Opgaven Quantumfysica II: Week 3

Inleveren voor 12:00 uur op maandag 12 januari bij de portier van de Diamantslijperij.
Bij problemen: Ronald van Elburg, tel.(525)5975, Martijn Wubs, tel. (525)5645 of Mischa Megens, tel. (525)5651.

Opgave 3.1: De tijdsontwikkelingsoperator

De Schrödingervergelijking is een eerste orde differentiaalvergelijking in de tijd t. Dit houdt in dat de golffunctie $\Psi(t)$ eenduidig door $\Psi(t_0)$ bepaald wordt. Met behulp van een tijdsontwikkelingsoperator $U(t, t_0)$ kunnen we schrijven:

$$\Psi(t) = U(t, t_0)\Psi(t_0) \tag{1}$$

Deze definitie geeft aanleiding tot een aantal eigenlijk nogal voor de hand liggende eigenschappen van de tijdsontwikkelingsoperator:

a. Laat zien dat geldt:

1. $U(t, t_0)$ is lineair.
2. $U(t_0, t_0)$ is de eenheidsoperator.
3. $U(t_2, t_1)U(t_1, t_0) = U(t_2, t_0)$.
4. $U(t_0, t)$ is de inverse operator van $U(t, t_0)$.

b. Laat zien dat $U(t, t_0)$ unitair is. Wat is de fysische interpretatie van deze eigenschap?

c. Leid met behulp van de Schrödingervergelijking een bewegingsvergelijking voor $U(t, t_0)$ af. Hint: 'bewegingsvergelijking": een verband tussen de tijdsafgeleide van een grootheid en die grootheid zelf.)

d. Los deze vergelijking op voor een Hamiltoniaan die niet expliciet van de tijd afhangt. Is de gevonden tijdsontwikkelingsoperator inderdaad unitair?

e. Welke moeilijkheden ontstaan er wanneer de Hamiltoniaan wel expliciet van de tijd afhangt?

De verwachtingswaarde van een observabele A ten tijde t kan uitgedrukt worden in de operator $\hat{A}$ en de golffunctie $\Psi(t_0)$. (Let wel, de golffunctie is gegeven op een ander tijdstip dan de gevraagde verwachtingswaarde, namelijk t_0 in plaats van t.) Het berekenen van de verwachtingswaarde gaat met behulp van de tijdsontwikkelingsoperator, en wel als volgt:

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle U(t, t_0)\Psi(t_0)|\, \hat{A}(t)\, |U(t, t_0)\Psi(t_0)\rangle\,. \tag{2}$$

Gewoonlijk wordt dit geschreven als

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \Psi(t)|\hat{A}(t)|\Psi(t)\rangle. \tag{3}$$

In dit geval wordt de tijdsafhankelijkheid van de verwachtingswaarde vooral bepaald door de tijdsafhankelijkheid van de golffunctie $\Psi(t)$. De operator $\hat{A}(t)$ hangt vaak helemaal niet direct van de tijd t af. (De impulsoperator $\hat{p}$ bijvoorbeeld is $-i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ in de plaatsrepresentatie, en daarin staat nergens een tijdstip t.) De situatie in vergelijking 3 wordt het Schrödinger-beeld genoemd. In dit beeld is de verwachtingswaarde gegeven door $\langle \hat{A} \rangle = \langle \Psi_S(t)|\hat{A}_S|\Psi_S(t)\rangle$, met $\Psi_S(t)$ de (Schrödinger-) golffunctie en $\hat{A}_S$ de (Schrödinger-) operator.

Echter, als we willen kunnen we de tijdsafhankelijkheid net zo goed in het operator-gedeelte stoppen:

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \Psi(t_0)|U(t_0, t)\hat{A}U(t, t_0)|\Psi(t_0)\rangle. \tag{4}$$

In dit geval hangt de golffunctie niet meer van de tijd t af (alleen nog maar van een vast tijdstip t_0). De operator tussen de streepjes van het inprodukt hangt nu wel expliciet van de de tijd af. Deze situatie (vergelijking 4) wordt het Heisenberg-beeld genoemd. In dit beeld is de verwachtingswaarde gegeven door $\langle \hat{A} \rangle = \langle \Psi_H|\hat{A}_H(t)|\Psi_H\rangle$, met Ψ_H de (Heisenberg-) golffunctie en $\hat{A}_H(t)$ de (Heisenberg-) operator.

Samenvattend: de verwachtingswaarde van een operator $\hat{A}$ wordt gegeven door

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \Psi_S(t)|\hat{A}_S|\Psi_S(t)\rangle = \langle \Psi_H|A_H(t)|\Psi_H\rangle. \tag{5}$$

Dit lijkt natuurlijk allemaal erg op elkaar. Toch zijn de operatoren $\hat{A}_S$ en $\hat{A}_H$ heel verschillend.

f. Geef het verband tussen golffuncties in het Schrödinger- en het Heisenberg-beeld. Geef ook het verband tussen operatoren in beide beelden.

g. Bereken de tijdsafgeleide van de verwachtingswaarde van een operator A, zowel in het Schrödinger als in het Heisenberg beeld. Wat valt je op?

Opgave 3.2: Het viriaaltheorema

a. Leid een uitdrukking af voor de tijdafgeleide van de verwachtingswaarde van een operator A. Maak hierbij gebruik van de tijdafhankelijke Schrödingervergelijking.

b. We beschrijven een deeltje in een potentiaal $V(\vec{x})$ met de Hamiltoniaan $H = p^2/2m + V(\vec{x}) = T + V$. Bereken voor dit deeltje $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \vec{x} \cdot \vec{p} \rangle$.

c. Neem nu aan dat het systeem zich in een stationaire toestand bevindt. Laat zien dat we in dat geval de volgende vorm van het viriaaltheorema krijgen:

$$2\langle T \rangle = \langle \vec{x} \cdot \vec{\nabla} V \rangle. \tag{6}$$

(Over de naam van het theorema: in de klassieke mechanica wordt het inproduct van de plaatsvector met de kracht op die plaats de 'viriaal' genoemd. De viriaal stond zojuist dus in het rechterlid.)

d. Pas het viriaaltheorema toe op een centrale potentiaal van de vorm $V(r) = A\ r^n$, en druk de verwachtingswaarde van de potentiaal voor gebonden toestanden uit in de energie.

e. Als we de spin even buiten beschouwing laten, door welke centrale potentiaal wordt dan het waterstofatoom bijeengehouden? Zoek op in Gasiorowicz wat de grondtoestandsenergie van dit atoom is. Bereken nu, met de gegevens die je in deze opgave hebt afgeleid en gevonden, de kinetische energie (in eV) van het waterstofatoom in de grondtoestand.

Opgave 3.3: Dispersie

in de appendix van Gasiorowicz over operatoren wordt afgeleid hoe de commutatie-relaties tussen twee operatoren leiden tot een onzekerheidsrelatie voor de bij de operatoren horende waarneembare grootheden (observabelen). Ook in het hoofdstuk 'the general structure of wave mechanics' wordt aandacht aan dit onderwerp besteed. We gaan in deze opgave spelen met de golffuncties met minimale onzekerheid uit de appendix. We zullen zien wat er gebeurt met de dispersie Δp als we de dispersie Δx van de positie-observabele x veranderen.

We beginnen met de (Gaussische) golffuncties (de aangekondigde golffuncties met minimale onzekerheid),

$$\psi_a(x) = C \exp\left(-\frac{x^2}{2a}\right), \text{ met } a \text{ een reele constante.} \tag{7}$$

a. Normeer deze golffunctie en schets de vorm. Geef de a-afhankelijkheid van de vorm aan.

(N.B.: De norm wordt degeven door een integraal van de vorm $\int f(x)\,\mathrm{d}x$. Deze kunt U uitrekenen door te kwadrateren, $\int\int f(x)f(y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y$, en vervolgens over te gaan op poolcoordinaten. Alle integralen in deze opgave bent U in het eerste jaar van Uw studie reeds tegengekomen.)

b. Bereken de dispersie van de operatoren x en p, dus Δx en Δp.

Nu laten we a kleiner worden.

c. Wat gebeurt er met Δx? Wat is de fysische betekenis hiervan?

d. En wat gebeurt er met $\Delta x \Delta p$? Leg dit uit.

(Als U de appendix goed gelezen hebt, weet U reeds wat er met $\Delta x \Delta p$ gebeurt; U kunt het natuurlijk ook gewoon uitrekenen.)