

$$\text{Men } e^s = \sum s^j/j! \equiv \sum A_j s^j \Rightarrow \frac{A_{j+1}}{A_j} = \frac{j!}{(j+1)!} = \frac{1}{j+1} \approx \frac{1}{j}$$

$$\Rightarrow V(s) \approx e^{2s}$$

$$\Rightarrow V(s) \approx e^{2s} s^{l+1} e^{-s} = s^{l+1} e^s \rightarrow \infty, \text{ när } s \rightarrow \infty$$

\Rightarrow Vi måste kräva att $c_N = 0$ för ngt $j=N$ ($\Rightarrow c_j = 0 \forall j > N$)

Rekursiva formeln $\Rightarrow \underline{2(N+l) - s_0 = 0}$

Q0181008 Mån Lv6

Repetition

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi) \quad \text{klotytfunk.}$$

Vinkel del $Y(\theta, \phi) \rightarrow Y_l^m(\theta, \phi)$

$$l=0, 1, 2, \dots \quad m=-l, -l+1, \dots, -1, 0, 1, \dots, l-1, l$$

Radie del $u(r) \equiv rR(r)$

$$\mathcal{K} = \sqrt{-\frac{qME}{\hbar^2}}, \quad S = \mathcal{K}r, \quad S_0 = \frac{me e^2}{2\pi\epsilon_0 \hbar^2 \mathcal{K}}$$

$$\Rightarrow \frac{d^2 u}{dr^2} - \left[1 - \frac{S_0}{S} + \frac{l(l+1)}{S^2} \right] u = 0$$

Asymptotiskt $u(S) \rightarrow e^{-S}, \quad S \rightarrow \infty$

$$u(S) \rightarrow S^{l+1}, \quad S \rightarrow 0$$

Ansats: $u(S) = v(S) S^{l+1} e^{-S}$ slut rep.

Potensserie ansats: $v(S) = \sum_{j=0}^{\infty} c_j S^j \Rightarrow \exists N \text{ s.t. } c_N = 0, c_{N-1} \neq 0$

\Rightarrow vår rekursiva formel för c_j ger då

$$2(N+l) - S_0 = 0, \quad S_0 = 2n$$

$$\Rightarrow n = N+l = 1, 2, 3, \dots$$

Energin ges då av $E_n = -\frac{Me}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{n^2}$
 via $E = -\frac{\hbar^2 \mathcal{K}^2}{8m} = -\frac{Me e^4}{8\pi^2 \epsilon_0 \hbar^2 S_0^2}$.

$$\text{Låt } E_1 = -\frac{Me}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 = -13.6 \text{ eV}$$

$$\Rightarrow E_n = \frac{E_1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Bohrsformel för energinivåerna!

Värt $\mathcal{K} = \frac{me e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \frac{1}{n} \equiv \frac{1}{an}$ där $a = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me e^2}$ kallas för

Bohr radien, $a \approx 0.5 \cdot 10^{-10} \text{ m}$.

"Radian" av elektronbanan ges av $r = a n$, $n=1, 2, \dots$

• Tre st. kvanttal som beskriver väteatomen:

n, l, m . n kallas huvudkvanttalet.

Stationär lösning: $\psi_{nem}(r, \theta, \phi) = R_n(r) Y_l^m(\theta, \phi)$

$$\text{där } R_n(r) = \frac{1}{r} s^{l+1} e^{-s} v(s), \quad s = \alpha r.$$

$v(s)$ är ett polynom av ordning $n-l-1$ i s .

Koefficienterna i serien för $v(s)$ ges av $C_{j+1} = \frac{\alpha(j+l+1-n)}{(j+1)(j+2l+2)} C_j$

Eftersom $N \geq 1$ ($C_N=0$), $N+l=n \Rightarrow n-l \geq N$, dvs $l \leq n-1$.

Det maximala värdet på l för ett givet värdet på n : $l_{\max}=n-1$.

Grund tillståndet $n=1 \Rightarrow l_{\max}=0 \Rightarrow l=m=0$

$$\Rightarrow \psi_{100}(r, \theta, \phi) = R_{10}(r) Y_0^0(\theta, \phi) \quad \text{där } R_{10}(r) = \frac{C_0}{r} e^{-r/a},$$

C_0 bestäms via normalisering.

$$1 = \int_0^\infty r^2 |R_{10}(r)|^2 dr = \frac{|C_0|^2}{a^2} \int_0^\infty r^2 e^{-2r/a} dr = \frac{|C_0|^2 a}{4} \Rightarrow C_0 = 1/\sqrt{4\pi}$$

$$\text{Vinkel delen } Y_0^0(\theta, \phi) = 1/\sqrt{4\pi} \Rightarrow \psi_{100}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{a^3 \pi}} e^{-r/a}$$

Huvudkvanttalet $n=2 \Rightarrow l=0, 1$.

För $l=0 \Rightarrow m=0$, $l=1 \Rightarrow m=-1, 0, 1$.

Det finns alltså 4 olika tillstånd som delar samma huvudkvanttal, dvs samma energi.

Vi säg att $l_{\max}=n-1$, dvs $l=0, 1, \dots, n-1$. Här finns $\Delta l+1$ möjliga värden på m . Dessa olika värdena på l & m svarar mot samma energi. Vi säger att tillstånden är degenererade till nivån $d(n) \equiv \sum_{l=0}^{l_{\max}} N(m(l)) = \sum_{l=0}^{n-1} (\Delta l + 1) = n^2$, där n^2 är nivån på vilka våra tillstånd är degenererade.

$$\Rightarrow \psi_{nem}(r, \theta, \phi) = \sqrt{\left(\frac{\alpha}{na}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{\Delta n (n+l)!}} e^{-r/na} \left[\left(\frac{\partial r}{na} \right)^l \left[L_{n-l-1}^{l+1} \left(\frac{\partial r}{na} \right) \right] Y_l^m(\theta, \phi) \right]$$

$L_{n-l-1}^{(l+1)} \left(\frac{qr}{na}\right)$ associerade Laguerre polynom.

$$\int \Psi_{n' e' m'}^* \Psi_{n e m} dr d\Omega = \delta_{nn'} \delta_{ee'} \delta_{mm'}$$

Rörelsemängds moment

Huvudkantalen $n \rightarrow$ energin, $l, m \rightarrow ?$

Klassisk fysik $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$.

$$L_x = yP_z - zP_y, L_y = zP_x - xP_z, L_z = xP_y - yP_x$$

Kvantmekaniken $\vec{p} \rightarrow \hat{p} = -i\hbar \vec{\nabla}$.

Borde kunna använda \hat{x}, \hat{p} för att bygga upp \hat{L} .

$$\text{I } 1D \text{ gäller } [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

$$\text{I } 3D \text{ gäller } [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}, \text{ dvs. } [\hat{y}, \hat{p}_y] = i\hbar, \text{ t.ex. } [\hat{x}, \hat{p}_y] = 0$$

$$\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p} \text{ verkar bra, } \hat{r} = (x, y, z)$$

Exempel

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = [\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z] = i\hbar (\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x) = i\hbar \hat{L}_z$$

$$[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x, [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y \quad \text{cyklistisk permutation!}$$

Vi kan också visa att $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ kommuterar med \hat{L}_i :

$$\forall i = x, y, z. \quad [\hat{L}^2, \hat{L}_i] = 0$$

Osäkerhetsrelationen \Rightarrow inga begränsningar på mätning av \hat{L}^2 & \hat{L}_i samtidigt.

\Rightarrow Bör kunna hitta samtliga egenfunktioner till \hat{L}^2, \hat{L}_i :

$$\hat{L}^2 f = \lambda f, \hat{L}_z f = \mu f.$$

Vi def. $\hat{L}_{\pm} = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$ (stegoperator för rörelsemängdsmomentet).

Vi kan visa att $[\hat{L}_z, \hat{L}_{\pm}] = \pm \hbar \hat{L}_{\pm}$ & $[\hat{L}^2, \hat{L}_{\pm}] = 0$

Antag att f är en egenfunktion till \hat{L}^2 & \hat{L}_z . Vad är då $(\hat{L}_{\pm} f)$?

$$\hat{L}^2 f = \lambda f \Rightarrow \hat{L}^2 (\hat{L}_{\pm} f) = \hat{L}_{\pm} (\hat{L}^2 f) = \hat{L}_{\pm} (\lambda f) = \lambda (\hat{L}_{\pm} f)$$

$\therefore \hat{L}_{\pm} f$ är också en egenfunk. till \hat{L}^2 med egenv. λ

För \hat{L}_z har vi $\hat{L}_z f = \mu f$

$$\Rightarrow \hat{L}_z (\hat{L}_{\pm} f) = L_{\pm} (\hat{L}_z f) \pm \hbar \hat{L}_{\pm} f = \hat{L}_{\pm} (\mu f) \pm \hbar \hat{L}_{\pm} f = \mu \hat{L}_{\pm} f \pm \hbar \hat{L}_{\pm} f = (\mu \pm \hbar) \hat{L}_{\pm} f.$$

∴ $\hat{L}_{\pm} f$ är en egenfunk. till \hat{L}_z med egenvärde $\mu \pm \hbar$.

\hat{L}_{\pm} är en stegoperator:

\hat{L}_+ höjer egenvärdet för \hat{L}_z med \hbar

\hat{L}_- sänker ————— .

Vi vet att $\langle L^2 \rangle = 1$ & $\langle L^2 \rangle = \langle L_x^2 \rangle + \langle L_y^2 \rangle + \langle L_z^2 \rangle = \langle L_x^2 \rangle + \langle L_y^2 \rangle + \mu^2$

$$\Rightarrow 1 \geq \mu^2$$

Det måste finnas ett översta tillstånd f_t s.a. $\hat{L}_+ f_t = 0$.

Låt $\mu = \hbar l$ (egenvärdet till \hat{L}_z) för egenfunktionen f_t :

$$\hat{L}_z f_t = \hbar l f_t \quad \& \quad \hat{L}^2 f_t = 1 f_t.$$

Vi kan skriva \hat{L}^2 i termer av \hat{L}_{\pm}, \hat{L}_z : $\hat{L}^2 = \hat{L}_{\pm} \hat{L}_{\mp} + \hat{L}_z^2 + \hbar \hat{L}_z$

$$\Rightarrow \hat{L}^2 f_t = (\hat{L}_- \hat{L}_+ + \hat{L}_z^2 + \hbar \hat{L}_z) f_t = (0 + (\hbar l)^2 + \hbar (\hbar l)) f_t = \hbar l (\hbar l + 1) f_t$$

$$\text{dvs. } 1 = \hbar l (\hbar l + 1)$$

2018/10/11

Tors LV6

Rörelsemängdsmoment

Kommunikationsrelationer $[\hat{L}^x, \hat{L}_z] = 0$

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z \quad (\text{cyklistisk})$$

$$\Rightarrow \hat{L}^x f = \lambda f \quad \& \quad \hat{L}_z f = \mu f$$

Stegoperatorer $\hat{L}_{\pm} = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$

$$\langle \hat{L}^2 \rangle = \langle \hat{L}_x^2 \rangle + \langle \hat{L}_y^2 \rangle + \langle \hat{L}_z^2 \rangle \iff \lambda = \langle \hat{L}_x^2 \rangle + \langle \hat{L}_y^2 \rangle + \mu^2 \Rightarrow \lambda \geq \mu^2$$

\Rightarrow översta tillstånd f_t s.a. $\hat{L}_+ f_t = 0$.

Vad för inte $\hat{L}_+ f_t = f_t$?

Därför $\hat{L}_+ f_t = f_t$, $\hat{L}_z f_t = \hbar l f_t \Rightarrow \hat{L}_z(\hat{L}_+ f_t) = \hat{L}_+(\hat{L}_z f_t) + \hbar \hat{L}_+ f_t$
 $= \hat{L}_+(\hbar l f_t) + \hbar f_t = \hbar l (\hat{L}_+ f_t) + \hbar f_t = \hbar l f_t + f_t = \hbar(l+1)f_t$.

$$\hat{L}_z(\hat{L}_+ f_t) = \hat{L}_z(f_t) = \hbar l f_t \Rightarrow \hbar l f_t = \hbar(l+1)f_t \Rightarrow \underline{f_t = 0}$$

Så $\hat{L}_+ f_t = 0 \Rightarrow \lambda = \hbar^2 l(l+1)$ där $\hat{L}_z f_t = \hbar l f_t$

P.S.S. finns ett understa tillstånd f_b s.a. $\hat{L}_- f_b = 0$.

Om $\hat{L}_z f_b = \hbar l f_b \Rightarrow \lambda = \hbar^2 \bar{l}(\bar{l}-1) \Rightarrow \hbar^2 l(l+1) = \hbar^2 \bar{l}(\bar{l}-1)$.

Antingen $\bar{l} = l+1$ (minsta egenv. > största egenv. för \hat{L}_z , nej!)
eller $\bar{l} = -l$ (ja, detta är ok/gäller).

Då är största egenvärdet till \hat{L}_z l & minsta är $-l$,

Om $\hat{L}_z f = \hbar m f$, för ngt m & \hat{L}_{\pm} stegar upp/ned
egenvärdet med $\hbar \Rightarrow -l+N=l \Rightarrow l=N/2$

$\Rightarrow m = -l, \dots, l$ med heltalssteg. Detta skiljer sig från
egenvärdarna vi hittade mha. differentialekvationen.

Schrödingerekvationen \Leftrightarrow ekvation för en skalär
funktion $\Psi(x,t)$.

Halvtalsegenvärdena \Leftrightarrow svarar mot icke-skalära egenskaper hos kvantsystemet.

$$\therefore \begin{cases} \hat{L}^2 f_e^m = \hbar^2 l(l+1) f_e^m \\ \hat{L}_z f_e^m = \hbar m f_e^m \end{cases} \text{ där } \begin{cases} l=0, 1/2, 1, 3/2, \dots \\ m=-l, -l+1, \dots, -1, 0, 1, \dots, l-1, l \end{cases}$$

$$\text{Hamiltonianen } H = \frac{\hat{P}_r^2}{2m} + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + V(r) \rightarrow \frac{\hat{P}_r^2}{2m} + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + V(r)$$

$$\text{S.E. } i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi$$

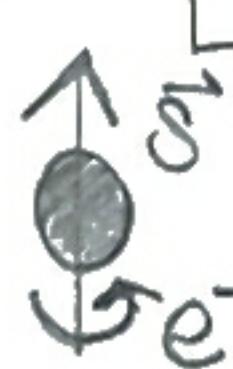
$$\Rightarrow f_e^m = Y_e^m \text{ (klotytfunktionen)}$$

$$\begin{aligned} \hat{H} \Psi &= E_n \Psi \\ \hat{L}^2 \Psi &= \hbar^2 l(l+1) \Psi \\ \hat{L}_z \Psi &= \hbar m \Psi \end{aligned}$$

Spinn

Banrörelsemängdsmoment: $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$

Inre rörelsemängdsmoment: spinn



Algebraisk teori

Spinnoperator \hat{S} : $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z, \hat{S}^2$.

$$\text{Uppfyller } \begin{cases} [\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar \hat{S}_z \\ [\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar \hat{S}_x \\ [\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar \hat{S}_y \end{cases} \quad [\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{S}_k$$

$$[\hat{S}^2, \hat{S}_z] = 0$$

Egenvektor till \hat{S}^2, \hat{S}_z : $|S, m\rangle$

$$\hat{S}^2 |S, m\rangle = \hbar s(s+1) |S, m\rangle$$

$$\hat{S}_z |S, m\rangle = \hbar m |S, m\rangle$$

$$\text{där } \begin{cases} s=0, 1/2, 1, 3/2, \dots \\ m=-s, -s+1, \dots, s \end{cases}$$

$$\text{Om } \hat{S}_{\pm} = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y \Rightarrow \hat{S}_{\pm} |S, m\rangle = \hbar \sqrt{s(s+1)-m(m\pm 1)} |S, m\pm 1\rangle$$

Vare partikel har ett inre spinn vars egenskaper fångas av våra operatorer

Elektron: spinn $1/2$ (spinorfält)

Foton: spinn 1 (vektorfält)

Gravitation: spinn $\frac{1}{2}$ (tensorfält)
 (spinn 0 → skalärer fält)

Spinnet är för egenskap hos varje partikelslag, och kan ej ändras (banrörelsemängdsmomentet kan ändras)

Spinn $\frac{1}{2}$

protoner, neutroner, elektroner

$\frac{1}{2}$ egentillstånd $s=\frac{1}{2}, m=-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

$$|s, m\rangle \rightarrow \begin{cases} |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle & \text{spinn upp } \uparrow \\ |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle & \text{spinn ned } \downarrow \end{cases}$$

Introducerar en tvåkomponentsvektorbasis (komplex!)

s.a. Alla spinntillstånd för spinn $\frac{1}{2}$ kan skrivas

$$\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = a\chi_+ + b\chi_- \text{ där } \chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ & } \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$\chi_+ \leftrightarrow |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, \chi_- \leftrightarrow |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle, \chi$ kallas spinor.

⇒ Operatorer \Leftrightarrow linjära transformationer $\Leftrightarrow 2 \times 2$ matriser

$$\hat{s}^2 |s, m\rangle = \hbar^2 s(s+1) |s, m\rangle. \quad \hat{s}^2 \rightarrow S^2 \text{ s.a. } \begin{cases} S^2 \chi_+ = \frac{3}{4} \hbar^2 \chi_+ \\ S^2 \chi_- = \frac{3}{4} \hbar^2 \chi_- \end{cases}$$

$$\text{Låt } S^2 = \begin{pmatrix} c & d \\ e & f \end{pmatrix}.$$

$$\begin{pmatrix} c & d \\ e & f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow c = \frac{3}{4} \hbar^2, e = 0 \Rightarrow S^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} c & d \\ e & f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \Rightarrow d = 0, f = \frac{3}{4} \hbar^2$$

$$\hat{s}_z |s, m\rangle = \hbar m |s, m\rangle \Rightarrow \hat{s}_z \rightarrow S_z = \begin{pmatrix} \hbar/2 & 0 \\ 0 & -\hbar/2 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$(S_z \chi_+ = \hbar/2 \chi_+, S_z \chi_- = -\hbar/2 \chi_-)$$

stegoperatorer

$$\hat{s}_{\pm} \rightarrow S_{\pm} \quad \begin{cases} S_+ \chi_- = \hbar \chi_+, S_- \chi_+ = \hbar \chi_- \\ S_+ \chi_+ = S_- \chi_- = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{aligned} S_+ &= \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ S_- &= \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Men $S_{\pm} = S_x \pm iS_y$

$$\Rightarrow S_x = \frac{\hbar}{2}(10) \quad \& \quad S_y = \frac{\hbar}{2}(0-i).$$

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \text{ där } \sigma_x = (01), \sigma_y = (0-i), \sigma_z = (10)$$

kallas Paulis spinnmatriser.

S_i, S^2 hermitska \Rightarrow observabler, S_{\pm} ej hermitsk.

För ett allmänt tillstånd måste normalisering gälla:

$$X = aX_+ + bX_- \Rightarrow X^*X = 1 = |a|^2 + |b|^2,$$

där $|a|^2$ är sanno. att möta $\hbar/2$ på X .

$|b|^2$ - $\hbar/2$ på X .

Vad händer om vi möter S_x ?

$$\text{Eigenvärde } S_x X = \lambda X, \begin{vmatrix} -1 & \frac{\hbar}{2} \\ \frac{\hbar}{2} & 1 \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \lambda = \pm \frac{\hbar}{2}$$

Egenspinor

$$S_x \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} (01) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} (\beta) \Rightarrow \begin{pmatrix} \beta \\ \alpha \end{pmatrix} = \pm \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \text{ dvs. } \beta = \pm \alpha$$

$$\text{Normalisering } |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \quad \left\{ \begin{array}{l} X_+^{(\alpha)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (1) \\ X_-^{(\alpha)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (-1) \end{array} \right., \quad \lambda = \frac{\hbar}{2}$$

Vi kan använda $X_{\pm}^{(\alpha)}$ som basvektorer lika gärna som X_{\pm} ("z-bas")

Energin av ett magnetiskt moment i ett yttre magnetfält ges av $H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} \rightarrow \hat{H} \rightarrow$ linjär transformation, dvs en 2×2 -matris: $H = -\gamma \vec{S} \vec{S}$ där \vec{S} är en matriss-representation av spinnvektorn & $\vec{\mu} = \gamma \vec{S}$

2018/10/15
Mån Lv7

WKB-approximationen

W: Wentzel, K: Kramers, B: Brillouin

Metod för att hitta approximativa lösningar till differentialekvationer.

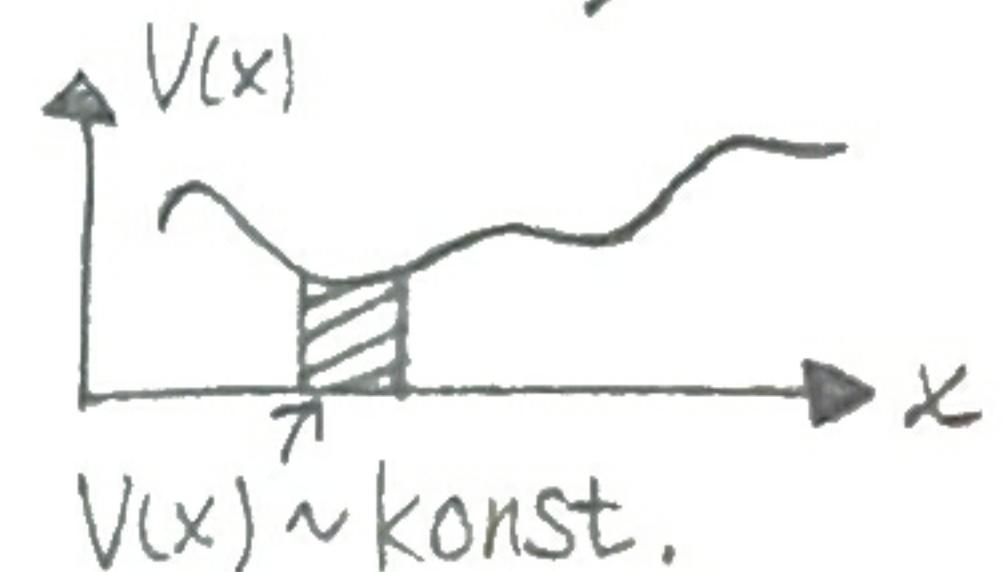
- ⇒ Hitta två olika skallängder i problemet vi tittar på.
- ⇒ Derivatorna av våra fysikaliska storheter får olika storlek beroende på vilken längdskala de associeras till.

Schrödingerekvationen

$$-\frac{\hbar^2}{8m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi, \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{p^2(x)}{\hbar^2}\psi$$

$$\text{där } p(x) = \sqrt{8m(E-V(x))}$$

- $V=\text{konst.}$
- a) $E > V \Rightarrow p \in \mathbb{R} \Rightarrow \psi \sim e^{\pm ikx}$
 - b) $E < V \Rightarrow p \in \mathbb{C} \Rightarrow \psi \sim e^{\pm kx}$



Ansats $\begin{cases} \psi(x) = A(x)e^{i\phi(x)} \\ A, \phi \text{ reella funktioner} \end{cases}$

$$\Rightarrow \text{S.E. ger da} \quad \frac{d\psi}{dx} = \frac{dA}{dx} e^{i\phi} + i \frac{d\phi}{dx} A e^{i\phi},$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \left[\frac{d^2A}{dx^2} + 2i \frac{dA}{dx} \frac{d\phi}{dx} + iA \frac{d^2\phi}{dx^2} - A \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 \right] e^{i\phi}$$

$$\Rightarrow \frac{d^2A}{dx^2} + 2i \frac{dA}{dx} \frac{d\phi}{dx} + iA \frac{d^2\phi}{dx^2} - A \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 = -\frac{P^2}{\hbar^2} A$$

$$\text{Realdelen} \quad \frac{d^2A}{dx^2} - A \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 = -\frac{P^2}{\hbar^2} A \quad (E > V(x))$$

$$\text{Imaginärdelen} \quad 2 \frac{dA}{dx} \frac{d\phi}{dx} + A \frac{d^2\phi}{dx^2} = 0 \quad \Rightarrow \frac{d}{dx} \left(A^2 \frac{d\phi}{dx} \right) = 0$$

$$\Rightarrow A(x) = C / \sqrt{|d\phi/dx|}$$

A^Q kopplas till sannolikheten.

$\frac{d\phi}{dx} \leftrightarrow$ "hastighet" hos partikeln.

"Klassiska regimen"

dvs. partikelns våglängd är liten jämfört med potentialens förändring i x . $V(x)$

$$\lambda_{dB} \ll \left| \frac{1}{V} \frac{dV}{dx} \right|^{-1}$$

Realdelen av S.E. går ej att integrera i allmänhet.

$V(x)$ varierar långsamt \Rightarrow långsamt varierande amplitud.

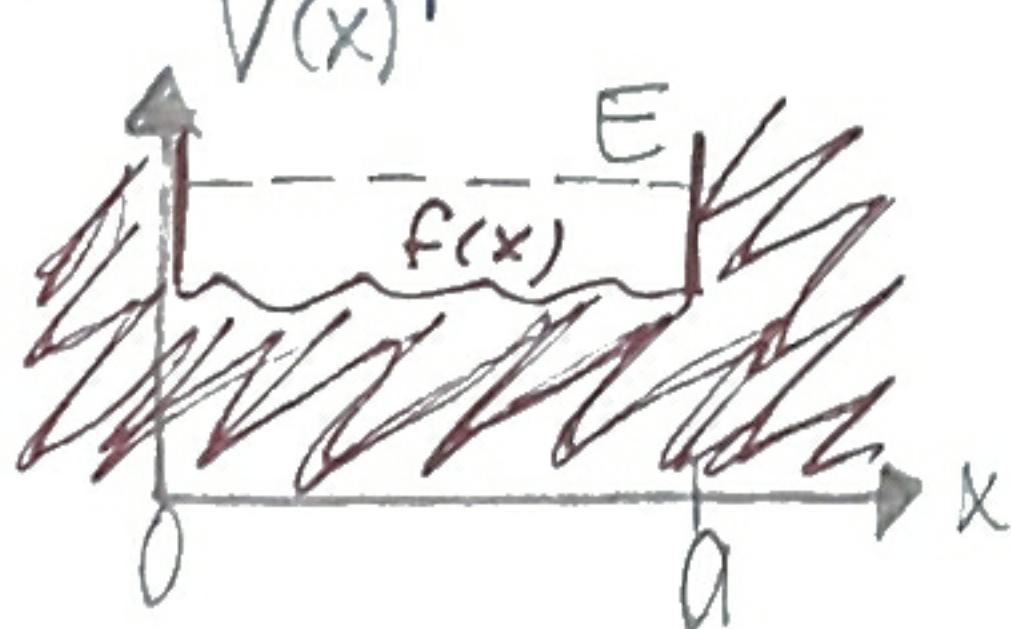
$A(x)(?)$

WKB-approx. $\frac{1}{A} \frac{d^2A}{dx^2} \ll \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 \Rightarrow \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 \approx \frac{P^2}{\hbar^2}$

$$\Rightarrow \phi(x) \approx \pm \frac{1}{\hbar} \int P(x) dx$$

$$\Psi(x) = A(x) e^{i\phi(x)} \approx \frac{C}{\sqrt{P(x)}} e^{\pm i \int P(x) dx}, \quad A(x) = \frac{C}{\sqrt{|i d\phi/dx|}}$$
$$\left| \frac{d\phi}{dx} \right| = -\frac{P}{\hbar} \Rightarrow |\Psi(x)|^2 = \frac{|C|^2}{P(x)}$$

Exempel 9.1



$$V(x) = \begin{cases} f(x), & 0 < x < a \\ \infty, & x < 0, x > a \end{cases}$$

$$E(x) > V(x) \quad \forall x \in [0, a]$$

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{P(x)}} [C_+ e^{i\phi(x)} + C_- e^{-i\phi(x)}] \text{ där } \phi(x) = \frac{1}{\hbar} \int_0^x P(x') dx'$$

$$\Rightarrow \Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{P(x)}} [C_1 \sin \phi + C_2 \cos \phi].$$

Randvillkor: $\Psi(0) = \Psi(a) = 0 \Rightarrow C_2 = 0 \text{ & } \phi(a) = n\pi, n=1, 2, 3, \dots$

$$\Rightarrow \int_0^a P(x) dx = n\pi \hbar.$$

Check: för $f(x)=0 \rightarrow P(x)=\sqrt{amE} \Rightarrow E = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, n=1, 2, 3, \dots$

Tunnlings

Uppstår när vi har en ändlig potential $V(x)$ & $E < V(x)$ i en region.

Utför samma WKB-approx. som tidigare, men med

$$P(x) = \sqrt{2m(E - V(x))} = i\sqrt{2m|E - V(x)|} = i|P(\omega)|.$$

Samma typ av räkning som för $E > V(x)$ ger då

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{|P(x)|}} C e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int_0^x |P(x')| dx'}$$

A = inkommande

B = reflekterad

F = transitterad

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, x > a \\ f(x), & 0 < x < a \end{cases}$$

$$x < 0: \Psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

$$x > a: \Psi(x) = F e^{ikx}$$

$0 < x < a$ WKB-approx. ger en linjärkomb. av växande & avtagande lösningar

$$\Psi(x) = \frac{C}{\sqrt{|P(x)|}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^x |P(x')| dx'} + \frac{D}{\sqrt{|P(x)|}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^x |P(x')| dx'}.$$

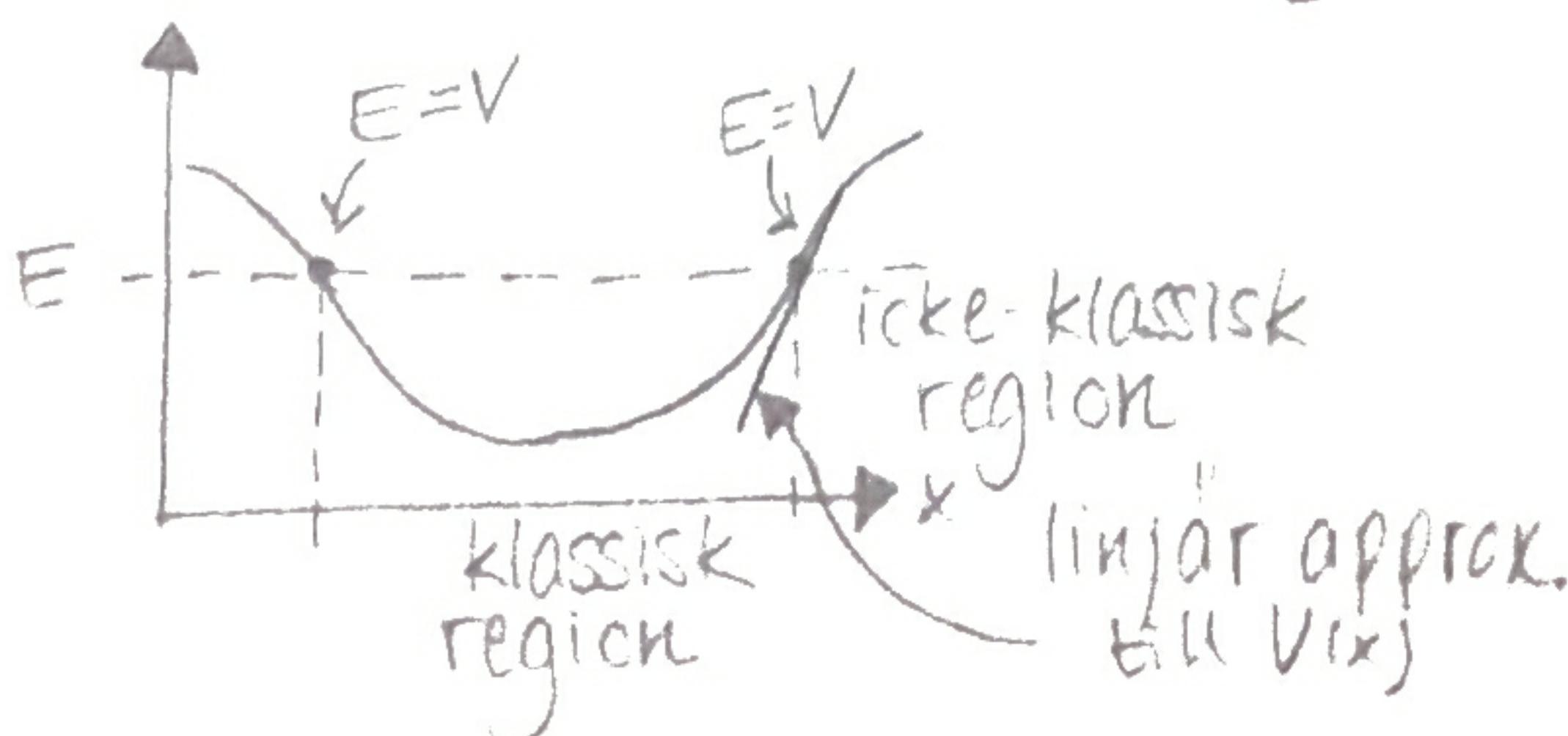
För hög / vid potential $V(x) \Rightarrow$ exponentiellt växande del blir "för stor"

$$\Rightarrow \Psi(x) \approx \frac{D}{\sqrt{|P(x)|}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^x |P(x')| dx'}.$$

Transmissionen kommer då att se ut som

$$T \approx e^{-\frac{2}{\hbar} \int_0^a |P(x)| dx} \quad (\sim \frac{|F|^2}{|A|^2})$$

Vändpunkter & anslutningsformler



För att kunna rita lösningar i alla regioner behöver vi veta vad som händer i x där $E = V(x)$

I närmheten av det x där $E = V(x) \Rightarrow$ linjär approx.

Flytta origo s.t. $x=0$ där $E = V(x)$

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} \left[B e^{\frac{i}{\hbar} \int_x^0 p(x') dx'} + C e^{-\frac{i}{\hbar} \int_x^0 |p(x')| dx'} \right], x < 0$$
$$\frac{D}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^x |p(x')| dx'}, x > 0$$

Problem: $E \rightarrow V \Rightarrow p \rightarrow 0 \Rightarrow \Psi \rightarrow \infty$

$$V(x) = E + \frac{dH}{dx} \Big|_{x=0} x = E + V'(0)x$$

S.E. med linjär potential (Ψ_p = plåsterfunktion)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi_p}{dx^2} + (E + V'(0)x)\Psi_p = E\Psi_p$$

$$\Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi_p}{dx^2} = V'(0)x\Psi_p.$$

Låt $\alpha = (\frac{2m}{\hbar^2} V'(0))^{1/3}$ & $z = \alpha x \Rightarrow \frac{d^2\Psi_p}{dz^2} = z\Psi_p$

TVÅ linjära obr. lösningar Airyekvationen.

$A_i(z), B_i(z)$.

Innehåller både oscilatoriskt & experimentellt beteende.

$$\Psi_p(x) = a A_i(\alpha x) + b B_i(\alpha x).$$

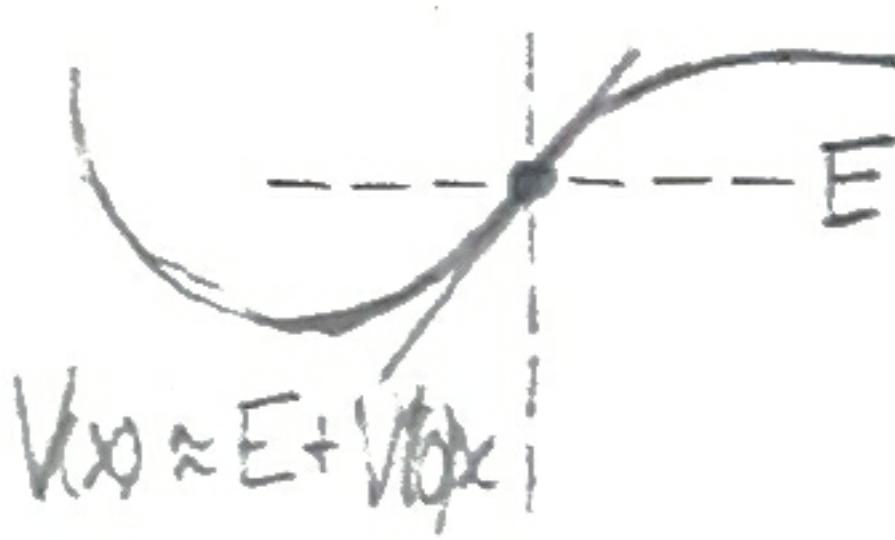
Denna lösning ska nu matchas till våra WKB-lösningar i regioner kring $x=0$.

2018/10/18

Tors Lv7

WKB-approximationer

$$V(x)$$



Punkten x där $V(x)=E$

$$\Rightarrow \psi_p(x) \sim \frac{1}{\sqrt{p(x)}}$$

$$\text{där } p(x) = \sqrt{2m(E-V)}.$$

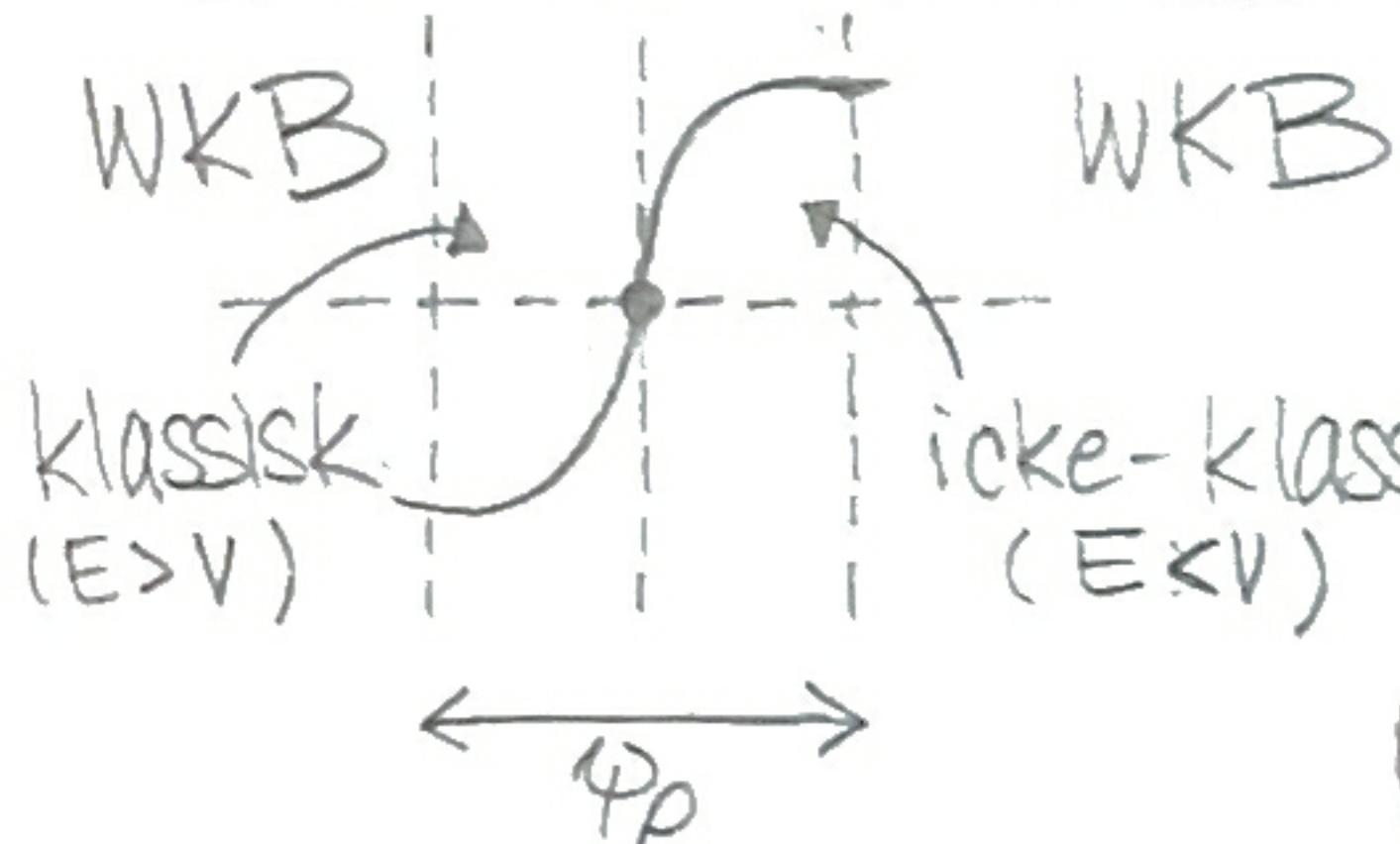
Låt $V(x) = E + V'(0)x$ där $V(0) = E$.

$$\Rightarrow \frac{d\psi_p}{dz} = z\psi_p \quad \text{Airys ekvation där } z = \alpha x$$

$$\text{där } \alpha = (\frac{2m}{\hbar^2} V'(0))^{1/3}.$$

TVÅ linj. obr lösningsar $A_i(z), B_i(z)$, $\therefore \psi_p(x) = aA_i(\alpha x) + bB_i(\alpha x)$

Ska nu matchas till WKB-lösn. För $E < V$, $E > V$.



Plösterregionen $V(x) \approx E + V'(0)x$

$$\Rightarrow p(x) \approx \sqrt{2m(E-E-V'(0)x)} = \hbar \alpha^{3/2} \sqrt{-x}$$

a) icke-klassiska regionen

$$\int_0^x |p(x')| dx' \approx \hbar \alpha^{3/2} \int_0^x \sqrt{-x'} dx = \frac{2}{3} \pi (\alpha x)^{3/2}$$

WKB-lösningen blir då

$$\psi_p(x) \approx \frac{D}{\sqrt{\pi} \alpha^{3/4} x^{1/4}} e^{-\frac{2}{3} (\alpha x)^{3/2}}.$$

Via våra Airyfunk. har vi

$$\psi_p(x) \approx \frac{a}{\sqrt{4\pi} (\alpha x)^{1/4}} e^{-\frac{2}{3} (\alpha x)^{3/2}} + \frac{b}{\sqrt{4\pi} (\alpha x)^{1/4}} e^{\frac{2}{3} (\alpha x)^{3/2}}$$

Jämför ψ & ψ_p

$$\Rightarrow a = \sqrt{\frac{4\pi}{\alpha \hbar}} D \text{ och } b = 0.$$

b) Klassiska regionen ($E > V$)

$$\int_x^0 p(x') dx' \approx \frac{q}{3} \hbar (-\alpha x)^{3/2}.$$

WKB-lösningen blir då

$$\Psi(x) \approx \frac{1}{\sqrt{\hbar \alpha^{3/4} (-x)^{1/4}}} [Be^{\frac{q}{3} i(-\alpha x)^{3/2}} + Ce^{-\frac{q}{3} i(-\alpha x)^{3/2}}].$$

Plåsterfunktionerna i den klassiska regionen.

$$\Psi_p(x) \approx \frac{a}{\sqrt{\pi} (-\alpha x)^{1/4}} \left[e^{i\pi/4} e^{\frac{q}{3} i(-\alpha x)^{3/2}} - e^{-i\pi/4} e^{-\frac{q}{3} i(-\alpha x)^{3/2}} \right]$$

$$\text{Jämför } \Psi_p \text{ & } \Psi \Rightarrow B = \sqrt{\frac{\hbar \alpha}{\pi}} \frac{a}{\partial C} e^{i\pi/4}, C = -\sqrt{\frac{\hbar \alpha}{\pi}} \frac{a}{\partial C} e^{-i\pi/4}$$

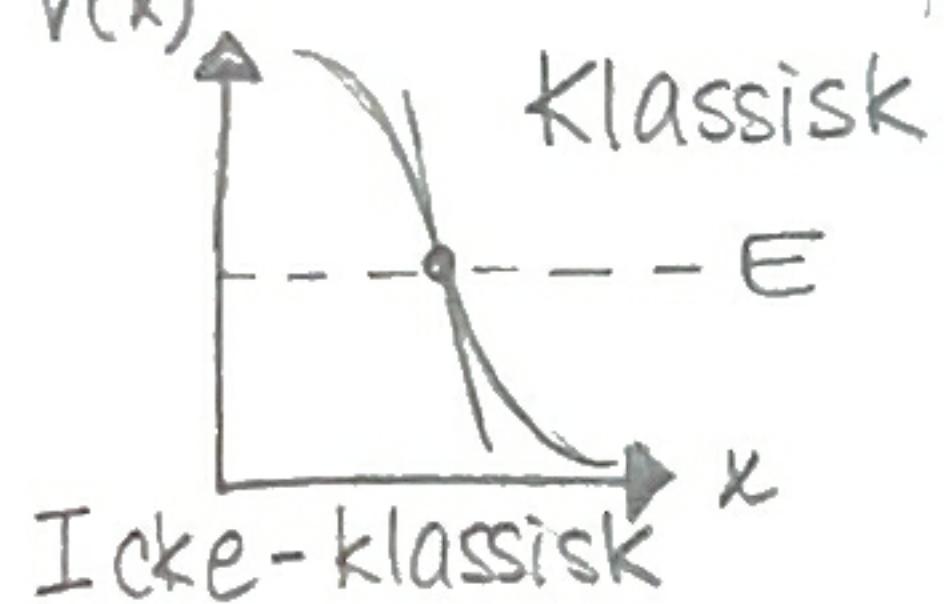
Eftersom $a = \sqrt{\frac{4\pi}{\alpha \hbar}} D$

$\Rightarrow B = -ie^{i\pi/4} D$ & $C = ie^{-i\pi/4} D$, kallas för anslutningsformler
Dessa knyter ihop WKB-lösningarna i $E > V$ & $E < V$ -regionerna via Ψ_p .

Flytta nu $E = V$ från $x=0$ till $x=x_0$. Slutliga WKB blir då

$$\Psi(x) \approx \begin{cases} \frac{\partial D}{\sqrt{Vp(x)}} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right], & x < x_0 \\ \frac{D}{\sqrt{Vp(x)}} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x |p(x')| dx' \right], & x > x_0 \end{cases}$$

P.S.S, kan vi behandla skärningspunkten $E = V(x)$ för $\frac{dV}{dx} < 0$



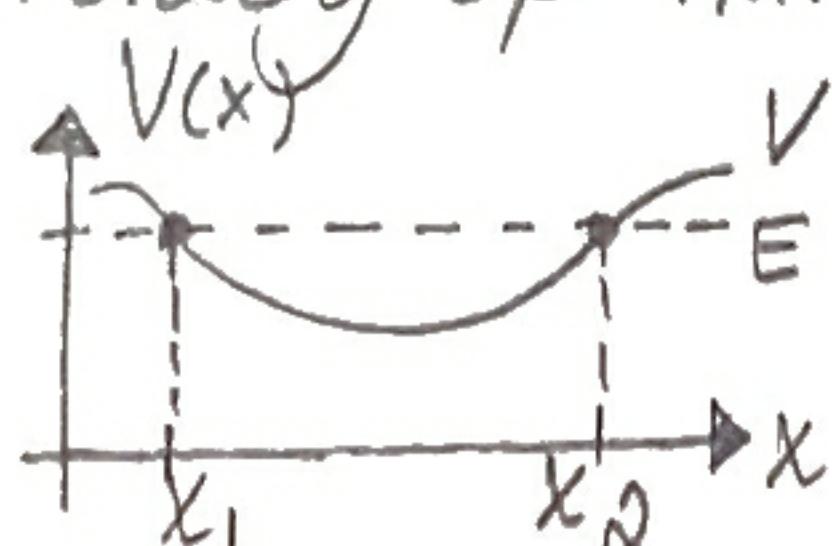
WKB-lösning via Ψ_p & anslutningsformler:

$$\Psi(x) \approx \begin{cases} \frac{D'}{\sqrt{Vp(x)}} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} |p(x')| dx' \right] & x < x_0 \\ \frac{\partial D'}{\sqrt{Vp(x)}} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right] & x > x_0 \end{cases}$$

där x_0 är punkten där $E = V(x_0)$.

För en potentialgrop har vi två skärningspunkter x_1 & x_2

$$\text{där } E = V$$



Lösningar för $x_1 < x < x_2$

$$\Psi(x) \approx \frac{2D}{\sqrt{p(x)}} \sin \theta_0(x); \quad \theta_0(x) = \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} p(x') dx' + \frac{\pi}{4}$$

$$\text{eller } \Psi(x) \approx -\frac{2D'}{\sqrt{p(x)}} \sin \theta_1(x), \quad \theta_1(x) = -\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' - \frac{\pi}{4}.$$

Förutom att \tilde{n} behöver matcha D, D' behöver våra fasfaktorer ge samma x -beroende.

$$D \sin \theta_0(x) = -D' \sin \theta_1(x) \Leftrightarrow \sin \theta_0(x) = A \sin \theta_1(x) \text{ där } A = -D'/D.$$

$$\sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right] = A \sin \left[-\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' - \frac{\pi}{4} \right].$$

$$\text{Låt } \eta \equiv \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} p(x') dx' \Rightarrow \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} p(x') dx' = \eta - \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx'.$$

$$\text{Låt } a(x) = -\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' - \frac{\pi}{4}.$$

$$\begin{aligned} \sin(\eta + a(x) + \frac{\pi}{2}) &= A \sin a(x) \quad \text{där } \sin(\eta + \frac{\pi}{2}) \cos a(x) + \\ &\quad + \cos(\eta + \frac{\pi}{2}) \sin a(x) = A \sin a(x). \\ \Rightarrow \begin{cases} \eta + \frac{\pi}{2} = (n+1)\pi, \quad n=0,1,2,\dots \\ A = (-1)^n, \quad n=0,1,2,\dots \end{cases} \end{aligned}$$

$$\text{dvs. } \eta = \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} p(x') dx' = (n + \frac{1}{2})\pi, \quad n=0,1,2,\dots$$

$$\therefore \int_{x_1}^{x_2} p(x') dx' = \hbar(n + \frac{1}{2})\pi, \quad n=0,1,2,\dots$$

Kvantiseningsvilkoren på energinivåerna i en allmän potential $V(x)$. ($p(x) = \sqrt{2m(E-V(x))}$)

Symmetri & Konserveringslagar

- Konserveringslagar är fundamentala i fysik.
- Symmetri är extremt viktiga för vår beskrivning av omgivningen.
- Symmetri \Leftrightarrow konserveringslagar Noethers teorem

Symmetri transformation \Leftrightarrow operator

Rumstranslation förflyttar en funktion (tillstånd)

från en punkt till en annan: $\psi(x) = \hat{T}(a)\psi(x) \equiv \psi(x-a)$

Speglingstransf. tar värdet av funktionen x till
värdet i punkten $-x$: $\psi(x) = \hat{\Pi}\psi(x) \equiv \psi(-x)$

Rotation roterar värdet av en funktion en vinkel φ
runt z-axeln: $\psi(r, \theta, \phi) = \hat{R}(\varphi)\psi(r, \theta, \phi) \equiv \psi(r, \theta, \phi - \varphi)$.

Symmetrioperatorer \Leftrightarrow differentialoperatorer?

$$\hat{T}(a)\psi(x) = \psi(x-a) = \sum_{n=0}^{\infty} (-a)^n / n! d^n \psi(x) / dx^n.$$

$\psi(x)$ godt, $\Rightarrow \hat{T}(a) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-ia\hat{p}}{n} \right)^n = \exp\left(-\frac{ia}{\hbar} \hat{p}\right)$,
p kallas generatorn av translation.

$\hat{T}(a)$ är unitär, dvs $\hat{T}^*(a) = \hat{T}^{-1}(a)$

Transformation av operatorer

$\psi'(x) = \hat{T}(a)\psi(x)$, def! \hat{Q}' som den transformerede operatoren

\hat{Q}' via $\langle \psi' | \hat{Q}' | \psi' \rangle = \langle \psi | \hat{Q}' | \psi \rangle$.

$|\psi'\rangle = \hat{T}|\psi\rangle \Rightarrow \langle \psi' | \hat{Q}' | \psi' \rangle = \langle \psi | \hat{T}^* \hat{Q} \hat{T} | \psi \rangle$ dvs $\hat{Q}' = \hat{T}^* \hat{Q} \hat{T}$

Translationsinvanans

Systemets egenskaper begränsas av hamiltonianen, dvs \hat{H} ,

Vt säger att systemet är translationsinvant om

$$\hat{H}' = \hat{T}^* \hat{H} \hat{T} = \hat{H}.$$

\hat{T} är unitär, $\hat{T}^* = \hat{T}^{-1} \Rightarrow$ multiplikationen $\hat{T}^* \hat{H} \hat{T}$ med \hat{T}

$$\Rightarrow \hat{T}(\hat{T}^* \hat{H} \hat{T}) = \hat{T}(\hat{T}^{-1} \hat{H} \hat{T}) = \hat{H} \hat{T} = \hat{T} \hat{H}$$
 eller $[\hat{H}, \hat{T}] = 0$.

Om $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x) \Rightarrow V(x+a) = V(x)$ om translationsinvant.

- a) Kont. translationssymmetri $\Rightarrow V = \text{konst.}$
 b) Diskret translationssymmetri \Rightarrow kristaller
 med gitterpotential.

Kontinuerlig translationssymmetri

$$\lambda \rightarrow \varepsilon a, \varepsilon \ll 1, \Rightarrow \hat{T}(\varepsilon a) = \exp\left(-\frac{i\varepsilon a}{\hbar} \hat{P}\right) \approx 1 - \frac{i\varepsilon a}{\hbar} \hat{P}.$$

$$0 = [\hat{H}, \hat{T}] \approx [\hat{H}, 1 - \frac{i\varepsilon a}{\hbar} \hat{P}] = -\frac{i\varepsilon a}{\hbar} [\hat{H}, \hat{P}]$$

Ehrenfests teorem

$$\frac{d}{dt} \langle P \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{P}] \rangle = 0$$

Translationssymmetri \Leftrightarrow P "resemångdsbevarande".