Cvičení ÚDKM 31. 3. 2022 (7. cvičení)

Témata:

- harmonický oscilátor

Lineární harmonický oscilátor

V klasické mechanice má Hamiltonián lineárního harmonického oscilátoru tvar:

$$H = T + V = \frac{\tilde{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \tilde{x}^2 \,. \tag{1}$$

Ke kvantové mechanice přejdeme ostříškováním operátorů hybnosti $p \to \hat{p}$ a souřadnice $x \to \hat{x}$:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\tilde{p}}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{\tilde{x}}^2 \tag{2}$$

a zavedením komutační relace

$$[\hat{\tilde{x}}, \hat{\tilde{p}}] = i \,. \tag{3}$$

Konstant v (2) se můžeme zbavit substitucí $\hat{\tilde{x}} = \lambda \hat{x}$ a $\hat{\tilde{p}} = \hat{p}/\lambda$. (I) Zjistěte, jak musíme zvolit λ, aby Hamiltonián získal tvar

$$\frac{\hat{H}}{\omega} \equiv \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} + \frac{\hat{x}^2}{2} \,. \tag{4}$$

Dále ověřte, že komutační relace (3) zůstane zachována, tj.

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i \,. \tag{5}$$

Jak vyřešit LHO? Hledáme energie E_n a odpovídající vlnové funkce $|\psi_n\rangle$,

$$\hat{H} |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle \,. \tag{6}$$

Máme dvě možnosti:
(a) Přejdeme do souřadnicové reprezentace, tj. nahradíme $\hat{p} \to= -i\frac{\partial}{\partial x}$ a $\hat{x} \to x$, a vyřešíme diferenciální rovnici. Nebo lépe
(b) Vyřešíme problém LHO zavedením vhodných operátorů $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$:

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{x} + i\hat{p}) \,, \quad \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{x} - i\hat{p}) \,, \tag{7}$$

kde $\dagger$ značí hermitovské sdružení.

(II) Ukažte, že hamiltonián LHO lze vyjádřit pomocí operátorů $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$ jako

$$\hat{H} = \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \,. \tag{8}$$

(III) Dále také ukažte, že platí následující komutační relace

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \,, [\hat{H}, \hat{a}] = -\hat{a} \,, [\hat{H}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger \,. \tag{9}$$

Operátory $\hat{a}$, $\hat{a}^\dagger$ mají význam snižovacích, resp. zvyšovacích operátorů, podobně jako nám již známé spinové operátory $\hat{S}_-$ a $\hat{S}_+$. Operátor $\hat{a}$ snižuje stav $|\psi_n\rangle$ odpovídající n-té hladině na stav o jedna nižší $|\psi_{n-1}\rangle$, tj. odpovídající $(n-1)$ hladině. Podobně operátor $\hat{a}^\dagger$ zvyšuje stav $|\psi_n\rangle$ odpovídající n-té hladině na stav o jedna vyšší $|\psi_{n+1}\rangle$, tj. odpovídající $(n+1)$ hladině. Tedy operátor $\hat{a}^\dagger$ zvyšuje stupeň excitace LHO, tj. "přidává" excitaci, a ho nazýváme kreačním operátorem. Operátor $\hat{a}$ naopak snižuje stupeň excitace, tj. "ubírá" excitaci, a nazýváme ho anihilačním operátorem. Pro působení těchto dvou operátorů platí

$$\hat{a} |\psi_n\rangle = \sqrt{n} |\psi_{n-1}\rangle \,, \tag{10}$$

$$\hat{a}^\dagger |\psi_n\rangle = \sqrt{n+1} |\psi_{n+1}\rangle \,. \tag{11}$$

Použitím operátorové rovnosti $[\hat{H}, \hat{a}] = -\hat{a}$ zjistíme, že energetické spektrum je kvantové a jednotlivé hladiny se liší o 1:

$$[\hat{H}, \hat{a}] |\psi_n\rangle = -\hat{a} |\psi_n\rangle \tag{12}$$

$$\left(\hat{H}\hat{a} - \hat{a}\hat{H}\right) |\psi_n\rangle = -\hat{a} |\psi_n\rangle \tag{13}$$

$$\left(\hat{H}\hat{a} - \hat{a}E_n\right) |\psi_n\rangle = -\hat{a} |\psi_n\rangle \tag{14}$$

$$\hat{H}\hat{a} |\psi_n\rangle = (E_n - 1) \, \hat{a} |\psi_n\rangle \,. \tag{15}$$

Dále požadavkem existence základního stavu, tj. stavu s nejnižší energií,

$$\hat{a}\left|\psi_0\right\rangle = 0\,, \tag{16}$$

zjistíme, že energie n-tého stavu je dána

$$E_n = n + \frac{1}{2}\,. \tag{17}$$

Pro nejnižší stav totiž máme (a jak jsem viděli výše, hladiny jsou od sebe vzdálené o jedna)

$$\hat{a}\left|\psi_0\right\rangle = 0 \tag{18}$$

$$\hat{a}^\dagger\hat{a}\left|\psi_0\right\rangle = 0 \tag{19}$$

$$\left(\hat{H} - \frac{1}{2}\right)\left|\psi_0\right\rangle = 0 \tag{20}$$

$$\left(E_0 - \frac{1}{2}\right)\left|\psi_0\right\rangle = 0 \Rightarrow E_0 = \frac{1}{2}\,. \tag{21}$$

Výše uvedené rovnice (10) a (11) pro působení operátorů $\hat{a}$ a $\hat{a}^\dagger$ použijeme, abychom zjistili, jak vypadají funkce tří nejnižších hladin LHO v souřadnicové reprezentaci. Vyjdeme opět z požadavku na existenci základního stavu $\left|\psi_0\right\rangle$,

$$\hat{a}\left|\psi_0\right\rangle = 0\,, \tag{22}$$

(čtěte jako "nejnižší stav už nelze snížit"). Dosazením za $\hat{a}$ a přechodem do souřadnicové reprezentace (tj. zleva přenásobíme $\langle x|$) získáme jednoduchou diferenciální rovnici

$$\left(x + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\psi_0(x) = 0\,, \tag{23}$$

jejíž řešením je

$$\psi_0(x) = \sqrt[4]{\frac{1}{\pi}}e^{-\frac{x^2}{2}}\,. \tag{24}$$

(IV) Odvoďte tento výsledek pomocí postupu popsaném v tomto odstavci. Jaká energie odpovídá tomuto stavu?

Vyšší, excitované, stavy získáme působením operátoru $\hat{a}^\dagger$,

$$\hat{a}^\dagger\left|\psi_n\right\rangle = \sqrt{n+1}\left|\psi_{n+1}\right\rangle\,. \tag{25}$$

(V) Ukažte, že pro první a druhý excitovaný stav (uveďte také odpovídající energie) získáme

$$\psi_1(x) = \sqrt[4]{\frac{4}{\pi}}xe^{-\frac{x^2}{2}}\,, \tag{26}$$

$$\psi_2(x) = \sqrt[4]{\frac{1}{4\pi}}(2x^2-1)e^{-\frac{x^2}{2}}\,. \tag{27}$$

Nakreslete si, jak tyto funkce vypadají. (VI) Ověřte, že funkce $\psi_0(x)$, $\psi_1(x)$ a $\psi_2(x)$ jsou normalizované na jedničku a že jsou navzájem (po dvojících) orthogonální, tj.

$$\langle\psi_n|\psi_k\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^*(x)\psi_k(x)\mathrm{d}x = \delta_{nk} \tag{28}$$

Vlastní funkce $\psi_n(x)$ LHO můžeme obecně zapsat ve tvaru

$$\psi_n(x) = A_n H_n e^{-\frac{x^2}{2}}\,, \tag{29}$$

kde H_n značí Hermitovy polynomy (A_n je normalizační konstanta). Je (možná) zajímavé, jak tyto vlnové funkce vypadají pro vysoká n. Odpovídající pravděpodobnost výskytu části se pak blíží klasickému výsledku. Oproti klasickému LHO však dostaneme nenulovou pravděpodobnost výskytu částice za hranicí potenciálu (podobně jako minule částice mohla pronikat do bariéry).

LHO: Pravděpodobnost výskytu v "zakázané" oblasti

Uvažujme lineární harmonický oscilátor

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \,. \tag{30}$$

Vlnová funkce základního stavu má v souřadnicové reprezentaci tvar

$$\psi(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\alpha x^2/2} \,, \tag{31}$$

kde $\alpha = m\omega/\hbar$.

Při klasickém popisu platí, že částici můžeme nalézt jen v oblasti $E \geq V(x)$. Při kvantovém popisu nám však vyjde nenulová pravděpodobnost výskytu částice v oblasti $E < V(x)$. Jakou pravděpodobnost získáme?

Nejprve se podívejme na LHO klasicky a spočteme si, jaká je maximální možná vzdálenost částice (v základním stavu) od rovnovážné polohy, kterou dovoluje klasická mechanika.

(I) Zkuste provést tento výpočet, než budete číst dále. Mělo by vyjít $x_{\max} = \pm\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$.

Z pohledu klasické mechaniky je rovnovážná poloha v bodě $x_0 = 0$ a částice se nemůže dostat do místa s větší potenciální energií, než je její vlastní energie:

$$\frac{1}{2}m\omega^2 x_{\max}^2 = \frac{1}{2}\hbar\omega \quad \Rightarrow \quad x_{\max} = \pm\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \,. \tag{32}$$

Nyní nám zbývá spočítat, s jakou pravděpodobností se v kvantovém světě může částice nacházet za touto hranicí. Tj. chceme spočítat

$$P = 1 - P(\text{klasicka oblast}) = \int_{-\infty}^{-x_{\max}} |\psi(x)|^2 \mathrm{d}x + \int_{x_{\max}}^{+\infty} |\psi(x)|^2 \mathrm{d}x \,. \tag{33}$$

(II) Proveďte výpočet. Mělo by vyjít přibližně 16 %.
Užitečný integrál: $\int_0^1 e^{-x^2}\mathrm{d}x \approx 0,16\frac{\sqrt{\pi}}{2}$.

Molekulové vibrace: dva oscilátory stejné frekvence

Molekuly se skládají z atomů spojených vazbami, kolem kterých vibrují. Ve velmi dobrém přiblížení můžeme tyto vibrace popsat jako harmonické, tj. pro každý z vibračních módů použijeme model harmonického oscilátoru. Uvažujme, že dvě vibrace v nějaké molekule mají stejnou frekvenci a studujme tyto dvě vibrace. Hamiltonián popisující náš systém má tedy tvar

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 = \frac{1}{2}\left(\hat{P}_1^2 + \hat{Q}_1^2\right) + \frac{1}{2}\left(\hat{P}_2^2 + \hat{Q}_2^2\right) \,, \tag{34}$$

kde $\hat{P}_i$, $\hat{Q}_i$ jsou operátory hybnosti a souřadnice splňující výše vypsané komutační relace.

Definujme operátory $\hat{N}_1 = \hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1$ a $\hat{N}_2 = \hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2$. Jejich vlastní stavy stavy a vlastní čísla označíme

$$\hat{N}_i \left|n_i\right\rangle = n_i \left|n_i\right\rangle \,, \tag{35}$$

kde $i = 1, 2$ a $n_i = 0, 1, 2, ...$ (I) Jaký je fyzikální význam těchto operátorů $\hat{N}_i$, jejich vlastních čísel n_i a vlastních stavů $|n_i\rangle$?

(II) Vyjádřete $\hat{H}$ pomocí operátorů $\hat{N}_1 = \hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1$ a $\hat{N}_2 = \hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2$ a napište výraz pro energii systému popsaného hamiltoniánem $\hat{H}$ pomocí n_1, n_2. Jsou tyto hladiny degenerované?

To, že hladiny jsou degenerované, poukazuje na to, že existuje nějaká symetrie v systému. Nyní zavedeme operátory

$$\hat{J}_0 = \frac{1}{2}\left(\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2 - \hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1\right) \,, \tag{36}$$

$$\hat{J}_+ = \hat{a}_2^\dagger\hat{a}_1 \,, \tag{37}$$

$$\hat{J}_- = \hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2 \,. \tag{38}$$

Jaká je možná fyzikální interpretace těchto operátorů? (III) Spočítejte komutátory těchto tří operátorů s hamiltoniánem $\hat{H}$.

(IV) Spočítejte komutátory těchto tří operátorů mezi sebou.

Vlastní stavy $\hat{H}$ označme $|n_1, n_2\rangle = |n_1\rangle\,|n_2\rangle$. (V) Jak působí $\hat{H}$, $\hat{J}_0$, $\hat{J}_+$, $\hat{J}_-$ na stavy $|n_1, n_2\rangle$? Místo stavů $|n_1, n_2\rangle$ můžeme zvolit jako naši bázi stavy $|j, m\rangle$ definované

$$\hat{J}_0\,|j, m\rangle = m\,|j, m\rangle\ , \tag{39}$$

$$\hat{J}^2\,|j, m\rangle = j\,(j+1)\,|j, m\rangle\ . \tag{40}$$

(VI) Vyjádřete j, m pomocí n_1, n_2 a energii E pomocí j.

Povinné úlohy na příště

1. (1 b.) Ukažte, že pro první a druhý excitovaný stav LHO (uveďte také odpovídající energie) získáme

$$\psi_1(x) = \sqrt[4]{\frac{4}{\pi}}\,x e^{-\frac{x^2}{2}}\ , \tag{41}$$

$$\psi_2(x) = \sqrt[4]{\frac{1}{4\pi}}\,(2x^2-1)e^{-\frac{x^2}{2}}\ . \tag{42}$$

   Nakreslete si funkce $\psi_0(x)$, $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$.

2. (1 b.) Spočítejte komutátory $\left[\hat{J}_0, \hat{J}_+\right]$, $\left[\hat{J}_0, \hat{J}_-\right]$, $\left[\hat{J}_+, \hat{J}_-\right]$.

Bonusová úloha

Uvažujme potenciál zadaný

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \qquad \text{pro} \quad x < 0 \tag{43}$$

$$V(x) \to +\infty \qquad \text{pro} \quad x > 0\,, \tag{44}$$

tj. jen levou půlku harmonického oscilátoru. Vyřešte Schrödingerovu rovnici pro tento potenciál, tj. najděte energetické spektrum a odpovídající vlastní funkce.