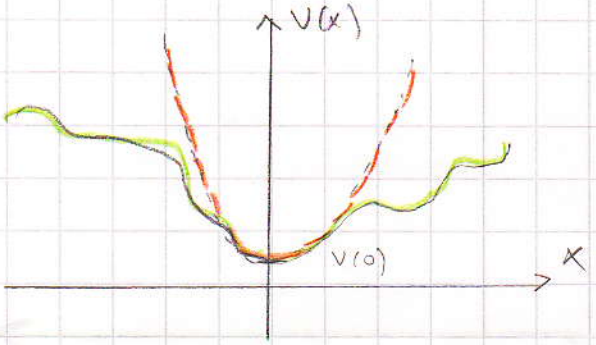
3.4 Harmooninen värähtelijä

1-ul harmooninen värähtelijä $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$



Harmoonisen värähtelijän avulla voi usein laskea lokaalin approksimaatio monimutkaiselle spektrille

$$V(x) = V(0) + \underbrace{V'(0)}_{=0} + \frac{1}{2}V''(0)x^2 + \dots$$

tutkitaan $\boxed{V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2}$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

SSY $$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi(x) = E\psi(x)}$$

valitaan muunnos $x = by$ missä $b^2 = \frac{\hbar}{m\omega}$

lisäksi merkitään $\varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}$

ja $\psi(x) = \psi(by) = N\phi(y)$

Demot $\longrightarrow$ $$\boxed{\frac{d^2\phi}{dy^2} + (\varepsilon - y^2)\phi = 0}$$

Yrite $\phi(y) = f(y)\, e^{-\frac{1}{2}y^2}$ demot

$\longrightarrow$ $$f''(y) - 2y f'(y) + (\varepsilon - 1) f(y) = 0 \qquad (*)$$

Tämä ratkaistaan Frobeniuksen menetelmällä

$$f = y^s \sum_n^\infty a_n y^n \qquad a_0 \neq 0$$

laske f' ja f'' ja sij. DYn

ja saat palautuskaavan

$$(s+n+2)(s+n+1)a_{n+2} = (2s+2n+1-\varepsilon)a_n \qquad (*)$$

Huomaa että $e^{y^2} = \sum \frac{(y^2)^n}{n!}$

tälle pätee $\frac{a_{n+2}}{n} \xrightarrow{n\to\infty} \frac{2}{n}$ ihan niin kuin palautuskaavalle (HT)

tästä voidaan päätellä että $f(y)$ ja $\phi(y)$ hajoavat (HT)

Tämä hajoaminen kuitenkin estyy jos sarja ⊛ katkeaa jollain n.

sij: $s=0$ ⟶ palautuskaavaan

ja päätelle $\Rightarrow$ $\underline{E = 2n+1 \quad n=0,1,2\ldots}$ ja

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

$$\boxed{E = \hbar\omega\left(n+\tfrac{1}{2}\right) \quad n=0,1,2\ldots}$$

sij E (★):n $\rightarrow$ $f''(y) - 2yf'(y) + 2nf(y) = 0$

Tällaisen yhtälön ratkaisut ovat <u>Hermiten</u> polynomeja (ks. joku taulukko)

$$\rightarrow \quad \boxed{\psi(x) = N H_n(y)\, e^{-\frac{1}{2}y^2}, \qquad y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x}$$

$$\begin{cases} H_n^{(+)} = a_0 + a_2y^2 + a_4y^4 + \ldots + a_ny^n & n = \text{parillinen} \\ H_n^{(-)} = a_1y + a_3y^3 + a_5y^5 + \ldots + a_ny^n & n = \text{pariton} \end{cases}$$

<u>siis</u> valitsemalla $a_n = 2^n$ (tapana valita näin)

$H_n^{(+)}(y)$	$H_n^{(-)}(y)$
$H_0 = 1$	$H_1 = 2y$
$H_2 = -2 + 4y^2$	$H_3 = -12y + 8y^3$
$H_4 = 12 - 48y^2 + 16y^4$	$H_5 = 120y - 160y^3 + 32y^5$
$\vdots$	$\vdots$

Normitus $\int dx\, \psi_N^* \psi_M = \delta_{NM}$

$$|N|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx\; H_N^*\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x\right) H_M\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x\right) e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} = 1$$

$$|N|^2 \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dy\; H_N^*(y)\, H_M(y)\, e^{-y^2}}_{2^n \sqrt{\pi}\, n!\, \delta_{NM}} = 1$$

$\leftarrow$ (ei osoiteta jätetään harrastuksen varaan)

valitaan $N \in \mathbb{R}$

$$N = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}$$

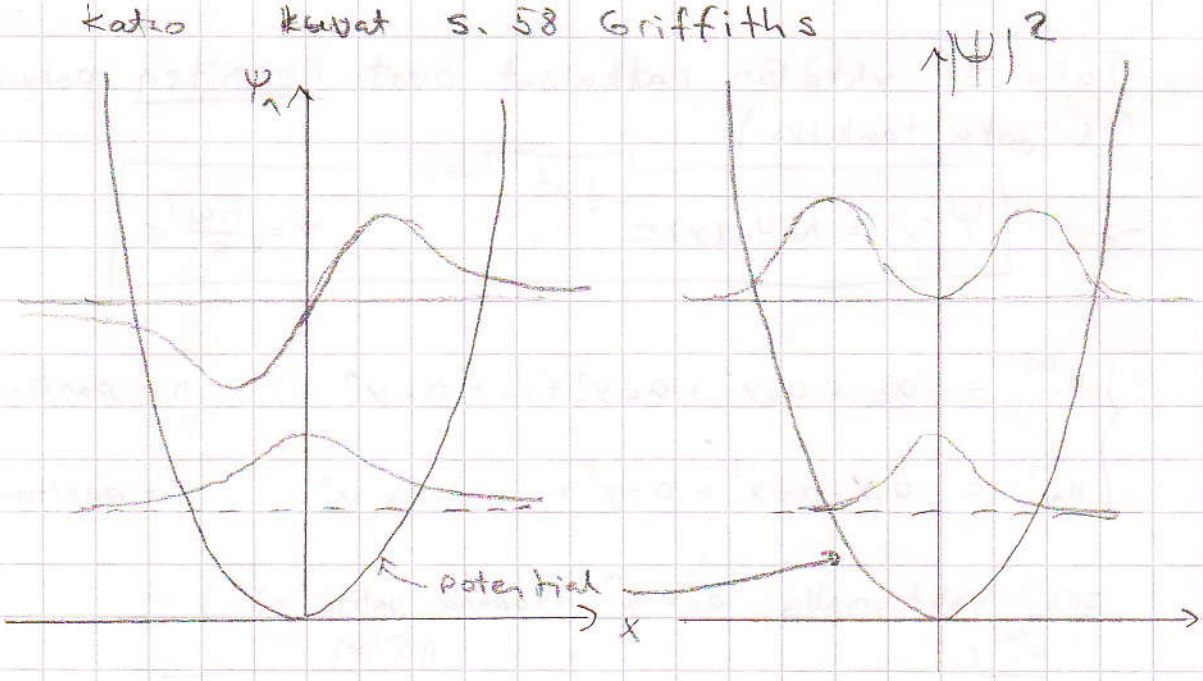
Tulokset:

$$\boxed{\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x\right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}}$$

ja

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \tfrac{1}{2}\right) \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$

katso kuvat s. 58 Griffiths



4.0 Diracin merkintä

$$\psi_a(\bar{x}) = \underbrace{|\psi_a\rangle = |a\rangle}$$

Dirac, usein merkitään vain kvantiluvut näkyviin, kutsutaan tilavektoreiksi

$$\psi_a^*(\bar{x}) = \langle\psi_a| = \langle a|$$

Nimet: $\langle\psi_a|$ on bra
$|\psi_a\rangle$ on ket

bra(c)ket

* sisätulo: $\int d^3x\, \psi_b^*(\bar{x})\, \psi_a(\bar{x}) = \langle b|a\rangle$

* Olkoon $|\psi_1\rangle$ ja $|\psi_2\rangle$ tilavektoreita:

→ uusia tiloja saa superpositiolla $|\psi\rangle = c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle$

mm seuraavat pätevät:

a) $\langle\psi_1|\psi_2\rangle^* = \langle\psi_2|\psi_1\rangle$

b) $\langle\phi_1|(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) = c_1\langle\phi_1|\psi_1\rangle + c_2\langle\phi_1|\psi_2\rangle$
(lineaarisuus)

c) $\langle\psi|\psi\rangle = |\psi|^2 \geq 0 \qquad |\psi| = \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}$

* Valitaan tilat niin, että $\boxed{\langle\psi|\psi\rangle = 1}$ Normitus

Ominais arvo: $A|\psi\rangle = a|\psi\rangle$
$\langle\psi|A^\dagger = a\langle\psi|$

Muista

#P2 Observaabelin A operaattorille $A = A^{+}$ (hermiittisyys)

Jos $|\psi\rangle = \sum_n c_n |a_n\rangle$, $\hat{A}|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle$

$$\langle A\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle = \sum_{mn} c_m^* c_n \langle a_m|\underbrace{\hat{A}|a_n\rangle}_{a_n|a_n\rangle}$$

$$= \sum_{mn} c_m^* c_n a_n \underbrace{\langle a_m|a_n\rangle}_{\delta_{mn}} = \sum_n |c_n|^2 a_n$$

Normitus: $\sum |c_n|^2 = 1$ todennäköisyystulkinta säilyy #P4

4.1 Diracin merkinnän yhteys aaltoesitykseen

$$\boxed{\psi(\bar{x}) = \langle \bar{x}|\psi\rangle}$$

aaltomekaniikka on kvanttimekaniikkaa $\bar{x}$ esityksessä

4.2 Yksikköoperaattori $\hat{\mathbb{1}}$

$\mathbb{1}|\psi\rangle = |\psi\rangle$, $|\psi\rangle = \sum_n c_n|a_n\rangle$, $c_n = \langle a_n|\psi\rangle$

Nyt: $1 = \langle\psi|\psi\rangle = \sum_n |c_n|^2 = \sum_n \langle a_n|\psi\rangle^* \langle a_n|\psi\rangle$

$$= \sum_n \langle\psi|a_n\rangle\langle a_n|\psi\rangle = \langle\psi|\underbrace{\left(\sum_n |a_n\rangle\langle a_n|\right)}_{\hat{\mathbb{1}}}|\psi\rangle$$

siis $\boxed{\mathbb{1} = \sum_n |a_n\rangle\langle a_n|}$ (nk. täydellisyysrelaatio)

käy läpi kaikki omin tilat

$$\langle\psi|A|\phi\rangle = \sum_{nm} \langle\psi|a_n\rangle\langle a_n|\underbrace{A|a_m\rangle}_{a_m}\langle a_m|\phi\rangle$$

$$= \sum_{nm} \langle\psi|a_n\rangle a_m \underbrace{\langle a_n|a_m\rangle}_{\delta_{n,m}} \langle a_m|\phi\rangle$$

eli $\langle\psi|A|\phi\rangle = \sum_n \langle\psi|a_n\rangle a_n \langle a_n|\phi\rangle$

$$= \langle\psi|\underbrace{\left(\sum_n |a_n\rangle a_n \langle a_n|\right)}_{\hat{A}}|\phi\rangle$$

Nk. spektriesitys $\boxed{\hat{A} = \sum_n |a_n\rangle a_n \langle a_n|}$, kun $\hat{A}|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle$
(diskreetti spektri)

5.0 Matriisiesitys

Silloin jos observaabelilla on tiloja äärellinen määrä N voi kvanttimekaniikan operaattorit esittää $N\times N$ matriiseina ja tilavektorit $N\times 1$ vektoreina.

Matriisit:

* $N\times N$ matriisi $\mathbb{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \dots & A_{1N} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \dots & A_{2N} \\ \vdots & & & \vdots \\ A_{N1} & \dots & \dots & A_{NN} \end{pmatrix}$

A_{ij} = matriisielementti

* $\mathbb{A}\mathbb{B} = \mathbb{C}$ c:n matriisielementit $\boxed{c_{ij} = \sum_{k=1}^{n} a_{ik} b_{kj}}$

* $\mathbb{A}\mathbb{B} \neq \mathbb{B}\mathbb{A}$ yleensä

* Yksikkömatriisi $\mathbb{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathrm{diag}(1, 1, \dots, 1)$

eli alkiot δ_{ij}

* käänteismatriisi $\mathbb{A}^{-1}\mathbb{A} = \mathbb{A}\mathbb{A}^{-1}$

* kompleksikonjugaatti $\mathbb{A}^* = \begin{pmatrix} a_{11}^* & \dots & a_{1N}^* \\ \vdots & & \\ a_{N1}^* & \dots & a_{NN}^* \end{pmatrix}$, $(a_{ij}^*) = (a_{ij})^*$

* Hermiittinen matriisi $\boxed{\mathbb{A}^\dagger = \mathbb{A}}$ $a_{ij} = a_{ji}^*$

* Unitaarinen matriisi $A^{\dagger} = A^{-1}$

* Transpoosi $\mathbb{A}^T = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{21} & \dots & a_{n1} \\ \vdots & & & \\ a_{1n} & \dots & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}$ $\left(\text{eli } A^{\dagger} = (A^*)^T \right)$

* vektori $= N \times 1$ matriisi $\mathbb{d} = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_N \end{pmatrix}$

$$\underbrace{|\mathbb{d}|^2}_{\text{luku}} = \underset{1\times N}{\mathbb{d}^{\dagger}} \underset{N\times 1}{\mathbb{d}} = (\mathbb{d}^T)^* \mathbb{d} = (d_1^*, d_2^*, \dots d_N) \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_N \end{pmatrix}$$

$$= \sum_{i=1}^{N} d_i^* d_i = \sum_{i=1}^{N} |d_i|^2 \geq 0$$

* $\underset{\text{matriisi}}{\mathbb{A}} \underset{\text{vektori}}{\mathbb{b}} = \mathbb{d}$ $\quad d_i = \sum_{k=1}^{N} a_{ik} b_k$

* Matriisin jälki "trace" → TR

$$TR(\mathbb{A}) = a_{11} + a_{22} + \dots + a_{nn}$$

* Matriisin <u>ominaisarvot ja ominaisvektorit</u>

$$\underbrace{\mathbb{A}}_{N\times N} \underbrace{\mathbb{d}}_{N\times 1} = \underbrace{\lambda}_{\text{luku}} \underbrace{\mathbb{d}}_{N\times 1}$$

$\lambda = \mathbb{A}$:n ominaisarvo
$\mathbb{d}$ on $\mathbb{A}$:n ominaisvektori

$(\mathbb{A} - \lambda \mathbb{1})\mathbb{d} = 0$ N:n yhtälön yhtälöryhmä jolla ei triv. ratk. jos $\det(A - \lambda \mathbb{1}) = 0$

- - - - - - - - - - - - - - - - - -

5.1 Operaattorin matriisiesitys

Observaabeli A, operaattori $\hat{A}$, olkoon $\hat{A}|\psi\rangle = |\phi\rangle$

$$\underset{\uparrow \mathbb{1}}{\hat{A}}\,|\psi\rangle = \underset{\uparrow \mathbb{1}}{|\phi\rangle}$$

$$\sum_n^N \hat{A}|n\rangle\langle n|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\phi\rangle \qquad |\cdot\langle m| \rightarrow$$

$$\sum_n^N \langle m|\hat{A}|n\rangle\langle n|\psi\rangle = \sum_n \underbrace{\langle m|n\rangle}_{\delta_{mn}}\langle n|\phi\rangle$$

$$\sum_n^N \langle m|\hat{A}|n\rangle\langle n|\psi\rangle = \langle m|\phi\rangle$$

Merk.
$$\langle m|\hat{A}|n\rangle = A_{mn}$$
$$\langle n|\psi\rangle = \alpha_n$$
$$\langle m|\phi\rangle = \beta_m$$

$$\sum_n^N A_{mn}\alpha_n = \beta_m$$

Matriisien ketolaskua!

$$\boxed{\underset{\text{matriisi}}{\mathbb{A}}\,\underset{\text{vektori}}{\boldsymbol{\alpha}} = \mathbb{B}}$$

$$\mathbb{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & \cdots & A_{1N} \\ \vdots & & \vdots \\ A_{N1} & \cdots & A_{NN} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle 1|A|1\rangle & \cdots & \langle 1|\hat{A}|N\rangle \\ \vdots & & \vdots \\ \langle N|\hat{A}|1\rangle & \cdots & \langle N|\hat{A}|N\rangle \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle 1|\psi\rangle \\ \vdots \\ \langle N|\psi\rangle \end{pmatrix} \quad \text{ja} \quad \mathbb{B} = \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle 1|\phi\rangle \\ \vdots \\ \langle N|\phi\rangle \end{pmatrix}$$

Siis operaattorin $\hat{A}$ matriisielementti kannassa $\{|n\rangle\}$ on $A_{nm} = \langle n|\hat{A}|m\rangle$. $\mathbb{A}$ on $\hat{A}$:n matriisiesitys tässä kannassa

n-esityksen aaltofunktioiden arvot $\langle n|\psi\rangle$ ovat N-dimensioisten vektoreiden komponentteja

Voidaan siis samaistaa

$$|\psi\rangle = \mathbb{1}|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle \underbrace{\langle n|\psi\rangle}_{c_n} = c_1|1\rangle + c_2|2\rangle + \dots + c_n|n\rangle$$

$$= c_1\begin{pmatrix}1\\0\\\vdots\\0\end{pmatrix} + c_2\begin{pmatrix}0\\1\\0\\\vdots\\0\end{pmatrix} + \dots + c_n\begin{pmatrix}0\\\vdots\\0\\1\end{pmatrix}$$

eli $|1\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\\\vdots\\0\end{pmatrix}$ $|2\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\\0\\\vdots\\0\end{pmatrix}$ .... $|n\rangle = \begin{pmatrix}0\\0\\\vdots\\n\end{pmatrix}$

$$\hat{A} = \mathbb{A}$$

$$|\psi\rangle = \mathbb{a} = \begin{pmatrix}\langle 1|\psi\rangle\\\vdots\\\langle N|\psi\rangle\end{pmatrix}$$

* Operaattorin $\hat{A}$ esitys kannassa $|n\rangle$?

$$\underline{\hat{A} = \mathbb{1}\hat{A}\mathbb{1} = \sum_{nm} |n\rangle A_{nm}\langle m|}$$

5.1.1 Ominaisarvot

$$\hat{A}|n\rangle = a_n|n\rangle \quad |\cdot\langle m|$$

$$\langle m|\hat{A}|n\rangle = a_n \underbrace{\langle m|n\rangle}_{\delta_{mn}}$$

eli $A_{mn} = \delta_{mn}a$ eli $\mathbb{A} = \begin{pmatrix}a_1 & 0 & & 0\\0 & a_2 & & \vdots\\\vdots & & \ddots & \\0 & \dots & & a_N\end{pmatrix}$

Jos $\hat{A}$:n esitys $|n\rangle$ kannassa tunnettu. Omin arvot?

$A_{nm} = \langle n|\hat{A}|m\rangle$ tunnettu

halutaan $\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle \quad | \cdot \langle n| \rightarrow$

$\mathbb{1}$

$$\sum_m \underbrace{\langle n|\hat{A}|m\rangle}_{A_{nm}} \underbrace{\langle m|a\rangle}_{d_m} = a \underbrace{\langle n|a\rangle}_{d_n}$$

$$\sum_m A_{nm} d_m = a \, d_n$$

$$\sum_m \left(A_{nm} d_m - a \delta_{nm} d_n\right) = 0$$

$$\boxed{\sum_m \left(A_{nm} - a\delta_{nm}\right) d_n = 0}$$

$$\boxed{(A - a\mathbb{1})\mathbf{d} = 0}$$

N yhtälön yhtälöryhmä jolla ei-triv. ratk. vain jos

$$(\star) \quad \boxed{\det(A - a\mathbb{1}) = 0}$$

$\hat{A}$:n ominaisarvot ovat A:n ominaisarvot

$\hat{A}$:n omin vekt. ovat A:n omin. vekt.

Ominaisarvot saadaan $(\star)$:stä. Jos useita samoja juuria niin k-kertainen juuri $\rightarrow$ <u>k-kertain degeneraatio</u>

Esimerkkejä demoissa.

6.0 Yleinen epämääräisyysperiaate

Tutkitaan $\boxed{[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C} \neq 0}$ (Tässä tarkastellaan observaabeleita vastaavia operaattoreita $\leftrightarrow A = A^{\dagger}$)

Johdetaan yleinen epämääräisyysperiaate $\boxed{(\Delta A)(\Delta B) \geq \frac{1}{2}|\langle C\rangle|}$

Merk.: $\hat{A}' = \hat{A} - \langle\hat{A}\rangle$
$\hat{B}' = \hat{B} - \langle\hat{B}\rangle$

$$(\Delta A)^2 = \langle\psi|(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle)^2|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}'\hat{A}'|\psi\rangle = \langle\hat{A}'^{\dagger}\psi|\hat{A}'\psi\rangle$$

$$\overset{\text{Hermiittisyys}}{=} \langle\hat{A}'\psi|\hat{A}'\psi\rangle = |\hat{A}'\psi|^2$$

Samoin: $(\Delta B)^2 = |B'\psi|^2$

$$(\Delta A)^2(\Delta B)^2 = |\hat{A}'\psi|^2|B'\psi|^2 \geq \langle\psi|\hat{A}'\hat{B}'|\psi\rangle$$

schwarzin epäyhtälö $|\psi|^2|\phi|^2 \geq |\langle\psi|\phi\rangle|^2$

Eli $\hat{A}'\hat{B}' = \frac{1}{2}\underbrace{(\hat{A}'B' + \hat{B}'\hat{A}')}_{\hat{n}\text{ (hermiitinen)}} + \frac{1}{2}\underbrace{(\hat{A}'\hat{B}' - \hat{B}'\hat{A}')}_{[\hat{A}', \hat{B}'] \underset{\text{TSI}}{=} [\hat{A}, \hat{B}] = iC}$

$$\hat{A}'\hat{B}' = \tfrac{1}{2}\hat{n} + [\hat{A}, \hat{B}]$$

eli $(\Delta A)^2(\Delta B)^2 \geq |\langle\psi|(\frac{1}{2}n + \frac{i}{2}\hat{C})|\psi\rangle|^2$

$$= \frac{1}{4}|\langle\psi|\hat{n}|\psi\rangle + i\langle\psi|\hat{C}|\psi\rangle|^2 = \frac{1}{4}|\langle\hat{n}\rangle + i\langle\hat{C}\rangle|^2$$

$\hat{n}^{\dagger} = \hat{n}$, $\hat{C}^{\dagger} = \hat{C}$ eli $\langle\hat{n}\rangle \in \mathbb{R}$, $\langle\hat{C}\rangle \in \mathbb{R}$

eli

$$(\Delta A)^2(\Delta B)^2 \geq \frac{1}{4}(\underbrace{\langle\hat{n}\rangle^2}_{\geq 0} + \langle\hat{C}\rangle^2) \geq \frac{1}{4}\langle\hat{C}\rangle^2$$

eli $\boxed{(\Delta A)(\Delta B) \geq \frac{1}{2}|\langle C\rangle|}$

6.1 Heisenbergin epämääräisyysperiaate

P#5 $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$

$$\boxed{(\Delta x)(\Delta p) \geq \hbar/2}$$

Hiukkasen paikkaa ja liikemäärää ei samanaikaisesti voi mitata mielivaltaisen tarkasti

6.2 Energian ja ajan epämääräisyys

$$\boxed{(\Delta t)(\Delta E) \geq \tfrac{1}{2}\hbar}$$

(* oikeasti paremmin vasta 7.-luvun jälkeen)
(Annetaan vain nyt.)

eli jos halutaan mitata E tarkkuudella ΔE se vie vähintään ajan Δt

7.0 Aikakehitys

7.1 Tilojen aikakehitys

P6 $$\boxed{i\hbar \frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle = \hat{H}|\Psi(t)\rangle}$$

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle = \hat{H}|\Psi(t)\rangle \quad | \cdot \langle E| \quad \leftarrow \left(\hat{H}|E\rangle = E|E\rangle\right)$$

$$\underbrace{i\hbar \langle E|\frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle}_{} \overset{\text{Hermiittisyys}}{=} E\langle E|\Psi(t)\rangle$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\underbrace{\langle E|\Psi(t)\rangle}_{\Psi(E,t)} \quad \text{ei riipu ajasta}$$

eli $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(E,t) = E\,\Psi(E,t)$

$$\rightarrow \quad \Psi(E,t) = \langle E|\Psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E(t-t_0)}\Psi(E,t_0)$$

alkuhetki

tutkitaan

$$|\psi(t)\rangle = \overbrace{\sum_E |E\rangle\langle E|}^{\mathbb{1}}\psi(t)\rangle$$

$$\psi(E,t)$$

$$\boxed{|\psi(t)\rangle = \sum_E \psi(E,t)\,|E\rangle = \sum_E e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)E}\psi(E,t_0)\,|E\rangle}$$

kertomalla vasemalta $\langle\bar{x}|$ ja merk $c_E = \psi(E,t_0)$

$$\boxed{\psi(t,\bar{x}) = \sum_E c_E\,\underbrace{\psi_E(\bar{x})}_{\substack{\text{stat.}\\ \text{tila}\\ \text{aaltofunktio}}}\,\underbrace{e^{-i/\hbar(t-t_0)E}}_{\text{vaihe}}}$$

$$\hat{U}(t,t_0) = e^{-i/\hbar(t-t_0)\hat{H}}$$

kutsutaan aikakehityksoperaattoriksi
lisää kvantikenttäteoriosissa

7.2 Observaabelin odotusarvojen aikariippuvuus

olk olkoon $\langle A\rangle = \langle\psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle$

Tutkitaan

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \left(\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\right)\hat{A}|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|\hat{A}\underbrace{\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle}_{\frac{1}{i\hbar}\hat{H}|\psi(t)\rangle}$$

Muista SY $i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle$

1° termi $\left(\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\right)\hat{A}|\psi(t)\rangle = \left(\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\right)\hat{A}\psi(t)\rangle = \langle\hat{A}\psi(t)|\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle^*$

$$= \langle\hat{A}\psi(t)|\frac{1}{i\hbar}\hat{H}|\psi(t)\rangle^* = -\frac{1}{i\hbar}\langle A\psi(t)|\hat{H}|\psi(t)\rangle^*$$

Hermiitti SYYS

$$= -\frac{1}{i\hbar}\langle\hat{H}\psi(t)|A\psi(t)\rangle = -\frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)|\hat{H}\hat{A}|\psi(t)\rangle$$

eli

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \underbrace{\langle\psi(t)|\frac{\partial A}{\partial t}|\psi(t)\rangle}_{\text{merk } \langle\frac{\partial A}{\partial t}\rangle} - \frac{1}{i\hbar}\langle\psi|\underbrace{\hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H}}_{[\hat{H},\hat{A}]}|\psi(t)\rangle$$