

# Tilat ja observaabelit

Maksimaalinen informaatio systeemistä tietyllä ajanhetkellä sisältyy **tilaan**  $|\psi\rangle$  (ket).

Tila = vektori Hilbertin avaruudessa

- sisätulo  $\langle\psi'|\psi\rangle \in \mathbb{C}$
- $\langle\psi|c_1\psi_1 + c_2\psi_2\rangle = c_1\langle\psi|\psi_1\rangle + c_2\langle\psi|\psi_2\rangle$
- $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \langle\psi_2|\psi_1\rangle^*$
- $|\psi\rangle$  ja  $c|\psi\rangle$  sama tila, voidaan normittaa  $\langle\psi|\psi\rangle = 1$

Kutakin mitattavaa suuretta  $A$  vastaa lineaarinen hermiittinen **operaattori**  $\hat{A}$

- hermiittisyys:  $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$  (yleisesti  $\langle\psi_1|\hat{A}\psi_2\rangle = \langle\hat{A}^\dagger\psi_1|\psi_2\rangle$ )
- ominaistilat  $\hat{A}|\psi\rangle = a|\psi\rangle$

# Mittaus

Mitattaessa suuretta  $A$  mahdolliset tulokset ovat  $\hat{A}$ :n ominaisarvot. Tuloksen  $a$  todennäköisyys on

$$P_a = |c_a|^2 = |\langle a|\psi\rangle|^2$$

Välittömästi mittauksen jälkeen systeemi on tilassa  $|a\rangle$  (kun mittaustulos oli  $a$ )  $\Rightarrow$  jos mittaus toistetaan heti uudestaan, saadaan  $a$  todennäköisyydellä 1.

Jos mittaus toistetaan monta kertaa (samaan tilaan), tulosten keskiarvo on  $A$ :n odotusarvo

$$\langle A \rangle = \sum_a P_a a = \sum_a |\langle a|\psi\rangle|^2 a = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$$

# Hermiittisen operaattorin ominaistilat

Hermiittisen operaattorin ominaistiloille ja -arvoille on voimassa:

- reaalisuus,  $a^* = a$
- ortogonaalisuus,  $\langle a|a' \rangle = 0$  jos  $a \neq a'$ 
  - samaan ominaisarvoon liittyvät tilat voidaan valita ortogonaalisiksi (ortonormeeraus)
- $\langle a|a' \rangle = \delta_{aa'}$
- täydellisyys,  $\sum_a |a\rangle\langle a| = \mathbb{1}$

Hermiittisillä operaattoreilla  $\hat{A}$  ja  $\hat{B}$  on yhteiset ominaistilat jos ja vain jos  $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$

Paikka ja impulssi eivät kommutoi:  $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$

# Aikakehitys

Tilan aikakehityksen antaa **Schrödingerin yhtälö**

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle$$

Energian ( $\hat{H}$ :n) ominaistilan aikakehitys triviaalia,

$$|E, t\rangle = e^{-iEt/\hbar} |E, 0\rangle$$

Mielivaltaisen alkutilan  $|\psi\rangle$  aikakehitys saadaan kirjoittamalla se energian ominaistilojen avulla

$$|\psi(t)\rangle = \sum_E |E\rangle e^{-iE(t-t_0)/\hbar} \langle E | \psi(t_0) \rangle$$

**Odotusarvon aikakehitys**

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

Epätäydellisesti tunnettua systeemiä kuvaa tiheysoperaattori

$$\hat{\rho} = \sum_n p_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n|$$

- $\langle A \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{A})$
- $\text{Tr} \hat{\rho} = 1$
- $\text{Tr} \hat{\rho}^2 \leq 1$  (vain puhtaalle tilalle =1)
- $i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho} = [\hat{H}, \hat{\rho}]$

# Aaltomekaniikka

Paikan  $\hat{x}$  ominaistilojen kannassa amplitudi on **aaltofunktio**

$$\psi(\mathbf{x}) \equiv \langle \mathbf{x} | \psi \rangle$$

- sisätulo  $\langle \psi | \psi' \rangle = \int d^3x \psi^*(\mathbf{x}) \psi'(\mathbf{x})$
- odotusarvo  $\langle \psi | \hat{A} | \psi' \rangle = \int d^3x \psi^*(\mathbf{x}) \hat{A} \psi'(\mathbf{x})$
- paikka  $\hat{x} = x$
- impulssi  $\hat{p} = -i\hbar \nabla$

Aaltofunktio on todennäköisyysamplitudi löytää hiukkanen pisteestä  $\mathbf{x}$ , todennäköisyystiheys  $\rho(\mathbf{x}) = |\psi(\mathbf{x})|^2$ .

Tavallisesti Hamiltonin funktio  $H = p^2/2m + V(\mathbf{x})$ , jolloin

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{x}) \right] \psi(\mathbf{x}, t)$$

# Perusasioita aaltomekaniikasta

- Todennäköisyystulkinta edellyttää **normitusta**:

$$\int d^3x |\psi(\mathbf{x})|^2 = N \Rightarrow \psi \rightarrow \psi/\sqrt{N}$$

- **Superpositioperiaate**: jos  $\psi_1(x)$  ja  $\psi_2(x)$  ovat mahdollisia aaltofunktioita, myös  $c_1\psi_1(x) + c_2\psi_2(x)$  on
  - interferenssi
- Liikemäärän ominaistila on **tasoaalto**

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$$

- Epätarkkuusperiaate:  $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$
- Impulssiavaruuden aaltofunktio

$$\varphi(p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3x e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} \psi(\mathbf{x})$$

# Yksinkertaisia systeemejä

Suorakulmaiset potentiaalit:

- aaltofunktiot  $\sim e^{ikx}$ ,  $e^{-\kappa x}$
- $\psi$  ja  $\psi'$  jatkuvia
- sidotut tilat:  $\psi(\pm\infty) = 0$

Deltafunktio potentiaali:

- reunaehto integroimalla Schrödingerin yhtälöä

Sironta potentiaalista:

- äärettömydessä tasoaalto
- ei normittuva, sironta ja heijastus suhteessa alkuperäiseen aaltoon
- **tunnelointi**, aaltofunktio tunkeutuu klassisesti kiellettyyn alueeseen

# Harmoninen oskillaattori

## Aaltofunktiot

$$\psi_n(x) = \text{Hermiten polynomi} \times e^{-m\omega x^2/2\hbar}, \quad E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$$

## Operaattoriformalismissa yksinkertaisempi

- nosto- ja laskuoperaattorit:  $a^{(\dagger)} \sim \hat{x} \pm i\hat{p}$
- perustila:  $a|0\rangle = 0$
- muut tilat:  $a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ ,  $a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$
- Hamiltonin operaattori  $\hat{H} = \hbar\omega(a^\dagger a + 1/2)$
- energiat  $\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega(n + 1/2)|n\rangle$

# Keskeispotentiaali

Potentiaali riippuu vain  $r$ :stä. Muuttujien separointi

$$\psi(\mathbf{r}) = R_\ell(r)Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$$

## Palloharmonisten funktioiden ominaisuuksia

- ortonormaaleja:  $\int d\Omega Y_{\ell m} Y_{\ell' m'} = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}$
- täydellinen joukko: mv.  $f(\theta, \phi) = \sum_{\ell m} a_{\ell m} Y_{\ell m}(\theta, \phi)$
- implussimomentin ominaistiloja:

$$\hat{\mathbf{L}}^2 Y_{\ell m} = \hbar^2 \ell(\ell + 1) Y_{\ell m}, \quad \hat{L}_z Y_{\ell m} = \hbar m Y_{\ell m}$$

Radiaaliyhtälö (tavallisesti helpompi funktiolle  $u(r) = rR(r)$ ):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} u + V(r)u + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2} u = Eu$$

Vapaan hiukkasen ratkaisut Besselin pallofunktioita  $j_\ell(kr)$ .

# Vedynkaltainen atomi

- Coulombin potentiaali  $V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$
- aaltofunktiot:  $\psi_{n\ell m} = (\text{Laguerren polynomi}) \times r^\ell e^{-Zr/na}$
- energiatilat  $E_n = -\frac{1}{2}Z^2\alpha^2 m_e c^2 \frac{1}{n^2}$ 
  - riippuu vain pääkvanttiluvusta  $n = 0, 1, 2, \dots$
  - $n^2$  kertaa degeneroitunut:  $\ell = 0, \dots, n-1, m = -\ell, \dots, \ell$
  - verrannollinen  $\alpha^2 \sim e^4, m, Z^2$

# Häiriöteoria

Tunnettu systeemi (tilat  $|\varphi_n\rangle$ ) + pieni korjaus:

$$H = H_0 + gV$$

Ensimmäisen kertaluvun korjaus energiaan

$$gE_n^{(1)} = \langle \varphi_n | g\hat{V} | \varphi_n \rangle$$

Aaltofunktio:

$$|\psi_n\rangle = |\varphi_n\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{\langle \varphi_m | g\hat{V} | \varphi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |\varphi_m\rangle + \mathcal{O}(g^2)$$

Toisen kertaluvun korjaus energiaan:

$$g^2 E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \varphi_m | g\hat{V} | \varphi_n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

# Variaatiomenetelmä

- soveltuu (perustilan) energian arviointiin
- antaa ylärajan energialle
- viritystiloja vain, jos alemmat tilat saadaan poistettua (symmetriat)
- onnistuminen riippuu yritteen valinnasta → ymmärrys systeemistä tärkeä

Menetelmä:

- 1 tehdään yrite  $|\psi(\alpha_i)\rangle$ , joka riippuu parametreista  $\alpha_i$
- 2 lasketaan energian odotusarvo  $E(\alpha_i) = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle / \langle \psi | \psi \rangle$
- 3 minimoidaan parametrien suhteen:

$$\frac{\partial}{\partial \alpha_j} E(\alpha_i) = 0$$