1. Luento

Tällä luennolla: superpositioperiaate

Viimeksi: Diracin notaatio, Hilbertin avaruus, Hermiittiset operaattorit

- Jos valmistamme suuren joukon identtisiä systeemejä, joilla kaikilla aaltofunktio $\Psi(x,0)$, obsevaabelin mittaus E ei yleensä anna samaa mittaustulosta eri systeemeissä.
- Kuinka tätä käsitellään?
- $|e_n\rangle$ virittää Hilbertin avaruuden ja $e_n(x) = \langle x | e_n\rangle$

$$\Rightarrow \Psi(x,t) = \sum_n b_n(t) \langle x | e_n\rangle = \sum_n b_n(t)\, e_n(x)$$

tilafunktio on summa tai $\boxed{\text{superpositio}}$ monesta termistä

- Kuinka kanta valitaan? ⇒ mukavuussyyt, mikä tahansa kanta käy
- Laskut helpompia toisilla valinnoilla ⇒ mitä ajat takaa vaikuttaa siihen mikä kanta kannattaa valita.
- Esim: Haluat mitata tai laskea energian. Luonteva kanta on energiaoperaattorin $\hat{H}$ ominaistilat e_n (ja niillä ominaisarvot E_n)

Miksi? $\Psi(x,t) = \sum_n b_n(t)\, e_n(x)$, $\langle E\rangle = \langle \hat{H}\rangle = \sum_{n,m} \int dx\, e_m^*(x) \hat{H} e_n(x)\, b_m^*(t) b_n(t)$

$$= \sum_{n,m} b_n b_m^* E_n \underbrace{\int dx\, e_m^* e_n}_{\delta_{n,m}}$$

$$\Rightarrow \langle E\rangle = \sum_n |b_n(t)|^2 E_n \Rightarrow \text{Helppo laskea}$$

Vaihtoehto: $|\Psi\rangle$ paikkaoperaattorin ominaistilojen avulla $\Psi(x,t) = \langle x | \Psi\rangle$

$$|\Psi\rangle = \sum_x \langle x|\Psi\rangle\, |x\rangle$$

$$\langle E\rangle = \int dx\, \Psi^*(x,t)\, \hat{H}\, \Psi(x,t) = \int dx\, \Psi^*(x,t) \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right] \Psi(x,t)$$

Tämän laskeminen voi olla vaikeampaa. Lopputulos on kuitenkin sama.

2.

Huomasimme siis, että kun energian odotusarvoa laskettiin energian ominaistilojen muodostamassa kannassa

$$\langle E\rangle = \sum_n P(E_n) E_n, \quad P(E_n) = |b_n|^2$$

eli $P(E_n)$ antaa todennäköisyysjakauman $\hat{E}$:n mittaustuloksille

Ylipäätään minkä tahansa E:hen liittyvän observaabelin lasku on helppoa tässä kannassa

$$\langle E^N\rangle = \langle \hat{H}^N\rangle = \sum_{n,m} \langle \varphi_m | \hat{H}^N | \varphi_n\rangle b_n b_m^* = \sum_n E_n^N \langle \varphi_m | \varphi_n\rangle b_n b_m^*$$

$$= \sum P(E_n) E_n^N$$

Yleisesti: Mittaa F, jolla operaattori $\hat{F} \Rightarrow \hat{F}\varphi_n = f_n \varphi_n$

esitä $|\psi\rangle$ tässä kannassa $|\psi\rangle = \sum b_n |\varphi_n\rangle \Rightarrow P(f_n) = |b_n|^2$ antaa todennäköisyysjakauman F:n mittaustuloksille

• Mitataan taas energiaa 1D laatikossa: $\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$

alussa tilassa $\psi(x,0) = \frac{3\varphi_2 + 4\varphi_9}{\sqrt{25}}$, Diracin notaatio $\Rightarrow |\psi\rangle = \frac{3}{\sqrt{25}}|\varphi_2\rangle + \frac{4}{\sqrt{25}}|\varphi_9\rangle$

• normi?: $\langle\psi|\psi\rangle = \left[\frac{3}{5}\langle\varphi_2| + \frac{4}{5}\langle\varphi_9|\right]\left[\frac{3}{5}|\varphi_2\rangle + \frac{4}{5}|\varphi_9\rangle\right] = \frac{9}{25}\langle\varphi_2|\varphi_2\rangle + \frac{16}{25}\langle\varphi_9|\varphi_9\rangle$

$$+ \frac{12}{25}\big(\underbrace{\langle\varphi_2|\varphi_9\rangle + \langle\varphi_9|\varphi_2\rangle}_{0}\big) = 1 \quad \text{OK!}$$

Huomattavaa: ei integrointia, koska tiesimme $|\varphi_n\rangle$:n ortonormaaliksi kannaksi.

• Tn mitata energia E_2: $P(E_2) = |b_2|^2 = \frac{9}{25}$

E_1: $P(E_1) = 0$

E_9: $P(E_9) = 16/25 = |b_9|^2$

Huom! Tila tarkka, mittaustulos epävarma.

Kysymys: Kuinka tiedät mitkä kertoimet superpositiota muodostettaessa tarvitaan?

Jos sinulla on aaltofunktio $\psi(x)$ ja operaattorin ominaistilat $\phi_n(x)$, jotka muodostavat kannan,

$$\psi(x) = \sum_n \alpha_n \phi_n(x)$$, kerro vasemmalta $\psi_m^*(x)$:llä ja integroi avaruuden yli:

$$\Rightarrow \int dx\, \phi_m^*(x)\psi(x) = \sum_n \alpha_n \underbrace{\int dx\, \phi_m^*(x)\phi_n(x)}_{\delta_{n,m}}$$

$\delta_{n,m}$ koska oletetaan ortonormaali kanta

$$\Rightarrow \boxed{\alpha_m = \int dx\, \phi_m^*(x)\psi(x)}$$

Sama asia Diracin merkintätavalla:

$$|\psi\rangle = \sum_n \alpha_n |\phi_n\rangle \Rightarrow \langle\phi_m|\psi\rangle = \sum_n \alpha_n \underbrace{\langle\phi_m|\phi_n\rangle}_{\delta_{n,m}} = \alpha_m$$

Esim. $\hat{p}$:n ominaistilojen $\psi_k = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$ avulla

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk\, e^{ikx}\, b(k)$$

← vastaa "α_n":ää aikaisemmin

$$b(k) = \int dx\, \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx}}_{\text{vastaa } \phi_m^*(x)\text{:ää aiemmin}}\, \psi(x)$$ (tämä on $\psi(x)$:n Fourier-muunnos)

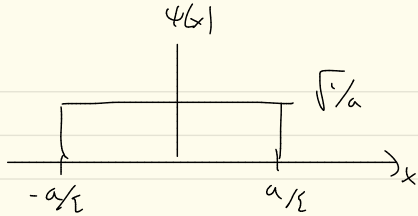
Jos $|\psi\rangle = \sum \alpha_n |\phi_n\rangle$ jossain kannassa $|\phi_n\rangle$. Entä jos haluamme esittää tämän jossain toisessa kannassa $|\psi_n\rangle$?

$$\Rightarrow |\psi\rangle = \sum_m c_m |\psi_m\rangle = \sum_n \alpha_n |\phi_n\rangle$$

$\int dx\, \psi_\ell^*(x)\phi_n(x)$ esim.

$$\Rightarrow \sum_m c_m \langle\psi_\ell|\psi_m\rangle = \sum_n \alpha_n \langle\psi_\ell|\phi_n\rangle \Leftrightarrow \underline{c_\ell = \sum_n \alpha_n \langle\psi_\ell|\phi_n\rangle}$$

3.



Mitataan liikemäärä?

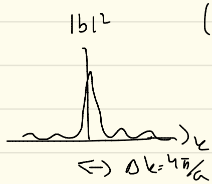
$\langle \hat{p} \rangle = \int dx\, \psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x) \Rightarrow ?$ ei kivaa

esitetään ψ p:n ominaistilojen kannassa. $\varphi_k = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$

$$\psi(x,0) = \int_{-\infty}^{\infty} b(k)\varphi_k\, dk \Rightarrow b(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x,0)\varphi_k^*\, dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x,0) e^{-ikx} dx$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi a}}\int_{-a/2}^{a/2} e^{-ikx} dx = \sqrt{\frac{2}{\pi a}}\, \frac{\sin(ka/2)}{k}$$

$\Rightarrow$



$\left(\int |b(k)|^2 dk = 1 \text{ ok!} \right)$

$|b|^2 = \frac{2}{\pi a}\, \frac{\sin^2 \frac{ka}{2}}{k^2}$, maksimi k=0:ssa. Häviää kun $\frac{ka}{2} = n\cdot\pi \Leftrightarrow \underline{p = \hbar k = \frac{2\pi\hbar}{a}}$

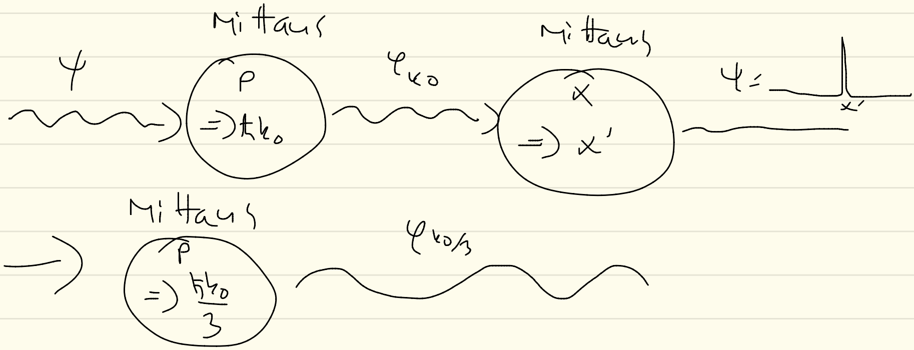
$\Delta k \approx 4\pi/a \Rightarrow \Delta p = \hbar\Delta k = \frac{4\pi\hbar}{a}$, toisaalta $\Delta x = a$

$$\Rightarrow \Delta p\, \Delta x \approx \hbar$$

· tod. näk. että liikemäärä välillä $\left\{-\frac{2\pi\hbar}{a}, \frac{2\pi\hbar}{a}\right\}$?

$$P(k) = |b(k)|^2 \Rightarrow P = \int_{-2\pi/a}^{2\pi/a} \frac{2}{\pi a}\, \frac{\sin^2(ka/2)}{k^2}\, dk = \frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \frac{\sin^2\eta}{\eta^2}\, d\eta \approx \underline{\underline{0.903}}$$

4.



Käytä mittauspostulaattia (VI) pitämään kirjaa siitä miten aaltofunktio muuttuu mittauksissa.

Mittausten välillä $\underline{i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi}$.

Muita esimerkkejä: hiukkanen laatikossa. Mittaa p.

a) $\psi(x) = \sum b_n \varphi_n(x) \Rightarrow \langle p \rangle = \sum_{n,m} b_m^* b_n \int \varphi_m^*(x)\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)\varphi_n(x)$

$b_1 = 1/\sqrt{2},\ b_2 = 1/\sqrt{2}$: $\int \varphi_1(x) \frac{\partial}{\partial x}\varphi_2 = -\int \varphi_2 \frac{\partial}{\partial x}\varphi_1 \Rightarrow \underline{\langle p \rangle = 0}$

b) $\psi_k = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx}$, $\varphi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\frac{n\pi x}{L} = \frac{1}{i}\sqrt{\frac{1}{2L}}\left(e^{+i\frac{n\pi}{L}x} - e^{-i\frac{n\pi}{L}x}\right)$

$\psi(x) = \sum_k c(k)\psi_k$, $n=1 \Rightarrow c\left(\frac{\pi}{L}\right) = \frac{-i}{\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}$, $c\left(-\frac{\pi}{L}\right) = \frac{i}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{2}}$

$n=2$: $c\left(\frac{2\pi}{L}\right) = \frac{-i}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{2}} = -c\left(\frac{2\pi}{L}\right)$

$P(k) = |c(k)|^2 = \begin{cases} \frac{1}{4}, & \text{kun } k = \{\pm\frac{\pi}{L}, \pm\frac{2\pi}{L}\} \\ 0, & \text{muulloin} \end{cases}$ $\quad \langle k \rangle = \sum_k P(k)k \Rightarrow$

Tässä tapauksessa amplitudit c(k) voitiin lukea suoraan etutekijöistä.

5.

$$\langle k \rangle = \frac{1}{4}\left\{ \frac{\pi}{L} - \frac{\pi}{L} + \frac{2\pi}{L} - \frac{2\pi}{L} \right\} = 0$$

$$\Rightarrow \underline{\langle p \rangle = 0}$$

Kommutaattorit:

Kahden operaattorin välinen kommutaattori tarkoittaa

$$[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

Jos operaattorit kommutoivat $[\hat{A},\hat{B}]=0$ eikä operaattorien järjestyksellä ole silloin väliä.

Esim: $[\hat{A},\hat{A}^2]=?$. Käytä testifunktiota $g(x)$

$$[\hat{A},\hat{A}^2]g(x) = (A\hat{A}^2 - \hat{A}^2 A)g(x) = (\hat{A}\hat{A}\hat{A} - \hat{A}\hat{A}\hat{A})\,g(x) = 0$$ -> aika triviaali

yleisemmin $[\hat{A}, f(\hat{A})] = 0$.

Esim: $[\hat{x},\hat{p}] = ?$

$$[\hat{x},\hat{p}]g(x) = x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)g(x) + i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(x\,g(x)) = \cancel{-i\hbar x\frac{\partial g}{\partial x}} + i\hbar\left(g(x) + \cancel{x\frac{\partial g}{\partial x}}\right)$$

$$= i\hbar\, g(x)$$

$\Rightarrow [\hat{x},\hat{p}] = i\hbar$ TÄRKEÄ!

Oleta $[\hat{A},\hat{B}]=0$. Mitä tämä implikoi ominaistiloille?

Jos φ_a on $\hat{A}$:n ominaistila $\hat{A}\varphi_a = a\varphi_a$

$\Rightarrow \hat{B}\hat{A}\varphi_a = \hat{B}a\varphi_a = a\hat{B}\varphi_a$ toisaalta $\hat{B}\hat{A} = \hat{A}\hat{B}$ kommutoinnin takia

$\Rightarrow \hat{A}(\hat{B}\varphi_a) = a(\hat{B}\varphi_a) \Rightarrow \hat{B}\varphi_a$ on myös $\hat{A}$:n ominaistila.

Jos φ_a on $\hat{A}$:n <u>ainut</u> a:ta vastaava ominaistila $\hat{B}\varphi_a$ voi poiketa φ_a:sta vain vakion μ kautta ts.

$\hat{B}\varphi_a = \mu\varphi_a \Rightarrow$ φ_a on myös $\hat{B}$:n ominaistila

Mitä tämä implikoi mittauksille?

Jos esim. mittaat $\hat{A}$:n ja saat tulokseksi a, on systeemi mittauksen jälkeen tilassa φ_a. Koska φ_a on myös $\hat{B}$:n ominaistila, voit nyt mitata myös $\hat{B}$:n ja tehdä sen mielivaltaisen tarkasti (ainoa mahdollinen mittaustulos on μ.)

$[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \Leftrightarrow \Delta A \Delta B \geq 0$ siis ei rajoituksia mittaustarkkuudelle epämääräisyysperiaatteista.

Degeneraatio: samaa ominaisarvoa vastaa usea ominaistila.

Esim: $\hat{A}$:lla kaksinkertainen degeneraatio

$A\varphi_1 = a\varphi_1$
$A\varphi_2 = a\varphi_2$

yleisin mahdollinen mittaustulosta a vastaava tila on $\varphi_a = \alpha\varphi_1 + \beta\varphi_2$ $(|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1)$

$[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \Rightarrow ??$

$\hat{B}\hat{A}\varphi_1 = a\hat{B}\varphi_1 = \hat{A}\hat{B}\varphi_1 \Rightarrow \hat{B}\varphi_1$ on $\hat{A}$:n ominaistila, mutta emme tiedä mikä φ_a se on (siis α ja β ovat vielä mitä tahansa)

$\Rightarrow \hat{B}\varphi_1 = \mu(\alpha\varphi_1 + \beta\varphi_2) \Rightarrow \varphi_1$ ei välttämättä ole $\hat{B}$:n ominaistila.

Degeneroituneella operaattorilla "enemmän" ominaistiloja.

Esim: $\cos kx$ on $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ ominaistila, mutta ei $-i\hbar\frac{\partial}{\partial x} = \hat{p}$:n ominaistila.

$\cos kx = \frac{1}{2}e^{ikx} + \frac{1}{2}e^{-ikx}$ voidaan lausua $\hat{p}$:n ominaistilojen avulla.

Kommutaattorit ja epämääräisyys:

Jos $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{C}$

$$\Rightarrow \Delta\hat{A}\,\Delta\hat{B} \geq \frac{1}{2}|\langle C\rangle|$$

Ts. kun operaattorit eivät kommutoi niiden mittaukseen liittyy epämääräisyysperiaate.

Esim: $[x, p] = i\hbar$

$$\Rightarrow \Delta x \Delta p \geq \frac{1}{2}|\langle i\hbar\rangle| = \hbar/2$$

Yläolevan todistus on hankalampi ja jätetään "ekstra harjoitukseksi"

Uncertainty principle: 2 hermitian operators $\hat{A}$ & $\hat{B}$

$$\Delta A^2 = \langle\psi|(\hat{A}-\langle\hat{A}\rangle)^2|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{U}^2|\psi\rangle$$
$$\Delta B^2 = \langle\psi|\hat{B}-\langle B\rangle|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{V}^2|\psi\rangle$$

$$U = \hat{A}-\langle\hat{A}\rangle = \hat{A}-\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$$
$$V = \hat{B}-\langle B\rangle = \hat{B}-\langle\psi|\hat{B}|\psi\rangle$$

$$[U,V] = [(A-\langle A\rangle)(B-\langle B\rangle) - (B-\langle B\rangle)(A-\langle A\rangle)$$
$$= (\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}) - A\langle B\rangle - \langle A\rangle B + B\langle A\rangle + \langle B\rangle A$$
$$= [A,B]$$ since $\langle B\rangle$ & $\langle A\rangle$ just numbers

Choose $|\phi\rangle = U|\psi\rangle + i\lambda V|\psi\rangle$ and compute innerproduct

$$\langle\phi|\phi\rangle = \langle U\psi + i\lambda V\psi|U\psi + i\lambda V\psi\rangle \geq 0$$
$$= \langle\psi|U^2|\psi\rangle + \lambda^2\langle\psi|V^2|\psi\rangle + i\lambda\langle U\psi|V\psi\rangle$$
$$- i\lambda\langle V\psi|U\psi\rangle \geq 0$$
$$= \Delta A^2 + \lambda^2\Delta B^2 + i\lambda\langle\psi|[U,V]|\psi\rangle \geq 0 \quad (*)$$

minimum where? $\Rightarrow \frac{\partial}{\partial\lambda}$ and set to zero

$\Rightarrow 2\lambda\Delta B^2 + i\langle\psi|[U,V]|\psi\rangle = 0$ so $\lambda = \frac{-i\langle\psi|[U,V]|\psi\rangle}{2\Delta B^2}$

Plug in to (*)

$$\Rightarrow \Delta A^2 - \frac{\Delta B^2}{4\Delta B^4}\langle\psi|[U,V]|\psi\rangle^2 + \frac{\langle\psi|[U,V]|\psi\rangle^2}{2\Delta B^2} \geq 0$$
$$\Delta A^2\Delta B^2 \geq -\frac{1}{4}\langle\psi|[U,V]|\psi\rangle^2 = \langle\psi|\frac{i}{2}[U,V]|\psi\rangle^2$$
$\Leftrightarrow \Delta A^2\Delta B^2 \geq |\frac{i}{2}\langle[A,B]\rangle|^2$ note $\langle[A,B]\rangle$ is purely imaginary... exercise.

Other ways to prove as well.