Εξέλιξη στο Χρόνο

Δομή Διάλεξης

Χρονική Εξέλιξη Καταστάσεων: Εξίσωση Schrodinger

Χρονική Εξέλιξη Αναμενόμενων Τιμών (θεώρημα Ehrenfest)

Σύνοψη

Χρονοεξαρτώμενη Εξίσωση Schrodinger

Χρονική Εξέλιξη στην Κλασσική Μηχανική:

Κατάσταση Συστήματος: Θέσεις και Ορμές Σωματίων $\xrightarrow{\mathbf{f} = m\mathbf{a}}$ Χρονικά Εξελιγμένη Κατάσταση

Χρονική Εξέλιξη στην Κβαντική Μηχανική:

Αρχική Κατάσταση Συστήματος: Κατάσταση ket συστήματος |ψ(0)> $\xrightarrow{\text{Εξ. Schrodinger}}$ |ψ(t)>

Εξ. Schrodinger: Χρονική εξέλιξη ket: $\boxed{i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = H|\psi\rangle}$

Νόμος της Φύσης (συμβατός στο κλασσικό όριο με νόμο Νεύτωνα)

Χρονική εξέλιξη bra (ερμητειανή συζηγία): $\xrightarrow{H^\dagger = H}$ $-i\hbar \frac{\partial \langle\psi|}{\partial t} = \langle\psi|H$

3a+

Εξέλιξη καταστάσεων καθορισμένης ενέργειας |E>

Για $|\psi\rangle=|E_n\rangle$ η χρονοεξαρτημένη εξ. Schrodinger δινει:

3b+

$$i\hbar\frac{\partial|E_n\rangle}{\partial t}=H|E_n\rangle=E_n|E_n\rangle \Longrightarrow |E_n,t\rangle=|E_n,0\rangle e^{-iE_nt/\hbar}$$

Μόνο αλλαγή φάσης!!

Εξέλιξη γενικής κατάστασης |ψ(t)>

Αναπτύσουμε την |ψ(t)> στην βάση καθορισμένης ενέργειας $|E_n(t)>$ι:

$$|\psi,t\rangle = \sum_n a_n(t)|E_n,t\rangle$$

Αντικαθιστούμε το ανάπτυγμα στην χρονοεξαρτώμενη εξ. Schrodinger:

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial|\psi\rangle}{\partial t} = \sum_n \mathrm{i}\hbar\left(\dot{a}_n|E_n\rangle + a_n\frac{\partial|E_n\rangle}{\partial t}\right) = \sum_n a_n H|E_n\rangle \Rightarrow \dot{a}_n = 0$$

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial|E_n\rangle}{\partial t} = H|E_n\rangle$$

$$|\psi,t\rangle = \sum_n a_n(t)|E_n,t\rangle$$

$$\dot{a}_n = 0$$

$$|E_n,t\rangle = |E_n,0\rangle \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar}$$

$$\Rightarrow \boxed{|\psi,t\rangle = \sum_n a_n \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar}|E_n,0\rangle}$$

3c+

Εξέλιξη γενικής κατάστασης |ψ(t)>

$$\left.\begin{aligned} |\psi, t\rangle &= \sum_n a_n(t)|E_n, t\rangle \\ \dot{a}_n &= 0 \\ |E_n, t\rangle &= |E_n, 0\rangle \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar} \end{aligned}\right\} \Rightarrow \boxed{|\psi, t\rangle = \sum_n a_n \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar}|E_n, 0\rangle}$$

Για την έυρεση της |ψ(t)> παίζει καθοριστικό ρόλο η βάση καταστάσεων καθορισμένης ενέργειας που είναι και ιδιοκαταστασεις της Hamiltonian

Άρα η επίλυση της εξίσωσης ιδιοτιμών της H (χρονοανεξάρτητη εξίσωση Schrodinger) είναι πολύ σημαντική για την εύρεση χρονικής εξέλιξης.

$$H|E_n\rangle = E_n|E_n\rangle$$

Χρονική Εξέλιξη Αναμενόμενης Τιμής <ψ|Q|ψ>

$$\left.\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial|\psi\rangle}{\partial t} &= H|\psi\rangle \\ -i\hbar\frac{\partial\langle\psi|}{\partial t} &= \langle\psi|H \end{aligned}\right\} \Rightarrow$$

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi|Q|\psi\rangle = -\langle\psi|HQ|\psi\rangle + i\hbar\langle\psi|\frac{\partial Q}{\partial t}|\psi\rangle + \langle\psi|QH|\psi\rangle$$

$$= \langle\psi|[Q,H]|\psi\rangle + i\hbar\langle\psi|\frac{\partial Q}{\partial t}|\psi\rangle$$

3d+

Θεώρημα Ehrenfest

Αν ενας τελεστής δεν εξαρτάται εκπεφρασμένα απο τον χρόνο και μετατίθεται με την Hamiltonian τότε η αναμενόμενη τιμή του είναι χρονικά αμετάβλητη (διατηρείται).

Αντίστοιχο αποτέλεσμα ισχύει στην κλασσική μηχανική με Hamiltonian και αγκύλες Poisson αντι για μεταθέτη.

Ειδικές Περιπτώσεις

1. [Q,H]≠0 αλλά |ψ>=|E>:

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle E|Q|E\rangle = \langle E|(QH-HQ)|E\rangle = (E-E)\langle E|Q|E\rangle = 0$$

$$H|E\rangle = E|E\rangle$$

3e+

2. Q=H:

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi|Q|\psi\rangle = \langle\psi|[Q,H]|\psi\rangle + i\hbar\langle\psi|\frac{\partial Q}{\partial t}|\psi\rangle \Longrightarrow \frac{\mathrm{d}\langle E\rangle}{\mathrm{d}t} = \left\langle\frac{\partial H}{\partial t}\right\rangle$$

3f+

Η ενέργεια διατηρείται όταν η Hamiltonian δεν εξαρτάται εκπεφρασμένα απο τον χρόνο (πχ λόγω εξωτερικών αιτίων)

Σύνοψη

Η χρονική εξέλιξη των κβαντικών καταστάσεων γίνεται με βάση την χρονοεξαρτώμενη εξίσωση Schrodinger:

$$\boxed{\mathrm{i}\hbar\frac{\partial|\psi\rangle}{\partial t} = H|\psi\rangle}$$

Απαιτείται γνώση μόνο της αρχικής κατάστασης που περιέχει όλη την πληροφορία των αρχικών συνθηκών.

Οι ιδιοκαταστάσεις της Hamiltonian έχουν πολύ απλή χρονική εξέλιξη:

$$|E_n, t\rangle = |E_n, 0\rangle \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar}$$

Η χρονίκή εξέλιξη οποιασδήποτε κβαντικής κατάστασης προκύπτει μετα απο ανάπτυγμα στις ιδιοκαταστάσεις της Hamiltonian:

$$\boxed{|\psi, t\rangle = \sum_n a_n \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar}|E_n, 0\rangle}$$

Η χρονίκή εξέλιξη της αναμενόμενης τιμής τελεστή Q προκύπτει με χρήση της εξίσωσης Schrodinger ως:

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi|Q|\psi\rangle = \langle\psi|[Q,H]|\psi\rangle + \mathrm{i}\hbar\langle\psi|\frac{\partial Q}{\partial t}|\psi\rangle$$

Άσκηση 1

1. Η Hamiltonian συστήματος έχει ενεργειακό φάσμα: $E_n = n^2\mathcal{E}$

όπου n=1,2,3,… και οι αντίστοιχες κβαντικές καταστάσεις είναι |1>, |2>, … , |n>. Την στιγμή t=0 το σωμάτιο είναι στην κατάσταση

$$|\psi(0)\rangle = 0.2|1\rangle + 0.3|2\rangle + 0.4|3\rangle + 0.843|4\rangle$$

3g+++

A.Αν μετρήσουμε την ενέργεια την t=0 ποια είναι η πιθανότητα να την βρούμε με τιμή μικρότερη απο $6\mathcal{E}$;

B. Ποια είναι η μέση τιμή και η τυπική απόκλιση της ενέργειας την t=0;

C . Βρείτε την |ψ(t)>. Παραμένουν οι απαντήσεις στα A και B ίδιες για t>0;

D . Καποια στιγμή μετράμε την ενέργεια και βρίσκουμε $16\mathcal{E}$. Ποια είναι η κατάσταση του συστήματος μετά την μέτρηση; Ποια τιμή θα πάρουμε αν επαναλάβουμε την μέτρηση;

Υποδείξεις

A. Η πιθανότητα προκύπτει 0.13 ($0.2^2+0.3^2$).

Άσκηση 1

B. Ποια είναι η μέση τιμή και η τυπική απόκλιση της ενέργειας την t=0;

C . Βρείτε την |ψ(t)>. Παραμένουν οι απαντήσεις στα A και B ίδιες για t>0;

D . Καποια στιγμή μετράμε την ενέργεια και βρίσκουμε $16\mathcal{E}$. Ποια είναι η κατάσταση του συστήματος μετά την μέτρηση; Ποια τιμή θα πάρουμε αν επαναλάβουμε την μέτρηση;

Υποδείξεις

B. Οι πιθανότητες είναι: $P_1 = 0.04,\ P_2 = 0.09,\ P_3 = 0.16,\ P_4 = 0.71$

Έτσι βρίσκουμε: $\langle E \rangle = 13.2\mathcal{E} \quad \langle E^2 \rangle = 196\mathcal{E}^2 \quad \sigma_E = 4.67\mathcal{E}$

C. Έχουμε: $|\psi(t)\rangle = 0.2e^{-i\mathcal{E}t/\hbar}|1\rangle + 0.3e^{-i4\mathcal{E}t/\hbar}|2\rangle + 0.4e^{-i9\mathcal{E}t/\hbar}|3\rangle + 0.843e^{-i16\mathcal{E}t/\hbar}|4\rangle$

D. Μετά την μέτρηση: $|\psi\rangle = |4\rangle$

Άσκηση 2

Δείξτε ότι το μήκος (μέτρο) μιας κβαντικής κατάστασης δεν μεταβάλεται κατα την εξέλιξή της σύμφωνα με την εξίσωση Schrodinger.

Λύση

Έχουμε

$$\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \frac{d\langle\psi(t)|}{dt}|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt}$$

3h+

Αλλά

$$\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar}H(t)|\psi(t)\rangle \Longrightarrow \frac{d}{dt}\langle\psi(t)| = -\frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)|H^{\dagger}(t) = -\frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)|H(t)$$

$$\left.\begin{aligned}&\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar}H(t)|\psi(t)\rangle\\ &\frac{d}{dt}\langle\psi(t)| = -\frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)|H^{\dagger}(t) = -\frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)|H(t)\end{aligned}\right\} \Longrightarrow \left\{\begin{aligned}&\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \frac{d\langle\psi(t)|}{dt}|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt}\\ &= \left[-\frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)|H(t)\right]|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|\left[\frac{1}{i\hbar}H(t)|\psi(t)\rangle\right] = 0\end{aligned}\right.$$