Kvanttimekaniikka: Luento 7

Martikainen Jani-Petri

Viimeksi

- Superpositioperiaate
- Kommutaatorit
- Degeneraatio

Voiko olla ei-hermiittisiä operaattoreita, joilla on reaaliset ominaisarvot? Miksi emme käytä niitä? Muistiinpanot…

Tänään

- Aikakehitys kvanttimekaniikassa
- Ehrenfestin periaate: yhteys klassiseen mekaniikkaan

Muuten…olettehan huomanneet?

Timeline+lähteitä mistä voi lukea

Tässä kurssin timeline niin kuin sen nyt ymmärrän. Pienet muutokset voivat olla mahdollisia. Lisään tähän myös mainintoja siitä mistä voi lukea näistä teemoista.

Timeline+lähteitä mistä voi lukea

1. Käytännön asiat, historiaa... :Liboff luku 2
2. Operaattorit, observaabelit, ominaisarvot, potentiaalikaivon ominaistilat: Liboff 3.1 ja 4.1, Bolton&Lambourne 2.2.1 ja 3.1.3, Griffiths 2.1-2.2, Griffiths 3.2
3. Aaltofunktio ja sen yhteys mittauksiin, aaltofunktion aikakehitys: Liboff 3.3-3, Bolton&Lambourne luku 2 myös Bolton&Lambourne 4.1-4.4, Griffiths 1.1-1.4, Griffiths 2.1
4. Mittauspostulaatti, lomittuminen/entanglement, Diracin delta-funktio: Liboff luku 3.2, lomittumisesta esim. "Quantum World : Quantum Mechanics and Its Interpretation":Bolton luku 6, Griffiths joitain huomioita luvussa 12, Delta-funktio potentiaali Griffiths 2.5.2
5. Hermittiiset operaattorit, Hilbertin avaruus, Diracin merkintätapa: Liboff 4.4-4.5, Griffiths 3.1-3.3
6. Superposiot, kommutaattorit, epämääräisyysperiaate: Superpositiosta mm. Liboff 5.1 kommutaattoreista ja degeneraation konseptista Liboff 5.2-5.5, Bolton&Lambourne 4.1-4.5, epämääräisyysperiaatteet ja kommutaattorit Griffithsissä 1.6 ja 3.5
7. Aikakehitys, Ehrenfestin periaate (yhteys klassiseen mekaniikkaan), tiheysmatriisi, dekoherenssi, kuinka luoda haluttuja tiloja?: Liboff 6.2, Bolton&Lambourne luku 6
8. Harmoninen oskillaattori, luomis- ja hävitysoperaattorit: Liboff 7.2-7.3, Bolton&Lambourne luku 5, Griffiths 2.3
9. Sironta potentiaalista, tunneloituminen, sidottu tila: Liboff 7.5-7.8 ja Bolton&Lambourne luku 8, sidotusta tilasta äärellisessä potentiaali kuopassa Liboff 8.1 tai Bolton&Lambourne 3.3, Griffiths 8.2, äärellisestä potentiaalikuopasta ja läpäisykertoimista Griffiths 2.6
10. Qubitin eli 2-tilasysteemin fysiikkaa, matriisiesitys, keskustelua kvanttitietokoneista: 2x2 matriiseista, spinistä jne. esim. "Quantum World : Quantum Mechanics and Its Interpretation": Bolton luku 3, kvantti-informaatiosta lisää esim. "Quantum
11. Periodinen hila, Blochin teoreema, aineen vyörakenne: Liboff 8.1-8.3, Griffiths 5.3.2
12. Kertausta, yhteenvetoa, kysymyksiä

Aikakehitys

- Tähän mennessä lähinnä energian ominaistiloja/stationäärisiä tiloja…näillä triviaali aikakehitys (miksi?)

$$\psi_n(x,t) = \psi_n(x)e^{-iE_n t/\hbar}$$

- Yleinen ratkaisuhan ajasta riippuvalle Schrödingerin yhälölle oli

$$\psi(x,t) = e^{-\frac{it\hat{H}}{\hbar}}\psi(x,0)$$

- Entäpä, jos meillä on **superpositiotila energian ominaistiloista**?

Aikakehitys

- Aaltofunktio alussa

$$\psi(x, t=0) = \sum_n \alpha_n \psi_n(x)$$

- Joten aikakehitys…

$$\psi(x, t) = e^{\frac{-i\hat{H}t}{\hbar}} \sum_n \alpha_n \psi_n(x)$$

- Siirretään operaattori summan sisälle…käytetään tietoa ominaistiloista…

$$\psi(x, t) = \sum_n \alpha_n e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(x)$$

Aikakehitys

- Esim. Potentiaalikaivossa

$$\psi(x,0) = \sqrt{\frac{2}{L}}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\left(\frac{\pi}{L}x\right) - \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right)\right]$$

- ???

$$\psi(x,t) = \sqrt{\frac{2}{L}}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)e^{-iE_1 t/\hbar} - \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right)e^{-iE_2 t/\hbar}\right]$$

Esim. energian odotusarvo ei muutu, koska kunkin amplitudin itseisarvo pysyy samana. Entä muut odotusarvot?

Aikakehitys

- Jos laskemme vaikka paikan odotusarvon tilalla

$$\psi(x,t) = \sqrt{\frac{2}{L}}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)e^{-iE_1 t/\hbar} - \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right)e^{-iE_2 t/\hbar}\right]$$

huomaamme, että se EI ole aina vakio (matlab demo tästä)

- Miksi ei? Entä milloin se on vakio? Esimerkki Matlabissa…
- Dynamiikan lähteenä ovat ristitermit laskettaessa paikan todennäköisyysjakaumaa

$$P(x,t) = |\psi(x,t)|^2$$

- Energiaa laskettaessa nämä termit integroituvat nollaan (ortogonaalisuus!), mutta x:llä kerrottaessa näin ei välttämättä enää ole.

Aikakehitys

Siis dynamiikkaa, kun tila

EI ole Hamiltonin operaattorin ominaistila!

(vaan joku superpositio niistä)

Miksi atomi muuten voi säteillä?

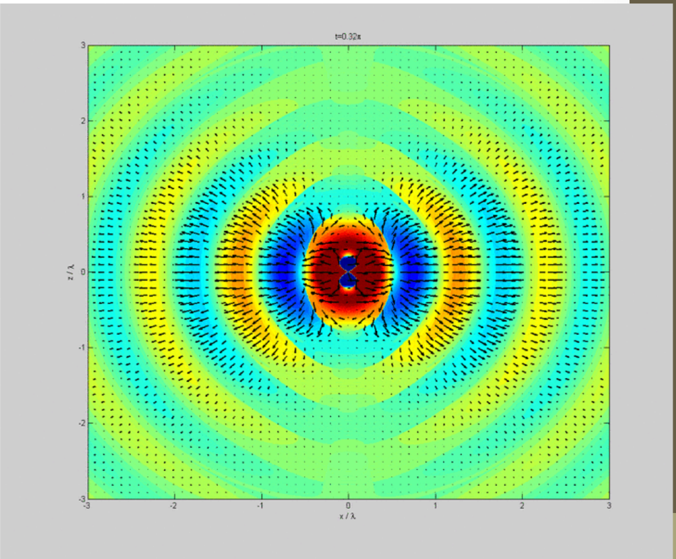
- Miten radio toimii? Mistä se säteily syntyy?
- Värähtelevä dipoli e **x**(t) (ajastava riippuva virta siis)→ sähkömagneettinen säteily

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho_v}{\varepsilon} \qquad \text{(Gauss' Law)}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{H} = 0 \qquad \text{(Gauss' Law for Magnetism)}$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \qquad \text{(Faraday's Law)}$$

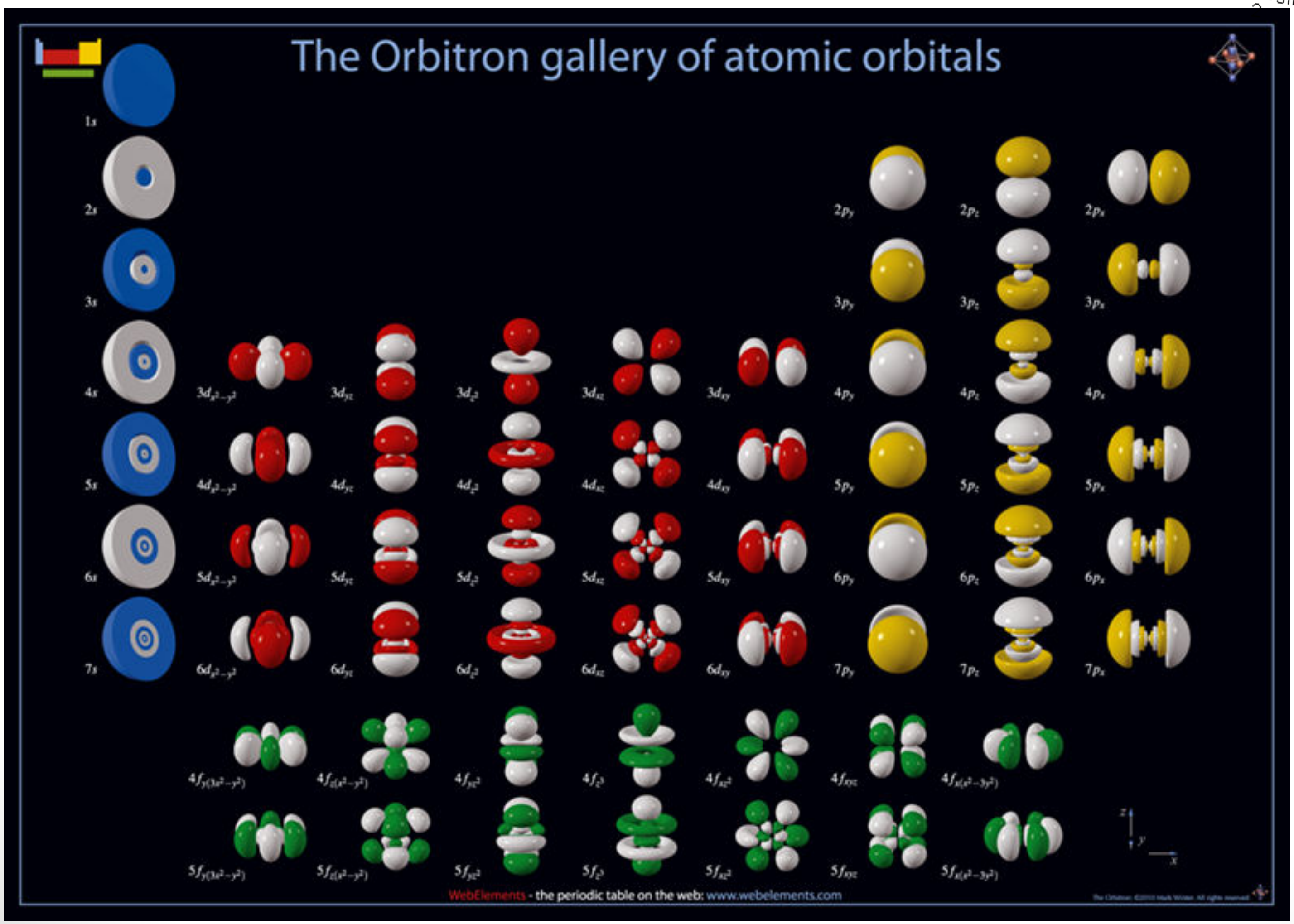
$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \varepsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \qquad \text{(Ampere's Law)}$$



Vetyatomi: ominaistilat laskettu

n	ℓ	m_ℓ	$F(\phi)$	$P(\theta)$	$R(r)$
1	0	0	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0}$
2	0	0	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{2\sqrt{2}\, a_0^{3/2}}\left[2-\frac{r}{a_0}\right] e^{-r/2a_0}$
2	1	0	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\frac{\sqrt{6}}{2}\cos\theta$	$\frac{1}{2\sqrt{6}\, a_0^{3/2}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0}$
2	1	±1	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm i\phi}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}\sin\theta$	$\frac{1}{2\sqrt{6}\, a_0^{3/2}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0}$

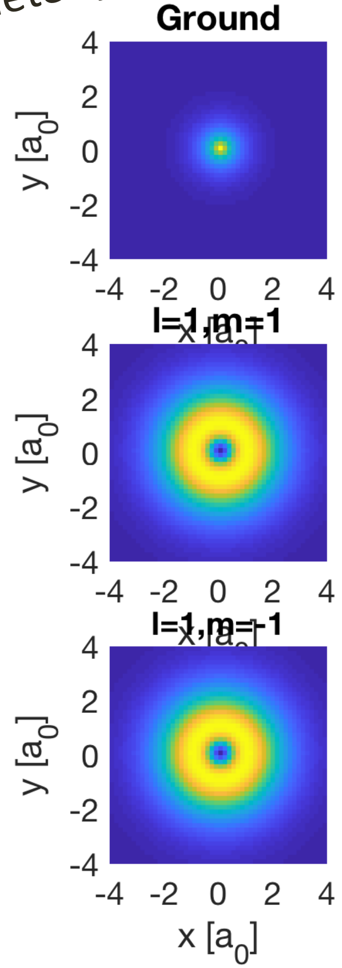
☑ n=1,2 ☐ n=3
☑ Separated
☐ Combined

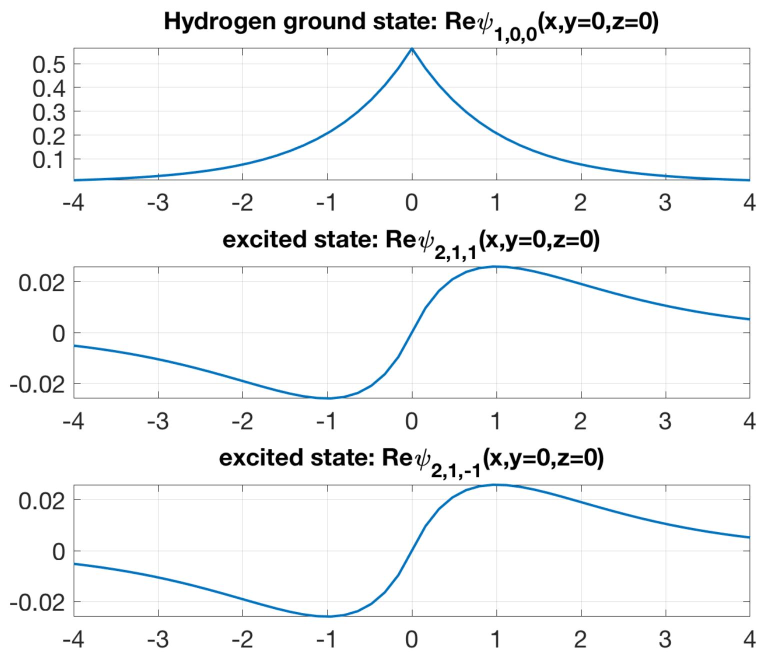


Vetyatomi: esimerkiksi xy-tasossa perustila ja pari ylempää

Myös vaihetekijöitä olemassa

Symmetrioissa eroja: perustila parillinen joka suuntaan. Ensimmäinen vitystila voi olla pariton joihinkin suuntiin



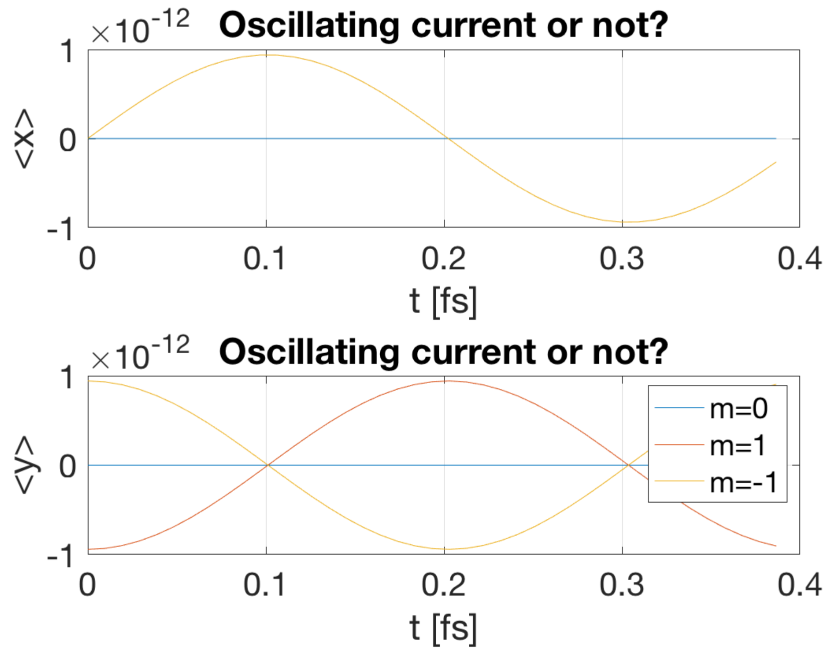


Värähtelevä dipoli vetyatomissa?

- Ominaistilassa varausjakauma ajasta riippumaton
- Superpositiossa ei välttämättä…laske

$$\langle \mathbf{d}(t) \rangle = e\langle \mathbf{x} \rangle = e\langle \psi(t)|\mathbf{x}|\psi(t) \rangle$$

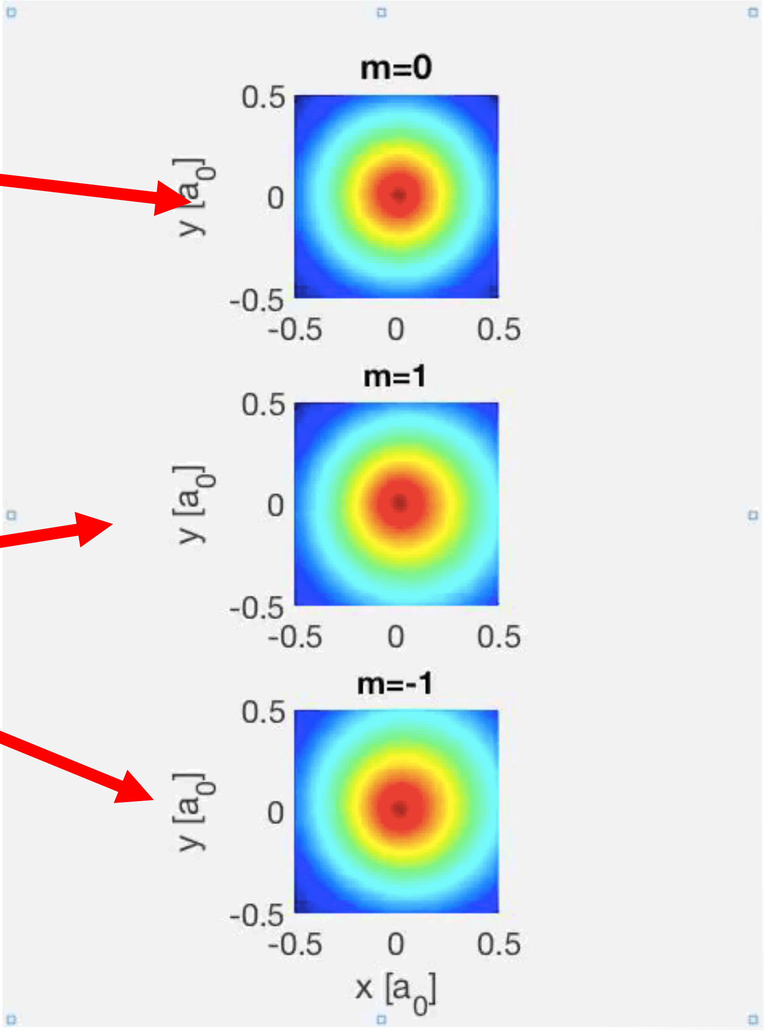
- Toisissa superpositioissa tämä on nolla, mutta jos sotkemme parillisia ja parittomia funktioita….



Värähtelevä dipoli vetyatomissa?

Parillisten superpositio

Parillisen superpositio
parittoman kanssa



Säteily!
Oikein tekeminen vaatii myös
SM kentän kvantisointia.

Pohdintatehtävä

- Eikö elektoni voisi myös säteillä painovoima-aaltoja?
- Miksi se ei spiraloidu ytimeen tästä johtuvan energiahukan vuoksi?

Odotusarvojen aikakehitys

- Jos tunnemme aaltofuntion aikakehityksen, voimme toki laskea odotusarvojen aikakehityksen

$$\langle \hat{O} \rangle_t = \langle \psi(t) | \hat{O} | \psi(t) \rangle$$

- Voimmeko kirjoittaa $\langle \hat{O} \rangle$:lle liikeyhtälöä ja saada vastauksen siitä suoraan? (taululla)
- Vastaus: no tavallaan…(käytä Schrödingerin yhtälöä ja muista H:n hermiittisyys)

$$\frac{d\langle \hat{O} \rangle}{dt} = \langle \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{O}] \rangle + \langle \frac{\partial \hat{O}}{\partial t} \rangle$$

Huom: Jos O:ssa ei eksplisiittistä aikariippuvuutta ja JOS se kommutoi H:n kanssa, O on liikevakio!

Ehrenfestin periaate

- Sovelletaan edellistä paikalle x

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$$

$$\frac{d\langle\hat{x}\rangle}{dt} = \langle\frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{x}]\rangle = \langle\frac{\hat{p}}{m}\rangle$$

$$\frac{d\langle\hat{p}\rangle}{dt} = \langle\frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{p}]\rangle = \langle\frac{i}{\hbar}[V(x),\hat{p}]\rangle = -\int \psi^*(x)\frac{\partial V(x)}{\partial x}\psi(x)dx$$

$$= -\langle\frac{\partial V(x)}{\partial x}\rangle$$

Klassiset liikeyhtälöt kunhan "otamme keskiarvot aaltofunktion yli." Demo matlabilla…

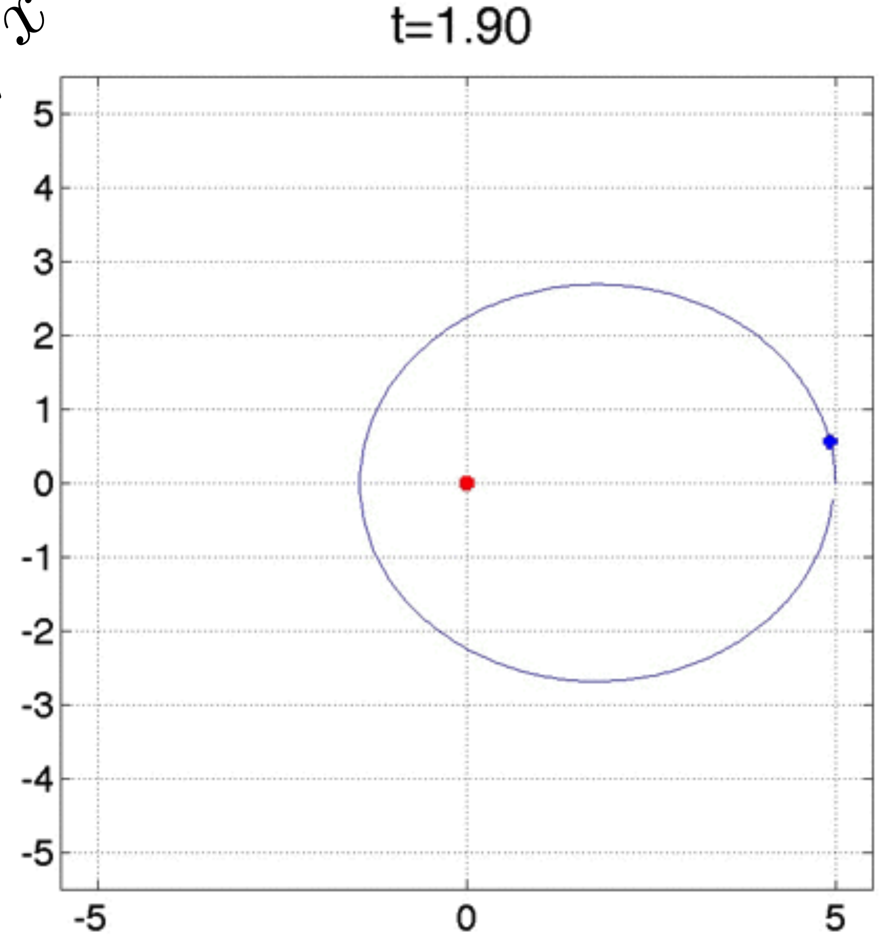
Ehrenfest: tragedia

In recent years it has become ever more difficult for me to follow the developments in physics with understanding. After trying, ever more enervated and torn, I have finally given up in desperation. This made me completely weary of life ... I did feel condemned to live on mainly because of the economic cares for the children. I tried other things but that helps only briefly. Therefore I concentrate more and more on the precise details of suicide. I have no other practical possibility than suicide, and that after having first killed Wassik. Forgive me ...

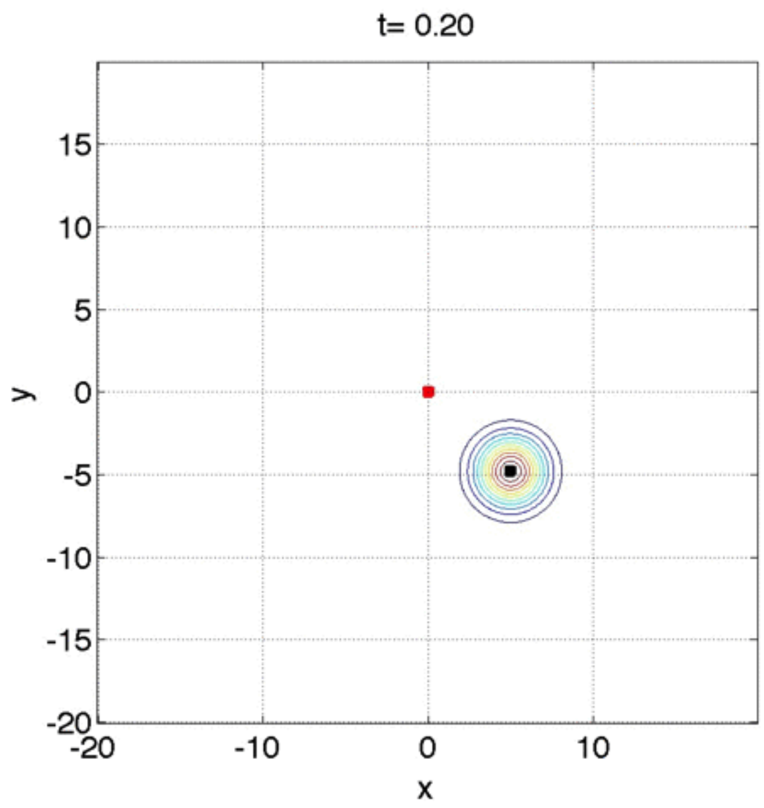
(Fysiikka ei ole niin tärkeää)

Esimerkki: klassinen rata

$$V(x,y) = \frac{-1}{\sqrt{x^2+y^2}}$$

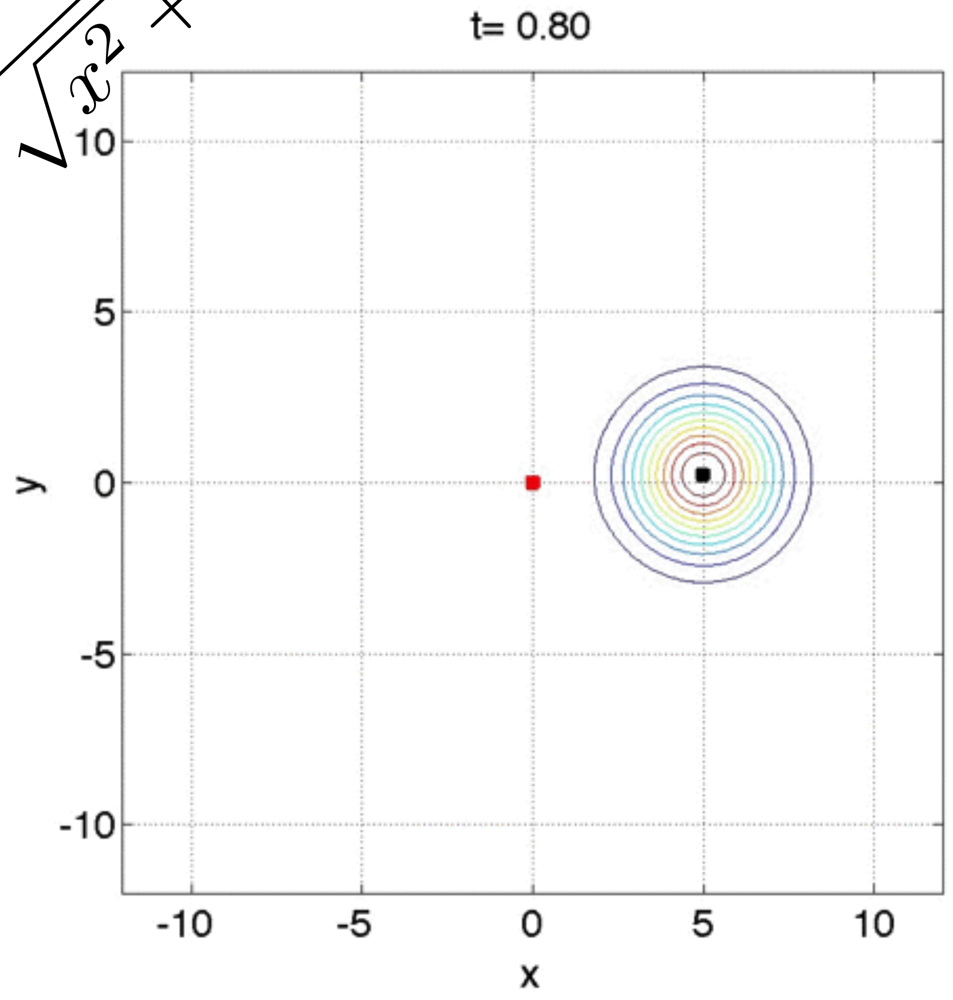


Esimerkki: klassinen ja kvanttimekaaninen ilman potentiaalia…liike ylöspäin



Esimerkki: klassinen vs. kvantti

$$V(x,y) = \frac{-1}{\sqrt{x^2+y^2}}$$



Kvanttimekaniikasta klassiseen

- Makroskooppisilla kappaleilla aaltofunktioiden leveys on hyvin pieni systeemin kokoon verrattuna
- Kvanttiefektit usein pieniä
- Ehrenfestin periaate antaa ymmärtää, että klassiset liikeyhtälöt seuraavat kvanttimekaniikasta…siinä mielessä ei ristiriitaa
- Pohdittavaa: voisiko ympäristön tulkita tekevän jatkuvasti paikan mittauksia niin, että aaltofunktion leviäminen tyrehtyy aaltofunktion romahtamisen seurauksena? Ympäristö siis osallisena klassisen kuvan ajoittaisessa järkevyydessä?

Kysymyksiä?


Slo-Mo-Tion
Chaos and confusion are the best form of communication

Extraa tämän jälkeen…tuskin aikaa

Aikakehitys: vapaa-avaruus

- Oletetaan nyt: $\hat{H} = -\frac{\hbar^2 \partial^2}{2m \partial x^2} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

- Koska derivointi muuttuu numerolla kertomiseksi k-avaruudessa, ehkä kannattaa laskea siellä!
- Fourier-muunnoksella…

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

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

Aikakehitys: vapaa-avaruus

- Aikakehitys integraalista $\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

$$\psi(x,t) = e^{-\hat{H}t/\hbar} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} b(k,0) e^{ikx} dk$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} b(k,0) e^{ikx - i\omega t}$$

- Kukin amplitudi saa siis oman ajasta riippuvan vaihetekijänsä
- **Gaussinen aaltopaketti:** saamme kaikki integraalit ratkaistua

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{a}} \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/4} e^{ik_0 x} e^{-x^2/4a^2}$$

Simulaatioita: phet.colorado.edu

Aikakehitys: gaussinen paketti

- Liikemäärän odotusarvo:

$$\langle \hat{p} \rangle = \int \psi^*(x,0)(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\psi(x,0)dx$$

$$= \int b^*(k,0)(\hbar k)b(k,0) = \hbar k_0$$

- Esitys k-avaruudessa laskemalla F-muunnos …

$$b(k) = \sqrt{\frac{2a}{\sqrt{2\pi}}e^{-a^2(k_0-k)^2}}$$

- Huom: $P(k) = |b(k)|^2$ antaa tod.näk. jakauman liikemäärälle

Aikakehitys: gaussinen paketti

- Myös aikakehitys voidaan tälle ratkaista: idea

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} b(k,0) e^{ikx - i\omega t} dk$$

1. Laske alkutilalle $b(k,0)$
2. Kullekin amplitudille $b(k) \rightarrow b(k) e^{-i\omega(k)t}$
3. Käänteis Fourier-muunnos takaisin paikka-avaruuteen

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} b(k,0) e^{-i\omega(k)t} e^{ikx} dk$$

Katso yksityiskohdat kirjasta tai netistä

Aikakehitys numeerisesti

$$\psi(t+\Delta t) = \exp(-i\frac{\hat{H}\Delta t}{\hbar})\psi(t)$$

- Crank-Nicolson tai esim. split-operator tekniikka

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x^2} + V(x) = \hat{K} + \hat{V}$$

$$\hat{U} \approx \exp(-i\frac{V(x)\Delta t}{2\hbar})\exp(-i\frac{\hat{K}\Delta t}{\hbar})\exp(-i\frac{V(x)\Delta t}{2\hbar})$$

Potentiaalitermi on helppo, koska siinä vain kerrotaan aaltofunktiota kompleksiluvulla kussakin avaruuden pisteessä

Aikakehitys numeerisesti

- Kineettisessä termissä derivaattoja eksponentissa ?
- Yksi kätevä tapa hoitaa tämä on ottaa Fourier-muunnos aaltofunktiosta ja sitten operoida

$$\hat{U}_K = \exp(-i\frac{\hbar^2 k^2 \Delta t}{2m\hbar})$$

termillä k-avaruudessa missä derivaatat korvautuvat luvuilla

- Lopuksi käänteinen F-muunnos takaisin paikka-avaruuteen
- Tätä sitten jatketaan niin kauan kuin aikakehitystä lasketaan
- Matlab demo tästä.

Säilymislait ja symmetriat

- Opimme aikaisemmin, että mikäli observaabeli kommutoi Hamiltonin operaattorin kanssa se on liikevakio
- Säilymislait liittyvät syvällisesti symmetrioihin.
- Esimerkit: energia,

  liikemäärä (vapaa hiukkanen)

Jokaista teorian jatkuvaa symmetriaa vastaa säilyvä suure.

Emmy Noether

Energia: ajan homogeenisuus

- Fysiikan lait eivät riipu siitä milloin niitä sovelletaan
- Maxwell, Newton… kaikki tämän mallisia
- Ajan homogeenisuus, time translation symmetry
- Jos H on koko maailmankaikkeuden Hamiltonin operaattori, siinä ei silloin ole ekplisiittistä aikariippuvuutta

$$\frac{dE}{dt} = 0$$

- Energia säilyy!

Liikemäärä: avaruuden homogeenisuus

- Entä jos teoria ei riipu koordinaatiston nollakohdan siirrosta?
- Siirto-operaattori:

$$\hat{\mathcal{D}}(\zeta)f(x) = f(x+\zeta) = e^{i\zeta\hat{p}_x/\hbar}f(x)$$

- Miksi näin? Taylorin sarja $\zeta = 0$:n ympärillä. (Taululla.)
- Jos siirtymä on pieni (I=identiteetti operaattori)

$$\hat{\mathcal{D}}(\zeta) = \hat{I} + \frac{i\zeta\hat{p}_x}{\hbar}$$

- Eristetyn systeemin Hamiltonin operaattori ei riipu siirrosta joten siirto-operaattori kommutoi H:n kanssa
- Ts. myös $\hat{p}_x$ kommutoi **ja on siis liikevakio!**

Kulmaliikemäärä: avaruuden isotrooppisuus

- Oleta suljetun systeemin kiertyvän kulman $\Delta\phi$ jonkin akselin ympäri
- Jos lait eivät riipu orientaatiosta (avaruus isotrooppinen), Hamiltonin funktio ei voi riippua tästä kulmasta
- Kierto-operaattori:

$$\hat{R}_{\Delta\phi} f(\phi) = f(\phi + \Delta\phi)$$

$$\hat{R}_{\Delta\phi} = e^{i\frac{\boldsymbol{\Delta}\phi\cdot\hat{\mathbf{L}}}{\hbar}}$$

- **Kulmaliikemäärä säilyy, kun H kommutoi R:n kanssa!**

Säilymislait

- **Yleisesti: Jos tunnet symmetriamuunnokset, voit laskea kyseistä symmetriaa vastaavan säilyvän suureen.**
- Kirjassa keskustelua mm. pariteettioperaatiosta/pariteetin säilymisestä.

$$\hat{P} f(x) = f(-x)$$

- Kannattaa tutustua. Tästä myös hiukan käsinkirjoitetuissa muistiinpanoissa.

Kulmaliikemäärä

- Siis häh? $\hat{R}_{\Delta\phi} = e^{i\frac{\boldsymbol{\Delta}\phi\cdot\hat{\mathbf{L}}}{\hbar}}$

- Kierretään z-akselin ympäri. Tällöin

$$\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{p}_x\hat{y} = -i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x})$$

- Polaarikoordinaateissa $x = r\cos\phi \text{ ja } y = r\sin\phi$

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial\phi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\phi} = \cos\phi\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r}\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \cdots$$

Kulmaliikemäärä

- Kokoa tulokset yhteen, sievistele ja saat

$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$$

- Toisin sanoen

$$\hat{R}_{\Delta\phi} = e^{i\Delta\phi\hat{L}_z/\hbar} = e^{\Delta\phi\frac{\partial}{\partial\phi}}$$

$$\hat{R}_{\Delta\phi}f(\phi) = (1 + \Delta\phi\frac{\partial}{\partial\phi} + \cdots)f(\phi) = f(\phi + \Delta\phi)$$

- Eli todellakin kiertää kulmaa… samalla tavalla muille komponenteille