

Kwantumfysica I

2008-2009

Hoorcollege vrijdag 21 november 2008

Vragen n.a.v. stof vorige college?

Vragen n.a.v. boek hoofdstukken 1,2 & 3 ?

Homework and study material for Wednesday next week

Study material
All of Chapter 3

Reading material
none

Homework, to be made before the werkcollege
Book Chapter 3 - 3.1, 3.2, 3.3, 3.4, 3.5, 3.10,
3.11 (lots of algebra, use $X_0=0$ and $P_0=0$)

Problems to work on during werkcollege
Problems C3.1 - C3.4 will be handed out in class.
Book Chapter 3 - 3.12, 3.15, 3.16, 3.20, 3.21

See <http://caspar.fmns.rug.nl/teaching/>

Postulaten van de kwantum theorie

- Toestand
- 1) Toestand op t is beschreven door golf functie $\Psi(t)$.
 $\Psi(t)^* \Psi(t)$ heeft betekenis kansdichtheid.
 - 2) Alle fysische eigenschappen beschreven door een operator.
Eigenschap A door operator \hat{A} , een observabele.

Tijdsevolutie

- 3) Schrödinger vergelijking
$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(x,t)$$

- Meting
- 4) Meting van eigenschap A geeft altijd een eigenwaarde van \hat{A} .
Is het resultaat a , dan is de toestand na het meten is de bijbehorende eigenfunctie φ_a .
 - 5) Kansdichtheid op meetuitkomst a is $|\int \Psi(x,t)^* \varphi_a dx|^2$

Postulaten over meting zijn de basis van een BELANGERIJK en handig denkmodel over meten, maar zijn niet nodig als we het meetproces goed kunnen omschrijven als interacties tussen meter en het te meten systeem.

Orthogonality of eigenfunctions (pas na H3 in boek)

$$\hat{A} \varphi_n(x) = a_n \varphi_n(x) \quad \text{Eigenwaarde vergelijking}$$

$$a_n \quad \text{Eigenwaarde}$$

$$\varphi_n(x) \quad \text{Eigenfunctie}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^*(x) \varphi_m(x) dx = \begin{cases} 1, & \text{for } n = m \\ 0, & \text{for } n \neq m \end{cases} \Rightarrow$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^*(x) \hat{A} \varphi_m(x) dx = \begin{cases} a_n, & \text{for } n = m \\ 0, & \text{for } n \neq m \end{cases}$$

Functies van Operatoren

Stel

$$\hat{A}\varphi_n(x) = a_n\varphi_n(x) \quad \text{Eigenwaarde vergelijking}$$

$$a_n \quad \text{Eigenwaarde}$$

$$\varphi_n(x) \quad \text{Eigenfunctie}$$

Dan heeft de operator $f(\hat{A})$ de volgende eigenschappen:

$$f(\hat{A})\varphi_n(x) = f(a_n)\varphi_n(x) \quad \text{Eigenwaarde vergelijking}$$

$$f(a_n) \quad \text{Eigenwaarde}$$

$$\varphi_n(x) \quad \text{Eigenfunctie}$$

Operator voor impuls \hat{p}_x

$$\hat{p}_x\varphi_k(x) = p_x\varphi_k(x)$$

$$\hat{p}_x \leftrightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

Voor het geval we de toetsand representeren als een functie van x .

Volgt uit Hamiltoniaanse mechanica, zie H1 in boek, afleiding volgt later.

Oplossingen voor dit eigenwaarde probleem:

$$\varphi_k = Ae^{\frac{ip_x x}{\hbar}} = Ae^{ikx} \quad \text{met } k = \frac{p_x}{\hbar} \quad \text{of} \quad p_x = \hbar k$$

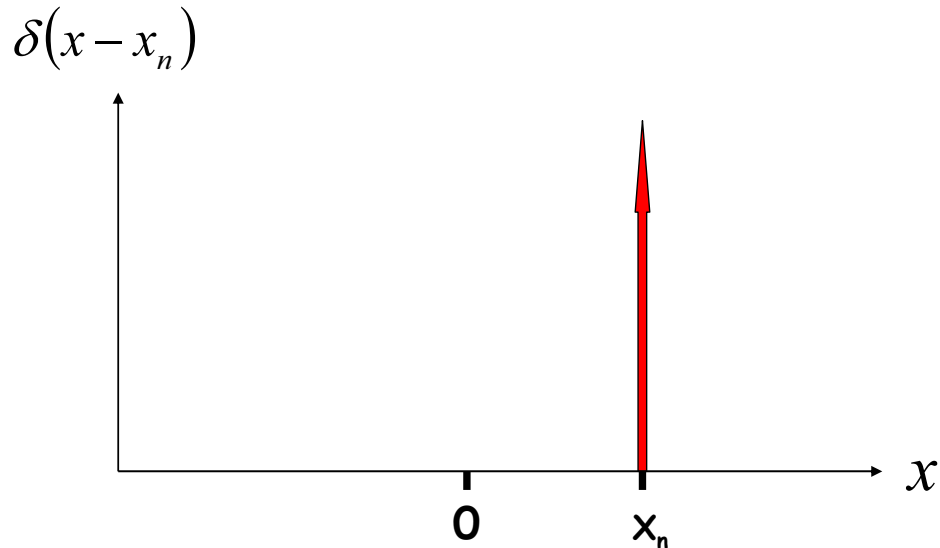
Wat is k ?

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad \text{geeft De Broglie} \quad \lambda = \frac{h}{p_x}$$

Operator voor positie \hat{X}

$$\hat{X}\delta(x - x_n) = x_n\delta(x - x_n)$$

$\hat{X} \leftrightarrow x$ Voor het geval we de toetsand representeren als een functie van x .



Operator voor totale energie \hat{H} (Hamiltoniaan)

$$\hat{H}\varphi_n(x) = E_n\varphi_n(x) \quad \text{Tijdsonafhankelijk Schrödinger verg.}$$

Oplossen voor free particle

$$\frac{\hat{p}_x^2}{2m}\varphi_n(x) = E_n\varphi_n(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi_n(x) = E_n\varphi_n(x)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi_n(x) + k^2\varphi_n(x) = 0 \quad k^2 = \frac{2mE_n}{\hbar^2}$$

$$\varphi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

Plane wave solutions,
same as for p_x -operator
Why should this have been expected?

Expectation value:

Fysische eigenschap van het systeem afleiden uit de golffunctie

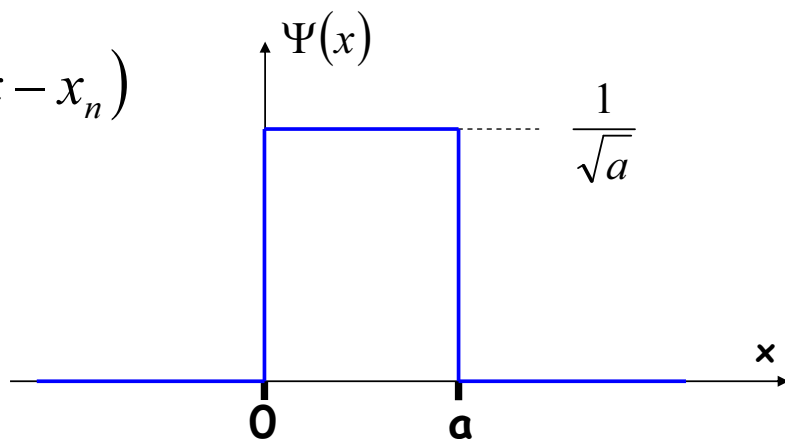
Verwachtingswaarde voor eigenschap A op $t = t_0$

Stel systeem is in toestand $\Psi(x, t_0)$

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, t_0)^* \hat{A} \Psi(x, t_0) dx$$

Voorbeeld verwachtings waarde: positie x

$$\hat{X} \delta(x - x_n) = x_n \delta(x - x_n)$$

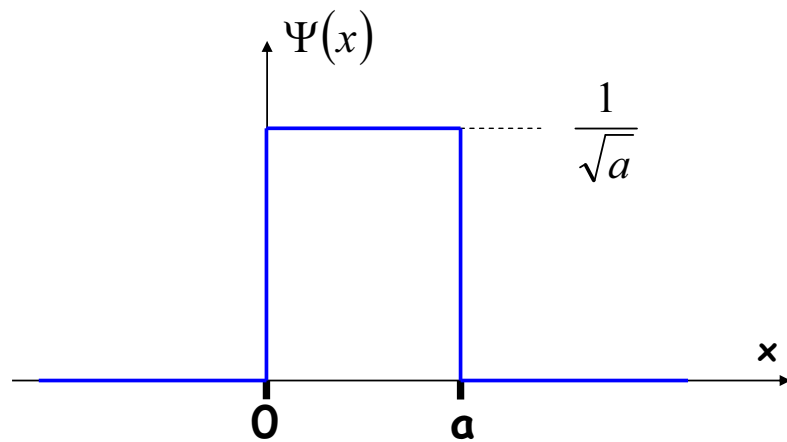


$$\langle \hat{X} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x)^* \hat{X} \Psi(x) dx$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{X} \frac{1}{\sqrt{a}} = x \frac{1}{\sqrt{a}} \\ \hat{X} 0 = 0 \end{array} \right.$$

$$\langle \hat{X} \rangle = \int_0^a \left(\frac{1}{\sqrt{a}} \right)^* x \left(\frac{1}{\sqrt{a}} \right) dx = \frac{a}{2}$$

Voorbeeld verwachtings waarde: Δx



$$\Delta X = \sqrt{\langle \hat{X}^2 \rangle - \langle \hat{X} \rangle^2}$$

$$\langle \hat{X}^2 \rangle = \int_0^a \left(\frac{1}{\sqrt{a}} \right)^* x^2 \left(\frac{1}{\sqrt{a}} \right) dx = \frac{a^2}{3}$$

$$\Delta X = \sqrt{\frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{4}} = \frac{a}{\sqrt{12}}$$

Postulaat 3

De Hamiltoniaan van een systeem bepaalt de tijdsevolutie van dat systeem, volgens de tijdsafhankelijke Schrödinger vergelijking.

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(x, t)$$

In praktijk vaak aanpak om eerst tijdsonafhankelijke Schrödinger vergelijking op te lossen voor een tijdsonafhankelijke Hamiltoniaan van het systeem, en dan in een vervolg stap te kijken naar:

- Tijdsevolutie van dat systeem met stationaire Hamiltoniaan
- Invloed van niet-stationaire termen in de Hamiltoniaan (wordt later behandeld)

Wat wordt bedoeld met stationaire Hamiltoniaan?

p verandert in de tijd,
maar de operator
(uitdrukking) voor p niet

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V_0(x)$$

$$\hat{H}(t) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x, t) = H_0 + V_t(x, t)$$

↑
niet-stationaire term

Afleiden tijdsafhankelijke Schrödinger vergelijking

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \hat{H}_0 \Psi(x, t) \quad \text{Stel } \Psi(x, t) = \varphi(x) \chi(t)$$

$$\text{Scheiding van variabelen } \frac{i\hbar}{\chi(t)} \frac{\partial \chi(t)}{\partial t} = \frac{\hat{H}_0 \varphi(x)}{\varphi(x)} = E \quad (\text{constant}) \Rightarrow$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{H}_0 \varphi(x) = E \varphi(x) \Rightarrow \text{Tijdsafhankelijke Schrödinger vergelijking,} \\ \text{eigenwaarde probleem voor energie} \\ \\ i\hbar \frac{d\chi(t)}{\chi(t)} = E dt \Rightarrow \text{Tijdsevolutie van de energie-eigentoestanden} \end{array} \right.$$

Time-evolution operator:

For system with time-independent Hamiltonian \hat{H}_0

$$\text{Solve: } i\hbar \frac{d\chi(t)}{\chi(t)} = E dt \quad \Rightarrow \quad \chi(t) = A e^{\frac{-iEt}{\hbar}}$$

Holds for all values of E, probability is conserved (A=1), used to define

$$\hat{U} = e^{\frac{-i\hat{H}_0 t}{\hbar}} \quad \Rightarrow \quad \hat{U} \Psi(x, t_0) = \Psi(x, t_0 + t)$$

For system at $t=0$ in an energy eigenstate $\varphi_n(x)$ with eigenvalue E_n

$$\Psi(x, t) = \hat{U} \varphi_n(x) = e^{\frac{-i\hat{H}_0 t}{\hbar}} \varphi_n(x) = e^{\frac{-iE_n t}{\hbar}} \varphi_n(x)$$

Stationary states - nothing moves:

For system with time-independent Hamiltonian \hat{H}_0 in energy eigenstate φ_n

at $t=0$, how does an arbitrary property A depend on time?

$$\text{Use: } \hat{U} \Psi(x, t=0) = \Psi(x, t) \quad \hat{U} = e^{\frac{-i\hat{H}_0 t}{\hbar}}$$

$$\langle \hat{A} \rangle(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, t)^* \hat{A} \Psi(x, t) dx$$

$$\langle \hat{A} \rangle(t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{+iE_n t}{\hbar}} \varphi_n(x)^* \hat{A} e^{\frac{-iE_n t}{\hbar}} \varphi_n(x) dx$$

$$\langle \hat{A} \rangle(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n(x)^* \hat{A} \varphi_n(x) dx \quad \text{Is constant in time!}$$

Arbitrary phase factor:

For example:

For system with time-independent Hamiltonian \hat{H}_0 in energy eigenstate φ_n at $t=0$, how does its wavefunction evolve in time?

$$\Psi(x,t) = \hat{U} \Psi(x,t=0) = e^{\frac{-iE_n t}{\hbar}} \varphi_n$$

What are the consequences of this evolving "global" phase factor?

Nothing that can be observed.

You can add any constant to all the E_n .

Dynamics of the system \mathcal{I}

For system with time-independent Hamiltonian \hat{H}_0 in a state

$$\Psi(x,t=0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_1 + \varphi_2)$$

$$\hat{H}_0 \varphi_n(x) = E_n \varphi_n(x)$$

$$\langle \hat{H}_0 \rangle(0) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1 + \varphi_2)^* \hat{H}_0 \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1 + \varphi_2) dx$$

$$\langle \hat{H}_0 \rangle(t) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \left[e^{\frac{+iE_1 t}{\hbar}} \varphi_1(x)^* + e^{\frac{+iE_2 t}{\hbar}} \varphi_2(x)^* \right] \hat{H}_0 \left[e^{\frac{-iE_1 t}{\hbar}} \varphi_1(x) + e^{\frac{-iE_2 t}{\hbar}} \varphi_2(x) \right] dx$$

$$\langle \hat{H}_0 \rangle(t) = \frac{E_1 + E_2}{2} \quad \text{Is constant in time!}$$

Dynamics of the system II

So, is there any physical property A that can depend on time, for system with time-independent Hamiltonian \hat{H}_0 ?

Assume again state $\Psi(x, t = 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_1 + \varphi_2)$. A is some arbitrary property

$$\langle \hat{A} \rangle(0) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1 + \varphi_2)^* \hat{A} \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1 + \varphi_2) dx$$

$$\langle \hat{A} \rangle(t) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \left[e^{\frac{+iE_1 t}{\hbar}} \varphi_1(x)^* + e^{\frac{+iE_2 t}{\hbar}} \varphi_2(x)^* \right] \hat{A} \left[e^{\frac{-iE_1 t}{\hbar}} \varphi_1(x) + e^{\frac{-iE_2 t}{\hbar}} \varphi_2(x) \right] dx$$

$$\langle \hat{A} \rangle(t) = \frac{\langle \hat{A} \rangle_{11}}{2} + \frac{\langle \hat{A} \rangle_{22}}{2} + \langle \hat{A} \rangle_{12} \cos\left(\frac{E_2 - E_1}{\hbar} t\right) \quad \left(\text{used here } \langle \hat{A} \rangle_{12} = \langle \hat{A} \rangle_{21} \right)$$

(not always the case)

System with time-independent Hamiltonian \hat{H}_0 has only time dependence of physical properties in the form of oscillations $e^{i\omega t}$, with $\hbar\omega = E_n - E_m$.

Postulaat 4

Meting van eigenschap A geeft altijd een eigenwaarde van \hat{A} .

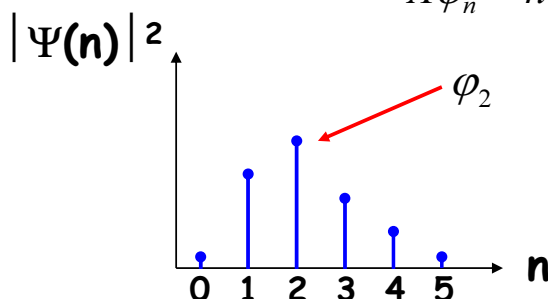
Is het resultaat a , dan is de toestand na het meten is de bijbehorende eigenfunctie φ_a .

Discreet voorbeeld $A=N^2$

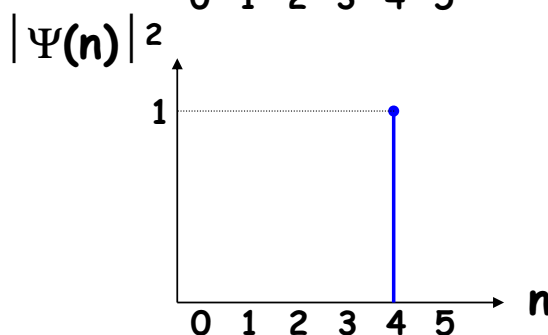
$$\hat{N}\varphi_n = n\varphi_n$$

$$\hat{A}\varphi_n = n^2\varphi_n$$

Voor meten



Na meten



Meetuikkomst was 16

$$\Rightarrow \Psi(n) = \varphi_4$$

Postulaat 5 - discreet (weinig aandacht in boek)

Kans op meetuitkomst a is $|\sum \Psi(n,t)^* \varphi_a(n)|^2$

|Inwendig product $\Psi(n,t)^*$ en $\varphi_a(n)$ |²

Zelfde voorbeeld $A=N^2$

N.B. in dit voorbeeld (vorige slide), vallen de eigenvectoren $\varphi_a(n)$ samen met de basisvectoren die horen bij de coördinaten n. Algemene geval komt hierna.

Stel voor het meten

$$\Psi(n) = 0\varphi_0(n) + c_1\varphi_1(n) + c_2\varphi_2(n) + 0\varphi_3(n) + c_4\varphi_4(n) + 0\varphi_5(n)$$

$$\Psi(n) = \sum_n c_n \varphi_n(n) \quad \text{met} \quad \sum_n c_n^* c_n = 1$$

Kans op meetuitkomst 16 is dan

$$\left| \sum_n \Psi(n)^* \varphi_4(n) \right|^2 = \left| \sum_n c_n^* \varphi_n^*(n) \cdot \varphi_4(n) \right|^2 = |c_4|^2$$

Vorige slide geschreven als vectoren

(hier over het interval $n=0..4$, daarbuiten zijn alle $c_n=0$):

$$\Psi(n)^* = (0 \quad c_1^* \quad c_2^* \quad 0 \quad c_4^*) \quad \varphi_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\left| \sum_n \Psi(n)^* \varphi_4 \right|^2 = \left| (0 \quad c_1^* \quad c_2^* \quad 0 \quad c_4^*) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right|^2 = |c_4|^2$$

Vervolg Postulaat 5 - discreet

In het algemeen, hoeven de eigenvectoren $\varphi_a(n)$ niet samen te vallen met de basisvectoren die worden gebruikt in de somaties over coördinaten n in onderstaande voorbeeld. Dit maakt de link met het continue geval (volgende slide) duidelijker.

Stel voor het meten

$$\Psi(n) = 0\varphi_0(n) + c_1\varphi_1(n) + c_2\varphi_2(n) + 0\varphi_3(n) + c_4\varphi_4(n) + 0\varphi_5(n)$$

$$\Psi(n) = \sum_m c_m \varphi_m(n) \quad \text{met} \quad \sum_m c_m^* c_m = 1$$

Kans op meetuitkomst behorend bij eigenvector $\varphi_4(n)$ is dan

$$\begin{aligned} \left| \sum_n \Psi(n)^* \varphi_4(n) \right|^2 &= \left| \sum_n \left(\sum_m c_m^* \varphi_m^*(n) \right) \cdot \varphi_4(n) \right|^2 = \\ 0 + \left| \sum_n c_1^* \varphi_1^*(n) \cdot \varphi_4(n) \right|^2 &+ \left| \sum_n c_2^* \varphi_2^*(n) \cdot \varphi_4(n) \right|^2 + 0 + \left| \sum_n c_4^* \varphi_4^*(n) \cdot \varphi_4(n) \right|^2 + 0 = \\ 0 + 0 + 0 + 0 + |c_4^*|^2 + 0 &= |c_4|^2 \end{aligned}$$

Postulaat 5 - continu (weinig aandacht in boek)

Kansdichtheid op meetuitkomst a is $\left| \int \Psi(x,t)^* \varphi_a(x) dx \right|^2$

 **|Inwendig product $\Psi(x,t)^*$ en $\varphi_a(x)$ |²**

Kans op meetuitkomst tussen a_1 en a_2 is: $\int_{a_1}^{a_2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x,t)^* \varphi_a(x) dx \right|^2 da$

Postulaat 4 en 5 gaan over meten - paar opmerkingen:

Handig denkmodel over wat de invloed van meten is,
in de volgende extreme limiet (ideale meting):

- Metingen met zeer sterke interactie tussen meter en kwantum systeem.
- De meting duurt heel erg kort.
- Er is geen interactie met de meter voor en na de meting.

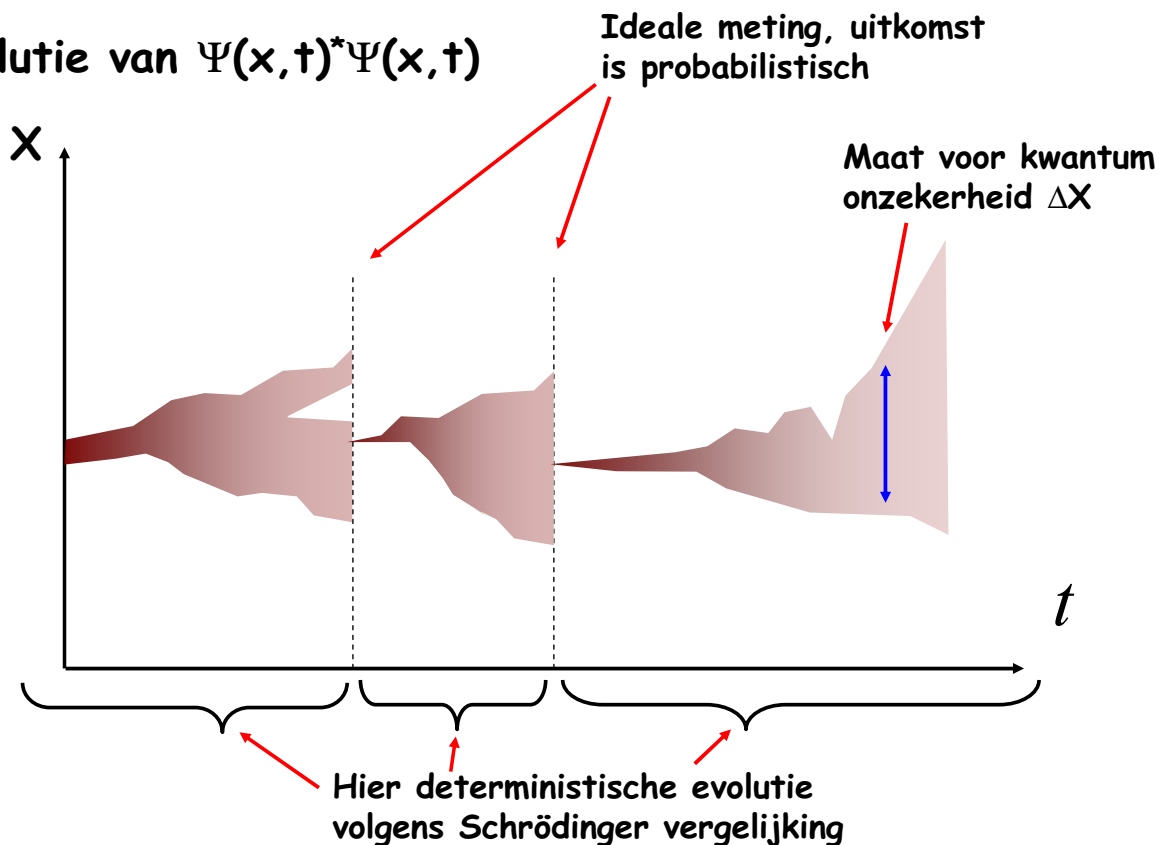
Men spreekt in dit geval over "reductie" of "collapse" van de golf functie.

Is in praktijk niet altijd het geval!

De gepresenteerde postulaten, interpretatie van golf functie met de probabilistische interpretatie van het meetproces is de meest gangbare: de Kopenhaagse interpretatie.

Tijdsevolutie met meten

Evolutie van $\Psi(x,t)^*\Psi(x,t)$



Samenvatting:

1. Postulaten
2. Operatoren
3. Alles, b.v. De Broglie en $\hbar\omega = E_n - E_m$,
volgt uit de postulaten