Κβαντομηχανική ΙΙ

Κωνσταντίνος Σφέτσος,
Καθηγητής Φυσικής

Τομέας Πυρηνικής και Στοιχειωδών Σωματιδίων,
Τμήμα Φυσικής,
Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών

Κεφάλαιο 2: Γραμμικός αρμονικός ταλαντωτής

18 Μαρτίου 2021

Περιεχόμενα

- Τελεστές δημιουργίας και καταστροφής
- Αλγεβρικός τρόπος κατασκευής ιδιοσυναρτήσεων
- Συνοχικές καταστάσεις
- Κίνηση σε σταθερό ΗΜ πεδίο

Κβαντικός αρμονικός ταλαντωτής: Βασικές σχέσεις

Η Χαμιλτονιανή και ο βασικός μεταθέτης είναι

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2 \ , \qquad [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \ .$$

Εισάγουμε για ευκολία νέους (αδιάστατους) τελεστές

$$\hat{x} = x_0 \hat{X} \ , \qquad \hat{p} = \frac{\hbar}{x_0} \ P \ , \qquad \text{οπότε} \quad [\hat{X}, \hat{P}] = i \ ,$$

όπου η σταθερά μήκους ορίζεται ως

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \ .$$

Η Χαμιλτονιανή τότε γράφεται

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} \left(\hat{P}^2 + \hat{X}^2 \right) \ .$$

Τελεστές δημιουργίας και καταστροφής

Η παραπάνω μορφή «προτείνει» τον ορισμό τελεστών

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} + i\hat{P}) \ , \qquad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} - i\hat{P})$$

Η Χαμιλτονιανή γράφεται

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\mathrm{N} + \frac{1}{2}\right) \ ,$$

όπου

$$\mathrm{N} = a^\dagger a \ .$$

Εύκολα αποδεικνύεται ότι

$$[a, a^\dagger] = 1 \ , \qquad [a, \mathrm{N}] = a \ , \qquad [a^\dagger, \mathrm{N}] = -a^\dagger \ .$$

Έστω η εξίσωση ιδιοτιμών του τελεστή N

$$\mathrm{N}|n\rangle = N_n|n\rangle \ , \quad N_n \in \mathbb{R} \ , \quad N_n = |a|n\rangle|^2 \geqslant 0 \ .$$

- Έχουμε ότι

$$\mathrm{N}(a|n\rangle) = (N_n - 1)(a|n\rangle) \ , \quad \mathrm{N}(a^\dagger|n\rangle) = (N_n + 1)(a^\dagger|n\rangle) \ .$$

- Μονοδιάστατα απειροδιάστατα συστήματα δεν έχουν εκφυλισμένες δέσμιες καταστάσεις. 'ρα

$$a|n\rangle = C_n|n-1\rangle \ , \qquad a^\dagger|n\rangle = \tilde{C}_n|n+1\rangle \ .$$

- Πρέπει να προσδιορίσουμε της διάφορες σταθερές:
  - Απ' το $\langle n-1|a|n\rangle = C_n = \tilde{C}^*_{n-1}$.
  - Απ' την $a^\dagger a|n\rangle = N_n|n\rangle$, έχουμε $N_n = \tilde{C}_{n-1}C_n = |C_n|^2$.
  - Απ' την $\langle n|[a, a^\dagger]|n\rangle = 1$, έχουμε $N_{n+1} - N_n = 1$.
    'ρα $N_n = n + c$, $c \in \mathbb{R}$.

- Απαιτούμε να υπάρχει βασική κατάσταση $|0\rangle$ η οποία να μπορεί να κατασκευαστεί με διαδοχικές δράσεις του a.
  Η αντίστοιχη ιδιοτιμή του Ν θα μειώνεται κάθε φορά κατά ένα. 'ρα θα πρέπει

$$a|0\rangle = 0 \ .$$

  'ρα $a^\dagger a|0\rangle = 0$ και $c = 0$, οπότε $C_n = \sqrt{n}$ και $\tilde{C}_n = \sqrt{n+1}$.
- Τελικά

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \ , \quad a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \ , \quad \mathrm{N}|n\rangle = n|n\rangle$$

  και

$$\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)|n\rangle \ .$$

- Ο τελεστής a ονομάζεται καταστροφής, ο τελεστής $a^\dagger$ δημιουργίας και ο N τελεστής αρίθμησης της κατάστασης.
- Η γενική κατάσταση είναι

$$\boxed{|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\,(a^\dagger)^n|0\rangle}\ .$$

Η απόδειξη γίνεται με επαγωγή.

Αλγεβρικός τρόπος κατασκευής ιδιοσυναρτήσεων

Η κατασκευή της θεμελιώδους κατάστασης γίνεται ως εξής

$$0 = \sqrt{2}\langle x|a|0\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\langle x|\hat{x}|\Psi_0\rangle + \frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}}\langle x|\hat{p}|\Psi_0\rangle$$
$$= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\Psi_0(x) + \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\Psi_0'(x) \ ,$$

όπου $|\Psi_0\rangle$ συμβολίζει την $|0\rangle$ και $\Psi_0(x) = \langle x|\Psi_0\rangle$. ’ρα

$$\frac{\Psi_0'(x)}{\Psi_0(x)} = -\frac{m\omega}{\hbar}x \implies \Psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \ ,$$

είναι η σωστά κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση.

Για μια γενική κατάσταση

$$\Psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}}\langle x|(a^\dagger)^n|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\xi^2/2} \ ,$$

όπου $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$. Με επαγωγή μπορεί να δειχθεί ότι

$$\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\xi^2/2} = (-1)^n e^{\xi^2/2}\frac{d^n}{d\xi^n}e^{-\xi^2} \ ,$$

οπότε

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

όπου

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2}\frac{d^n}{d\xi^n}e^{-\xi^2} \ ,$$

είναι τα πολυώνυμα Hermite, μέσω του τύπου του Rodrigues.

Συνοχικές καταστάσεις

Θεωρούμε ιδιοκαταστάσεις του τελεστή a

$$a|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle \ .$$

Αναπτύσσουμε

$$|\lambda\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n|n\rangle \implies \lambda c_n = \sqrt{n+1}c_{n+1} \implies c_n = c_0\frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}} \ .$$

Η κανονικοποιημένες στη μονάδα καταστάσεις είναι

$$|\lambda\rangle = e^{-|\lambda|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle \ .$$

Οι καταστάσεις αυτές ονομάζονται συνοχικές. Η θεμελιώδης κατάσταση $|0\rangle$ είναι συνοχική με $\lambda = 0$.

Βασικές ιδιότητες

- Οι συνοχικές καταστάσεις διατηρούν τη μορφής τους

$$U(t)|\lambda_0\rangle = e^{-|\lambda_0|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda_0^n}{\sqrt{n!}}e^{-i\omega(n+1/2)t}|n\rangle$$

'ρα, αμελώντας τη φάση $e^{-i\omega t/2}$, έχουμε

$$U(t)|\lambda_0\rangle = |\lambda(t)\rangle\ , \qquad \lambda(t) = \lambda_0 e^{-i\omega t}\ .$$

- Οι μέσες τιμές των τελεστών θέσης και ορμής υπακούουν τις κλασικές εξισώσεις κίνησης

$$\langle\lambda(t)|\hat{x}|\lambda(t)\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\langle\lambda(t)|a+a^\dagger|\lambda(t)\rangle = x_0\cos(\omega t-\phi)\ ,$$

όπου $\lambda_0 = |\lambda_0|e^{i\phi}$ και $x_0 = |\lambda_0|\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}$. Παρομοίως

$$\langle\lambda(t)|\hat{p}|\lambda(t)\rangle = -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\langle\lambda(t)|a-a^\dagger|\lambda(t)\rangle = -m\omega x_0\sin(\omega t-\phi)\ .$$

- Οι συνοχικές καταστάσεις έχουν τη μικρότερη δυνατή αβεβαιότητα

$$\Delta X = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \ , \qquad \Delta P = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \ .$$

Συνοχικές καταστάσεις στην αναπαράσταση θέσης

Απ' τον ορισμό των συνοχικών καταστάσεων και θέτοντας

$$\Psi_\lambda(x,t) = \langle x|\lambda(t)\rangle \ ,$$

έχουμε ότι

$$\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{d}{dx}\right)\Psi_\lambda(x,t) = \lambda(t)\Psi_\lambda(x,t) \ .$$

με λύση μπορεί να γραφτεί ως

$$\Psi_\lambda(x,t) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{i\delta(t)} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x-\langle\hat{x}\rangle)^2 + i\langle\hat{p}\rangle x/\hbar} ,$$

όπου $\delta(t)$ είναι μια φάση που υπολογίζεται απαιτώντας η $\Psi_\lambda(x,t)$ να υπακούει την εξίσωση Schrödinger. Βρίσκουμε ότι

$$\delta(t) = \delta_0 - \frac{1}{2}\omega t + \frac{|\lambda|^2}{2}\sin 2(\omega t - \phi) ,$$

όπου δ_0 σταθερά ['σκηση].

Μαθηματικές ιδιότητες των συνοχικών καταστάσεων

- Το πλάτος

$$P_n = |\langle n|\lambda\rangle|^2 = e^{-|\lambda|^2} \frac{|\lambda|^{2n}}{n!} \ .$$

ακολουθεί κατανομή Poisson.

$$\langle\lambda|\mathrm{N}|\lambda\rangle = |\lambda|^2 \ .$$

- Διαφορετικές συνοχικές καταστάσεις δεν είναι ορθογώνιες.
Απόδειξη:

$$\langle\mu|\nu\rangle = e^{-|\mu|^2/2-|\nu|^2/2} \sum_{m,n=0}^{\infty} \frac{(\mu^*)^m \nu^n}{\sqrt{m!n!}} \langle m|n\rangle$$

$$e^{-|\mu|^2/2-|\nu|^2/2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(\mu^*\nu)^m}{m!} = e^{-|\mu|^2/2-|\nu|^2/2+\mu^*\nu} \ .$$

Όχι ανάλογο του $\delta(\mu-\nu)$ (ο a δεν είναι Ερμιτιανός).
Επίσης

$$|\langle\mu|\nu\rangle|^2 = e^{-|\mu-\nu|^2} \ .$$

- Οι συνοχικές καταστάσεις συνιστούν πλήρης βάση

$$\frac{1}{\pi}\int d^2\lambda|\lambda\rangle\langle\lambda| = \mathbb{I} \ .$$

- Οι συνοχικές καταστάσεις μπορούν να κατασκευασθούν

$$|\lambda\rangle = D(\lambda)|0\rangle \ ,$$

όπου

$$D(\lambda) = e^{\lambda a^\dagger - \lambda^* a} = e^{-|\lambda|^2/2} e^{\lambda a^\dagger} e^{-\lambda^* a} \ ,$$

(προκύπτει απ΄ τον τύπο των Baker–Campbell–Hausdorff)

$$e^{A+B} = e^{-\frac{1}{2}[A,B]} e^A e^B \ , \quad \text{όταν } [A,[A,B]] = [B,[A,B]] = 0 \ ,$$

Σημειώνω τις ιδιότητες $D^\dagger(\lambda) = D^{-1}(\lambda) = D(-\lambda)$. Έχουμε

$$D(\lambda)|0\rangle = e^{-|\lambda|^2/2} e^{\lambda a^\dagger} e^{-\lambda^* a}|0\rangle = e^{-|\lambda|^2/2} e^{\lambda a^\dagger}|0\rangle$$

$$= e^{-|\lambda|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} \underbrace{(a^\dagger)^n|0\rangle}_{\sqrt{n!}|n\rangle} = |\lambda\rangle \ .$$

Κβαντικό σωμάτιο σε ΗΜ πεδίο

Κλασικό μη σχετικιστικό σωμάτιο σε ΗΜ πεδίο E και B δέχεται

Δύναμη Lorentz : $$m\frac{d\mathrm{v}}{dt} = q\mathrm{E} + \frac{q}{c}\mathrm{v}\times\mathrm{B}\ .$$

Η Λαγκρανζιανή απ΄ την οποία προέρχεται είναι η

$$L = \frac{1}{2}m\mathrm{v}^2 - q\Phi + \frac{q}{c}\mathrm{v}\cdot\mathrm{A}\ , \qquad \mathrm{v} = \frac{d\mathrm{x}}{dt}\ ,$$

όπου $\Phi(\mathrm{x},t)$ και $\mathrm{A}(\mathrm{x},t)$ το βαθμωτό και διανυσματικό δυναμικό

$$\mathrm{B} = \nabla\times\mathrm{A}\ , \qquad \mathrm{E} = -\nabla\Phi - \frac{1}{c}\frac{\partial\mathrm{A}}{\partial t}\ .$$

Κλασικές ιδιότητες

- Τα δυναμικά δεν είναι μονοσήμαντα ορισμένα

$$\text{Μετασχηματισμοί βαθμίδας}: \Phi \to \Phi - \frac{1}{c}\frac{\partial \Lambda}{\partial t}\ , \mathrm{A} \to \mathrm{A} + \nabla \Lambda\ .$$

Τα ΗΜ πεδία παραμένονν αναλλοίωτα και η Λαγκρανζιανή αλλάζει με ολική παράγωγο, δηλ. $L \to L + \frac{q}{c}\frac{d\Lambda}{dt}$.

- Η κανονική ορμή είναι

$$\mathrm{p} = \boldsymbol{\pi} + \frac{q}{c}\mathrm{A}\ ,$$

όπου $\boldsymbol{\pi} = m\mathrm{v}$ είναι η μηχανική ορμή.

- Η Χαμιλτονιανή είναι

$$H = \mathrm{v}\cdot\mathrm{p} - L = \frac{1}{2m}\left(\mathrm{p} - \frac{q}{c}\mathrm{A}\right)^2 + q\Phi = \frac{1}{2m}\boldsymbol{\pi}^2 + q\Phi\ .$$

Κβάντωση

- Η θέση x και η κανονική ορμή p αντιστοιχούν στους τελεστές $\hat{x}$ και $\hat{p}$ που υπακούουν τις συνήθεις σχέσεις μετάθεσης.
- Τα δυναμικά ανάγονται επίσης σε τελεστές

$$\Phi(x,t) \to \hat{\Phi}(\hat{x},t) \ , \qquad A(x,t) \to \hat{A}(\hat{x},t) \ .$$

- Οι μηχανικές ορμές υπακούουν

$$[\pi_i, \pi_j] = i\frac{q\hbar}{c}(\partial_i A_j - \partial_j A_i) = i\frac{q\hbar}{c}\epsilon_{ijk} B_k \ ,$$

όπου ϵ_{ijk} το σύμβολο Levi–Civita.
Ορισμός: Ισούται με $+1(-1)$ αν i,j,k είναι μια άρτια (περιττή) εναλλαγή των $(i,j,k) = (1,2,3)$ και μηδέν αν δύο δείκτες είναι ίσοι. Αντισυμμετρικό και στους τρείς δείκτες.
Σύμβαση Einstein: Επαναλαμβανόμενοι δείκτες αθροίζονται.

Κβαντικό σωματίδιο σε σταθερό μαγνητικό πεδίο

Αν $\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{z}}$ και $\mathbf{E} = 0$, τότε

$$\mathbf{A} = B(-y, 0, 0)\ , \qquad \Phi = 0\ .$$

- Οι κλασικές εξισώσεις είναι

$$\frac{dv_x}{dt} = -\omega_B v_y\ , \quad \frac{dv_y}{dt} = \omega_B v_x\ , \quad \frac{dv_z}{dt} = 0\ , \quad \omega_B = \frac{qB}{mc}\ .$$

  Η κίνηση γίνεται σε έλικα με συχνότητα κυκλότρου ω_B. Το μέτρο της ορμής του σωματιδίου είναι $P = mR\omega_B$.

- Η συχνότητα περιστροφής δίνεται από

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{qBv}{c} \quad \Longrightarrow \quad \omega = \frac{v}{r} = \frac{qB}{mc} = \omega_B\ .$$

- Η κβαντική Χαμιλτονιανή είναι

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\underbrace{(\hat{p}_x + m\omega_B\hat{y})^2}_{\pi_x^2} + \frac{1}{2m}(\hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) \ , \qquad \omega_B = \frac{qB}{mc} \ .$$

- Ορίζουμε

$$\hat{q} = \frac{\hat{p}_x}{m\omega_B} + \hat{y} \ , \quad \hat{p} = \hat{p}_y \implies [\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar \ ,$$

οπότε

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_B^2\hat{q}^2 + \frac{\hat{p}_z^2}{2m} \ .$$

Υπέρθεση αρμονικού ταλαντωτή και ελεύθερου σωματίου

- Η ενέργεια είναι

$$E_{n,p_z} = \hbar\omega_B\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{p_z^2}{2m} \ .$$

- Οι ιδιοσυναρτήσεις είναι της μορφής

$$\Psi(x,y,z) = \frac{1}{2\pi} e^{ip_x x/\hbar + ip_z z/\hbar}\Psi(y) \ ,$$

όπου η $\Psi(y)$ υπακούει την

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi}{dy^2} + \frac{1}{2}m\omega_B^2(y-y_0)^2\Psi = \left(E - \frac{p_z^2}{2m}\right)\Psi \ ,$$

όπου

$$y_0 = -\frac{p_x}{m\omega_B} \ ,$$

η ακτίνα της κλασικής τροχιάς.