Domača naloga za kvantno mehaniko 1:

Harmonski oscilator 3

(Martin Knapič, 14.5.2003)

Naloga:

Nabit delec je v osnovnem stanju enodimenzionalnega harmonskega oscilatorja. Ob času t=0 vklopimo dodatno homogeno in od časa neodvisno električno polje. Izračunaj časovni razvoj valovne funkcije in verjetnostno gostoto v odvisnosti od časa.

Podatki:

m=masa delca, e=naboj delca, k='konstanta vzmeti', E=jakost električnega polja.

Oznake:

$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$

$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{k}}$ (amplituda klasičnega nihanja, pri kateri je energija enaka razmiku med kvantnimi energijskimi nivoji)

$p_0 = m \cdot v_0 = m \cdot \omega \cdot x_0$ (amplituda gibalne količine, ki ustreza sinusnemu nihanju z amplitudo x_0 in frekvenco ω)

1.Kaj moramo vedeti od prej?

1.1.Novi potencial je spet harmonski (z enakim k) v novih koordinatah: $\tilde{x} = x - \frac{E \cdot e}{k}$.
V resnici ima novi potencial še konstanto, ki pa jo lahko izpustimo.

Razlaga:Operator H+C ima enake lastne funkcije kot H, le lastne vrednosti so večje za C in s tem se časovni deli stacionarnih rešitev pomnožijo z exp(-$i\frac{C}{\hbar}t$). Ko razvijamo poljubno začetno stanje $\psi(x,0)$ po lastnih funkcijah H+C, dobimo enake koeficiente in enako časovno odvisnost kot pri H, le da je pomnožena z exp(- $i\frac{C}{\hbar}t$).

Absolutna vrednost valovne funkcije je enaka, kot če ne bi bilo konstante v potencialu, zato je tudi verjetnostna gostota enaka.

1.2. Začetna valovna funkcija $\left|0\right\rangle$ je določena z lastnostjo $\tilde{a}\left|0\right\rangle = z_0\left|0\right\rangle$, kjer je

$$z_0 = -\frac{e \cdot E}{\sqrt{2k} \cdot x_0}$$

Do tega smo prišli tako, da smo v enačbi a$\left|0\right\rangle$ =0 izrazili a z $\tilde{a}$.

(Količine, označene z vijugo so definirane v novih koordinatah.)

1.3.Če je začetno stanje (ob t=0) lastna funkcija za $\tilde{a}$ z lastno vrednostjo z$\in$C (označimo $\left|z\right\rangle$), se čez čas t razvije v exp $(-\frac{i\omega t}{2})\cdot\left|z\cdot\exp(-i\omega t)\right\rangle$.

(To je s faktorjem exp($-i\frac{\omega t}{2}$) pomnožena lastna funkcija operatorja $\tilde{a}$, ki pripada lastni vrednosti $z\cdot\exp(-i\omega t)$.)

2.Reševanje:

2.1.Iskanje koordinatne reprezentacije lastnih funkcij operatorja $\tilde{a}$:

Enačbo $\tilde{a}\left|z\right\rangle = z\cdot\left|z\right\rangle$ lahko spremenimo v diferencialno enačbo: namesto $\left|z\right\rangle$ pišemo $\psi_z(\tilde{x})$, $\tilde{a}$ pa nadomestimo z njegovo definicijo:

$$\tilde{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\frac{\tilde{x}}{x_0} + i\frac{\tilde{p}}{p_0}\right] \qquad (\tilde{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\tilde{x}})$$

Dobimo homogeno linearno enačbo 1. reda:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\frac{x\cdot\psi_z(x)}{x_0} + i\frac{-i\hbar\frac{\partial\psi_z}{\partial x}(x)}{p_0}\right] = z\cdot\psi_z(x)$$

Od tu naprej izpuščam vijuge, ker bomo stalno v novem koordinatnem sistemu.

Enačbo rešujemo z ločitvijo spremenjlivk:

$$\frac{\hbar}{p_0}\cdot\frac{d\psi_z}{dx} = (\sqrt{2}z - \frac{x}{x_0})\cdot\psi_z$$

$$\int\frac{d\psi_z}{\psi_z} = \int\frac{p_0}{\hbar}(\sqrt{2}z - \frac{x}{x_0})\cdot dx$$

$$\ln(\psi_z(x)) = \frac{p_0}{\hbar}(\sqrt{2}zx - \frac{x^2}{2x_0}) + \ln(C(z))$$

C(z) je sicer neodvisna od x, vendar je odvisna od z. Pri vajah smo na to pozabili, zato smo imeli težave pri razlagi rezultata.

$$\psi_z(x) = C(z) \cdot \exp\left[\frac{p_0}{\hbar}(\sqrt{2}zx - \frac{x^2}{2x_0})\right]$$

2.2. Točki 1.2 in 1.3 prepišemo v koordinatni zapis in ju združimo:

$$\psi(x, t = 0) = \psi_{z_0}(x)$$

$$\psi_z(x,t) = \exp(-i\frac{\omega t}{2}) \cdot \psi_{z \cdot \exp(-i\omega t)}(x,0)$$

Sledi:

$$\psi(x,t) = \psi_{z_0}(x,t) = \exp(-i\frac{\omega t}{2}) \cdot \psi_{z_0 \cdot \exp(-i\omega t)}(x,0) =$$

$$\exp(-i\frac{\omega t}{2}) \cdot C(z_0 \cdot \exp(-i\omega t)) \cdot \exp\left[\frac{p_0}{\hbar}(\sqrt{2}z_0 \cdot \exp(-i\omega t) \cdot x - \frac{x^2}{2x_0})\right]$$

2.3. Normalizacija

Drugi faktor v zadnjem izrazu je odvisen le od časa, zato ga označimo z D(t). Določiti ga moramo tako, da bo $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = 1$ za vsak t:

$$\int_{-\infty}^{\infty} 1 \cdot |D(t)|^2 \cdot \left|\exp\left[\frac{p_0}{\hbar}(\sqrt{2}z_0 \cdot (\cos(\omega t) - i\sin(\omega t)) \cdot x - \frac{x^2}{2x_0})\right]\right|^2 dx = 1$$

Imaginarni člen $-i \cdot \sin(\omega t)$ lahko prečrtamo, ker je $|\exp(a + i \cdot b)| = |\exp(a)|$
V eksponentu ostane realno število, zato lahko tudi absolutno vrednost izpustimo:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |D(t)|^2 \cdot \exp\left[-\frac{p_0}{\hbar x_0} \cdot (x^2 - \sqrt{2} \cdot 2 \cdot x_0 z_0 \cos(\omega t) x)\right] dx = 1$$

Funkcijo pod integralom (krajevni del) bomo spravili v obliko exp($-x^2$), ki jo znamo integrirati po celi realni osi (integral je $\sqrt{\pi}$):

$$\int_{-\infty}^{\infty}|D(t)|^2\cdot\exp\left[-\frac{p_0}{\hbar x_0}\cdot((x-\sqrt{2}\cdot x_0 z_0\cos(\omega t))^2-2x_0^2z_0^2\cos^2(\omega t))\right]dx=1 \qquad (*)$$

Uvedemo novo spremenjivko: v=x-$\sqrt{2}x_0 z_0\cos(\omega t)$, dv=dx

$$|D(t)|^2\cdot\exp\left[\frac{2p_0x_0z_0^2}{\hbar}\cos^2(\omega t)\right]\cdot\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[-\frac{p_0}{\hbar x_0}v^2\right]dv=1$$

Uvedemo novo spremenljivko: u=$\sqrt{\frac{p_0}{\hbar x_0}}$ v ,du=$\sqrt{\frac{p_0}{\hbar x_0}}$ dv

$$|D(t)|^2\cdot\exp\left[\frac{2p_0x_0z_0^2}{\hbar}\cos^2(\omega t)\right]\cdot\int_{-\infty}^{\infty}\exp(-u^2)\cdot du\cdot\sqrt{\frac{\hbar x_0}{p_0}}=1$$

$$|D(t)|=\sqrt[4]{\frac{p_0}{\pi\hbar x_0}}\cdot\exp\left[-\frac{p_0x_0z_0^2}{\hbar}\cos^2(\omega t)\right]$$

Sedaj poznamo absolutno vrednost D(t) ne pa polarnega kota. Tega ne znam določiti. Verjetno ni dober vsak $\varphi(t)$, ker potem rešitev ne zadošča nujno Schrödingerjevi enačbi.

Na srečo za izračun povprečnih vrednosti kateregakoli operatorja $\hat{A}$, ki deluje le na krajevni del valovne funkcije (tako da je $\hat{A}$ X(x)T(t)=T(t) $\hat{A}$ X(x)), $\varphi(t)$ sploh ni pomemben. Operatorji x,p,H ter njihove potence spadajo v to kategorijo. Prav tako lahko izračunamo verjetnostno gostoto in verjetnostni tok ob vsakem času in kraju.

2.4. Izračun verjetnostne gostote v odvisnosti od časa:

Da ne ponavljamo istih korakov, začnemo pri enačbi (*), ki ima pod integralom verjetnostno gostoto in vstavimo pravkar izračunano vrednost $|D(t)|$:

$$\rho(x,t)=\sqrt{\frac{p_0}{\pi\hbar x_0}}\cdot\exp\left[-\frac{2p_0x_0z_0^2}{\hbar}\cos^2(\omega t)\right]$$

$$\bullet\exp\left[-\frac{p_0}{\hbar x_0}(x-\sqrt{2}x_0z_0\cos(\omega t))^2\right]\cdot\exp\left[\frac{2p_0x_0z_0^2}{\hbar}\cos^2(\omega t)\right]$$

Krajšamo in vstavimo z_0 ter dobimo:

$$\rho(x,t)=\sqrt{\frac{p_0}{\pi\hbar x_0}}\cdot\exp\left[-\frac{p_0}{\hbar x_0}(x+\frac{Ee}{k}\cdot\cos(\omega t))^2\right]$$

To je Gaussova krivulja z nedoločenostjo $\sigma=\sqrt{\frac{\hbar x_0}{2p_0}}$, katere vrh sinusno niha z amplitudo $\frac{Ee}{k}$, ki je enaka premiku ravnovesne lege. V okviru klasične mehanike bi pričakovali podoben rezultat, le Gaussovo funkcijo bi nadomestila funkcija delta. Če σ izrazimo z osnovnimi podatki harmonskega oscilatorja ugotovimo, da je

$\sigma \propto \frac{1}{\sqrt[4]{k \cdot m}}$. Ko produkt $k \cdot m$ narašča, se Gaussova funkcija približuje delti in kvantni rezultat preide v klasičnega.