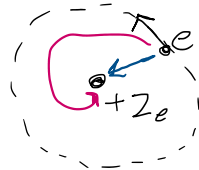
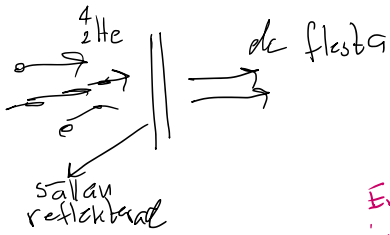


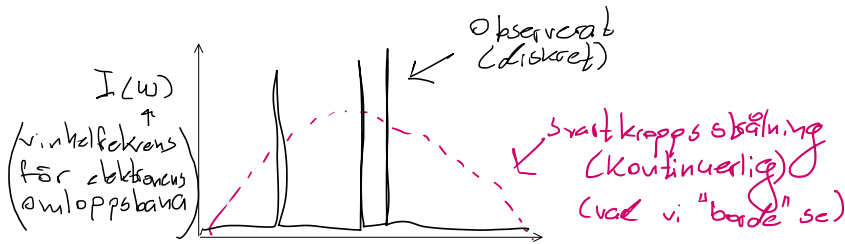
# 1. Spektrallinjer

Vi visste sedan under 1900-talet att atomer är för det mesta tom.

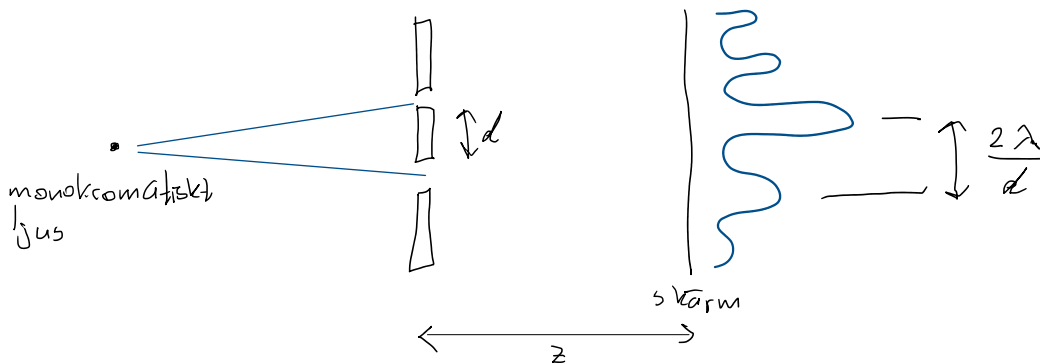


$Z_e$  = "atomnummer" eller antalet protoner i kärnan.

Enligt klassisk fysik faller elektronen in mot kärnan



# 2. Dubbelspaltsexperimentet



Om skillnaden mellan avstånden är  $n\lambda$  ( $n \in \mathbb{Z}$ ,  $\lambda = \text{våglängd}$ ) fås "konstruktiv" interferens (förstärkt)

- Vi ser samma mönster om vi skickar partiklar med en viss energi, som om partiklarna beter sig som vågor!
- Om vi skickar punkter en efter en, ser vi samma interferensmönster, som om en enda partikel hade gått genom båda spalter samtidigt.
- Om vi skickar partiklar en efter och kollar vilken spalt den gick genom, försvinner interferensmönstret.

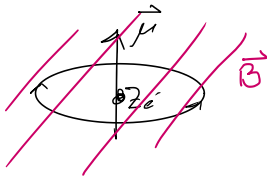
Varför beter partiklar sig som vågor?  
 Varför påverkar en mellanliggande mätning det slutliga resultatet?

# 3. Stern-Gerlach experiment

Vissa atomer, t.ex. Silver, har ett magnetiskt dipolmoment

$$\vec{\mu} = \dots$$

Vissa atomer, t.ex. Silver, har ett magnetiskt dipolmoment



$\vec{\mu}$  = dipolmoment

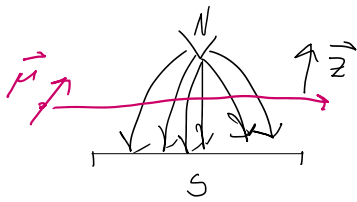
Växelverkande energi

$$E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

kraft  $\vec{F} = \vec{\mu} \cdot \nabla \vec{B}$

$$F_z = \mu_z \frac{\partial B}{\partial z}$$

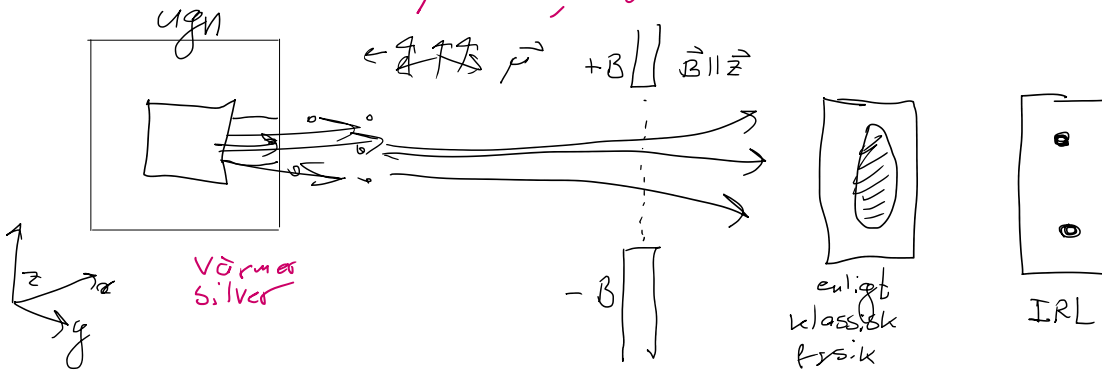
Ett Stern-Gerlach filter består av



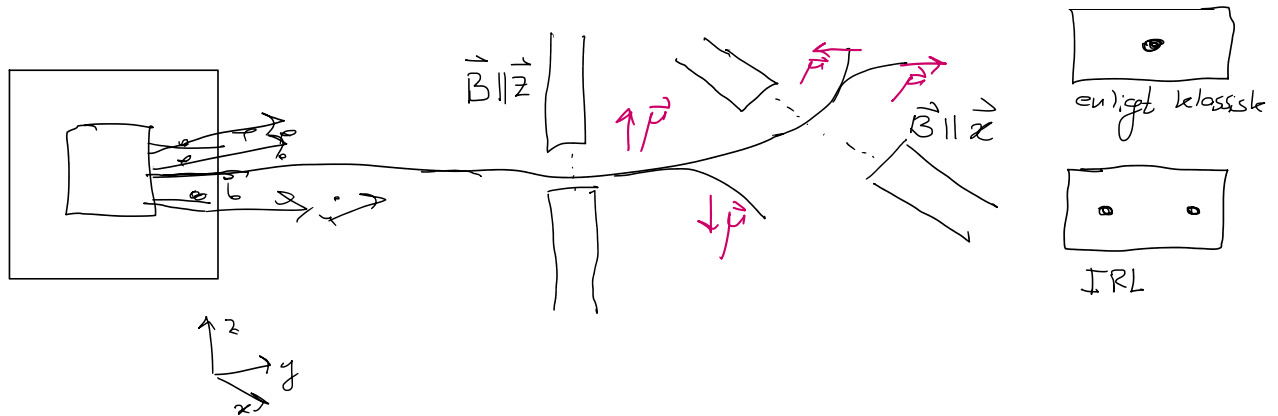
$\vec{\mu} \parallel \vec{B}$ , deflektad mot starkare  $\vec{B}$

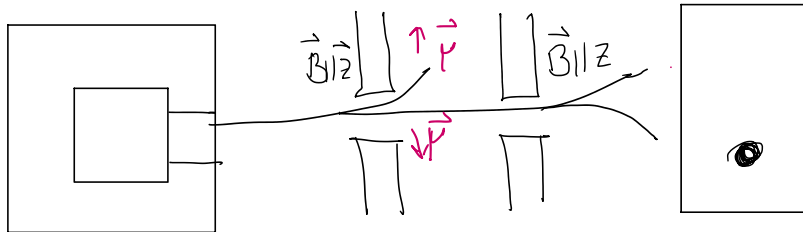
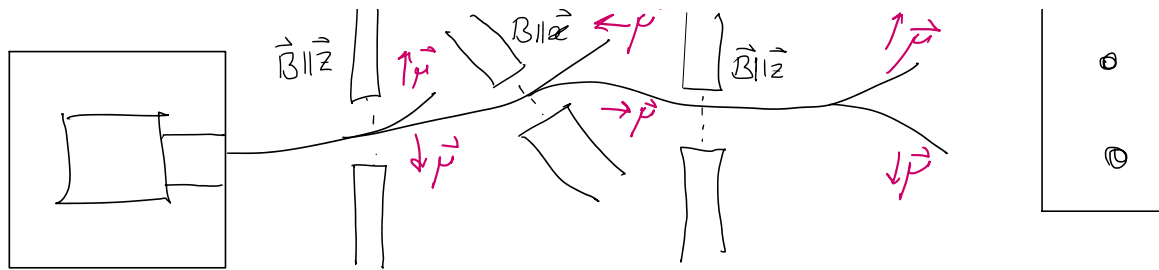
$\vec{\mu} \parallel \vec{B}$ , deflektad mot svagare  $\vec{B}$

$\vec{\mu} \perp \vec{B}$ , odeflektad



Det som händer IRL är som om dipolmomenten antingen är helt parallella eller helt antiparallella med B.

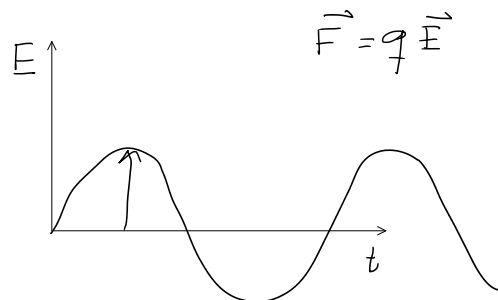
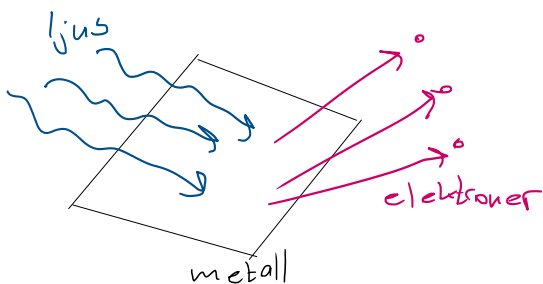




Varför kan projektionen av atomernas dipolmoment ta bara vissa, diskreta värden?

Varför "glömmar" partikeln sina egna egenskaper när vi utför en mellanliggande mätning?

#### 4. Den fotoelektriska effekten

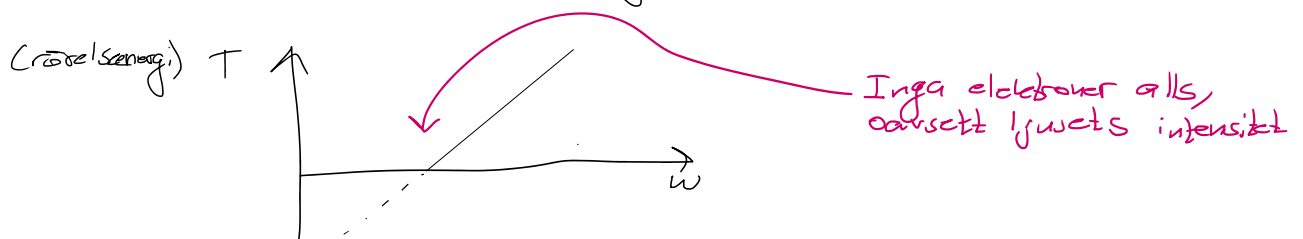


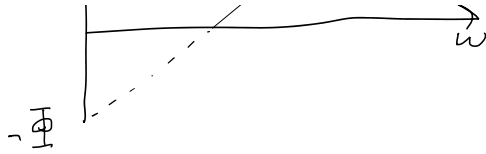
$$\text{intensitet} = \frac{\text{effekt}}{\text{area}} = \frac{1}{2} c \epsilon_0 |\vec{E}|^2$$

IRL

Ökar intensiteten  $\Rightarrow$  Borde antalet elektroner öka  $\checkmark$  (klassisk fysik)  
 $\Rightarrow$  Borde rörelseenergin öka  $\times$

Ökar frekvensen  $\Rightarrow$  Borde antalet stanna oförändrat  $\times$  (Enligt klassisk fysik beror inte effekten på frekvensen.)  
 $\Rightarrow$  Borde rörelseenergin stanna oförändrat  $\times$





Einsteins förklaring: Ljus består av partiklar (fotoner)  
som har energi  $E = h\omega$

↑  
Planck's reducerade konstant

$$N_e \propto \frac{\text{intensitet}}{h\omega}$$

En foton ger all dess energi till en elektron

## 5. Observationer

1. I vissa fall kan fysikaliska mängder ta bara diskreta värden
2. Partiklar kan bete sig som vågor,  $\omega = E/h \rightarrow E = h\omega$
3. Ljus kan både bete sig som en partikel
4. Resultatet av en mätning är "obestämd"
5. Mätning "stör" systemet på ett oundvikligt sätt.  
Resultatet kan bero på mellanliggande mätningar



1. Sannolikhet

Aristoteles: "Det sannolika är det som för det mesta sker."

↑ antalet gånger att någon händelse sker

Vi ska definiera sannolikhet "operationellt":  $P = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_L}{N}$

↑ det totala antalet försök

$P \in \mathbb{R}$  ,  $0 \leq P \leq 1$  , inga enheter

Regler för sannolikhet:

1. Om två exklusiva händelser har sannolikheterna  $P(X)$  respektive  $P(Y)$  är sannolikheten att X eller Y sker:  $P(X \text{ eller } Y) = P(X) + P(Y)$
2. Om det finns två exklusiva sätt att uppnå samma resultat X, med sannolikheterna  $P(X_1)$ ,  $P(X_2)$ , är sannolikheten att X sker genom 1 eller 2:  $P(X) = P(X_1) + P(X_2)$

Vi påstår att det finns en "sannolikhetsamplitud", ett komplext tal vars belopp i kvadrat ger en sannolikhet:

$P = |\alpha|^2, \alpha \in \mathbb{C}$

$0 \leq P \leq 1 \Rightarrow 0 \leq |\alpha| \leq 1$  men  $\arg(\alpha)$  är obestämt

Vi ska ersätta reglerna ovan med:

1. Om det finns två exklusiva resultat, X och Y, får vi addera sannolikheterna precis som förut:

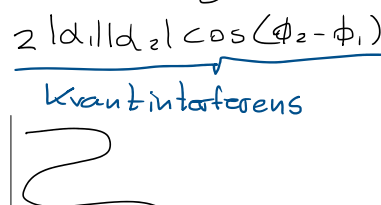
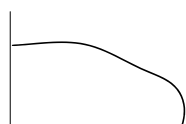
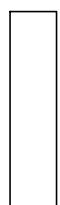
$P(X \text{ eller } Y) = |\alpha(X)|^2 + |\alpha(Y)|^2$

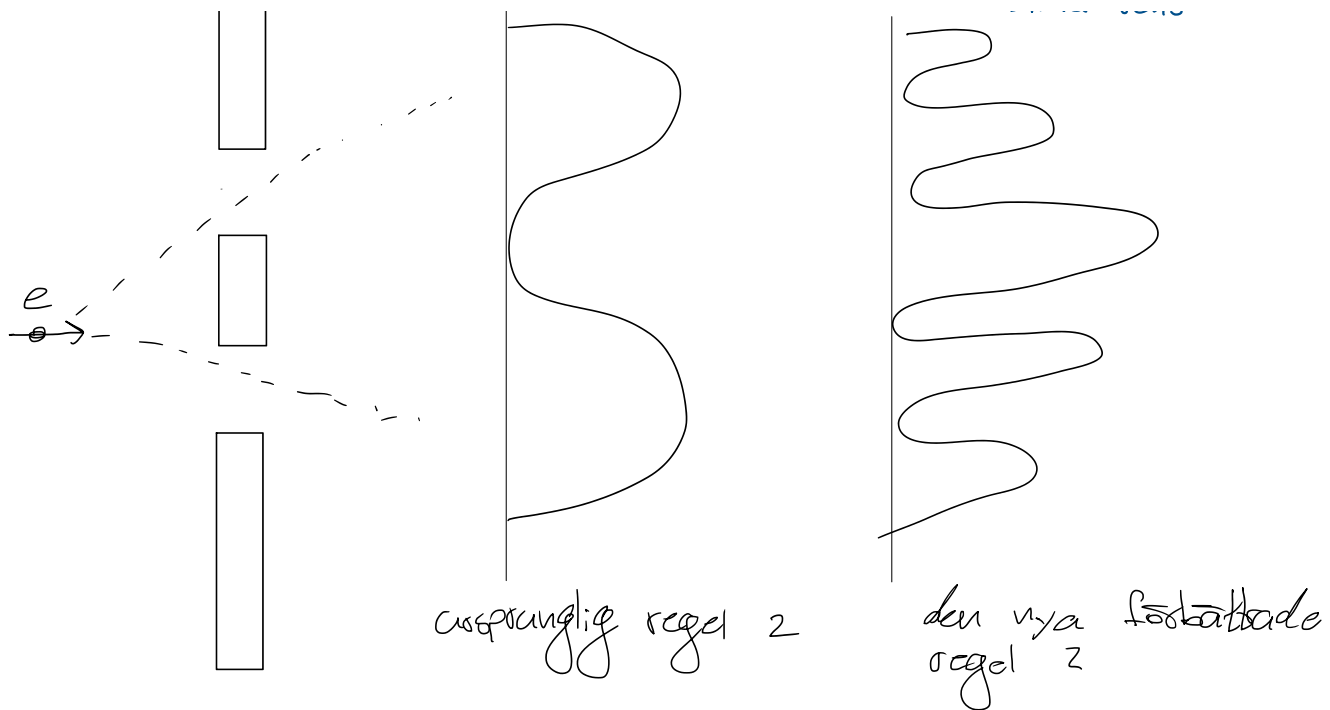
2. Om det finns två exklusiva sätt att uppnå samma resultat, måste vi addera sannolikhetsamplituderna först.

$P(X_1 \text{ eller } X_2) = |\alpha(X_1) + \alpha(X_2)|^2 = |\alpha_1 + \alpha_2|^2 =$   
 $= (\alpha_1 + \alpha_2)^* (\alpha_1 + \alpha_2) = |\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2 + \alpha_1^* \alpha_2 + \alpha_2^* \alpha_1$

$\alpha_1 = |\alpha_1| e^{i\phi_1}, \alpha_2 = |\alpha_2| e^{i\phi_2}$

$P(X) = P(X_1 \text{ eller } X_2) = |\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2 + |\alpha_1||\alpha_2| \left\{ e^{i(\phi_2 - \phi_1)} + e^{i(\phi_1 - \phi_2)} \right\}$





Kvantfysikens mål är att bestämma sannolikhetsamplituder.  
Vi ska införa en ny notation för dem

$$\langle \text{resultat} | \text{system} \rangle \in \mathbb{C}$$

= "sannolikhetsamplitud att få ett visst resultat när vi mäter det givna system"

Exempel 1 : Säg att ett system får ha bara vissa, diskreta energier  
 $E_1, E_2, E_3, \dots, E_N$

När vi har ett allmänt system använder vi symbolen " $\psi$ " för namnet

$\langle E_1 | \psi \rangle$  = "Sannolikheten att en energimätning ger  $E_1$  om vi har det givna systemet"

$$P(E_1) = |\langle E_1 | \psi \rangle|^2 = \begin{matrix} \text{motsvarande} \\ \text{sannolikhet} \end{matrix}$$

$$\sum_{n=1}^N P(E_n) = \sum_{n=1}^N |\langle E_n | \psi \rangle|^2 = 1$$

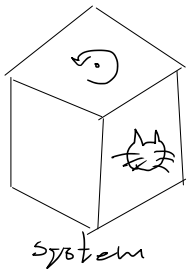
Exempel 2 : Säg att systemets position  $x$  ligger i området  
 $0 \leq x \leq L$

$\langle x | \psi \rangle =$  "sannolikhetsamplitud att en positionsmätning ger  $x$  när vi har det givna systemet"

$|\langle x | \psi \rangle|^2 =$  en "sannolikhetstäthet"

$$P(x_1 < x < x_2) = \int_{x_1}^{x_2} |\langle x | \psi \rangle|^2 dx = \text{"sannolikhet att en positionsmätning ger } x_1 < x < x_2$$

## 2. Tillstånd



möjliga mätningar

position  $x$

energi  $E$

rörelsemängd  $p$

liv/död

...

En fullständig beskrivning av systemet består av en sannolikhetsamplitud för varje möjligt resultat av varje möjlig mätning

"Listan" över alla dessa sannolikhetsamplituder kallas för ett kvanttillstånd:  $|\psi\rangle$  ← ket

$|\psi\rangle$  kan tolkas som en vektor.

Vi beskriver ett kvantsystem med ett kvanttillstånd  $|\psi\rangle$  som är en typ vektor,  $|\psi\rangle \in \mathbb{C}^N$  eller  $\infty$  ("ket")

1. Vi kan addera och multiplicera med komplexa tal dessa tillstånd:

$$|\psi\rangle = \alpha |a\rangle + \beta |b\rangle, \quad \alpha, \beta \in \mathbb{C}$$

$|\psi\rangle, |a\rangle, |b\rangle$  bor i samma vektorrum

2. Vi kan representera den i termer av en bas

$$|\psi\rangle = \sum_n d_n |v_n\rangle \quad \text{— bas tillstånd}$$

dar  $\{ |v_n\rangle \}$  spänner upp hela vektorrummet

3. För att definiera en inre produkt behöver vi en "adjunkt" till tillståndet:

$$|\psi\rangle^\dagger = \langle \psi | = \text{"bra"}$$

Adjunkt = ett konjugerat transponat  
 En "bra"  $\langle \psi |$  kan tolkas som en radvektor

4. Inreprodukten (skalärprodukten) byggs av en bra och en ket:

$$\langle \phi | \psi \rangle \in \mathbb{C}$$

$\langle \phi | \psi \rangle = 0$ ,  $|\psi\rangle$  och  $|\phi\rangle$  är ortogonala mot varandra.

$\langle \psi | \psi \rangle = 1$ ,  $|\psi\rangle$  är "normerad"

$$|\psi\rangle = \sum_m \alpha_m |v_m\rangle, \quad |\phi\rangle = \sum_n \beta_n |v_n\rangle$$

$$\langle \phi | \psi \rangle = \left( \sum_m \beta_m^* \langle v_m | \right) \left( \sum_n \alpha_n |v_n\rangle \right) =$$

$$= \sum_m \sum_n \beta_m^* \alpha_n \underbrace{\langle v_m | v_n \rangle}_{=}$$

$$= \sum_n \beta_n^* \alpha_n \quad ? \quad \left. \begin{array}{l} 0 \quad m \neq n \\ 1 \quad m = n \end{array} \right\} = \delta_{mn}$$

$$\langle \phi | \psi^* \rangle = \sum_n \beta_n \alpha_n^* = \sum_n \alpha_n^* \beta_n = \langle \psi | \phi \rangle$$

### 3. Superpositioner

Vi ser att en sannolikhetsamplitud motsvarar "överlappningen" mellan ett tillstånd som beskriver systemet och ett annat tillstånd som beskriver resultatet.

$$\langle E_2 | E_1 \rangle = 0 \quad \text{om } E_1 \neq E_2$$

$$\langle E_1 | E_1 \rangle = 1$$

Så en "bra" är tillstånd där systemet har en viss egenskap.

$$|E_1\rangle \leftrightarrow \langle E_1|$$

Tillstånden som motsvarar olika resultat är ortogonala med varandra.

Dvs. mängden  $\{|E_n\rangle\}$  av alla exklusiva fysikaliska resultat bildar en ortonormerad bas.

$$|\psi\rangle = \sum_n \alpha_n |E_n\rangle \quad \text{"Superposition"}$$

"Superposition"

$$|\psi\rangle = \sum_n \alpha_n |E_n\rangle$$

$\uparrow$  ett allmänt tillstånd  
 $\uparrow$  sannolikhetsamplitud att en mätning ger  $E_n$   
 $\leftarrow$  tillstånd där systemet har energi  $E_n$

$$\langle E_m | \psi \rangle = \sum_n \alpha_n \underbrace{\langle E_m | E_n \rangle}_{\text{Sum}} = \alpha_m = \text{precis som förut}$$

#### 7. Matrixnotation

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$\langle \psi | = (\alpha_1^* \ \alpha_2^* \ \alpha_3^* \ \dots)$$

$$\langle \phi | \psi \rangle = (\beta_1^* \ \beta_2^* \ \beta_3^* \ \dots) \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$|\psi\rangle \langle \phi| = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \vdots \end{pmatrix} (\beta_1^* \ \beta_2^* \ \beta_3^* \ \dots) = \begin{pmatrix} \alpha_1 \beta_1^* & \alpha_1 \beta_2^* & \dots \\ \alpha_2 \beta_1^* & \alpha_2 \beta_2^* & \\ \vdots & \ddots & \end{pmatrix}$$

Det här objektet kallas för en "operator" och motsvarar en matris.

1.  $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ i \end{pmatrix}$ ,  $\langle \psi | = ?$

Svar:  $\langle \psi | = (0 \ -i)$

2.  $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} -i \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ ,  $\langle \psi | = ?$

Svar:  $(i \ 1 \ 0)$

$$3. |\psi\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\phi\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$|\phi\rangle\langle\psi| = ?$$

$$\text{Svar: } \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} (1 \ 0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$4. |\psi\rangle\langle\phi| = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (1 \ 1) = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$6. |\psi\rangle = \frac{|1\rangle - |2\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |\phi\rangle = \frac{|1\rangle + i|2\rangle}{\sqrt{2}}, \quad \langle\phi|\psi\rangle = ?$$

Antag  $|1\rangle$  och  $|2\rangle$  bildar en ortonormerad bas.

$$\left( \frac{\langle 1| - i\langle 2|}{\sqrt{2}} \right) \left( \frac{|1\rangle - |2\rangle}{\sqrt{2}} \right) = \frac{1}{2} + \frac{i}{2}$$

$$7. \langle\psi|\phi\rangle = \left( \frac{\langle 1| - \langle 2|}{\sqrt{2}} \right) \left( \frac{|1\rangle + i|2\rangle}{\sqrt{2}} \right) = \frac{1 - i}{2}$$

$$\text{Alternativt: } \langle\psi|\phi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle^* = \frac{1}{2} - \frac{i}{2} = \frac{1 - i}{2}$$

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$$

$$|\psi\rangle = \frac{i|1\rangle - |2\rangle}{\sqrt{2}} \cdot |\phi\rangle = \frac{|1\rangle + i|2\rangle}{\sqrt{2}}$$

$$\langle\psi|\phi\rangle = ?$$

$$\langle\psi|\phi\rangle = \frac{1}{2} (-i \cdot 1 + (-1) \cdot i) = -i$$

$$|\psi\rangle = \alpha|1\rangle + \beta|2\rangle. \text{ P(1) om } \alpha = \frac{i}{2} ? \quad P = |\langle \text{resultat} | \psi \rangle|^2 \quad \alpha = \frac{i}{2} \rightarrow P = |\alpha|^2 = \frac{1}{4}$$

$$|\psi\rangle = \alpha|1\rangle + \beta|2\rangle. \text{ P(1) om } \beta = e^{i\pi/3} ? \quad P(1) = |\alpha|^2 = 1 - |\beta|^2 = 1 - |\exp(i\pi/3)|^2 = 0$$

$$\text{Om } \beta = \frac{1+i}{2} : P(1) = ?$$

$$P(1) = 1 - \left| \frac{1+i}{2} \right|^2 = 1 - \left( \frac{1-i}{2} \right) \left( \frac{1+i}{2} \right) = \dots = \frac{1}{2}$$

$$|z|^2 = z^* z$$

## 1 Operatörer

En operator är ett objekt som tar en ket och ger tillbaka en annan ket

$$\hat{Q} |\psi\rangle = |\phi\rangle$$

Om  $|\psi\rangle$  kan tolkas som en vektor kan en operator tolkas som en matris.

I. Alla operatörer vi möter i kvantfysik är "linjära".

$$\hat{Q} (\alpha|\psi\rangle + \beta|\psi\rangle) = \alpha \hat{Q} |\psi\rangle + \beta \hat{Q} |\psi\rangle$$

II. Ibland har operatörer speciella ket som de inte förändrar mer än att omskala den

$$\hat{Q} |\psi\rangle = \lambda |\psi\rangle$$

↑ egenvärde  $\in \mathbb{C}$       ↖ egentillstånd

↑ egenvärde  $\in \mathbb{R}$

III. Operatorns adjunkt  $\hat{Q}^\dagger$  definieras som

$$(\langle \psi | \hat{Q} | \phi \rangle)^* = \langle \phi | \hat{Q}^\dagger | \psi \rangle$$

Om  $\hat{Q}$  ses som en matris, är  $\hat{Q}^\dagger$  sitt konjugerade transponerat

De viktigaste operatorer inom kvantfysik är s.k. "Hermitiska" operatorer (självdjugerade)

$$\hat{Q} = \hat{Q}^\dagger$$

Hermitiska operatorer har tre viktiga egenskaper:

1. Dess egenvärden är rella
2. Egentillstånd som motsvarar olika egenvärden är ortogonala
3. Dess egentillstånd bildar en "fullständig bas", dvs de spänner upp hela vektorrummet som alla tillstånd bor i

Det går att representera ett allmänt tillstånd som en linjär kombination av en hermitisk operators egentillstånd

$$|\psi\rangle = \sum_n \alpha_n |q_n\rangle$$

Alla tillstånd kan representeras som en linjär kombination av en Hermitisk operators egentillstånd.

Princip 1: Alla fysikaliska mängder (energi, position...) har en motsvarande Hermitisk operator. De möjliga utfall av en mätning är operatorns egenvärden.

Vi gör såhär eftersom:

- Bara reella tal är rimliga som resultat av en mätning
- Vi måste ha att olika fysikaliska resultat är beskrivna av ortogonala tillstånd

$$\langle E_1 | E_2 \rangle = 0 \text{ om } E_1 \neq E_2$$

och  $\{E_n\}$  är egenvärden av någon "energioperator"

Måste komma ihåg:

× Bevisa att en Hermitisk operator har reella egenvärden och ortogonala egentillstånd:

Låt  $\hat{Q}$  vara en Hermitisk operator, s.e.  $\hat{Q} = \hat{Q}^\dagger$ , och  $|q_n\rangle$  ett av



Bevisa att en Hermitisk operator har reella egenvärden och ortogonala egen tillstånd.

Låt  $\hat{Q}$  vara en Hermitisk operator, s.a.  $\hat{Q} = \hat{Q}^\dagger$ , och  $|q_n\rangle$  ett av  $\hat{Q}$ 's egentillstånd med motsvarande egenvärde  $q_n$ .

$$\begin{aligned} (\langle q_n | \hat{Q} | q_n \rangle)^* &= \langle q_n | \hat{Q}^\dagger | q_n \rangle \\ &= \langle q_n | \hat{Q} | q_n \rangle = \end{aligned}$$

$$(q_n \langle q_n | q_n \rangle)^* = q_n \langle q_n | q_n \rangle$$

$$q_n^* \langle q_n | q_n \rangle = q_n \langle q_n | q_n \rangle \Rightarrow q_n \in \mathbb{R}$$

$$(\langle a | b \rangle)^* = \langle b | a \rangle$$

$$(\langle q_m | \hat{Q} | q_n \rangle)^* = \langle q_n | \hat{Q} | q_m \rangle$$

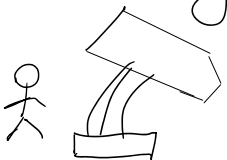
$$(q_n \langle q_m | q_n \rangle)^* = q_m \langle q_n | q_m \rangle$$

$$q_n \langle q_n | q_m \rangle = q_m \langle q_n | q_m \rangle$$

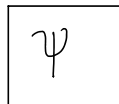
Om  $q_n \neq q_m$ ,  $\langle q_n | q_m \rangle = 0 \Rightarrow |q_n\rangle$  och  $|q_m\rangle$  är ortogonala egentillstånd

Som ansvariga fysiker lovar vi att normera alla egentillstånd vi finner.

## 2. Mätning



Experimentell utrustning



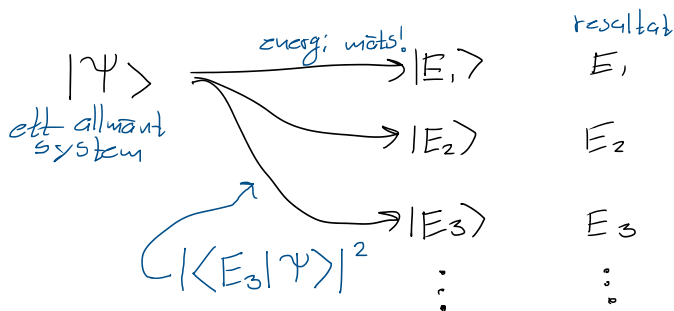
System

Systemet och utrustningen blir sammankopplade under en kort tid

Det är för svårt att förutsäga växelverkan mellan systemet och utrustningen, om utrustningen är mycket större än systemet.

**Princip 2:** När vi mäter ett system, "kollapsar" dess tillstånd till ett av den motsvarande Hermitiska operatorns egentillstånd. ( $q_n$ )

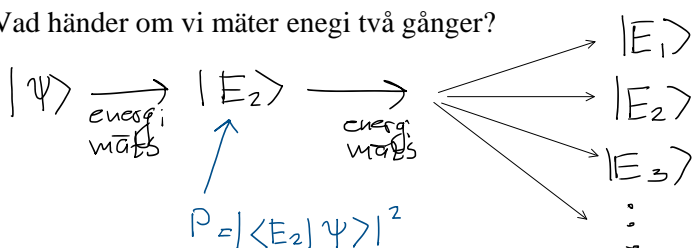
Sannolikheten av kollapsen är  $|\langle q_n | \psi \rangle|^2$ .



Mätningen stör systemet och dess tillstånd förändras. Om vi får  $E_2$  som resultat, betyder det att systemets energi faktiskt var  $E_2$  före mätningen och att dess tillstånd var  $|E_2\rangle$ ?

Det finns experiment som visar att svaret är nej - systemet har ingen bestämd energi tills den mäts.

Vad händer om vi mäter energi två gånger?

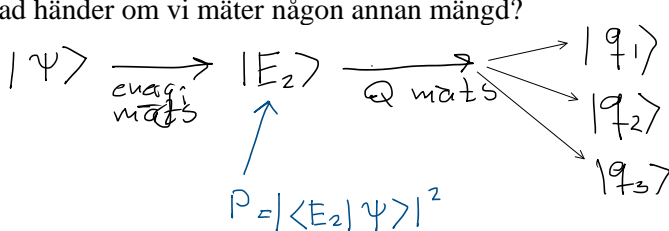


$$P = |\langle E_1 | E_2 \rangle|^2 = 0$$

$$P = |\langle E_2 | E_2 \rangle|^2 = 1$$

$$P = |\langle E_3 | E_2 \rangle|^2 = 0$$

Vad händer om vi mäter någon annan mängd?



$$P = |\langle q_1 | E_2 \rangle|^2 \neq 1 \quad \text{generellt}$$

$$P = |\langle q_2 | E_2 \rangle|^2 \neq 1 \quad \text{generellt}$$

När får vi veta både  $Q$  och energi? --> Om vi har ett tillstånd som är ett egentillstånd till både  $\hat{Q}$  och energioperatören.

Om alla egentillstånd är delade mellan  $\hat{Q}$  och energioperatören, kan vi generellt veta båda två exakt och samtidigt.



Säg att vi har två operatörer  $\hat{P}$  och  $\hat{Q}$ , samt  $\{|v_n\rangle\}$  som uppfyller  $\hat{P}|v_n\rangle = p_n|v_n\rangle$  och  $\hat{Q}|v_n\rangle = q_n|v_n\rangle$

då säger vi att egentillstånden är delade.

Två operatörer delar alla egentillstånd om de "kommuterar"

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0$$

Två operatörer delar alla egentillstånd om de "kommuterar"

$$[\hat{P}, \hat{Q}] = \hat{P}\hat{Q} - \hat{Q}\hat{P} = 0$$

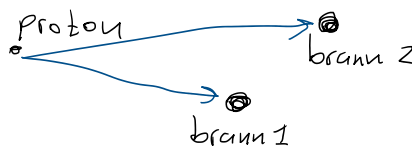
Kommutatorn

Dvs ordningen av operatorerna spelar inte roll

$$[\hat{P}, \hat{Q}] = 0 \iff \hat{P} \text{ och } \hat{Q} \text{ har en gemensam bas: egentillstånd}$$

### 3. Exempel

Säg att vi har en partikel som är bunden till ett par potentialbrunnar



Partikeln kan antingen finnas vid brunn 1 eller brunn 2. Tillstånden som motsvarar dess positioner är  $|1\rangle$  och  $|2\rangle$ .

"Energioperatorn"  $\hat{H} = \epsilon (|1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|)$

Vi mäter partikelns position och finner att den är vid brunn 1.

Det ursprungliga tillståndet är  $|1\rangle$

a) Om vi mäter partikelns energi, vad har vi för möjliga utfall och deras motvarande sannolikhet

Energioperatorn  $\hat{H} \leftrightarrow \text{energi}$

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

Tillstånd där systemet har bestämd energi

Anta att  $|E\rangle = \alpha|1\rangle + \beta|2\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$ ,

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \epsilon (|1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|) = \epsilon \left( \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right) = \epsilon \left[ \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \right] = \\ &= \epsilon \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Eigenkvation

$$\hat{H}|E\rangle = E|E\rangle = \epsilon \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} -E & \epsilon \\ \epsilon & -E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

determinant=0

$$\Rightarrow (-E)^2 - \epsilon^2 = 0$$

$\Rightarrow E = \pm \varepsilon \Rightarrow$  möjliga utfall är  $\pm \varepsilon$

$$E = +\varepsilon \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \Rightarrow \alpha = \beta \quad |E\rangle = N \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$E = -\varepsilon \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \Rightarrow \alpha = -\beta \quad |E\rangle = N \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

Normeringsfaktor

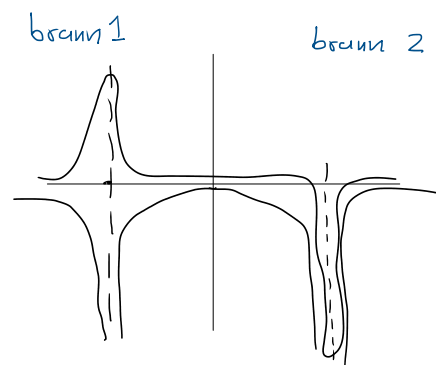
Energioperatorn har  $\pm \varepsilon$  som egenvärden och  $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix}$  som egentillstånd.

$$|+\varepsilon\rangle = \frac{|1\rangle + |2\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |-\varepsilon\rangle = \frac{|1\rangle - |2\rangle}{\sqrt{2}}$$

$$P = |\langle +\varepsilon | 1 \rangle|^2 = \left[ \left( \frac{\langle 1 | + \langle 2 |}{\sqrt{2}} \right) |1\rangle \right]^2 = \frac{1}{2}$$

$$P = |\langle -\varepsilon | 1 \rangle|^2 = \frac{1}{2}$$

Den lägsta energin motsvarar en superposition, som om partikeln var "delad" mellan brunnar.



Hermitiska operatorer har tre viktiga egenskaper:

1. Dess egenvärden är rella
2. Egentillstånd som motsvarar olika egenvärden är ortogonala
3. Dess egentillstånd bildar en "fullständig bas", dvs de spänner upp hela vektorrummet som alla tillstånd bor i

Förra gången:

1. Alla fysikaliska mängder har en motsvarande Hermitisk operator. De möjliga utfall en mätning är operators egenvärden.
2. När en mängd Q mäts, kollapsar tillståndet  $|\psi\rangle$  till ett av  $\hat{Q}$ :s egentillstånd med sannolikhet  $P = |\langle q_n | \psi \rangle|^2$ .
3. Två mängder  $\hat{P}$  och  $\hat{Q}$  är "kompatibla", dvs det är möjligt att veta båda två exakt och samtidigt, om deras operatorer kommuterar:  $[\hat{P}, \hat{Q}] = \hat{P}\hat{Q} - \hat{Q}\hat{P} = 0$

1. Schrödinger-ekvationen

Princip 3: Alla kvanttillstånd utvecklas över tid i enlighet med "den tidsberoende Schrödinger ekvationen":

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

$\hat{H}$  är "Hamiltonianen", operatorm som motsvarar systemets totala energi.

"Det är lätt att lösa TDSE, jämfört med Newtons andra lag.

1. TBSE (Tidsberoende schrödinger ekvationen) är linjär:

$\hat{H}|\psi_1\rangle$  och  $|\psi_2\rangle$  uppfyller den, så gör  $\alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle$  också det

2. Den är första ordning i tid. Vi behöver bara ett begynnelsevillkor för att lösa den.

Jämför med Newtons andra lag  $\frac{d^2}{dt^2} = \vec{F} = m\vec{a}$  som är andra ordning i tid.

I  $|\psi\rangle$  finns både position och acceleration, eftersom den beskriver alla tillstånd

Ett kvanttillstånd innehåller all information om ett system, allt. Newtons andra lag betraktar vi position och rörelsemängd separat istället.

Allmän lösning för TDSE:

Vi ska använda att en Hermitisk operator har egentillstånd som bildar en fullständig bas.

→ Vår lösningsansats blir  $|\psi\rangle = \sum_n \alpha_n |E_n\rangle$

Sannolikhetsamplitud för  $E_n$       Energietillstånd

VL:  $\hat{H}|\psi\rangle = \sum_n \alpha_n E_n |E_n\rangle$

HL:  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = i\hbar \sum_n \frac{d\alpha_n}{dt} |E_n\rangle + \alpha_n \frac{\partial |E_n\rangle}{\partial t}$

VL = HL:

$\sum_n \alpha_n E_n |E_n\rangle = \sum_n i\hbar \frac{d\alpha_n}{dt} |E_n\rangle$

= 0 om  $\hat{H} \neq \hat{H}(t)$

Att Hamiltonianen inte beror på tid betyder det inte att systemet inte beror på tid, utan att systemets fysik inte beror på tid

Detta innebär att kraften som verkar på partiklar inte beror på tid, men partiklarna själva får bero på tid och röra sig

Detta innebär att kraften som verkar på partiklar inte beror på tid, men partiklarna själva får bero på tid och röra sig

$$\sum_n \alpha_n \langle E_n | E_n \rangle = \sum_n i\hbar \frac{d\alpha_n}{dt} |E_n\rangle$$

$$\langle E_m | \rightarrow \quad \langle E_m | \rightarrow$$

$$\sum_n \alpha_n \langle E_m | E_n \rangle = \sum_n i\hbar \frac{d\alpha_n}{dt} \langle E_m | E_n \rangle$$

$$\langle E_m | E_n \rangle = \delta_{mn}$$

$$\alpha_m \dot{E}_m = i\hbar \frac{d\alpha_m}{dt}$$

$$\alpha_m \frac{E_m}{i\hbar} = \alpha_m \left( -\frac{i E_m}{\hbar} \right)$$

$$\Rightarrow \alpha_m \left( -\frac{i E_m}{\hbar} \right) = \alpha_m \left( -\frac{i E_m}{\hbar} \right)$$

$$\Rightarrow \alpha_m = C \exp\left(-\frac{i E_m t}{\hbar}\right)$$

$$\alpha_m(t) = \alpha_m(t=0) \exp\left(-\frac{i E_m t}{\hbar}\right)$$

$$\Rightarrow \text{Lösningen } |\Psi; t\rangle = \sum_n \underbrace{\alpha_n(t=0)}_{\text{Fas från}} \underbrace{\exp\left(-\frac{i E_n t}{\hbar}\right)}_{\text{Wiggle-faktor}} |E_n\rangle$$

Fas från  
begynnelsevillkor

Wiggle-faktor

Wiggle-faktorn säger att olika energiegentillstånd får en oscillerande fasfaktor, och hur fort det oscillerar beror på energin

$$|\Psi; t\rangle = \sum_n \alpha_n(t=0) \exp\left(-\frac{i E_n t}{\hbar}\right) |E_n\rangle$$

Ett allmänt recept för att löse TDSE:

1. Lös egenvärdesekvationen  $\hat{H}|E\rangle = E|E\rangle$  för  $\{E_n\}$  och  $\{|E_n\rangle\}$ .
2. Uttryck det begynnande tillståndet  $|\psi; t=0\rangle$  som en linjär kombination av  $|E_n\rangle$ .
3. Lägg till "wiggle faktor"  $\exp\left(-\frac{i E_n t}{\hbar}\right)$ .

Det som är svårt med processen är att man först måste lösa egenvärdesekvationen för Hamiltonianen

Det som är svårast att lösa "den tidsberoende Schrödinger-ekvationen".

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

Från lösningen  $|\Psi; t\rangle = \sum_n \alpha_n \exp\left(-\frac{i E_n t}{\hbar}\right) |E_n\rangle$  kan vi se vissa egenskaper:

Sannolikhetsamplitud att en energimätning ger  $E_m$  är

$$\langle E_m | \Psi; t \rangle = \alpha_m \exp\left(-\frac{i E_m t}{\hbar}\right)$$

$$|\langle E_m | \Psi; t \rangle|^2 = |\alpha_m|^2$$

$\Rightarrow P(E_m) \neq P(E_m)(t) \Rightarrow$  Sannolikheten att mäta en viss energi inte beror på tid

$\Rightarrow \sum_n P_n E_n = \langle E \rangle$  beror inte på tid heller (väntevärdet)

Då Hamiltonianen inte beror på tid, får vi en "konserveringslag". **Energien är bevarad**

$$\begin{aligned} \text{Om } |\Psi; t=0\rangle &= |E_1\rangle \\ |\Psi; t\rangle &= \exp\left(-\frac{iE_1 t}{\hbar}\right) |E_1\rangle \end{aligned}$$

D.v.s. om systemet börjar i ett energiegentillstånd, stannar det i samma tillstånd.

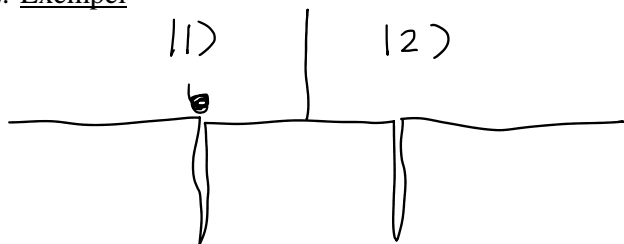
Energiegentillstånden har en konstig egenskap att de inte gör något intressant. Om man börjar i ett energiegentillstånd så stannar man där. Om man stannar i ett energiegentillstånd har man inget tidsberoende.

"Stationary states" = energiegentillstånd

Om man har en blandning av energiegentillstånd så får man kvantinterferens

$$\begin{aligned} P(x_1 \text{ eller } x_2) &= |\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2 + |\alpha_1||\alpha_2| \left\{ e^{i(\phi_2 - \phi_1)} + e^{i(\phi_1 - \phi_2)} \right\} \\ &= P(x_1) + P(x_2) + \underbrace{2|\alpha_1||\alpha_2| \cos(\phi_2 - \phi_1)}_{\text{Kvantinterferens}} \end{aligned}$$

## 2. Exempel



En partikel kan begynna sig vid brunn 1 eller 2.  $\{|1\rangle, |2\rangle\}$  bildar en fullständig bas.

Hamiltonianen är  $\hat{H} = \epsilon(|1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|)$ .

Om partikeln hittas vid brunn 1 vid  $t = 0$ , vad är sannolikheten att en mätning, ett tidsintervall  $\Delta$  senare också ger brunn 1.

Begynnelsevillkor:  $|\Psi; t=0\rangle = |1\rangle$

1. Lös TOSE,  $\hat{H}|E\rangle = E|E\rangle$ , få  $\{E_n\}$  och  $\{|E_n\rangle\}$

2. Uttryck tillståndet  $|\Psi\rangle$  som linjärskombination av  $|E_n\rangle$

3. Lägg till "wiggle-faktar"

①

Jag gör en ansats att  $|E\rangle = \alpha|1\rangle + \beta|2\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \Rightarrow |1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

$$\hat{H} = \epsilon \left[ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \right] = \epsilon \left[ \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right] =$$

$$= \epsilon \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Eigenvärden:  $\epsilon \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \vec{E} = E \vec{E}$

$$\begin{pmatrix} -E & \epsilon \\ \epsilon & -E \end{pmatrix} \vec{E} = 0 \quad \left| \begin{pmatrix} -E & \epsilon \\ \epsilon & -E \end{pmatrix} \right| = E^2 - \epsilon^2 = 0$$

$$E_1 = \epsilon, \quad E_2 = -\epsilon$$

$$E = +\epsilon \quad \epsilon \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = +\epsilon \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \alpha = \beta \quad \Rightarrow |+\epsilon\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\epsilon \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = -\epsilon \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \Rightarrow \alpha = -\beta$$

$$\Rightarrow |-\epsilon\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

② Bestämmande tillståndet:

$$|\psi\rangle = |1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \underbrace{\frac{c_1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}}_{|+\epsilon\rangle} + \underbrace{\frac{c_2}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}}_{|-\epsilon\rangle}$$

$$= \frac{|+\epsilon\rangle + |-\epsilon\rangle}{\sqrt{2}}$$

Ett allmänt recept för att lösa TDSE:

1. Lös egenvärdesekvationen  $\hat{H}|E\rangle = E|E\rangle$  för  $\{E_n\}$  och  $\{|E_n\rangle\}$ .
2. Uttryck det begynnande tillståndet  $|\psi; t=0\rangle$  som en linjär kombination av  $|E_n\rangle$ .
3. Lägg till "wiggle faktor"  $\exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right)$ .

$$= \frac{c_1 c_2}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow c_1 c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

③ Wiggle-faktorer

$$\exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right)$$

Wiggle-faktor, anpassad för olika egenvärden

$$|\psi, t=0\rangle = \frac{|+\epsilon\rangle + |-\epsilon\rangle}{\sqrt{2}}$$



$$|\Psi; t=0\rangle = \frac{|+\varepsilon\rangle + |-\varepsilon\rangle}{\sqrt{2}}$$

$$|\Psi; t\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(-\frac{i\varepsilon t}{\hbar}\right) |+\varepsilon\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(+\frac{i\varepsilon t}{\hbar}\right) |-\varepsilon\rangle$$

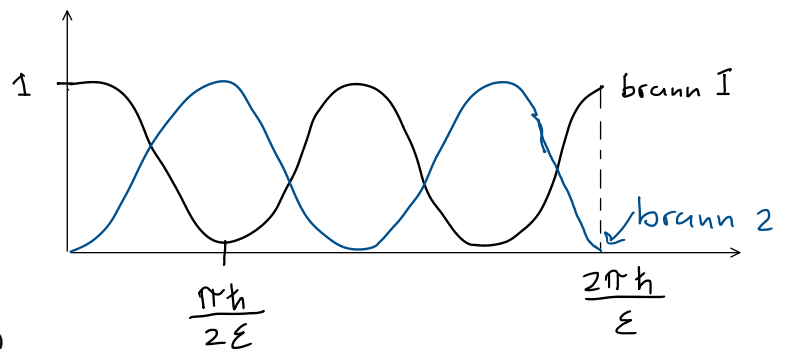
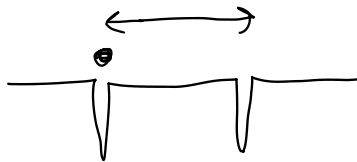
Vad är sannolikheten att partikeln befinner sig vid brunn 1 vid  $t = \Delta$ ?

$$|\pm\varepsilon\rangle = \frac{|1\rangle \pm |2\rangle}{\sqrt{2}}$$

$$\langle 1 | \Psi; t \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(-\frac{i\varepsilon t}{\hbar}\right) \underbrace{\langle 1 | +\varepsilon \rangle}_{=\frac{1}{\sqrt{2}}} + \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(+\frac{i\varepsilon t}{\hbar}\right) \underbrace{\langle 1 | -\varepsilon \rangle}_{=\frac{1}{\sqrt{2}}} =$$

$$= \frac{1}{2} \left[ \exp\left(-\frac{i\varepsilon t}{\hbar}\right) + \exp\left(+\frac{i\varepsilon t}{\hbar}\right) \right] = \cos\left(\frac{\varepsilon t}{\hbar}\right)$$

$$\Rightarrow P = \cos^2\left(\frac{\varepsilon t}{\hbar}\right)$$



(Detta är ett exempel på hur interferens ger rörelse)

### 3. Fria partiklar

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{T} + \hat{V}$$

↑ Hamiltonianen      ↑ rörelseenergi      ← potentiell energi

För en partikel,  $\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$        $\hat{p}$  = rörelsemängdsoperatör,  $m$  = massa

Potentialenergin  $\hat{V}$  beskriver hur systemet påverkas av interna och externa krafter.

Inom klassisk fysik,  $F = -\frac{\partial V}{\partial x}$

En "fri partikel" påverkas av inga krafter:  $\hat{V} = V_0 = \text{konstant} = 0$

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \quad (\hat{T}, \hat{V}, \hat{p}, \text{ är alla Hermitiska.})$$

$$\hat{H}|E\rangle = \frac{\hat{p}^2}{2m}|E\rangle = E|E\rangle \quad \leftarrow \text{Om vi ska lösa den tidsberoende Schrödinger-ekvationen för en fri partikel börjar vi med att lösa den tidsberoende Schrödinger-ekvationen}$$

Lösningen är  $|p\rangle$ , egentillstånd av rörelsemängdsoperatoren är

$$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle \quad \text{och} \quad \hat{H}|p\rangle = \frac{p^2}{2m}|p\rangle$$

Här ser vi att  $\hat{H}$  och  $\hat{p}$  delar egentillstånd  $\Leftrightarrow [\hat{H}, \hat{p}] = 0$

Den mest allmänna lösningen är en linjärkombination av rörelsemängds(/energi)egentillstånd:

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p) |p\rangle dp \quad \text{Den linjära kombinationen skrivs som en integral istället för en summa eftersom } p \text{ är kontinuerlig. Alla } p \in [-\infty, \infty] \text{ är tillåtna.}$$

( $p$  är kontinuerlig. Alla  $p \in [-\infty, \infty]$  är tillåtna)

$\tilde{\psi}(p)$  = "vågfunktion i rörelsemängdsbasen"

$|\tilde{\psi}(p)|^2$  = sannolikhetstäthet att en rörelsemängdsmätning ger  $p$

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p) |p\rangle dp$$

$$|\psi; t\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) |p\rangle dp \quad \text{jfr: } |\psi\rangle = \sum_n \alpha_n \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p) \exp\left(-\frac{i p^2 t}{2m\hbar}\right) |p\rangle dp \quad \hat{H}|p\rangle = \frac{p^2}{2m}|p\rangle = E$$

vågfunktion vid  $t=0$

wiggle-faktor

tillståndet där partikeln har en bestämd rörelsemängd

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p, t) |p\rangle$$

vågfunktion som funktion av tid

Sannolikheten för en viss rörelsemängd är samma oavsett hur mycket tid som gått för en fri partikel



$$|\tilde{\Psi}(p, t)|^2 = |\tilde{\Psi}(p, 0)|^2$$

Precis som Newtons första lag förutsäger, en partikel i rörelse behåller sin rörelsemängd oförändrad om det inte finns några externa krafter

Detta gäller dock inte om vi har potentiell energi i problemet ( $V \neq 0$ ), då delar Hamiltonianen och rörelsemängdsoperatoren i princip inga egentillstånd. Alltså vi kan inte skriva tillståndet som en linjär kombination av olika p

I ett kvanttillstånd finns all information för systemet, så om vi hade velat avgöra positionen måste vi uttrycka tillståndet i annan bas, mer specifikt med egentillstånden för positionsoperatoren

Tittar vi på tillståndet med annan bas kan vi avläsa annan information

1. Alla kvanttillstånd uppfyller den tidsberoende Schrödinger ekvationen,  $\hat{H}|\psi\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle$ , där  $\hat{H}$  är Hamiltonianen (operatorn som motsvarar systemets energi)

1. Den allmänna lösningen kan skrivas som en superposition av energitillstånd, viktade med s.k. "wiggle-faktor".

$$|\psi; t\rangle = \sum_n \alpha_n \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right) |E_n\rangle.$$

2. En fri partikel påverkas inte av externa krafter,  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ . Dess tidsberoende vågfunktion är

$$\tilde{\psi}(p, t) = \tilde{\psi}(p, 0) \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right). \quad |\psi; t\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p, t) |p\rangle dp$$

1. Rörelsemängdsoperatorn

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

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(p) |p\rangle dp$$

Samma tillstånd men uttryckt i olika baser

Precis som tillstånd har olika representation i olika baser har operatörer olika representationer i olika baser.

$$\hat{p}|\Psi\rangle = ? \quad (\text{senare i kursen})$$

$$\langle x | \hat{p} | \Psi \rangle = -i\hbar \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x}$$

Vi tar det som en definition av  $\hat{p}$ :

$$\hat{p} \Psi(x) = -i\hbar \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x}$$

Rörelsemängdsoperatorn är Hermitisk  
=> bevis finns i Griffiths

Hermitiska operatörer har tre viktiga egenskaper:

1. Dess egenvärden är rella
2. Egentillstånd som motsvarar olika egenvärden är ortogonala
3. Dess egentillstånd bildar en "fullständig bas", dvs de spänner upp hela vektorrummet som alla tillstånd bor i

Den har rella egenvärden, ortogonala egentillstånd som bildar en fullständig bas.

Rörelsemängdsoperatorns egenfunktioner :

$$\hat{p} |p\rangle = p |p\rangle$$

$$\hat{p}|p\rangle = p|\hat{p}\rangle$$

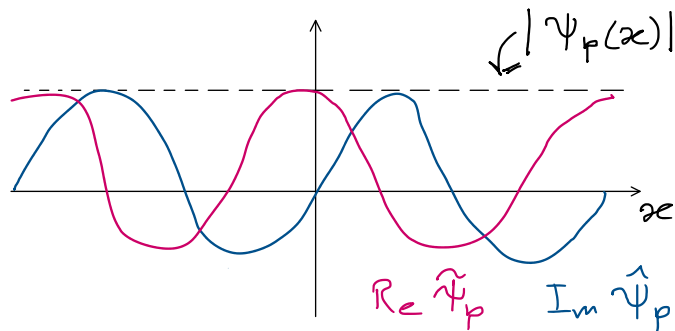
$$\langle x|\hat{p}|p\rangle = p\langle x|p\rangle$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi_p(x) \quad \psi_p(x)$$

Sannolikhetsamplitud att en positionsmätning ger  $x$  när systemet har en bestämd rörelsemängd

$\psi_p(x)$  är vågfunktion av en partikel med bestämd rörelsemängd

$$\Rightarrow \psi_p(x) = A \exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right)$$



Om vi vet partikelns rörelsemängd exakt, har vi ingen information om partikelns position.

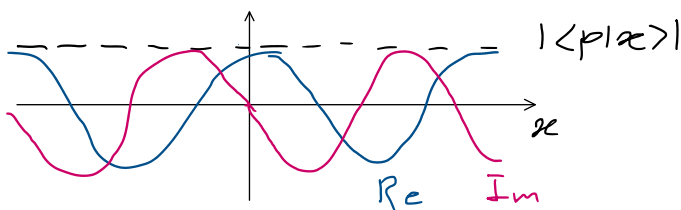
$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} =$$

= de Broglie våglängd

Det här gäller tvärtom

$$\langle p|x\rangle = \langle x|p\rangle^* = A^* \exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right)$$

Sannolikhetsamplituden att en rörelsemängdsmätning ger  $p$  när partikeln har en bestämd position



Om vi vet partikelns position exakt, har vi ingen information om rörelsemängden.

=> Position och rörelsemängd är "inkompatibla".

$$\Rightarrow [\hat{x}; \hat{p}] \neq 0$$

## 2. Osäkerhetsprincipen

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

$$= x \left[ -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) \right] - \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) [x \psi(x)]$$

$$= i\hbar \left[ -x \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} (x \psi) \right]$$

$$= i\hbar \left[ -x \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} (x \psi) \right]$$

$$= i\hbar \left[ -x \frac{\partial \psi}{\partial x} + \psi + x \frac{\partial \psi}{\partial x} \right] = i\hbar \psi(x)$$

$$\Rightarrow \boxed{[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \hat{1}}$$

Det kanoniska kommuteringsförhållandet  
Alltså det är omöjligt att visa både rörelsemängd och position exakt och samtidigt

Exakt information om position

$\Rightarrow$

Ingen information om rörelsemängd

Exakt information om rörelsemängd

$\Rightarrow$

Ingen information om position

$$\langle x | [\hat{x}, \hat{p}] | \psi \rangle = \langle x | (\hat{x} \hat{p} - \hat{p} \hat{x}) | \psi \rangle =$$

$$= \langle x | \hat{x} (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) | \psi \rangle - \langle x | (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) \hat{x} | \psi \rangle =$$

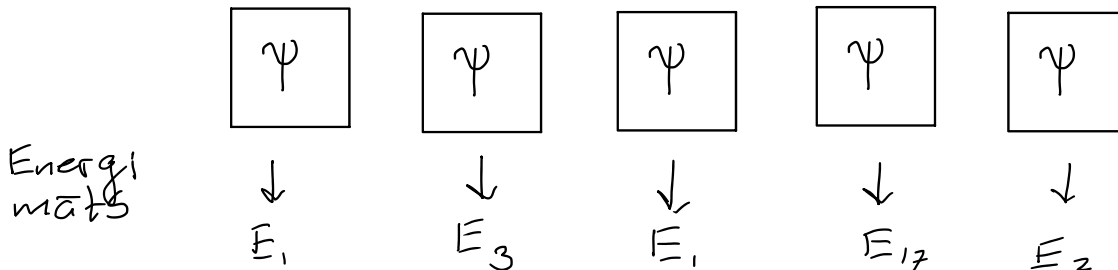
$$= \langle x | \hat{x} | -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} \rangle - \langle x | (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) x | \psi \rangle =$$

$$= -x i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} - (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (x \psi)) =$$

$$= -x i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} - (-i\hbar \psi \frac{\partial}{\partial x} x - i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x}) =$$

$$= -x i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} + i\hbar \psi + x i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} = i\hbar \psi$$

Från statistik lånar vi ett "väntevärde" och en "standardavvikelse"



$$\langle E \rangle = \sum_n P_n E_n = \sum_n |\alpha_n|^2 E_n = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle$$

Detta eftersom:

$$|\psi\rangle = \sum_n \alpha_n |E_n\rangle, \quad \hat{H} |\psi\rangle = \sum_n \alpha_n E_n |E_n\rangle,$$

$$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \sum_{n,m} \alpha_n^* \alpha_m \delta_{nm} E_n = \sum_n P_n E_n = \langle E \rangle$$

I kvantfysik definieras ett väntevärde som:

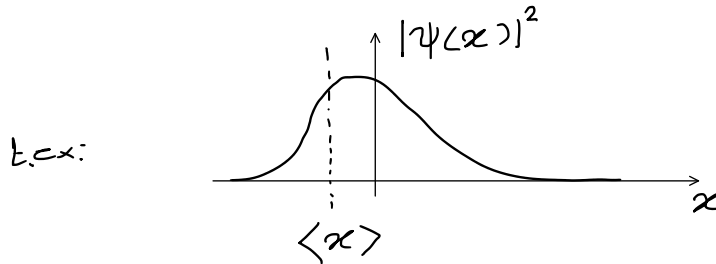
$$\langle Q \rangle = \langle \psi | \hat{Q} | \psi \rangle$$

$$\langle Q \rangle = \langle \psi | \hat{Q} | \psi \rangle$$

där  $\hat{Q}$  är någon Hermitisk operator. Ifall  $\hat{Q}$  beskriver en kontinuerlig variabel:

$$\langle Q \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(q) \hat{Q} \psi(q) dq \quad Q = \begin{cases} \hat{x}, & \text{position} \\ \hat{p}, & \text{rörelsemängd} \end{cases}$$

Väntevärdet beskriver det genomsnittliga resultatet om vi mäter många system som alla har tillståndet  $|\psi\rangle$ .



Standardavvikelsen beskriver hur nära de möjliga utfallen ligger väntevärdet.

$$\sigma_Q = \sqrt{\langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2}$$

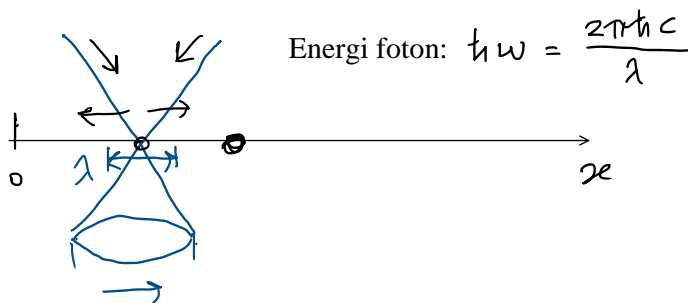
$\uparrow$   
 $\langle \psi | \hat{Q}^2 | \psi \rangle$

Osäkerhetsprincipen är  $\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}$

Det kommer ifrån ett mer allmänt resultat

$$\sigma_p^2 \sigma_q^2 \geq \left| \frac{1}{2i} \langle \psi | [\hat{p}, \hat{q}] | \psi \rangle \right|^2$$

Varför får vi inte veta både  $x$  och  $p$



Om jag försöker förbättra positionsmätningen genom att minska våglängden, ökar jag hur mycket partikeln blir deflektad/sparkad av en foton, som förändrar partikeln rörelsemängd.

Minsta fokus på ljus ungefär  $\lambda$   
 "Rayleigh criterion" - ljusets våglängd bestämmer hur litet ett objekt kan ses med ljuset.

### 3. Basbyte

∞

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) |x\rangle dx$$

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p) |p\rangle dp$$

$x$  och  $p$  är kontinuerliga variabler så deras egentillstånd uppfyller ett annat normeringsvillkor:

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

$$\langle x' | x \rangle = \delta(x - x')$$

$$\langle x' | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \underbrace{\langle x' | x \rangle}_{\delta(x - x')} dx = \psi(x')$$

$$\langle p' | \psi \rangle = \tilde{\psi}(p') = \text{en vågfunktion kan omskrivas som en inre produkt.}$$

anledningen till att vi skriver vågfunktioner istället för inre produkter är för att vi upptäckte vågfunktioner först

jfr.

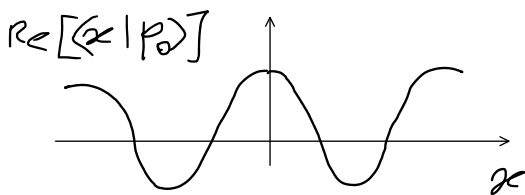
$$\langle p | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \langle p | x \rangle dx = \tilde{\psi}(p)$$

$$\langle x | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p) \langle x | p \rangle dp = \psi(x)$$

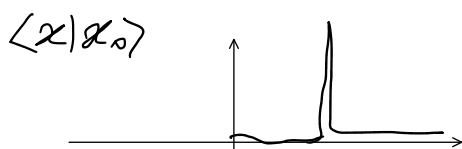
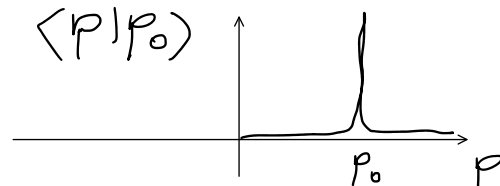
$$\text{där } \langle x | p \rangle = \frac{1}{\underbrace{\sqrt{2\pi\hbar}}_{=A}} \exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right)$$

Detta så att  $\langle q' | q \rangle = \delta(q - q')$   
Alltså normerad

Vågfunktioner i  $x$  och  $p$  förkopplas av Fourier transformering:



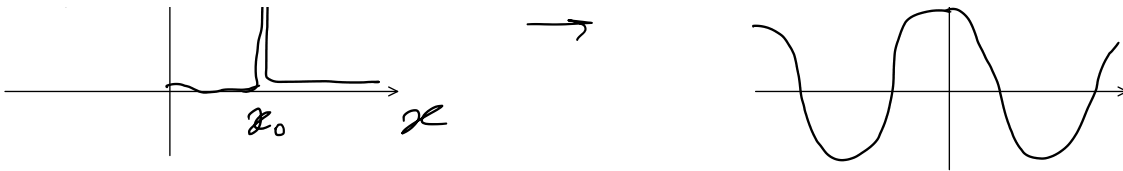
→



→







Det som är stort i vanlig rymd är litet i dess invers-rymd

Dessa tillstånd onormerbara

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx \neq 1$$

då är de inte fysikaliska. Alla fysikaliska tillstånd byggs av superpositioner.

#### 4. Vågpaket

En fri partikel är beskriven av

$$|\psi; t\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p, t) |p\rangle dp$$

$$\tilde{\psi}(p, t) = \tilde{\psi}(p, 0) \exp\left(-\frac{i p^2 t}{2m\hbar}\right)$$

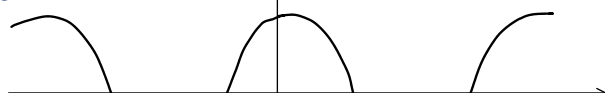
$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p, 0) \exp\left(-\frac{i p^2 t}{2m\hbar}\right) \frac{\exp\left(\frac{i p x}{\hbar}\right)}{\sqrt{2\pi\hbar}} dp =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p, 0) \exp\left[i(kx - \omega t)\right] dp,$$

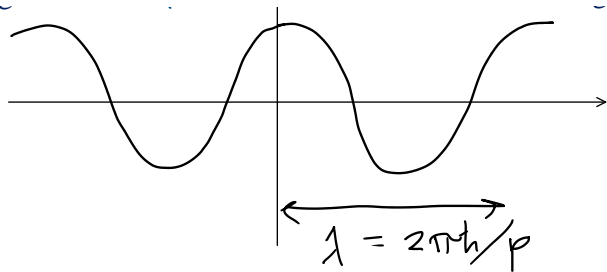
$$k = \frac{p}{\hbar}, \quad \omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{p^2}{2m\hbar}$$

vänster-  
gående  
vågor

$k < 0$  ←



→  $k > 0$  hörgående vågor



Vågpartikel dualitet, att vi kan betrakta partiklar från vågor, kommer från att de faktiskt är vågor, men vågor i sannolikhet. Precis som ljus är oscillationer i det elektromagnetiska fältet, så är partiklar oscillationer i sannolikhet

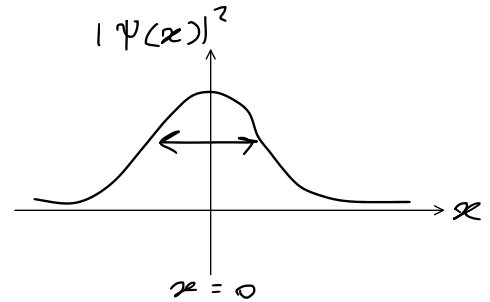
Vid  $t = 0$ , är positionens vågfunktion:

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} \exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma^2}\right)$$

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, 0) x \psi(x, 0) dx =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} x \frac{\exp(-x^2/2\sigma^2)}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}} dx = 0$$

$\downarrow$   
udda
 $\downarrow$   
jämn



Det genomsnittliga positionen är noll

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, 0) x^2 \psi(x, 0) dx =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \frac{\exp(-x^2/2\sigma^2)}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}} dx =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \cdot \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^3}}, \quad \left[ \alpha = \frac{1}{2\sigma^2} \right]$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \cdot \frac{1}{2} \sqrt{\pi} \sqrt{8\sigma^6} =$$

$$= \sigma^2$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} = \pi \alpha^{-1/2}$$

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \rightarrow$$

$$-\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx = -\sqrt{\pi} \frac{1}{2} \alpha^{-3/2}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^3}}$$

$$\sigma_x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sigma$$

$$\tilde{\Psi}(p, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-x^2/4\sigma^2)}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} \underbrace{\frac{\exp(-ipx/\hbar)}{\sqrt{2\pi\hbar}}}_{\langle p|x \rangle} dx$$

$$\langle p|x \rangle = \langle x|p \rangle^* = A^* \exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right)$$

Om du inte minns om det är positiv eller negativ exponent i  $\langle p|x \rangle$  eller  $\langle x|p \rangle$ , skriv tillståndet i braket notation:

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) |x\rangle dx$$

Jag vill ha vågfunktionen i termer av rörelsemängd:

$$\langle p|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \langle p|x \rangle dx$$

Om man ska lära sig en sak så är det:  $\langle x|p \rangle = \frac{\exp(ipx/\hbar)}{\sqrt{2\pi\hbar}}$

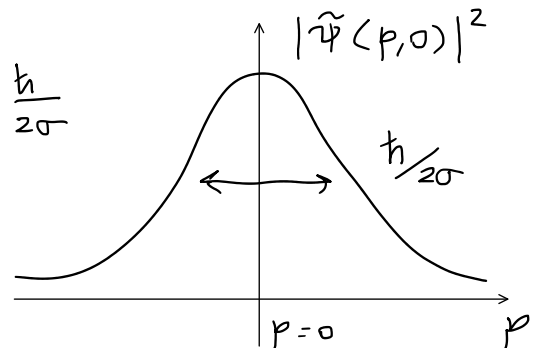
Om man byter ordningen från  $\langle x|p \rangle$  till  $\langle p|x \rangle$  så är det samma som att konjugera, dvs:

$$\langle p|x \rangle = \langle x|p \rangle^* = \frac{\exp(-ipx/\hbar)}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

$$\tilde{\Psi}(p, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-x^2/4\sigma^2)}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} \frac{\exp(-ipx/\hbar)}{\sqrt{2\pi\hbar}} dx =$$

$$= \left(\frac{2\sigma}{\pi\hbar^2}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{\sigma^2 p^2}{\hbar^2}\right)$$

$$\sigma_p = \frac{\hbar}{2\sigma}$$



→  
Lämnas som övning att lösas

$$\sigma_x \sigma_p = \sigma \frac{\hbar}{2\sigma} = \frac{\hbar}{2}$$

Exakt osäkerhetsprincipen

Det var sigma som bestämde osäkerhet (standardavvikelse) när position mättes, alltså ju högre sigma desto större osäkerhet i position. Men när rörelsemängden mäts så blir osäkerheten (standardavvikelsen) mindre om sigma ökar. Det här uppfyller osäkerhetsprincipen exakt.

$$\sigma_x \sigma_p = \sigma \frac{\hbar}{2\sigma} = \frac{\hbar}{2}$$

Exakt osäkerhetsprincipen

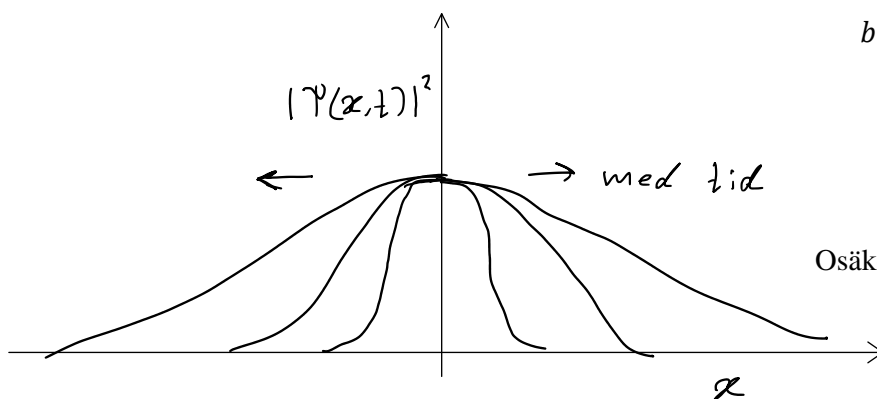
Det var sigma som bestämde osäkerhet (standardavvikelse) när position mättes, alltså ju högre sigma desto större osäkerhet i position. Men när rörelsemängden mäts så blir osäkerheten (standardavvikelsen) mindre om sigma ökar. Det här uppfyller osäkerhetsprincipen exakt.

$$\tilde{\Psi}(p, 0) = \left(\frac{2\sigma}{\pi\hbar^2}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{\sigma^2 p^2}{\hbar^2}\right)$$

$$\tilde{\Psi}(p, t) = \left(\frac{2\sigma}{\pi\hbar^2}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{\sigma^2 p^2}{\hbar^2} - \frac{i p^2 t}{2m\hbar}\right)$$

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\Psi}(p, t) \exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right) dp = \text{Lämnas som övning} =$$

$$= \left(\frac{\sigma^2}{2\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{b} \exp\left(-\frac{x^2}{4b^2}\right) \quad b^2 = \sigma^2 + \frac{i\hbar t}{2m}$$



$b$  är osäkerheten i position och ökar med tid

Osäkerheten i position växer med tid s.a  $\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}$ .

Vilka tillstånd uppfyller den tidsberoende Schrödingers ekvationen?

Svar: Alla tillstånd

Vilka tillstånd uppfyller den tidsberoende Schrödingers ekvationen?

Svar: Bara energiegentillstånd

Om två operatörer kommuterar, betyder det att

- har lika egenvärden
- de har gemensam bas av egentillstånd
- de är lika med varandra
- båda två måste vara hermitiska

Svar: b) de har gemensam bas av egentillstånd

---

System har bestämd energi  $-E$

$$|\Psi; t\rangle = |-E\rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(-E)t\right) = |-E\rangle \exp\left(\frac{i}{\hbar}Et\right)$$

---

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \hat{1}$$

Det kanoniska kommuteringsförhållandet

---

Vågfunktion av en partikel med bestämd rörelsemängd är:

$$\Psi_p(x) = \langle x|p\rangle = \frac{\exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right)}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

Förra gången:

1. Hamiltonianen  $\hat{H}$  kan delas upp på två bidrag: rörelseenergin  $\frac{\hat{p}^2}{2m}$  (för en partikel) och potentialenergin  $\hat{V}$ . Potentialenergin  $\hat{V}$  ger hur systemet påverkas av interna och externa krafter.
2. En fri partikel har  $\hat{V} = 0$  (eller någon konstant)  $\Rightarrow [\hat{H}, \hat{p}] = 0$  och den allmänna lösningen till den tidsberoende Schrödinger-ekvationen är ett "vågpaket".  $\int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p, 0) \exp[i(kx - \omega t)] dp$ ,  $k = \frac{p}{\hbar}$ ,  $\omega = \frac{p^2}{2m\hbar}$ .
3.  $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \Rightarrow$  Det går inte att veta både position och rörelsemängd exakt och samtidigt "Osäkerhetsprincipern"  $\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}$  begränsar vår kunskap om  $x$  och  $p$ .

1. Inledning

Vad händer om  $\hat{V} = V(\hat{x})$ ? Enligt klassisk fysik, finns det en kraft på partikeln,  $F = -\frac{\partial V}{\partial x}$ .

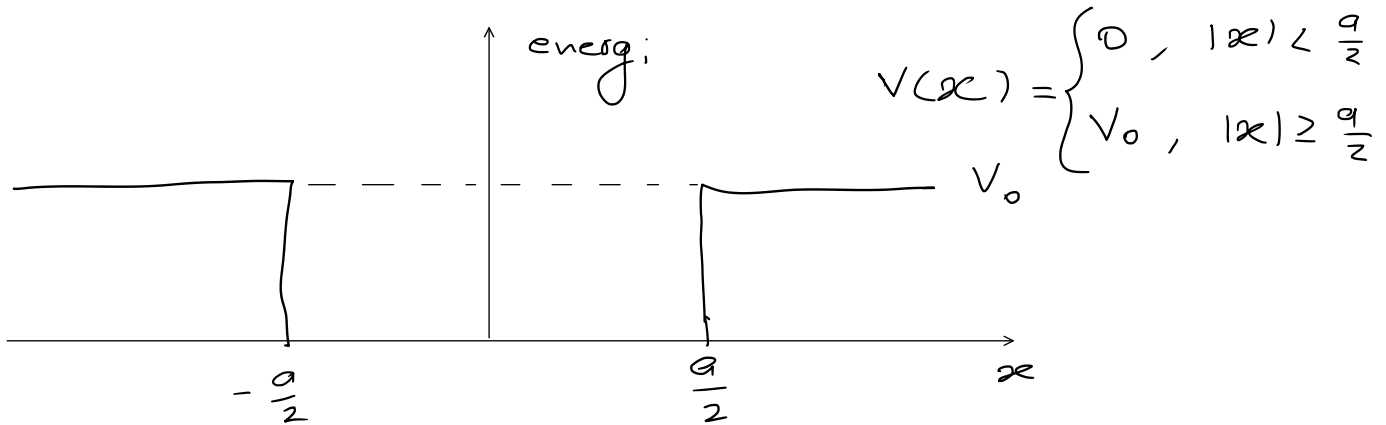
Om  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \Rightarrow [\hat{H}, \hat{p}] \neq 0$ .

I positionsbasen blir den tidsberoende Schrödinger ekvationen:

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

Vågfunktion som beskriver ett energiegentillstånd.

$$\left[ \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right]$$



Om  $E < V_0 \Rightarrow$  bunden, instängd i området  $|x| \leq \frac{a}{2}$

Om  $E > V_0 \Rightarrow$  fri, partikeln rör sig fritt över brunnen

Vi söker lösningen till TOSE som har  $E < V_0$ , dvs "bundna tillstånd"

Potentialenergin är en symmetrisk funktion av  $x$ , och många av potentialerna vi ska se inom är symmetriska på något sätt, vilket hjälper oss lösa Schrödinger-ekvationen

## 2. Paritet

En paritetstransformation inverterar alla vektorer i problemet,  $x \rightarrow -x$

$$\hat{\Pi}|\alpha\rangle = |-x\rangle$$

$$\hat{\Pi}|\rho\rangle = |-p\rangle$$

### $\hat{\Pi}$ 's egenskaper

1.  $\hat{\Pi}^2|\alpha\rangle = \hat{\Pi}|-x\rangle = |\alpha\rangle$   
 $\Rightarrow \hat{\Pi}^2 = \hat{1}$

2. En invertering lämnar tillståndets norm oförändrad.

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

$$(|\phi\rangle = \hat{\Pi}|\psi\rangle)$$

$$\langle\phi|\phi\rangle = 1 = \langle\psi|\underbrace{\hat{\Pi}^\dagger\hat{\Pi}}_{\hat{1}}|\psi\rangle$$

$$\Rightarrow \hat{\Pi}^\dagger\hat{\Pi} = \hat{1}$$

3.  $\hat{\Pi}$  är Hermitisk, med egenvärden  $\pm 1$ .

+1 = jämn paritet, -1 = udda paritet

egenfunktion med jämn paritet är symmetrisk funktion av  $x$

egenfunktion med udda paritet är anti-symmetrisk funktion av  $x$

4.  $[\hat{\Pi}, \hat{x}] \neq 0$

$$\langle x \rangle = \langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle$$

$$-\langle x \rangle = \langle\psi|\hat{\Pi}^\dagger\hat{x}\hat{\Pi}|\psi\rangle$$

$$-\langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle =$$

$$-\hat{x} = \hat{\Pi}^\dagger\hat{x}\hat{\Pi}$$

$$-\hat{\Pi}\hat{x} = \hat{\Pi}\hat{\Pi}^\dagger\hat{x}\hat{\Pi}$$

$$-2\hat{\Pi}\hat{x} = -\hat{\Pi}\hat{x} + \hat{x}\hat{\Pi} = [\hat{x}, \hat{\Pi}] \neq 0, \quad [\hat{p}, \hat{\Pi}] \neq 0$$

5.  $[\hat{\Pi}, \hat{x}^2] = [\hat{\Pi}, \hat{p}^2] = 0$

Om  $V(\hat{x})$  är en jämn funktion av  $x$  (Taylor serien innehåller bara jämna termer), kommuterar Hamiltonianen med paritetsoperatorn:

$$[\hat{H}, \hat{\Pi}] = \underbrace{\left[ \frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{\Pi} \right]}_{\text{alltid noll}} + \underbrace{\left[ V(\hat{x}), \hat{\Pi} \right]}_{\text{noll om alla termer är jämna i } \hat{x}}$$

$$\left[ V_0 + \frac{\partial V}{\partial x} \hat{x} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} \hat{x}^2 + \dots, \hat{\Pi} \right]$$

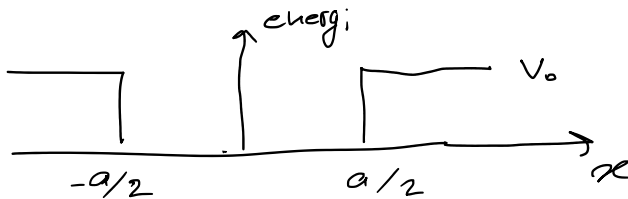
=> Det går att hitta energieigenfunktioner som har bestämd paritet, dvs lösningar

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

kan vara antingen jämna eller udda.

### 3. Randvillkor

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \Psi(x) = E \Psi(x), \quad \text{där } V(x) = \begin{cases} 0 & |x| < \frac{a}{2} \\ V_0 & |x| \geq \frac{a}{2} \end{cases}$$



Detta är eftersom vi måste ha första derivatan så vi kan använda rörelsemängdsoperatorn från Schrödinger-ekvationen

Randvillkor

1.  $\psi(x)$  måste vara kontinuerlig (så att rörelsemängden är väldefinierad)
  2.  $\partial\psi/\partial x$  måste vara kontinuerlig (så att rörelseenergin är vädefinierad)
  3.  $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \psi(x) = 0$  (så att vågfunktionen är normerbar)
- } gäller alla energieigenfunktioner  
} gäller bunda energieigenfunktioner

### 4. Lösningen

$$|x| < \frac{a}{2} \quad \circ \quad \text{blir Schrödinger ekvationen} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = E \psi$$

$$\Rightarrow \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + k^2 \psi = 0, \quad \text{där } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad 0 \leq E < V_0$$

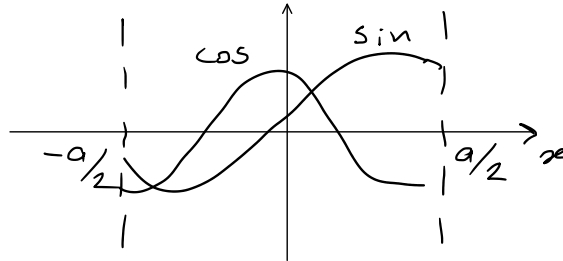
Lösningar är linjärkombination av sinus och cosinus



↓  
Vi har bestämt oss att vi ska söka  
energiegenfunktioner som har bestämd paritet

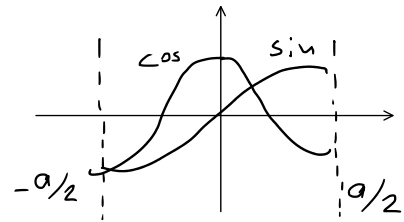
↓  
cosinus är symmetrisk i x => bestämd paritet +1  
sinus är antisymmetrisk i x => bestämd paritet -1

$$\psi(x) = \begin{cases} A \cos kx, & \text{j\u00e4mn} \\ B \sin kx, & \text{udda} \end{cases}$$



$$x > \frac{a}{2} : -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = E\psi, \text{ d\u00e4r } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad 0 \leq E < V_0$$

$$\psi(x) = \begin{cases} A \cos kx, & \text{j\u00e4mn} \\ B \sin kx, & \text{udda} \end{cases}$$



$$x > \frac{a}{2} : -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V_0 \psi = E\psi \Rightarrow \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - q^2 \psi = 0,$$

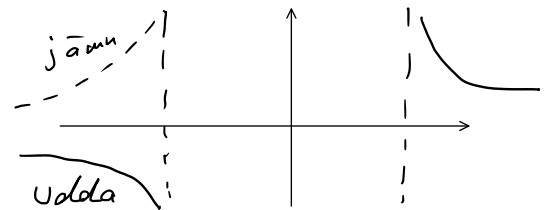
$$\text{d\u00e4r } q = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}, \quad q > 0$$

$$\Rightarrow \psi(x) = \underline{C \exp(-qx)}$$

Den positiva l\u00f6sningen m\u00e5ste  
tas bort eftersom den blir  
o\u00e4ndligt stor om x blir o\u00e4ndligt  
stor

Den h\u00e4r v\u00e4gfunktionen g\u00e4ller i b\u00e5de udda och j\u00e4mna  
fallet

$$x < \frac{a}{2} : \psi(x) = \begin{cases} C \exp(qx), & \text{j\u00e4mn} \\ -C \exp(qx), & \text{udda} \end{cases}$$



Randvillkor ger:

$$\text{j\u00e4mn: } \psi \text{ kontinuerlig vid } x = \frac{a}{2} : A \cos \frac{ka}{2} = C e^{-qa/2}$$

$-qa/2$

jämn:  $\psi$  Kontinuerlig vid  $x = \frac{a}{2}$  :  $A \cos \frac{ka}{2} = C e^{-\gamma a/2}$

$\frac{\partial \psi}{\partial x}$  Kontinuerlig vid  $x = \frac{a}{2}$  :  $-kA \sin \frac{ka}{2} = -\gamma C e^{-\gamma a/2}$

$$\Rightarrow \tan \frac{ka}{2} = \frac{\gamma}{k} = \frac{\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - k^2}}{k} = \sqrt{\left(\frac{W}{ka}\right)^2 - 1} \quad \left( W^2 = \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} \right)$$

1)

odda:  $B \sin \frac{ka}{2} = C e^{-\gamma a/2}$

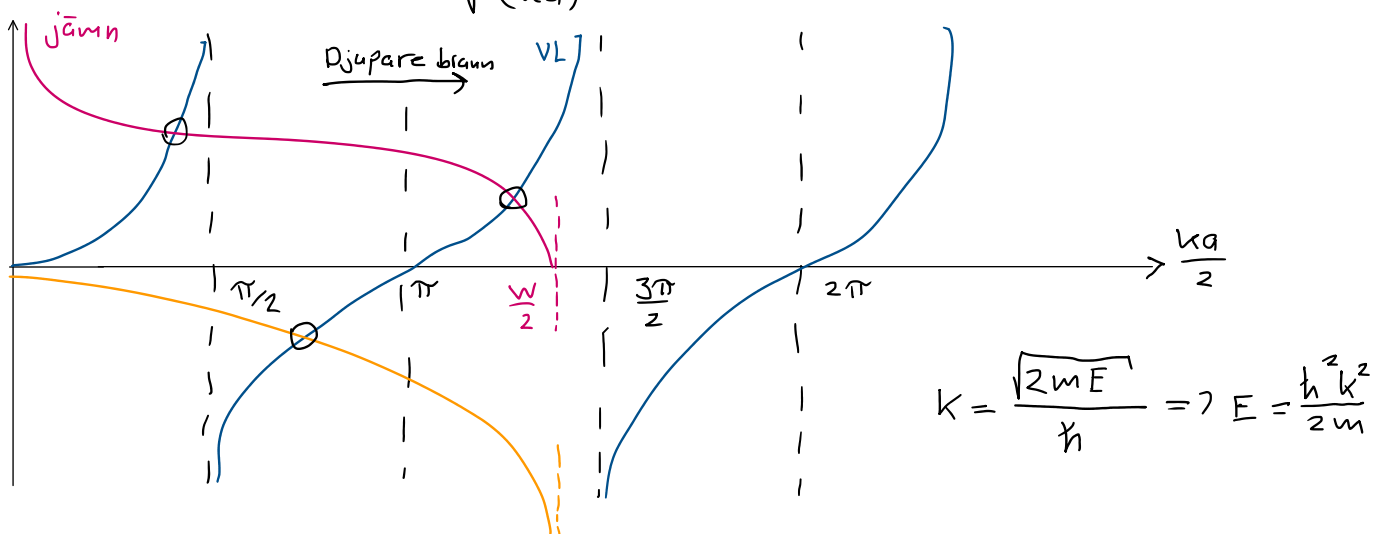
$kB \sin \frac{ka}{2} = -\gamma C e^{-\gamma a/2}$

$$\Rightarrow \tan \frac{ka}{2} = -\frac{k}{\gamma} = -\frac{1}{\sqrt{\left(\frac{W}{ka}\right)^2 - 1}}$$

2)

Vi löser 1) och 2) grafiskt:

$$\left. \begin{array}{l} \text{jämn: } \tan \frac{ka}{2} = \sqrt{\left(\frac{W}{ka}\right)^2 - 1} \\ \text{odda: } \tan \frac{ka}{2} = -\frac{1}{\sqrt{\left(\frac{W}{ka}\right)^2 - 1}} \end{array} \right\} W^2 = \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2}$$



1. De tillåtna energierna är "kvantiserade": bara diskreta värden av energi  $E$ , som kallas för "energinivåer".

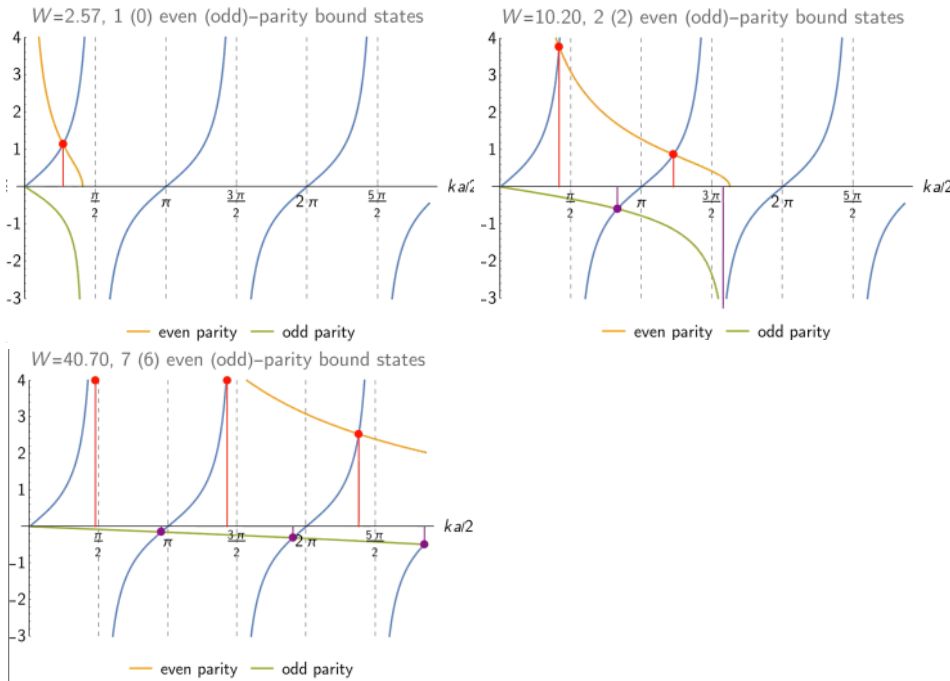
För fria partiklar är energivärdet kontinuerligt, men för det bunda fallet finns det bara vissa energivärden

2. Antalet bundna tillstånd ökar med brunnens djup.

Om vi ökar  $V_0$ , alltså vi höjer brunnens kanter, då blir  $W$  större. rör sig de streckade linierna åt höger

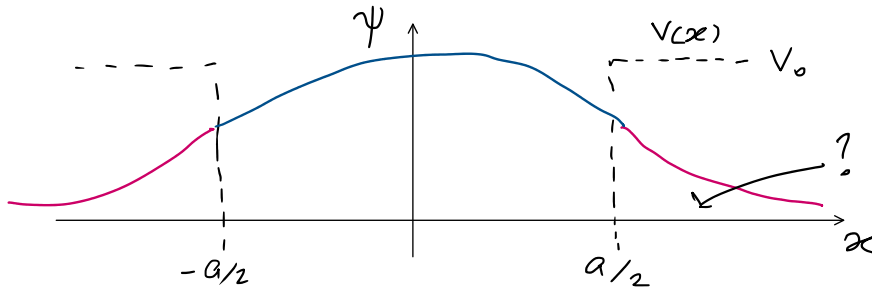
- Antalet bunda tillstånd ökar med brunnens djup.
- Tillstånden växlar mellan jämn och udda. Den lägsta energin ("brunnenergin") har en jämn vågfunktion.

Om vi ökar  $V_0$ , alltså vi höjer brunnens kanter, då blir  $W$  större, rör sig de streckade linjerna åt höger och då dyker fler och fler skärningspunkter upp



Hur ser vågfunktionerna ut?

$$\text{Grundenergin: } \psi(x) = \begin{cases} A \cos kx & |x| \leq \frac{a}{2} \\ C \exp(-q|x|) & |x| > \frac{a}{2} \end{cases}$$



$$\Rightarrow E < V_0$$

Energien är mindre än  $V_0$ , men vågfunktionen är nollskild trots att  $x > \frac{a}{2}$

Enligt klassisk fysik, kan en partikel med  $E < V_0$  inte hittas utanför brunnens.

Det är möjligt inom kvantfysik att partiklar kan befinna sig i klassiskt förbjudna områden.

Det här kallas för "kvanttunneling"

$$\psi(x) = \exp(-qx) \quad , \quad q = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

$$\psi(x) = \exp(-qx) \quad , \quad q = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

$$\exp\left(-\frac{x}{L}\right) \quad , \quad L = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E_0)}}$$

Om man vill se "kvanttunneling" behövs små partiklar (liten massa) och svaga potentialer (liten  $V_0$ ).

(Mer om tunnling imorgon)

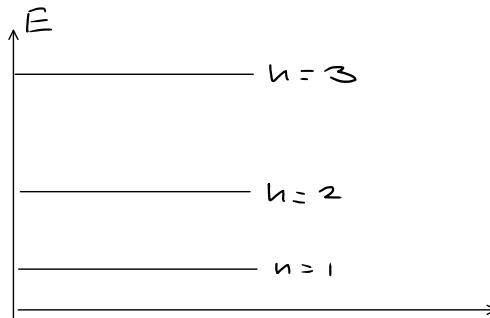
### 5. "Partikel i en låda"

Om vi höjer brunnens kanter  $V_0 \rightarrow \infty$ , blir de tillåtna  $\frac{ka}{2}$  närmare och närmare  $\frac{\pi}{2}, \pi, \frac{3\pi}{2}, \dots$  och antalet bundna tillstånd blir oändligt stort

$$\frac{ka}{2} = \frac{n\pi}{2} \quad , \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

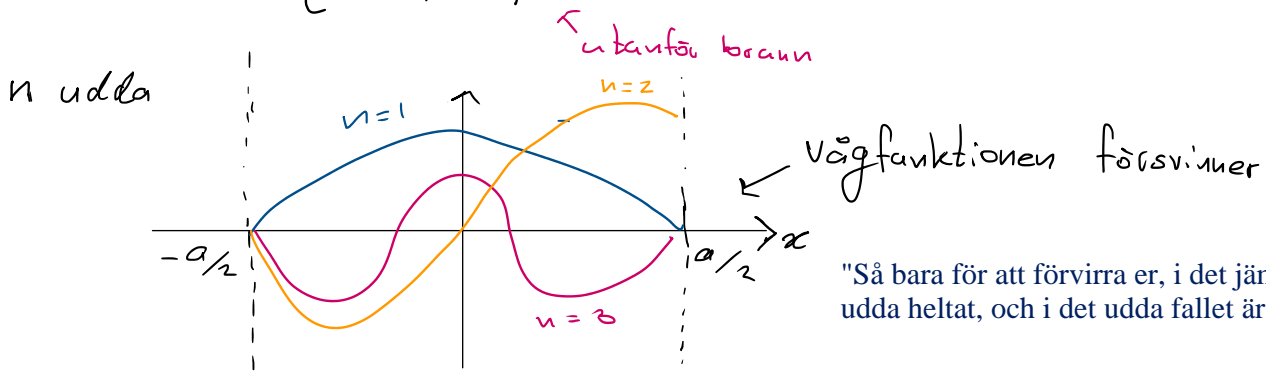
$$\frac{2mE}{\hbar^2} a^2 = n^2 \pi^2$$

$$\Rightarrow E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2m a^2}$$



Det finns heltal som bestämmmer energinivåerna:  $n$  kallas för ett "kvanttal"

jämn:  $\psi(x) = \begin{cases} A \cos kx \\ C \exp(-q|x|) \end{cases} \quad , \quad k = \frac{n\pi}{a} \quad , \quad q = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \xrightarrow{V \rightarrow \infty} \infty$



"Så bara för att förvirra er, i det jämna fallet är  $n$  ett udda heltal, och i det udda fallet är  $n$  jämn."

Om potentialen är  $\infty$  i ett ändligt område, måste  $\psi(x) = 0$

$$\int_{-a/2}^{a/2} |\psi_n(x)|^2 dx = 1 = A, B = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

- 1) En partikel rör sig i en potential  $V(x)$ , och har bestämd energi  $E$ . För vilken  $V$  kan partikeln också ha bestämd rörelsemängd?

$$[\hat{H}, \hat{p}] = 0$$

$$\left[ \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}), \hat{p} \right] = \left\{ \hat{p}^2 \text{ kommuterar med } \hat{p} \right\} = [V(\hat{x}), \hat{p}] = 0$$

$$\Rightarrow V(\hat{x}) = 0 \quad \text{eller} \quad V(\hat{x}) = \text{konstant}$$

- 2) En partikel rör sig i en potential och har bestämd energi  $E$ . Kan partikeln både ha bestämd position och bestämd rörelsemängd?

Svar: Nej!

Det spelar ingen roll vad för potential och energi partikeln har, position och rörelsemängd kommuterar aldrig, det alltid omöjligt att veta dem exakt och samtidigt

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \neq 0$$

- 3) Vad kommuterar paritetsoperatören med?

$$[\hat{x}, \hat{\Pi}] \neq 0 \quad [\hat{x}^3, \hat{\Pi}] \neq 0$$

$$[\hat{x}^2, \hat{\Pi}] = 0 \quad [\hat{x}^4, \hat{\Pi}] = 0 = [\hat{x}^2 \hat{x}^2, \hat{\Pi}] =$$

$$= \hat{x}^2 [\hat{x}^2, \hat{\Pi}] + [\hat{x}^2, \hat{\Pi}] \hat{x}^2 = 0$$

$$\Rightarrow [\hat{x}^{2n}, \hat{\Pi}] = 0$$

- 4) Om paritetsoperatören kommuterar med hamiltonianen, är

- Är potentialenergin anti-symmetrisk
- Måste alla energiegenfunktioner ha bestämd paritet
- Går det att hitta energiegenfunktioner med bestämd paritet
- Är energin kvantifierad

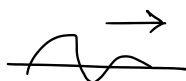
?

$$\ominus_m \quad [\hat{\Pi}, \hat{H}] = 0$$

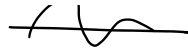
en fri partikel har  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \Rightarrow [\hat{\Pi}, \hat{H}] = 0$

$$\hat{H} |p\rangle = \frac{p^2}{2m} |p\rangle$$

$$[\hat{\Pi}, \frac{p^2}{2m}] = 0$$



$$[\hat{\Pi}, \frac{p^2}{2m}] = 0$$



$$\hat{\Pi} |p\rangle \rightarrow |-p\rangle$$

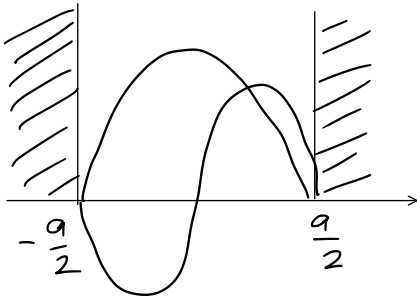
$$|E\rangle = \frac{|p\rangle + |-p\rangle}{\sqrt{2}} = \begin{cases} \sin \frac{px}{\hbar} \\ \cos \frac{px}{\hbar} \end{cases}$$

Svar: Det går att hitta energieigenfunktioner med bestämd paritet

Förra gången:

1. Där potentialenergin  $\hat{V}$  är en funktion av  $x$  löser vi den tidsberoende Schrodinger ekvationen i positionsbasen  $\left[-\frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right] \psi(x) = E\psi(x)$  för energiegenvärden  $\{E\}$  och energiegenfunktionerna  $\{\psi(x)\}$ .
2. Om potentialen är symmetrisk,  $V(x) = V(-x)$ , kan vi anta att energiegenfunktionerna har bestämd paritet (jämn/udda).
3. Energi av en bunden partikel är "kvantiserad", pga randvillkor som vågfunktionen uppfyller.
4. För en rektangulär brunn,  $V(x) = 0, |x| \leq \frac{a}{2}$  eller  $V_0, |x| > \frac{a}{2}$ , finns det enollskild sannolikhet att kan hittas utanför, i ett klassiskt förbjudet område.

1. Partikel i en låda



$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}$$

$$\psi_n(x) = \frac{\sqrt{2}}{a} \begin{cases} \cos \frac{n\pi x}{a} & n = 1, 3, 5, \dots \\ \sin \frac{n\pi x}{a} & n = 2, 4, 6, \dots \end{cases}$$

$n$  är ett "kvanttal"

Vågfunktionen försvinner utanför brunnen.  $\frac{\partial \psi}{\partial x}$  är inte kontinuerlig vid  $x = \pm \frac{a}{2}$

(okej om  $V(\pm \frac{a}{2}) \rightarrow \infty$ )

3 randvillkor som en energiegenfunktion måste uppfylla:

1. Vågfunktionen är kontinuerlig
2. Första derivatan är kontinuerlig
3. Vågfunktionen måste försvinna när  $x$  blir väldigt stor

2.4 i Griffiths

Bestäm  $\langle x \rangle, \langle x^2 \rangle, \langle p \rangle$  och  $\langle p^2 \rangle \dots$

$$\langle p \rangle = \langle \psi | p | \psi \rangle =$$

$$= \int_{-a/2}^{a/2} \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi(x) dx$$

Jämn:

$$= -i\hbar \frac{2}{a} \int_0^{a/2} \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \frac{\partial}{\partial x} \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx$$

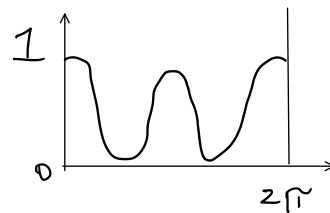
$$\begin{aligned}
 \langle p \rangle &= -i\hbar \frac{2}{a} \int_{-a/2}^{a/2} \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \frac{\partial}{\partial x} \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx \\
 &= + \frac{2i\hbar}{a} \int_{-a/2}^{a/2} \underbrace{\frac{n\pi}{a} \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right)}_{\text{j\u00e4mn}} \underbrace{\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)}_{\text{udda}} dx = 0
 \end{aligned}$$

$\underbrace{\int_{-a/2}^{a/2}}_{\text{symmetriskt intervall}}$

$$\langle p^2 \rangle = \int_{-a/2}^{a/2} \psi^*(x) \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \psi(x) dx =$$

$$= -\frac{2\hbar^2}{a} \int_{-a/2}^{a/2} \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx$$

$$= + \frac{2\hbar^2}{a} \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 \int_{-a/2}^{a/2} \cos^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx =$$



$$= \frac{2\hbar^2}{a} \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 \int_{-a/2}^{a/2} 1 + \cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right) dx$$

$$= \frac{2\hbar^2}{a} \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 \left[ x \Big|_{-a/2}^{a/2} + A \sin\left(\frac{2n\pi x}{a}\right) \Big|_{x=-a/2}^{x=a/2} \right]$$

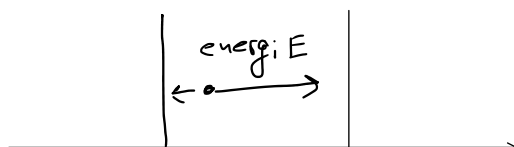
$\text{---} = 0$

$$\langle p^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{a} \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 a = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{a^2} = 2m E_n$$

$$\Rightarrow \langle p \rangle = 0, \quad \langle p^2 \rangle = 2m E_n$$

Udda fallet ger exakt samma svar

Om vi betraktar det som en klassisk partikel som studsar fram och tillbaka med best\u00e4md energi, vad \u00e4r  $\langle p \rangle$  och  $\langle p^2 \rangle$





$$50\% \text{ av tiden, } p = \sqrt{2mE}$$

$$50\% \text{ av tiden, } p = -\sqrt{2mE}$$

$$\langle p \rangle = 0$$

$$\langle p^2 \rangle = \frac{2mE + 2mE}{2} = 2mE$$

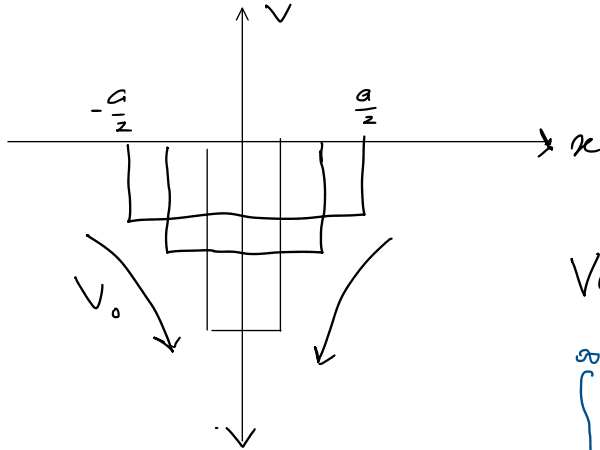
Precis som vi fått har från Schrödinger ekvationen

Obs, samma gäller inte  $\langle x \rangle$  och  $\langle x^2 \rangle$

## 2. $\delta$ -funktion-potentialer

Vad händer om vi tar en rektangulär brunn, 
$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & |x| \leq \frac{a}{2} \\ 0 & |x| > \frac{a}{2} \end{cases}$$

och tar gränsen där brunnen blir djupare,  $V_0 \rightarrow \infty$ , och smalare,  $a \rightarrow 0$ , så att  $V_0 a = \Delta$  ( $\Delta$  i Griffiths)  
(så att arean  $V_0 \cdot a$  är en konstant delta)



$$V(x) = -\Delta \delta(x) \quad [L^{-1}]$$

[energi] · [L]

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x - x_0) dx = f(x_0)$$

Energivåerna kan hittas med resultaten från igår:

$$\tan\left(\frac{ka}{2}\right) = \sqrt{\left(\frac{W}{ka}\right)^2 - 1}, \quad W^2 = \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2}, \quad k = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

eller direkt:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \Delta \delta(x) \psi(x) = -E \psi(x)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + k^2 \psi = 0 \quad \text{om } x \neq 0, \quad k = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$$

Randvillkor krav:

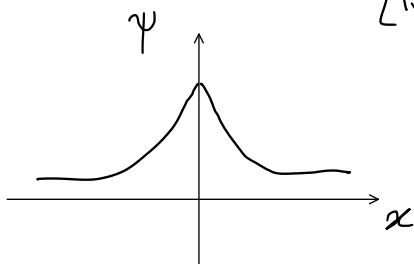
Vågfunktionen måste vara kontinuerlig  
Första derivatan måste vara kontinuerlig  
Måste gå mot noll för stora  $x$

$$\Rightarrow \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + k^2 \psi = 0 \quad \text{om } x \neq 0, \quad k = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$$

Detta uppfylls av ~~sin, cos, e<sup>ikx</sup>, e<sup>-ikx</sup>, e<sup>kx</sup>, e<sup>-kx</sup>~~

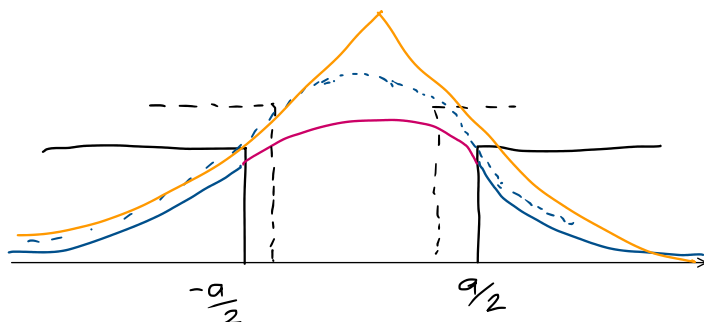
Uppfylls ej pga randvillkor

$$\Rightarrow \psi(x) = \begin{cases} A e^{-kx} & , x > 0 \\ B e^{kx} & , x < 0 \end{cases} \Rightarrow A = B \text{ så att } \psi \text{ är kontinuerlig.}$$



Derivatan är inte kontinuerlig, vilket är ett problem, men vi har en delta-funktion vid  $x = 0$ , där potentialen är oändligt stor, i ett väldigt litet område, så det är okej att första derivatan inte är kontinuerlig eftersom vi har en delta funktion

lösningen:  $\psi(x) = A e^{|x|}$  och  $\frac{\partial \psi}{\partial x}$  är inte kontinuerlig för att det finns en "oändligt stor" potential vid  $x = 0$



Om vi gör brunnen smalare, då klämmer vi området där vågfunktionsgradienten byter tecken, och till slut ser det ut som att det är okontinuerligt, men det är det inte

Vi får ett speciellt randvillkor för  $\delta$ -funktioner genom att integrera TOSE över ett intervall  $-\epsilon < x < \epsilon$ , där  $\epsilon \rightarrow 0$ .

$$\int_{-\epsilon}^{\epsilon} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \Delta \delta(x) \psi(x) dx = E \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \psi(x) dx$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial \psi}{\partial x} \Big|_{-\epsilon}^{\epsilon} - \Delta \psi(0)$$

$$\approx \epsilon E \psi(0) = 0$$

Arean under vågfunktionen, men om epsilon är väldigt liten blir det noll

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial \psi}{\partial x} \Big|_{-\epsilon}^{\epsilon} - \Delta \psi(0) = 0}$$

gäller  $\frac{\partial \psi}{\partial x}$  vid  $\delta$ -funktion potentialer

$$\psi(x) = A e^{-k|x|}$$

$$\left. \begin{aligned} x > 0 : \frac{\partial \psi}{\partial x} &= -kA e^{-k|x|} \\ x < 0 : \frac{\partial \psi}{\partial x} &= +kA e^{-k|x|} \end{aligned} \right\}$$

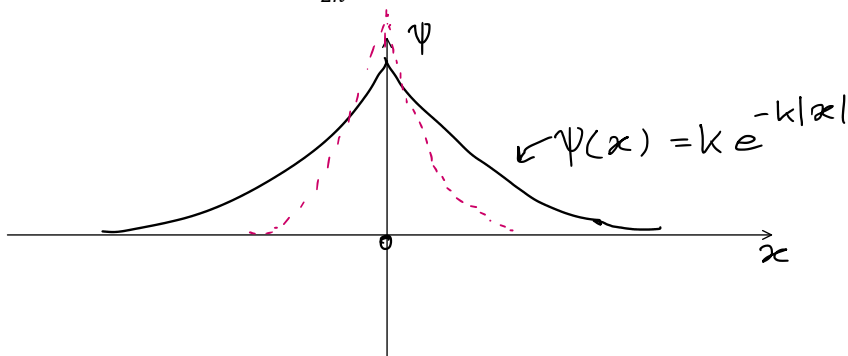
$$\left. \frac{\partial \psi}{\partial x} \right|_{-\infty}^{\infty} = -2kA = \frac{2m\Delta}{\hbar^2} \frac{\psi(0)}{A}$$

$$k = \frac{m\Delta}{\hbar^2}, \quad k = \frac{\sqrt{-2mE'}}{\hbar}$$

$$\text{Ett bundet tillstånd, } E = -\frac{m\Delta^2}{2\hbar^2}$$

$$\Rightarrow E = -\frac{m\Delta^2}{2\hbar^2}$$

$$\text{Ett bundet tillstånd, } E = -\frac{m\Delta^2}{2\hbar^2}$$



"Så vi har hittat att partikeln är bunden av en potential som den aldrig befinner sig i. Är det rimligt? Utanför brunnen är potentialen noll, så partikeln är bunden, men varför är den alltid utanför brunnen?"

Om jag var partikeln, och jag ville minska min energi, dvs jag vill göra min energi mer negativ, så att jag blir mer bunden till brunnen, och det gör jag genom att klämma in vid  $x = 0$ , dvs jag vill att vågfunktionens värde vid  $x = 0$  blir större, då känner jag brunnen mer.

Men vad händer om vågfunktionen blir tätare omkring brunnen (streckade linjen)? Vågfunktionen säger hur sannolikt det är att hitta partikeln någonstans. Om vågfunktionen blir tätare, vad säger det om sannolikhetstätheten? Svaret är att området partikeln kan hittas blir mindre, vilket gör att osäkerhet i position blir mindre, dvs att  $\langle x^2 \rangle \rightarrow 0$ . Detta gör att osäkerheten i rörelsemängden ökar, dvs att  $\langle p^2 \rangle \rightarrow \infty$ . Vad betyder detta? Vad är  $p^2$  kopplat med? Rörelseenergin, alltså  $\frac{p^2}{2m} \rightarrow \infty$ .

Så om jag gör så att vågfunktionen blir tätare, då minskar jag osäkerheten i position, då ökar jag osäkerhet i rörelsemängd, då ökar jag partikelns rörelseenergi.

Alltså genom att jag försöker minska min potentialenergi har jag höjt min rörelseenergi istället. Om jag vill minska min rörelseenergi gör jag tvärtom, då vill jag att partikeln sprider ut sig så mycket som möjligt."

$$\langle x \rangle \rightarrow 0$$

$$\langle p^2 \rangle \rightarrow \infty$$

$$\langle \underline{p^2} \rangle \rightarrow \infty$$

Det finns en kamp mellan potential och rörelseenergi pga osäkerhetsprincipen

Den lägsta energin bestäms av balansen mellan dessa två.

$$\frac{\langle p^2 \rangle}{2m} \rightarrow \psi$$

Den lägsta energin bestäms av balansen mellan dessa två.

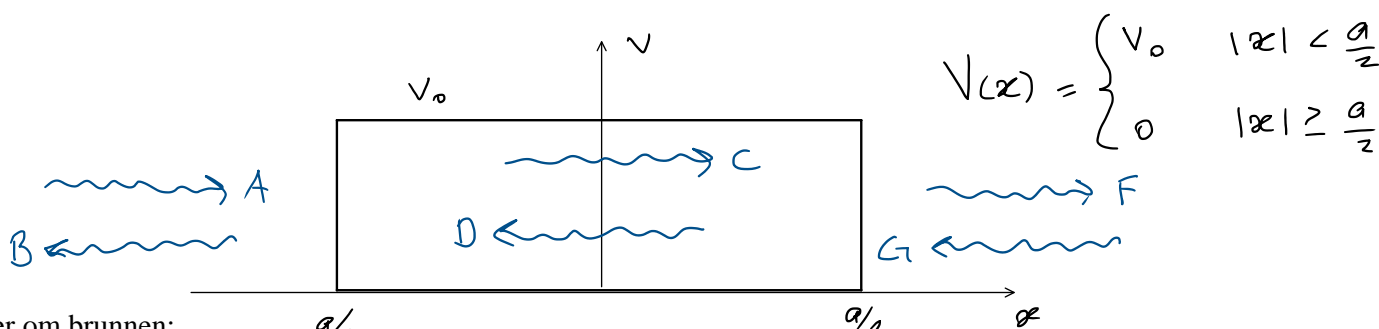
### 3. Spridning

Vi har sett både fria och bundna partiklar, men hur åtskiljer vi dem?

Ett energiegentillstånd som uppfyller

$$E < \lim_{x \rightarrow \pm\infty} V(x) = \text{"bundet"}$$

$$E > \lim_{x \rightarrow \pm\infty} V(x) = \text{"spridningstillstånd"} \quad \text{partikeln är nästan fri}$$



Vänster om brunnen:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + k^2 \psi = 0$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\Rightarrow \psi = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

↑  
egentillstånd

I brunnen:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + q^2 \psi = 0$$

$$q = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$$

$$\begin{cases} q \in \mathbb{R}, & \text{om } E > V_0 \\ q \in i\mathbb{R}, & \text{om } E < V_0 \end{cases}$$

$$\Rightarrow \psi = C e^{iqx} + D e^{-iqx}$$

Höger om brunnen:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + k^2 \psi = 0$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\Rightarrow \psi = F e^{ikx} + G e^{-ikx}$$

Vad exponentialfunktionerna beskriver är partiklar som går mot barriären och iväg från barriären (kolla bild)

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

$$\Rightarrow \hat{H} \psi(x) = E \psi(x)$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V_0 \psi = E \psi$$

$$\Rightarrow \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - (V_0 - E) \psi = \frac{2m}{\hbar^2} \psi = 0$$

$$= \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \psi = 0$$

$$= \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + q^2 \psi = 0, \text{ där}$$

$$q = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$$

Om energin är större än  $V_0$ , då är det komplexa exponentialen, och om det är mindre än  $V_0$  har vi en reell term i exponentialfunktionen

Våra tillstånd är tekniskt sätt inte normerbara, men vi kommer runt det genom att göra såhär. Vi har den här definitionen istället för om tillstånden var normerbara så skulle normeringsfaktorn försvinna

Tolka

$$T = \frac{F}{A} = \text{sannolikhetsamplitud för transmission}$$

och

$$D = \frac{B}{A} = \text{sannolikhetsamplitud för}$$

vi kommer runt det genom att göra såhär. Vi har den här definitionen istället för om tillstånden var normerbara så skulle normeringsfaktorn försvinna vid dessa kvoter

och

$$R = \frac{B}{A} = \text{sannolikhetsamplitud för reflektion}$$

Vi kan anta  $G = 0$  om partikeln skickas från vänster

Randvillkor:

- $\psi$  är kontinuerlig vid  $x = \pm \frac{a}{2}$
- $\frac{\partial \psi}{\partial x}$  är kontinuerlig vid  $x = \pm \frac{a}{2}$

$x = -\frac{a}{2} :$

$$A e^{-ik \frac{a}{2}} + B e^{+ik \frac{a}{2}} = C e^{-iq \frac{a}{2}} + D e^{+iq \frac{a}{2}}$$

$$k A e^{-ik \frac{a}{2}} - k B e^{+ik \frac{a}{2}} = q C e^{-iq \frac{a}{2}} - q D e^{+iq \frac{a}{2}}$$

$x = \frac{a}{2} :$

$$C e^{+iq \frac{a}{2}} + D e^{-iq \frac{a}{2}} = F e^{+ik \frac{a}{2}} + G e^{-ik \frac{a}{2}} = 0$$

$$q C e^{+iq \frac{a}{2}} - q D e^{-iq \frac{a}{2}} = k F e^{+ik \frac{a}{2}}$$

Fyra ekvationer i fyra okända variabler, C, B, D och F

$\%A$   $e^{-ik \frac{a}{2}} + R e^{+ik \frac{a}{2}} = C e^{-iq \frac{a}{2}} + D e^{+iq \frac{a}{2}}$   
 $k e^{-ik \frac{a}{2}} - k R e^{+ik \frac{a}{2}} = q C e^{-iq \frac{a}{2}} - q D e^{+iq \frac{a}{2}}$

$x = \frac{a}{2} :$

$\%A$   $C e^{+iq \frac{a}{2}} + D e^{-iq \frac{a}{2}} = T e^{+ik \frac{a}{2}}$   
 $q C e^{+iq \frac{a}{2}} - q D e^{-iq \frac{a}{2}} = k T e^{+ik \frac{a}{2}}$

Definiera om konstanten C/A till C, D/A = D

$$\underbrace{\begin{pmatrix} e^{-ik \frac{a}{2}} & e^{+ik \frac{a}{2}} \\ \frac{k}{q} e^{-ik \frac{a}{2}} & -\frac{k}{q} e^{+ik \frac{a}{2}} \end{pmatrix}}_{M_1} \begin{pmatrix} 1 \\ R \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} e^{-iq \frac{a}{2}} & e^{+iq \frac{a}{2}} \\ e^{-iq \frac{a}{2}} & -e^{+iq \frac{a}{2}} \end{pmatrix}}_{M_2} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}$$

$$\underbrace{\begin{pmatrix} e^{+iq \frac{a}{2}} & e^{-iq \frac{a}{2}} \\ e^{+iq \frac{a}{2}} & -e^{-iq \frac{a}{2}} \end{pmatrix}}_{M_3} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ k/q \end{pmatrix} T e^{+ik \frac{a}{2}}$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ R \end{pmatrix} = M_1^{-1} M_2 M_3^{-1} \begin{pmatrix} 1 \\ k/q \end{pmatrix} T e^{+ik \frac{a}{2}}$$

$$1 \quad | \quad e^{+iq \frac{a}{2}} \quad e^{-iq \frac{a}{2}} \quad | \quad \dots \quad |$$

$$M_3^{-1} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{iq\frac{a}{2}} & -e^{-iq\frac{a}{2}} \\ e^{iq\frac{a}{2}} & -e^{-iq\frac{a}{2}} \end{pmatrix}$$

$$A^{-1} = \frac{1}{|A|} \text{Adj} A$$

$$M_1^{-1} = \frac{q}{2k} \begin{pmatrix} \frac{k}{q} e^{ik\frac{a}{2}} & e^{ik\frac{a}{2}} \\ \frac{k}{q} e^{-ik\frac{a}{2}} & -e^{-ik\frac{a}{2}} \end{pmatrix}$$

$$M_3^{-1} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{k}{q} \end{pmatrix} T e^{ik\frac{a}{2}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{-iq\frac{a}{2}} & e^{-iq\frac{a}{2}} \\ e^{iq\frac{a}{2}} & -e^{iq\frac{a}{2}} \end{pmatrix} T e^{ik\frac{a}{2}} =$$

$$= \frac{1}{2} e^{ik\frac{a}{2}} T \begin{pmatrix} e^{-iq\frac{a}{2}} & (1 + \frac{k}{q}) \\ e^{iq\frac{a}{2}} & (1 - \frac{k}{q}) \end{pmatrix}$$

$$M_2 M_3^{-1} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{k}{q} \end{pmatrix} T e^{ik\frac{a}{2}} = \begin{pmatrix} e^{-iq\frac{a}{2}} & e^{iq\frac{a}{2}} \\ e^{-iq\frac{a}{2}} & -e^{iq\frac{a}{2}} \end{pmatrix} \frac{1}{2} e^{ik\frac{a}{2}} T \begin{pmatrix} e^{-iq\frac{a}{2}} \cdot (1 + \frac{k}{q}) \\ e^{iq\frac{a}{2}} \cdot (1 - \frac{k}{q}) \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{2} T e^{ik\frac{a}{2}} \begin{pmatrix} e^{-2iq\frac{a}{2}} (1 + \frac{k}{q}) + e^{2iq\frac{a}{2}} (1 - \frac{k}{q}) \\ e^{-2iq\frac{a}{2}} (1 + \frac{k}{q}) - e^{2iq\frac{a}{2}} (1 - \frac{k}{q}) \end{pmatrix} =$$

$$= T e^{ik\frac{a}{2}} \begin{pmatrix} \cos(qa) - \frac{2k}{q} \sin(qa) \\ -i \sin(qa) + \frac{k}{q} \cos(qa) \end{pmatrix}$$

$$M_1^{-1} M_2 M_3^{-1} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{k}{q} \end{pmatrix} T e^{ik\frac{a}{2}} =$$

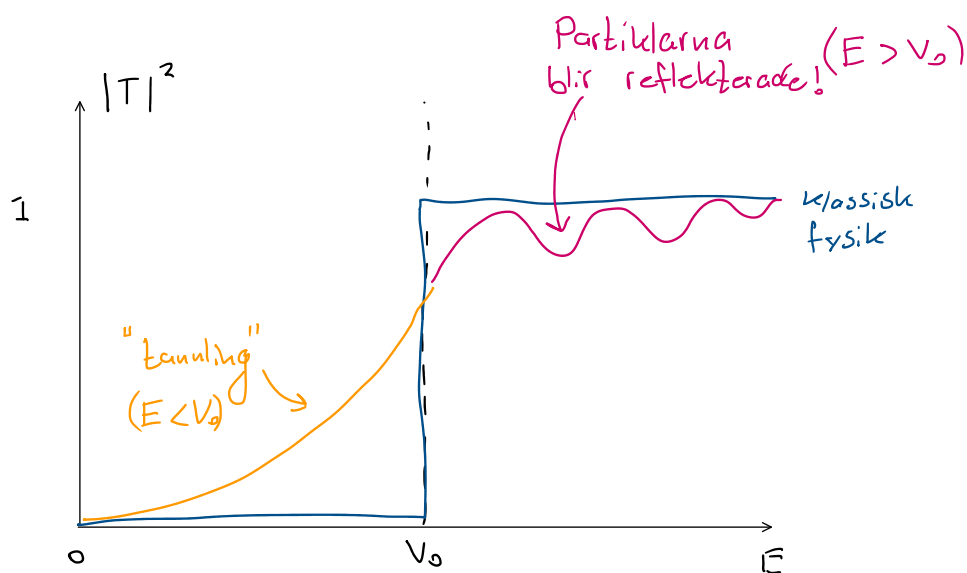
$$= \frac{q}{2k} T e^{ik\frac{a}{2}} \begin{pmatrix} \frac{k}{q} e^{ik\frac{a}{2}} & e^{ik\frac{a}{2}} \\ \frac{k}{q} e^{-ik\frac{a}{2}} & -e^{-ik\frac{a}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(qa) - \frac{ik}{q} \sin(qa) \\ -i \sin(qa) + \frac{k}{q} \cos(qa) \end{pmatrix} =$$

$$= \frac{q}{2k} T e^{ik\frac{a}{2}} \begin{pmatrix} e^{ik\frac{a}{2}} \frac{k}{q} [\cos(qa) - \frac{ik}{q} \sin(qa)] + [-i \sin(qa) + \frac{k}{q} \cos(qa)] \\ \dots \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 \\ \dots \end{pmatrix} \Rightarrow \frac{1}{T} = e^{ika} \left( \cos(qa) - i \frac{k^2 + q^2}{2kq} \sin(qa) \right)$$

$$|T|^2 = \left[ \cos^2(qa) + \left( \frac{k^2 + q^2}{2kq} \right)^2 \sin^2(qa) \right]^{-1}$$

$$= \left[ 1 + \frac{V_0^2}{4E|E-V_0|} \sin^2(qa) \right]^{-1}, \quad E > V_0$$



$$\left[ 1 + \frac{V_0^2}{4E|E-V_0|} \sin^2(qa) \right]^{-1}, \quad E > V_0$$

$$\left[ \dots \frac{V_0^2}{\dots} \right]^{-1}$$

$$\left[ 1 + \frac{V_0^2}{4E|E-V_0|} \sinh^2(qa) \right]^{-1}, \quad E < V_0$$

Om  $a \rightarrow \infty$ ,  $\sinh^2(qa) \rightarrow \exp(2qa)$ ,  $|T|^2 \sim \exp(-2qa)$

Om  $a \rightarrow \infty$ ,  $\sinh(qa) \rightarrow \exp(qa)$ ,  $|T|^2 \sim \exp(-2qa)$

$\Rightarrow$  Tunnlingssees när partiklar har en våglängd som är jämförbar med barriärens bredd

$\frac{1}{q} \sim$  våglängden av partikel  $\sim \frac{h}{mv}$

de broglie

(Det här är ämnet av inlämning 2)

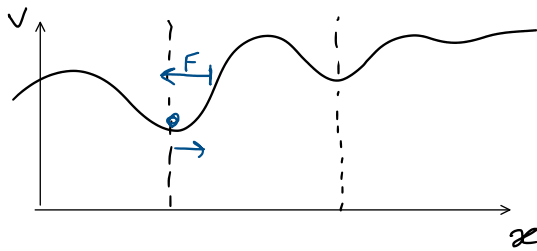


Förra gången:

1. Ett energiegentillstånd med  $E < \lim_{x \rightarrow \pm\infty} V(x)$  är "bundet" och ett med  $E > \lim_{x \rightarrow \pm\infty} V(x)$  är ett "spridningstillstånd"
2. Partiklar kan "tunnla" genom potentialbarriärer trots att deras energi inte räcker enligt klassisk fysik.

1. Motivering

Låt oss betrakta en allmän, glatt, potential:



Punkter där potentialens gradient försvinner  $\frac{\partial V}{\partial x} = 0$  kallas för "jämviktpunkter". (ingen kraft på partikeln).

Expanderar potentialen omkring  $x = x_0$

$$V(x) \approx V(x_0) + \cancel{\frac{\partial V}{\partial x} \Big|_{x=x_0} (x-x_0)} + \frac{1}{2} \underbrace{\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} \Big|_{x=x_0}}_{> 0} (x-x_0)^2 + \dots$$

$= 0$  vid jämvikt
 $> 0 \Rightarrow$  "stabila" jämviktpunkter

Om partikeln inte rör sig långt ifrån jämvikten, ser potentialen kvadratisk ut:

$$V(x) = \frac{1}{2} k x^2 = \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2 \quad k = m \omega_0^2$$

↖ fjäderkonstant
↖ "naturliga frekvensen"

Enligt klassisk fysik:

Newtons andra lag:  $m \frac{d^2 x}{dt^2} = -m \omega_0^2 x$

$$\Rightarrow x = A \cos(\omega_0 t) + B \sin(\omega_0 t)$$

Partikeln oscillerar med en frekvens som inte beror på amplituden.

Enligt kvantfysik:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 \hat{x}^2$$

Lös först  $\hat{H} |E\rangle = E |E\rangle$

## 2. Stegoperatorer

I positionsbasen blir Tidsoberoende Schrödinger-ekvationen (TOSE):

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2 \right] \psi(x) = E \psi(x)$$

↗ Vågfunktionen som beskriver ett energiegentillsånd

Titta på 2.3.2 i Griffiths för att se hur man löser det direkt.

Vi ska göra det på ett annat sätt

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 \hat{x}^2$$

Kan jag faktorisera Hamiltonianen?

Inför en operator  $\hat{a} = \frac{1}{2L} \hat{x} + \frac{iL}{\hbar} \hat{p}$  ,  $L = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}$

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{2} \hat{x}^\dagger - \frac{iL}{\hbar} \hat{p}^\dagger = \frac{1}{2} \hat{x} - \frac{iL}{\hbar} \hat{p} \neq \hat{a}$$

$\hat{a}$  är inte Hermitisk

$\hat{a}$  och  $\hat{a}^\dagger$  faktorerar (nästan) Hamiltonianen:

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} = \left( \frac{\hat{x}}{2L} - \frac{iL}{\hbar} \hat{p} \right) \left( \frac{\hat{x}}{2L} + \frac{iL}{\hbar} \hat{p} \right) =$$

$$\frac{1}{4L^2} \hat{x}^2 + \frac{L^2}{\hbar^2} \hat{p}^2 + \frac{i}{2\hbar} \hat{x} \hat{p} - \frac{i}{2\hbar} \hat{p} \hat{x} =$$

$$= \frac{1}{4L^2} \hat{x}^2 + \frac{L^2}{\hbar^2} \hat{p}^2 + \frac{i}{2\hbar} \underbrace{[\hat{x}, \hat{p}]}_{i\hbar}$$

$$4L^2 = \frac{\hbar^2}{4L^2} \hat{x}^2 + \frac{L^2}{\hbar^2} \hat{p}^2 - \frac{1}{2}$$

$$\Rightarrow \hat{a}^\dagger \hat{a} = \frac{2m\omega_0}{4\hbar} \hat{x}^2 + \frac{1}{2m\omega_0\hbar} \hat{p}^2 - \frac{1}{2}$$

$$= \frac{1}{\hbar\omega_0} \left( \frac{1}{2} m\omega_0^2 \hat{x}^2 + \frac{1}{2m} \hat{p}^2 \right) - \frac{1}{2}$$

$$= \frac{1}{\hbar\omega_0} \hat{\mathcal{H}} - \frac{1}{2}$$

$$\Rightarrow \hat{\mathcal{H}} = \hbar\omega_0 \left( \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \quad [\hbar\omega_0] = [\text{energy}]$$

Vad gör operatorerna  $\hat{a}$  och  $\hat{a}^\dagger$ ?

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

$$\hat{a} \hat{\mathcal{H}} |E\rangle = E \hat{a} |E\rangle$$

$$= \hat{\mathcal{H}} \hat{a} \quad \text{om } [\hat{\mathcal{H}}, \hat{a}] \stackrel{!}{=} 0$$

$\Rightarrow$  Vi behöver  $[\hat{\mathcal{H}}, \hat{a}]$  och  $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]$

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \left[ \frac{1}{2L} \hat{x} + \frac{iL}{\hbar} \hat{p}, \frac{1}{2L} \hat{x} - \frac{iL}{\hbar} \hat{p} \right]$$

$$= -\frac{i}{2\hbar} \underbrace{[\hat{x}, \hat{p}]}_{i\hbar} + \frac{i}{2\hbar} \underbrace{[\hat{p}, \hat{x}]}_{-i\hbar} =$$

$$[\hat{x}, \hat{x}] = [\hat{p}, \hat{p}] = 0$$

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{1} \quad \text{identitetsoperatorn}$$

$$[\hat{a}, \hat{\mathcal{H}}] = \left[ \hat{a}, \hbar\omega_0 \left( \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \right]$$

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]$$

$$\begin{aligned}
 [\hat{a}, \hat{H}] &= \left[ \hat{a}, \hbar\omega_0 \left( \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \right] && [A, BC] = [A, B]C + B[A, C] \\
 &= \hbar\omega_0 \left[ \underbrace{[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]}_{\hat{1}} \hat{a} + \hat{a}^\dagger \underbrace{[\hat{a}, \hat{a}]}_{=0} \right] \\
 &= \hbar\omega_0 \hat{a}
 \end{aligned}$$

På samma sätt:  $[\hat{a}^\dagger, \hat{H}] = -\hbar\omega_0 \hat{a}^\dagger$

$$\begin{aligned}
 \hat{H}|E\rangle &= E|E\rangle && [\hat{a}, \hat{H}] = \hbar\omega_0 \hat{a} \\
 \hat{a}\hat{H}|E\rangle &= E\hat{a}|E\rangle \\
 \hat{H}\hat{a} + \underbrace{[\hat{a}, \hat{H}]}_{\hbar\omega_0 \hat{a}} & \\
 \hline
 (\hat{H} + \hbar\omega_0)\hat{a} &
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (\hat{H} + \hbar\omega_0)\hat{a}|E\rangle &= E\hat{a}|E\rangle \\
 \hat{H}(\hat{a}|E\rangle) &= (E - \hbar\omega_0)\hat{a}|E\rangle
 \end{aligned}$$

$$\hat{H}(\hat{a}|E\rangle) = \underbrace{(E - \hbar\omega_0)}_{\text{Energiegenvärde}} \underbrace{\hat{a}|E\rangle}_{\text{Energiegentillstånd}}$$

Tillståndet  $\hat{a}|E\rangle$  är ett annat energiegentillstånd med energi  $E - \hbar\omega_0$

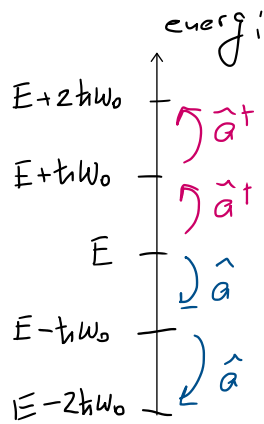
Alltså om jag börjar med ett visst energiegentillstånd och tillämpar  $\hat{a}$ , så skapar jag ett till energiegentillstånd med mindre energi

Tillståndet  $\hat{a}^\dagger|E\rangle$  är ett annat energiegentillstånd med energi  $E + \hbar\omega_0$

$\Rightarrow \hat{a}$  kallas för "den minskande operatör" / "förintelseoperatör" / "annihilation operator"

$\hat{a}^\dagger$  kallas för "den ökande operatören" / "skapelseoperatören" / "creation operator"

Det vi har hittat är att vi har en stege av energinivåer



Vi har en stege av energinivåer, åtskild av  $\hbar\omega_0$ , men var börjar stegen?

Var börjar stegen?

Alla egentillstånd måste vara normerbara:  $\langle E | E \rangle = 1$

Det finns ett tillstånd där en fler tillämpning av  $\hat{a}$  ska skapa ett onormerbart tillstånd.

$|E_0\rangle \leftarrow$  Energitillstånd med lägsta energivärde

$\hat{a}|E_0\rangle$  måste vara onormerbart

$$\begin{aligned} \langle E_0 | \hat{a}^\dagger \hat{a} | E_0 \rangle &= 0 = \left\{ \hat{a}^\dagger \hat{a} = \frac{\hat{p}^2}{\hbar\omega_0} - \frac{1}{2} \right\} = \\ &= \langle E_0 | \left( \frac{\hat{p}^2}{\hbar\omega_0} - \frac{1}{2} \right) | E_0 \rangle = 0 = \frac{E_0}{\hbar\omega_0} - \frac{1}{2} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow E_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2}$$

De tillåtna energinivåerna är  $\frac{\hbar\omega_0}{2}, \frac{3\hbar\omega_0}{2}, \frac{5\hbar\omega_0}{2}, \frac{7\hbar\omega_0}{2}, \dots$

$$\Rightarrow E_n = \hbar\omega_0 \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad n \in \mathbb{Z}, \quad n \geq 0$$

$$E_n = \hbar \omega_0 \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

↑  
ett kvanttal  $n$

$|n\rangle =$  "tillstånd där partikeln har bestämd energi  $E_n = \hbar \omega_0 \left( n + \frac{a}{2} \right)$ "

$$\hat{a}|n\rangle = \alpha|n-1\rangle, \quad \hat{a}^\dagger|n\rangle = \beta|n+1\rangle$$

$$\langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = |\alpha|^2 \underbrace{\langle n-1|n-1\rangle}_{=1}$$

$$\langle n|\frac{\hat{H}}{\hbar\omega_0} - \frac{1}{2}|n\rangle = \frac{\left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0}{\hbar\omega_0} - \frac{1}{2} = n = |\alpha|^2 \Rightarrow \alpha = \sqrt{n}$$

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad = \text{minskande (förntelse)operatorn}$$

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad = \text{ökande (skapelse)operatorn}$$

$$\hat{H} = \hbar\omega_0 \left( \hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2} \right)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}|n\rangle &= \hbar\omega_0 \left( \hat{a}^\dagger\sqrt{n}|n-1\rangle + \frac{1}{2}|n\rangle \right) \\ &= \hbar\omega_0 \left( \sqrt{n-1+1}\sqrt{n}|n\rangle + \frac{1}{2}|n\rangle \right) \\ &= \hbar\omega_0 \left( n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle \end{aligned}$$

### 3. Vågfunktioner

Hur ser  $\psi_n(x) = \langle x|n\rangle$  ut?

$$\hat{a}|0\rangle = 0$$

$$\langle x|\hat{a}|0\rangle = 0$$

$\hat{a}$  i positionsbasen

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{där } |0\rangle \text{ är "grundtillståndet"} \\ \hat{a} = \frac{1}{2L}\hat{x} + \frac{iL}{\hbar}\hat{p} \end{array} \right.$$

↑  
... till  $\psi(x)$

$\hat{a}$  i positionsbasen

$$\left(\frac{1}{2L}x + L\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi_0(x) = 0$$

$$\hat{p}\psi(x) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)$$

$$\psi_0(x) = A \exp\left(-\frac{x^2}{4L^2}\right) = \text{grundtillståndets vågfunktion}$$

$$A \text{ kommer ifrån } \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \Rightarrow A = \frac{1}{(2\pi L^2)^{1/4}}$$

Högre vågfunktioner:

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$$

$$\langle x | \rightarrow$$

$$\hat{a}^\dagger \psi_n(x) = \sqrt{n+1} \psi_{n+1}(x)$$

$$\left(\frac{x}{2L} - L\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi_n(x) = \sqrt{n+1} \psi_{n+1}(x)$$

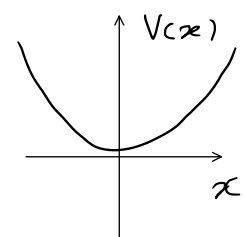
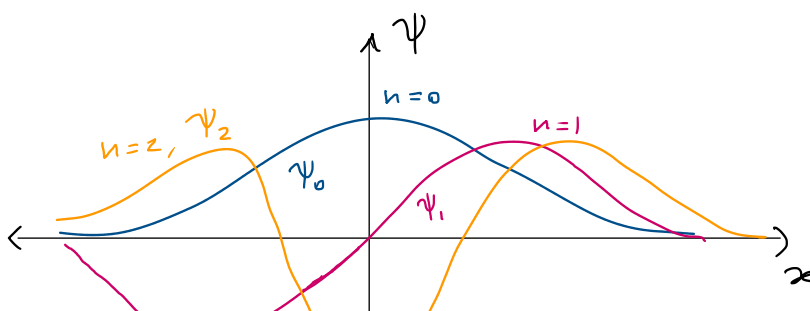
$$\Rightarrow \psi_{n+1}(x) = \frac{\frac{x}{2L} - L\frac{\partial \psi_n}{\partial x}}{\sqrt{n+1}}$$

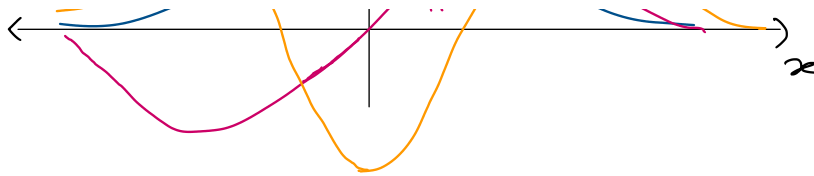
$$\psi_0(x) = \frac{1}{(2\pi L^2)^{1/4}} \exp\left(-\frac{x^2}{4L^2}\right)$$

$$\psi_1(x) = \frac{1}{(2\pi L^2)^{1/4}} \frac{x}{L} \exp\left(-\frac{x^2}{4L^2}\right)$$

$$\psi_n(x) = \frac{1}{(2\pi L^2)^{1/4}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \underbrace{H_n\left(\frac{x}{\sqrt{2}L}\right)}_{\text{Hermite polynom}} \exp\left(-\frac{x^2}{4L^2}\right)$$

Hermite  
polynom





Osäkerheten i  $x$  blir större som  $n \rightarrow \infty$ .

Vågfunktionerna växlar mellan jämn och udda.  
(Våra egenfunktioner har bestämd paritet)

Jämn  $n \Rightarrow$  jämn funktion

(Våra egenfunktioner har bestämd paritet, eftersom potentialen är en symmetrisk funktion av  $x$ , så paritetsoperatoren kommuterar med hamiltonianen, och då kan vi anta att alla egenfunktioner har bestämd paritet)

#### 4. Väntevärden

$\langle x^2 \rangle$  för det första exciteradetillsåndet,  $n = 1$

$$\langle x^2 \rangle = \langle 1 | \hat{x}^2 | 1 \rangle$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x) x^2 \psi_1(x) dx$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi L^2}} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{x}{L}\right)^2 x^2 \exp\left(-\frac{x^2}{2L^2}\right) dx$$

Integrera aldrig detta i positionsbasen, jobba smart, inte hårt.

Vi börjar igen

$$\langle x^2 \rangle = \langle 1 | \hat{x}^2 | 1 \rangle$$

$$\hat{x} = L(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$$

$$\hat{a} = \frac{\hat{x}}{2L} + \frac{iL}{\hbar} \hat{p}$$

$$\hat{a}^\dagger = \frac{\hat{x}}{2L} - \frac{iL}{\hbar} \hat{p}$$

$$\hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$$

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$$

$$\hat{x}^2 |1\rangle = L(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2 |1\rangle$$

$$= L(|0\rangle + \sqrt{2}|2\rangle)$$



$$\hat{x}^2|1\rangle = L^2 (|1\rangle + \sqrt{2}[(\sqrt{2}|1\rangle + \sqrt{3}|3\rangle)])$$

$$= L^2 [3|1\rangle + \sqrt{6}|3\rangle]$$

$$\langle 1|\hat{x}^2|1\rangle = L^2 [3 \underbrace{\langle 1|1\rangle}_{=1} + \sqrt{6} \underbrace{\langle 1|3\rangle}_{=0}] = 3L^2$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 \hat{x}^2$$

$$\tilde{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$$

$$\tilde{a} = \frac{\hat{x}}{2L} + \frac{iL}{\hbar} \hat{p}$$

$$= \hbar\omega_0(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2})$$

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$$

$$\hat{a}^\dagger = \frac{\hat{x}}{2L} - \frac{iL}{\hbar} \hat{p}$$

1.  $\hat{a}|2\rangle =$

A.  $|1\rangle$

B.  $\sqrt{2}|1\rangle$

C.  $\sqrt{2}|3\rangle$

D.  $\sqrt{3}|3\rangle$

$$\tilde{a}|2\rangle = \sqrt{2}|1\rangle$$

2.  $\hat{a}^\dagger \hat{a}|2\rangle =$

A.  $2|2\rangle$

B.  $\sqrt{2}|2\rangle$

C.  $\sqrt{2}(|1\rangle + |3\rangle)$

D.  $|3\rangle$

$$\hat{a}^\dagger \hat{a}|2\rangle = \hat{a}^\dagger \sqrt{2}|1\rangle = \sqrt{2} \sqrt{2}|2\rangle = 2|2\rangle$$

3. Vad är rörelsemängdsoperatoren i termer av stegoperatorer?

A.  $\hbar(\hat{a}^\dagger - \hat{a})/(2L)$

B.  $\hbar(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)/(2L)$

C.  $i\hbar(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)/(2L)$

D.  $i\hbar(\hat{a}^\dagger - \hat{a})/(2L)$

$$i\hbar(\hat{a}^\dagger - \hat{a})/2L =$$

$$= i\hbar \left( \frac{2ik}{\hbar} \hat{p} \right) / 2L = \hat{p}$$

4.  $\psi_n(x) = \langle x|n\rangle$  är jämn om

A.  $n$  är jämn

B.  $n$  är udda

(A)

$\psi_n(x)$  är jämn om  $n$  är jämn

För en partikel i en låda är vågfunktionen jämn om  $n$  är udda



Förra gången:

1. En harmonisk oscillator ger en uppskattning av rörelse nära jämviktspunkten, där första termen i serien är kvadratisk:

$$V(x) \approx V(x_0) + \cancel{\frac{\partial V}{\partial x} \Big|_{x=x_0} (x-x_0)} + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} \Big|_{x=x_0} (x-x_0)^2 + \frac{1}{3!} \frac{\partial^3 V}{\partial x^3} \Big|_{x=x_0} (x-x_0)^3 + \dots$$

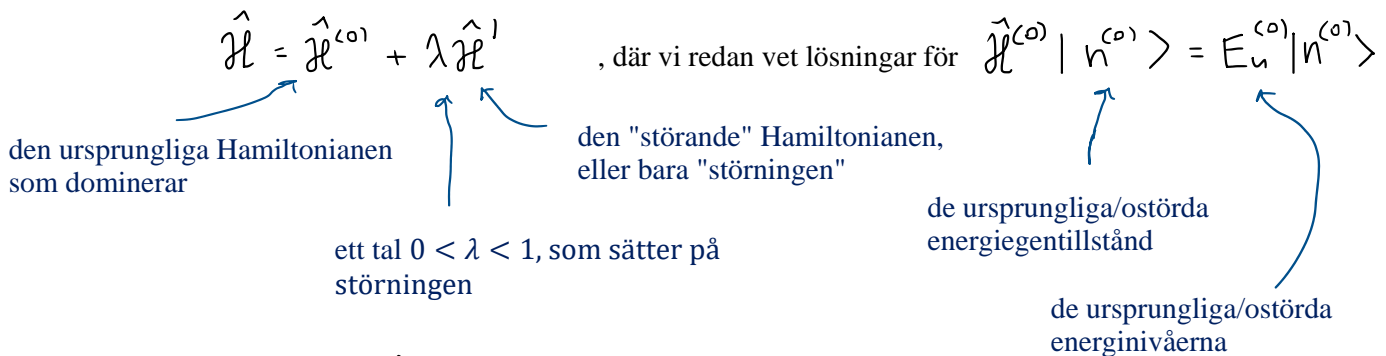
2. Hamiltonianen  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega_0^2 \hat{x}^2 = \hbar\omega_0 \left( \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right)$  där  $\hat{a}$  och  $\hat{a}^\dagger$  är  
 stegoperatorer:  $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ ,  $\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$

3. Vi hittar en steg av energinivåer  $E_n = \hbar\omega_0 \left( n + \frac{1}{2} \right)$ ,  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$

jämna  $n \leftrightarrow$  jämna vågfunktioner  $\psi_n(x) = \langle x | n \rangle$

### 1. Inledning

I "störningsteori" betraktar vi ett systems dynamik som om det bestod av två delar: en som dominerar (och är analytiskt lösbar) och en mindre, svagare del som vi ska hantera uppskattningsvis.



Vi antar de riktiga lösningarna  $\hat{H} |n\rangle = E_n |n\rangle$ , är "välartade" funktioner av  $\lambda$ .

Om jag ökar lambda väldigt lite, så ändrar jag systemet lite. alltså en liten störning i lambda blir liten störning i systemet

I vissa fall funkar det inte, och små störningar i systemet ger stora störningar i systemet

$$|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |n^{(2)}\rangle + \dots$$

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots$$

första ordningens korrigeringar

andra ordningens korrigeringar

$$\hat{H} |n\rangle = E_n |n\rangle \Rightarrow (\hat{H}^{(0)} + \lambda \hat{H}^1) (|n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |n^{(2)}\rangle + \dots) = (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots) (|n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |n^{(2)}\rangle + \dots)$$

## 2. Första ordningens korrigeringar

$$\lambda^2 : \hat{H}^{(0)} |n^{(1)}\rangle + \hat{H}' |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)} |n^{(0)}\rangle$$

$$\langle n^{(0)} | : \rightarrow$$

$$\langle n^{(0)} | \hat{H}^{(0)} |n^{(1)}\rangle + \langle n^{(0)} | \hat{H}' |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} \langle n^{(0)} | n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)}$$

$$\langle n^{(1)} | \hat{H}^{(0)} |n^{(0)}\rangle^* = E_n^{(0)} \langle n^{(1)} | n^{(0)}\rangle^* = E_n^{(0)} \langle n^{(0)} | n^{(1)}\rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | \hat{H}' |n^{(0)}\rangle}$$

$\Rightarrow$  Första ordningen korrigering till energinivån är störningens väntevärde

$$\text{eller } E_n^{(1)} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \hat{H}' \psi_n(x) dx$$

$$\lambda^2 : \hat{H}^{(0)} |n^{(1)}\rangle + \hat{H}' |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)} |n^{(0)}\rangle$$

$$\langle n^{(0)} | : \rightarrow$$

$$\langle n^{(0)} | \hat{H}^{(0)} |n^{(1)}\rangle + \langle n^{(0)} | \hat{H}' |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} \langle n^{(0)} | n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)} \delta_{nn}$$

$$\text{Anta att } |n^{(1)}\rangle = \sum_k \alpha_k |k^{(0)}\rangle \quad \text{Vi måste ha att } \langle n | n \rangle = 1 \text{ så att den är normerad}$$

anta att  $|n^{(1)}\rangle$  kan skrivas som en linjärkombination av energiegentillstånd, då de ursprungliga energiegentillstånden är tillstånd till en Hermitisk operator (hamiltonianen) och bildar därför en fullständig bas

$$\langle n | n \rangle = (\langle n^{(0)} + \lambda \langle n^{(1)} + \dots) (|n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \dots) = 1$$

$$= \underbrace{\langle n^{(0)} | n^{(0)}\rangle}_{=1} + \lambda (\langle n^{(1)} | n^{(0)}\rangle + \langle n^{(0)} | n^{(1)}\rangle + \dots) = 1$$

$$\Rightarrow \langle n^{(1)} | n^{(0)}\rangle = 0$$

ortogonal!

$\Rightarrow$  Första ordningens korrigering till tillståndet  $|n^{(1)}\rangle$  är ortogonal med  $|n^{(0)}\rangle$ .

$$\Rightarrow |u^{(1)}\rangle = \sum_{k \neq n} \alpha_k |k^{(0)}\rangle \quad (\because \langle u^{(0)} | u^{(1)} \rangle = \sum_{k \neq n} \alpha_k \delta_{nk} = 0)$$

$$\langle u^{(0)} | \hat{H}^{(0)} | u^{(1)} \rangle + \langle u^{(0)} | \hat{H}' | u^{(0)} \rangle = E_n^{(0)} \langle u^{(0)} | u^{(1)} \rangle + E_n^{(1)} \delta_{nn}$$

$$\sum_{k \neq n} E_k^{(0)} \alpha_k \langle u^{(0)} | k^{(0)} \rangle + \langle u^{(0)} | \hat{H}' | u^{(0)} \rangle = \sum_{k \neq n} E_n^{(0)} \alpha_k \langle u^{(0)} | k^{(0)} \rangle + E_n^{(1)} \delta_{nn}$$

Substituera (1)  $E_n^{(0)} \alpha_m + \langle u^{(0)} | \hat{H}' | u^{(0)} \rangle = E_n^{(0)} \alpha_m + E_n^{(1)} \delta_{mn}$  ( $m \neq n$ )

$$\alpha_m = \frac{\langle u^{(0)} | \hat{H}' | u^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

$$|u^{(1)}\rangle = \sum_{k \neq n} \alpha_k |k^{(0)}\rangle, \quad \alpha_k = \frac{\langle k^{(0)} | \hat{H}' | u^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

De största bidragen till första ordningens korrigering till tillståndet kommer från energiegentillstånd som ligger närmast i termer av energi.

### 3. Andra ordningens korrigeringar

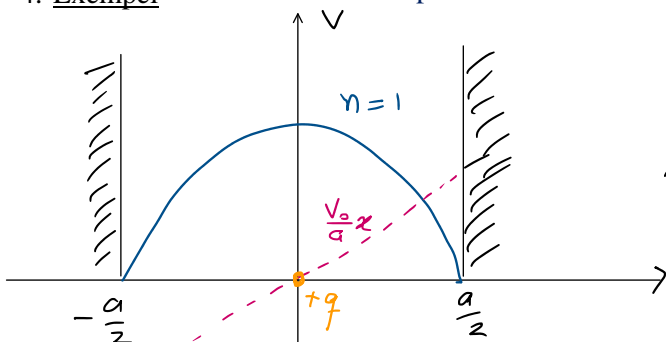
$$E_n^{(2)} = \langle u^{(0)} | \hat{H}'' | u^{(1)} \rangle$$

som härleds precis på samma sätt som första ordningen

Högre ordningens termer beror generellt på lägre ordningens korrigeringar.

### 4. Exempel

partikel i en låda



$$E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mg^2}, \quad n=1,2,3,\dots$$

$$\psi_n^{(0)}(x) = \sqrt{2/a} \begin{cases} \cos \frac{n\pi x}{a}, & n \text{ udda} \\ \sin \frac{n\pi x}{a}, & n \text{ jämnt} \end{cases}$$

$$\hat{H}' = \frac{V_0 x}{a} = \frac{V_0 x}{a} \text{ i positionsbasen}$$

Vi stör partikeln med en linjär potential

Vad är första ordningens korrigeringar till grundtillståndet ( $n=1$ )?

$$E_n^{(1)} = \langle 1 | \hat{H}' | 1 \rangle = \frac{2}{a} \int_0^{a/2} \cos \frac{\pi x}{a} \frac{V_0 x}{a} \cos \frac{\pi x}{a} dx = 0$$

vad är första ordningens korrigering till grundtillståndet (n=1)?

$$E_1^{(1)} = \langle 1 | \hat{H} | 1 \rangle = \frac{2}{a} \int_{-a/2}^{a/2} \cos \frac{\pi x}{a} \frac{V_0 x}{a} \cos \frac{\pi x}{a} dx = 0$$

↑  
udda

Det är noll eftersom sannolikhetstätheten är symmetrisk och störningen är antisymmetrisk.

Förra gången:

1. Vi använder störningsteori för att lösa Schrödingers ekvationerna uppskattningsvis. Det betraktar Hamiltonianen som den består av en dominerande del  $\hat{H}^{(0)}$  och en svag "störning"  $\hat{H}'$ .

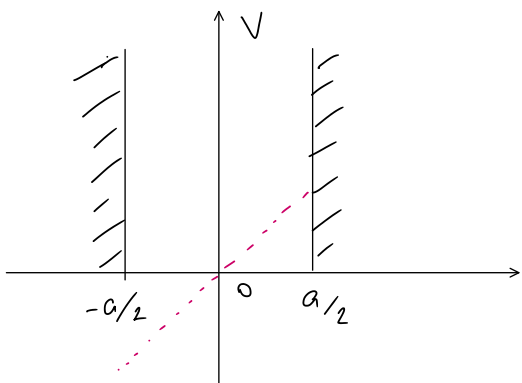
2. Första ordningens korrigering till energinivån är  $E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | \hat{H}' | n^{(0)} \rangle$

3. Första ordningens korrigering till tillståndet är  $|n^{(1)}\rangle = \sum_{k \neq n} \alpha_k |k^{(0)}\rangle$ ,  $\alpha_k = \frac{\langle k^{(0)} | \hat{H}' | n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$

4. Andra ordningens korrigering till energinivån är  $E_n^{(2)} = \langle n^{(0)} | \hat{H}' | n^{(1)} \rangle$

1. Exempel forts.

En partikeln i en låda blir störd av en svag, linjär potential  $\frac{V_0 x}{a}$ . Vad är första ordningens korrigeringar till grundtillståndets energi och grundtillståndet själv.



$$E_1^{(1)} = \frac{2}{a} \int_{-a/2}^{a/2} \cos \frac{\pi x}{a} \frac{V_0 x}{a} \cos \frac{\pi x}{a} dx = 0$$

$$|1^{(1)}\rangle = \sum_{k \neq 1} \alpha_k |k\rangle, \quad \alpha_k = \frac{\langle k | \hat{H}' | 1 \rangle}{E_1 - E_k}$$

$$E_1 - E_k = \frac{\hbar^2 \pi^2 1^2}{2ma^2} - \frac{\hbar^2 \pi^2 k^2}{2ma^2} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (1 - k^2)$$

$$\langle k | \hat{H}' | 1 \rangle = \frac{2}{a} \int_{-a/2}^{a/2} \begin{cases} \cos \frac{k\pi x}{a}, & k = 3, 5, \dots \\ \sin \frac{k\pi x}{a}, & k = 2, 4, \dots \end{cases} \frac{V_0 x}{a} \cos \frac{\pi x}{a} dx$$

Om k är udda, försvinner matriselementen.

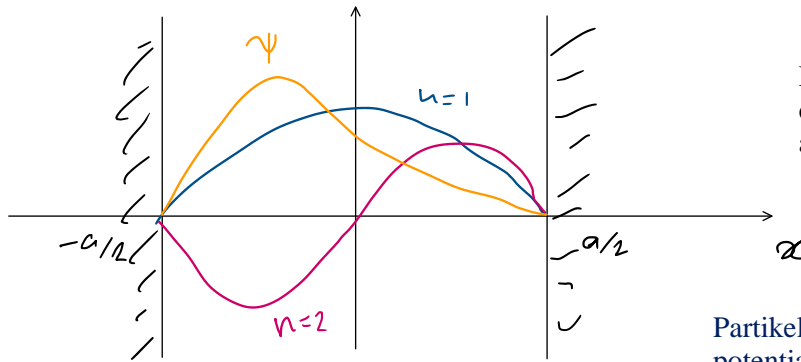
Om k är jämn ... är mitt förslag: uttryck sin/cos i komplex form och expandera => det ger fyra termer  $\sim x \exp(i\beta x)$ , partiell integration, substituera för B

$$= \frac{16V_0}{9 - \pi^2} \quad (k=2), \quad - \frac{32V_0}{225\pi^2} \quad (k=4) \quad \begin{aligned} |1^{(1)}\rangle &= \sum_{k \neq 1} \alpha_k |k\rangle \\ |1\rangle &= |1\rangle + |1^{(1)}\rangle \end{aligned}$$

Den hela vågfunktionen (som beskriver det störda grundtillståndet) (som vi skriver med stora psi):

$$\alpha_k = \frac{\langle k^{(0)} | \hat{H}' | n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

$$\Psi(x) = \psi_1(x) - \frac{32}{27} \frac{m a^2 V_0}{\hbar^2 \pi^2} \psi_2(x) + \frac{64}{3375} \frac{m a^2 V_0}{\hbar^2 \pi^2} \psi_4(x) + \dots$$



Den störda grundnivån lutar sig åt vänster, där potentialenergin är lägre. (Men inte helt åt vänster p.g.a. osäkerhetsprincipen)

(negativ  $\psi_2$ , så den adderas till vänster)

Partikeln försöker hitta balansen att minska potentialenergin (som den gör genom att sitta på vänstersidan) och att minska sin rörelseenergi (som den gör genom att sprida ut sig). Minska osäkerheten i x, öka osäkerheten i p

## 2. Degenererad störningsteori

$$|n^{(1)}\rangle = \sum_{k \neq n} \frac{\langle k | \hat{H}' | n \rangle}{E_n - E_k} |k\rangle$$

Korrigerig till tillståndet beror på ett matriselement och en energiskillnad

Vad händer om det finns två energiegentillstånd som ockuperar samma energinivå? (Dvs vi har två egentillsånd som har samma egenvärde)

I fallen av en partikel i en låda och en harmonisk oscillator var energinivåerna unika Dvs till varje energinivå finns det ett motsvarande egentillstånd/vågfunktion

Men i fallet av en fri partikel har vi båda  $|p\rangle$  och  $|-p\rangle$ , eftersom det inte finns någon potential för fria partiklar så är  $E = \frac{p^2}{2m}$

Så både vänstergående och högergående, med samma rörelsemängd, har samma energi

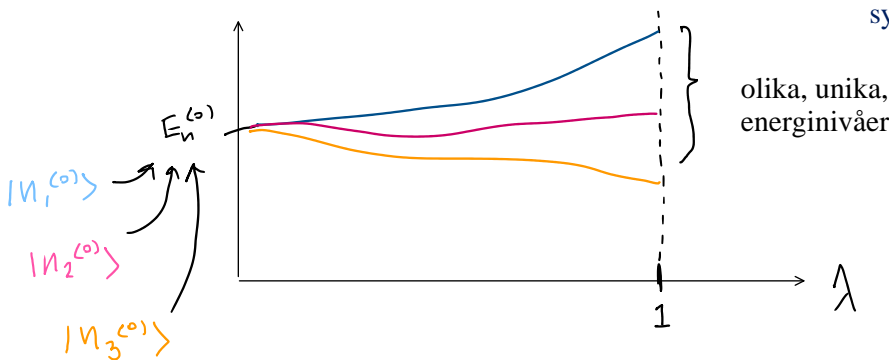
Orsaken är att det finns en symmetri i problemet

Detta kallas för degenerering, och antalet tillstånd som delar samma energi kallas för degenerationsgrad

"Degeneration" (att det finns fler än ett tillstånd till ett egenvärde) har ett ursprung ifrån symmetrier

(Degenerationsgrad = antalet tillstånd som har samma egenvärde)

Om systemets degenerering orsakas av en symmetri, antar jag att när jag sätter på störningen, så bryter vi symmetrin, och lyfter degenerationen



Infinitesimalt efter  $\lambda = 0$ , måste tillståndet fatta ett beslut om vilket håll de ska åt, en plötslig förändring. Detta innebär att det inte finns en väldefinierad derivata, och det är därför nämnaren blir noll i uttrycket för  $\alpha_k$ .

Anta att störningen bryter symmetrin och lyfter degenerationen. De degenerade tillstånden måste hoppa omedelbart till någon linjär kombination av energiegentillstånd



$$|\psi\rangle = \sum_{k=1}^N \beta_k |k^{(0)}\rangle$$

bara de  $|k_0\rangle$  som delar en energinivå

Systemet omorganiserar sig själv så att vi har N välartade funktioner av lambda, där N är degenerationsgraden.

Detta är inte en linjärkombination av alla egentillstånd, utan bara de som delar en energinivå.

$$(\hat{H}^{(0)} + \lambda \hat{H}^{(1)}) |\psi\rangle = (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \dots) |\psi\rangle$$

alla  $k^{(0)}$  är samma, så  $\hat{H}$  plockar ut samma egenvärden för dem.

$\langle n^{(0)}| \rightarrow$  (och ta bara första ordningen  $\lambda$ )

$$\sum_{k=1}^N \underbrace{\langle n^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | k^{(0)} \rangle}_{\text{matris } W_{nk}} \underbrace{\beta_k}_{\text{vektor}} = E_n^{(1)} \beta_n$$

första ordningens korrigering till energin

Metod: Betrakta degenerade energinivåer separat.

Hitta linjära kombinationer av energiegentillstånd som diagonaliserar störningen.

Första ordningens korrigeringar är egenvärden av störningens matris.

### 3. Kvantfysik i 3D

Vi har tre positionsoperatorer,  $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ , samt tre rörelsemängdsoperatorer,  $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ . Alla 6 är Hermitiska:

$$[\hat{x}_j, \hat{x}_k] = 0 \quad [\hat{p}_j, \hat{p}_k] = 0$$

Men:

$$[\hat{x}_j, \hat{p}_k] = i\hbar \delta_{jk}$$

=> Positions- och rörelsemängdsoperatorer längd med samma axel kommuterar inte med varandra

Det går att uttrycka ett allmänt tillstånd som en superposition/linjärkombination av t.ex. positionsegentillstånd:

$$|\psi\rangle = \iiint \psi(\vec{r}) |\vec{r}\rangle d^3\vec{r}$$

eller

tillstånd där partikeln har en bestämd position  $\vec{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$

$$|\psi\rangle = \iiint \tilde{\psi}(\vec{p}) |\vec{p}\rangle d^3\vec{p}$$

tillstånd där partikeln har en bestämd rörelsemängd  $\vec{p} = \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix}$

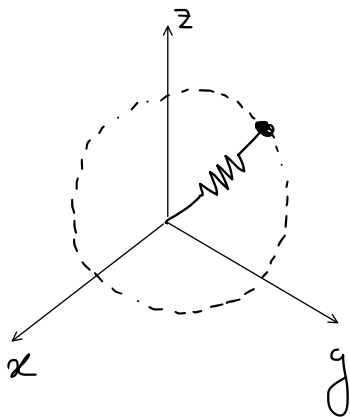
$$\langle \vec{r}, \vec{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left(\frac{i\vec{p}\cdot\vec{r}}{\hbar}\right) = \text{vågfunktion (i 3D) av en partikel med bestämd rörelsemängd, som är sannolikhetstäthet för dess position}$$

I positionsbasen  $\hat{x}\psi(\vec{r}) = x\psi(\vec{r})$ ,  $\hat{y}\psi(\vec{r}) = y\psi(\vec{r})$ ,  $\hat{z}\psi(\vec{r}) = z\psi(\vec{r})$

$$\hat{p}_x\psi(\vec{r}) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi(\vec{r}), \hat{p}_y\psi(\vec{r}) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\psi(\vec{r}), \hat{p}_z\psi(\vec{r}) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}\psi(\vec{r})$$

$$\hat{\vec{r}}\psi(\vec{r}) = \vec{r}\psi(\vec{r}), \hat{\vec{p}}\psi(\vec{r}) = -i\hbar\nabla\psi(\vec{r})$$

#### 4. En tredimensionell harmonisk oscillator



partikel fri att röra sig i alla tre dimensioner, anta att problemet är sfärsikt symmetrisk

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2|\hat{\vec{r}}|^2 \\ &= \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + \frac{1}{2}m\omega_0^2(\hat{x}^2 + \hat{y}^2 + \hat{z}^2) \\ &= \hat{\mathcal{H}}_x + \hat{\mathcal{H}}_y + \hat{\mathcal{H}}_z \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \hat{\mathcal{H}}_x = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2\hat{x}^2, \text{ osv}$$

$$[\hat{\mathcal{H}}_x, \hat{\mathcal{H}}_y] = 0 = [\hat{\mathcal{H}}_y, \hat{\mathcal{H}}_z] = [\hat{\mathcal{H}}_x, \hat{\mathcal{H}}_z] = [\hat{\mathcal{H}}_x, \hat{\mathcal{H}}]$$

Eftersom alla fyra operatörer kommuterar går det att hitta energiegentillstånd till alla fyra samtidigt

Det går att hitta egentillstånd  $|E\rangle$  som uppfyller

$$\hat{\mathcal{H}}_x|E\rangle = \lambda_x|E\rangle, \hat{\mathcal{H}}_y|E\rangle = \lambda_y|E\rangle, \hat{\mathcal{H}}_z|E\rangle = \lambda_z|E\rangle, \hat{\mathcal{H}}|E\rangle = E|E\rangle$$

$$\hat{\mathcal{H}}_x|E\rangle = \hbar\omega_0(n_x + \frac{1}{2})|E\rangle$$

$$\hat{H}_y |E\rangle = \hbar\omega_0 (n_y + \frac{1}{2}) |E\rangle$$

$$\hat{H}_z |E\rangle = \hbar\omega_0 (n_z + \frac{1}{2}) |E\rangle$$

$$\Rightarrow \hat{H} |E\rangle = \hbar\omega_0 (n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}) |E\rangle$$

Det krävs tre kvanttal  $n_x, n_y, n_z$  för att beskriva tillståndet.

lägsta energitillståndet är  $\frac{3}{2}\hbar\omega_0$  då alla  $n=0$

energi	tillstånd	degenerationsgrad
$\frac{3}{2}\hbar\omega_0$	$ 0,0,0\rangle$	1
$\frac{5}{2}\hbar\omega_0$	$ 1,0,0\rangle$	3
	$ 0,1,0\rangle$	
	$ 0,0,1\rangle$	
$\frac{7}{2}\hbar\omega_0$	$ 2,0,0\rangle$	6
	$ 1,1,0\rangle$	
	$ 0,2,0\rangle$	
	$ 0,1,1\rangle$	
$\frac{9}{2}\hbar\omega_0$	$ 3,0,0\rangle$	10
	$ 2,1,0\rangle$	
	...	

Vi har två stegoperatorer i varje dimension.

$$\hat{a}^\dagger |n_x, n_y, n_z\rangle = \sqrt{n_x+1} |n_x+1, n_y, n_z\rangle$$

$$\hat{a}_x |0,0,0\rangle = 0$$

$$\Psi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) = \Psi_{n_x}(x) \Psi_{n_y}(y) \Psi_{n_z}(z)$$

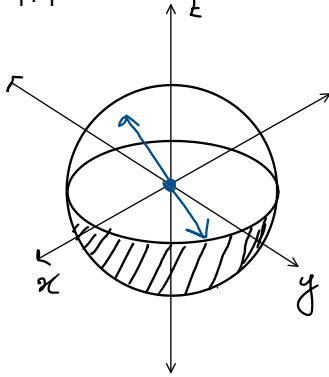
$$E = \frac{3}{2}\hbar\omega_0$$

en energieigenfunktion av 1D harmonisk oacillator

$$E = \frac{3}{2} \hbar \omega_0$$

$$\psi \sim \exp\left(-\frac{r^2}{4L^2}\right)$$

ytan där  $|\psi|^2$  är konstant:



Partikeln oscillerar fram och tillbaka på en okänd riktning, och den är sfäriskt symmetrisk eftersom jag inte har någon aning vilket håll partikeln oscillerar.

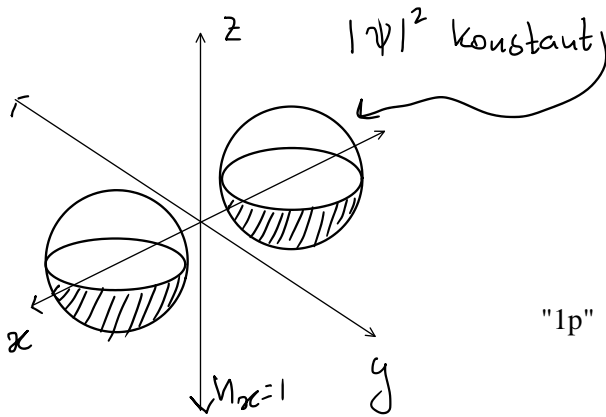
Denna vågfunktion kallas för "OS"

( en energieigenfunktion av 1D harmonisk oscillator

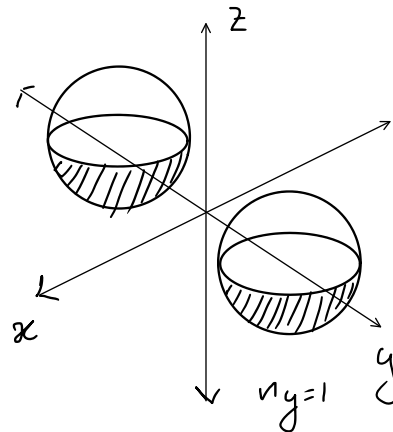
grundtillståndet har en sfäriskt symmetrisk vågfunktion

grundtillståndets egenfunktion är gaussisk

$$E = \frac{5}{2} \hbar \omega_0 \quad \psi \sim x \exp\left(-\frac{r^2}{4L^2}\right)$$



"1p"



$$[\hat{x}, \hat{p}_y] = 0$$

$$[\hat{p}_y, \hat{y}] = -[\hat{y}, \hat{p}_y] = -i\hbar$$

$$[\psi(\vec{r})] = [L^{-3/2}]$$

$$|\psi\rangle = \iiint \psi(\vec{r}) |\vec{r}\rangle d^3\vec{r}$$

$$\iiint \underbrace{|\psi\rangle^2}_{[L^{-3}]} d^3\vec{r} = 1$$

$$\hookrightarrow [|\psi\rangle] = [L^{-3/2}]$$

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2) + \frac{1}{2} m \omega_0^2 (\hat{x}^2 + \hat{y}^2), \quad E_0 = \hbar \omega_0$$

Hur många tillstånd har energin  $= 2\hbar\omega_0 \Rightarrow N = 2$

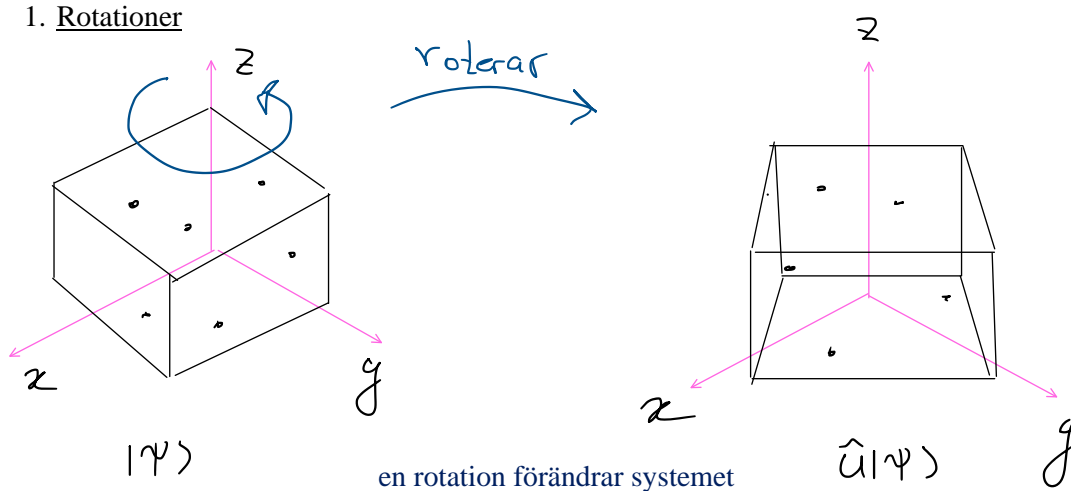
$$V = \frac{1}{2} m\omega_0 (\hat{x}^2 + \hat{y}^2 + 4\hat{z}^2), \quad E_0 = 2\hbar\omega_0$$

$$E = (n_x + \frac{1}{2})\hbar\omega_0 + \\ (n_y + \frac{1}{2})\hbar\omega_0 + \\ (n_z + \frac{1}{2})\hbar(2\omega_0)$$

Förra gången:

1. En degenererad egenivå måste betraktas separat inom störningsteori. Vi antar att störningen bryter symmetrin som orsakar degenerationen så att de  $N$  degenererade tillstånd blandas ihop:  $|\psi\rangle = \sum_{k=1}^N \beta_k |k^{(0)}\rangle$   
 Första ordningens korrigeringar bestäms av:  $\sum_{k=1}^N \langle k^{(0)} | \hat{H}' | k^{(0)} \rangle \beta_k = E^{(1)} \beta_n$
2. I 3D har vi tre positioner och tre rörelsemängdsoperatörer:  $[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0$ ,  $[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0$   
 fast  $[\hat{x}_j, \hat{p}_k] = i\hbar \delta_{jk}$
3. En tredimensionell harmonisk oscillator har energinivåerna  $E_N = (N + \frac{3}{2}) \hbar \omega_0$ ,  $N = 0, 1, 2, \dots$   
 Degenerationsgraden,  $\frac{1}{2}(N+1)(N+2)$ , är stor pga potentialens sfäriska symmetri.

1. Rotationer



rotationsoperator

$\hat{u}(\theta \vec{n})$  är en rotationsoperator. Den ger hur tillståndet förändras när systemet blir roterat genom en vinkel  $\theta$  omkring en axel  $\vec{n}$ .

$\hat{u}$ :s egenskaper:

1.  $\hat{u}(0) = \hat{1}$ , identitetsoperatören
2.  $\hat{u}(\theta_2 \vec{n}) \hat{u}(\theta_1 \vec{n}) = \hat{u}((\theta_1 + \theta_2) \vec{n})$
3. En rotations bevarar den totala sannolikheten =>  $\hat{u}$  får inte ändra tillståndets norm.

$$\langle \psi | \hat{u}^\dagger \hat{u} | \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle = 1$$

$$\Rightarrow \hat{u}^\dagger(\theta \vec{n}) \hat{u}(\theta \vec{n}) = \hat{1}$$

sådana operatorer kallas för "unitära" (dvs operatorer som har som invers sitt egen adjunkt kallas för unitär)

Jag påstår att  $\hat{u}(\delta\theta\vec{n}) = \hat{1} - \frac{i\delta\theta}{\hbar} \vec{n} \cdot \hat{\mathbf{J}}$  ( $\delta$  är en infinitesimal mängd)

$\hat{n} \cdot \hat{\mathbf{J}} = n_x \hat{J}_x + n_y \hat{J}_y + n_z \hat{J}_z$

dar  $\hat{\mathbf{J}}$  är någon vektoroperator

Uppfyller den här lösningssatsen  $\hat{u}$ :s egenskaper?

1.  $\hat{u}(\delta\theta=0) = \hat{1} \quad \checkmark$

2.  $\hat{u}(\delta\theta_2\vec{n}) \hat{u}(\delta\theta_1\vec{n}) = (\hat{1} - \frac{i\delta\theta_2}{\hbar} \vec{n} \cdot \hat{\mathbf{J}} \dots) (\hat{1} - \frac{i\delta\theta_1}{\hbar} \vec{n} \cdot \hat{\mathbf{J}}) =$   
 $= \hat{1} - \frac{i(\delta\theta_2 + \delta\theta_1)}{\hbar} \vec{n} \cdot \hat{\mathbf{J}} + \dots \quad \checkmark$

3.  $\hat{u}^\dagger(\delta\theta\vec{n}) \hat{u}(\delta\theta\vec{n}) = (\hat{1} + \frac{i\delta\theta}{\hbar} \vec{n} \cdot \hat{\mathbf{J}}^\dagger + \dots) (\hat{1} - \frac{i\delta\theta}{\hbar} \vec{n} \cdot \hat{\mathbf{J}} \dots) = \hat{1}$   
 $= \hat{1} + \frac{i\delta\theta}{\hbar} \vec{n} \cdot (\hat{\mathbf{J}}^\dagger - \hat{\mathbf{J}}) + \dots$   
 $\Rightarrow \hat{\mathbf{J}}$  är Hermitisk!

$\hat{\mathbf{J}}$  motsvarar "systemets totala rörelsemängdsmoment".  
 (Den genererar rotationer.)

Om  $\theta$  inte är liten blir  $\hat{u}(\theta\vec{n}) = \exp\left(-\frac{i\theta}{\hbar} \vec{n} \cdot \hat{\mathbf{J}}\right)$

## 2. Rörelsemängdsmomentets kommuteringsförhållanden

Säg att jag har en Hermitisk operator som motsvarar en fysikalisk mängd som transformerar som en skalär, t.ex  $E$ ,  $p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$  (längder av vektoroperatorer),  $\hat{r} = \sqrt{\hat{x}^2 + \hat{y}^2 + \hat{z}^2}$  (skalär betyder att det inte ändras av en rotation)

Antag  $\hat{Q}$  en skaläroperator

Innan rotation  $\langle Q \rangle = \langle \psi | \hat{Q} | \psi \rangle$   
 Efter rotation  $\langle Q \rangle = \langle \psi' | \hat{Q} | \psi' \rangle$

$\hat{u}^\dagger \hat{Q} \hat{u} = \hat{Q} \Rightarrow [\hat{\mathbf{J}}, \hat{Q}] = 0$

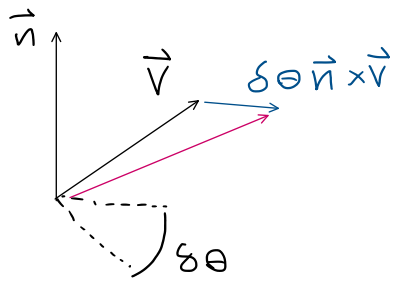
det totala rörelsemängdsmomentet kommuterar med ALLA skaläroperatorer

$\hat{\mathbf{J}}$  kommuterar med alla skaläroperatorer.

$[\hat{\mathbf{J}}, \hat{p}^2] = [\hat{\mathbf{J}}, |\hat{\mathbf{p}}|^2] = 0$   
 $[\hat{\mathbf{J}}, \hat{r}^2] = [\hat{\mathbf{J}}, \hat{x}^2 + \hat{y}^2 + \hat{z}^2] = 0$

$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2m} |\hat{\mathbf{p}}|^2 + \frac{1}{2} m \omega_0^2 \hat{r}^2 \Rightarrow [\hat{\mathcal{H}}, \hat{\mathbf{J}}] = 0$

Vad händer med vektoroperatorer?



Innan rotation:  $\langle \vec{V} \rangle = \langle \psi | \hat{V} | \psi \rangle$

Efter rotation:  $\langle \vec{V} \rangle + \delta\theta \vec{n} \times \langle \vec{V} \rangle = \langle \psi | \hat{U}^\dagger \hat{V} \hat{U} | \psi \rangle$

Väntevärde av vektor:  $\langle \vec{V} \rangle = \begin{pmatrix} \langle \psi | \hat{V}_x | \psi \rangle \\ \langle \psi | \hat{V}_y | \psi \rangle \\ \langle \psi | \hat{V}_z | \psi \rangle \end{pmatrix}$

$$\langle \vec{V} \rangle + \delta\theta \vec{n} \times \langle \vec{V} \rangle = \langle \psi | \hat{U}^\dagger \hat{V} \hat{U} | \psi \rangle$$

$$= \langle \psi | \left( \hat{1} + \frac{i}{\hbar} \delta\theta \vec{n} \cdot \hat{\mathbf{J}} \right) \hat{V} \left( \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \delta\theta \vec{n} \cdot \hat{\mathbf{J}} \right) | \psi \rangle$$

$$= \langle \psi | \left( \hat{V} + \frac{i}{\hbar} \delta\theta [\vec{n} \cdot \hat{\mathbf{J}}, \hat{V}] + \dots \right) | \psi \rangle$$

~~$$\langle \vec{V} \rangle + \delta\theta \vec{n} \times \langle \vec{V} \rangle = \langle \vec{V} \rangle + \frac{i}{\hbar} \delta\theta \langle \psi | [\vec{n} \cdot \hat{\mathbf{J}}, \hat{V}] | \psi \rangle$$~~

~~$$\delta\theta \epsilon_{2jk} n_j \hat{V}_k = \frac{i}{\hbar} \delta\theta [n_j \hat{J}_j, \hat{V}_i]$$~~

$$\boxed{[\hat{J}_i, \hat{V}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} V_k}$$

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} +1 & \begin{matrix} 1,2,3 \\ 3,1,2 \\ 2,3,1 \end{matrix} \\ -1 & \begin{matrix} 2,1,3 \\ 1,3,2 \\ 3,2,1 \end{matrix} \\ 0 & \text{annars} \end{cases}$$

$$[\hat{J}_x, \hat{z}] = i\hbar \epsilon_{132} \hat{y} = -i\hbar \hat{y}$$

$\hat{\mathbf{J}}$  kommuterar inte med vektoroperatorer:

$$\boxed{\begin{aligned} [\hat{J}_i, \hat{J}^2] &= 0 \\ [\hat{J}_i, \hat{J}_j] &= i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{J}_k \end{aligned}}$$

=> Det bästa vi får nöja oss med är att veta  $\hat{J}^2$  och en komponent  $\hat{J}_i$



Det innebär att det bästa vi kan göra inom kvantfysik är att veta **beloppet** och **en komponent** av rörelsemängdsmomentet samtidigt. Fysikaliskt kommer det ifrån faktumet att rotationer omkring olika axlar inte kommuterar.

Rörelsemängdskommuteringsförhållanden är

$$[\hat{J}_i, \hat{J}^2] = 0$$

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{J}_k$$

Det är omöjligt att veta två komponenter av  $\hat{J}$  exakt och samtidigt: det bästa vi kan göra är att veta beloppet  $\hat{J}^2$  och en komponent.

Varför?

Rörelsemängdoperatorer längs med olika axlar kommuterar inte med varandra eftersom rotationer längs med olika axlar inte kommuterar med varandra

### 3. Egenvärden

De tillåtna värdena av en mätning av  $\hat{J}$  är  $\hat{J}$ 's egenvärden.

Vi ska välja egentillstånd som är egentillstånd till både  $\hat{J}^2$  och  $\hat{J}_z$



$$\hat{J}^2 |\lambda, \mu\rangle = \lambda |\lambda, \mu\rangle$$

$$\hat{J}_z |\lambda, \mu\rangle = \mu |\lambda, \mu\rangle$$

Strategi:

1. Inför  $\hat{J}_{\pm} = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y$  ( $\hat{J}_{\pm}^{\dagger} = \hat{J}_{\mp}$  inte Hermitiska)

2. Visa att  $\hat{J}_{\pm}$  är stegoperatorer som skapar andra  $|\lambda', \mu'\rangle$

3. Bestäm var stegen börjar och slutar.

Randvillkoren ska ge att rörelsemängdsmoment är kvantiserat.

$$[\hat{J}_{\pm}, \hat{J}^2] = [\hat{J}_x, \hat{J}^2] \pm i[\hat{J}_y, \hat{J}^2] = 0$$

$$L_{J_z} \psi = L_{J_x} \psi - L_{J_y} \psi$$

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

$$\underbrace{[\hat{J}_x, \hat{J}_z]}_{-i\hbar \hat{J}_y} \pm i \underbrace{[\hat{J}_y, \hat{J}_z]}_{+\hbar \hat{J}_x} = \mp \hbar \hat{J}_\pm$$

$$\Rightarrow \hat{J}_z |\lambda, \mu\rangle = \mu |\lambda, \mu\rangle$$

$$\hat{J}_\pm \rightarrow$$

$$\hat{J}_\pm \hat{J}_z |\lambda, \mu\rangle = \mu \hat{J}_\pm |\lambda, \mu\rangle$$

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

$$\hat{J}_z \hat{J}_\pm - \hat{J}_\pm \hat{J}_z = \pm \hbar \hat{J}_\pm$$

$$\Rightarrow \hat{J}_\pm \hat{J}_z = \hat{J}_z \hat{J}_\pm - \pm \hbar \hat{J}_\pm$$

$$\Rightarrow \hat{J}_z (\hat{J}_\pm |\lambda, \mu\rangle) = (\mu \pm \hbar) \hat{J}_\pm |\lambda, \mu\rangle$$

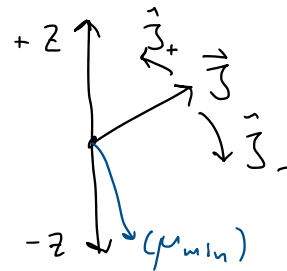
$$\text{Vi har visat } \Rightarrow \hat{J}_\pm |\lambda, \mu\rangle = \alpha_\pm |\lambda, \mu \pm \hbar\rangle$$

$\hat{J}_\pm$  skapar rörelsemomentsegen tillstånd med  $\pm \hbar \hat{J}_z$  (RMM omkring z-axeln)

Om vi börjar med en viss  $\mu$  och fortsätter tillämpa  $\hat{J}_+$  så blir beloppet bevarat och vi ökar hur mycket  $\hat{J}_z$  vi har

eller att  $\hat{J}_+$  tar rörelsemängdsmoment från  $\hat{J}_x$  och  $\hat{J}_y$  och ger det till  $\hat{J}_z$

Om vi fortsätter tillämpa  $\hat{J}_+$  måste vi nå en punkt där det finns inget mer rörelsemängdsmoment som kan tas ifrån  $\hat{J}_x$  och  $\hat{J}_y$



$$\hat{J}_+ |\lambda, \mu_{\max}\rangle = 0 \quad \langle \lambda, \mu_{\min} | \hat{J}_- \hat{J}_+ |\lambda, \mu_{\max}\rangle = 0$$

$$\hat{J}_- |\lambda, \mu_{\min}\rangle = 0 \quad \langle \lambda, \mu_{\min} | \hat{J}_+ \hat{J}_- |\lambda, \mu_{\max}\rangle = 0$$

$$\hat{J}_- \hat{J}_+ = (\hat{J}_x - i\hat{J}_y)(\hat{J}_x + i\hat{J}_y) =$$

$$= \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + i[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar \hat{J}_z$$

$$= \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + 2[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar \hat{J}_z$$

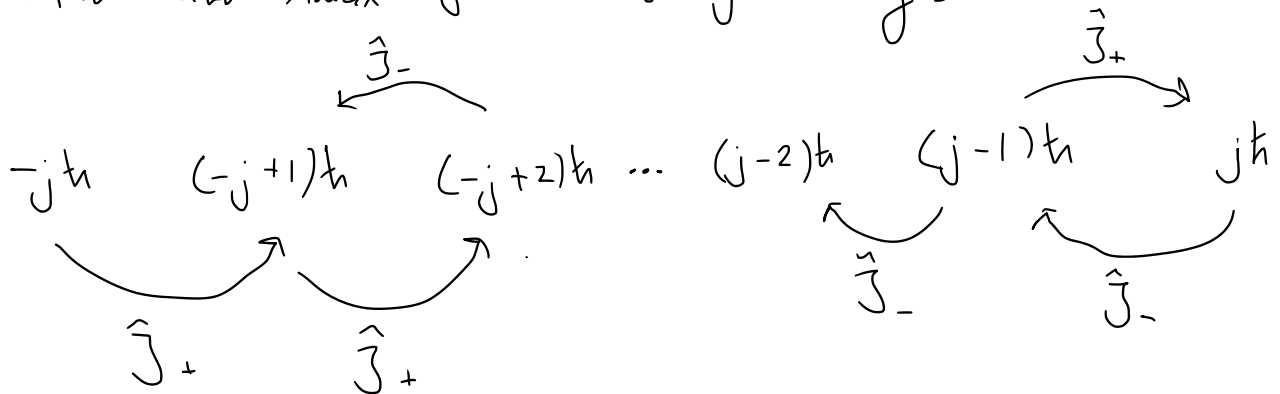
$$\langle \lambda, \mu_{\max} | \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar \hat{J}_z | \lambda, \mu_{\max} \rangle = \lambda - \mu_{\max}^2 - \hbar \mu_{\max} = 0$$

$\lambda$  egenvärde av  $\hat{J}$ ,  $\mu$  av  $\hat{J}_z$

pss.  $\lambda - \mu_{\min}^2 - \hbar \mu_{\min} = 0$

$$\left. \begin{aligned} \lambda - \mu_{\max}^2 - \hbar \mu_{\max} &= 0 \\ \lambda - \mu_{\min}^2 - \hbar \mu_{\min} &= 0 \end{aligned} \right\} \begin{aligned} \mu_{\max} &= -\mu_{\min} \\ \lambda &= \mu_{\max}(\mu_{\max} + \hbar) \end{aligned}$$

Anta att  $\lambda_{\max} = j\hbar$  där  $j$  är något tal.



Avståndet =  $2j\hbar = N\hbar$ , där  $N$  är ett heltal

$\Rightarrow j$  är ett heltal eller ett halvtal

$$j = \frac{N}{2}$$

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}, \dots$$

$$\Rightarrow \lambda = j(j+1)\hbar^2 \quad [\lambda = \mu_{\max}(\mu_{\max} + \hbar)]$$

$$\hat{J}^2 |j, m_j\rangle = j(j+1)\hbar^2 |j, m_j\rangle, \quad j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$$

$$\hat{J}_z |j, m_j\rangle = m_j \hbar |j, m_j\rangle, \quad -j \leq m \leq +j \quad ; \text{ helbarga step}$$

$j$	$m_j$	antallet
0	0	1
$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	2 ← (spinn -1/2 partiklar)
1	-1, 0, 1	3

Förra gången:

1. När ett kvantsystem med tillståndet  $|\psi\rangle$  blir roterad genom en vinkel  $\theta$  omkring en axel  $\vec{n}$  blir tillståndet  $\hat{u}(\theta\vec{n})|\psi\rangle$ , där rotationsoperatoren  $\hat{u}(\theta\vec{n}) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\theta\vec{n} \cdot \hat{\vec{J}}\right]$ , och  $\hat{\vec{J}}$  är systemets totala rörelsemängdsmoment.
2. För kommuteringsförhållanden har  $\hat{\vec{J}}$ :  $[\hat{J}_i, \hat{J}^2] = 0$  och  $[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{J}_k \Rightarrow$  vi får veta beloppet och en komponent (vanligtvis  $\hat{J}_z$ ) exakt och samtidigt.
3. Ett system med bestämda  $\hat{J}^2$  och  $\hat{J}_z$  är beskrivet av egentillståndet  $|j, m_j\rangle$ , där  $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$  och  $-j \leq m_j \leq j$  i heltaliga steg.

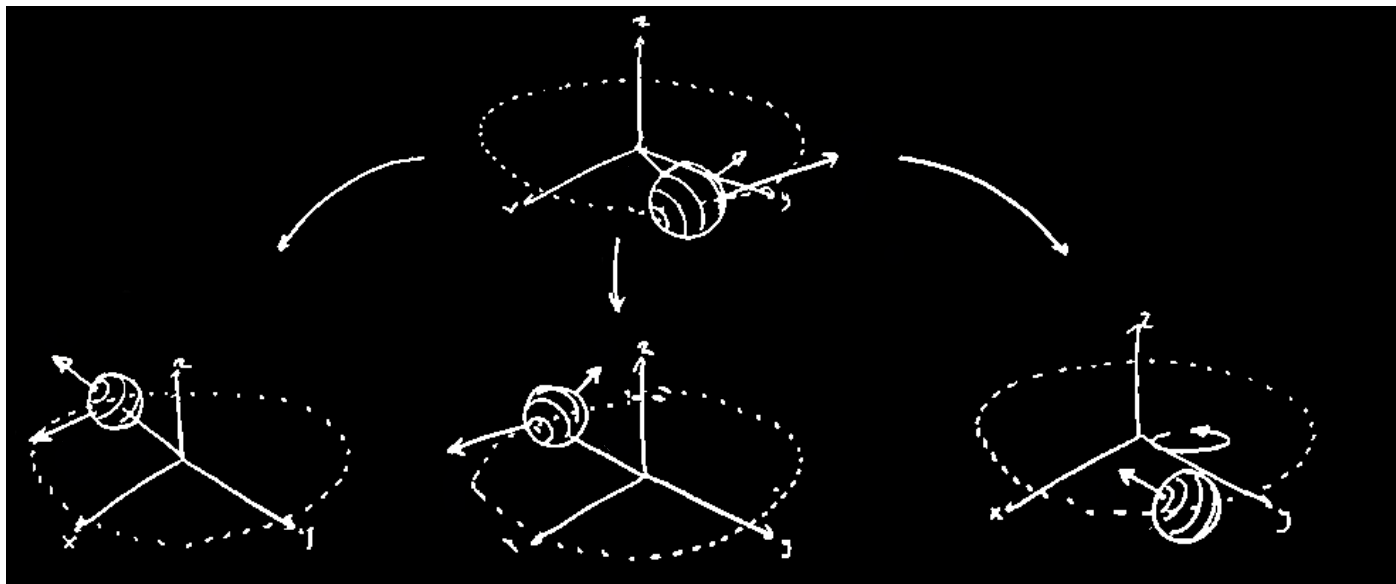
$$\hat{J}^2 |j, m_j\rangle = j(j+1)\hbar^2 |j, m_j\rangle \quad \text{och} \quad \hat{J}_z |j, m_j\rangle = m_j\hbar |j, m_j\rangle$$

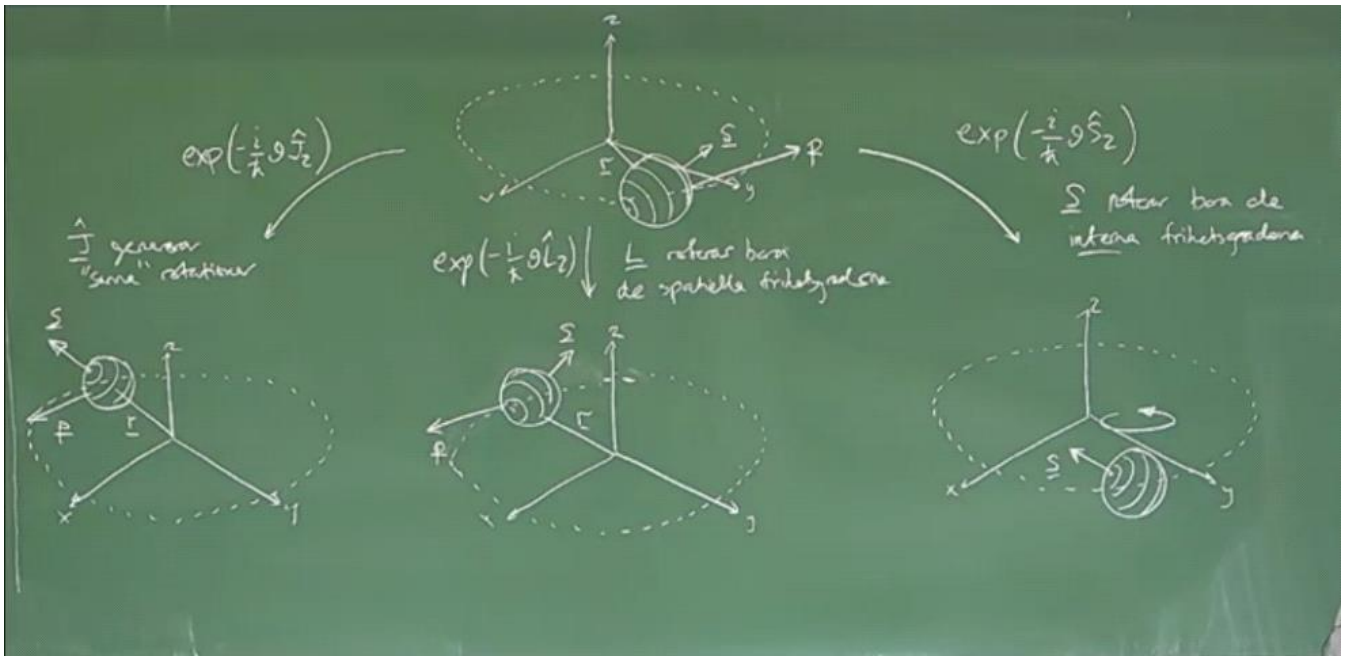
### 1. Olika sorter "rörelsemängdsmoment"

$$\hat{\vec{J}} \text{ består av två delar: } \hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}$$

$\hat{\vec{L}}$  kallas för "banrörelsemängdsmoment" och det beskriver bidraget från partikelns spatiella frihetsgrader, dvs hur partikelns masscentrum rör sig genom rymden

$\hat{\vec{S}}$  kallas för "spinnrörelsemängdsmoment" eller bara "spinn" och det beskriver partikelns interna frihetsgrader, dvs som om partikeln snurrar runt sin egen axel.





## 2. Banrörelsemängdsmoment

("Det orbitala rörelsemängdsmomentet")

$$\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p} \quad \Leftrightarrow \quad \hat{L}_z = \epsilon_{zjk} \hat{x}_j \hat{p}_k$$

$$\hat{L}_x = \hat{y} \hat{p}_z - \hat{z} \hat{p}_y$$

$\hat{L}$  har precis samma kommuteringsförhållanden som  $\hat{J}$

$$[\hat{L}_i, \hat{L}^2] = 0$$

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{L}_k$$

=> Det måste ha samma egenvärden!

$\hat{L}^2$  har egenvärden  $l(l+1)\hbar^2$ ,  $l = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$

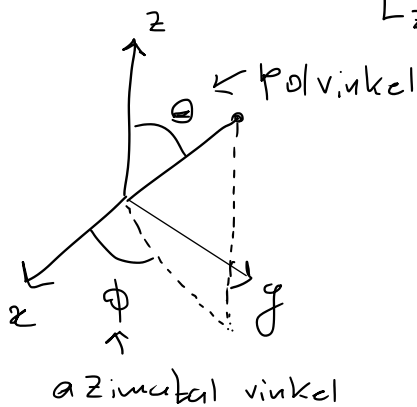
$\hat{L}_z$  har egenvärden  $m\hbar$ ,  $-l \leq m \leq +l$ ; heltalssteg

Men det finns ett till randvillkor i fallet av  $\hat{L}$  som inte gäller  $\hat{J}$  och  $\hat{S}$

I positionsbasen  $\hat{r} \psi(\vec{r}) = \vec{r} \psi(\vec{r})$  och  $\hat{p} \psi(\vec{r}) = -i\hbar \nabla \psi(\vec{r})$ ,

$$\text{blir } \hat{L}^2 \psi(\vec{r}) = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \psi(\vec{r})$$

$$\hat{L}_z \psi(\vec{r}) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \psi(\vec{r})$$



Antag att  $\psi_{l,m}(\vec{r})$  är en egenfunktion av  $\hat{L}^2$  och  $\hat{L}_z$ :

$$\hat{L}_z \psi_{l,m}(\vec{r}) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \psi_{l,m}(\vec{r}) = m_l \hbar \psi_{l,m}(\vec{r})$$

$$\psi_{l,m}(\vec{r}) = N(r, \theta) \exp(-im_l \phi)$$

$\Rightarrow$  Azimutal symmetri ger att  $-im_l(\phi + 2\pi N) = -im_l \phi$

$$\Rightarrow \exp(-im_l 2\pi) = 1$$

$\Rightarrow m_l$  är ett heltal, som utesluter halvtaliga lösningar för  $l$ .

Fysikaliskt: en hel rotation (genom  $2\pi$ ) kan inte förändra systemets spatiella frihetsgrader.

Matematiskt: vågfunktionen måste vara envärdad

$\Rightarrow$  alla halvtaliga lösningar utesluts för  $l$

$$\hat{L}^2 |l, m_l\rangle = l(l+1)\hbar^2 |l, m_l\rangle = , \quad l = 0, 1, 2, 3, \dots$$

$$\hat{L}_z |l, m_l\rangle = m_l \hbar |l, m_l\rangle , \quad -l \leq m_l \leq +l \quad ; \text{ heltaliga steg}$$

Egenfunktioner  $\psi_{lm}(\vec{r}) = \langle \vec{r} | l, m_l \rangle = Y_l^m(\theta, \phi) =$

$$Y_l^m(\theta, \phi) = N \underbrace{P_l(\cos \theta)}_{\text{Legendre polynom}} \exp(-im_l \phi)$$

klotytefunktion

De måste vara normerade så att

$$\int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi |Y_l^m(\theta, \phi)|^2 = 1$$

Den hela vågfunktionen  $\psi(\vec{r}) = R(r) Y_l^m(\theta, \phi)$   
 om partikeln har bestämda  $\hat{L}^2$  och  $\hat{L}_z$

### 3. Spinn

Spinn är det bidrag till  $\hat{J}$  som inte kommer ifrån  $\hat{L}$   $\hat{S} = \hat{J} - \hat{L}$   
 Det är "lite" som om partiklar "snurrar" runt singa egna axlar.

$$\left. \begin{aligned} [\hat{S}_i, \hat{S}^2] &= 0 \\ [\hat{S}_i, \hat{S}_j] &= i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{S}_k \end{aligned} \right\} \begin{aligned} \hat{S}^2 |s, m_s\rangle &= s(s+1)\hbar^2 |s, m_s\rangle \\ \text{där } s &= 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots \\ \hat{S}_z |s, m_s\rangle &= m_s \hbar |s, m_s\rangle \\ \text{där } -s &\leq m_s \leq +s \\ &: \text{ heltalssteg} \end{aligned}$$

Spinnbeloppet (spinnkvanttalet s) är en fastställd egenskap av fundamentala partiklar

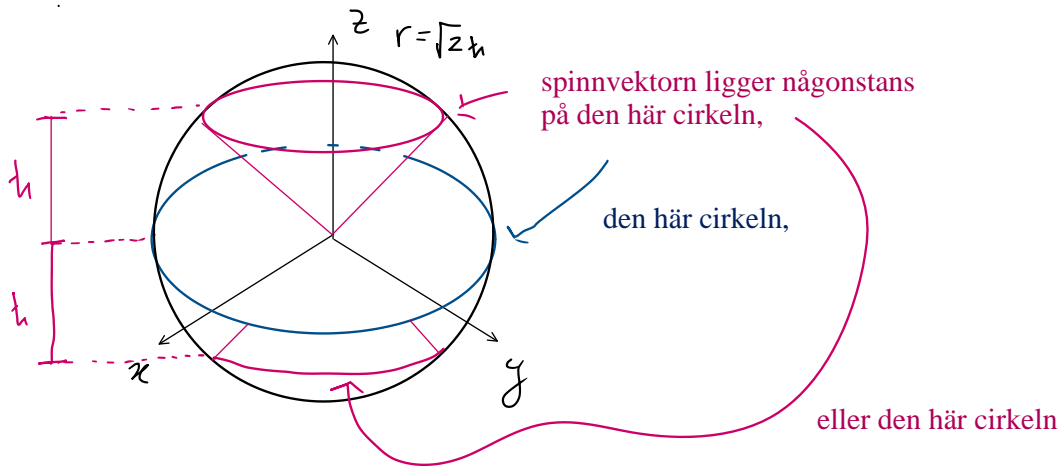
$s = 1$  fotoner

$s = 1/2$  elektroner, protoner, neutroner, (quarks, neutrinos)

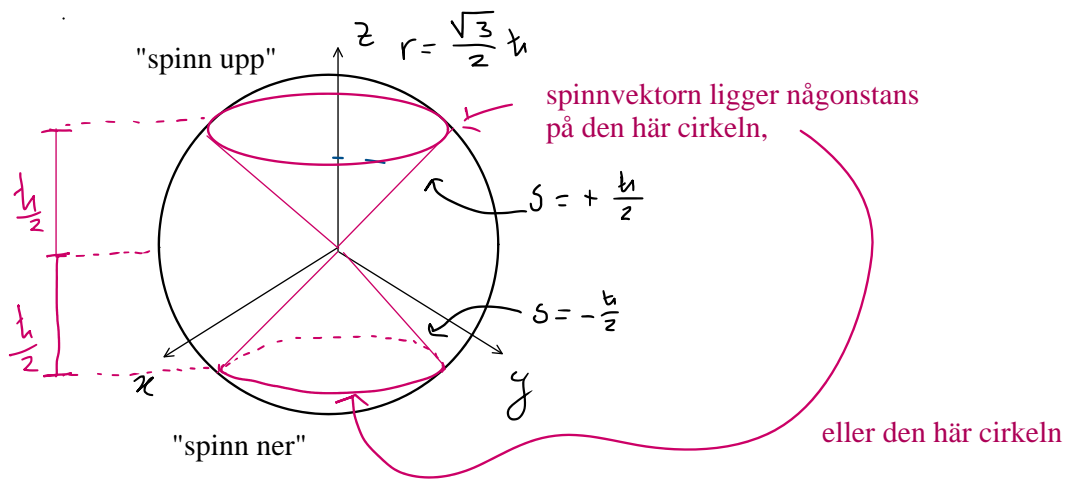


$S = 0$  Higgs Boson

$S = 1$   $S^2 = 1(1+1)\hbar^2 \Rightarrow |S| = \sqrt{2}\hbar$   
 och  $S_z = \{-\hbar, 0, +\hbar\}$



$S = \frac{1}{2}$   $S^2 = \frac{1}{2}(\frac{1}{2} + 1)\hbar^2 \Rightarrow |S| = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar$ ,  $S_z = \{-\frac{\hbar}{2}, \frac{\hbar}{2}\}$



Anta att jag har en partikel med bestämd  $s$  och att  $m_s = +s$   $\mathcal{L}_{S^2} |s, s\rangle$

Om jag roterar partikeln omkring z-axeln genom en vinkel  $\theta$ ,

$$\hat{U}(\theta \vec{n}) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \theta \hat{S}_z\right) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \theta s\right)$$

$$\text{Om } s = 1 : \hat{U} = \exp(-i\theta) \hat{1} \Rightarrow \theta = 2\pi \Rightarrow \hat{U} = \hat{1}$$

$$\text{Om } s = 0 : \hat{U} = \hat{1} \Rightarrow \text{vilken } \theta \text{ som helst, som en enfärgad sfär}$$

$$\text{Om } s = \frac{1}{2} : \hat{U} = \exp(-i\frac{\theta}{2}) \Rightarrow \theta = 4\pi \Rightarrow \hat{U} = \hat{1}$$

Vilket objekt tar minst två rotationer för att systemet ska återställas?

(Det behövs ett högre dimensionellt objekt i tredimensionellt rum)

#### 4. Spinorer och spinnmatriser

Samma logik gäller  $\hat{J}, \hat{L}, \hat{S}$

Om systemet har bestämt spinn är spinnbeloppet ett allmänt kvanttillstånd:

$$|\psi\rangle = \sum_{m_s = -s}^{-s} \alpha_s |s, m_s\rangle$$

som kan tolkas som en "vektor" med  $2s + 1$  komplexa komponenter

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_s \\ \alpha_{s-1} \\ \alpha_{s-2} \\ \vdots \\ \alpha_{-s} \end{pmatrix} = \text{"spinnor" (istället för vektor)}$$

$\alpha_m$  är sannolikhetsamplitud att en mätning av  $\hat{S}_z$  ger  $m_s \hbar$

Spinnoperatorer blir därför  $(2s + 1) \times (2s + 1)$  matriser!

$$\hat{S}_i = s\hbar \hat{\sigma}_i$$

↑  
Pauli matris

$$s = \frac{1}{2} : \hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

-i och +i ty hermitisk så dess

adjunkt (transponerade  
konjugat) är sig själv

$\hat{\sigma}_i$  är Hermitiska matriser. Alla tre har egenvärden  $\pm 1$

### 5. Exempel: Dr Knowitalls mystiska låda

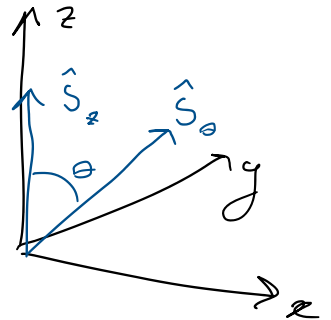
En elektron ( $s = \frac{1}{2}$ ) är bunden i en brunn så att Hamiltonianen inte påverkar spinnet.

Knapp 1 mäter spinn-projektionen längs z-axeln och ger rött, eller grönt när, ( $R = \frac{\hbar}{2}, G = -\frac{\hbar}{2}$ )

Knapp 2 mäter spinn, projektionen längs en axel i x-z planet som blivit roterad av en vinkel  $\theta$

$$\hat{S}_\theta = \cos \theta \hat{S}_z + \sin \theta \hat{S}_x$$

$$= \frac{\hbar}{2} \left[ \cos \theta \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + \sin \theta \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right]$$

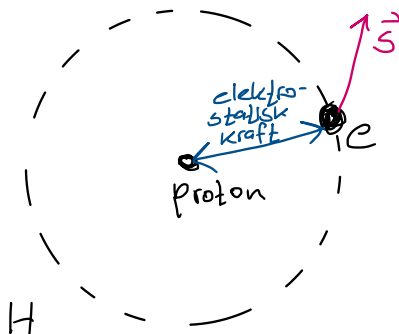


$$= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \rightarrow \hat{S}_\theta \text{ har egenvärden } \pm \frac{\hbar}{2}$$

$$|S_\theta = \frac{\hbar}{2}\rangle = \begin{pmatrix} \cos \theta/2 \\ \sin \theta/2 \end{pmatrix}, \quad |S_\theta = -\frac{\hbar}{2}\rangle = \begin{pmatrix} -\sin \theta/2 \\ \cos \theta/2 \end{pmatrix}$$

1. Väte är det lättaste grundämnet och det första som bildades (ungefär 400,000 år efter Big Bang)
2. 74% av allt synligt material i universum är väte (~24% procent är helium)
3. Väte är det enklaste atomiska systemet och det enda som kan lösas analytiskt

Väte består av en proton och en elektron bundna tillsammans av en elektrostatiske kraft



$$\hat{\mathcal{H}} = \underbrace{\frac{\hat{p}^2}{2m}}_{\text{Bohr Hamiltonianen}} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hat{r}}$$

$$m = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \approx m_e$$

reducerad massa

$$\hat{p}^2 = \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 = |\hat{\mathbf{p}}|^2$$

$$\hat{r} = \sqrt{\hat{x}^2 + \hat{y}^2 + \hat{z}^2}$$

Observationer

1.  $\hat{H}$  beror bara på skaläroperatorer  $\Rightarrow [\hat{\mathbf{J}}, \hat{\mathcal{H}}] = 0$

Det går att hitta egentillstånd med bestämda  $E, \hat{J}^2$  och  $\hat{J}_z$

2.  $\hat{H}$  har inget spinn-beroende  $\Rightarrow [\hat{\mathbf{S}}, \hat{\mathcal{H}}] = 0$

Det går att hitta egentillstånd med bestämda  $E, \hat{S}^2$  och  $\hat{S}_z$

3.  $\Rightarrow [\hat{\mathbf{L}}, \hat{\mathcal{H}}]$

Det går att hitta egentillstånd med bestämda  $E, \hat{L}^2$  och  $\hat{L}_z$

Om jag vill veta alla sju samtidigt måste alla operatorer kommutera parvis  $\Rightarrow 2 \cdot \binom{7}{2} = 42$

Om A kommuterar med B, och B kommuterar med C, kommer A kommutera med C? Nej! tex om B är identitetsoperatören

$\forall \dots \quad \Gamma \hat{A} \hat{A}^\dagger \hat{A} \dots \quad \Gamma \hat{B} \hat{B}^\dagger \hat{B} \dots$

operatorer kommutera parvis  $\rightarrow L_z, J_z, S_z$

B är identitetsoperatoren

$$V: \forall \psi \quad [\hat{L}_z, \hat{J}^2] \neq 0 \quad \text{och} \quad [\hat{S}_z, \hat{J}^2] \neq 0$$

Vi kan hitta egentillstånd med bestämda  $E, \hat{L}^2, \hat{L}_z, \hat{S}^2, \hat{S}_z$  ← okopplade basen

eller  $E, \hat{J}^2, \hat{J}_z, \hat{L}^2, \hat{S}^2$  ← kopplade basen

Vi ska välja den okopplade basen idag

$$\nabla = \left( \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

Vi söker egentillstånd som har energi  $E, \hat{L}^2, \hat{L}_z, \hat{S}^2$

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

$$\langle \vec{r} | \hat{H} | \psi \rangle = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi(\vec{r}) \leftarrow \text{En tredimensionell differentialekvation}$$

$$\nabla^2 f = \nabla \cdot \nabla f$$

### 3. Radiell och tangentiell rörelseenergi

Vi har inte tagit hänsyn till att problemet har sfärisk symmetri, då det kanske blir lättare om vi skriver om  $\nabla^2$  i sfäriska koordinater

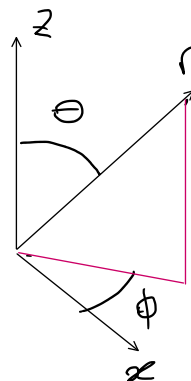
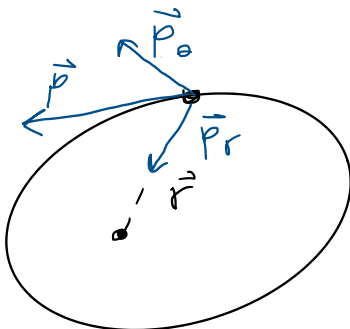
$$\nabla^2 \psi(\vec{r}) = \underbrace{\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right)}_{\left( \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right)^2 \psi(r)} + \underbrace{\frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2}}_{-\frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2} \psi(\vec{r})}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right)^2 \psi(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2} \psi(r)$$

total rörelseenergi

radiell rörelseenergi

tangentiell rörelseenergi



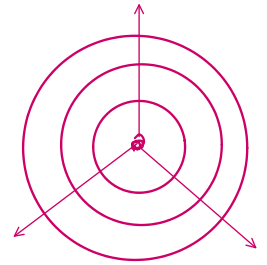
Eftersom den radiella rörelseenergin beror på enoperator i kvadrat ska jag tolka den som att vi har en radiell rörelsemängd, dvs den komponent av rörelsemängdsvektorn som är riktad mot protonen

Radiell rörelsemängd:  $\langle \vec{r} | \hat{p}_r | \psi \rangle = -i\hbar \left( \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \psi(\vec{r})$

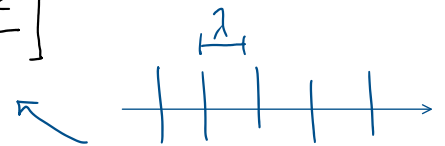
$\text{Rörelsemängd} = mv = p$   
 $\text{Rörelseenergi} = \frac{mv^2}{2} = \frac{(mv)^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}$   
 $= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$

jfr.  $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

$\hat{p}_r$  : s egenfunktioner  $-i\hbar \left( \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \psi(r) = p_r \psi(r)$   
 $\Rightarrow \psi(r) = \frac{\exp[i p_r r / \hbar]}{r}$



jfr.  $\psi_p(x) = \exp\left[\frac{i p_x x}{\hbar}\right]$



$[\hat{r}, \hat{p}_r] = i\hbar$  / jfr.  $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$

Den totala rörelseenergin  $\frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hat{L}^2}{2m\hat{r}^2}$

Om jag tillämpar Bohr-Hamiltonianen till ett energiegentillstånd

$\hat{H} |E, l, m_l, m_s\rangle = \left( \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m\hat{r}^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hat{r}} \right) |E, l, m_l, m_s\rangle$

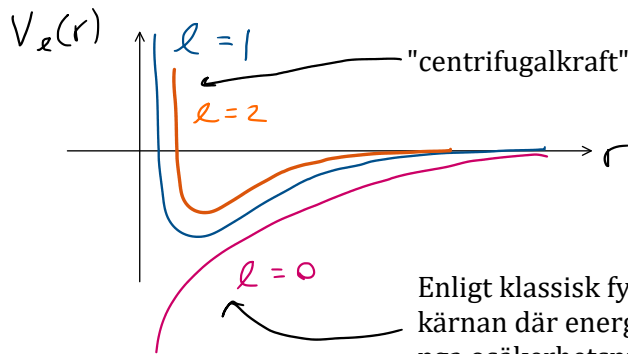
Bestämd energi (points to  $\frac{\hat{p}_r^2}{2m}$ )  
 Bestämd banrörelsemängdsmoment (points to  $\frac{l(l+1)\hbar^2}{2m\hat{r}^2}$ )  
 Bestämd spinnprojektion på z-axeln (points to  $m_s$ )  
 Bestämd banrörelsemängdsmomentets z-projektion (points to  $m_l$ )  
 $\hat{H}_e$  (points to the entire operator)

$\left( \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m\hat{r}^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hat{r}} \right) = \hat{H}_e$

alla termer beror bara på radien, så mitt tredimensionella problem har blivit endimensionellt

Genom att använda  $[\hat{H}, \hat{L}] = 0$  har jag reducerat problemet till en dimension

Om jag tolkar  $\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2m\tilde{r}^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\tilde{r}}$  som en effektiv potential, får jag en serie olika potentialkurvor



Enligt klassisk fysik vill elektronen falla ner i kärnan där energin är lägst, men den gör det inte pga osäkerhetsprincipen. Om partikeln har bestämd position har den ingen bestämd rörelsemängd och ingen bestämd rörelseenergi.

## 2. Energivåer

$$\hat{H}_\ell |E, \ell\rangle = \left( \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2m\tilde{r}^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\tilde{r}} \right) |E, \ell\rangle$$

Finns det två operatörer som nästan faktoriserar Hamiltonianen, och vad gör operatörerna till ett energiegentillstånd?

$$|E, \ell\rangle = |E, \ell, m_\ell, m_s\rangle$$

Inför en längdskala  $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = \text{"Bohr radien"}$

och en operator  $\hat{a}_\ell = \frac{a_0}{\sqrt{2}} \left( \frac{i}{\hbar} \tilde{p}_r - \frac{\ell+1}{\tilde{r}} + \frac{1}{(\ell+1)a_0} \right)$

Strategi: visa att  $\hat{a}_\ell$  och  $\hat{a}_\ell^\dagger$  faktoriserar Hamiltonianen, och att  $\hat{a}_\ell$  och  $\hat{a}_\ell^\dagger$  är stegoperatörer

Strategi:

1. Visa att  $\hat{a}_\ell$  och  $\hat{a}_\ell^\dagger$  faktoriserar Hamiltonianen  $\hat{H}_\ell$

2. Visa att  $\hat{a}_\ell$  och  $\hat{a}_\ell^\dagger$  är stegoperatörer som skapar nya energiegentillstånd

3. Tillämpa randvillkor för att hitta var stegen börjar och slutar

$$a^2 \dots \wedge \ell+1 \quad \frac{1}{\dots} \quad \wedge \quad \ell+1 \quad \frac{1}{\dots}$$

Step 1

$$\hat{a}_e^+ \hat{a}_e = \frac{a_0^2}{2} \left( -\frac{i}{\hbar} \hat{p}_r - \frac{\ell+1}{r} + \frac{1}{(\ell+1)a_0} \right) \left( +\frac{i}{\hbar} \hat{p}_r - \frac{\ell+1}{r} + \frac{1}{(\ell+1)a_0} \right)$$

$$= \frac{a_0^2}{2} \left( \frac{1}{\hbar^2} \hat{p}_r^2 + \frac{i(\ell+1)}{\hbar} \underbrace{\left[ \hat{p}_r, \frac{1}{r} \right]}_{\frac{i\hbar}{r^2}} + \frac{(\ell+1)^2}{r^2} - \frac{2}{a_0 r} + \frac{1}{(\ell+1)^2 a_0^2} \right)$$

$$\hat{H}_\ell = \frac{\hbar^2}{m a_0^2} \left( \hat{a}_e^+ \hat{a}_e - \frac{1}{2(\ell+1)^2} \right)$$

Step 2

$$[\hat{a}_e, \hat{a}_e^+] = \frac{a_0^2}{2} \left[ \frac{i}{\hbar} \hat{p}_r - \frac{\ell+1}{r} + \frac{1}{(\ell+1)a_0}, -\frac{i}{\hbar} \hat{p}_r - \frac{\ell+1}{r} + \frac{1}{(\ell+1)a_0} \right]$$

$$= \frac{a_0^2}{2} \left[ -\frac{i(\ell+1)}{\hbar} \left[ \hat{p}_r, \frac{1}{r} \right] + \frac{i(\ell+1)}{\hbar} \left[ \frac{1}{r}, \hat{p}_r \right] \right]$$

$$= \frac{m a_0^2}{\hbar^2} (\hat{H}_{\ell+1} - \hat{H}_\ell)$$

$$[\hat{a}_e, \hat{H}_\ell] = \frac{\hbar^2}{m a_0^2} \left[ \hat{a}_e, \hat{a}_e^+ \hat{a}_e - \frac{1}{(\ell+1)a_0} \right] = \frac{\hbar^2}{m a_0^2} [\hat{a}_e, \hat{a}_e^+] \hat{a}_e$$

$$= (\hat{H}_{\ell+1} - \hat{H}_\ell) \hat{a}_e$$

$$\hat{H}_\ell |E, \ell\rangle = E |E, \ell\rangle$$

$$\hat{a}_e \hat{H}_\ell |E, \ell\rangle = E \hat{a}_e |E, \ell\rangle$$

$$[\hat{a}_e, \hat{H}_\ell] + \hat{H}_\ell \hat{a}_e$$

$$(\hat{H}_{\ell+1} - \hat{H}_\ell) \hat{a}_e + \hat{H}_\ell \hat{a}_e |E, \ell\rangle = E \hat{a}_e |E, \ell\rangle$$

$$\hat{H}_{\ell+1} (\hat{a}_e |E, \ell\rangle) = E (\hat{a}_e |E, \ell\rangle)$$

tillståndet  $\hat{a}_e |E, \ell\rangle$  uppfyller en egenvärdesekvation för  $\hat{H}_{\ell+1}$  med samma energi E. Så tillståndet  $\hat{a}_e |E, \ell\rangle$  har energiegenvärdet samma som  $|E, \ell\rangle$ , men med mer harrörelsemängdsmoment



## banrörelsemängdsmoment

Om  $|E, l\rangle$  är ett egentillstånd med bestämd energi  $E$  och banrörelsemoment  $l$ , är  $\hat{a}_l |E, l\rangle$  ett egentillstånd med bestämd energi  $E$  men banrörelsemoment  $l+1$ .

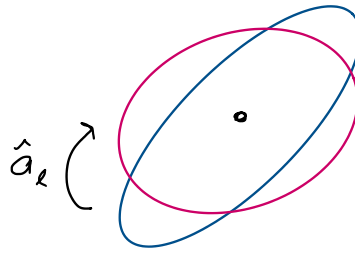
$\hat{a}_l$  skapar ett energiegentillstånd som har samma energi men med mer banrörelsemoment, eller om vi föredrar, ett tillstånd som har samma totala energi men med mer tangentiell energi

$$\tilde{a}_l |E, l\rangle = \beta |E, l+1\rangle$$

↑  
konstant

$\hat{a}_l$  minskar elektronens radiella rörelseenergi, och ökar dess tangentiella rörelseenergi med samma mängd.

pss:  $\hat{a}_l^\dagger |E, l+1\rangle = \beta' |E, l\rangle$



$\hat{a}_l$  för omloppsbanan mer cirkulär

Om vi fortsätter tillämpa  $\hat{a}_l$  måste vi nå en punkt där det inte finns någon radiell rörelseenergi kvar när banan är helt cirkulär, och då kommer  $\hat{a}_l$  förstöra tillståndet

Om vi fortsätter tillämpa  $\hat{a}_l$  måste vi nå en punkt där det inte finns någon energi kvar som kan ges till elektronens tangentiella rörelseenergi

dvs det finns något  $l_{max}$  där det nästa  $\hat{a}_l$  förstör tillståndet

$$\hat{a}_l |E, l_{max}\rangle = 0$$

$$\langle E, l_{max} | \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l |E, l_{max}\rangle = \langle E, l_{max} | \frac{m a_0^2}{\hbar^2} \left( \mathcal{H}_{l_{max}} + \frac{1}{2(l_{max}+1)^2} \right) |E, l_{max}\rangle$$

$$0 = \frac{m a_0^2}{\hbar^2} E + \frac{1}{2(l_{max}+1)^2}$$

$$\dots \frac{\hbar^2}{2} =$$

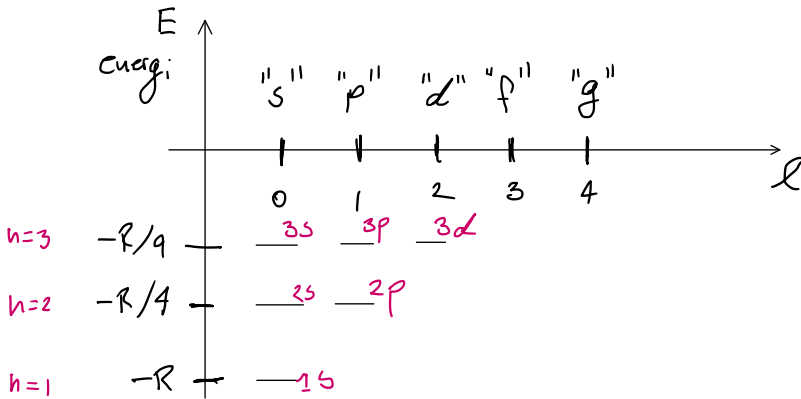
$$\Rightarrow E = \frac{h^2}{2m a_0^2 (l_{max} + 1)^2}$$

Identificera  $l_{max} + 1 = n$  ("huvudkvantalet")

där  $n = 1, 2, 3, \dots$

$$E_n = -\frac{h^2}{2m a_0^2 n^2} = -\frac{R}{a_0^2} = -\frac{13,6 \text{ eV}}{n^2}$$

↙ Rydbergs konstant

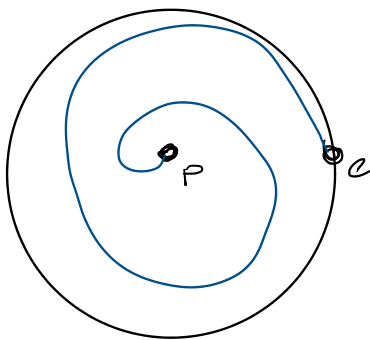


för givet  $n$ , är de tillåtna  $l$

$$0 \leq l \leq n-1$$

$l$  kvanttal får bokstäver av historiska skäl

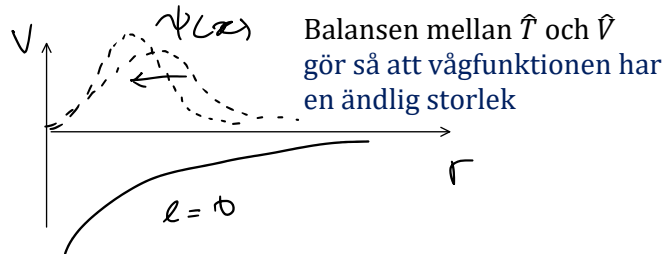
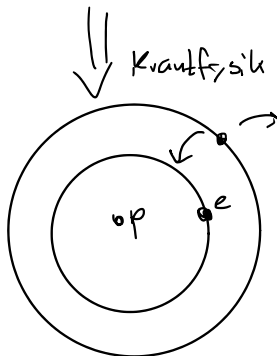
Varför är atomer stabila?



Enligt klassisk fysik accelererar elektronen när den roterar och förlorar energi, därmed ska den falla ner i kärnan

1. Bundna tillstånd har kvantiserade energier pga randvillkor (ett randvillkor är att vågfunktionen måste försvinna om man går långt ifrån potentialen)

2. Den lägsta energin är inte  $-\infty$  pga osäkerhetsprincipen



Elektronen kunde minska energin genom att klämma vågfunktionen omkring  $r=0$  där potentialenergin är lägst. Men om vågfunktionen blir tätare så att osäkerheten i position minskas, då ökar vi osäkerheten i rörelsemängden vilket betyder rörelseenergin ökar. Genom att försöka minska energin har jag faktiskt höjt den

Förra gången:

1. En väteatom består av en elektron och en proton, bundna av en elektrostatisk kraft. "Bohr Hamiltonianen är:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hat{L}^2}{2m\hat{r}^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hat{r}}, \quad \hat{p}_r = \text{radiell rörelsemängd,}$$

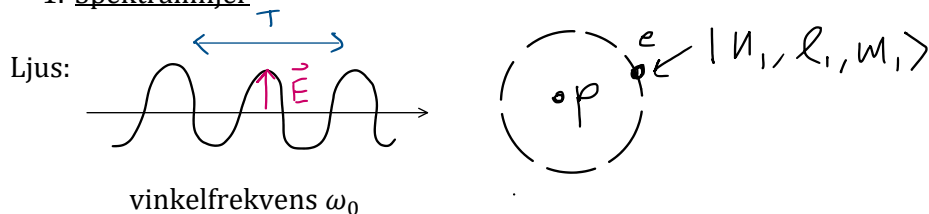
$$m = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}, \text{ den reducerade massan}$$

2. Med hjälp av stegoperatorn  $\hat{a}_l = \frac{a_0}{\sqrt{2}} \left( \frac{i}{\hbar} \hat{p}_r - \frac{l+1}{\hat{r}} + \frac{1}{(l+1)a_0} \right),$

där "Bohr radien"  $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}$ , som bevarar energin men ökar  $l \rightarrow l+1$ ,

hittar vi en steg av energinivåer  $E_n = -\frac{\hbar^2}{2m a_0^2 n^2}$ , huvudkvanttalet  $n = 1, 2, 3, \dots$   
 $0 \leq l \leq n-1$ , och  $-l \leq m_l \leq l$

1. Spektrallinjer



Elektronen är en laddad partikel och ljus har ett elektriskt fält.

Det finns ett till bidrag till Hamiltonianen:  $\hat{H}' = -e E \cos(\omega_0 t) \hat{z}$   
 som beror på tid!  
 störning

Svaret blir:

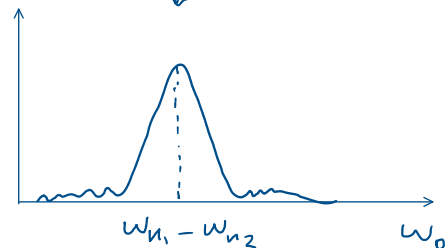
$$P(n_2, l_2, m_2) = \frac{4e^2 E^2}{\hbar^2} \left| \langle n_2, l_2, m_2 | \hat{z} | n_1, l_1, m_1 \rangle \right|^2 \frac{\sin^2 \left[ (\omega_0 - \omega_{n_1} + \omega_{n_2}) \frac{T}{2} \right]}{(\omega_0 - \omega_{n_1} + \omega_{n_2})^2}$$

matrislementen ger oss "urvalsregler"

$$\langle n_2, l_2, m_2 | \hat{z} | n_1, l_1, m_1 \rangle \neq 0$$

$$\text{om } \Delta l = l_2 - l_1 = \pm 1$$

$$\text{om } \Delta m_l = m_2 - m_1 = 0, \pm 1$$



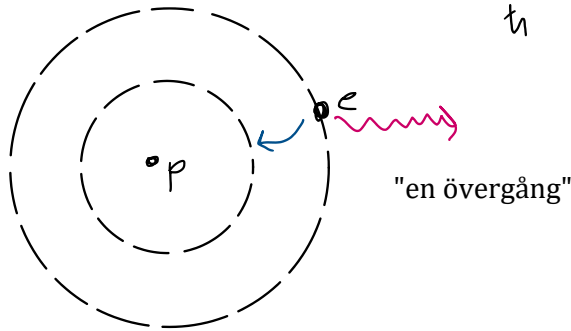
dvs elektronen kan absorbera ljus när frekvensen  $\omega_0$  är just  $\omega_{n_1} - \omega_{n_2}$

$$= \frac{E_{n_1} - E_{n_2}}{\hbar}$$

Elektronen i tillståndet  $n_1, l_1, m_1$  kan "hoppa" till ett annat tillstånd  $n_2, l_2, m_2$  och (antingen) absorbera ljus eller utge ljus med en vinkelfrekvens:  $\dots |E_2 - E_1|$

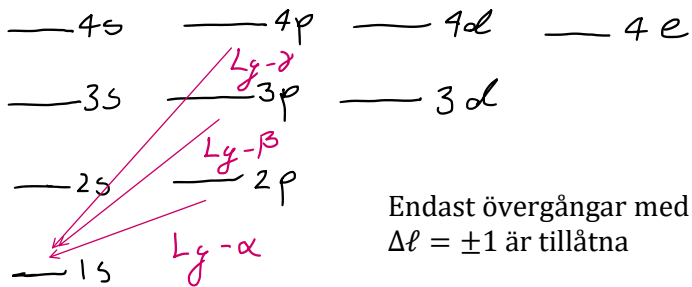
Elektronen i tillståndet  $n_1, \ell_1, m_1$  kan "hoppa" till ett annat tillstånd  $n_2, \ell_2, m_2$  och (antingen) absorbera ljus eller utge ljus med en vinkelfrekvens:

$$\omega = \frac{|E_2 - E_1|}{\hbar}$$



### Lyman-serien

Ursprunger ifrån övergången  $n_1 \rightarrow 1$



Endast övergångar med  $\Delta\ell = \pm 1$  är tillåtna

Om elektronen hamnar i 1s och har fallit ifrån 2, är det tillåtet att gå från 2s till 1s?

Bankvanttalet för 2s är  $\ell = 0$

Bankvanttalet för 1s är  $\ell = 0$

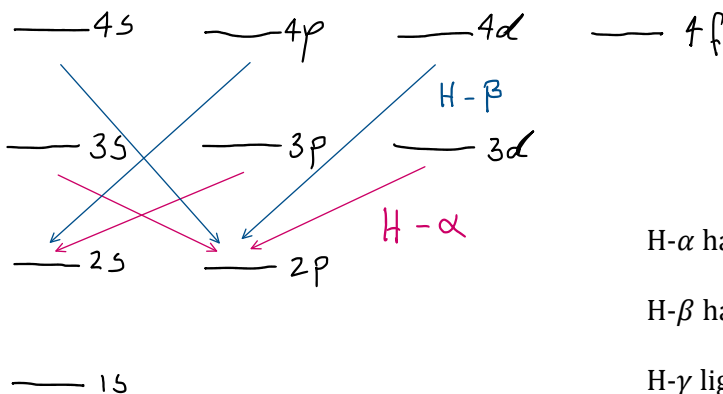
Bankvanttalet förändras inte och det är därför inte tillåtet, alltså måste elektronen ha kommit från 2p istället där  $\ell = 1$

Ly- $\alpha$  har våglängd 120nm (UV)

Ly- $\beta$  och uppåt har en kortare våglängd och är osynliga

### Balmer serien

Ursprunger från övergångar  $n_1 \rightarrow 2$



H- $\alpha$  har en våglängd 660 nm (röd)

H- $\beta$  har en våglängd 487 nm (blå)

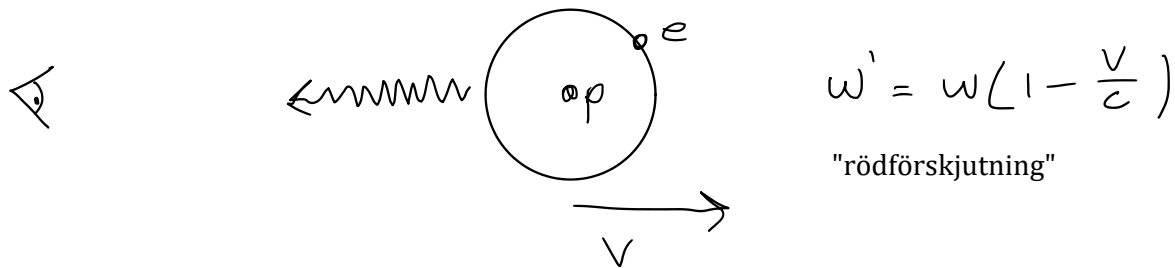
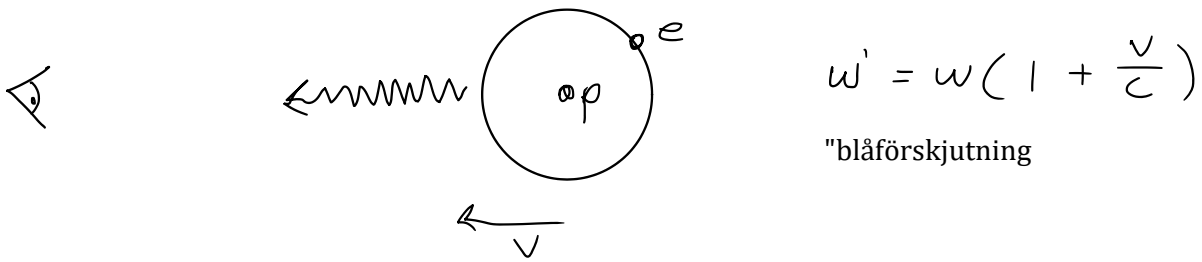
H- $\gamma$  ligger i UV

En elektron som sitter i 2s är väldigt stabil och kan inte falla till ett annat tillstånd

För att jonisera väte krävs en energi på 13.6 eV (1 Rydberg), för då hamnar det på energi noll och kan inte stanna på något tillstånd 1, 2, 3, 4, 5... på vägen

Ett termodynamiskt avbrott

Om jag har en atom som utger ljus med frekvens  $\omega$ , och den rör sig med en hastighet  $v$ , vad för frekvens kommer jag att se?

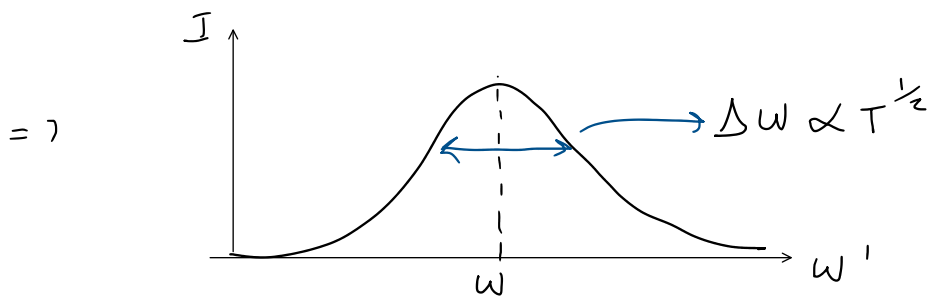


I en gas med temperatur  $T$  är atomerna hastigheter längs en axel distribuerade som:

$$df = N \exp \left[ -\frac{mv^2}{2k_B T} \right] dv$$

$$df = N' \exp \left[ -\frac{mc^2(\omega' - \omega)^2}{2k_B T \omega^2} \right] d\omega$$

$v = c \left( 1 - \frac{\omega'}{\omega} \right)$



2. Vågfunktioner

Hur ser  $|n_1, \ell, m_\ell, m_s\rangle$  ut i positionsbasen?

spinn försvinner eftersom det inte finns någon vågfunktion som beskriver spinntillstånd, vi måste använda spinnorer

$$\Psi_{n\ell m_\ell}(\vec{r}) = \langle \vec{r} | n, \ell, m \rangle = \underbrace{R_{n\ell}(r)}_{\text{Egenfunktion av } \hat{H}_\ell} \underbrace{Y_\ell^m(\theta, \phi)}_{\text{Klotyfefunktion, egenfunktion av } \hat{L}^2 \text{ och } \hat{L}_z}$$

Sannolikhetsamplitud att en positionsmätning ger  $\vec{r}$  när elektronen börjar i energitillståndet  $|n_1, \ell, m_\ell\rangle$

$R_{n,\ell}(r)$  kallas för den "radiella vågfunktionen" :

$$\hat{a}_{n-1} |n, n-1\rangle = 0 \quad (\text{kom ihåg att } 0 \leq \ell \leq n-1) \quad \hat{a}_\ell |E, \ell\rangle = \beta |E, \ell+1\rangle$$

blir null om utanför intervall

$$\Rightarrow \frac{a_0}{\sqrt{2}} \left( \frac{\partial}{\partial r} + \frac{n-1}{r} + \frac{1}{a_0 n} \right) R_{n,n-1}(r) = 0$$

$$\Rightarrow R_{n,n-1}(r) = N r^{n-1} \exp\left(-\frac{r}{na_0}\right) \quad (\ell = n-1)$$

Vågfunktionen är normerad så att  $\int_{\vec{r} \in \mathbb{R}^3} |\psi|^2 d^3 \vec{r} = 1$   $d^3 \vec{r} = r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi$

$$\int_0^\infty |R_{n,\ell}(r)|^2 r^2 dr = 1 \quad \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \sin \theta d\theta d\phi |Y_\ell^m(\theta, \phi)|^2 = 1$$

glöm inte mig!!!

$$\Rightarrow R_{n,n-1}(r) = \frac{1}{\sqrt{(2n)!}} \left(\frac{2}{na_0}\right)^{3/2} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^{n-1} \exp\left(-\frac{r}{na_0}\right)$$

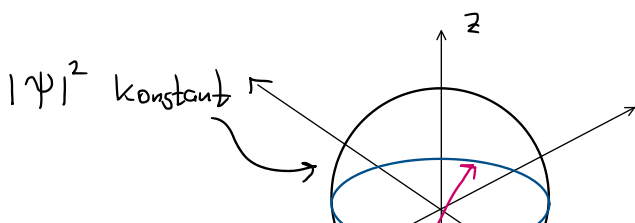
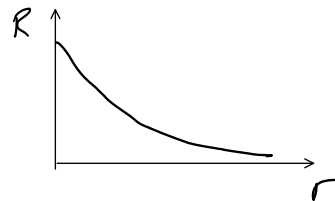
För att skapa vågfunktioner med lägre  $\ell$  ska man använda  $\hat{a}_\ell^\dagger$ .  $[\hat{a}_\ell^\dagger |n, \ell+1\rangle = \beta' |n, \ell\rangle]$

$$R_{n,n-1}(r) = \frac{1}{\sqrt{(2n)!}} \left(\frac{2}{na_0}\right)^{3/2} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^{n-1} \exp\left(-\frac{r}{na_0}\right) :$$

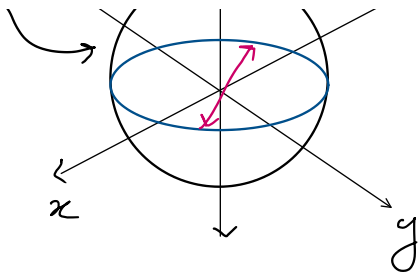
1s :  $n=1$   $\ell=0$ ,  $m_\ell=0$

$$R_{1,0}(r) \propto \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)$$

$$Y_0^0(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$



Elektronen har ingen tangentiell rörelseenergi eftersom  $\ell = 0$ , utan den har bara radiell rörelseenergi. Elektronen slår fram och tillbaka längs radien genom protonen, på en okänd ...



energin  $\neq 0$ , utan den har bara radiell rörelseenergi. Elektronen slår fram och tillbaka längs radien genom proteonen, på en okänd riktning.

Elektronen har bara radiell rörelse och oscillerar fram och tillbaka

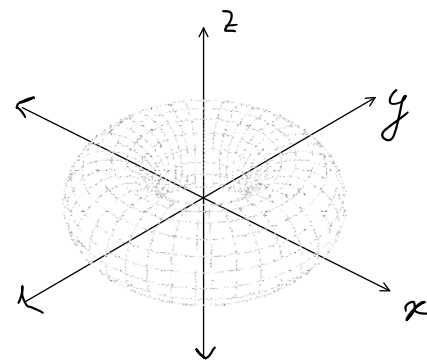
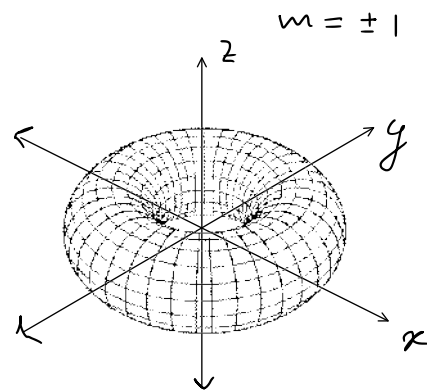
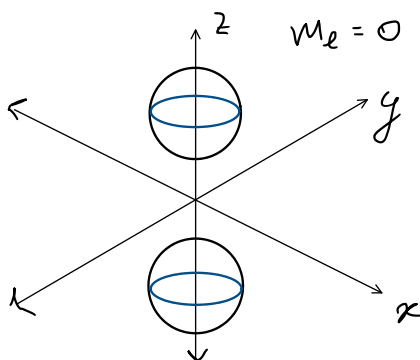
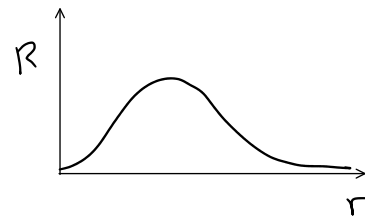
2P :  $n=1, l=1, m_l = -1, 0, 1$

$$R_{2,1}(r) \propto r \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right)$$

$$Y_1^{-1}(\theta, \phi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{-i\phi}$$

$$Y_1^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta$$

$$Y_1^1(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{i\phi}$$



3. Finstruktur

$$\hat{H} = \underbrace{\frac{\hat{p}^2}{2m}}_{\text{rörelseenergi}} + \underbrace{\frac{\hat{L}^2}{2m\hbar^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hat{r}}}_{\text{Coulomb potentialen}} + \text{fler bidrag}$$

rörelseenergi

Coulomb potentialen

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2m a_0^2 n^2}, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

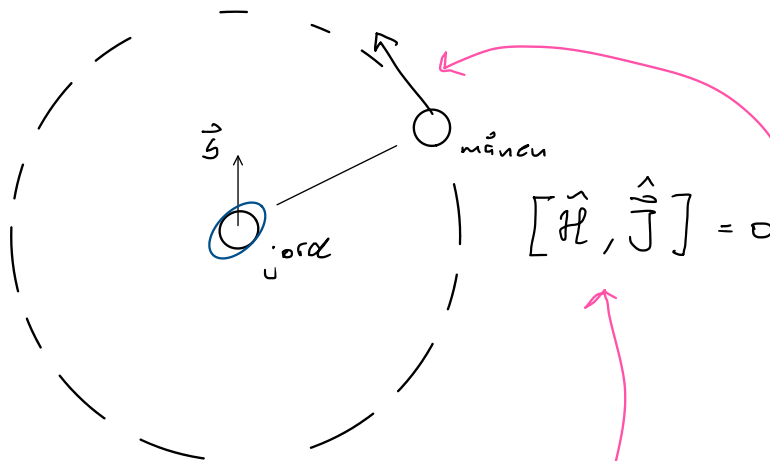
$$0 \leq l \leq n-1$$

$$-l \leq m_l \leq l$$

Det finns också korrigeringar till Bohr Hamiltonianen, som kommer ifrån:

1. Relativistiska påverkningar
2. Spinn-ban koppling
3. Darwins korrigering

Vi ska bara kolla på spinn-ban koppling

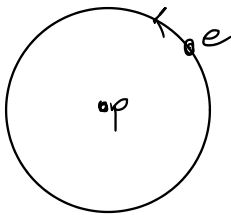


Månens tyngdkraft drar på havet mer på delen av havet som är närmare än månen, så det skapar en vattenmassa. Samma vattenmassa drar på månen på samma sätt som månen drar på vattenmassan. Och eftersom jorden snurrar så snabbt som den gör, är vattenmassan lite framför månen, så att tyngdkraften drar på månen både mot jorden och den i den här riktningen

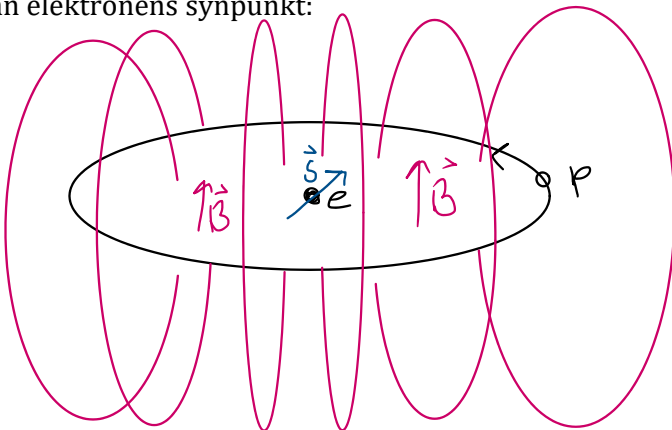
Detta gör så att månen accelererar pga jordens hav. Om månen accelererar måste dess banrörelsemoment  $\hat{L}$  öka. Då minskar jordens spinn eftersom den totala rörelseenergin är bevarad enligt

Detta gör så att dagen hela tiden blir längre. Om 4 miljarder år blir en dag på jorden lika lång som en månad.

I en väteatom



Från elektronens synpunkt:



Hamiltonianen som beskriver ett magnetiskt moment som befinner sig i ett magnetiskt fält är

$$\hat{H} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} \propto \hat{S} \cdot \hat{L}$$

magnetiska momentet

Den här växelverkan kallas för "spinn-ban koppling"

=> Protonens rörelse skapar ett magnetiskt fält  $\vec{B} \propto \vec{L}$



=> Protonens rörelse skapar ett magnetiskt fält  $B \propto L$

$$\Rightarrow \hat{\mathcal{H}}_{sb} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 m^2 c^3} \hat{L} \cdot \hat{S} = \frac{e^2}{16\pi\epsilon_0 m^2 c^3} (\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2)$$

$$\hat{J}^2 = (\hat{L} + \hat{S})^2 = \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + \hat{L} \cdot \hat{S} + \hat{S} \cdot \hat{L} = \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{L} \cdot \hat{S}$$

Betrakta  $\hat{\mathcal{H}}_{sb} = \frac{e^2}{16\pi\epsilon_0 m^2 c^3} (\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2)$  som en störning

~~$$|u^{(1)}\rangle = \sum_k \frac{\langle u | \hat{\mathcal{H}} | k \rangle}{E_u - E_k} |k\rangle$$~~

Funkar inte pga degenerade energinivåer

Problemet är att våra energinivåer är väldigt degenerade!

$$\sum_{\substack{u' \\ W}} \langle u', \ell', m' | \hat{\mathcal{H}}_{sb} | u, \ell, m \rangle \beta_{u', \ell', m'} = E^{(1)} \beta_{u, \ell, m}$$

För komplicerad för att lösa

Vi gjorde ett misstag igår när vi valde den okopplade basen  $(\hat{\mathcal{H}}, \hat{L}^2, \hat{L}_z, \hat{S}^2, \hat{S}_z)$

Hade vi valt den kopplade basen  $(\hat{\mathcal{H}}, \hat{J}^2, \hat{J}_z, \hat{L}^2, \hat{S}^2)$  skulle W ha blivit diagonell

och vi skulle kunna "läsa av" egenvärdena.

$$E^{(1)} = \langle u, j, m_j, \ell | \hat{\mathcal{H}}_{sb} | u, j, m_j, \ell \rangle$$

$$= \frac{e^2}{16\pi\epsilon_0 m^2 c^3} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle \frac{[j(j+1) - \ell(\ell+1) - 3/4] \hbar^2}{\ell(\ell+1/2)(\ell+1) \hbar^3 a_0^3} =$$

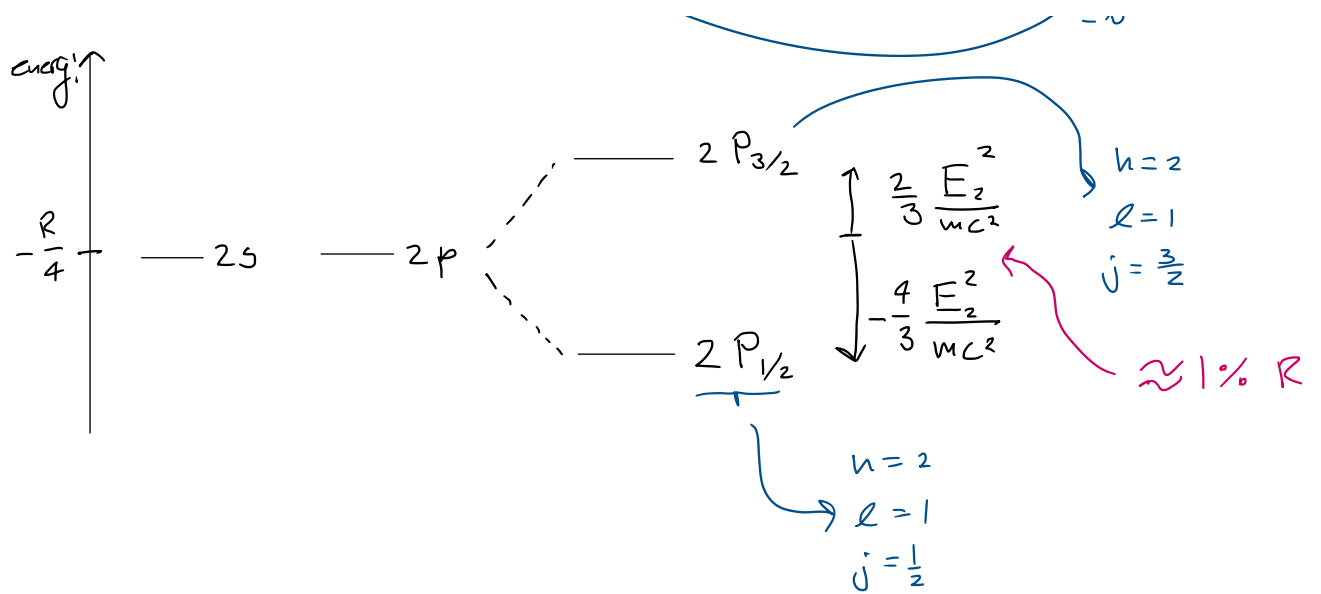
$$E^{(1)} = \frac{E_n^2}{m c^2} \frac{u [j(j+1) - \ell(\ell+1) - 3/4]}{\ell(\ell+1/2)(\ell+1)}$$

= 0 om  $\ell = 0$

$$\hat{\mathcal{H}}_{sb} = A \hat{L} \cdot \hat{S}$$

= 0

energ. ↑



Om man samlar alla finstruktur korrigeringar

$$E_{fs}^{(1)} = - \frac{E_n^2}{m c^2} \left( \frac{4n}{j+1/2} - 3 \right)$$

Tidigare:

1. Rörelsemängdsmomentets operatörer uppfyller  $[\hat{J}_i, \hat{J}^2] = 0$  och  $[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{J}_k$ .
2.  $\hat{J}^2$  har för egenvärden  $j(j+1)\hbar^2$ ,  $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$   
och  $\hat{J}_z$  har  $m\hbar$ ,  $-j \leq m \leq j$  i heltaliga steg.
3. Ett allmänt tillstånd kan skrivas som  $|\psi\rangle = \sum_{m_j} \alpha_m |j, m_j\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_j \\ \alpha_{j-1} \\ \vdots \\ \alpha_{-j} \end{pmatrix}$  (vektor)  
och rörelsemängdsmomentoperatorer som matriser,  $\hat{J}_i = j\hbar \hat{\sigma}_i \leftarrow$  Pauli matris

1. Tillstånd

Säg att jag har två partiklar med spinnkvanttalet  $s_1$ , respektive  $s_2$ .

$$|\psi_1\rangle = \sum_{m_1=-s_1}^{-s_1} \alpha_{m_1} |s_1, m_1\rangle \quad \text{beskriver partikel 1}$$

$$|\psi_2\rangle = \sum_{m_2=-s_2}^{-s_2} \beta_{m_2} |s_2, m_2\rangle \quad \text{beskriver partikel 2}$$

Om det tar  $2s_1 + 1$  amplituder för att beskriva partikel 1 (samma gäller partikel 2), tar det  $(2s_1 + 1)(2s_2 + 1)$  amplituder för att beskriva kombinationen.

Det blir alltså svårare och svårare att beskriva ett system om antalet partiklar ökar.

Om  $|\psi_1\rangle$  bor i ett Hilbertrum med dimension  $2s_1 + 1$  (samma gäller  $|\psi_2\rangle$ ) bor tillståndet som beskriver hela systemet i ett Hilbertrum med dimension  $(2s_1 + 1)(2s_2 + 1)$ .

Det större Hilbertrummet spänns upp av bastillstånden

$$\left\{ |s_1, m_1\rangle \otimes |s_2, m_2\rangle \right\}$$

↑  
tensorprodukt

Ett allmänt tillstånd som beskriver både partikel 1 och partikel 2 (är en linjär kombination av dessa bastillstånd)

$$|\Psi\rangle = \sum_{m_1=-s_1}^{-s_1} \sum_{m_2=-s_2}^{-s_2} \alpha_{m_1, m_2} |s_1, m_1\rangle \otimes |s_2, m_2\rangle$$

Sannolikhetsamplitud att en  $\hat{S}_z$  mätning på partikel 1 ger  $m_1\hbar$   
och en  $\hat{S}_z$  mätning på partikel 2 ger  $m_2\hbar$

↑  
tillstånd där partikel 1 har bestämd  $S_z$  och att partikel 2 har bestämt  $S_z$ .

Tillståndet  $|\Psi\rangle$  måste vara normerat:

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \Psi \rangle &= \left( \sum_{m_1'=-s_1}^{-s_1} \sum_{m_2'=-s_2}^{-s_2} \alpha_{m_1', m_2'}^* \langle s_1, m_1' | \otimes \langle s_2, m_2' | \right) \\ &\quad \times \left( \sum_{m_1=-s_1}^{-s_1} \sum_{m_2=-s_2}^{-s_2} \alpha_{m_1, m_2} |s_1, m_1\rangle \otimes |s_2, m_2\rangle \right) \\ &= \sum \sum \sum \sum \alpha_{m_1, m_2}^* \alpha_{m_1, m_2} \underbrace{\langle s_1, m_1' | s_1, m_1 \rangle}_{\delta_{m_1' m_1}} \underbrace{\langle s_2, m_2' | s_2, m_2 \rangle}_{\delta_{m_2' m_2}} \\ &= \sum_{m_1=-s_1}^{-s_1} \sum_{m_2=-s_2}^{-s_2} |\alpha_{m_1, m_2}|^2 = 1 \end{aligned}$$

OBS Tillstånd som beskriver olika partiklar ser inte varandra.

Jag måste erkänna att vi har gjort detta förut...

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) |x\rangle dx \quad (\text{en partikel som rör sig längs } x\text{-axeln})$$

$$|\psi\rangle = \int \psi(x|\vec{r}) d^3\vec{r} \quad (\text{en partikel som rör sig i tre dimensioner})$$

$$\Rightarrow |\vec{r}\rangle = |x\rangle \otimes |y\rangle \otimes |z\rangle$$

tillståndet där partikeln har bestämda  $x, y$  och  $z$

Från en matematisk synpunkt finns det ingen skillnad mellan 3 partiklar som rör sig i en dimension, och 1 partikel som rör sig i 3 dimensioner

Det går att bygga ett större Hilbertrum genom att  $\otimes$  "kompatibla" tillstånd.  
(kompatibla tillstånd innebär att de kommuterar)

$$|x\rangle \otimes |y\rangle \quad \checkmark$$

$$|s_1, m_1\rangle \otimes |s_2, m_2\rangle \quad \checkmark$$

$$|x\rangle \otimes |p_x\rangle \quad \times$$

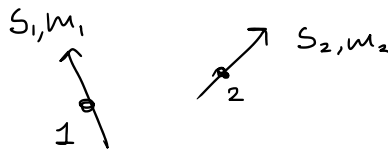
ej kompatibla ty de kommuterar ej

"Kompatibla" betyder att operatorerna som motsvarar egentillstånden (de fysikaliska mängder) kommuterar

t.ex. 
$$|\psi\rangle = \sum_{m=-s}^{-s} \int d^3\vec{r} \alpha_m \psi_m(\vec{r}) |\vec{r}\rangle \otimes |s, m_s\rangle$$

jag expanderar Hilbertrummet för att omfatta spinn-information

## 2. Mätning av ett subsystem



Jag kan mäta individuella partiklar eller det hela systemet.

### Individuella partiklar

Princip: Vid mätning kollapsar tillståndet till ett egentillstånd av operatoren som motsvarar det vi mäter.

Utfallet av mätningen är egenvärdet som motsvara egentillståndet.

Kollapsen sker med sannolikheten  $P = |\langle a_n | \psi \rangle|^2$ .

Om vi mäter  $\hat{S}_z$  för partikel 1:

$$|\Psi\rangle = \sum_{m_1=-s_1}^{-s_1} \sum_{m_2=-s_2}^{-s_2} \alpha_{m_1, m_2} |s_1, m_1\rangle \otimes |s_2, m_2\rangle$$

och får utfallet  $\mu\hbar$ , kollapsar tillståndet till

$$= \frac{\sum_{m_2=-s_2}^{-s_2} \alpha_{\mu m_2} |s_1, \mu\rangle \otimes |s_2, m_2\rangle}{\sum_{m_2=-s_2}^{-s_2} |\alpha_{\mu m_2}|^2}$$

med sannolikheten

$$P = \sum_{m_2=-s_2}^{-s_2} |\alpha_{\mu m_2}|^2$$

Om du har tillståndet

$$\frac{1}{\sqrt{(|1\rangle + |2\rangle)}}$$

$$m_2 = s_2$$

När jag har en superposition av många tillstånd

1. Addera sannolikheterna från alla termer som överensstämmer med egenvärdet
2. (efter kollaps) radera alla termer som inte motsvarar egenvärdet och normera igen

$$|\psi\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}|\uparrow\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}}|\downarrow\rangle$$

$$P(s_2 = \frac{\hbar}{2}) = \frac{2}{3}$$

efter kollaps

$$|\psi\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}|\uparrow\rangle$$

Normera igen:

$$|\psi'\rangle = \frac{\sqrt{\frac{2}{3}}|\uparrow\rangle}{\sqrt{\frac{2}{3}}} = |\uparrow\rangle$$

Om du har tillståndet

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle)$$

och du mäter

$$\langle 1 | (\frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle + |2\rangle) \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

ditt nya tillstånd blir

$$|1\rangle = \frac{\frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle}{\frac{1}{\sqrt{2}}}$$

### 3. Exempel

Jag har två spinn- $\frac{1}{2}$  partiklar A och B

$$|\Psi\rangle = \frac{|A:\uparrow\rangle \otimes |B:\downarrow\rangle - |A:\downarrow\rangle \otimes |B:\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}$$

- a) om jag mäter  $S_z$  för partikel A, vad är de möjliga utfall, de motsvarande sannolikheterna och hur ser tillståndet ut efter mätning?

$$[\hat{S}_z^{(A)} \text{ har egenvärden } +\frac{\hbar}{2}, |A:\uparrow\rangle \text{ samt } -\frac{\hbar}{2}, |A:\downarrow\rangle]$$

$$P(+\frac{\hbar}{2}) = \frac{1}{2}, \quad |\Psi'\rangle = \frac{|A:\uparrow\rangle \otimes |B:\downarrow\rangle}{\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{(\frac{1}{\sqrt{2}})} = |A:\uparrow\rangle \otimes |B:\downarrow\rangle$$

$$P(-\frac{\hbar}{2}) = \frac{1}{2}, \quad |\Psi'\rangle = -|A:\downarrow\rangle \otimes |B:\uparrow\rangle$$

- b) Om jag nu mäter  $S_z$  för partikel B, vad har jag för möjliga utfall och sannolikheter, samt hur ser tillståndet ut efter mätning?

$$\text{Om } S_z^{(A)} = \frac{\hbar}{2}, |\Psi\rangle = |A:\uparrow\rangle \otimes |B:\downarrow\rangle$$

$$P(S_z^B = -\frac{\hbar}{2}) = 100\%$$

$$\text{Om } S_z^{(A)} = -\frac{\hbar}{2}, |\Psi\rangle = |A:\downarrow\rangle \otimes |B:\uparrow\rangle$$

$$P(S_z^B = \frac{\hbar}{2}) = 100\%$$

c) Säg att jag hade mätit  $\hat{S}_x$  för partikel A, istället för  $\hat{S}_z$

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |A:\uparrow\rangle \otimes |B:\downarrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |A:\downarrow\rangle \otimes |B:\uparrow\rangle$$

Skriv om  $|A:\uparrow\rangle$  och  $|A:\downarrow\rangle$  i termer av  $\hat{S}_x$ 's egentillstånd

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \lambda = \pm \hbar \quad |+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

Tillstånd där  $s_x$  har ett bestämt värde

$$\Rightarrow |A:\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{|A:+\rangle + |A:-\rangle}{\sqrt{2}}$$

$$|A:\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{|A:+\rangle - |A:-\rangle}{\sqrt{2}}$$

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{|A:+\rangle + |A:-\rangle}{\sqrt{2}} \right) \otimes |B:\downarrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{|A:+\rangle - |A:-\rangle}{\sqrt{2}} \right) \otimes |B:\uparrow\rangle$$

$$P(S_x^A = \frac{\hbar}{2}) = \left| \frac{1}{2} \right|^2 + \left| -\frac{1}{2} \right|^2 = \frac{1}{2}$$

$$\Rightarrow |\Psi\rangle = \frac{1}{2} |A:+\rangle \otimes |B:\downarrow\rangle - \frac{1}{2} |A:-\rangle \otimes |B:\downarrow\rangle + \frac{1}{2} |A:+\rangle \otimes |B:\uparrow\rangle - \frac{1}{2} |A:-\rangle \otimes |B:\uparrow\rangle$$

$$\Rightarrow |\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |A:+\rangle \otimes |B:\downarrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |A:+\rangle \otimes |B:\uparrow\rangle$$

$$= |A:+\rangle \otimes \frac{|B:\downarrow\rangle - |B:\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = |B:-\rangle$$

poss.  $P(S_z^{(A)} = -\frac{\hbar}{2}) = \frac{1}{2}$

$$|\Psi\rangle = |A:-\rangle \otimes \frac{|B:\uparrow\rangle + |B:\downarrow\rangle}{\sqrt{2}}$$

$$= |B:+\rangle$$

Partiklarna A och B är spinn-upp och spinn-ner längs en godtycklig axel!

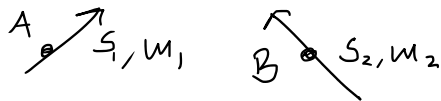
Ett "sammanflätad" tillstånd kan inte faktoriseras i produkten av ett tillstånd som beskriver A och ett tillstånd som beskriver B

$$\text{t.c.x. } |\Psi\rangle = \underbrace{\left( \sum_n \alpha_n |a_n\rangle \right)}_A \otimes \underbrace{\left( \sum_n \beta_n |a_n\rangle \right)}_B$$

Ett "separerbart" tillstånd fungerar "som vanligt", dvs att partiklarna är okopplade



1. Mätning av hela systemet



$$\hat{S}_2^{tot} = \hat{S}_2^{(A)} \otimes \hat{1}^{(B)} + \hat{1}^{(A)} \otimes \hat{S}_2^{(B)}$$

$$\left[ \hat{S}_2^{tot} = \hat{S}_2^{(A)} + \hat{S}_2^{(B)} \right] \leftarrow \text{Kom ihåg att när det skrivs på detta sätt är det egentligen såhär:}$$

$$\begin{aligned} \hat{S}_{tot}^2 &= \hat{S}_{(A)}^2 \otimes \hat{1}^{(B)} + \hat{1}^{(A)} \otimes \hat{S}_{(B)}^2 \\ &\quad + \hat{S}_x^{(A)} \otimes \hat{S}_x^{(B)} + \hat{S}_y^{(A)} \otimes \hat{S}_y^{(B)} + \hat{S}_z^{(A)} \otimes \hat{S}_z^{(B)} \end{aligned}$$

$$\left[ \hat{S}_{tot}^2 = \hat{S}_{(A)}^2 + \hat{S}_{(B)}^2 + \hat{S}^{(A)} \cdot \hat{S}^{(B)} \right]$$

$$\left[ \hat{S}_{tot}^2, S_2^{tot} \right] = 0 \quad (\text{precis som för en individuell partikel})$$

$$\left[ \hat{S}_{tot}^2, \hat{S}_{(A)}^2 \right] = \left[ \hat{S}_{tot}^2, \hat{S}_{(B)}^2 \right] = 0$$

$$\left[ \hat{S}_z^{tot}, \hat{S}_z^{(A)} \right] = \left[ \hat{S}_z^{tot}, \hat{S}_z^{(B)} \right] = 0$$

men

$$\left[ \hat{S}_{tot}^2, \hat{S}_z^{(A)} \right] \neq 0 \quad \text{gäller också för partikel B.}$$

Vi får veta exakt och samtidigt  $\hat{S}_{tot}^2, \hat{S}_z^{tot}$  samt  $\hat{S}_{(A)}^2, \hat{S}_{(B)}^2$

$$\begin{aligned} | \Psi \rangle &= \sum_{m_1=-s_1}^{-s_1} \sum_{m_2=-s_2}^{-s_2} \alpha_{m_1, m_2} |s_1, m_1\rangle \otimes |s_2, m_2\rangle \\ &= \sum_{M=-S}^S \beta |S, M\rangle \end{aligned}$$

där (stor) S är spinnkvanttalet för hela systemet  $[-S \leq M_S \leq S \text{ i heltaliga steg}]$

$$S = \{ s_1 + s_2, s_1 + s_2 - 1, s_1 + s_2 - 2, \dots, s_1 - s_2 \} \quad \text{om } s_1 \geq s_2$$

Exempel  $s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$  :  $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle,$   
 $|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$

bastillstånd

$$|S, M_S\rangle = \sum_{m_1, m_2} C_{m_1, m_2, M}^{s_1, s_2, S} |s_1, m_1\rangle \otimes |s_2, m_2\rangle, \quad M = m_1 + m_2$$

För två spinn 1/2 - partiklar,  $M = \{-1, 0, 0, 1\}$ ,

Stora S får vi från en tabell  $C_{m_1, m_2, M}^{s_1, s_2, S}$ , "Glebsch-Gordom koefficienter".

S. 179

### GLEBSCH-GORDON TABELL

	$ 0, 0\rangle_{ab}$	$ 1, 0\rangle_{ab}$	$ 1, 1\rangle_{ab}$
$ 1, -1\rangle_{ab}$	$\sqrt{\frac{1}{2}}$	$\sqrt{\frac{1}{2}}$	$1$
	$-\sqrt{\frac{1}{2}}$	$\sqrt{\frac{1}{2}}$	
$ 1, 1\rangle_{ab}$			

The top, single number, "table" says that the  $|1, 1\rangle$  net momentum state is found in terms of

$$|1, 1\rangle_{ab} = 1 \times |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle_a |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle_b$$

The second table gives the states with zero net angular momentum in the z-direction. For example, the first column of the table says that the  $|0, 0\rangle$  singlet state is found as:

$$|0, 0\rangle_{ab} = \sqrt{\frac{1}{2}} |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle_a |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle_b - \sqrt{\frac{1}{2}} |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle_a |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle_b$$

Similarly the second column gives the middle rung  $|1, 0\rangle$  on the triplet ladder. The bottom "table" gives the bottom rung of the triplet ladder.

You can also read the tables horizontally [N.29]. For example, the first row of the middle table says that the  $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle_a |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle_b$  product state equals

$$|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle_a |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle_b = \sqrt{\frac{1}{2}} |0, 0\rangle_{ab} + \sqrt{\frac{1}{2}} |1, 0\rangle_{ab}$$

Triplet-tillstånden är "symmetriska" och singlet-tillstånden är "antisymmetriska"

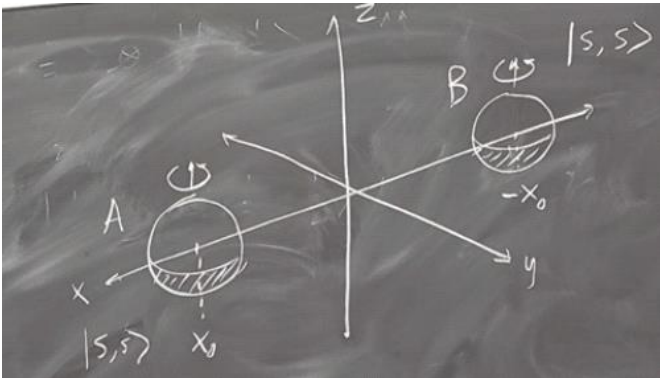
## 2. Utbytessymmetri

Om jag roterar ett system med tillståndet  $|\Psi\rangle$  blir tillståndet efter rotationen  $\hat{u}(\theta)|\Psi\rangle$ ,  
 $\hat{u}(\theta) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\theta\vec{n}\cdot\hat{\vec{J}}\right)$  rotationsoperator som beror på  $\hat{\vec{J}}$ , systemets totala rörelsemängd.

$$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}$$

$\hat{\vec{L}}$  genererar rotationer av systemets spatiella frihetsgrader

$\hat{\vec{S}}$  genererar rotationer av systemets interna frihetsgrader



$$|\Psi\rangle = |A: x_0, s\rangle \otimes |B: -x_0, s\rangle$$

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= \langle \vec{r}_1 | \otimes \langle \vec{r}_2 | |\Psi\rangle \\ &= \psi(\vec{r}_1, x_0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \psi(\vec{r}_2, -x_0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Jag ska rotera det hela systemet genom  $\theta = \pi$  omkring z-axeln.  
 (Vilket motsvarar ett "utbyte" av partiklar A, B...)

$$\begin{aligned} \hat{u}(\theta) &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\theta\hat{\vec{J}}_z\right), \quad \hat{\vec{J}}_z = \hat{L}_z^{(A)} \otimes \hat{1}^{(B)} + \hat{1}^{(A)} \otimes \hat{L}_z^{(B)} + \\ &\quad + \hat{S}_z^{(A)} \otimes \hat{1}^{(B)} + \hat{1}^{(A)} \otimes \hat{S}_z^{(B)} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \hat{u}(\theta) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\theta\hat{L}_z^{(A)}\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\theta\hat{S}_z^{(A)}\right) \otimes \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\theta\hat{L}_z^{(B)}\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\theta\hat{S}_z^{(B)}\right)$$

$$\hat{u}(\pi)|\Psi\rangle = \underbrace{\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\pi s\hbar\right)}_{(-1)^s} |A: -x_0, s\rangle \otimes \underbrace{\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\pi s\hbar\right)}_{(-1)^s} |B: x_0, s\rangle$$

$$= (-1)^{2s} |A: -x_0, s\rangle \otimes |B: x_0, s\rangle$$

Om partiklar A och B är "ourskiljbara" ("identiska")...

$$= (-1)^{2s} |A: x_0, s\rangle \otimes |B: -x_0, s\rangle = (-1)^{2s} |\Psi\rangle$$

om  $s = 0, 1, 2, 3, \dots$   $\hat{u}|\Psi\rangle = |\Psi\rangle$  ett utbyte förändrar inte tillståndet

om  $s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$   $\hat{U}|\Psi\rangle = -|\Psi\rangle$  ett utbyte byter tillståndets tecken

**Utbytessymmetri:** Ett utbyte av två partiklar i ett system som består av N ouskiljbara partiklar med spinnkvanttalet  $s$  inför en faktor  $(-1)^{2s}$ .

eller Ett tillstånd som beskriver **fermioner** (partiklar med halvtaliga spinn) är antisymmetriskt vid utbyte.  
Ett tillstånd som beskriver **bosoner** (partiklar med heltaliga spinn) är symmetriskt vid utbyte.

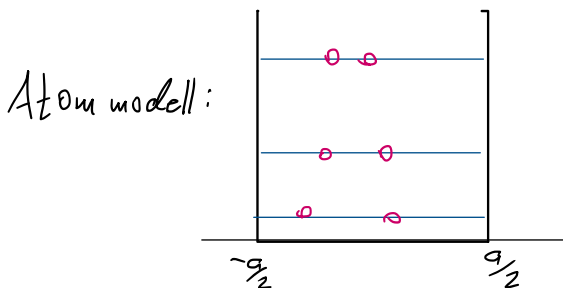
Vad har det för konsekvenser?

om  $s_0 = 0$ ,  $|\Psi\rangle = |A: 0, s\rangle \otimes |B: 0, s\rangle$   
 $\hat{U}|\Psi\rangle = (-1)^{2s}|\Psi\rangle = |\Psi\rangle$

om  $s$  är ett heltal  $|\Psi\rangle = -|\Psi\rangle \Rightarrow$  Det är förbjudet

**Uteslutningsprincipen:** Det är förbjudet att två fermioner (ouskiljbara) har samma kvanttillstånd (eller, har samma mängd kvanttal.)

Att det är förbjudet att två elektroner ockuperar samma tillstånd, betyder att ...

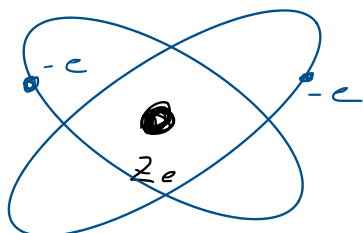


$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2m a^2}$$

atomiskt struktur finns, att neutronstjärning inte kollapsar till svarta hål, osv...

### 3. Helium

Består av två elektroner som är bundna till en kärna med två protoner.



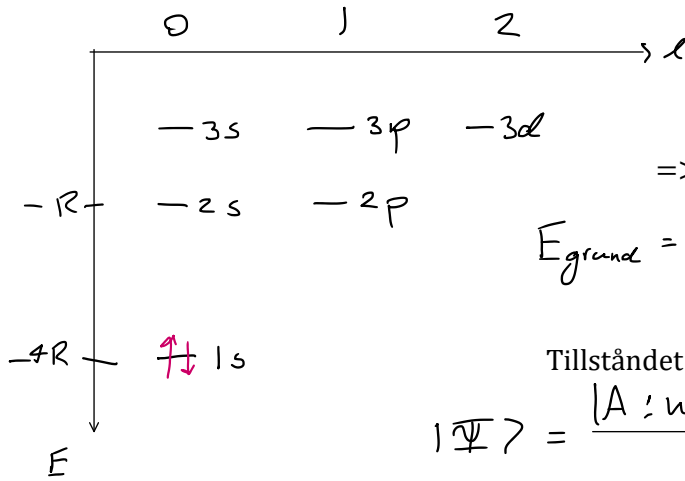
$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 \hat{r}_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 \hat{r}_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\hat{r}_1 - \hat{r}_2|}$$

~~$e^2$~~   
e-e repulsion

Börja med att försumma repulsionen så att Hamiltonianen är separerbar.

$$E_n = \frac{Z^2 \hbar^2}{2m a_0^2 n^2}, \quad n \in \{1, 2, 3, \dots\}, \quad a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{2m e^2} \quad (\text{Bohr radien})$$

$$= -\frac{4R}{n^2} \quad \text{om } Z = 2$$



$\Rightarrow$  Heliums grundtillstånds energi är

$$E_{\text{grund}} = (-4R) + (-4R) = -8R = -109 \text{ eV}$$

Tillståndet är

$$|\Psi\rangle = \frac{|A: n=1, l=0, m_s = \frac{1}{2}\rangle \otimes |B: n=1, l=0, m_s = -\frac{1}{2}\rangle}{\sqrt{2}}$$

$$= -\frac{|A: n=1, l=0, m_s = -\frac{1}{2}\rangle \otimes |B: n=1, l=0, m_s = \frac{1}{2}\rangle}{\sqrt{2}}$$

$$= |A: n=1, l=0\rangle \otimes |B: n=1, l=0\rangle \otimes \frac{|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}$$

$$= |0, 0\rangle$$

Normet blir " $1s^2$ " eller  ${}^{2s+1}L_3 = {}^1S_0 \leftarrow$  Singlet helium

1. Problemet med helium

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\hat{r}_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\hat{r}_2} + \frac{e^2}{4\pi|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

$e-e$   
repulsion

Försumma repulsionen  $\Rightarrow \hat{H}$  är separerbar

Grundtillståndets energi

Repulsionen betyder att TISE inte kan lösas analytiskt!

Vi ska gissa (försiktigt)

2. Variationsmetoden

$\hat{H}$  har okända energiegenvärden och egentillstånd,  $E_n$  och  $|E_n\rangle$ .

Ta något tillstånd  $|\psi\rangle$  och bestäm väntevärdet  $\langle E \rangle = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle$

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_n \alpha_n |E_n\rangle \Rightarrow \langle E \rangle = \left( \sum_m \alpha_m^* \langle E_m| \right) \hat{H} \left( \sum_n \alpha_n |E_n\rangle \right) \\ &= \sum_m \sum_n \alpha_m^* \alpha_n E_n \langle E_m | E_n \rangle \\ &= \sum_n |\alpha_n|^2 E_n \\ \text{Alla } E_n &\geq E_0 \rightarrow \geq \sum_n |\alpha_n|^2 E_0 \\ &\geq E_0 \end{aligned}$$

$\Rightarrow \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle$  är en "övre begränsning" av  $E_0$ !

Grundtillståndet är tillståndet som minimerar  $\langle E \rangle$ .

Variationsmetoden:

1. Gissa något lämpligt tillstånd, som beror på minst en fri parameter.
2. Beräkna  $\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle$
3. Minimera  $\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle$  med avseende på de fria parametrarna

### 3. Grundtillståndets energi

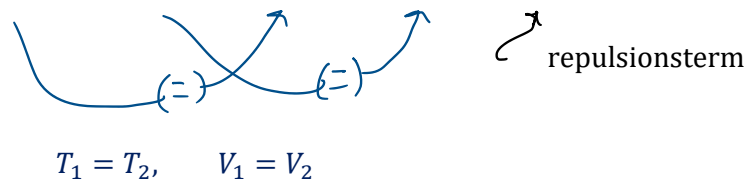
$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\hat{r}_1 - \hat{r}_2|}$$

Utan repetition  $|\Psi\rangle = |n=1, \ell=0\rangle \otimes |n=1, \ell=0\rangle \otimes |0,0\rangle$

$$\langle \hat{r}_1 | \otimes \langle \hat{r}_2 | \Psi \rangle = \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{Z^{*3}}{\pi a_0^2} \exp\left[-\frac{Z^*(r_1 + r_2)}{a_0}\right]$$

Jag tar  $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  som "ansatsvågfunktion" med  $Z^*$  som fri parameter

Beräkna  $\langle T_1 \rangle, \langle V_1 \rangle, \langle T_2 \rangle, \langle V_2 \rangle, \langle V_{ee} \rangle$



$$\langle T_1 \rangle = \langle \Psi | \frac{\hat{p}_1^2}{2m} | \Psi \rangle$$

$$= \frac{Z^{*6}}{\pi^2 a_0^6} \int d^3\vec{r}_1 \exp\left(-\frac{Z^* r_1}{a_0}\right) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial}{\partial r_1} + \frac{1}{r_1} \right) \right] \exp\left(-\frac{Z^* r_1}{a_0}\right)$$

$$\downarrow \quad \downarrow$$

$$\frac{Z^{*3}}{\pi^2 a_0^3} \int 4\pi r_1^2 dr_1 \exp\left(-\frac{Z^* r_1}{a_0}\right) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial}{\partial r_1} + \frac{1}{r_1} \right) \right] \exp\left(-\frac{Z^* r_1}{a_0}\right)$$

$$= Z^{*2} R$$

$$\langle V_1 \rangle = \frac{Z^{*3}}{\pi a_0^3} \int d^3\vec{r}_1 \exp\left(-\frac{Z^* r_1}{a_0}\right) \left( -\frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right) \exp\left(-\frac{Z^* r_1}{a_0}\right) =$$

$$= -2Z^* R$$

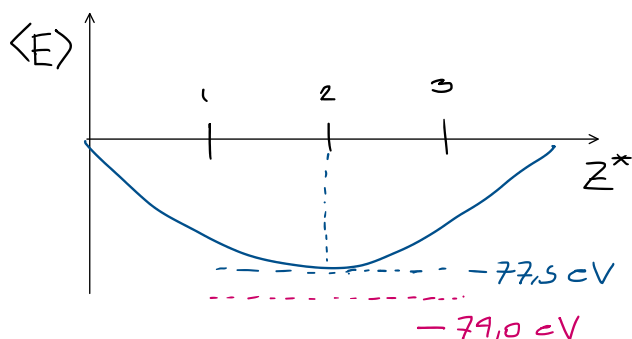
$$\langle V_{ee} \rangle = \frac{Z^{*6}}{4\pi^2 a_0^6} \int d^3\vec{r}_1 \int d^3\vec{r}_2 \exp\left(-\frac{Z^*(r_1+r_2)}{a_0}\right) \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_1-\vec{r}_2|} \exp\left(-\frac{Z^*(\vec{r}_1+\vec{r}_2)}{a_0}\right)$$

$$= \frac{5}{4} Z^* R$$

$$\langle E \rangle = 2 Z^{*2} R - 4 Z Z^* R + \frac{5}{4} Z^* R$$

Om  $Z = 2$ :

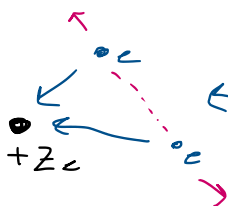
$$\langle E \rangle = \left[ 2 Z^{*2} - \frac{27}{4} Z^* \right] R$$



$\langle E \rangle$  är minimerad när  
 $Z^* = \frac{27}{16} = 1,69$

$\Rightarrow \langle E \rangle = -77,5 \text{ eV}$

[I verklighet,  $-79,0 \text{ eV}$ ]

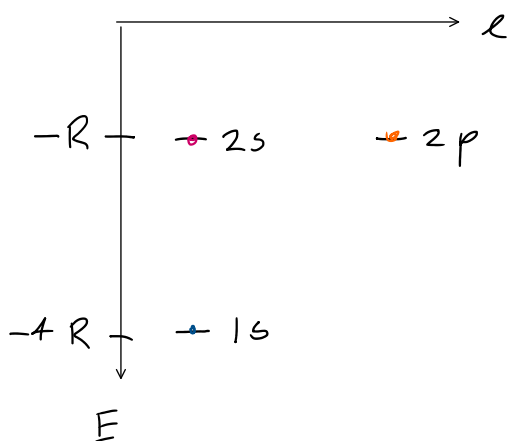


$Z^*$  kan tolkas som kärnans "effektiva" laddning  $< 2$

elektronerna attraheras till kärnan, men repellerar också varandra

#### 4. Exciterade tillstånd

Hej!



Två möjliga exciterade tillstånd: 1s2s, 1s2p

••••

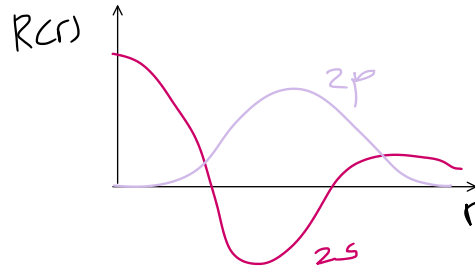
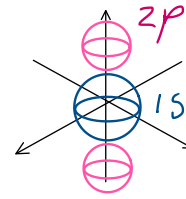
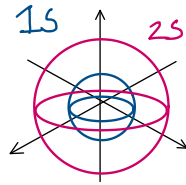
1. Vilket tillstånd har högst energi?

(Utan repulsionstermen har både 1s2s och 1s2p samma energi:  $-5R$ )





F



Denna har  
högst energi  
pga "skärning"

(1s 2s)

Elektroner har olika huvudkvanttal => De kan ha olika  $m_s$ !

$$S = 0 \text{ (singlet)} : \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{\langle \vec{r}_1 | 1, 0 \rangle \langle \vec{r}_2 | 2, 0 \rangle + \langle \vec{r}_1 | 2, 0 \rangle \langle \vec{r}_2 | 1, 0 \rangle}{\sqrt{2}}$$

$$S = 1 \text{ (triplet)} : \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{\langle \vec{r}_1 | 1, 0 \rangle \langle \vec{r}_2 | 2, 0 \rangle - \langle \vec{r}_1 | 2, 0 \rangle \langle \vec{r}_2 | 1, 0 \rangle}{\sqrt{2}}$$

Vilket tillstånd har högre energi?

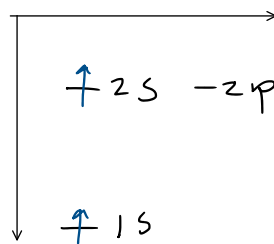
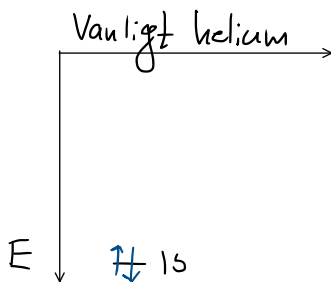
Svar: repulsionen är lägre för ett singlet tillstånd än för ett triplet tillstånd. Alltså har triplet tillståndet högst energi.

Vilket tillstånd är mer stabilt, 1s2s eller 1s2p?

Svar: 1s2s

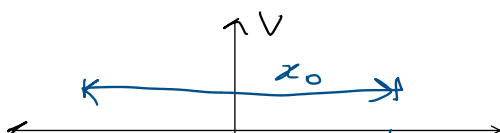
1s2p - 2ms

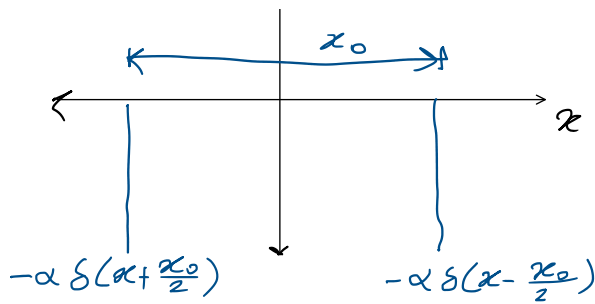
1s2s - 2 binner (metastabil) He



Hur skapas interatomära bindningar?

### 5. Interatomär bindningar





$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \alpha \delta(x - \frac{x_0}{2}) - \alpha \delta(x + \frac{x_0}{2})$$

$V(x) = V(-x) \Rightarrow [\hat{H}, \hat{\Pi}] = 0 \Rightarrow \psi(x)$  är jämn eller udda

$$|x| < \frac{x_0}{2} : \psi(x) = \begin{cases} A \cosh(kx) & \text{jämn} \\ B \sinh(kx) & \text{udda} \end{cases}$$

$$x > \frac{x_0}{2} : \psi(x) = \begin{cases} C \exp(-kx) & \text{jämn} \\ D \exp(-kx) & \text{udda} \end{cases}$$

$$x < -\frac{x_0}{2} : \psi(x) = \begin{cases} C \exp(kx) & \text{jämn} \\ -D \exp(kx) & \text{udda} \end{cases}$$

$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = E \psi \Rightarrow$  jag söker  $E < 0$  s.a. tillståndet är bundet.

$x = \frac{x_0}{2} :$  Vågfunktionen är kontinuerlig ✓

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{\frac{x_0}{2}-\epsilon}^{\frac{x_0}{2}+\epsilon} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} dx - \alpha \int_{\frac{x_0}{2}-\epsilon}^{\frac{x_0}{2}+\epsilon} \delta(x - \frac{x_0}{2}) dx = 0$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \left. \frac{\partial \psi}{\partial x} \right|_{-\epsilon}^{\epsilon} = \alpha \psi(x = \frac{x_0}{2})$$

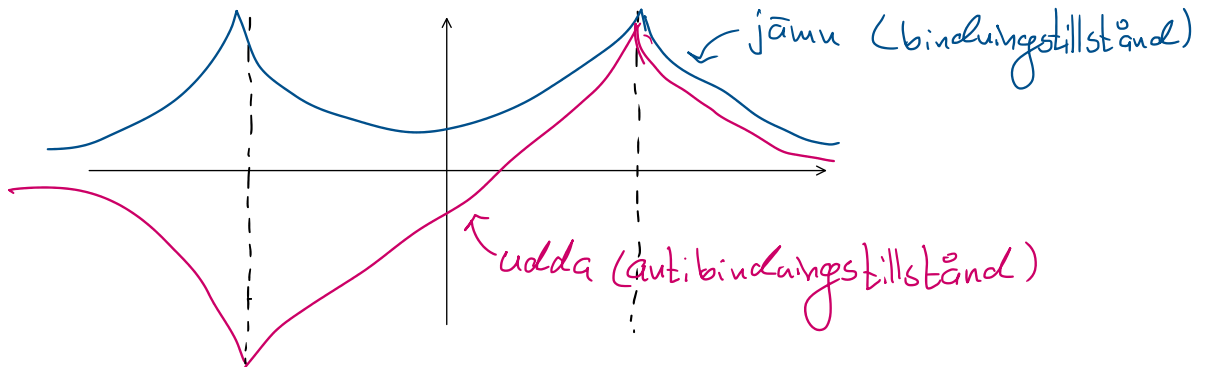
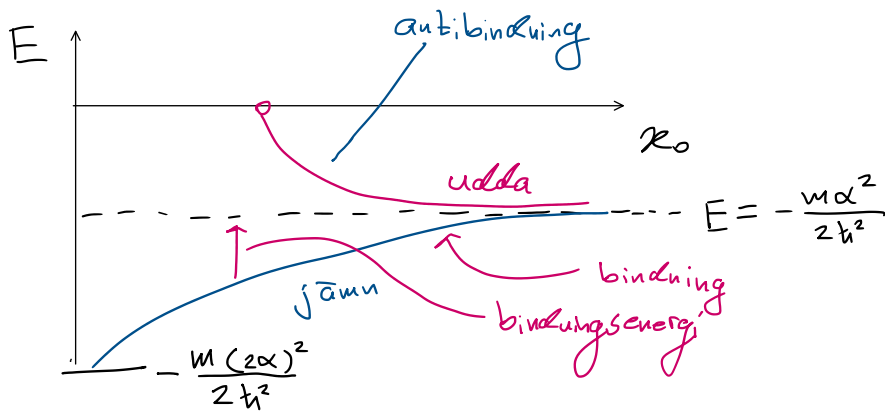
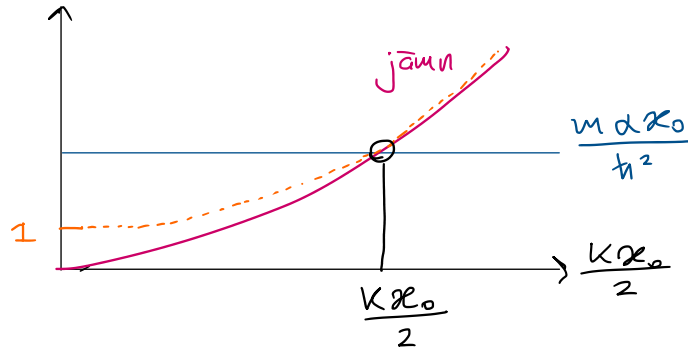
men första derivatan är okontinuerlig

$$\dots \frac{\hbar^2 k x_0}{2} (1 + \dots) = \frac{m \alpha x_0}{2}$$

jämn:

$$\frac{k\alpha_0}{2} \left(1 + \tanh \frac{k\alpha_0}{2}\right) = \frac{m\alpha\alpha_0}{\hbar^2}$$

$$\frac{k\alpha_0}{2} \left(1 + \coth \frac{k\alpha_0}{2}\right) = \frac{m\alpha\alpha_0}{\hbar^2}, \quad k = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$$



1. Vilket tillstånd har lägre  $\langle V \rangle$ ?

Svar: Det udda

2. Vilket tillstånd har lägre  $\langle T \rangle$ ?

Svar: Det jämna

Det finns ett kvantmekansikt bidrag till alla kovalenta bindningar (där elektronen är delad mellan alla atomer) som ursprungar ifrån osäkerhetsprincipen