ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΠΑΤΡΩΝ
UNIVERSITY OF PATRAS

ΑΝΟΙΚΤΑ ακαδημαϊκά μαθήματα ΠΠ

Κβαντική Φυσική Ι

Ενότητα 17: Εφαρμογή στην αναπαράσταση τελεστών με μήτρα και εισαγωγή στον συμβολισμό Dirac

Ανδρέας Τερζής
Σχολή Θετικών Επιστημών
Τμήμα Φυσικής

Σκοποί ενότητας

- Σκοπός της ενότητας είναι να παραθέσει μια πιο ολοκληρωμένη εφαρμογή στην αναπαράσταση τελεστών με μήτρα και να εισάγει τον συμβολισμό Dirac.

Περιεχόμενα ενότητας

- Εφαρμογή
- Φορμαλισμός Dirac

Εκφώνηση εφαρμογής

- Θεωρούμε ένα κβαντικό σύστημα δύο επιπέδων, δηλαδή έχουμε δύο ιδιοκαταστάσεις της ενέργειας, τις οποίες δεν γνωρίζουμε. Για το τελεστή $\hat{\mathrm{A}}$ γνωρίζουμε τις ιδιοκαταστάσεις του, δηλ.

$$\hat{\mathrm{A}}\Phi_1 = \alpha\Phi_1$$
$$\hat{\mathrm{A}}\Phi_2 = b\Phi_2$$

Γνωρίζουμε ακόμη ότι

$$\hat{\mathrm{H}}\Phi_1 = \varepsilon\Phi_1 + \delta\Phi_2$$
$$\hat{\mathrm{H}}\Phi_2 = \delta\Phi_1 + \varepsilon\Phi_2$$

1. Να βρεθούν οι ιδιοκαταστάσεις της ενέργειας.
2. Την χρονική στιγμή $t = 0$ πραγματοποιούμε μια μέτρηση στο φυσικό μέγεθος που περιγράφει ο τελεστής $\hat{\mathrm{A}}$ και βρίσκουμε την ιδιοτιμή b. Να βρεθεί πώς εξελίσσεται χρονικά το σύστημα και η μέση τιμή του τελεστή $\hat{\mathrm{A}}$.

Ιδιοτιμές χαμιλτονιανής

- Η αναπαράσταση της χαμιλτονιανής θα γίνει κάνοντας χρήση των ιδιοσυναρτήσεων του τελεστή Α.
- Θα έχουμε λοιπόν $\mathrm{H} = \begin{pmatrix} \varepsilon & \delta \\ \delta & \varepsilon \end{pmatrix}$
- Για παράδειγμα για το στοιχείο H_{11} θα έχουμε:

$$\mathrm{H}_{11} = \left(\Phi_1, \widehat{\mathrm{H}}\Phi_1\right) = (\Phi_1, \varepsilon\Phi_1 + \delta\Phi_2) = (\Phi_1, \varepsilon\Phi_1) + (\Phi_1, \delta\Phi_2)$$
$$= \varepsilon(\Phi_1, \Phi_1) + \delta(\Phi_1, \Phi_2) = \varepsilon$$

Με την ίδια διαδικασία προκύπτουν και τα υπόλοιπα στοιχεία.

Για να βρεθούν οι ιδιοτιμές διαγωνοποιούμε τον πίνακα Η. Θα πρέπει $\det(H - \lambda \mathrm{I}) = 0 \Rightarrow \det[\begin{pmatrix} \varepsilon & \delta \\ \delta & \varepsilon \end{pmatrix} - \lambda \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}] = 0 \Rightarrow$

$$\det\left[\begin{pmatrix} \varepsilon - \lambda & \delta \\ \delta & \varepsilon - \lambda \end{pmatrix}\right] = 0 \Rightarrow (\varepsilon - \lambda)^2 - \delta^2 = 0 \Rightarrow \lambda_1 = \varepsilon + \delta, \lambda_2 = \varepsilon - \delta$$

Μορφή ιδιοσυναρτήσεων

- Οι εξισώσεις ιδιοτιμών για την ενέργεια γίνονται

$$\hat{\mathrm{H}}\Psi_1 = (\varepsilon + \delta)\Psi_1$$
$$\hat{\mathrm{H}}\Psi_2 = (\varepsilon - \delta)\Psi_2$$

- Οι ιδιοσυναρτήσεις της ενέργειας Ψ_1 και Ψ_2 θα είναι γραμμικός συνδυασμός των Φ_1 και Φ_2, δηλαδή

$$\Psi_1 = d_{11}\Phi_1 + d_{12}\Phi_2$$
$$\Psi_2 = d_{21}\Phi_1 + d_{22}\Phi_2$$

- Υπό μορφή στήλης τα ιδιοδιανύσματα είναι

$$\Psi_1 = \begin{pmatrix} d_{11} \\ d_{12} \end{pmatrix}, \Psi_2 = \begin{pmatrix} d_{21} \\ d_{22} \end{pmatrix}$$

Υπολογισμός ιδιοσυναρτήσεων

- Για το πρώτο ιδιοδιάνυσμα Ψ_1 λύνουμε το αλγεβρικό σύστημα
$$\begin{bmatrix} \varepsilon - \lambda_1 & \delta \\ \delta & \varepsilon - \lambda_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_{11} \\ d_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Αντικαθιστούμε $\lambda_1 = \varepsilon + \delta$ και έχουμε:
$$\begin{bmatrix} -\delta & \delta \\ \delta & -\delta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_{11} \\ d_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow$$
$$d_{11} = d_{12}$$

- Όμως θέλουμε οι συναρτήσεις μας να είναι και ορθοκανονικές:
- $(\Psi_1, \Psi_1) = (d_{11}\Phi_1 + d_{12}\Phi_2, d_{11}\Phi_1 + d_{12}\Phi_2) = 1 \Rightarrow$
$${d_{11}}^2 + {d_{12}}^2 = 1.$$
- Από τα παραπάνω συμπεραίνουμε ότι $d_{11} = d_{12} = \frac{1}{\sqrt{2}}$ και άρα
$$\Psi_1 = \frac{\Phi_1 + \Phi_2}{\sqrt{2}}$$

Χρονική εξέλιξη του συστήματος

- Ομοίως βρίσκουμε ότι $\Psi_2 = \frac{\Phi_1 - \Phi_2}{\sqrt{2}}$.
- Από την εκφώνηση γνωρίζουμε ότι το σύστημα προέρχεται αρχικά από μια μέτρηση στην οποία το φυσικό μέγεθος που περιγράφει ο τελεστής A έχει τιμή b.
- Άρα συμπεραίνουμε ότι $\Psi^0(x) = \Phi_2$.
- Αλλά έχουμε $\Psi_1 = \frac{\Phi_1 + \Phi_2}{\sqrt{2}}$ και $\Psi_2 = \frac{\Phi_1 - \Phi_2}{\sqrt{2}}$. Αφαιρώντας αυτές τις δύο σχέσεις

παίρνουμε $\Phi_2 = \frac{\Psi_1 - \Psi_2}{\sqrt{2}} = \Psi^0(x)$.

- Άρα $c_1 = -c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$.
- Έτσι η κυματοσυνάρτηση που περιγράφει το σύστημα ανά πάσα στιγμή είναι

$$\Psi(\mathrm{x}, \mathrm{t}) = \frac{\Psi_1 \mathrm{e}^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} - \Psi_2 \mathrm{e}^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}}}{\sqrt{2}}$$

Χρονική εξέλιξη μέσης τιμής τελεστή Α

- Θυμίζουμε ότι γενικά ισχύει $\langle \widehat{\mathrm{A}} \rangle = \sum_{n,m} c_n{}^* c_m e^{i(E_n - E_m)t/\hbar} A_{nm}$
- Τα στοιχεία A_{nm} θα τα υπολογίσουμε με βάση τις ιδιοσυναρτήσεις της ενέργειας. Ας πάρουμε για παράδειγμα το στοιχείο A_{11}:

$$\mathrm{A}_{11} = (\Psi_1, \mathrm{A}\Psi_1) = \left(\frac{\Phi_1 + \Phi_2}{\sqrt{2}}, \mathrm{A}\left(\frac{\Phi_1 + \Phi_2}{\sqrt{2}} \right) \right) =$$

$$\frac{1}{2}\left[(\Phi_1, \mathrm{A}\Phi_1) + (\Phi_1, \mathrm{A}\Phi_2) + (\Phi_2, \mathrm{A}\Phi_1) + (\Phi_2, \mathrm{A}\Phi_2) \right] =$$

$$\frac{1}{2}\left[\mathrm{\alpha}(\Phi_1, \Phi_1) + b(\Phi_1, \Phi_2) + \alpha(\Phi_2, \Phi_1) + b(\Phi_2, \Phi_2) \right] =$$

$$\frac{a+b}{2}$$

- Ανάλογα βρίσκουμε ότι $\mathrm{A}_{12} = \frac{\mathrm{\alpha} - \mathrm{b}}{2}, A_{21} = \frac{a-b}{2}, A_{22} = \frac{a+b}{2}$

Τελική μορφή

- Έχουμε λοιπόν

$$\langle \mathrm{A} \rangle(t) = \frac{1}{2}(A_{11} + A_{22}) - \frac{1}{2}\left(A_{12}e^{i\omega_{12}t} + A_{21}e^{i\omega_{21}t}\right)$$

$$= \frac{1}{2}\left(\frac{a+b}{2} + \frac{a+b}{2}\right) - \frac{1}{2}\left(\frac{a-b}{2}e^{i\omega_{12}t} + \frac{a-b}{2}e^{-i\omega_{12}t}\right)$$

$$\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}cos\omega_{12}t =$$

$$= \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}cos\frac{2\delta}{\hbar}t$$

Φορμαλισμός Dirac

- Ο φορμαλισμός Dirac είναι ένας διαφορετικός τρόπος αναπαράστασης των ιδιοδιανυσμάτων.
- Οι αντιστοιχίες είναι οι εξείς: $\varphi_i(x) \longrightarrow |i\rangle$ και $\varphi_i{}^*(x) \longrightarrow \langle i|$, όπου $\varphi_i(x)$ τα ιδιοδιανύσματα κάποιου τελεστή.
- Το $|i\rangle$ ιδιοδιάνυσμα ονομάζεται "**ket**", ενώ το $\langle i|$ ονομάζεται "**bra**".
- Η αντιστοιχία με το εσωτερικό γινόμενο που ξέρουμε είναι $\int \varphi_i{}^*(x)\varphi_j(x)dx \longrightarrow \langle i|j\rangle$. Το $\langle i|j\rangle$ ονομάζεται "**braket**".
- Η συνθήκη ορθοκανονικότητας με την χρήση συμβολισμού Dirac γίνεται $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$.

Επιπλέον αντιστοιχίες

- Η εξίσωση ιδιοτιμών $\mathrm{A}\psi_n = a\psi_n$ σύμφωνα με όσα είπαμε παραπάνω θα μεταφράζεται ως $\mathrm{A}|n\rangle = a_n|n\rangle$.
- Το ανάπτυγμα της κυματοσυνάρτησης στις ιδιοκαταστάσεις του A είναι $|\psi\rangle = \sum_n c_n|n\rangle$ με $c_n = \langle n|\psi\rangle$.
- Τα διανύσματα ket είναι ουσιαστικά τα διανύσματα στήλης, ενώ τα bra είναι τα διανύσματα γραμμής.
- Μια έκφραση της μορφής $|m\rangle\langle n|$ αποτελεί ουσιαστικά έναν τελεστή. Η δράση του πάνω στην κυματοσυνάρτηση έχει ως εξής:

$$|m\rangle\langle n|\psi\rangle = |m\rangle\langle n|c_n|n\rangle = c_n|m\rangle$$

Η σχέση πληρότητας

- Σχέση πληρότητας στην κβαντομηχανική θα καλούμε την σχέση $\mathrm{I} = 1 = \sum_n |n\rangle\langle n|$, όπου I είναι ο ταυτοτικός τελεστής.
- Όταν ο ταυτοτικός τελεστής δράσει πάνω στην ιδιοκατάσταση $|n\rangle$, δεν επιφέρει ουσιαστικά καμία αλλαγή, δηλ. $\mathrm{I}|n\rangle = |n\rangle$.
- Ας δούμε μια χρήση της σχέσης πληρότητας:

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\varphi|1|\psi\rangle = \langle\varphi|\left(\sum_n |n\rangle\langle n|\right)|\psi\rangle =$$

$$\sum_n \langle\varphi|n\rangle\langle n|\psi\rangle = \sum_n \langle n|\varphi\rangle^* \langle n|\psi\rangle = \sum_n d_n{}^* c_n$$

- Βλέπουμε δηλαδή ότι όταν παρεμβάλλουμε την μονάδα στο braket προκύπτουν οι συντεταγμένες των ιδιοδιανυσμάτων.

Εφαρμογή στον συμβολισμό Dirac

- Έστω ότι $\widehat{\mathrm{H}} = \varepsilon|1\rangle\langle 1| + \varepsilon|2\rangle\langle 2| + \delta|1\rangle\langle 2| + \delta|2\rangle\langle 1|$,

όπου τα διανύσματα $|1\rangle, |2\rangle$ είναι τα ιδιοδιανύσματα του τελεστή Α, δηλ. $\widehat{\mathrm{A}}|1\rangle = \alpha_1|1\rangle, \widehat{\mathrm{A}}|2\rangle = \alpha_2|2\rangle$. Να βρεθούν οι ιδιοτιμές και ιδιοδιανύσματα του τελεστή της ενέργειας.

Ο τελεστής της χαμιλτονιανής

- Θα γράψουμε αρχικά τον τελεστή της χαμιλτονιανής υπό μορφή μήτρας:

$$\mathrm{H} = \begin{pmatrix} \mathrm{H}_{11} & \mathrm{H}_{12} \\ \mathrm{H}_{21} & \mathrm{H}_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle 1|\mathrm{H}|1\rangle & \langle 1|\mathrm{H}|2\rangle \\ \langle 2|\mathrm{H}|1\rangle & \langle 2|\mathrm{H}|2\rangle \end{pmatrix}$$

- Έτσι για παράδειγμα έχουμε:

$$\mathrm{H}_{11} = \langle 1|\mathrm{H}|1\rangle$$
$$= \Big\langle 1\Big|\Big[\varepsilon|1\rangle\langle 1| + \varepsilon|2\rangle\Big\langle 2| + \delta|1\rangle\langle 2| + \delta|2\rangle\langle 1|\Big]\Big|1\Big\rangle$$
$$= \varepsilon\Big\langle 1|1\rangle\langle 1|1\rangle + \varepsilon\langle 1|2\rangle\langle 2|1\rangle + \delta\langle 1|1\rangle\langle 2|1\rangle + \delta\langle 1|2\rangle\langle 1|1\rangle$$
$$= \varepsilon$$

- Μόνο ο πρώτος όρος επιβιώνει καθώς οι υπόλοιποι μηδενίζονται λόγω ορθοκανονικότητας.

Ιδιοτιμές

- Ομοίως υπολογίζουμε και τα υπόλοιπτα στοιχεία. Η τελική μορφή της μήτρας είναι:

$$\mathrm{H} = \begin{pmatrix} \varepsilon & \delta \\ \delta & \varepsilon \end{pmatrix}$$

- Για να βρούμε τις ιδιοτιμές παίρνουμε την γνωστή μας συνθήκη $det\begin{bmatrix} \varepsilon-\lambda & \delta \\ \delta & \varepsilon-\lambda \end{bmatrix} = 0 \Rightarrow$

$$(\varepsilon-\lambda)^2 - \delta^2 = 0 \Rightarrow \lambda_1 = \varepsilon+\delta, \lambda_2 = \varepsilon-\delta$$

- Τα λ_1 και λ_2 είναι ουσιαστικά οι ιδιοτιμές της ενέργειας, δηλ. $\lambda_1 = \mathrm{E}_1, \lambda_2 = \mathrm{E}_2$.

Ιδιοδιανύσματα

- Για $\lambda_1 = \varepsilon + \delta$,
$$\begin{pmatrix} -\delta & \delta \\ \delta & -\delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_{11} \\ d_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Longrightarrow d_{11} = d_{12}$$
- Χρησιμοποιώντας και την συνθήκη ορθοκανονικότητας συμπεραίνουμε $d_{11} = d_{12} = \frac{1}{\sqrt{2}}$.
- Τα ιδιοδιάνυσμα $|\varphi_1\rangle$ θα είναι επομένως
$$|\varphi_1\rangle = \frac{|1\rangle + |2\rangle}{\sqrt{2}}.$$
- Ομοίως $|\varphi_2\rangle = \frac{|1\rangle - |2\rangle}{\sqrt{2}}$.

Τέλος Ενότητας

Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στο πλαίσιο του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «**Ανοικτά Ακαδημαϊκά Μαθήματα στο Πανεπιστήμιο Αθηνών**» έχει χρηματοδοτήσει μόνο την αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Σημείωμα Αναφοράς

Copyright Πανεπιστήμιο Πατρών,Ανδρέας Τερζής ,2014. Ανδρέας Τερζής . «Κβαντική Φυσική Ι. Εφαρμογή στην αναπαράσταση τελεστών με μήτρα και εισαγωγή στον συμβολισμό Dirac». Έκδοση: 1.0. Πάτρα 2014. Διαθέσιμο από τη δικτυακή διεύθυνση: https://eclass.upatras.gr/courses/PHY1957/

Σημείωμα Αδειοδότησης