Mechanika kwantowa II

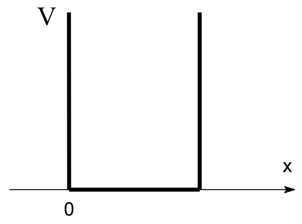
Opracowanie:
Barbara Pac, Piotr Petelenz

Cząstka w pudle potencjału

Cząstka w pudle potencjału to układ, w którym cząstka o masie m porusza się w pewnej ograniczonej przestrzeni. Zakładamy, ze wewnątrz pudla energia potencjalna cząstki jest stała; dla uproszczenia jej wartość przyjmujemy za równą zeru. Niemożność wydostania się cząstki poza granice pudla jest gwarantowana przez założenie o nieskończenie dużej wartości potencjału na jego ściankach.

Przypadek jednowymiarowy

Cząstka w jednowymiarowym pudle potencjału może poruszać się tylko w jednym kierunku (np. wzdłuż osi x, rys.1).



Rys. 1. Jednowymiarowe pudło potencjału.

Potencjał można w takim przypadku zdefiniować następująco:

$$V = \begin{cases} 0; & x \in (0, a) \\ \infty, & x \in (-\infty, 0] \cup [a, \infty) \end{cases} \qquad \text{[W.3.24]}$$

Energia naszej cząstki sprowadza się w takim przypadku do energii kinetycznej jej ruchu wzdłuż osi x:

$$E = \frac{1}{2m} p_x^2 \qquad \text{[W.3.25]}$$

a hamiltonian naszego układu ma postać:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \qquad \text{[W.3.26]}$$

Równanie Schrödingera dla stanów stacjonarnych [W.3.23] można zatem zapisać jako:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_n = E_n \psi_n \qquad \text{[W.3.27]}$$

a funkcje własne i energie własne tego układu maja postać:

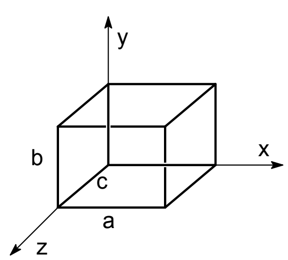
$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x \qquad \text{[W.3.28]}$$

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8ma^2}, \qquad \text{gdzie n=1,2,3.....} \qquad \text{[W.3.29]}$$

Rozwiązania równania Schrödingera musza spełniać warunki brzegowe właściwe dla rozważanego układu. Zatem przy zadanej dla naszej cząstki postaci potencjału, funkcje falowe muszą na brzegach pudla przyjmować wartość 0. Łatwo sprawdzić, ze funkcja zadana równaniem [W.3.28] spełnia ten warunek; dla x=0 i x=a mamy $\psi_n(0) = \psi_n(a) = 0$.

Przypadek trójwymiarowy

Przyjmijmy teraz, ze naczynie, wewnątrz którego może poruszać się cząstka, ma kształt prostopadłościanu o krawędziach a,b,c.



Rys. 2. Sześcienne pudło potencjału

Energia naszej cząstki ma zatem postać:

$$E = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) \quad \text{[W.3.30]}$$

a hamiltonian zapiszemy jako:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \quad \text{[W.3.31]}$$

Zauważmy, ze energie i hamiltonian możemy zapisać jako sumę komutujących ze sobą członów zależnych tylko od jednej współrzędnej

$$E = E_x + E_y + E_z \quad \text{[W.3.32]}$$

gdzie $E_x = \frac{1}{2m} p_x^2$, $E_x = \frac{1}{2m} p_y^2$, $E_x = \frac{1}{2m} p_z^2$ [W.3.33abc]

$$H = H_x + H_y + H_z \quad \text{[W.3.34]}$$

$$H_x = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2},\ H_y = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dy^2},\ H_z = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dz^2} \quad \text{[W.3.35abc]}$$

W takim przypadku funkcja falowa układu jest iloczynem funkcji falowych zależnych od danej współrzędnej

$$\psi_{n_x n_y n_z}(x,y,z) = \psi_{n_x}(x)\cdot\psi_{n_y}(y)\cdot\psi_{n_z}(z) \quad \text{[W.3.36]}$$

a postać funkcji $\psi_{n_x}(x),\ \psi_{n_y}(y),\ \psi_{n_z}(z)$ jest analogiczna do tej danej wzorem [W.3.28]:

$$\psi_{n_x} = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n_x\pi}{a}x,\ \psi_{n_y} = \sqrt{\frac{2}{b}}\sin\frac{n_y\pi}{b}y,\ \psi_{n_z} = \sqrt{\frac{2}{c}}\sin\frac{n_z\pi}{c}z \quad \text{[W.3.37]}$$

Ostatecznie zatem:

$$\psi_{n_x n_y n_z}(x,y,z) = \sqrt{\frac{8}{V}}\sin\frac{n_x\pi}{a}x\cdot\sin\frac{n_y\pi}{b}y\cdot\sin\frac{n_z\pi}{c}z; \quad \text{[W.3.38]}$$

gdzie *V=abc* jest objętością pudła potencjału.

Wobec zależności [W.3.29] i [W.3.32] automatycznie niemal możemy także określić wartość energii naszego układu.

$$E_{n_x n_y n_z} = E_{n_{x+}} + E_{n_y} + E_{n_z} \quad \text{[W.3.39]}$$

gdzie

$$E_{n_x} = \frac{n_x^2 h^2}{8ma^2},\ E_{n_y} = \frac{n_y^2 h^2}{8mb^2},\ E_{n_z} = \frac{n_z^2 h^2}{8mc^2} \quad \text{[W.3.40abc]}$$

Ostatecznie zatem:

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2}\right) \quad \text{[W.3.41]}$$

Przykład 3

Elektron porusza się swobodnie we wnętrzu trójwymiarowego krystalitu o kształcie sześcianu, utworzonego z półprzewodnika. Długość krawędzi krystalitu wynosi *l*.

1. Dla stanu podstawowego i pierwszych dwóch stanów wzbudzonych elektronu określić:

a) postać funkcji falowej
b) wartość energii
c) stopień degeneracji

2. Określić, w jaki sposób (ilościowo)

a) zmieniłaby się energia tych stanów, gdyby liniowe rozmiary krystalitu zostały podwojone?
b) zmieniłaby się energia tych stanów, gdyby elektron został zastąpiony cząstką o dwukrotnie większej masie?

Ad. 1

W naszym przypadku długości wszystkich krawędzi pudla są takie same i wynoszą *l*. Funkcja opisana wzorem [W.3.38] przyjmuje zatem postać:

$$\psi_{n_x n_y n_z}(x,y,z)=\sqrt{\frac{8}{l^3}}\sin\frac{n_x\pi}{l}x\cdot\sin\frac{n_y\pi}{l}y\cdot\sin\frac{n_z\pi}{l}z \qquad [3.3.1]$$

a energia opisana w przypadku ogólnym wzorem [W.3.41] sprowadza się do postaci:

$$E_{n_x n_y n_z}=\frac{h^2}{8ml^2}\left(n_x^2+n_y^2+n_z^2\right) \qquad [3.3.2]$$

Zajmijmy się najpierw stanem podstawowym naszego elektronu. W stanie tym $n_x=n_y=n_z=1$
Wtedy funkcja i energia będą dane jako:

$$\psi_{111}(x,y,z)=\sqrt{\frac{8}{l^3}}\sin\frac{\pi}{l}x\cdot\sin\frac{\pi}{l}y\cdot\sin\frac{\pi}{l}z \qquad [3.3.3]$$

$$E_{111}=\frac{3h^2}{8ml^2} \qquad [3.3.4]$$

Ponieważ energii E_{111} odpowiada tylko jedna funkcja falowa ψ_{111}, stopień degeneracji stanu podstawowego wynosi 1 (czyli stan ten nie jest zdegenerowany).

Pierwszy stan wzbudzony naszego elektronu odpowiada sytuacji, gdy dwie liczby kwantowe będą przyjmowały swoje najniższe wartości, czyli będą równe 1, a jedna będzie równa 2.

Daje nam to następujące możliwości kombinacji liczb kwantowych n_x, n_y, n_z:

1.	$n_x=1$	$n_y=1$	$n_z=2$
2.	$n_x=1$	$n_y=2$	$n_z=1$
3.	$n_x=2$	$n_y=1$	$n_z=1$

Każdej z tych kombinacji przypisujemy odpowiadającą jej funkcję falową:

1. $$\psi_{112}(x,y,z)=\sqrt{\frac{8}{l^3}}\sin\frac{\pi}{l}x\cdot\sin\frac{\pi}{l}y\cdot\sin\frac{2\pi}{l}z \qquad [3.3.5a]$$

2. $$\psi_{121}(x,y,z)=\sqrt{\frac{8}{l^3}}\sin\frac{\pi}{l}x\cdot\sin\frac{2\pi}{l}y\cdot\sin\frac{\pi}{l}z \qquad [3.3.5b]$$

3. $$\psi_{211}(x,y,z)=\sqrt{\frac{8}{l^3}}\sin\frac{2\pi}{l}x\cdot\sin\frac{\pi}{l}y\cdot\sin\frac{\pi}{l}z \qquad [3.3.5c]$$

Wartość energii w każdym ze stanów opisanych funkcjami ψ_{112}, ψ_{121}, ψ_{211} jest taka sama i wynosi:

$$E_{112}=E_{121}=E_{211}=\frac{3h^2}{4ml^2} \qquad [3.3.6]$$

Ponieważ zatem w trzech różnych stanach opisanych funkcjami ψ_{112}, ψ_{121}, ψ_{211} elektron ma taka sama wartość energii (równa $\frac{3h^2}{4ml^2}$), stopień degeneracji poziomu energetycznego wynosi 3.

Czytelnikowi zostawiamy rozważenie przypadku z drugim stanem wzbudzonym.

Ad. 2
Podwojenie liniowych rozmiarów krystalitu sprowadza się do zastąpienia *l→2l,* a podwojenie masy *m→2m.*

W stanie podstawowym postać energii elektronu o masie *m* poruszającego się we wnętrzu sześciennego krystalitu o krawędzi *l* dane jest wzorem [3.3.4] jako: $E_{111}^{m,l} = \frac{3h^2}{8ml^2}$.

W takim razie:

$$E_{111}^{m,2l} = \frac{3h^2}{8m(2l)^2} = \tfrac{1}{4} E_{111}^{m,l} \qquad [3.3.7]$$

$$E_{111}^{2m,l} = \frac{3h^2}{8 \cdot 2ml^2} = \tfrac{1}{2} E_{111}^{m,l} \qquad [3.3.8]$$

czyli energia elektronu zmalałaby czterokrotnie w przypadku dwukrotnego zwiększenia liniowych rozmiarów krystalitu i zmalałaby dwukrotnie w przypadku zastąpienia elektronu cząstką o dwukrotnie większej masie. Analogiczna zmiana energii miałaby też miejsce w stanach wzbudzonych.

Zadania do samodzielnego rozwiązania

Zadanie 3

1. Wykaż bezpośrednim rachunkiem, że funkcje falowe cząstki w pudle o postaci zadanej wzorem [W.3.28] są unormowane.

2. Funkcja $\varphi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{n\pi}{a} x$ jest funkcją własną hamiltonianu cząstki w pudle potencjału zadanego wzorem [W.3.24], a jednak nie opisuje poprawnie stanu cząstki.

a) Wykaż bezpośrednim rachunkiem, że funkcje $\varphi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{n\pi}{a} x$ są funkcjami własnymi hamiltonianu cząstki w pudle.

b) Wyjaśnij, dlaczego nie nadają się one do opisu ruchu cząstki w pudle.

3. Dla cząstki w pudle jednowymiarowego nieskończonego potencjału znajdującej się

a) w stanie podstawowym

b) w pierwszym stanie wzbudzonym

znaleźć

I. wartość x, dla której gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki jest maksymalna.

II. wartość średnią x

III. wartość średnią x^2

IV. stopień degeneracji poziomu energetycznego

Wykazać ponadto, ze funkcje falowe cząstki w stanie podstawowym i w pierwszym stanie wzbudzonym są wzajemnie ortogonalne, a wartości energii odpowiadające tym stanom mają się do siebie jak 1:4.

Oscylator harmoniczny jednowymiarowy

Całkowita energia jednowymiarowego oscylatora harmonicznego dana jest wzorem:

$$E = \frac{p_x^2}{2m} + \tfrac{1}{2}kx^2 \qquad \text{[W.3.42]}$$

wobec czego hamiltonian tego układu ma postać:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \tfrac{1}{2}kx^2 \qquad \text{[W.3.43]}$$

a równanie Schrödingera można zapisać jako:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \tfrac{1}{2}kx^2\right)\psi_\upsilon = E_\upsilon \psi_\upsilon \qquad \text{[W.3.44]}$$

Mające sens fizyczny rozwiązania powyższego równania mają postać:

$$\psi_v(Q) = N_v e^{-Q^2/2} H_v(Q) \qquad \text{[W.3.45]}$$

gdzie:

υ jest kwantową liczbą oscylacji i przyjmuje wartości $\upsilon = 0,1,2....$

współrzędna Q jest związana ze współrzędną x relacją:

$$Q = \sqrt[4]{\frac{mk}{\hbar^2}}\,x \qquad \text{[W.3.46]}$$

$H_\upsilon(Q)$ są wielomianami Hermite'a danymi wzorem:

$$H_\upsilon(Q) = (-1)^\upsilon e^{Q^2} \frac{d^\upsilon e^{-Q^2}}{dQ^\upsilon} \qquad \text{[W.3.47]}$$

a N_v jest stałą normalizacji:

$$N_\upsilon = \left[\frac{1}{2^\upsilon \upsilon!}\left(\frac{2mk}{\hbar^2\pi^2}\right)^{1/4}\right]^{1/2} \qquad \text{[W.3.48]}$$

Energie własne oscylatora harmonicznego dane są wzorem:

$$E_\upsilon = h\nu(\upsilon + \tfrac{1}{2}) = \hbar\omega(\upsilon + \tfrac{1}{2}) \qquad \text{[W.3.49]}$$

gdzie:
υ jest kwantową liczbą oscylacji i przyjmuje wartości $\upsilon = 0,1,2....$
ν-jest częstością drgań oscylatora związaną z siłą oscylatora i jego masą zależnością:

$$\nu = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}} = \frac{1}{2\pi}\omega \qquad \text{[W.3.50]}$$

Drugie kwantowanie

Uzyskaną poprzednio postać równania Schrödingera [W.3.44] można zapisać wprowadzając bezwymiarową współrzędną Q zdefiniowaną wzorem [W.3.46] oraz bezwymiarową współrzędną *P:*

$$P = p_x \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} \qquad [W.3.51]$$

Operator $\hat{P}$ (co można łatwo sprawdzić bezpośrednim rachunkiem) jest wtedy zdefiniowany jako:

$$\hat{P} = -i\frac{d}{dQ} \qquad [W.3.52]$$

a hamiltonian zapisany za pomocą nowych współrzędnych ma postać:

$$\hat{H} = \tfrac{1}{2}\hbar\omega(\hat{P}^2 + \hat{Q}^2) \qquad [W.3.53]$$

Hamiltonian ten można zapisać za pomocą (niehermitowskich) operatorów $a,\ a^+$ w następujący sposób:

$$H = \hbar\omega(a^+ a + \tfrac{1}{2}) \qquad [W.3.54]$$

przy czym operatory $a,\ a^+$ są związane z operatorami $\hat{Q}\ i\ \hat{P}$ następującymi relacjami:

$$a = \tfrac{1}{\sqrt{2}}(\hat{Q} + i\hat{P}) = \tfrac{1}{\sqrt{2}}(\hat{Q} + \tfrac{d}{dQ}) \qquad [W.3.55]$$

$$a^+ = \tfrac{1}{\sqrt{2}}(\hat{Q} - i\hat{P}) = \tfrac{1}{\sqrt{2}}(\hat{Q} - \tfrac{d}{dQ}) \qquad [W.3.56]$$

Ze związku [W.3.55] bezpośrednio wynika, że operatory H i a^+a komutują ze sobą, a zatem mają ten sam zestaw funkcji własnych.

Działanie operatorów $a,\ a^+$ na funkcje własne oscylatora jest następujące:

$$a\psi_\upsilon = \sqrt{\upsilon}\ \psi_{\upsilon-1} \qquad [W.3.57]$$

$$a^+\psi_\upsilon = \sqrt{\upsilon+1}\ \psi_{\upsilon+1} \qquad [W.3.58]$$

Występujące w powyższych równaniach funkcje falowe $\psi_{v-1},\ \psi_v,\ \psi_{v+1}$ są funkcjami własnymi oscylatora harmonicznego w różnych stanach kwantowych. Widać, że działanie operatora a na funkcję odpowiadającą stanowi o liczbie kwantowej υ prowadzi do otrzymania funkcji odpowiadającej stanowi $\upsilon-1$ (pomnożonej przez $\sqrt{\upsilon}$). Operator ten nazywamy *operatorem obniżającym (operatorem anihilacji).* Działanie operatora a^+ na funkcję odpowiadającą stanowi o liczbie kwantowej υ prowadzi natomiast do otrzymania funkcji odpowiadającej stanowi $\upsilon+1$ (pomnożonej przez $\sqrt{\upsilon+1}$). Operator ten nazywamy *operatorem podnoszącym (operatorem kreacji).*

Minimalna wartość liczby kwantowej υ wynosi 0. Działając operatorem anihilacji na funkcję odpowiadającą temu stanowi musimy więc uzyskać wartość 0.

$$a\psi_0 = 0 \qquad [W.3.59]$$

Rozwiązanie tego równania i unormowanie uzyskanej funkcji prowadzi do otrzymania funkcji falowej ψ_0 o następującej postaci:

$$\psi_0 = \pi^{-1/4} \cdot e^{-Q^2/2} \qquad [W.3.60]$$

Przykład 4

Funkcja własna oscylatora harmonicznego w drugim stanie wzbudzonym ma postać:

$$\psi_2 = \frac{\pi^{-1/4}}{2\sqrt{2}}(4Q^2 - 2)\cdot e^{-Q^2/2}$$

1. Jaką postać mają funkcje $\psi_1,\ \psi_3$ oscylatora?

2. Oblicz wartości całek:

a) $\langle\psi_2|a^+|\psi_2\rangle$

b) $\langle\psi_2|(a^+ - a)^2|\psi_2\rangle$

c) $\langle\psi_2|a^+(a + a^+)^2 a|\psi_2\rangle$

3. Dla stanu o $\upsilon = 2$ oblicz wartości średnie

a) energii całkowitej

b) energii kinetycznej

c) energii potencjalnej

Ad. 1

Dla wartości kwantowej liczby oscylacji $\upsilon = 2$ wzór [W.3.57] przybierze postać:

$$a\psi_2 = \sqrt{2}\psi_1 \qquad [3.4.1]$$

Postać funkcji ψ_1 jest więc dana jako:

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}a\psi_2 \qquad [3.4.2]$$

Podstawiając do powyższego wzoru jawną postać operatora a (wzór [W.3.55]) i jawną postać funkcji ψ_2 (temat zadania) otrzymujemy:

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{Q} + \tfrac{d}{dQ})\frac{\pi^{-1/4}}{2\sqrt{2}}(4Q^2 - 2)\cdot e^{-Q^2/2} = \frac{\pi^{-1/4}}{2\sqrt{2}}(\hat{Q} + \tfrac{d}{dQ})(2Q^2 - 1)\cdot e^{-Q^2/2} \qquad [3.4.3a]$$

Ostatecznie, po wykonaniu powyższego działania:

$$\psi_1 = \frac{\pi^{-1/4}}{\sqrt{2}}2Q\cdot e^{-Q^2/2} \qquad [3.4.3b]$$

Postać funkcji ψ_3 otrzymamy korzystając z wynikającej ze wzoru [W.3.58] zależności:

$$a^+\psi_2 = \sqrt{3}\psi_3 \quad \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{3}}a^+\psi_2 = \psi_3 \qquad [3.4.4]$$

Do wykonania tego działania należy posłużyć się jawną postacią operatora a^+ daną wzorem [W.3.56]. Alternatywnie, postać funkcji ψ_1 i ψ_3 możemy wyprowadzić korzystając ze wzoru [W.3.45].

Ad. 2a

Wartość całki $\langle\psi_2|a^+|\psi_2\rangle$ możemy obliczyć na dwa sposoby.

sposób I

Działanie operatora kreacji na funkcje własne oscylatora harmonicznego jest określone wzorem [W.3.56]. Dla $\upsilon = 2$ mamy:

$$a^+|\psi_2\rangle = \sqrt{3}\psi_3 \qquad [3.4.5]$$

W takim razie wartość naszej całki jest równa

$$\langle\psi_2|a^+|\psi_2\rangle = \sqrt{3}\langle\psi_2|\psi_3\rangle = 0 \qquad [3.4.6]$$

(Skorzystano tu oczywiście z warunku ortogonalności funkcji własnych).

sposób 2

Wstawiając w naszej całce jawną postać funkcji ψ_2 (daną w temacie zadania) i jawną postać operatora a^+ (daną wzorem [W.3.57]) otrzymujemy:

$$\langle\psi_2|a^+|\psi_2\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\pi^{-1/4}}{2\sqrt{2}}(4Q^2 - 2)\cdot e^{-Q^2/2}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{Q} - \tfrac{d}{dQ})\right)\frac{\pi^{-1/4}}{2\sqrt{2}}(4Q^2 - 2)\cdot e^{-Q^2/2}\,dQ =$$

$$= \frac{\pi^{-1/2}}{2\sqrt{2}}\int_{-\infty}^{+\infty}(2Q^2 - 1)\cdot e^{-Q^2/2}\left(\hat{Q} - \tfrac{d}{dQ}\right)(2Q^2 - 1)\cdot e^{-Q^2/2}\,dQ =$$

$$= \frac{\pi^{-1/2}}{2\sqrt{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} (2Q^2 - 1) \cdot (4Q^3 - 6Q) \cdot e^{-Q^2} dQ = \frac{\pi^{-1/2}}{2\sqrt{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} (8Q^5 - 16Q^3 + 6Q) \cdot e^{-Q^2} dQ \qquad [3.4.7]$$

Jak widać funkcję podcałkową można łatwo przedstawić w postaci sumy funkcji nieparzystych. W takim razie

$$\langle \psi_2 | a^+ | \psi_2 \rangle = 0 \qquad [3.4.8]$$

Ad. 2b

Przykład a pokazał, że obliczenie wartości całki $\langle \psi_2 | (a^+ - a)^2 | \psi_2 \rangle$ będzie znacznie łatwiejsze, jeżeli nie podstawimy jawnej postaci funkcji falowej (danej w temacie zadania) i jawnej postaci operatorów (danej wzorami [W.3.55] i [W.3.56]) a jedynie wykorzystamy znajomość sposobu działania tych operatorów na funkcje własne oscylatora (wzory [W.3.57] i [W.3.58]).

Obliczmy najpierw, jaki jest wynik działania operatora $(a^+ - a)^2$ na funkcję ψ_2.

$$(a^+ - a)^2 | \psi_2 \rangle = \left(\left(a^+\right)^2 - a^+ a - a a^+ + a^2 \right) \psi_2 \qquad [3.4.9]$$

Jak widać operator $(a^+ - a)^2$ można przedstawić jako sumę czterech innych operatorów. Sposób ich działania na funkcję ψ_2 jest następujący:

$$\left(a^+\right)^2 \psi_2 = \sqrt{3} a^+ \psi_3 = 2\sqrt{3} \psi_4 \qquad [3.4.10]$$

$$-a^+ a \psi_2 = -\sqrt{2} a^+ \psi_1 = -2\psi_2 \qquad [3.4.11]$$

$$-a a^+ \psi_2 = -\sqrt{3} a \psi_3 = -3\psi_2 \qquad [3.4.12]$$

$$a^2 \psi_2 = \sqrt{2} a \psi_1 = 2\psi_0 \qquad [3.4.13]$$

W takim razie:

$$\langle \psi_2 | (a^+ - a)^2 | \psi_2 \rangle = 2\sqrt{3} \langle \psi_2 | \psi_4 \rangle - 5 \langle \psi_2 | \psi_2 \rangle + 2 \langle \psi_2 | \psi_0 \rangle \qquad [3.4.14]$$

Uwzględniając warunek ortogonalności funkcji własnych (wzór [W.3.15]) otrzymujemy ostatecznie:

$$\langle \psi_2 | (a^+ - a)^2 | \psi_2 \rangle = -5 \qquad [3.4.14]$$

Obliczenie wartości ostatniej całki pozostawiamy czytelnikowi.

Ad. 3a

Układ znajduje się w stanie własnym hamiltonianu o $\upsilon = 2$. W takim przypadku oczywiście wartość średnia energii całkowitej musi być równa wartości własnej energii w tym stanie.

Wartości własne energii oscylatora dane są wzorem ([W.3.49]), który dla $\upsilon = 2$ przybiera postać:

$$E_2 = h\nu(2 + \tfrac{1}{2}) = \tfrac{5}{2} \hbar \nu \qquad [3.4.15]$$

Ad. 3b

Wyrażenie na wartość średnią energii kinetycznej możemy (zgodnie z [W.3.3]) zapisać jako:

$$\langle T \rangle = \langle \psi_2 | \hat{T} | \psi_2 \rangle \qquad [3.4.16]$$

Zdefiniowaną tak całkę możemy obliczyć dwoma sposobami.

<u>I sposób</u>

Ze wzoru [W.3.54] wynika następująca postać operatora energii kinetycznej:

$$\hat{T} = \tfrac{1}{2} \hbar \omega \hat{P}^2. \qquad [3.4.17]$$

Z kolei, z definicji operatorów kreacji i anihilacji (wzory [W.3.55] i [W.3.56]) wynika następująca postać operatora $\hat{P}$:

$$\hat{P} = \tfrac{i}{\sqrt{2}} (a^+ - a) \qquad [3.4.18]$$

W takim razie:

$$\hat{T} = \tfrac{1}{2} \hbar \omega \hat{P}^2 = \tfrac{1}{2} \hbar \omega \left(\tfrac{i}{\sqrt{2}} (a^+ - a) \right)^2 = -\tfrac{1}{4} \hbar \omega (a^+ - a)^2 \qquad [3.4.19]$$

Wartość średnia energii kinetycznej wynosi więc:

$$\langle T\rangle = -\tfrac{1}{4}\hbar\omega\langle\psi_2|(a^+ - a)^2|\psi_2\rangle \qquad [3.4.20]$$

Wartość całki $\langle\psi_2|(a^+ - a)^2|\psi_2\rangle$ została obliczona w poprzednim podpunkcie i wynosi -5. Wartość średnia energii kinetycznej:

$$\langle T\rangle = \tfrac{5}{4}\hbar\omega \qquad [3.4.21]$$

<u>II sposób</u>

$$T = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi_2\hat{T}\psi_2 dQ \qquad [3.4.22]$$

Wstawiając do wzoru [3.4.17] postać operatora $\hat{P}$ (wzór [W.3.52]) mamy:

$$\hat{T} = \tfrac{1}{2}\hbar\omega(-i\tfrac{d}{dQ})^2 = -\tfrac{1}{2}\hbar\omega\frac{d^2}{dQ^2} \qquad [3.4.23]$$

Korzystając z jawnej postaci funkcji danej w temacie zadania:

$$T = \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\pi^{-1/4}}{2\sqrt{2}}(4Q^2-2)\cdot e^{-Q^2/2}\left(-\tfrac{1}{2}\hbar\omega\frac{d^2}{dQ^2}\right)\frac{\pi^{-1/4}}{2\sqrt{2}}(4Q^2-2)\cdot e^{-Q^2/2}\,dQ =$$

$$= -\tfrac{1}{4}\hbar\omega\pi^{-1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}(2Q^2-1)\cdot e^{-Q^2/2}\frac{d^2}{dQ^2}(2Q^2-1)\cdot e^{-Q^2/2}\,dQ$$

$$= -\tfrac{1}{4}\hbar\omega\pi^{-1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}(2Q^2-1)\cdot e^{-Q^2/2}(5-11Q^2+2Q^4)e^{-Q^2/2}\,dQ$$

$$= -\tfrac{1}{4}\hbar\omega\pi^{-1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}(2Q^2-1)(5-11Q^2+2Q^4)e^{-Q^2}dQ = -\tfrac{1}{4}\hbar\omega\pi^{-1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}(4Q^6-24Q^4+21Q^2-5)e^{-Q^2}dQ =$$

$$= -\tfrac{1}{4}\hbar\omega\pi^{-1/2}(4\cdot\tfrac{15}{8}\pi^{1/2} - 24\cdot\tfrac{3}{4}\pi^{1/2} + 21\cdot\tfrac{1}{2}\pi^{1/2} - 5) = \tfrac{5}{4}\hbar\omega \qquad [3.4.24]$$

Zauważmy, że obliczana wartość średnia energii kinetycznej jest równa połowie wartości energii własnej w tym stanie. Druga połowa będzie zatem przypadać na energię potencjalną.

$$\langle V\rangle = \tfrac{5}{4}\hbar\omega \qquad [3.4.25]$$

Sprawdzenie tego bezpośrednim rachunkiem pozostawiamy czytelnikowi

Zadania do samodzielnego rozwiązania

Zadanie 4

1. Dla dwóch najniższych stanów energetycznych oscylatora harmonicznego oraz dla stanu, którego funkcję falową można zapisać w postaci następującej kombinacji liniowej funkcji własnych oscylatora $\psi = \sqrt{\frac{2}{3}}\psi_1 + \frac{1}{\sqrt{3}}\psi_2$

a) podaj postać jawną funkcji falowych
b) oblicz następujące wartości średnie:
I. $\langle Q \rangle$
II. $\langle Q^2 \rangle$
III. $\langle P \rangle$
IV. $\langle P^2 \rangle$
V. $\langle T \rangle$; gdzie T jest energią kinetyczną oscylatora
VI. $\langle V \rangle$; gdzie V jest energią potencjalną oscylatora
VII. $\langle H \rangle$

2. Klasyczny oscylator ma największą prędkość podczas przechodzenia przez położenie równowagi a najmniejszą (równą 0) w punktach zwrotnych. Prawdopodobieństwo znalezienia oscylatora klasycznego w położeniu równowagi osiąga więc wartość minimalną.
Oblicz wartość Q, dla której prawdopodobieństwo znalezienia oscylatora kwantowego w jego stanie podstawowym jest maksymalne. Porównaj zachowanie oscylatora klasycznego i oscylatora kwantowego.

Zadanie 5

1. Oblicz wartość komutatorów:
a) $[a, a^+]$
b) $[a^+, a]$
c) $[aa^+, a]$
d) $[a^+a, H]$
e) $[a^2a^+a, H]$
f) $[H, T]$
g) $[H, V]$

2. Działając operatorem anihilacji na funkcję odpowiadającą najniższemu stanowi energetycznemu oscylatora harmonicznego otrzymujemy wartość 0. Zatem, po rozwiązaniu równania $a\psi_0 = 0$ i unormowaniu otrzymanej funkcji, uzyskamy funkcję własną oscylatora w stanie podstawowym. Wykonaj opisane działania prowadzące do otrzymania jawnej postaci funkcji ψ_0.

3. Oblicz wartości następujących całek:
a) $\langle \psi_1 | a | \psi_2 \rangle$
b) $\langle \psi_1 | a^2 a^+ | \psi_2 \rangle$
c) $\langle \psi_1 | aa^+ | \psi_2 \rangle$
d) $\langle \psi_1 | (a + a^+)^2 a^+ | \psi_2 \rangle$

4. Wykaż, że operatory a i a^+ są operatorami niehermitowskimi, a będący ich iloczynem operator a^+a jest operatorem hermitowskim.