Opgaven Quantumfysica II, Week 2, 12 januari 2000

Inleveren voor maandag 17 januari 2000, 12.00 uur, bij de portier van de Diamantslijperij. Met vragen over stof en opgaven kun je terecht bij de werkcollegedocenten:

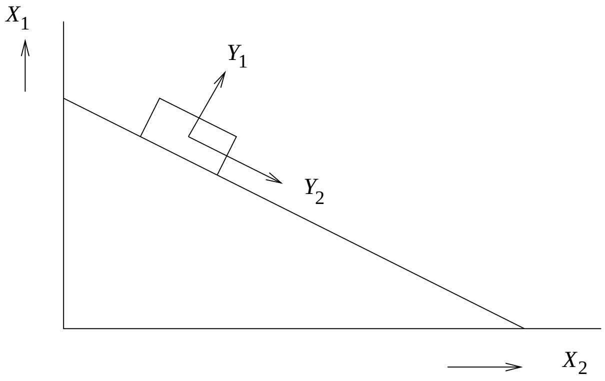
- *Alejandro Arrizabalaga (ITF kamer 333, tel. 5255006, arrizaba@wins.uva.nl)*
- *Joost Slingerland (ITF kamer 356, tel. 5255920, slinger@wins.uva.nl)*
- *Martijn Wubs (WZI kamer B045, tel 5255646, wubs@wins.uva.nl).*

Vermeld alstjeblieft de naam van je werkcollegedocent op het in te leveren werk. Succes !

Opgave 2.1: Diracnotatie

Tot nu toe hebben we quantummechanische systemen beschreven met golffuncties $\psi(x)$. Deze golffuncties zijn een weergave van de toestand waarin het systeem zich bevindt. Dezelfde toestand van het systeem kan echter ook op een andere manier worden weergegeven. Bijvoorbeeld met de golffunctie $-\psi(x)$ of met de golffunctie $\phi(p)$ in de impulsrepresentatie (zie Griffiths p. 107). De verhouding toestand/golffunctie is analoog aan de verhouding in de vectorrekening tussen een vector $\vec{r}$ en zijn weergave in coördinaten; dezelfde vector heeft verschillende coordinaten ten opzichte van verschillende bases voor de vectorruimte.

Aan de ene kant kan het heel handig zijn om verschillende representaties van dezelfde toestand te hebben. Dit stelt ons in staat de representatie te kiezen die de berekeningen het eenvoudigst maakt. We zien dit al in de klassieke mechanica. Bekijken we bijvoorbeeld een blokje op een helling dan is duidelijk dat de basis y_1, y_2 de handigste keuze van



basisvectoren is. Hadden we een vrij vallend blokje willen bekijken dan was x_1, x_2 een handige keus geweest. Ook in de quantummechanica vinden we dit terug: soms is de ene weergave handiger voor een berekening soms de andere.

Aan de andere kant is het zo dat de fysische grootheden (de uitkomsten van de berekeningen) niet afhangen van onze keuze van representatie, maar alleen van de toestand van het systeem. Dirac heeft een notatie geintroduceerd die de nadruk legt op de toestanden in plaats van op de representatie. Met behulp van deze notatie kunnen veel berekeningen gedaan worden zonder zelfs maar een representatie te kiezen. Het doel van deze opgave is je met deze notatie vertrouwd te maken. Voordat we met quantumtoestanden aan de slag gaan introduceren we de Dirac- of bra-ket-notatie eerst aan de hand van voorbeelden uit de driedimensionale vectorrekening .

We bekijken een driedimensionale lineaire ruimte $V \cong \mathbb{R}^3$ met inprodukt ("bracket") $\langle\cdot|\cdot\rangle$.

De Diracnotatie is geïnspireerd op de notatie voor het inprodukt. Een vector $\vec{v} \in V$ noteren we als *ket* $|\, v\,\rangle$, dus als de rechterkant van een inprodukt. Naast de ket voeren we voor elke $\vec{v} \in V$ ook de *bra* $\langle\, v\,|$ in. Deze bra is geen vector, maar moet gelezen worden als een voorschrift, namelijk: "Neem het inprodukt van $\vec{v}$ met de vector die rechts van deze bra staat." Met deze definities van bra en ket behoudt de uitdrukking $\langle\, v\,|\, w\,\rangle$ zijn oorspronkelijke betekenis (ga dit na), maar we kunnen nu ook bijvoorbeeld de uitdrukking $|\, v\,\rangle\langle\, v\,|$ opschrijven.

a. Laat zien dat $|\, v\,\rangle\langle\, v\,|$ een lineaire afbeelding definieert van V naar V.

De lineaire afbeelding uit de bovenstaande vraag is fysisch interessant: het is de projectie die plaatsvindt als je bij meting vindt dat het systeem in de toestand $|\, v\,\rangle$ is (in opgave 2.3f kun je dit zelf nog eens vaststellen aan de hand van een voorbeeld). Met behulp van de Diracnotatie kun je deze projectie dus opschrijven zonder een basis te gebruiken. Om je wat meer gevoel voor de notatie te geven zullen we nu toch met een basis gaan werken. Wanneer een basis $e = \{|\, e_i\,\rangle; i = 1,2,3\}$ voor V gegeven is kun je elke vector $|\, v\,\rangle$ vanuit de oorsprong weergeven als

$$|\, v\,\rangle = \sum_{i=1}^{3} v_i^e |\, e_i\,\rangle$$

de v_i^e noemen we de i-de component van de vector $|\, v\,\rangle$ ten opzichte van de basis e. Als we een basis b hebben dan kan $|\, v\,\rangle$ ook in b worden uitgedrukt, waarbij we dezelfde uitdrukkingen krijgen met e vervangen door b.

Het inprodukt van twee vectoren in V kunnen we schrijven in termen van de inprodukten van de basisvectoren

$$\langle\, v\,|\, w\,\rangle = \sum_{i,j=1}^{3} v_i^{e*} w_j^e \langle\, e_i\,|\, e_j\,\rangle.$$

We nemen nu aan dat de basis e orthonormaal is

$$\langle\, e_i\,|\, e_j\,\rangle = \delta_{ij}$$

b. Laat zien dat $v_i^e = \langle\, e_i\,|\, v\,\rangle$

c. Laat zien dat $\langle\, v\,|\, w\,\rangle$ geschreven kan worden als

$$\sum_{i=1}^{3} v_i^{e*} w_i^e \tag{1}$$

of equivalent

$$\sum_{i=1}^{3} \langle\, v\,|\, e_i\,\rangle\langle\, e_i\,|\, w\,\rangle$$

We kunnen nu "matrices" voor de bra $\langle\, v\,|$ en de ket $|\, w\,\rangle$ ten opzichte van de basis e introduceren. De matrix van de ket $|\, w\,\rangle$ is de kolomvector

$$\begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \end{pmatrix},$$

dus gewoon de coordinaatvector van $\vec{w}$. De matrix van de bra $\langle\, v \,|$ is de rijvector

$$(v_1^*, v_2^*, v_3^*)$$

Het inprodukt $\langle\, v \,|\, w \,\rangle$ is nu eenvoudigweg gegeven door

$$\langle\, v \,|\, w \,\rangle = (v_1^*, v_2^*, v_3^*) \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \end{pmatrix},$$

de bekende matrixvermenigvuldiging.

Merk op dat de matrix voor $\langle\, v \,|$ altijd de complex geconjugeerde getransponeerde is van die voor $|\, v \,\rangle$, onafhankelijk van de gekozen basis. Je zou de bra $\langle\, v \,|$ dus ook kunnen definieren als de rijvector die je op deze manier krijgt uit de coordinaatvector van $|\, v \,\rangle$ in de (willekeurige) basis waarin je wilt werken.

We gaan nu terug naar de quantummechanica. Als voorbeeld bekijken we een deeltje in een doos. De tijdsonafhankelijke Schrödingervergelijking voor dit systeem

$$\hat{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x)$$

heeft de functies $\psi_n(x)$ als oplossing. Deze eigenfuncties vormen een volledige basis, dwz. iedere golffunctie $\Psi(x)$ voor een deeltje in een doos kan als volgt in componenten $\psi_n(x)$ worden ontbonden:

$$\Psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n\psi_n(x). \tag{2}$$

Dit is analoog aan de expansie die we bij de vectoren zagen alleen heeft de golffunctie oneindig veel componenten i.p.v. de drie componenten die we voor R^3 gezien hebben.

Op de golffuncties $\Psi(x), \Phi(x)$ is een inproduct $\langle\, \Psi \,|\, \Phi \,\rangle$ gedefinieerd

$$\langle\, \Psi \,|\, \Phi \,\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\ \Psi^*(x)\Phi(x).$$

d. Controleer de volgende eigenschappen van het inproduct

   i positiviteit $\langle\, \Psi \,|\, \Psi \,\rangle \geq 0$ en $\langle\, \Psi \,|\, \Psi \,\rangle = 0$ d.e.s.d. $\Psi = 0$

   ii lineariteit (additiviteit): $\langle\, \Psi \,|\, \Phi + \Theta \,\rangle = \langle\, \Psi \,|\, \Phi \,\rangle + \langle\, \Psi \,|\, \Theta \,\rangle$

   iii lineariteit (homogeniteit): $\langle\, \Psi \,|\, \alpha\Phi \,\rangle = \alpha\langle\, \Psi \,|\, \Phi \,\rangle$

   iv Hermitische symmetrie: $\langle\, \Psi \,|\, \Phi \,\rangle = \langle\, \Phi \,|\, \Psi \,\rangle^*$

e. De ψ_n vormen een orthonormale basis bij het bovenstaande inproduct. Geef een uitdrukking voor c_n. (Hint: c_n speelt de zelfde rol als v_i^e)

In de uitdrukking voor het inprodukt hebben we de x-afhankelijkheid van de golffuncties weggelaten, dit is analoog aan vectorrekening waar de indices i ook niet in het inprodukt staan. Dit is niet zonder reden. De gedachte hierachter is dat het inprodukt tussen twee golffuncties een eigenschap van de quantummechanische toestanden vertegenwoordigt, zoals in de vectorrekening het inproduct voor een eigenschap van de vectoren staat. De golffunctie $\Psi(x)$ is maar een van de mogelijke representaties van de toestand van het systeem. We zouden dezelfde toestand bijvoorbeeld ook kunnen representeren met de rij van coefficienten $\{c_n\}$ uit vergelijking (2). In dat geval zou het inprodukt eruitzien als

$$\sum_{n=1}^{+\infty} c^*_{n,\Psi} c_{n,\Phi} = \langle\, \Psi \,|\, \Phi \,\rangle$$

(vergelijk dit met formule (1)) We gaan nu de toestanden benadrukken door het inprodukt "in tweeën te splitsen" net als bij vectorrekening. De *Bracket* $\langle\, \Psi \,|\, \Phi \,\rangle$ resulteert dan in twee *toestanden*, de *bra* $\langle\, \Psi \,|$ en de *ket* $|\, \Phi \,\rangle$. Deze *toestanden* $\langle\, \Psi \,|$ en $|\, \Phi \,\rangle$ verschillen in notatie van de *golffuncties* $\Psi^*(x)$ en $\Phi(x)$; zo ontbreekt bijvoorbeeld de variabele x waarover in het bijbehorende inprodukt wordt geïntegreerd.

Met behulp van het inprodukt kunnen we de ontbinding van een golffunctie in de basis $\psi_n(x)$ nu schrijven als

$$\Psi(x) = \sum_n \psi_n(x) \langle\, \psi_n \,|\, \Psi \,\rangle = \sum_n \langle\, \psi_n \,|\, \Psi \,\rangle \psi_n(x)$$

Een *toestand* daarentegen wordt ontbonden als

$$|\, \Psi \,\rangle = \sum_n |\, \psi_n \,\rangle \langle\, \psi_n \,|\, \Psi \,\rangle \tag{3}$$

De variabele x is hier dus geheel uit de notatie verdwenen! Als het duidelijk is in welke basis we werken, schrijven we in plaats van $|\, \psi_n \,\rangle$ ook wel kortweg $|\, n \,\rangle$. De ontbinding van een toestand in de basis $|\, \psi_n \,\rangle$ wordt dan

$$|\, \Psi \,\rangle = \sum_n |\, n \,\rangle \; \langle\, n \,|\, \Psi \,\rangle$$

De notatie suggereert de *volledigheids- of closure-relatie*

$$\sum_n |\, n \,\rangle \langle\, n \,| = I \tag{4}$$

f. Hoe schrijf je deze relatie (*"closure"*) in termen van golffuncties? (Hint: schrijf eerst vergelijking 3 uit in golffuncties in plaats van toestanden.)

Opmerking: mocht je nog verder (en abstracter) willen oefenen met bra-ket-notatie, kijk dan eens naar opgave 3.57 in Griffiths.

Opgave 2.2: Twee-deeltjessystemen

Deze opgave is bedoeld om je vertrouwd te maken met systemen met meer dan een deeltje. We zullen hierbij gebruik maken van Diracnotatie.

Stel, we hebben een systeem met één deeltje dat beschreven wordt met een Hamiltoniaan $H(x, p_x)$. De eigenwaarden van H noemen we E_n en de bijbehorende orthonormale eigentoestanden ψ_n, of in bra-ket-notatie: $|\, n \,\rangle$. Als we nu een systeem hebben met twee van zulke deeltjes die niet met elkaar wisselwerken, dan kunnen we dit beschrijven met de Hamiltoniaan $\tilde{H}(x, p_x, y, p_y) = H(x, p_x) + H(y, p_y)$ (x is hier de coordinaat van deeltje 1 en y de coordinaat van deeltje 2.)

a. Waarom kunnen we deze Hamiltoniaan niet gebruiken als de deeltjes wel wisselwerken?

b. Het produkt van twee eigentoestanden $\psi_m(x)$ en $\psi_n(y)$ van H is een eigentoestand van $\tilde{H}$ met eigenwaarde $E_m + E_n$. Controleer dit.

De produktgolffunctie $\psi_m(x)\psi_n(y)$ schrijven we in bra-ket-notatie als $|\, m\,\rangle|\, n\,\rangle$. Je kunt laten zien (maar we doen dat hier niet) dat de eigenfuncties van de vorm $|\, m\,\rangle|\, n\,\rangle$ een basis vormen voor de twee-deeltjes Hilbertruimte. (Opmerking: deze basis kun je ook nog gebruiken als de deeltjes wel wisselwerken)

c. Hoe ziet een willekeurige golffunctie van het tweedeeltjessysteem er dus uit ?

d. Ga na dat de operatoren $H_1 = H(x, p_x)$ en $H_2 = H(y, p_y)$ als volgt op de toestand $|\, m\,\rangle|\, n\,\rangle$ werken:

$$\begin{aligned} H_2|\, m\,\rangle|\, n\,\rangle &= |\, m\,\rangle(H_2|\, n\,\rangle) \\ H_1|\, m\,\rangle|\, n\,\rangle &= (H_1|\, m\,\rangle)|\, n\,\rangle \end{aligned}$$

Leid nu het resultaat van onderdeel b opnieuw af in bra-ket-notatie. Laat bovendien zien dat de toestand $|\, m\,\rangle|\, n\,\rangle + |\, n\,\rangle|\, m\,\rangle$ een eigentoestand is van $\tilde{H}$. Kunnen we in deze toestand nog spreken van "de energie van deeltje 1" ?

e. Schrijf de toestand $(|\, m\,\rangle + 2|\, m'\,\rangle)(|\, n\,\rangle - 2|\, n'\,\rangle)$ uit in termen van de basis van produkttoestanden. Normeer de gevonden toestand en bereken de verwachtingswaarde van de totale energie in de genormeerde toestand in termen van $E_m, E_{m'}, E_n$ en $E_{n'}$. Bereken ook de verwachtingswaarde van de energie van deeltje 1.

Opgave 2.3: Twee deeltjes in een harmonische-oscillatorpotentiaal

In deze opgave zullen we de verworvenheden van de vorige twee opgaven toepassen op een systeem van twee niet-wisselwerkende deeltjes in een harmonische-oscillatorpotentiaal. In het vak Quantumfysica 1 is afgeleid dat de Hamiltoniaan $H(x)$ voor een harmonische oscillator met (hoek)frequentie ω eigenwaarden $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ heeft met bijbehorende orthonormale eigentoestanden $\psi_n(x)$. (zie ook evt. Griffiths, paragraaf 2.3). Wij zullen ψ_n noteren als $|\, n\,\rangle$. Stel nu dat we twee niet-wisselwerkende deeltjes hebben die zich samen in deze harmonische-oscillatorpotentiaal bevinden.

a. Als we de coordinaten van de deeltjes aangeven met x_1 en x_2, wat is dan de Hamiltoniaan van dit systeem ? En de eigenwaarden van deze Hamiltoniaan ?

b. Wat is de grondtoestand van het systeem ? Geef twee lineair onafhankelijke eigentoestanden van de Hamiltoniaan die elk eigenwaarde $2\hbar\omega$ hebben. Hoeveel onafhankelijke eigentoestanden met eigenwaarde $4\hbar\omega$ zijn er ?

c. Wat is de verwachtingswaarde van de totale energie in de toestand

$$|\, \psi\,\rangle = (|\, 0\,\rangle_1 + 2|\, 2\,\rangle_1)|\, 1\,\rangle_2$$

(de onderindex geeft aan of het over een toestand van deeltje 1 of van deeltje 2 gaat) ? Laat zien dat de energie van deeltje 2 in deze toestand welbepaald is. Geldt dit ook voor de totale energie ? Ontbind de toestand in eigentoestanden van de Hamiltoniaan van het hele systeem.

d. Bereken nu de inprodukten $\langle\, 2\,|_1\langle\, 1\,|_2|\, \psi\,\rangle$, $\langle\, 0\,|_1\langle\, 1\,|_2|\, \psi\,\rangle$ en $\langle\, 3\,|_1\langle\, 1\,|_2|\, \psi\,\rangle$. Controleer of het resultaat klopt met de ontbinding in onderdeel c.

e. Stel, het systeem is in de toestand $|\, \psi\,\rangle$ en we gaan de totale energie meten. Wat zijn de mogelijke uitkomsten van deze meting en met welke kans treedt elke uitkomst op ? Stel dat we bij de meting een totale energie $4\hbar\omega$ hebben gevonden. Wat is dan de toestand na de meting ?

f. Bereken nu $|\, 2\,\rangle_1|\, 1\,\rangle_2\langle\, 2\,|_1\langle\, 1\,|_2|\, \psi\,\rangle$. Vergelijk het resultaat met de toestand na de meting bij e.

g. Schrijf de volledigheidsrelatie (4) uit opgave 1 op voor dit systeem met de basis $|\, m\,\rangle_1|\, n\,\rangle_2$. Controleer deze relatie voor de toestand $|\, \psi\,\rangle$