Κβαντική Φυσική Ι

Ενότητα 25: Μαθηματική μελέτη του κβαντικού αρμονικού ταλαντωτή

Ανδρέας Τερζής

Σχολή Θετικών Επιστημών

Τμήμα Φυσικής

Σκοποί ενότητας

- Σκοπός της ενότητας είναι να παρουσιάσει την μελέτη του κβαντικού αρμονικού ταλαντωτή με δύο τρόπους: 1)με την μέθοδο της απειροσειράς 2)με την αλγεβρική μέθοδο

Περιεχόμενα ενότητας

- Εξίσωση Schrödinger για τον αρμονικό ταλαντωτή
- Λύση του αρμονικού ταλαντωτή με την μέθοδο της απειροσειράς
- Λύση του αρμονικού ταλαντωτή με την αλγεβρική μέθοδο

Εξίσωση και μορφή ασυμπτωτικής λύσης για τον αρμονικό ταλαντωτή

- Όπως αναφέραμε στην προηγούμενη ενότητα, η εξίσωση που περιγράφει τον αρμονικό ταλαντωτή στο φυσικό σύστημα μονάδων είναι:

$$-\frac{\psi''}{2}+\frac{1}{2}x^2\psi = \mathrm{E}\psi \Longrightarrow \psi'' = (x^2-2E)\psi \quad (1)$$

- Θα μελετήσουμε αρχικά την ασυμπτωτική συμπεριφορά της λύσης, δηλ. όταν $x \to \infty$. Όταν $x \to \infty$, ο όρος $2\mathrm{E}\psi$ είναι αμελητέος και άρα η εξίσωση γίνεται:

$$\psi'' - x^2\psi = 0.$$

- Η λύση της εξίσωσης είναι της μορφής $\psi = e^{-\lambda x^2}$.
- Για να προσδιορίσουμε την σταθερά λ, τοποθετούμε την λύση στην εξίσωση και καταλήγουμε στην σχέση

$$-2\lambda e^{-\lambda x^2} + 4\lambda^2 x^2 e^{-\lambda x^2} - x^2 e^{-\lambda x^2} = 0$$

- Επειδή $x \to \infty$, ο πρώτος όρος θεωρείται αμελητέος και άρα συμπεραίνουμε ότι $4\lambda^2 = 1 \Rightarrow \lambda = \pm\frac{1}{2}$. Επειδή επιθυμούμε η λύση μας να είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη επιλέγουμε την λύση $\lambda = \frac{1}{2}$.

Γενική μορφή λύσης για τον αρμονικό ταλαντωτή

- Άρα η ασυμπτωτική λύση είναι $\psi = e^{-\frac{x^2}{2}}$.
- Η γενική τώρα μορφή της λύσης θα θεωρήσουμε ότι είναι $\psi(x) = \mathrm{H(x)}e^{-\frac{x^2}{2}}$, όπου $\mathrm{H(x)}$ είναι μια συνάρτηση της μεταβλητής x.
- Αντικαθιστώντας την λύση στην εξίσωση Schrödinger (1) καταλήγουμε σε μια νέα διαφορική εξίσωση που πρέπει να ικανοποιεί η συνάρτηση $\mathrm{H(x)}$. Αυτή είναι η $\mathrm{H'' - 2xH' + (2E - 1)H = 0}$.
- Η λύση αυτής θα βρεθεί με την μέθοδο της απειροσειράς.

Επίλυση με την μέθοδο της απειροσειράς

- Υποθέτουμε ότι η λύση είναι της μορφής

$\mathrm{H(x)} = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n$,όπου α_n άγνωστοι συντελεστές. Αν καταφέρουμε να υπολογίσουμε αυτούς, γνωρίζουμε ουσιαστικά την λύση της εξίσωσης.

- Θα αντικαταστήσουμε την λύση στην εξίσωση. Θα υπολογίσουμε τον κάθε όρο ξεχωριστά.
- Για την πρώτη παράγωγο έχουμε:

$\mathrm{H}' = \sum_{n=1}^{\infty} a_n n x^{n-1} = \sum_{n=0}^{\infty} a_n n x^{n-1}$.Άρα

$$xH' = \sum_{n=0}^{\infty} a_n n x^n \,.$$

- Για την δεύτερη παράγωγο έχουμε

$$\mathrm{H}'' = \sum_{n=2}^{\infty} n(n-1) a_n x^{n-2} = \sum_{k=0}^{\infty} (k+2)(k+1) a_{k+2} x^k \,.$$

Ολοκλήρωση της μεθόδου της απειροσειράς-Εύρεση συντελεστών

- Για την δευτερη παράγωγο πραγματοποιήσαμε αλλαγή μεταβλητής, θέτοντας $k = n - 2$, προκειμένου να έχουμε σε όλους τους όρους την ίδια δύναμη.
- Αντικαθιστώντας λοιπόν στην εξίσωση, καταλήγουμε στην σχέση

$$\sum_{n=0}^{\infty} [(n+2)(n+1)a_{n+2} - 2na_n + (2E-1)a_n\,]x^n = 0 \Rightarrow$$

$$a_{n+2} = \frac{2n - (2E-1)}{(n+2)(n+1)} a_n$$

- Από την παραπάνω σχέση καταλαβαίνουμε ότι αν ορίσουμε τον όρο α_0, μπορούμε να υπολογίσουμε τον α_2. Αν γνωρίζουμε τον α_2, μπορούμε να υπολογίσουμε τον α_4 και έτσι συνεχίζουμε και βρίσκουμε τους άρτιους όρους. Το ίδιο ισχύει και για τους περιττούς όρους, αν προσδιορίσουμε τον α_1.

Σύγκλιση σειράς

- Η σειρά πρέπει να τερματίζει. Και ο λόγος είναι ο εξής: Αν δεν τερματίζει, δηλ. $n \to \infty$, τότε

$\mathrm{H(x)} \approx e^{x^2}$. Άρα η κυματοσυνάρτηση θα είναι

$\psi(x) = \mathrm{H(x)} e^{-\frac{x^2}{2}} = e^{\frac{x^2}{2}}$, γεγονός που αποτελεί πρόβλημα, διότι δεν υπακούει στην απαίτησή μας να είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη.

- Επομένως η απειροσειρά πρέπει να τερματίζει, δηλ. να υπάρχει μια μέγιστη δύναμη n. Αν, λοιπόν, n είναι η μέγιστη δύναμη, τότε $a_{n+2} = 0 \Rightarrow 2n - 2E + 1 = 0$.
- Έτσι, μέσω αυτής της διαδικασίας καταλήξαμε ουσιαστικά στην συνθήκη κβάντωσης της ενέργειας. Λύνοντας ως προς E την παραπάνω σχέση, παρατηρούμε ότι οι δυνατές ενέργειες του συστήματος είναι $\mathrm{E}_n = n + \frac{1}{2}$.

Παρατήρηση

- Παρατήρηση: Η απειροσειρά μας είναι της μορφής $\alpha_0 + \alpha_1 x + a_2 x^2 + \cdots$

Αν η μέγιστος όρος είναι για παράδειγμα ο α_2, τότε μπορούμε να έχουμε έναν μη μηδενικό όρο α_0, (από τον οποίο θα βρίσκουμε τον α_2), ενώ η σχέση των συντελεστών θα δίνει $\alpha_4 = 0$ και θα μηδενίζονται επομένως όλοι οι υπόλοιποι άρτιοι όροι. Πρέπει να θέσουμε ωστόσο έναν επιπλέον περιορισμό. Αν ο όρος α_1 είναι μη μηδενικός, τότε οι περιττοί όροι δεν τερματίζουν. Άρα θέτουμε υποχρεωτικά $\alpha_1 = 0$. Αν ο μέγιστος όρος είναι περιττός, τότε ανάλογα θα θέτουμε υποχρεωτικά $\alpha_0 = 0$, ενώ $\alpha_1 \neq 0$.

- Το συμπέρασμα που προκύπτει μέσω αυτού του παραδείγματος είναι ότι η απειροσειρά θα αποτελείται είτε από άρτιους είτε από περιττούς όρους και όχι συνδυασμό των δύο.

Οι πρώτες λύσεις

- Η πρώτη λύση που αφορά τα πολυώνυμα $\mathrm{H}(x)$ είναι για $\alpha_0 \neq 0$,

$n = 0, a_1 = 0$. Άρα $H_0 = a_0$ και $\psi_0(x) = a_0 e^{-\frac{x^2}{2}}$. Αυτή είναι ουσιαστικά η θεμελιώδης κατάσταση με $\mathrm{E} = \frac{1}{2}$.

- Η δεύτερη λύση είναι για $n = 1, a_0 = 0, a_1 \neq 0$. Άρα $\mathrm{H}(x) = a_1 x$ και $\psi_1(x) = a_1 x e^{-\frac{x^2}{2}}$. Αυτή είναι η πρώτη διεγερμένη με $\mathrm{E} = 1 + \frac{1}{2} = \frac{3}{2}$.
- Αν τερματίσουμε την απειροσειρά στον όρο α_2, τότε

$n = 2, a_0 \neq 0, a_1 = 0$. Έχουμε $a_{n+2} = \frac{2n-(2(j+{}^1\!/_2)-1)}{(n+2)(n+1)} a_n$. Έχουμε αντικαταστήσει $\mathrm{E}_j = j + \frac{1}{2}$. Για να βρούμε τον όρο α_2 θέτουμε $n = 0$ και $j = 2$(δεύτερη διεγερμένη). Άρα $\alpha_2 = -2\alpha_0$. Επομένως

$\mathrm{H}(x) = a_0 + a_2 x^2 = a_0(1 - 2x^2)$ και $\psi_2(x) = a_0(1 - 2x^2) e^{-\frac{x^2}{2}}$.

Η κυματοσυνάρτηση

- Τα πολυώνυμα $\mathrm{H}(x)$, ονομάζονται πολυώνυμα Hermite.
- Γράφουμε την γενική έκφραση της κυματοσυνάρτησης συναρτήσει των πολυωνύμων Hermite ως εξής:

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(x) e^{-\frac{x^2}{2}}$$

- Ο παράγοντας $\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}$ προκύπτει από την κανονικοποίηση της κυματοσυνάρτησης, ενώ ο παράγοντας $\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}$ προκύπτει από τον νορμαλισμό των πολυωνύμων Hermite.
- Αν θέλουμε να έχουμε μια έκφραση για την ενέργεια σ' ένα οποιδήποτε σύστημα μονάδων, ισχύει ότι

$$\mathrm{E} = (\mathrm{n} + \frac{1}{2})\hbar\omega$$

Αλγεβρική μέθοδος

- Γράφουμε την χαμιλτονιανή του αρμονικού ταλαντωτή στο φυσικό σύστημα μονάδων ως

$\mathrm{H} = \frac{p^2}{2} + \frac{x^2}{2} = \frac{x+ip}{\sqrt{2}} \frac{x-ip}{\sqrt{2}}$, όπου x, p οι τελεστές θέσης και ορμής.

- Ορίζουμε στην συνέχεια δύο νέους τελεστές, τους

$$\hat{\alpha}^{\dagger} = \frac{\hat{x} - i\hat{p}}{\sqrt{2}}, \hat{a} = \frac{\hat{x} + i\hat{p}}{\sqrt{2}}$$

οι οποίοι ονομάζονται τελεστές δημιουργίας και καταστροφής ή τελεστές αναβίβασης και καταβίβασης. Την σημασία αυτής της ονομασίας θα την δούμε στην συνέχεια.

Η χαμιλτονιανή συναρτήσει των τελεστών $\hat{\alpha}^{\dagger}, \hat{\alpha}$

- Έχουμε

$$\hat{\alpha}\hat{\alpha}^{\dagger} = \frac{\hat{x}+i\hat{p}}{\sqrt{2}}\frac{\hat{x}-i\hat{p}}{\sqrt{2}} = \frac{1}{2}(\hat{x}^2 - i\hat{x}\hat{p} + i\hat{p}\hat{x} + \hat{p}^2) =$$

$$\frac{1}{2}(\hat{x}^2 + \hat{p}^2 - i[\hat{x}, \hat{p}])$$

❖ Θυμηθείτε ότι για δύο τελεστές $\widehat{\mathrm{A}}, \widehat{\mathrm{B}}$ γενικά $\widehat{\mathrm{A}}\widehat{\mathrm{B}} \neq \widehat{\mathrm{B}}\widehat{\mathrm{A}}$

εκτός αν μετατίθενται. Ισχύει ότι $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ και επειδή στο φυσικό σύστημα μονάδων $\hbar = 1, [\hat{x}, \hat{p}] = i$.

- Άρα $\hat{\alpha}\hat{\alpha}^{\dagger} = \widehat{\mathrm{H}} + \frac{1}{2} \Rightarrow \mathrm{H} = \alpha\alpha^{\dagger} - \frac{1}{2}$.

Μεταθετικές σχέσεις

- Αναφέρουμε κάποιες μεταθετικές σχέσεις που ικανοποιούν οι τελεστές $\hat{\alpha}^{\dagger}, \hat{\alpha}$.
- $\left[\alpha, \alpha^{\dagger}\right] = \left[\frac{x+ip}{\sqrt{2}}, \frac{x-ip}{\sqrt{2}}\right] = \frac{1}{2}[x. -ip] + \frac{1}{2}[ip, x] =$

$$= -\frac{i}{2}[x, p] + \frac{i}{2}[p, x] = 1$$

Ακόμη βρίσκουμε ότι $\left[\mathrm{H}, \alpha^{\dagger}\right] = \alpha^{\dagger}, [\mathrm{H}, \mathrm{\alpha}] = -\alpha$.

Ο τελεστής $\hat{\alpha}^{\dagger}$ και η ενέργεια

- Θα δούμε την επίδραση των τελεστών $\hat{\alpha}^{\dagger}, \hat{\alpha}$ στις ιδιοτιμές της ενέργειας. Η εξίσωση ιδιοτιμών για τον αρμονικό ταλαντωτή είναι της μορφής

$$\mathrm{H}|n\rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right)|n\rangle$$

- Έχουμε $\left[\mathrm{H}, \alpha^{\dagger}\right]\big|n\rangle = a^{\dagger}\big|n\rangle \Rightarrow$

$$\left(Ha^{\dagger} - a^{\dagger}H\right)\big|n\rangle = a^{\dagger}\big|n\rangle \Rightarrow$$
$$Ha^{\dagger}\big|n\rangle - a^{\dagger}H\big|n\rangle = a^{\dagger}|n\rangle \Rightarrow$$
$$Ha^{\dagger}\big|n\rangle - a^{\dagger}E_n\big|n\rangle = a^{\dagger}|n\rangle \Rightarrow$$
$$H\left(a^{\dagger}\big|n\rangle\right) = (E_n + 1)\left(a^{\dagger}\big|n\rangle\right)$$

- Παρατηρούμε λοιπόν ότι η κατάσταση $\left(a^{\dagger}\big|n\rangle\right)$ επαληθεύει επίσης την εξίσωση ιδιοτιμών. Της αντιστοιχεί ενέργεια $E_n + 1$.
- Επομένως , προκύπτει το συμπέρασμα ότι μπορούμε να κατασκευάσουμε λύσεις από ήδη υπάρχουσες, αν εφαρμόσουμε στις υπάρχουσες λύσεις τον τελεστή $\alpha^{\dagger}$.

Ο τελεστής $\widehat{\alpha}$ και η ενέργεια

- Σε αναλογία με τα προηγούμενα έχουμε:

$$[\mathrm{H}, \alpha]|n\rangle = -a|n\rangle \Rightarrow (Ha - aH)|n\rangle = -a|n\rangle \Rightarrow$$
$$Ha|n\rangle - aE_n|n\rangle = -a|n\rangle \Rightarrow$$
$$H(a|n\rangle) = (E_n - 1)(a|n\rangle)$$

- Παρατηρούμε ότι η κατάσταση $(a|n\rangle)$ επαληθεύει την εξίσωση ιδιοτιμών. Της αντιστοιχεί ενέργεια $(E_n - 1)$.

- Προκύπτει λοιπόν το συμπέρασμα ότι και με τον τελεστή $\hat{\alpha}$ κατασκευάζονται λύσεις από τις ήδη υπάρχουσες. Ο τελεστής $\hat{\alpha}^\dagger$ μας μεταβαίνει σε καταστάσεις υψηλότερης ενέργειας (εξ' ου και το όνομα «τελεστής αναβίβασης ή δημιουργίας»), ενώ ο τελεστής $\hat{\alpha}$ σε καταστάσεις χαμηλότερης ενέργειας (εξ' ου και το όνομα «τελεστής καταβίβασης ή καταστροφής).

Δράση του $\hat{\alpha}^\dagger$

- Θα δούμε τώρα πώς ακριβώς δρα ο $\hat{\alpha}^\dagger$ πάνω σε μια ιδιοκατάσταση.
- Η ιδιοκατάσταση $\left(a^\dagger|n\rangle\right)$ είναι η ιδιοκατάσταση της **αμέσως** υψηλότερης ενέργειας κάθε φορά (αφού η ενέργειά της είναι $(E_n + 1)$).
- Συμβολίζουμε λοιπόν την νέα ιδιοκατάσταση με $|n+1\rangle$ και γράφουμε: $\alpha^\dagger|n\rangle = C(n)|n+1\rangle$, όπου $C(n)$ είναι μια συνάρτηση που πρέπει να προσδιορίσουμε, προκειμένου να βρούμε τον ακριβή τρόπο δράσης του τελεστή $\alpha^\dagger$.
- Έχουμε $\langle n|a =(a^\dagger|n\rangle)^+= \mathrm{C(n)}^*\langle n+1|$ (διότι $(\alpha^\dagger)^+ = \alpha$ εξ' ορισμού).
- Άρα $\langle n|aa^\dagger|n\rangle = C(n)^2 \Longrightarrow \langle n|H+1/2|n\rangle = \langle n|n+1/2+1/2|n\rangle$

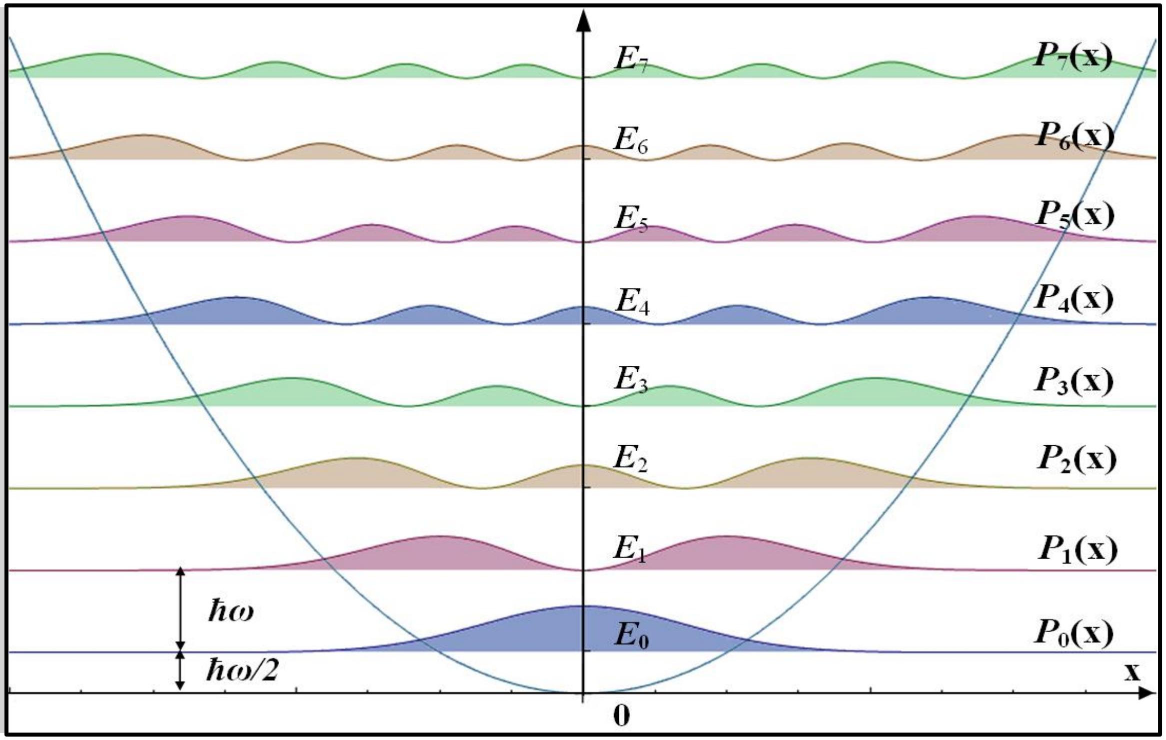
$\Rightarrow C(n)^2 = n+1 \Rightarrow C(n) = \sqrt{n+1}$.

- Άρα $\alpha^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$

Δράση του $\hat{a}$

- Θα δούμε πώς δρα ο τελεστής $\hat{\alpha}$ σε μια ιδιοκατάσταση.
- Ο τελεστής $\hat{\alpha}$ μας μεταβαίνει στην κατάσταση της **αμέσως** χαμηλότερης ενέργειας κάθε φορά.
- Συμβολίζουμε την κατάσταση αυτή ως $|n-1\rangle$ και έχουμε $\alpha|n\rangle = D(n)|n-1\rangle$ και $\langle n|a^{\dagger} = D^{*}(n)\langle n-1|$.
- Επομένως $\langle n\middle|a^{\dagger}a\middle|n\rangle = D^{2}\langle n-1|n-1\rangle = D^{2} = \langle n\middle|H - {}^{1}\!/_{2}\middle|n\rangle = \langle n\middle|n + {}^{1}\!/_{2} - {}^{1}\!/_{2}\middle|n\rangle = n \Rightarrow D = \sqrt{n}$.
- Άρα $\alpha\middle|n\rangle = \sqrt{n}\middle|n-1\rangle$.

Οι ιδιοκαταστάσεις του κβαντικού αρμονικού ταλαντωτή



Τέλος Ενότητας

Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στο πλαίσιο του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «**Ανοικτά Ακαδημαϊκά Μαθήματα στο Πανεπιστήμιο Αθηνών**» έχει χρηματοδοτήσει μόνο την αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Σημείωμα Αναφοράς

Copyright Πανεπιστήμιο Πατρών,Ανδρέας Τερζής ,2014. Ανδρέας Τερζής . «Κβαντική Φυσική Ι. Μαθηματική μελέτη του κβαντικού αρμονικού ταλαντωτή». Έκδοση: 1.0. Πάτρα 2014. Διαθέσιμο από τη δικτυακή διεύθυνση: https://eclass.upatras.gr/courses/PHY1957/

Σημείωμα Αδειοδότησης

Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων

Το Έργο αυτό κάνει χρήση των ακόλουθων έργων:

Εικόνα 1:

http://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_harmonic_oscillator