Viimeksi: Superpositio, kommutaattorit, degeneraatio

Tällä luennolla: aikakehitys

- Aikaisemmin ratkaisimme alkuarvo-ongelman: $\Psi(x,t)$ kun $\Psi(x,t=0)$ tunnet.

$$\Rightarrow \Psi(x,t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}\,\Psi(x,0)\,,\quad e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}} = 1 - \frac{i\hat{H}t}{\hbar} - \frac{\hat{H}^2t^2}{2!\,\hbar^2} + \dots$$

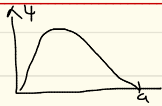
Jos $\Psi(x,0)$ on $\hat{H}$:n ominaistila ψ_n: $e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}}\psi_n = e^{-iE_nt/\hbar}\,\psi_n(x)$

Tämä on stationäärisen tilan aikakehitys.

- stationäärisillä tiloilla mikä tahansa odotusarvo $\langle\hat{O}\rangle$ on vakio kunhan $\hat{O}$ ei sisällä aikaa t eksplisiittisesti.
- stationäärinen tila oskilloi taajuudella $f = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{E_n}{\hbar\,2\pi} = E_n/h$
- Entä superpositiotila? $\Psi(x,0) = \sum_n b_n\psi_n(x)$, $b_n = \langle\psi_n|\Psi(x,0)\rangle$

$$\boxed{\Psi(x,t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}\sum_n b_n\psi_n(x) = \sum b_n e^{-i\hat{H}t/\hbar}\psi_n(x) = \sum_n b_n e^{-iE_nt/\hbar}\psi_n(x),\ \text{kun } \psi_n(x) \text{ on } \hat{H}\text{:n ominaistila. } \left(e^{-iE_nt/\hbar} = e^{-i\omega_nt},\ \text{kun } \omega_n = E_n/\hbar\right)}$$

Esim: laatikossa $\Psi(x,0) = \sqrt{\frac{2}{a}}\left[\underbrace{\frac{\sin(2\pi x/a)}{\sqrt{5}}}_{\psi_2} + \frac{2}{\sqrt{5}}\underbrace{\sin\frac{\pi x}{a}}_{\psi_1}\right]$



$$\Rightarrow \Psi(x,t) = \sqrt{\frac{2}{a}}\frac{1}{\sqrt{5}}\left[e^{-i\omega_2t}\sin\frac{2\pi x}{a} + 2e^{-i\omega_1t}\sin\frac{\pi x}{a}\right]$$

Yleisesti: $\Psi(x,t) = \sum_n b_n(t)\,\psi_n(x)$, missä $b_n(t) = b_n(t=0)\,e^{-i\omega_nt}$

$\Rightarrow$ esim energian mittaus, kun $t>0$: $\langle E\rangle = \sum |b_n(t)|^2E_n$, aikariippuvuus amplitudeissa.

Aikaisempi esimerkki: $|b_1|^2 = \frac{4}{5}$, $|b_2(t)|^2 = \frac{1}{5}$, $|b_n(t)| = 0$, muilla n arvoilla.

$$\Rightarrow \langle E\rangle = \frac{4}{5}E_1 + \frac{1}{5}E_2 = \frac{4}{5}E_1 + \frac{1}{5}2^2\cdot E_1 = \frac{8}{5}E_1 \quad \text{eli vakio, ok!}$$

2. Bra-ket notaatiossa sama lasku

$$|\Psi(t)\rangle = \frac{2}{\sqrt5} e^{-i\omega_1 t}|\varphi_1\rangle + \frac{1}{\sqrt5} e^{-i\omega_2 t}|\varphi_2\rangle$$

$$\langle E\rangle = \langle\Psi(t)|\hat H|\Psi(t)\rangle = \left[\frac{2}{\sqrt5}e^{i\omega_1 t}\langle\varphi_1| + \frac{1}{\sqrt5}e^{+i\omega_2 t}\langle\varphi_2|\right]\left[\hat H \frac{2}{\sqrt5} e^{-i\omega_1 t}|\varphi_1\rangle + \hat H\frac{1}{\sqrt5}e^{-i\omega_2 t}|\varphi_2\rangle\right]$$

$$= \frac45 e^{i\omega_1 t - i\omega_1 t}\underbrace{\langle\varphi_1|\hat H|\varphi_1\rangle}_{E_1\langle\varphi_1|\varphi_1\rangle} + \frac15\underbrace{\langle\varphi_2|\hat H|\varphi_2\rangle}_{E_2\langle\varphi_2|\varphi_2\rangle} = \frac85 E_1$$ eli sama tulos

Esim. odotusarvo, jossa on aikakehitystä $\langle x\rangle$ ($|x\rangle$ ei $\hat H$:n om. tila)

$\langle x(t)\rangle = \langle\Psi(x,t)|\hat x|\Psi(x,t)\rangle$, esitetään $|\Psi\rangle$, $\hat x$:n ominaistilojen avulla

$$\langle x|\Psi\rangle = \frac{2}{\sqrt5}e^{-i\omega_1 t}\varphi_1(x) + \frac{1}{\sqrt5}e^{-i\omega_2 t}\varphi_2(x) = \sqrt{\frac2a}\left[\frac{2}{\sqrt5}e^{-i\omega_1 t}\sin\frac{\pi x}{a} + \frac{1}{\sqrt5}e^{-i\omega_2 t}\sin\frac{2\pi x}{a}\right] = \Psi(x,t)$$

$$\Rightarrow \langle x(t)\rangle = \int_0^a dx\,\Psi^*(x,t)\,x\,\Psi(x,t) = \frac2a\int_0^a dx\,\frac45 x\sin^2\frac{\pi x}{a} + \frac15 x\sin^2\frac{2\pi x}{a}$$ $a^2/4$ $a^2/4$

$$+\frac25 e^{-i(\omega_2-\omega_1)t}\underbrace{\sin\frac{\pi x}{a}\sin\frac{2\pi x}{a}\cdot x}_{-8a^2/9\pi^2} + \frac25 e^{+i(\omega_2-\omega_1)t}\underbrace{\sin\frac{\pi x}{a}\sin\frac{2\pi x}{a}\,x}_{-8a^2/9\pi^2}$$

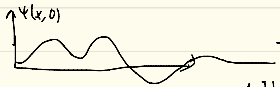
$= \ldots =$

$$= 2a\left\{\frac15+\frac{1}{20}-\frac{16}{45\pi}\cdot 2\cos((\omega_2-\omega_1)t)\right\}$$

Huomaa: 1) oskillaatio kulmataajuudella $(\omega_2-\omega_1)$

2) tulos reaalinen ($\hat x$ hermiittinen / observaabeli)

Entä jatkuva tapaus?



$\rightarrow \Psi(x,t) = ?$

Oletetaan vapaa hiukkanen t.s. $\hat H = \hat p^2/2m = \hbar^2k^2/2m$

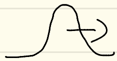
$\Psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} b(k)e^{ikx}$, missä $b(k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x,0)e^{-ikx}dx$

$$\Rightarrow \Psi(x,t) = e^{-i\hat Ht/\hbar}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} b(k)e^{ikx}dk = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} b(k)e^{i(kx-\omega t)}dk, \quad \omega = \frac{\hbar k^2}{2m} = E_k$$

eli kukin amplitudi saa oman ajasta riippuvan vaihetekijänsä

3. Kullakin k:n arvolla $b(k)\, e^{ik(x-\frac{\omega}{k}t)}$

vaihe vakio: $x = \frac{\omega t}{k}$, liikkuu vaihenopeudella $v = \omega/k = \frac{\hbar k}{2m}$

Aaltopaketti: muodostetaan kokoelmana $\hat{H}$:n ominaistiloja 

- jotta liikkuisi: $\langle p\rangle_{t=0} = \langle \psi(x,0)|\hat{p}|\psi(x,0)\rangle \neq 0$
- jotta lokalisoitu: $|\psi(x,0)|^2 \neq 0$ jossain pienessä alueessa

Simulaatioita tästä: phet.colorado.edu "Quantum tunneling & wavepackets"

Gaussinen aaltopaketti: $\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{a}}\left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/4} e^{ik_0x}\, e^{-x^2/4a^2}$

Tod. jak. alussa $P(x) = |\psi(x,0)|^2 = \frac{1}{a}\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2a^2}$ $\left(\int P(x)\,dx = 1\right)$

$\Delta x = \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle} = a$

$\langle p\rangle = \hbar k_0 \to ?$ $\Rightarrow \langle -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\rangle = \int \psi^*\left[(\hbar k_0)\psi^* + (-i\hbar)\left(-\frac{2x}{4a^2}\right)\psi\right]$

$= \hbar k_0 \underbrace{\int P(x)\,dx}_{1} + \underbrace{\int \text{pariton f.}}_{0}$

$= \underline{\underline{\hbar k_0}}$

b(k) laskemalla aikaisempi Fourier-muunnos

$\Rightarrow b(k) = \frac{1}{\sqrt{a}}\left(\frac{1}{2\pi}\right)^{3/4}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x'^2/4a^2}\, e^{ix'(k_0-k)}\,dx' = \sqrt{\frac{2a}{\sqrt{2\pi}}}\, e^{-a^2(k_0-k)^2}$

normaalijakauma k_0:n ympärillä.

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

$\Delta k = \sqrt{\langle k^2\rangle - \langle k\rangle^2} = \frac{1}{2a} \Rightarrow \Delta x\cdot\Delta k = a\cdot\frac{a}{2} = \frac{1}{2}$ t.s. $\underline{\underline{\Delta x\,\Delta p = \hbar/2}}$

pienin mahdollinen epämääräisyys!

4. entä Gaussisen paketin aikakehitys vapaassa avaruudessa?

katso kirjasta yksityiskohdat integraaleille.

Perusidea helppo: $\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} b(k)\, e^{i(kx-\omega(k)t)}\, dk$, $\hbar\omega(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

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

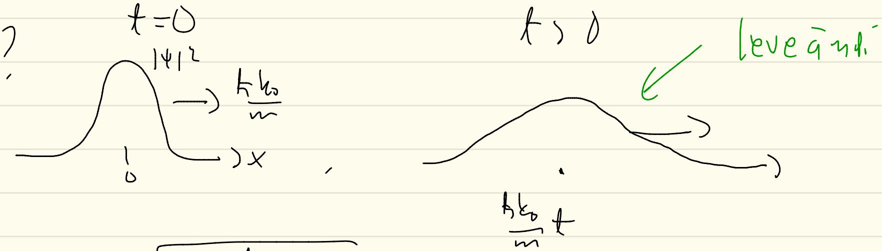
1° laske $b(k)$

2° kunkin amplitudin $b(k)$ aikakehitys vapaassa avaruudessa: $b(k) \to b(k)\, e^{-i\omega(k)t}$

3° käänteis F-muunnos $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int b(k)\, e^{-i\omega(k)t}\, e^{ikx}\, dk$

antaa $\Psi(x,t)$:n

Tulos?



leveys: $a \to a\sqrt{(1 + t^2/\tau^2)}$, $\tau = \frac{2ma^2}{\hbar}$

aaltopaketin leviäminen aikaskaalassa τ ts. sitä nopeampi mitä pienempi paketti. (a pieni)

Jos $\hbar \to 0$ $\tau \to \infty$ eli "klassisesti" paketti ei leviä.

5. Odotusarvojen aikakehitys:

Voimme laskea odotusarvon aikakehityksen aaltofunktion aikakehityksestä:

$\langle \hat{A} \rangle: \quad \psi(x,0) \rightarrow \psi(x,t) \rightarrow \langle \hat{O} \rangle_t = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle$

Voimmeko kirjoittaa $\langle \hat{A} \rangle$:lle liikeyhtälöä?

$\langle \hat{A} \rangle$:ssa ei paikkariippuvuutta: $\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \frac{\partial \langle A \rangle}{\partial t}$ $\quad \left(\frac{dA}{dt} = \cancel{\frac{\partial x}{\partial t} \frac{\partial A}{\partial x}} + \frac{\partial A}{\partial t} \right)$

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \int dx \underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \left(\psi^* \hat{A} \psi \right)}_{*} \qquad (1)$$

$$* = \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \hat{A} \psi + \psi^* \hat{A} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \psi$$

Schrödingerin yhtälö: $\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i\hat{H}}{\hbar} \psi, \quad \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \frac{i\hat{H}}{\hbar} \psi^*$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \left(\psi^* \hat{A} \psi \right) = \frac{i}{\hbar} \left(\hat{H} \psi^* \hat{A} \psi - \psi^* \hat{A} \hat{H} \psi + \frac{\hbar}{i} \psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \psi \right)$$

sijoitus (1):een $\Rightarrow \frac{d\langle A \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \left(\underbrace{\langle \hat{H} \psi | \hat{A} | \psi \rangle}_{\langle \psi | \hat{H} \hat{A} | \psi \rangle} - \langle \psi | \hat{A} \hat{H} | \psi \rangle + \frac{\hbar}{i} \langle \psi | \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} | \psi \rangle \right)$

$\langle \psi | \hat{H} \hat{A} | \psi \rangle$, koska $\hat{H}$ hermiittinen

$$\boxed{\Rightarrow \frac{d\hat{A}}{dt} = \left\langle \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}] \right\rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle}$$

Jos A:ssa ei eksplisiittistä aikariippuvuutta $\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 0$

ja $\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{A}] \rangle$

Huomaa: Jos $\hat{A}$ kommutoi $\hat{H}$:n kanssa A on liikevakio!

6. Esim : $H = \frac{p^2}{2m}$, $\hat{A} = \hat{p} \to [\hat{H}, \hat{p}] = 0 \Rightarrow \langle p \rangle = $ vakio

$\hat{A} = \hat{H} \to [\hat{H}, \hat{H}] = 0 \to \langle \hat{H} \rangle = $ vakio

6. Esim: $H = \frac{p^2}{2m}$, $\hat{A} = \hat{p} \to [\hat{H}, \hat{p}] = 0 \Rightarrow \langle p \rangle = \text{vakio}$

$$\hat{A} = \hat{H} \to [\hat{H}, \hat{H}] = 0 \to \langle \hat{H} \rangle = \text{vakio}$$

Ehrenfestin ~~Periaate~~ Periaate

Kvanttimekaniikka redusoituu klassiseen mekaniikkaan, kun laskemme odotusarvoja.

Esim: $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)$, hiukkanen johon vaikuttaa potentiaali $V(x)$

$$\frac{d\langle p \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H}, \hat{p}] \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle i\hbar \frac{\partial V}{\partial x} \rangle = -\langle \frac{\partial V}{\partial x} \rangle = \langle F \rangle, \quad F = -\frac{\partial V}{\partial x}$$

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H}, \hat{x}] \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [\frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{x}] \rangle = \frac{i}{2m\hbar}\langle \hat{p}\underbrace{[\hat{p}, \hat{x}]}_{-i\hbar} + \underbrace{[\hat{p}, \hat{x}]}_{-i\hbar}\hat{p} \rangle$$

$$= \frac{i}{2m\hbar}\langle -2i\hbar \hat{p} \rangle = \langle p \rangle / m$$

$\Rightarrow \langle x \rangle$ ja $\langle p \rangle$ seuraavat klassisia liikeyhtälöitä kunhan voimana F käytetään $\langle -\frac{\partial V}{\partial x} \rangle = -\int \Psi^*(x,t) \frac{\partial V}{\partial x} \Psi(x,t)$.

(Mistä muuten tuli $[H, \hat{p}] = i\hbar \frac{\partial V}{\partial x}$? $\hat{p}$ ja $\frac{p^2}{2m}$ kommutoivat

$$\Rightarrow [\hat{H}, \hat{p}]g(x) = [V(x), -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}]g(x) \Rightarrow V(x)(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x})g(x) - (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x})V(x)g(x)$$

$$= i\hbar \frac{\partial V}{\partial x} g(x) \Rightarrow [\hat{H}, \hat{p}] = i\hbar \frac{\partial V}{\partial x} \quad \square$$
)

Klassisesti: Hamiltonin mekaniikassa kanoniset koordinaatit $\{q, p\}$

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q} \; \& \; \frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}, \text{ Jos } q = x, \; p = p_x, \; H = \frac{p^2}{2m} + V(x) \Rightarrow \frac{dx}{dt} = \frac{p}{m}, \; \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial V}{\partial x}$$