Kwantumfysica I

2009-2010

Hoorcollege dinsdag 17 november 2009

Vragen n.a.v. stof vorige week?

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

Aanvullende huishoudelijke mededelingen:

Tips voor aanpak problemen bij werkcollege

Systematische aanpak bij oplossen van:
- Oefenopgaven
- Tentamenopgaven

Voordelen:
- Meer kans dat je tot oplossing komt.
- Sneller naar oplossing.
- Beter begeleiding door docenten.
- Beter cijfer op tentamen.

Systematic approach $\Rightarrow$ Solve in three steps:

1) Analyze the problem:
What do they actually ask?
What other information is relevant and mentioned.
Make a sketch.
Are there hints mentioned? List the relevant symbols and formula's, theory.

2) Start solving the problem:
Outline the approach to actual solving first.
Work out the algebra in **symbols – not in numbers**.

3) Evaluate the outcome:
Does the answer make sense, is the sign right?
Finding that the mass of the electron is -25 kg, should cause some alarm and start some feedback.
Answer wrong? Still points for evaluating remarks on exam.

Intermezzo:

Dirac-delta functie $\delta(x)$

Fourier transformatie

....zelfde als uit vak met Fourier Theorie

Dirac-delta functie δ(x)

$$\boxed{\delta(x)=\lim_{\varepsilon\to 0}\begin{cases}0, & |x|>\dfrac{\varepsilon}{2}\\[2mm] \dfrac{1}{\varepsilon}, & |x|\le\dfrac{\varepsilon}{2}\end{cases}}$$

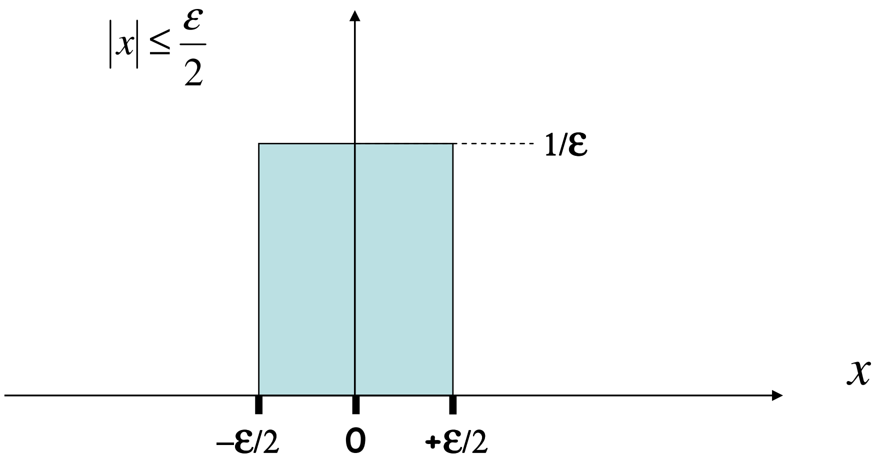
$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x)\,dx=1}$$

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty}f(x)\,\delta(x-a)\,dx=f(a)}$$

Dirac-delta functie δ(x) vanuit blokfunctie

$$\delta(x)=\lim_{\varepsilon\to 0}\begin{cases}0, & |x|>\dfrac{\varepsilon}{2}\\[2mm] \dfrac{1}{\varepsilon}, & |x|\le\dfrac{\varepsilon}{2}\end{cases}$$

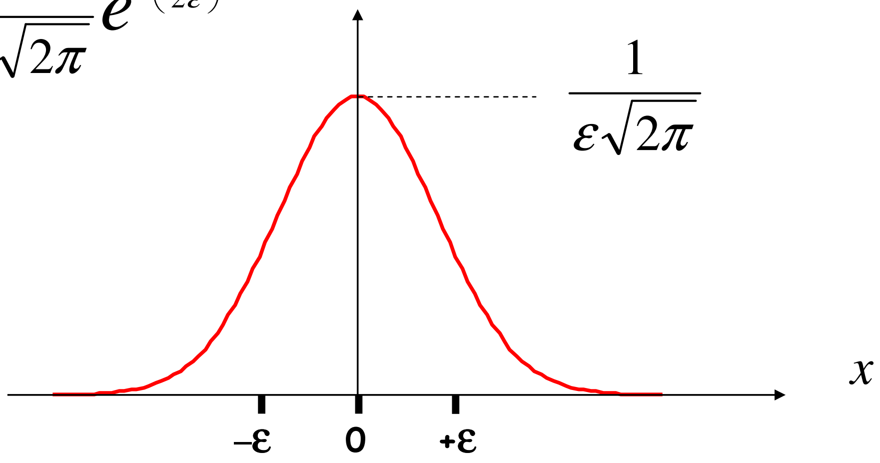
$$\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x)\,dx=1$$



Dirac-delta functie δ(x) vanuit Gaussian

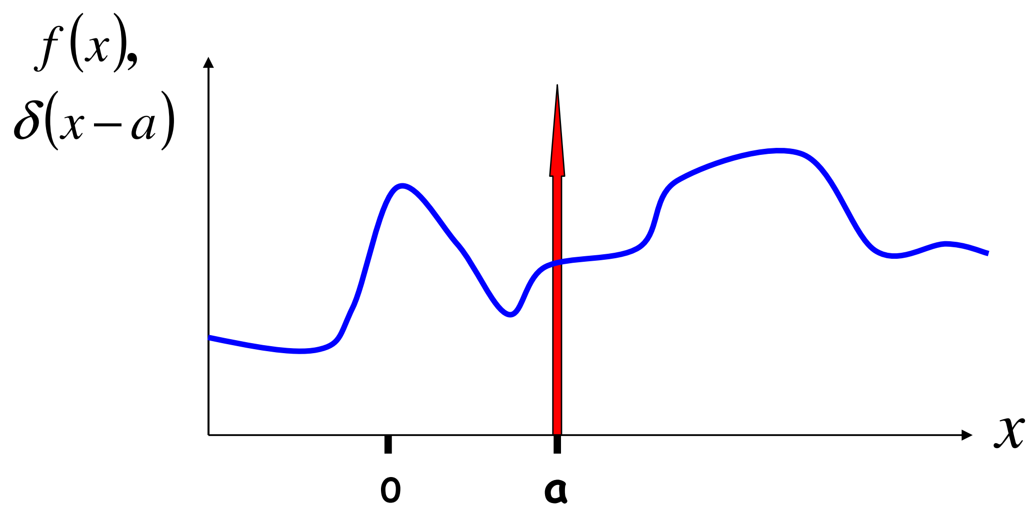
$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{1}{\varepsilon\sqrt{2\pi}} e^{-\left(\frac{x}{2\varepsilon}\right)^2}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)\,dx = 1$$



Dirac-delta functie δ(x)

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



Dirac-delta functie $\delta(x)$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-a)\,\delta(x-a)\,dx = \delta(a-a) = \delta(0) = \infty$$

Wavefunctions in the form of a Dirac delta function cannot be normalized.

The fact that a wavefunctions $\delta(x-a)$ cannot be normalized, is because in quantum mechanics the uncertainty Δx in the position of the particle can never be really zero (see also p. 164). Physically, the state $\delta(x-a)$ cannot exist. However, it will turn out that the Dirac delta function (and plane waves as on p. 72, that run by definition from $-\infty$ to $+\infty$, and also do not exist in practice) are very useful mathematical tools for calculating with wavefunctions.

Vorige week: quantum theorie is anders dan klassieke theorieën

Deze week:

Postulaten van kwantumfysica

Formele opbouw kwantumtheorie.

Vandaag en volgend college:
-Postulaten over operatoren
-Postulaat over tijdsevolutie
-Postulaten over meten

Opbouw theorie vanuit postulaten:

Postulaten: minimale verzameling regels, die niet verder afgeleid kunnen worden, en waarvan alleen met experimenten te toetsen valt of ze kloppen.

Uit deze postulaten zijn alle andere wetten van een theorie af te leiden.

Een geschikte verzameling postulaten is niet een unieke basis voor een theorie.
Kwantum mechanica:
- kan met postulaten van vandaag.
- kan ook met "Feynman path integrals" (is equivalent, zie Hoofdstuk 7.11).

Opbouw theorie vanuit postulaten:

Ook voor klassiek theorieën:

B.v. klassiek mechanica is gebaseerd op 4 postulaten over puntmassa P met massa m:

1. Toestand systeem: bepaalde positie en impuls.
2. Invloeden op P volgens additieve krachtvectoren F.
3. $F=m \cdot a$
4. $F_{actie} = - F_{reactie}$

Hiermee kan voor veel-deeltjes systemen worden bewezen:

- Wet van behoud van energie
- Wet van behoud van impuls
- Wet van behoud van impuls-moment
- ....alles

Kwantum theorie t.o.v. andere theorieën

	$v \ll c$	$v \approx c$
Meestal: Groot, wrijving, warm, omgeving	Klassiek F=m·a Dagelijks leven	Algemeen relativistisch Speciaal Relativistisch $E=p^2c^2+m^2c^2$
Meestal: Klein, geïsoleerd, koud Maar niet alleen losse atomen en quarks! Ook b.v. verklaren supergeleiding.	Kwantum Schrödinger verg. Ψ	Kwantum-relativistisch Dirac verg. Klein-Gordon verg.

Waar zit thermodynamica, diffusie vergelijking, etc.?
Is af te leiden uit bovenstaande, al is afleiden 2de hoofdwet nog niet altijd helemaal duidelijk.

Postulaten van de kwantum theorie

Toestand

1) Toestand op t is beschreven door golffunctie $\Psi(t)$.
$\Psi(t)^*\Psi(t)$ 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 $\left|\int \Psi(x,t)^* \varphi_a \, dx\right|^2$

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.

Centrale voorbeeld deze week:

Puntmassa met massa m in 1 dimensie x.

Maar vergeet niet:

Kwantum fysica gaat over alle systemen en vrijheidsgraden!

Postulaat 1 (zie vorige week)

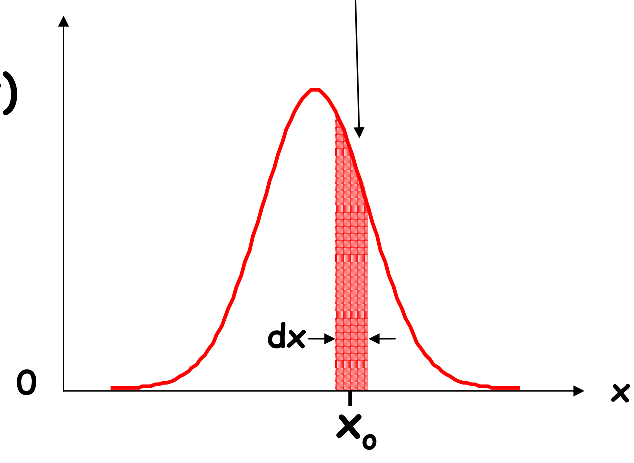
Toestand op t is beschreven door complexe golffunctie $\Psi(x,t)$.

$\Psi(x,t)^*\Psi(x,t)$ heeft betekenis kansdichtheid

Dat x een waarde heeft die in dit gebiedje dx valt heeft waarschijnlijkheid $W(x_o<x<x_o+dx) = |\Psi(x_o,t)|^2\,dx$

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

$= |\Psi(x,t)|^2$



Postulaat 2

Alle fysische eigenschappen worden beschreven door een operator.
Eigenschap A door operator Â, dit is is een *observabele*.
Een operator is dus een observabele als de eigenwaarden reëel zijn.

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

A kan zijn, energie, impuls, elektrische dipool, ……..

Â kan continu (1D positie van deeltje) of discreet (energie in atoom) spectrum van eigenwaarden hebben.

Waarom operatoren?

Eerst voorbeelden van operatoren met een klassieke toestand.

Met operatoren kun je bijvoorbeeld:

1. Beschrijven hoe een fysische eigenschap kan worden berekend, gegeven een zeker toestand.
2. Beschrijven hoe toestand B van het systeem volgt uit toestand A.

Notatie voor toestand van een deeltje met massa m, bewegend in 1 dimensie (hier dus eerst een klassiek toestand me precieze waarde voor X en P):

$$\boxed{X_1, P_1}$$

Deze blauwe box betekend "in de toestand", met het deeltje
Op plaats X_1 en impulsmoment P_1.

Beschrijven hoe eindtoestand van het systeem volgt uit een begintoestand, bijvoorbeeld tijdsevolutie van een vrij deeltje.

Definieer operator voor tijdsevolutie van een toestand

(hier voor het geval van een vrij deeltje):

$$\hat{U}(t_{START}, t_{END})$$

Dakje erop geeft aan dat het een operator is.

Dan is het resultaat van deze operator werkend op een toestand $\boxed{X_1, P_1}$

$$\hat{U}(t_{START}, t_{END})\ \boxed{X_1, P_1} = \boxed{\left(X_1 + \frac{P_1}{m}\cdot(t_{END} - t_{START})\right), P_1}$$

Beschrijven hoe een fysische eigenschap kan worden berekend, gegeven een zeker toestand, bijvoorbeeld kinetische energie.

Definieer operator voor kinetische energie:

$$\hat{T}$$

Dakje erop geeft aan dat het een operator is.

Dan is het resultaat van deze operator werkend op een toestand $\boxed{X_1, P_1}$

$$\hat{T}\ \boxed{X_1, P_1} = \frac{P_1^2}{2m}$$

Echter, in de kwantum mechanica kan het systeem in meerdere klassieke toestanden tegelijk zijn, bijvoorbeeld de toestand

$$c_a \boxed{X_1, P_1} + c_b \boxed{X_2, P_2}$$

"+" betekende hier "en tegelijk ook in de toestand"

c_a geeft het gewicht waarmee die in die toestand zit

Maar ook deze toestand kan!

$$c_a \boxed{X_1, P_1} + c_b \boxed{X_2, P_2} + c_c \boxed{X_1, P_2}$$

Hoe kunnen we nu handig de kinetische energie beschrijven?

$$\hat{T}\left(c_a \boxed{X_1, P_1} + c_b \boxed{X_2, P_2} + c_c \boxed{X_1, P_2}\right) = c_a \frac{P_1^2}{2m} + c_b \frac{P_2^2}{2m} + c_c \frac{P_2^2}{2m}$$

N.B., de pure toestand $\boxed{X_1, P_1}$ is kwantummechanische niet toegestaan vanwege de Heisenberg onzekerheidsreslatie. Dat is in dit voorbeeld even genegeerd.

Operatoren

- Wat moet je je daar nu bij voorstellen?
- Welke eigenschappen?
- Zie je lineaire algebra vak voor achtergrond eigenwaarde probleem

$$\hat{A}\varphi_n(x) = a_n \varphi_n(x)$$

Mathematische bewerking op een golffunctie, die,
voor willekeurige toestand van het systeem,
het volgende kan voorstellen:

- Fysische eigenschap van het systeem afleiden uit de golffunctie.
- Beschrijven hoe toestand B van het systeem volgt uit toestand A

Voorbeeld:

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:

Beschrijven hoe toestand B van het systeem volgt uit toestand A.

Tijdsevolutie (voor systeem met stationaire Hamiltoninaan $\hat{H}$)

$$\hat{U} = e^{-\frac{it\hat{H}}{\hbar}}$$

$$\hat{U}\,\Psi(x,t_0) = \Psi(x,t_0 + t)$$

Ander voorbeeld:
Operator die de gehele golffunctie over zekere afstand verschuift in de ruimte (zie huiswerk).

Orthogonality of eigenfunctions (pas na H3 in boek)

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

a_n Eigenwaarde

$\varphi_n(x)$ Eigenfunctie

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

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

Neem aan dat A een scalaire fysische grootheid is.

Wat is

$\int \Psi(x,t_0)^* \hat{A}\Psi(x,t_0)dx$ $\Rightarrow$ Scalaire waarde van de grootheid A

$\hat{A}\Psi(x,t_0)$ $\Rightarrow$ Weer een golffunctie
(niet altijd genormaliseerd)

$\Psi(x,t_0)^* \hat{A}$ $\Rightarrow$ Weer een golffunctie
(niet altijd genormaliseerd)

Denk over:

- golffuncties als kolom-vectoren
- (golffuncties)* als rij-vectoren
- operatoren als matrices

Dit ook om de volgorde in de formulering goed te houden!

Denk over:

- golffuncties als kolom-vectoren
- (golffuncties)* als rij-vectoren
- operatoren als matrices

Ook handig om de volgorde in de integralen goed te houden!

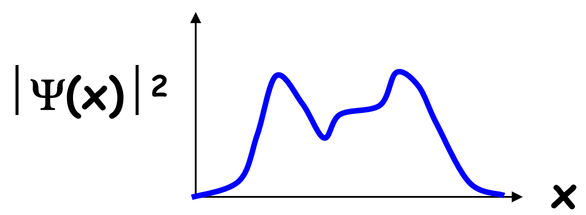
Voor scalaire eigenschap A (observabele $\hat{A}$)

$$\int \Psi(x,t_0)^* \hat{A} \Psi(x,t_0)\,dx \qquad \Rightarrow$$

$$\begin{pmatrix} c_1^* & c_2^* & c_3^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3} c_i^* c_j A_{ij} = \text{a real scalar number}$$

Continuous versus discrete degrees of freedom (pas na H3 in boek)

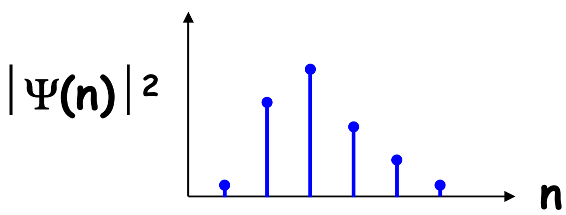
Continuous



$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x)\Psi(x)\,dx = 1$$

For example:
position of a particle

Discrete



$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \Psi^*(n)\Psi(n) = 1$$

For example:
number of electrons on a small conductor

Wordt vervolgd