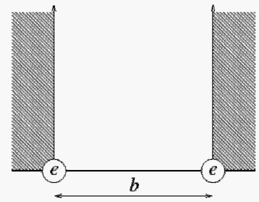
/Jernej Mazej, 15. 9. 2008/

<u>**Naloga:**</u> **H a r m o n s k i   o s c i l a t o r   II**



Potencial, ki ga čuti elektron, lahko opišemo z neskončno potencialno jamo s širino b, na robovih katere sta pritrjena delca z nabojem e (glej skico). Če je naboj e negativen in je širina potencialne jame dovolj velika, je potencial, ki ga elektron čuti, v nizkoenergijskih stanjih sistema v prvem približku harmonski.

1. Določi lastne energije elektrona v približku harmonskega potenciala.
2. Če je širina potencialne jame premajhna, postane pomemben tudi anharmonski del potenciala. Oceni, najmanj kolikšen mora biti b, da je harmonski približek upravičen za osnovno stanje sistema. Harmonski približek je veljaven, če je pričakovana vrednost anharmonskega dela potenciala v osnovnem stanju sistema bistveno manjša od razmika med energijskimi nivoji. Upoštevaj, da je pri majhnih odstopanjih od harmonskega potenciala pomemben samo najnižji neharmonski člen v razvoju potenciala v Taylorjevo vrsto.
3. Elektron je v osnovnem stanju sistema. Ob $t = 0$ v trenutku spremenimo naboja na robovih potencialne jame za faktor α^2 ($e \to \alpha^2 e$). S kolikšno verjetnostjo najdemo elektron v osnovnem stanju novega sistema?
4. Določi verjetnost, da je po spremembi elektron v n-tem vzbujenem stanju novega sistema. Namig: Izrazi stari anihilacijski operator kot linearno kombinacijo novega anihilacijskega in kreacijskega operatorja ter poišči rekurzijsko povezavo med koeficienti v razvoju začetne valovne funkcije po lastnih stanjih novega potenciala.

| 1.> Da bi poiskali lastne energije obravnavanega sistema v približku harmonskega oscilatorja, moramo potencial razviti v potenčno vrsto po x ter zanemariti člene, višje od kvadratičnega (harmonskega). Potencial vsakega od točkastih nabojev na robu jame pada z razdaljo kot:

$$\varphi(r) = -\frac{e}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{1}{r}$$

V našem enodimenzionalnem primeru naj se elektron nahaja nekje na osi x, negativna naboja e pa naj bosta pritrjena pri $x = \pm b/2$. Skupni potencial, ki ga čuti elektron, lahko tedaj zapišemo kot:

$$V(x) = -\frac{e}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\left[\frac{1}{x+b/2}+\frac{1}{b/2-x}\right] = -\frac{e}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{1}{b/2}\left[\frac{1}{1+2x/b}+\frac{1}{1-2x/b}\right] =$$

$$= -\frac{e}{2\pi\varepsilon_0 b}\cdot\left[\frac{1-2x/b+1+2x/b}{(1+2x/b)\cdot(1-2x/b)}\right] = -\frac{e}{\pi\varepsilon_0 b}\cdot\left[\frac{1}{1-(2x/b)^2}\right] =$$

$$= -\frac{e}{\pi\varepsilon_0 b}\cdot\left[1+(2x/b)^2+(2x/b)^4+\ldots\right] =$$

$$= -\frac{e}{\pi\varepsilon_0 b} - \frac{e}{\pi\varepsilon_0 b}\cdot(2/b)^2 x^2 - \frac{e}{\pi\varepsilon_0 b}\cdot(2/b)^4 x^4 + \ldots$$

$$= \underbrace{\frac{|e|}{\pi\varepsilon_0 b}}_{\equiv V_0} + \underbrace{\frac{4|e|}{\pi\varepsilon_0 b^3}}_{\equiv \frac{1}{2}k}\cdot x^2 + \underbrace{\frac{16|e|}{\pi\varepsilon_0 b^5}}_{\equiv \frac{1}{4}C}\cdot x^4 + \ldots = V_0 + \tfrac{1}{2}kx^2 + \tfrac{1}{4}Cx^4 + \ldots$$

V dobljenem izrazu upoštevamo le prva dva člena in potencial vstavimo v Schrödingerjevo enačbo:

$$\left[\frac{p^2}{2m}+\tfrac{1}{2}kx^2+V_0\right]\psi = E\psi \quad\Leftrightarrow\quad \left[\frac{p^2}{2m}+\tfrac{1}{2}kx^2\right]\psi = (E-V_0)\psi$$

Desna enačba je po obliki identična enačbi harmonskega oscilatorja, katerega lastne energije ($E_n^{(HO)}$) so dobro znane; razlika je le, da na desni strani namesto E nastopa $E - V_0$. Iz analogije takoj izpeljemo:

$$(E_n - V_0) \equiv E_n^{(HO)} = (n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega \quad\Rightarrow\quad E_n = (n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega + V_0 \underset{V_0=\frac{1}{8}b^2\cdot k=\frac{1}{8}b^2 m\omega^2}{\underset{\uparrow}{=}} (n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega + \tfrac{1}{8}mb^2\omega^2$$

Energijski spekter je v našem približku takšen kot pri harmonskem oscilatorju, le za V_0 je dvignjen.

2. Približek harmonskega oscilatorja je veljaven, kadar je pričakovana vrednost anharmonskega dela potenciala (slednji je v prvem približku – pri dovolj široki jami – enak ¼ Cx^4) dosti manjša od razmika med energijskimi nivoji. Za izračun te pričakovane vrednost je treba izvrednotiti $\langle 0|x^4|0\rangle$, kar bi lahko zaradi enostavne oblike osnovnega stanja kaj hitro storili tudi z direktnim integriranjem. Uberimo pa raje manj direktno, a pregledno pot prek kreacijskih in anihilacijskih operatorjev a in $a^\dagger$. Neposredno iz njune definicije izrazimo s tema operatorjema operator lege x (in od tod x^4) takole:

$$x = \sqrt{\tfrac{\hbar}{2\omega m}}(a + a^\dagger) = \frac{x_0}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger)$$

$$x^4 = \left[\frac{x_0}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger)\right]^4 = \frac{x_0^4}{4}\left[a\,a + a\,a^\dagger + a^\dagger a + a^\dagger a^\dagger\right]^2 =$$

$$= \frac{x_0^4}{4}\left[\begin{array}{l} a\,a\,a\,a + a\,a\,a\,a^\dagger + a\,a\,a^\dagger a + a\,a\,a^\dagger a^\dagger + a\,a^\dagger a\,a + a\,a^\dagger a\,a^\dagger + a\,a^\dagger a^\dagger a + a\,a^\dagger a^\dagger a^\dagger + \\ + a^\dagger a\,a\,a + a^\dagger a\,a\,a^\dagger + a^\dagger a\,a^\dagger a + a^\dagger a\,a^\dagger a^\dagger + a^\dagger a^\dagger a\,a + a^\dagger a^\dagger a\,a^\dagger + a^\dagger a^\dagger a^\dagger a + a^\dagger a^\dagger a^\dagger a^\dagger \end{array}\right]$$

Dobili smo precej dolg izraz, vendar bomo kmalu pokazali, da lahko pri računanju $\langle 0|x^4|0\rangle$ večino členov odmislimo. Spomnimo se namreč, kaj naredita operatorja a in $a^\dagger$ na n-tem lastnem stanju:

$$a\psi_n = \sqrt{n}\cdot\psi_{n-1} \quad \text{oziroma:} \quad a^\dagger\psi_n = \sqrt{n+1}\cdot\psi_{n+1}$$

S tem v mislih najprej uvidimo, da členi, pri katerih je na zadnjem mestu anihilacijski operator, dajo 0. Ker namreč pod osnovnim nivojem ni stanj, je $a\psi_0 \equiv 0$, iz nič pa nato z nobenim zaporedjem operatorjev a in $a^\dagger$ ne moremo več pričarati valovne funkcije.
Pri preostalih osmih lahko pozabimo tudi na člen, v katerem a nastopa večkrat kot $a^\dagger$. Anihilacijski operator namreč zniža indeks stanja za ena, kreacijski pa ga za toliko dvigne; kadar se potemtakem a pojavi večkrat od $a^\dagger$, bi v končni bilanci zopet pristali pod osnovnim nivojem, kjer pa stanj ni.
Od preostalih členov (tistih, pri katerih je na četrtem mestu $a^\dagger$ in v njih a nastopa kvečjemu tolikokrat kot $a^\dagger$) prav tako ne bomo ohranili vseh. Pri računanju pričakovane vrednosti bi nas namreč privedli do izraza oblike:

$$\langle 0|x^4|0\rangle = \frac{x_0^4}{4}\left[\,/\!\ldots\ldots/\cdot\underbrace{\langle 0|0\rangle}_{1} + /\!\ldots\ldots/\cdot\underbrace{\langle 0|1\rangle}_{0} + /\!\ldots\ldots/\cdot\underbrace{\langle 0|2\rangle}_{0} + /\!\ldots\ldots/\cdot\underbrace{\langle 0|4\rangle}_{0}\right],$$

v katerem bi zaradi ortogonalnosti lastnih stanj preživeli le členi z $\langle 0|0\rangle$. Zato bomo obdržali le tiste produkte, v katerih se oba operatorja pojavita enakokrat (dvakrat), saj edinole ti ne spremenijo indeksa prvotnemu stanju.
V končni fazi nam nemara kaj prinesejo le produkti, ki imajo na zadnjem mestu $a^\dagger$ in vsebujejo dva kreacijska ter dva anihilacijska operatorja. V računanje se zato vržemo le s tremi členi in dobimo:

$$\langle 0|x^4|0\rangle = \frac{x_0^4}{4}\cdot\langle 0|\Big[\underbrace{a\,\underbrace{a\,\underbrace{a^\dagger\,\underbrace{a^\dagger|0\rangle}_{\sqrt{1}\cdot|1\rangle}}_{\sqrt{2}\cdot\sqrt{1}\cdot|2\rangle}}_{\sqrt{2}\cdot\sqrt{2}\cdot\sqrt{1}\cdot|1\rangle}}_{\sqrt{1}\cdot\sqrt{2}\cdot\sqrt{2}\cdot\sqrt{1}\cdot|0\rangle} + \underbrace{a\,a^\dagger a\,a^\dagger|0\rangle}_{\sqrt{1}\cdot\sqrt{1}\cdot\sqrt{1}\cdot\sqrt{1}\cdot|0\rangle} + a^\dagger\,\underbrace{a\,\underbrace{a\,a^\dagger|0\rangle}_{\sqrt{1}\cdot\sqrt{1}\cdot|0\rangle}}_{0}\Big]$$

$$\langle 0|x^4|0\rangle = \frac{3x_0^4}{4}$$

Če želimo, da je pričakovana vrednost anharmonskega dela potenciala majhna v primerjavi z razmikom med nivoji ($\hbar\omega$), torej:

$$\langle 0|H_{anharm.}|0\rangle \approx \langle 0|\tfrac{1}{4}Cx^4|0\rangle = \tfrac{1}{4}C\cdot\tfrac{3}{4}x_0^4 << \hbar\omega \quad\Rightarrow\quad \tfrac{16|e|}{\pi\varepsilon_0 b^5}\cdot\tfrac{3}{4}x_0^4 << \hbar\omega,$$

tedaj mora veljati:

$$b^5 >> \tfrac{12|e|}{\pi\varepsilon_0\hbar\omega}x_0^4 = \tfrac{12|e|}{\pi\varepsilon_0\hbar\omega}\left(\tfrac{\hbar}{\omega m}\right)^2$$

Pogoj za upravičenost harmonskega približka se torej glasi:

$$b >> \left(\frac{12\hbar|e|}{\pi\varepsilon_0 m^2\omega^3}\right)^{1/5}$$

3. Za začetek se dogovorimo, da znamenje ~ označuje količino po spremembi naboja ($e \to \alpha^2 e \equiv \tilde{e}$). Osnovni stanji elektrona pred spremembo in po njej se izražata takole:

$$\psi_0(x) = (\sqrt{\pi}x_0)^{-1/2} \cdot e^{-\frac{1}{2}(x/x_0)^2}$$

$$\tilde{\psi}_0(x) = (\sqrt{\pi}\tilde{x}_0)^{-1/2} \cdot e^{-\frac{1}{2}(x/\tilde{x}_0)^2} \underset{\uparrow}{=} (\sqrt{\tfrac{\pi}{\alpha}}x_0)^{-1/2} \cdot e^{-\frac{1}{2}\alpha(x/x_0)^2}$$

$$\left.\begin{array}{l} \tilde{x}_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{\tilde{\omega}m}}; \quad \omega^2 \propto k \propto e; \\ \tilde{e} = \alpha^2 e \Rightarrow \tilde{\omega} = \alpha\omega \end{array}\right\} \Longrightarrow \tilde{x}_0 = \frac{1}{\sqrt{\alpha}} x_0$$

Verjetnost P, da po spremembi naboja najdemo sistem v novem osnovnem stanju, je enaka kvadratu koeficienta pred $\tilde{\psi}_0$ v razvoju stare funkcije po novih lastnih stanjih. Iskani koeficient (c_0) lahko dobimo kot vedno iz prekrivalnega integrala:

$$P = |c_0|^2$$

$$c_0 = \langle\tilde{\psi}_0 | \psi_0\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}_0(x)\psi_0(x)dx = (\sqrt{\tfrac{\pi}{\alpha}}x_0)^{-1/2} \cdot (\sqrt{\pi}x_0)^{-1/2} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}\alpha(x/x_0)^2} e^{-\frac{1}{2}(x/x_0)^2} dx$$

$$c_0 = \alpha^{1/4} \cdot (\sqrt{\pi}x_0)^{-1} \cdot \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\alpha+1}{2}(x/x_0)^2} d(\tfrac{\sqrt{\alpha+1}}{\sqrt{2}x_0}x)}_{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{\sqrt{2}x_0}{\sqrt{\alpha+1}} = \left[\frac{2\sqrt{\alpha}}{\alpha+1}\right]^{1/2}$$

Verjetnost, da najdemo po spremembi elektron v novem osnovnem stanju, je potemtakem:

$$P(\tilde{\psi} = \tilde{\psi}_0) = c_0^2 = \frac{2\sqrt{\alpha}}{\alpha+1}$$

4. Izhajajoč iz napotka v nalogi si najprej pripravimo izražavo starega anihilacijskega operatorja (a) kot linearno kombinacijo novega anihilacijskega ($\tilde{a}$) in kreacijskega operatorja ($\tilde{a}^\dagger$):

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\frac{x}{x_0} + x_0\frac{d}{dx}\right] = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\alpha^{-\frac{1}{2}}\frac{x}{\tilde{x}_0} + \alpha^{\frac{1}{2}}\tilde{x}_0\frac{d}{dx}\right] \underset{\uparrow}{=} \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\alpha^{-\frac{1}{2}} \cdot \tfrac{1}{2} \cdot \sqrt{2}\left[\tilde{a} + \tilde{a}^\dagger\right] + \alpha^{\frac{1}{2}} \cdot \tfrac{1}{2} \cdot \sqrt{2}\,\tfrac{1}{2}\left[\tilde{a} - \tilde{a}^\dagger\right]\right]$$

$$\left.\begin{array}{l} \tilde{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\frac{x}{\tilde{x}_0} + \tilde{x}_0\frac{d}{dx}\right] \\ \tilde{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\frac{x}{\tilde{x}_0} - \tilde{x}_0\frac{d}{dx}\right] \end{array}\right\} \pm \Longrightarrow \frac{x}{\tilde{x}_0} = \ldots, \quad \tilde{x}_0\frac{d}{dx} = \ldots$$

$$a = \tfrac{1}{2}\alpha^{-\frac{1}{2}} \cdot \left[\tilde{a} + \tilde{a}^\dagger\right] + \tfrac{1}{2}\alpha^{\frac{1}{2}} \cdot \left[\tilde{a} - \tilde{a}^\dagger\right] =$$

$$= \underbrace{\tfrac{1}{2}\left(\alpha^{-\frac{1}{2}} + \alpha^{\frac{1}{2}}\right)}_{\beta_1} \cdot \tilde{a} + \underbrace{\tfrac{1}{2}\left(\alpha^{-\frac{1}{2}} - \alpha^{\frac{1}{2}}\right)}_{\beta_2} \cdot \tilde{a}^\dagger$$

Z na novo uvedenima konstantama se torej stari anihilacijski operator na kratko zapiše kot:

$$a = \beta_1\tilde{a} + \beta_2\tilde{a}^\dagger$$

Sedaj pa je bržkone najenostavneje začeti iz (že v 2. delu nekajkrat uporabljene) enačbe:

$$a|\psi_0\rangle \equiv 0.$$

S pravkar dobljeno izražavo starega anihilacijskega operatorja se to prepiše v:

$$\left(\beta_1\tilde{a} + \beta_2\tilde{a}^\dagger\right)|\psi_0\rangle = 0$$

Če zdaj še staro osnovno stanje formalno zapišemo kot razvito po novih lastnih funkcijah, dobimo:

$$\left(\beta_1\tilde{a} + \beta_2\tilde{a}^\dagger\right)\sum_i c_i\tilde{\psi}_i = 0$$

Operatorja lahko zaradi linearnosti nesemo v vsoto:

$$\sum_i \left(c_i \beta_1 \tilde{a} \tilde{\psi}_i + c_i \beta_2 \tilde{a}^\dagger \tilde{\psi}_i \right) = 0$$

in ko si prikličemo v spomin, kako delujeta $\tilde{a}$ in $\tilde{a}^\dagger$ na lastna stanja, ostanemo končno z:

$$\sum_i \left(c_i \beta_1 \sqrt{i} \cdot \tilde{\psi}_{i-1} + c_i \beta_2 \sqrt{i+1} \cdot \tilde{\psi}_{i+1} \right) = 0$$

Poanta, na katero merimo, je ta, da so lastna stanja paroma ortogonalna; če naj bo vsota paroma ortogonalnih vektorjev identična nič, moramo zahtevati, da je vsota koeficientov pred slehernim izmed njih enaka 0. V duhu te zamisli poberemo skupaj koeficiente pred vsako od lastnih funkcij $\tilde{\psi}_i$:

$$\sum_{i=1}^{\infty} \left(c_{i+1} \beta_1 \sqrt{i+1} + c_{i-1} \beta_2 \sqrt{i} \right) \tilde{\psi}_i + c_1 \beta_1 \sqrt{1} \cdot \tilde{\psi}_0 = 0$$

Zaradi jasnosti smo $\tilde{\psi}_0$ zapisali ločeno. Iz členov znotraj oklepaja preberemo rekurzijsko zvezo med koeficienti v razvoju stare osnovne lastne funkcije po novih lastnih stanjih:

$$c_{i+1} \beta_1 \sqrt{i+1} + c_{i-1} \beta_2 \sqrt{i} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad c_{i+2} \beta_1 \sqrt{i+2} = -c_i \beta_2 \sqrt{i+1}$$

$$c_{i+2} = -\frac{\beta_2 \sqrt{i+1}}{\beta_1 \sqrt{i+2}} c_i$$

Izpeljana rekurzijska relacija povezuje člene dveh ločenih podzaporedij: zaporedja koeficientov z lihim indeksom ter zaporedja členov s sodim indeksom. Ker za izračun vsakega naslednjega koeficienta potrebujemo le enega njegovega predhodnika, bosta obe podzaporedji popolnoma določeni, če najdemo c_0 in c_1; prvega smo že izračunali v 3. razdelku, c_1 pa preberemo iz člena s $\tilde{\psi}_0$ v prejle zapisani vsoti:

$$c_1 \beta_1 \sqrt{1} \cdot \psi_0 = 0 \quad \overset{\beta_1 \neq 0}{\Rightarrow} \quad c_1 = 0$$

Ker je enak 0 prvi med njimi, so nič tudi vsi koeficienti z lihim indeksom. Pri sodih indeksih je stvar bolj zanimiva:

$$c_{i+2} = -\frac{\beta_2 \sqrt{i+1}}{\beta_1 \sqrt{i+2}} c_i$$

$$\Rightarrow \quad c_2 = \left(-\frac{\beta_2}{\beta_1} \right) \frac{\sqrt{2-1}}{\sqrt{2}} c_0, \quad c_4 = \left(-\frac{\beta_2}{\beta_1} \right) \frac{\sqrt{4-1}}{\sqrt{4}} c_2 = \left(\frac{\beta_2}{\beta_1} \right)^2 \frac{\sqrt{4-1}}{\sqrt{4}} \cdot \frac{\sqrt{2-1}}{\sqrt{2}} c_0$$

$$c_{2k} = \left(-\frac{\beta_2}{\beta_1} \right)^k \frac{\sqrt{2k-1}}{\sqrt{2k}} \cdot \frac{\sqrt{2k-3}}{\sqrt{2k-2}} \cdot \ldots \cdot \frac{\sqrt{4-1}}{\sqrt{4}} \cdot \frac{\sqrt{2-1}}{\sqrt{2}} c_0$$

$$c_{2k} = \left(-\frac{\beta_2}{\beta_1} \right)^k \frac{\sqrt{(2k-1)!!}}{\sqrt{(2k)!!}} \cdot c_0$$

Vstavimo $c_0 = \left[\frac{2\sqrt{\alpha}}{\alpha+1} \right]^{1/2}$ in razpišemo še na začetku razdelka vpeljani konstanti β_1 in β_2, pa dobimo:

$$c_{2k} = \left[-\frac{\frac{1}{2}\left(\alpha^{-\frac{1}{2}} - \alpha^{\frac{1}{2}} \right)}{\frac{1}{2}\left(\alpha^{-\frac{1}{2}} + \alpha^{\frac{1}{2}} \right)} \right]^k \frac{\sqrt{(2k-1)!!}}{\sqrt{2k!!}} \cdot \sqrt{\frac{2\sqrt{\alpha}}{\alpha+1}} = \left(-\frac{1-\alpha}{1+\alpha} \right)^k \frac{\sqrt{(2k-1)!!}}{\sqrt{2k!!}} \cdot \sqrt{\frac{2\sqrt{\alpha}}{\alpha+1}} \, ,$$

od tod pa po kvadriranju še verjetnost, da po spremembi sistem najdemo v n-tem vzbujenem stanju:

$$P(\tilde{\psi} = \tilde{\psi}_n) = c_n^2 = \begin{cases} \frac{2\sqrt{\alpha}}{\alpha+1} \cdot \left(-\frac{1-\alpha}{1+\alpha} \right)^n \cdot \frac{(n-1)!!}{n!!} & \text{za sode } n \\ 0 & \text{za lihe } n \end{cases}$$