Kwantumfysica I

2009-2010

Hoorcollege vrijdag 20 november 2009

Vragen n.a.v. stof vorige college?

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

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.

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

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

Functies van Operatoren

Stel

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

a_n Eigenwaarde

$\varphi_n(x)$ Eigenfunctie

Dan heeft de operator f(Â) de volgende eigenschappen:

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

$f(a_n)$ Eigenwaarde

$\varphi_n(x)$ 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:

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

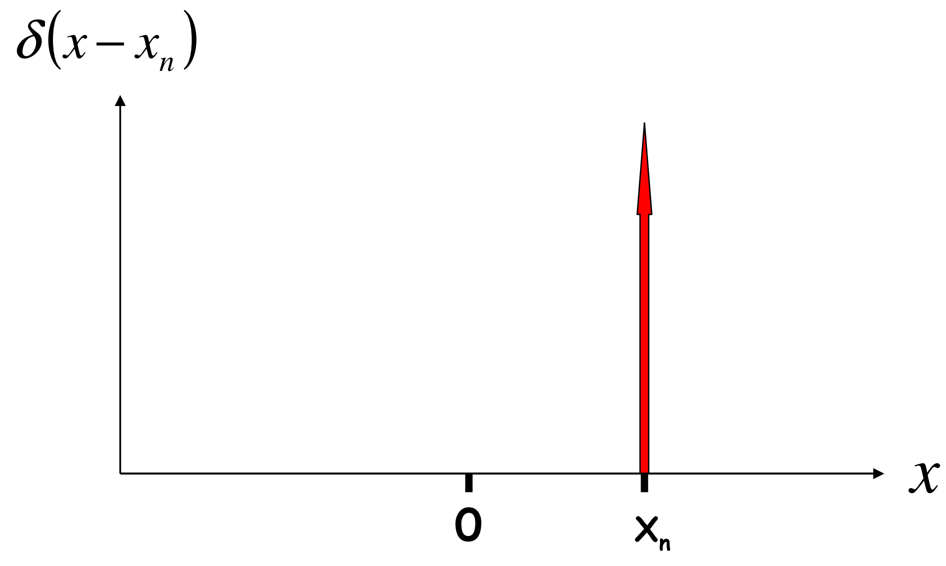
Wat is k?

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

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)

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

Tijdsonafhankelijk Schrödinger verg.

Oplossen voor free particle

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

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

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

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

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

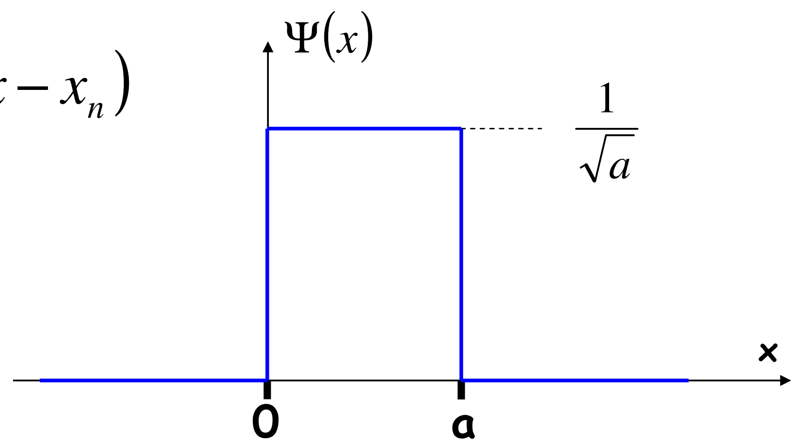
Verwachtingswaarde voor eigenschap A op $t = t_0$

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

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

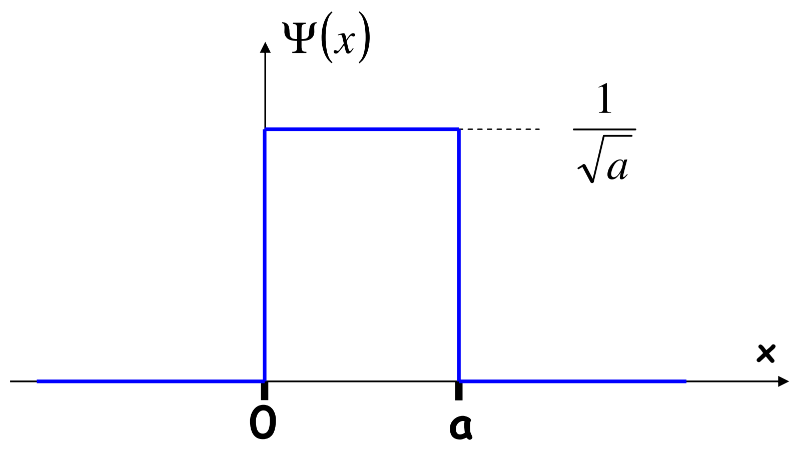


$$\begin{cases}\hat{X}\frac{1}{\sqrt{a}}=x\frac{1}{\sqrt{a}}\\ \hat{X}0=0\end{cases}$$

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

$$\left\langle \hat{X}\right\rangle =\int_{0}^{a}\left(\frac{1}{\sqrt{a}}\right)^{*}x\left(\frac{1}{\sqrt{a}}\right)dx=\frac{a}{2}$$

Voorbeeld verwachtings waarde: Δx



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

$$\left\langle \hat{X}^{2}\right\rangle =\int_{0}^{a}\left(\frac{1}{\sqrt{a}}\right)^{*}x^{2}\left(\frac{1}{\sqrt{a}}\right)dx=\frac{a^{2}}{3}$$

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

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 tijds**on**afhankelijke 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 tijdsonafhankelijke Schrödinger vergelijking

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = \hat{H}_0 \Psi(x,t)$$

Stel $\Psi(x,t) = \varphi(x)\chi(t)$

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

$$\begin{cases} \hat{H}_0 \varphi(x) = E\varphi(x) & \Rightarrow \text{Tijdsonafhankelijke Schrödinger vergelijking, eigenwaarde probleem voor energie} \\ i\hbar \dfrac{\mathrm{d}\chi(t)}{\chi(t)} = E\,\mathrm{d}t & \Rightarrow \text{Tijdsevolutie van de energie-eigentoestanden} \end{cases}$$

Time-evolution operator:

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

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

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

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

Stationary states – <u>nothing</u> moves:

For system with time-independent Hamiltonian $\hat{H}_0$ <u>in energy eigenstate</u> φ_n at $t=0$, how does an arbitrary property A depend on time?

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

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

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

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

Is constant in time!

Arbitrary phase factor:

For example:

For system with time-independent Hamiltonian $\hat{H}_0$ <u>in energy eigenstate</u> 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 *I*

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

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

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

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

$$\langle\hat{H}_0\rangle(t)=\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\left[e^{\frac{+iE_1t}{\hbar}}\varphi_1(x)^*+e^{\frac{+iE_2t}{\hbar}}\varphi_2(x)^*\right]\hat{H}_0\left[e^{\frac{-iE_1t}{\hbar}}\varphi_1(x)+e^{\frac{-iE_2t}{\hbar}}\varphi_2(x)\right]dx$$

$$\langle\hat{H}_0\rangle(t)=\frac{E_1+E_2}{2}$$ **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

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

$$\langle\hat{A}\rangle(t)=\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\left[e^{\frac{+iE_1t}{\hbar}}\varphi_1(x)^*+e^{\frac{+iE_2t}{\hbar}}\varphi_2(x)^*\right]\hat{A}\left[e^{\frac{-iE_1t}{\hbar}}\varphi_1(x)+e^{\frac{-iE_2t}{\hbar}}\varphi_2(x)\right]dx$$

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

$\left(\textit{used here}\ \langle\hat{A}\rangle_{12}=\langle\hat{A}\rangle_{21}\right)$
(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 $\hbar\omega=E_n-E_m$.

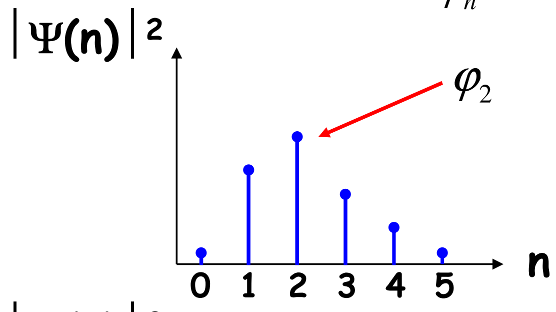
Postulaat 4

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.

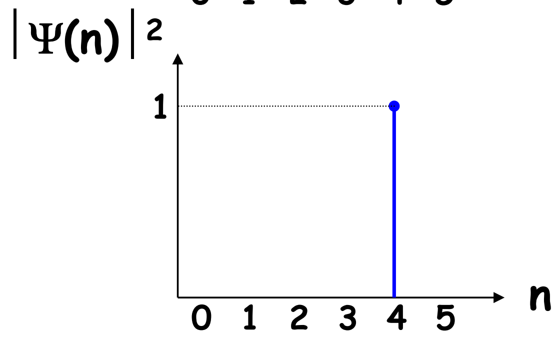
$$\hat{N}\varphi_n = n\varphi_n$$
$$\hat{A}\varphi_n = n^2\varphi_n$$

Discreet voorbeeld A=N²

Voor meten



Na meten



Meetuikomst was 16

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

Postulaat 5 - discreet (weinig aandacht in boek)

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

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

Zelfde voorbeeld A=N²

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

Stel voor het meten

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

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

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):

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

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

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 coordinaten n in onderstaande voorbeeld. Dit maakt de link met het continue geval (volgende slide) duidelijker.

Stel voor het meten

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

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

<u>Kans</u> op meetuitkomst behorend bij eigenvector $\varphi_4(n)$ is dan

$$\left|\sum_n \Psi(n)^* \varphi_4(n)\right|^2 = \left|\sum_n \left(\sum_m c_m^* \varphi_m^*(n)\right) \cdot \varphi_4(n)\right|^2 =$$

$$0 + \left|\sum_n c_1^* \varphi_1^*(n) \cdot \varphi_4(n)\right|^2 + \left|\sum_n c_2^* \varphi_2^*(n) \cdot \varphi_4(n)\right|^2 + 0 + \left|\sum_n c_4^* \varphi_4^*(n) \cdot \varphi_4(n)\right|^2 + 0 =$$

$$0 + 0 + 0 + 0 + |c_4^*|^2 + 0 = |c_4|^2$$

Postulaat 5 - continu (weinig aandacht in boek)

Kans<u>dichtheid</u> op meetuitkomst a is $|\int \Psi(x,t)^* \ \varphi_a(x)\, dx|^2$

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

<u>Kans</u> 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:

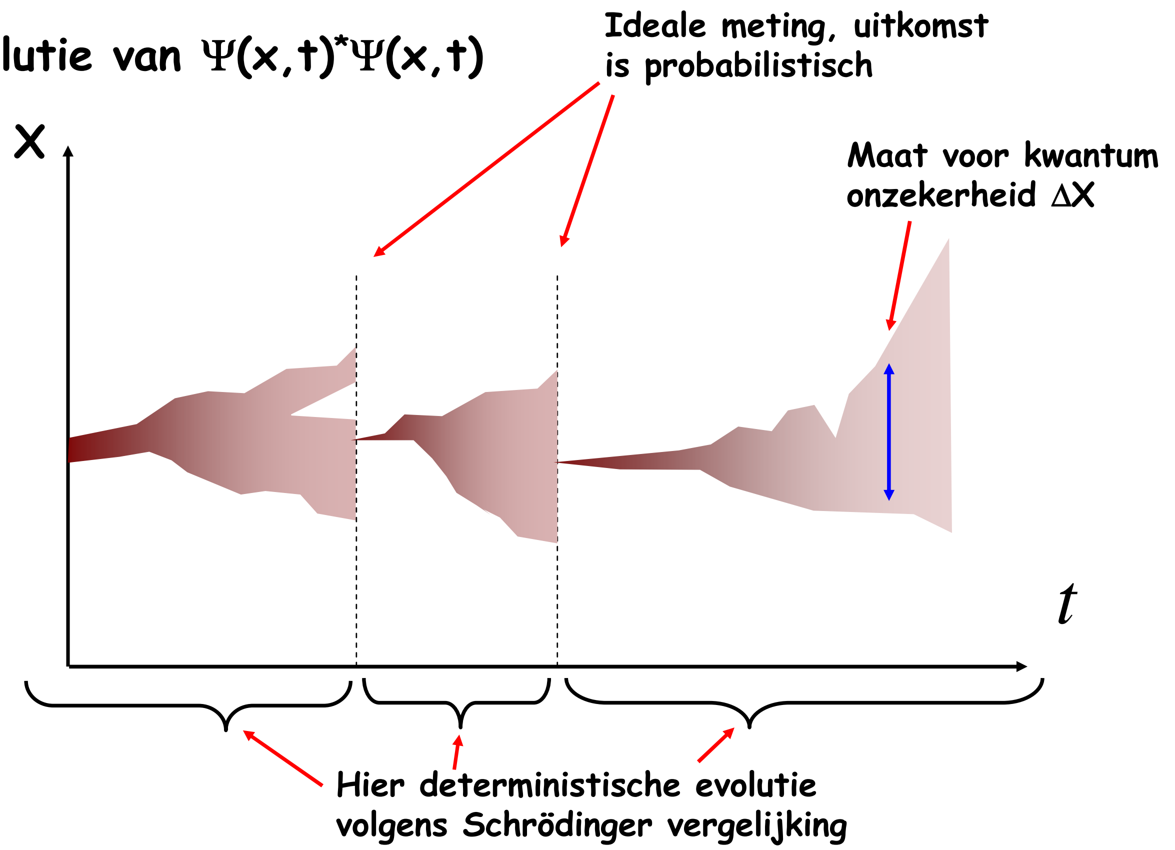
Handig denkmodel over wat de invloed van meten is,
in de volgende extreme limiet (ideale meting):
-Metingen met zeer sterke interactie tussen meter en kwantum systeem.
-De meting duurt heel erg kort.
-Er is geen interactie met de meter voor en na de meting.
Men spreekt in dit geval over "reductie" of "collapse" van de golffunctie.

Is in praktijk niet altijd het geval!

De gepresenteerde postulaten, interpretatie van golffunctie met de probabilistische interpretatie van het meetproces is de meest gangbare: <u>de Kopenhaagse interpretatie</u>.

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