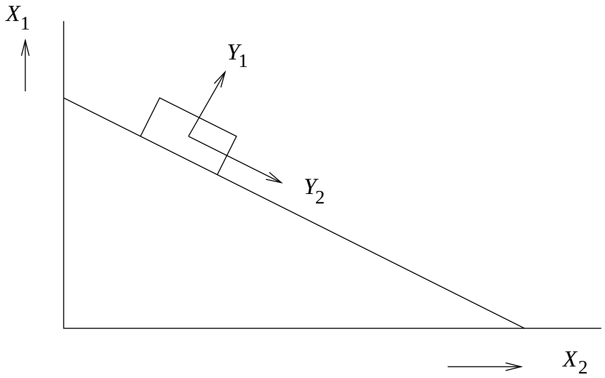
Opgaven Quantumfysica II: Week 2

Inleveren voor 12:00 uur op maandag 22 december bij de portier van de Diamantslijperij.
Bij problemen: Ronald van Elburg, tel.(525)5975, Martijn Wubs, tel. (525)5645 of Mischa Megens, tel. (525)5796.

Opgave 2.1: Diracnotatie

Tot nu toe hebben we quantum mechanische systemen beschreven met golffuncties en gezien dat er twee verschillende soorten golffuncties zijn. De golffuncties $\psi(x)$ in de plaatsrepresentatie en de golffuncties $\phi(p)$ in de impulsrepresentatie. Zoals het woord representatie al aangeeft zijn de golffuncties een weergave van iets, dat "iets" is de toestand waarin het quantum mechanische systeem zich bevindt. De verhouding toestand/golffunctie is analoog aan de verhouding in de vectorrekening tussen een vector $\vec{r}$ hebben en zijn weergave in bv. cartesische coördinaten (x_1, x_2).

Als je de lengte van een vector uitrekent dan krijg je onafhankelijk van de weergave hetzelfde antwoord. Ook de hoek tussen twee vectoren is onafhankelijk van de weergave. De keuze voor een bepaalde weergave is vaak dat in de ene weergave het probleem dat je wil oplossen veel eenvoudiger te formuleren is dan in de andere weergave. Bekijken we bijvoorbeeld een blokje op een helling dan is duidelijk dat de basis



y_1, y_2 de handigste keuze van basis vectoren 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 impuls-representatie handiger voor een berekening soms de plaats-representatie.

Dirac heeft een notatie geintroduceerd die de nadruk legt op de toestanden in plaats van op de representatie. Met deze notatie willen we je in deze opgave vertrouwd maken. De toestanden vormen samen een Hilbertruimte, dat wil zeggen een lineaire ruimte waarop een inprodukt gedefinieerd is. Voordat we met quantumtoestanden aan de slag gaan introduceren we eerst aan de hand van voorbeelden uit de driedimensionale vectorrekening de Dirac-notatie ook wel de bra-ket notatie genoemd (van het engelse woord voor haakje: Bracket).

Neem R^3 een drie dimensionale lineaire ruimte met inprodukt $\langle\cdot|\cdot\rangle$. Wanneer een basis $e = \{\vec{e_i}; i = 1, 2, 3\}$ gegeven is kun je elke vector $\vec{v}$ vanuit de oorsprong weergeven als

$$\vec{v} = \sum_{i=1}^{3} v_i^e \vec{e_i}$$

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

Het inprodukt voor vectoren in R^3 kennen we in termen van het inprodukten van de basis vectoren

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

We nemen nu aan dat de basis e orthonormaal is

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

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

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

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

of equivalent

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

We kunnen nu de bra $\langle\vec{v}|$ en de ket $|\vec{w}\rangle$ introduceren, de bra $\langle\vec{v}|$ is de rij vector

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

en de ket $|\vec{w}\rangle$ is de kolom vector

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

en het inproduct is nu eenvoudig weggegeven door

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

de bekende matrix vermenigvuldiging

Terug naar de quantummechanica, we gaan als voorbeeld de golffunctie van een deeltje in een put uitdrukken in de energie-eigenfuncties. 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 electron in een doos kan als volgt in componenten $\psi_n(x)$ worden ontbonden:

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

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

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

c. 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: $\langle\Psi|\Phi\rangle = \langle\Phi|\Psi\rangle^*$

d. 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 vector rekening het inproduct voor een eigenschap van de vectoren staat. We hadden het inprodukt even goed in de impuls representatie kunnen geven dan zou het inprodukt er als volgt uitzien

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dp\ \Psi^*(p)\Phi(p) = \langle\Psi|\Phi\rangle$$

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

$$|\Psi\rangle = \sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|\Psi\rangle \tag{1}$$

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*

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = I$$

e. Hoe schrijf je deze relatie (*'closure'*) in termen van golffuncties? (Hint: schrijf eerst vergelijking 1 uit in golffuncties in plaats van toestanden.)

Opgave 2.2: Plaats- en Impuls-representatie

In deze opgave willen we de Dirac-notatie verder onderzoeken. In het bijzonder zullen we laten zien dat de golffuncties $\Psi(x), \Psi(p)$ geschreven kunnen worden als inprodukten tussen de toestand Ψ en eigentoestanden van de operatoren $\hat{x}$ respectievelijk $\hat{p}$.

We beginnen met de basis van eigen*functies* van de plaats operator $\hat{x}$:

$$\psi_{x_a}(x) = \delta(x - x_a)$$

Deze basis is orthonormaal, in de zin dat

$$\langle \psi_{x_a} | \psi_{x_b} \rangle = \delta(x_a - x_b)$$

waarbij (ter herinnering) het inprodukt gegeven is door

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

a. Wat zijn de eigenwaarden van de operator $\hat{x}$?

b. Bereken $\langle \psi_{x_a} | \psi \rangle$ voor een willekeurige toestand $|\psi\rangle$ met golffunctie $\psi(x)$.

Net als in de vorige opgave schrijven we als duidelijk is in welke basis we werken in plaats van de ket $|\psi_{x_a}\rangle$ ook wel kortweg $|x_a\rangle$. Dit verklaart de notatie

$$\Psi(x) = \langle x | \Psi \rangle$$

Beschouw nu nogmaals de ontbinding van een toestand in de basis $|\psi_n\rangle$

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

zoals we die in onderdeel *e* van de vorige opgave hebben gezien. Deze ontbinding leidde tot de volledigheids relatie

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = I$$

c. Hoe verandert de volledigheidsrelatie als je in plaats van $|n\rangle$ nu $|x_a\rangle$ als basis gebruikt? (Hint: Bedenk wat de gevolgen zijn van het overgaan van een discrete set van energie eigentoestanden $|n\rangle$ naar de continue set van plaats eigentoestanden $|x_a\rangle$

Voor de operator $\hat{p}$ kunnen we een soortgelijke redenering volgen als voor $\hat{x}$.

d. Wat zijn de eigenfuncties ϕ_{p_a} van $\hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}$? (NB: De Ψ is hier de naam van de golffunctie, de p_a is de naam van de bijbehorende eigenwaarde. We hebben de $_a$ eraan gehangen om het verschil met bijvoorbeeld de operator $\hat{p}$ duidelijker te maken.)

e. Bereken hiermee $\langle x_a | p_a \rangle$.

Hoe bereken je nu bijvoorbeeld $\langle \Psi | \hat{p} | \Phi \rangle$? (Dit is het inprodukt van $\langle \Psi |$ met $\hat{p}|\Phi\rangle$; we schrijven de $\hat{p}$ buiten de $|\rangle$ om te benadrukken dat $\hat{p}$ op de toestand werkt.) Er zijn twee voor de hand liggende mogelijkheden: **Mogelijkheid 1:** Als je de golffuncties in de impulsrepresentatie kent, dwz. $\Psi(p) = \langle p | \Psi \rangle$ etc., dan gebruik je twee maal de volledigheids-relatie voor de toestanden $|p\rangle$. NB we laten het aanhangsel $_a$ van p_a en x_a nu voortaan maar weg. De volledigheids-relatie ziet er dan als volgt uit: $1 = \int dp' \; |p'\rangle\langle p'|$.

f. Leid af hoe je $\langle \Psi | \hat{p} | \Phi \rangle$ moet uitdrukken in $\Psi(p)$ en $\Phi(p)$.

Mogelijkheid 2: Als je de golffuncties in de plaatsrepresentatie kent, dwz. $\Psi(x) = \langle x | \Psi \rangle$ etc., dan gebruik je ook nog closure voor de toestanden $|x\rangle$.

g. Leid af hoe je $\langle \Psi | \hat{p} | \Phi \rangle$ uit moet drukken in $\Psi(x)$ en $\Phi(x)$. Gebruik dat $\int dy \; e^{ixy} = 2\pi\delta(x)$.

In het laatste onderdeel heb je eigenlijk de Fouriertransformatie weer teruggevonden:

$$\Psi^*(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx \;\Psi^*(x) e^{-i\frac{p}{\hbar}x}$$