

Μάθημα 17^ο, 18 Νοεμβρίου 2008 (9:00-11:00).

Άσκηση – Bonus[+0.5 στον τελικό βαθμό]

Για ένα μονοδιάστατο κβαντικό σύστημα που περιγράφεται από τρεις καταστάσεις με ενέργεια E_1 , E_2 και E_3 και αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις Ψ_1, Ψ_2, Ψ_3

μεγέθους. Πως εκτιμούμε την κυματοσυνάρτηση;

Να παρουσιασθούν τουλάχιστον τρία παραδείγματα στο πνεύμα των ασκήσεων που βρίσκονται στον ιστότοπο του μαθήματος [ΑσκήσειςΚΒΑΝΤΟΙ_ΓενικέςΈννοιεςΚβαντομηχανικής_σετ1].

Η παρουσίαση να γίνει σε ένα doc αρχείο.

Αναπαράσταση τελεστών με πίνακα

Ένας τελεστής A , μπορεί να αναπαρασταθεί ως πίνακας με στοιχεία που δίνονται από

$$A_{nm} = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^* \hat{A} \Psi_m dx$$

Τα n, m είναι τόσα, όσες είναι και οι ιδιοκαταστάσεις του συστήματος, για παράδειγμα αν έχουμε δυο ιδιοκαταστάσεις με ενέργειες E_1 και E_2 , και ιδιοκαταστάσεις Ψ_1, Ψ_2 , ορίζεται ο πίνακας:

$$\begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^* \hat{A} \Psi_1 dx & \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^* \hat{A} \Psi_2 dx \\ \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_2^* \hat{A} \Psi_1 dx & \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_2^* \hat{A} \Psi_2 dx \end{bmatrix}.$$

Οι ιδιοσυναρτήσεις που χρησιμοποιούμε για να ορίσουμε τον πίνακα δεν είναι απαραίτητο να είναι οι ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή της Χαμιλτονιανής (ενέργειας), αλλά μπορεί να είναι οι ιδιοσυναρτήσεις οποιουδήποτε τελεστή T .

Προφανώς, η αναπαράσταση ενός τελεστή με βάση τις ιδιοκαταστάσεις του θα είναι ένας διαγώνιος πίνακας.

Πράγματι, αν $\hat{A}\Psi_1 = a_1\Psi_1$, $\hat{A}\Psi_2 = a_2\Psi_2$, έχουμε

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^* \hat{A} \Psi_1 dx & \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^* \hat{A} \Psi_2 dx \\ \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_2^* \hat{A} \Psi_1 dx & \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_2^* \hat{A} \Psi_2 dx \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^* a_1 \Psi_1 dx & \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^* a_2 \Psi_2 dx \\ \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_2^* a_1 \Psi_1 dx & \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_2^* a_2 \Psi_2 dx \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} a_1 \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^* \Psi_1 dx & a_2 \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^* \Psi_2 dx \\ a_1 \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_2^* \Psi_1 dx & a_2 \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_2^* \Psi_2 dx \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 & 0 \\ 0 & a_2 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Άσκηση 13

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

Για τον τελεστή A, γνωρίζουμε τις εξής ιδιοτητές του

$$\hat{A}\Psi_1 = a\Psi_1 + b\Psi_2 \quad (1)$$

$$\hat{A}\Psi_2 = b\Psi_1 + a\Psi_2 \quad (2)$$

(α) Να βρεθούν οι ιδιοκαταστάσεις του τελεστή A.

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

βρίσκεται αρχικά στην κατάσταση $\Psi^0(x) = \left(\frac{\Psi_1 + \Psi_2}{\sqrt{2}} \right)$.

Λύση

(α) Έστω Φ_1, Φ_2 είναι οι ιδιοκαταστάσεις του τελεστή \hat{A} . Για να είναι οι Φ_1, Φ_2 οι ιδιοκαταστάσεις του \hat{A} πρέπει να ισχύουν:

$$\hat{A}\Phi_1 = \alpha_1\Phi_1$$

$$\hat{A}\Phi_2 = \alpha_2\Phi_2$$

Για να δούμε αν μπορούμε να βρούμε κάποιους γραμμικούς συνδυασμούς που να μας δίνουν την παραπάνω ζητούμενη μορφή.

Προσθέτουμε τις δυο σχέσεις (1) + (2) και βρίσκουμε

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

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

δηλαδή παρατηρούμε ότι η $(\Psi_1 + \Psi_2)$ είναι ιδιοκατάσταση του τελεστή A με ιδιοτιμή $(a+b)$.

Βέβαια η $(\Psi_1 + \Psi_2)$ δεν είναι νορμαλισμένη, αν η Ψ_1, Ψ_2 είναι νορμαλισμένες, γιατί

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} (\Psi_1 + \Psi_2)^* (\Psi_1 + \Psi_2) dx &= \int_{-\infty}^{\infty} (\Psi_1^* \Psi_1 + \Psi_1^* \Psi_2 + \Psi_2^* \Psi_1 + \Psi_2^* \Psi_2) dx = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^* \Psi_1 dx + \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_2^* \Psi_2 dx = 1 + 1 = 2. \end{aligned}$$

Προφανώς, η νορμαλισμένη ιδιοσυνάρτηση είναι $(\Psi_1 + \Psi_2)/\sqrt{2}$, καθώς

$$\int_{-\infty}^{\infty} (\Psi_1 + \Psi_2)^* (\Psi_1 + \Psi_2) dx = 2 \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\Psi_1 + \Psi_2}{\sqrt{2}} \right)^* \left(\frac{\Psi_1 + \Psi_2}{\sqrt{2}} \right) dx = 1.$$

Τώρα αφαιρούμε τις δυο σχέσεις (1) - (2) και βρίσκουμε

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

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

δηλαδή παρατηρούμε ότι η $(\Psi_1 - \Psi_2)$ είναι ιδιοκατάσταση του τελεστή A με ιδιοτιμή $(a-b)$.

Βέβαια η $(\Psi_1 - \Psi_2)$ δεν είναι νορμαλισμένη, αν η Ψ_1, Ψ_2 είναι νορμαλισμένες, γιατί

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} (\Psi_1 - \Psi_2)^* (\Psi_1 - \Psi_2) dx &= \int_{-\infty}^{\infty} (\Psi_1^* \Psi_1 - \Psi_1^* \Psi_2 - \Psi_2^* \Psi_1 + \Psi_2^* \Psi_2) dx = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^* \Psi_1 dx + \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_2^* \Psi_2 dx = 1 + 1 = 2. \end{aligned}$$

Προφανώς, η νορμαλισμένη ιδιοσυνάρτηση είναι $(\Psi_1 - \Psi_2)/\sqrt{2}$, καθώς

$$\int_{-\infty}^{\infty} (\Psi_1 - \Psi_2)^* (\Psi_1 + \Psi_2) dx = 2 \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\Psi_1 - \Psi_2}{\sqrt{2}} \right)^* \left(\frac{\Psi_1 - \Psi_2}{\sqrt{2}} \right) dx = 1.$$

Ποια η χρησιμότητα της αναπαράστασης τελεστών με πίνακες;

Ο τελεστής A , σε σχέση με τις ιδιοσυναρτήσεις Ψ_1, Ψ_2 έχει την αναπαράσταση

$$\begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a & b \\ b & a \end{bmatrix}.$$

Αν βρούμε τις ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή και κάνουμε την αναπαράσταση ως προς

αυτές τις ιδιοσυναρτήσεις θα έχουμε $\begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 & 0 \\ 0 & a_2 \end{bmatrix}$, όπου προφανώς τα a_1

και a_2 είναι οι ιδιοτιμές του τελεστή A . Πως μπορούμε να πάμε από την αρχική μη διαγώνια μορφή στην διαγώνια. Προφανώς με διαγωνοποίηση.

Άρα η μεθοδολογία για την εύρεση των ιδιοσυναρτήσεων είναι ισοδύναμη με την διαγωνοποίηση του πίνακα.

ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΑ ΔΙΑΓΩΝΟΠΟΙΗΣΗΣ

Αρχικός μη διαγώνιος πίνακας: $A = \begin{bmatrix} a & b \\ b & a \end{bmatrix}$.

Ο διαγώνιος πίνακας βρίσκεται από την συνθήκη $\det(A - \lambda I) = 0$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

όπου I είναι ο μοναδιαίος πίνακας.

Από αυτή την σχέση υπολογίζω το λ .

Αφού, $\begin{bmatrix} a & b \\ b & a \end{bmatrix} - \lambda \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a - \lambda & b \\ b & a - \lambda \end{bmatrix}$

Η σχέση $\det(A - \lambda I) = 0$

$$(a - \lambda)^2 - b^2 = 0$$

$$(a - \lambda - b)(a - \lambda + b) = 0$$

$$\boxed{\lambda_1 = a + b} \text{ ή } \boxed{\lambda_2 = a - b}$$

↙ ↘
ιδιοτιμές

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

και $\hat{A}\Phi_1 = \lambda_1\Phi_1 = (a + b)\Phi_1$

$$\hat{A}\Phi_2 = \lambda_2\Phi_2 = (a - b)\Phi_2$$

Τώρα θα βρω τις ιδιοσυναρτήσεις Φ_1 και Φ_2 . Οι ιδιοσυναρτήσεις αυτές θα είναι γραμμικός συνδυασμός των ιδιοσυναρτήσεων της ενέργειας, δηλαδή

$$\Phi_1 = d_{11}\Psi_1 + d_{12}\Psi_2$$

$$\Phi_2 = d_{21}\Psi_1 + d_{22}\Psi_2.$$

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

$$\text{ιδιοδιανυσμάτων με στήλη) είναι } \Phi_1 = \begin{bmatrix} d_{11} \\ d_{12} \end{bmatrix} \text{ και } \Phi_2 = \begin{bmatrix} d_{21} \\ d_{22} \end{bmatrix}.$$

Άρα για το πρώτο ιδιοδιάνυσμα, Φ_1 χρειάζεται να λύσω το αλγεβρικό σύστημα:

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

Ενώ για το δεύτερο ιδιοδιάνυσμα, Φ_2 χρειάζεται να λύσω το αλγεβρικό σύστημα:

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

$$\circ \quad (3): \begin{cases} -bd_{11} + bd_{12} \\ bd_{11} - bd_{12} \end{cases} \rightarrow \boxed{d_{11} = d_{12}}$$

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

$$(\Phi_1, \Phi_1) = (d_{11}\Psi_1 + d_{12}\Psi_2, d_{11}\Psi_1 + d_{12}\Psi_2) = 1 \Rightarrow d_{11}^2 + d_{12}^2 = 1.$$

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

$$\text{και } \Phi_1 = d_{11}\Psi_1 + d_{12}\Psi_2 \Rightarrow \boxed{\Phi_1 = \frac{\Psi_1 + \Psi_2}{\sqrt{2}}}$$

$$\circ \quad (4): bd_{21} + bd_{22} = 0 \rightarrow d_{21} + d_{22} = 0 \rightarrow \boxed{d_{21} = -d_{22}}$$

Αλλά αφού $(\Phi_2, \Phi_2) = 1$

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

$$\text{άρα } \Phi_2 = d_{21}\Psi_1 + d_{22}\Psi_2 \Rightarrow \boxed{\Phi_2 = \frac{\Psi_1 - \Psi_2}{\sqrt{2}}}$$

Όπου, χρησιμοποιήσαμε παραπάνω τον συμβολισμό του **εσωτερικού γινομένου** (παρένθεση), $(\Psi_1, \Psi_2) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} (\Psi_1)^* \Psi_2 dx$, των κυματοσυναρτήσεων Ψ_1 και Ψ_2 .

(β) Καθώς Ψ_1 και Ψ_2 είναι οι ιδιοκαταστάσεις της Χαμιλτονιανής \hat{H} , έχουμε $\langle \hat{A} \rangle(t) = \sum_{n,m} c_n^* c_m e^{i\omega_{nm}t} A_{nm}$, όπου $c_n = (\Psi_n, \Psi^0(x)) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^*(x) \Psi^0(x) dx$ και

$$\omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar}.$$

Τα A_{nm} είναι τα στοιχεία μήτρας $A_{11} = a, A_{12} = b, A_{21} = b, A_{22} = a$ ($A = \begin{bmatrix} a & b \\ b & a \end{bmatrix}$).

$$\text{Αφού η αρχική κατάσταση είναι } \Psi^0(x) = \frac{\Psi_1 + \Psi_2}{\sqrt{2}} \rightarrow \boxed{c_1 = c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}} \\ \boxed{c_i = 0} \text{ για } (i \geq 3).$$

Έτσι βρίσκουμε

$$\langle A \rangle(t) = \frac{1}{2}(A_{11} + A_{22}) + \frac{1}{2}(A_{12}e^{i\omega_{12}t} + A_{21}e^{i\omega_{21}t}) = \frac{1}{2}(a + a) + \frac{1}{2}(be^{i\omega_{12}t} + be^{i\omega_{21}t}) = a + b \cos \omega_{12}t.$$

Ενώ η κυματοσυνάρτηση που περιγράφει το σύστημα ανά πάσα χρονική στιγμή είναι

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

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 $\Psi^0(x) = \frac{\Phi_1 + \Phi_2}{\sqrt{2}}$