12/9 2012. (5) {Kvant} Varians

Ex1 $\hat{x}$-operatorn

$\mu = \langle \hat{x} \rangle$ Väntevärdet (medelvärdet)

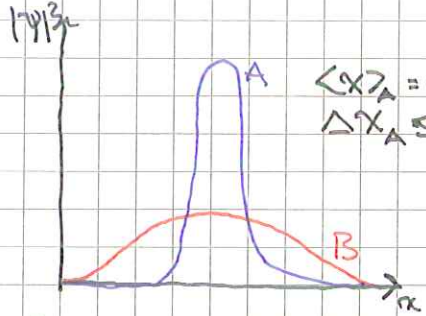
$(\Delta x)^2 = \langle (\hat{x}-\mu)^2 \rangle$: Varians för x (spridning kring medelvärdet)

$= \langle x^2 - 2\mu x + \mu^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - 2\mu \langle x \rangle + \mu^2 =$

$= \langle x^2 \rangle - 2\mu^2 + \mu^2 = \langle x^2 \rangle - \mu^2 =$

$= \langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2$

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



$\langle x \rangle_A = \langle x \rangle_B$

$\Delta x_A \leq \Delta x_B$

Heisenbergs allmäna obestämdhetsrelation (bevis i boken)

$$\boxed{\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{|\langle i[A,B] \rangle|}{2}}$$

Vi ser att $\Delta A \cdot \Delta B = 0$ då $[A,B] = 0$.

I boken visas även att (s121) $[A,B]=0$

$\Rightarrow$ de har en bas av gemensamma egenfunktioner

$\Rightarrow$ de är samtidigt mätbara.

Ex1 $[A,B]=0$ Vid mätning av A på ψ erhåller λ_i $\Rightarrow \psi \to \phi_i$ där $A\phi_i = \lambda_i \phi_i$

$\psi = \sum c_n \phi_i$, $P(\lambda_i) = |c_i|^2$.

Vi mäter nu B: $\Rightarrow \phi_i \to \phi_i$ och erhåller μ_i där $B\phi_i = \mu\phi_i$ $\Rightarrow$ Efterföljande mätning ändrar ej vågfunktionen $\Rightarrow$ samtidigt mätbara.

Sannolikhetsströmmen

Förra gången visade vi $\frac{d}{dt}\langle A \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [A,B] \rangle$

Välj $A = 1$.

$\frac{d}{dt}\langle \psi | 1 \psi \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H|1] \rangle = 0$.

$(H \cdot 1 - 1 \cdot H = 0)$

$\Rightarrow \frac{d}{dt} \int \underbrace{\psi^* \psi}_{|\psi|^2} dx = 0$.

- Normering bevaras med tiden
- Totala sannolikheten är en bevarad storhet.

$\to$ Sannolikhetstätheten $|\psi|^2 = \rho$ uppfyller en kontinuitetsekvation.

$1^3 \cdot \frac{d\rho}{dt} = L^2 (S_{in} - S_{ut})$

$-\frac{d\rho}{dt} + \frac{(S_{ut} - S_{in})}{L} = 0$

$\frac{d\rho}{dt} + \frac{S(x+L) - S(x)}{L} = 0$

ρ [sannolikhet/m^3]

S [sannolikhet/sm^2]

$\frac{d\rho}{dt}$ [sannolikhet/sm^3]

$L \to 0 \Rightarrow \frac{d\rho}{dt} + \frac{dS}{dx} = 0$

I 3D: $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \vec{S} = 0$.

Vad blir S i kvantmekaniken?

$\frac{d\rho}{dt} = \frac{d}{dt}(\psi^* \psi) = \dot{\psi}^* \psi + \psi^* \dot{\psi}$ (1)

TSE: $i\hbar \dot{\psi} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V\psi$

$\Rightarrow \dot{\psi} = \frac{1}{i\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V\psi\right)$ (2).

Detta ger: (2) $\to$ (1)

$\frac{d\rho}{dt} = \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*\right) = \frac{i\hbar}{2m} \nabla \cdot \left(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*\right)$

$\Rightarrow \vec{S} = \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi\right)$

Approximativa metoder

(1) Variationsmetoden

SATS u är en normerad vågfunktion och ε_1 är lägsta egenvärdet till H.

Då gäller: $\langle H \rangle = \langle u | Hu \rangle \geq \varepsilon_1$

$\min_u \langle u | Hu \rangle = \varepsilon_1$

Bevis: Utveckla u i egenfunktioner till H, $u = \sum c_n \phi_n$, där $H\phi_n = E_n \phi_n$, $\varepsilon_n \leq \varepsilon_{n+1}$.

$\langle H \rangle = \langle \sum_n c_n \phi_n | H \sum_m c_m \phi_m \rangle =$

$= \langle \sum_n c_n \phi_n | \sum_m \varepsilon_m c_m \phi_m \rangle = \sum_{nm} \varepsilon_m c_n^* c_m \delta_{nm} =$

$= \sum_n \varepsilon_n |c_n|^2 \geq \sum_n \varepsilon_1 |c_n|^2 = \varepsilon_1 \sum_n |c_n| = \varepsilon_1$

normerad vågfunktion gäller $\sum |c_n|^2 = 1$.

$\to$ Gissa en vågfunktion u med fria parametrar. Minimera $\langle H \rangle$ m.a.p. dessa parametrar.

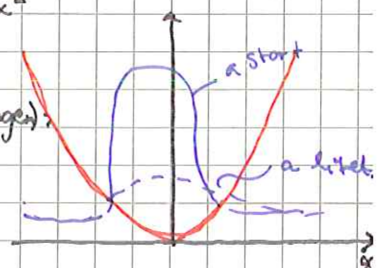
Ex Hitta energin för grundtillståndet hos för $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega x^2$

Vad ska vi gissa på?

Egenskaper för $u(x)$ (gissningen):

- Jämn funktion.
- Avta då $x \to \pm\infty$
- Inga noder

$\boxed{u_a(x) = N \cdot e^{-ax^2}}$



Normering $1 = |N|^2 \int e^{-2ax^2} dx = |N|^2 \sqrt{\frac{\pi}{2a}}$

$\langle H \rangle = \langle u | Hu \rangle$, vi beräknar Hu

$Hu = -\frac{\hbar^2}{2m} u_a'' + \frac{1}{2} m\omega x^2 u_a(x)$.

$= \int u^* Hu \, dx = \ldots = \frac{\hbar^2}{2m} a + \frac{1}{8} m\omega^2 \cdot \frac{1}{a}$

Minimering m.a.p. $a \Rightarrow \langle H \rangle_{min} = \frac{\hbar\omega}{2}$

$\Rightarrow \varepsilon_1 \leq \frac{\hbar\omega}{2}$ (övningsexempel 6.1)

(2) Första ordningens störningsräkning

Antag: $V_0 + V_1$ (V_1 är liten jmf. med V_0)

- Lösningarna till SE. måste vara kända för V_0.

$H_0 = \frac{p^2}{2m} + V_0$, $H_0 \phi_n^0 = \varepsilon_n^0 \phi_n^0$

Antag att störningen inte ändrar vågfunktionen så mycket, då är $\phi_k \approx \phi_n^0 \Rightarrow \varepsilon_k = \langle \phi_k | H \phi_k \rangle$

$\approx \langle \phi_n^0 | H \phi_n^0 \rangle = \underbrace{\langle \phi_n^0 | H_0 \phi_n^0 \rangle}_{\varepsilon_n^0} + \underbrace{\langle \phi_n^0 | V_1 \phi_n^0 \rangle}_{\Delta \varepsilon_k}$

③ Ändliga underrum

Operatorer kan representeras som matriser och vågfunktioner som vektorer.
Givet en uppsättning basvågfunktioner, (tex. egenfunktioner till en godtycklig hermitisk operator) kan en godtycklig funktion skrivas:

$$u = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \phi_n \text{ där } C_n = \langle \phi_n | u \rangle$$

Låt en operator $\hat{A}$ verka på u. $\hat{A}u = v$. (1)
där $v = \sum_{m}^{\infty} b_m \phi_m$.

$(1) \Rightarrow \sum_{n=1}^{\infty} C_n \hat{A} \phi_n = \sum_{m=1}^{\infty} b_m \phi_m$ (3)

Skalärmultiplicera med ϕ_k

$$(3) \Rightarrow \sum_n C_n \langle \phi_k | A \phi_n \rangle = \sum_m b_m \underbrace{\langle \phi_k | \phi_m \rangle}_{\delta_{n,m}}$$

$$\Rightarrow \sum \underbrace{\langle \phi_k | A \phi_n \rangle}_{A_{kn}} C_n = b_k.$$

$$\underbrace{\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1n} \\ A_{21} & \dots & & \vdots \\ & & & \vdots \\ A_{n1} & \dots & & A_{nn} \end{pmatrix}}_{A} \underbrace{\begin{pmatrix} C_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ C_n \end{pmatrix}}_{u} = \underbrace{\begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}}_{v}$$

På matrisformen representeras hermitska operatorer av hermitska matriser.

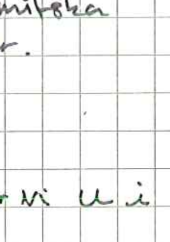
$$A_{n,m} = A^*_{m,n}$$

S.E. på matrisform:
För att lösa $Hu = Eu$ utvecklar vi u i en bas $u \approx \sum_{n=1}^{N} C_n \phi_n$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} \langle \phi_1 | H \phi_1 \rangle & \langle \phi_1 | H \phi_2 \rangle & \\ \langle \phi_2 | H \phi_1 \rangle & & \\ & & \ddots \\ & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ C_n \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} C_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ C_n \end{pmatrix}$$

ε är egenvärden till H matrisen och koefficienterna $\begin{pmatrix} C_1 \\ \vdots \\ C_n \end{pmatrix}$ fås som egenvektorer.

Ex) Låda med oändligt höga väggar med en störning $V_1 = C \cdot \delta(x - a/2)$ i mitten.
Vad blir ε_i med ändliga underrumsmetoden och i störningsräkning?



$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + V_1$. Vi utvecklar i egenfunktioner till $H_0 = \frac{p^2}{2m} + 0$.

$$\begin{cases} \phi_n^0 = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{k\pi x}{a}\right) \\ \varepsilon_n^0 = \frac{\pi^2 n^2}{2ma^2} \cdot \hbar^2 \end{cases}$$

① - Ändliga underrum.

$$\langle \phi_i | H \phi_n \rangle = \underbrace{\langle \phi_i | H^0 \phi_n \rangle}_{\delta_{ik} \varepsilon_n} + \langle \phi_i | V_1 \phi_n \rangle$$

$$\langle \phi_i | V_1 \phi_k \rangle = \frac{2}{a} \int \sin\left(\frac{i\pi x}{a}\right) \delta\left(x - \frac{a}{2}\right) \cdot C \sin\left(\frac{k\pi x}{a}\right)$$

$$= \frac{2}{a} \sin\left(\frac{i\pi}{2}\right) \cdot \sin\left(\frac{k\pi}{2}\right)$$

② Störningsräkning.

$\varepsilon_k \approx \varepsilon_k^0 + \Delta\varepsilon_k$ med $\Delta \varepsilon_k = \langle \phi_k^0 | V_1 \phi_k^0 \rangle$