נתונה מערכת שלושה אתרים על טבעת $|1\rangle=\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}|2\rangle=\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix},|3\rangle=\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}$.

הדינמיקה של המערכת מתוארת ע"י ההמילטוניאן: $H=\epsilon\widehat{D}+\epsilon\widehat{D}^\dagger$.

כך שאופרטורי ההזזות מוגדרים $\widehat{D}|i\rangle=|i-1\rangle,\widehat{D}^\dagger|i\rangle=|i+1\rangle$.

אופרטור המיקום מוגדר כ $\widehat{x}|i\rangle=i|i\rangle$.

א.ייצג את אופרטורי ההזזה ע"י מטריצה והראה כי אחד הוא צמוד הרמיטי של השני

ב. ייצג את אופרטור המיקום ע"י מטריצה. מהם הוקטורים והערכים העצמיים

ג. מהם הוקטורים והערכים העצמיים של ההמילטוניאן ,הצג את משוואת התנועה עבור המצבים העצמיים.

ד. מכינים את החלקיק בזמן 0 במצב $|3\rangle$ מהו מצב המערכת בזמן כלשהו?

ה. מה הסיכוי למצוא את החלקיק באתר 1 אחרי זמן כלשהו?

ו. מצא את המצבים העצמיים עבור מערכת עם אינסוף אתרים (גבול הרצף)עבור ההמילטוניאן הזה

ז. מהו יחס החילוף $[D,x]$.

<u>תשובה</u>

ב. נתחיל באופרטור המיקום - $\hat{x}$, אופרטור זה הוא גודל מדיד, ולכן הוא מחוייב להיות הרמיטי. התכונה שאנחנו רוצים מאופרטור זה הוא שהוא יבצע את הפעולה הבאה - $\langle i|\hat{x}|i\rangle = i$. כעת אנחנו צריכים לבחור בסיס לפיו נתאר את המיקום של החלקיק. מכיוון שאנו במרחב בעל מיקום בדיד ניתן לייצג את המיקומים על ידי וקטורים בצורה הבאה

$$|1\rangle=\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}\ ,\ |2\rangle=\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}\ ,\ |3\rangle=\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}$$

הבסיס שבחרנו לייצג את המערכת מבוסס על המיקום של החלקיק. על מנת למצוא את הערכים העצמיים של גודל מדיד כלשהו אנחנו פותרים את משוואת הערכים העצמיים לאותו האופרטור - $\hat{x}\,|i\rangle = i\,|i\rangle$. בצורה של וקטורים ומטריצות אנחנו מחפשים

$$\hat{X}\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}=1\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}\ ,\ \hat{X}\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}=2\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}\ ,\ \hat{X}\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}=3\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}$$

כאשר $\hat{X}$ היא היצוג של האופרטור $\hat{x}$ כמטריצה 3×3. המטריצה שמבצעת את הפעולה הנ"ל היא

$$\hat{X}=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&2&0\\0&0&3\end{pmatrix}$$

האופרטור $\hat{x}$ הוא כאמור הרמיטי, וזה מתבטא בכך שהמטריצה שמייצגת אותו היא מטריצה הרמיטית

$$\hat{X}^\dagger=\hat{X}$$

א) אופרטור ההזזה$\hat{D}$ צריך לבצע את הפעולה הבאה:

$$\hat{D}\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}\ ,\ \hat{D}\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}\ ,\ \hat{D}\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}$$

המטריצה שמבצעת פעולה זו היא

$$\hat{D} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

שימו לב שזו אינה מטריצה הרמיטית -

$$\hat{D}^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \hat{D} \neq \hat{D}^\dagger$$

ואכן $\hat{D}^\dagger$ מבצעת את הפעולה ההפוכה ל $\hat{D}$ -

$$\hat{D}^\dagger \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} , \ \hat{D}^\dagger \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} , \ \hat{D}^\dagger \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

ג) בעוד שהאופרטור $\hat{D}$ אינו הרמיטי, ההמילטוניאן המוגדר על ידי $\hat{H} = \epsilon\hat{D} + \epsilon\hat{D}^\dagger$ הוא כן הרמיטי:

$$\hat{H} = \epsilon \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \hat{H} = \hat{H}^\dagger = \left(\hat{H}^*\right)^T$$

ולכן האופרטור $\hat{H}$ הוא גודל מדיד. מכיון שאנחנו הגדרנו אותו בתור ההמילטוניאן של המערכת אנו זוכרים שהערכים העצמיים של אופרטור מרכיבים את ספקטרום האנרגיה של המערכת.

$$\hat{H}\psi = \begin{pmatrix} 0 & \epsilon & \epsilon \\ \epsilon & 0 & \epsilon \\ \epsilon & \epsilon & 0 \end{pmatrix} \psi = E\psi$$

הערכים העצמיים למטריצה זו הם: $E_{1,2} = -\epsilon \ , \ E_3 = 2\epsilon$

הוקטורים העצמיים שאנחנו מקבלים הם:

$$\psi_1 = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} , \ \psi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} , \ \psi_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

אנו שמים לב ששני הוקטורים העצמיים הראשונים אינם אורתוגונליים זה לזה (אבל כן בלתי תלויים זה בזה) – מכיון שהם שייכים לאותו ערך עצמי יוצא שהם לא אורתוגונליים. אבל שני וקטורים אלו כן אורתוגונליים לוקטור העצמי השלישי – כמחוייב מתוך תכונת ההרמיטיות של האופרטור $\hat{H}$. אנחנו יכולים למצוא וקטור אורתוגונלי לאחד מהוקטורים העצמיים הראשונים, כך שנקבל סט וקטורים עצמיים בלתי תלויים ואורתוגונליים, על ידי חישוב Vector rejection -

$$\psi_2' = \psi_2 - \frac{\psi_2 \cdot \psi 1}{\psi 1 \cdot \psi_1} \psi 1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ -1 \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

ולכן ניקח את הסט האורתונורמלי:

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} , \ \psi_2' = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ -1 \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} , \ \psi_3 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

כבסיס.

** שימו לב שהערך העצמי של ψ_2' זהה ל ψ_2, מעתה נכתוב את ψ_2' כ ψ_2 (ונשכח מ ψ_2 המקורי).

משוואת התנועה עבור המצבים העצמיים (האנרגטיים) היא :

$$\hat{H}\left|\psi\right\rangle = E\left|\psi\right\rangle \ , \ \left|\psi\right\rangle = \sum_{n=1}^{3} c_n\psi_n = \sum_{n=1}^{3} c_n\left|\psi_n\right\rangle$$

$$\left|\psi_1\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}-1\\0\\1\end{pmatrix} \ , \ \left|\psi_2\right\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}\begin{pmatrix}\frac{1}{2}\\-1\\\frac{1}{2}\end{pmatrix} \ , \ \left|\psi_3\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix}1\\1\\1\end{pmatrix}$$

$$E_{1,2} = -\epsilon \ , \ E_3 = 2\epsilon$$

ד) על מנת לחשב את השתנות של מצב כלשהו בזמן עלינו לבטא אותו כצירוף ליניארי של הוקטורים העצמיים של ההמילטוניאן:

$$\left|3\right\rangle = \begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix} = \sum_{n=1}^{3} c_n\left|\psi_n\right\rangle = c_1\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}-1\\0\\1\end{pmatrix} + c_2\sqrt{\frac{2}{3}}\begin{pmatrix}\frac{1}{2}\\-1\\\frac{1}{2}\end{pmatrix} + c_3\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix}1\\1\\1\end{pmatrix}$$

ניתן להציג בעיה זו בצורה

$$\begin{bmatrix}\frac{-1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{3}}\\ 0 & -\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{3}}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}c_1\\c_2\\c_3\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}$$

שנותן לנו $c_1 = 1/\sqrt{2},\ c_2 = 1/\sqrt{6},\ c_3 = 1/\sqrt{3}$

כך שהתפתחות מצב $\left|3\right\rangle$ בזמן ניתנת לנו על ידי:

$$\left|3(t)\right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}\left|\psi_1\right\rangle e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} + \frac{1}{\sqrt{6}}\left|\psi_2\right\rangle e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t} + \frac{1}{\sqrt{3}}\left|\psi_3\right\rangle e^{-i\frac{E_3}{\hbar}t}$$

$$\left|3(t)\right\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\left|\psi_1\right\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}\left|\psi_2\right\rangle\right)e^{-i\frac{-\epsilon}{\hbar}t} + \frac{1}{\sqrt{3}}\left|\psi_3\right\rangle e^{-i\frac{2\epsilon}{\hbar}t}$$

ה) על מנת לדעת מה הסיכוי למצוא את החלקיק $\left|3(t)\right\rangle$ במצב $\left|1\right\rangle$, עלינו לעשות הטלה של מצב $\left|1\right\rangle$ על מצב $\left|3(t)\right\rangle$:

$$\begin{aligned}\left\langle 1\right|\left.3(t)\right\rangle &= \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\left\langle 1\right|\left.\psi_1\right\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}\left\langle 1\right|\left.\psi_2\right\rangle\right)e^{-i\frac{-\epsilon}{\hbar}t} + \frac{1}{\sqrt{3}}\left\langle 1\right|\left.\psi_3\right\rangle e^{-i\frac{2\epsilon}{\hbar}t}\\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}\right) + \frac{1}{\sqrt{6}}\left(\frac{1}{\sqrt{6}}\right)\right)e^{-i\frac{-\epsilon}{\hbar}t} + \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)e^{-i\frac{2\epsilon}{\hbar}t}\\ &= -\frac{1}{3}e^{-i\frac{-\epsilon}{\hbar}t} + \frac{1}{3}e^{-i\frac{2\epsilon}{\hbar}t}\end{aligned}$$

ההסתברות למצוא את החלקיק $|3(t)\rangle$ במצב $|1\rangle$ הוא **ריבוע** של ההיטל:

$$P = |\langle 1|3(t)\rangle|^2 = \frac{2}{9} - \frac{1}{9}e^{3i\frac{\epsilon}{\hbar}t} - \frac{1}{9}e^{-3i\frac{\epsilon}{\hbar}t} = \frac{2}{9}\left(1-\cos\left(3\frac{\epsilon}{\hbar}t\right)\right)$$

ו) נסכל כעת על מערכת עם N אתרים, ונחפש מצב עצמי למערכת. נשים לב שמצב עצמי של $\hat{D}$ ו- $\hat{D}^\dagger$ הם גם מצבים של $\hat{H}$.

אנו עדיין מניחים ש$\hat{D}$ ו- $\hat{D}^\dagger$ אופרטורי הזזה שמקיימים $\hat{D}^\dagger|n\rangle = |n+1\rangle$ ו $\hat{D}^\dagger|N\rangle = |1\rangle$.

ונניח כי $|\varphi_j\rangle$ מצב עצמי של $\hat{D}^\dagger$ כלומר $\hat{D}^\dagger|\varphi_j\rangle = \lambda_j|\varphi_j\rangle$. נרשום את המצב בעצמי בבסיס המיקום $|\varphi_j\rangle = \sum_{n=1}^{N} c_n|n\rangle$. נפעיל את האופרטור $\hat{D}^\dagger$ על המצב $|\varphi_j\rangle$ ונקבל :

$$\hat{D}^\dagger|\varphi_j\rangle = \lambda_j|\varphi_j\rangle = \lambda_j \sum_{n=1}^{N} c_n|n\rangle$$

$$\hat{D}^\dagger|\varphi_j\rangle = \hat{D}^\dagger \sum_{n=1}^{N} c_n|n\rangle = \sum_{n=1}^{N} c_n|n+1\rangle$$

משני ביטויים אלו נקבל את השוויון:

$$c_1|2\rangle + c_2|3\rangle + \cdots = \sum_{n=1}^{N} c_n|n+1\rangle = \lambda_j \sum_{n=1}^{N} c_n|n\rangle = \lambda_j(c_1|1\rangle + c_2|2\rangle + \cdots)$$

נשווה מקדמים ונקבל את סט המשוואות:

$$\begin{cases} \lambda_j c_2 = c_1 \\ \lambda_j c_3 = c_2 \\ \dots \\ \lambda_j c_N = c_{N-1} \\ \lambda_j c_1 = c_N \end{cases}$$

נציב את המשוואות אחת בשניה (כל פעם את המקדם c_i הבא) ונקבל $\lambda_j^N c_N = c_N$ סך הכל $\lambda_j^N = 1$

והשורשים הN של 1 יהיו : $\lambda_j = e^{i\frac{2\pi}{N}j}$ עבור *j=1,2...N*.

מכאן נקבל את המצב :

$$|\varphi_j\rangle = \sum_{n=1}^{N} c_1 e^{i\frac{2\pi j}{N}n}|n\rangle$$

ננרמל את המצב ונקבל $c_1 = \frac{1}{\sqrt{N}}$ כלומר $|\varphi_j\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{n=1}^{N} e^{i\frac{2\pi j}{N}n}|n\rangle$.

בגבול הרצף : $N \to L\, ; n \to x\, ; \frac{2\pi j}{N} \to k$. ובעצם נקבל את המצב העצמי הk של טבעת

$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}}\sum_{x=0}^{L} e^{ikx}|x\rangle$ או לאחר הטלה על *x* נקבל את המצב שהכרנו

$\langle x|k\rangle = \varphi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{L}}e^{ikx}$.

ז) נסתכל על יחס החילוף $[\hat{D},\hat{x}]$:

$$\begin{aligned}[\hat{D},\hat{x}]|n\rangle &= (\hat{D}\hat{x} - \hat{x}\hat{D})|n\rangle = \hat{D}n|n\rangle - \hat{x}|n-1\rangle = n\hat{D}|n\rangle - (n-1)|n-1\rangle \\ &= n|n-1\rangle - (n-1)|n-1\rangle = |n-1\rangle = \hat{D}|n\rangle\end{aligned}$$

קיבלנו ש $[\hat{D},\hat{x}] = \hat{D}$.