

Μάθημα 18^ο, 19 Νοεμβρίου 2008 (9:00-10:00).

Άσκηση 14

Θεωρούμε κβαντικό σύστημα δύο επιπέδων, δηλαδή έχουμε δύο ιδιοκαταστάσεις της ενέργειας, $\hat{H}\Psi_1=E_1\Psi_1$ και $\hat{H}\Psi_2=E_2\Psi_2$, τις οποίες δεν γνωρίζουμε.

Ενώ για τον τελεστή A , γνωρίζουμε τις ιδιοκαταστάσεις του, δηλαδή

$$\hat{A}\Phi_1 = a\Phi_1$$

$$\hat{A}\Phi_2 = b\Phi_2$$

Γνωρίζουμε ακόμα ότι

$$\hat{H}\Phi_1 = \varepsilon\Phi_1 + \delta\Phi_2 \quad (1)$$

$$\hat{H}\Phi_2 = \delta\Phi_1 + \varepsilon\Phi_2 \quad (2)$$

(α) Να βρεθούν οι ιδιοκαταστάσεις της ενέργειας.

(β) Να βρεθεί πως εξελίσσεται χρονικά το σύστημα και η μέση τιμή του τελεστή A , αν το σύστημα προέρχεται αρχικά από μια μέτρηση στην οποία το φυσικό μέγεθος που περιγράφει ο τελεστής A , έχει τιμή b .

(γ) Να βρεθεί πως εξελίσσεται χρονικά το σύστημα και η μέση τιμή του τελεστή A ,

αν η αρχική κατάσταση είναι $\Psi^0(x) = \frac{\Phi_1 + \Phi_2}{\sqrt{2}}$

Λύση

(α) Χρησιμοποιούμε τις ιδιοσυναρτήσεις Φ_1, Φ_2 του τελεστή A , για να κάνουμε την αναπαράσταση του τελεστή της Χαμιλτονιανής.

Έτσι βρίσκουμε

$$\begin{bmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (\Phi_1, H\Phi_1) & (\Phi_1, H\Phi_2) \\ (\Phi_2, H\Phi_1) & (\Phi_2, H\Phi_2) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \varepsilon & \delta \\ \delta & \varepsilon \end{bmatrix}.$$

Καθώς

$$(\Phi_1, H\Phi_1) = (\Phi_1, \varepsilon\Phi_1 + \delta\Phi_2) = (\Phi_1, \varepsilon\Phi_1) + (\Phi_1, \delta\Phi_2) = \varepsilon(\Phi_1, \Phi_1) + \delta(\Phi_1, \Phi_2) = \varepsilon \cdot 1 + \delta \cdot 0 = \varepsilon$$

$$(\Phi_1, H\Phi_2) = (\Phi_1, \delta\Phi_1 + \varepsilon\Phi_2) = (\Phi_1, \delta\Phi_1) + (\Phi_1, \varepsilon\Phi_2) = \delta(\Phi_1, \Phi_1) + \varepsilon(\Phi_1, \Phi_2) = \delta \cdot 1 + \varepsilon \cdot 0 = \delta$$

$$(\Phi_2, H\Phi_1) = (\Phi_2, \varepsilon\Phi_1 + \delta\Phi_2) = (\Phi_2, \varepsilon\Phi_1) + (\Phi_2, \delta\Phi_2) = \varepsilon(\Phi_2, \Phi_1) + \delta(\Phi_2, \Phi_2) = \varepsilon \cdot 0 + \delta \cdot 1 = \delta$$

$$(\Phi_2, H\Phi_2) = (\Phi_2, \delta\Phi_1 + \varepsilon\Phi_2) = (\Phi_2, \delta\Phi_1) + (\Phi_2, \varepsilon\Phi_2) = \delta(\Phi_2, \Phi_1) + \varepsilon(\Phi_2, \Phi_2) = \delta \cdot 0 + \varepsilon \cdot 1 = \varepsilon$$

Αν βρούμε τις ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή της Χαμιλτονιανής θα βρεθούν με διαγωνοποίηση. Ο διαγώνιος πίνακας βρίσκεται από την συνθήκη $\det(H - \lambda I) = 0$.

$$\text{Αφού, } \begin{bmatrix} \varepsilon & \delta \\ \delta & \varepsilon \end{bmatrix} - \lambda \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \varepsilon - \lambda & \delta \\ \delta & \varepsilon - \lambda \end{bmatrix}$$

Η σχέση $\det(A - \lambda I) = 0$

$$(\varepsilon - \lambda)^2 - \delta^2 = 0$$

$$(\varepsilon - \lambda - \delta)(\varepsilon - \lambda + \delta) = 0$$

$$\boxed{\lambda_1 = \varepsilon + \delta} \quad \text{ή} \quad \boxed{\lambda_2 = \varepsilon - \delta}$$

↙ ↘
ιδιοτιμές

άρα ο καινούριος διαγώνιος πίνακας είναι:
$$\begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \varepsilon + \delta & 0 \\ 0 & \varepsilon - \delta \end{bmatrix}$$

και
$$\begin{aligned} H\Psi_1 &= \lambda_1 \Psi_1 = (\varepsilon + \delta) \Psi_1 \\ H\Psi_2 &= \lambda_2 \Psi_2 = (\varepsilon - \delta) \Psi_2 \end{aligned}$$

Τώρα θα βρω τις ιδιοσυναρτήσεις Ψ_1 και Ψ_2 . Οι ιδιοσυναρτήσεις αυτές θα είναι γραμμικός συνδυασμός των ιδιοσυναρτήσεων της ενέργειας, δηλαδή

$$\Psi_1 = d_{11}\Phi_1 + d_{12}\Phi_2$$

$$\Psi_2 = d_{21}\Phi_1 + d_{22}\Phi_2$$

Έτσι υπό μορφή στήλης τα ζητούμε ιδιοδιανύσματα (εδώ έχουμε αναπαράσταση των

ιδιοδιανυσμάτων με στήλη) είναι $\Psi_1 = \begin{bmatrix} d_{11} \\ d_{12} \end{bmatrix}$ και $\Psi_2 = \begin{bmatrix} d_{21} \\ d_{22} \end{bmatrix}$

Άρα για το πρώτο ιδιοδιάνυσμα, Ψ_1 χρειάζεται να λύσω το αλγεβρικό σύστημα:

$$\begin{bmatrix} \varepsilon - \lambda_1 & \delta \\ \delta & \varepsilon - \lambda_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_{11} \\ d_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \xrightarrow{\lambda_1 = \varepsilon + \delta} \begin{bmatrix} -\delta & \delta \\ \delta & -\delta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_{11} \\ d_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3)$$

Ενώ για το δεύτερο ιδιοδιάνυσμα, Ψ_2 χρειάζεται να λύσω το αλγεβρικό σύστημα:

$$\begin{bmatrix} \varepsilon - \lambda_2 & \delta \\ \delta & \varepsilon - \lambda_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_{21} \\ d_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \xrightarrow{\lambda_2 = \varepsilon - \delta} \begin{bmatrix} \delta & \delta \\ \delta & \delta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_{21} \\ d_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (4)$$

ο (3): $\begin{cases} -\delta d_{11} + \delta d_{12} \\ \delta d_{11} - \delta d_{12} \end{cases} \rightarrow \boxed{d_{11} = d_{12}}$

Αν θέλουμε να είναι και ορθοκανονικές οι ιδιοσυναρτήσεις, θα πρέπει να ισχύει ότι:

$$(\Psi_1, \Psi_1) = (d_{11}\Phi_1 + d_{12}\Phi_2, d_{11}\Phi_1 + d_{12}\Phi_2) = 1 \Rightarrow d_{11}^2 + d_{12}^2 = 1.$$

άρα $\boxed{d_{11} = d_{12} = \frac{1}{\sqrt{2}}}$

και $\Psi_1 = d_{11}\Phi_1 + d_{12}\Phi_2 \Rightarrow \boxed{\Psi_1 = \frac{\Phi_1 + \Phi_2}{\sqrt{2}}}$

ο (4): $\delta d_{21} + \delta d_{22} = 0 \rightarrow d_{21} + d_{22} = 0 \rightarrow \boxed{d_{21} = -d_{22}}$

Αλλά αφού $(\Psi_2, \Psi_2) = 1$

έχουμε $\boxed{d_{21} = -d_{22} = \frac{1}{\sqrt{2}}}$

άρα $\Psi_2 = d_{21}\Phi_1 + d_{22}\Phi_2 \Rightarrow \boxed{\Psi_2 = \frac{\Phi_1 - \Phi_2}{\sqrt{2}}}$

(β) Αφού το σύστημα προέρχεται αρχικά από μια μέτρηση στην οποία το φυσικό μέγεθος που περιγράφει ο τελεστής A , έχει τιμή b , έχουμε $\Psi^0(x) = \Phi_2$.

Αλλά έχουμε $\Psi_1 = \frac{\Phi_1 + \Phi_2}{\sqrt{2}}$ και $\Psi_2 = \frac{\Phi_1 - \Phi_2}{\sqrt{2}}$, οπότε αφαιρώντας τις δυο αυτές

σχέσεις βρίσκουμε $\Phi_2 = \frac{\Psi_1 - \Psi_2}{\sqrt{2}}$, έτσι βρίσκουμε $\boxed{c_1 = -c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}}$

$\boxed{c_i = 0}$ για $(i \geq 3)$.

Έτσι η κυματοσυνάρτηση που περιγράφει το σύστημα ανα πάσα χρονική στιγμή είναι

$$\Psi(x,t) = \frac{\Psi_1 e^{\frac{-iE_1 t}{\hbar}} - \Psi_2 e^{\frac{-iE_2 t}{\hbar}}}{\sqrt{2}}.$$

Ενώ από τις σχέσεις $\hat{A}\Phi_1 = a\Phi_1$ βρίσκω τα στοιχεία του πίνακα A_{nm} , τώρα όμως με $\hat{A}\Phi_2 = b\Phi_2$

αναπαράσταση ως προς τις ιδιοσυναρτήσεις της ενέργειας. Για παράδειγμα

$$\begin{aligned} A_{11} &= (\Psi_1, A\Psi_1) = \left(\frac{\Phi_1 + \Phi_2}{\sqrt{2}}, A \left(\frac{\Phi_1 + \Phi_2}{\sqrt{2}} \right) \right) = \frac{1}{2} [(\Phi_1, A\Phi_1) + (\Phi_1, A\Phi_2) + (\Phi_2, A\Phi_1) + (\Phi_2, A\Phi_2)] = \\ &= \frac{1}{2} [(\Phi_1, a\Phi_1) + (\Phi_1, b\Phi_2) + (\Phi_2, a\Phi_1) + (\Phi_2, b\Phi_2)] = \\ &= \frac{1}{2} [a(\Phi_1, \Phi_1) + b(\Phi_1, \Phi_2) + a(\Phi_2, \Phi_1) + b(\Phi_2, \Phi_2)] = \frac{a+b}{2} \end{aligned}$$

$$\text{Ανάλογα βρίσκουμε } A_{12} = \frac{a-b}{2}, A_{21} = \frac{a-b}{2}, A_{22} = \frac{a+b}{2}.$$

Οι παραπάνω τιμές είναι ανεμενόμενες καθώς έχουμε

$$\hat{A}\Phi_1 = a\Phi_1 \Rightarrow \hat{A}(\Psi_1 + \Psi_2) = a(\Psi_1 + \Psi_2)$$

$$\hat{A}\Phi_2 = b\Phi_2 \Rightarrow \hat{A}(\Psi_1 - \Psi_2) = b(\Psi_1 - \Psi_2)$$

και από την προσθαφαίρεση των παραπάνω σχέσεων βρίσκουμε

$$\hat{A}\Psi_1 = \frac{a+b}{2}\Psi_1 + \frac{a-b}{2}\Psi_2$$

$$\hat{A}\Psi_2 = \frac{a-b}{2}\Psi_1 + \frac{a+b}{2}\Psi_2.$$

Έτσι βρίσκουμε

$$\begin{aligned} \langle A \rangle(t) &= \frac{1}{2}(A_{11} + A_{22}) - \frac{1}{2}(A_{12}e^{i\omega_{12}t} + A_{21}e^{i\omega_{21}t}) = \frac{1}{2}\left(\frac{a+b}{2} + \frac{a+b}{2}\right) - \frac{1}{2}\left(\frac{a-b}{2}e^{i\omega_{12}t} + \frac{a-b}{2}e^{i\omega_{21}t}\right) = \\ &= \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}\cos\omega_{12}t. \end{aligned}$$

(γ) Καθώς η αρχική κατάσταση είναι $\Psi^0(x) = \frac{\Phi_1 + \Phi_2}{\sqrt{2}} = \Psi_1$, έχουμε μία στάσιμη

$$\text{κατάσταση και } \Psi(x,t) = \Psi_1 e^{\frac{-iE_1 t}{\hbar}}.$$

Τώρα έχουμε $c_1 = 1$, ενώ όλοι οι άλλοι συντελεστές μηδενίζονται. Έτσι έχουμε

$$\langle A \rangle(t) = A_{11} = \frac{a+b}{2}.$$

Συμβολισμός Dirac

Πολλές φορές για την αναπαράσταση των ιδιοδιανυσμάτων χρησιμοποιείται ο φορμαλισμός του Dirac.

Στα πλαίσια αυτού του φορμαλισμού έχουμε τις εξής αντιστοιχίες: $\phi_i(x) \rightarrow |i\rangle$ και $\phi_i^*(x) \rightarrow \langle i|$, όπου $\phi_i(x)$ ιδιοδιανύσματα κάποιου τελεστή που περιγράφει φυσικό μέγεθος.

Το $|i\rangle$ ονομάζεται ket-ιδιοδιάνυσμα και το $\langle i|$ ονομάζεται bra-ιδιοδιάνυσμα.

Το εσωτερικό γινόμενο ορίζεται ως: $\int \phi_i^*(x)\phi_j(x)dx \rightarrow \langle i|j\rangle$ (το $\langle i|j\rangle$ ονομάζεται bracket).

Η συνθήκη ορθοκανονικότητας δύο ιδιοσυνάρτησεων με τη χρήση του συμβολισμού Dirac παίρνει τη μορφή $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$.

Ενώ η πληρότητα των ιδιοκαταστάσεων* δίνεται από την έκφραση

$$\hat{1} = \sum_i |i\rangle\langle i|, \text{ όπου } \hat{1} \text{ είναι ο μοναδιαίος τελεστής.}$$

Η ανάπτυξη της αυθαίρετης κατάστασης $|\Psi\rangle$ (καθώς και η κυματοσυνάρτηση $\Psi(x)$) έχει ανάλογη αντιστοιχία $\Psi(x) \rightarrow |\Psi(x)\rangle$ σε ιδιοκαταστάσεις $|n\rangle$ εκφράζεται ως

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle = \sum_n [\langle n|\Psi\rangle] |n\rangle, \text{ όπου } c_n = \langle n|\Psi\rangle.$$

Οπότε, γενικεύοντας τα στοιχεία αναπαράστασης με πίνακα του τελεστή A , υπολογίζονται από την σχέση: $A_{ij} \equiv \int \phi_i^*(x)(A\phi_j(x))dx \rightarrow \langle i|A|j\rangle$.

Τέλος, με την βοήθεια των ιδιοδιανυσμάτων αυτών ορίζουμε και τελεστές, όπως ο προβολικός τελεστής $|i\rangle\langle i|$, ο οποίος «προβάλλει» την κυματοσυνάρτηση $|\Psi\rangle$ πάνω στην ιδιοκατάσταση $|i\rangle$ ($|i\rangle\langle i|\Psi\rangle = \langle i|\Psi\rangle|i\rangle = c_i|i\rangle$).

Επίσης

$$\psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \psi_n(x) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \Rightarrow |\psi(x,t)\rangle = \sum \langle n|\psi 0\rangle e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} |n\rangle$$

Άσκηση 15

Έστω ότι έχω $\hat{H} = \varepsilon|1\rangle\langle 1| + \varepsilon|2\rangle\langle 2| + \delta|1\rangle\langle 2| + \delta|2\rangle\langle 1|$,

όπου τα διανύσματα $|1\rangle, |2\rangle$ είναι τα ιδιοδιανύσματα του τελεστή A,

$$\hat{A}|1\rangle = \alpha_1|1\rangle \quad \hat{A}|2\rangle = \alpha_2|2\rangle$$

Να βρεθούν οι ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα του τελεστή της ενέργειας.

Λύση

Ο τελεστής της ενέργειας σε μορφή πίνακα είναι

$$\begin{bmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle 1|\hat{H}|1\rangle & \langle 1|\hat{H}|2\rangle \\ \langle 2|\hat{H}|1\rangle & \langle 2|\hat{H}|2\rangle \end{bmatrix}$$

Οπότε

$$H_{11} = \langle 1|\hat{H}|1\rangle = \langle 1| [\varepsilon|1\rangle\langle 1| + \varepsilon|2\rangle\langle 2| + \delta|1\rangle\langle 2| + \delta|2\rangle\langle 1|]$$
$$= \varepsilon\langle 1|1\rangle\langle 1|1\rangle + \varepsilon\langle 1|2\rangle\langle 2|1\rangle + \delta\langle 1|1\rangle\langle 2|1\rangle + \delta\langle 1|2\rangle\langle 1|1\rangle$$

$$\begin{array}{cc} \downarrow & \downarrow \\ 0 & 0 \end{array} \qquad \begin{array}{cc} \downarrow & \downarrow \\ 0 & 0 \end{array}$$

↓

Λόγω ορθοκανονικότητας

Ομοίως για H_{12}, H_{22}, H_{21} βρίσκουμε

$$\begin{bmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \varepsilon & \delta \\ \delta & \varepsilon \end{bmatrix}$$

Ιδιοδιανύσματα του H, $\hat{H}|\Phi_1\rangle = E_1|\phi_1\rangle$ και $\hat{H}|\Phi_2\rangle = E_2|\phi_2\rangle$

$$\text{Διαγωνοποιώ τον } \begin{bmatrix} \varepsilon & \delta \\ \delta & \varepsilon \end{bmatrix} \rightarrow \rightarrow \rightarrow \det \begin{bmatrix} \varepsilon - \lambda & \delta \\ \delta & \varepsilon - \lambda \end{bmatrix} = 0 \Rightarrow (\varepsilon - \lambda)(\varepsilon - \lambda) - \delta^2 = 0$$

οπότε $\lambda_1 = \varepsilon + \delta \rightarrow E_1$ και $\lambda_2 = \varepsilon - \delta \rightarrow E_2$

Για $\lambda_1 = \varepsilon + \delta$

$$\begin{bmatrix} -\delta & \delta \\ \delta & -\delta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_{11} \\ d_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow -\delta d_{11} + \delta d_{12} = 0 + d_{11} = d_{12} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Οπότε $|\phi_1\rangle = d_1|1\rangle + d_2|2\rangle$ και $\langle\phi_1| = d_1^*\langle 1| + d_2^*\langle 2|$

Έτσι

$$|\phi_1\rangle = \frac{|1\rangle + |2\rangle}{\sqrt{2}} \text{ και } |\phi_2\rangle = \frac{|1\rangle - |2\rangle}{\sqrt{2}}.$$