Institutionen för
Tillämpad fysik och
Teoretisk Fysik och Mekanik
Göteborg

Ett kvantdynamiskt system: Harmoniska Oscillatorn

Inledning. Ett kvantmekaniskt system beskrivs fullständigt av dess vågfunktion, $\psi(x,t)$. *Dynamiken*, dvs. tidsutvecklingen hos systemet, bestäms genom att lösa Schrödingerekvationen givet att systemet vid $t=0$ befinner sig i ett visst (känt) begynnelsetillstånd, $\psi(x,0)=F(x)$. Schrödingerekvationen för en partikel i en harmonisk potential lyder

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right]\psi(x,t) \tag{1}$$

Stationärtillstånd. Ekv. 1 löses genom att man först söker lösningar till det *stationära* egenvärdesproblemet (n=0, 1, 2, ...)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi_n(x)}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\phi_n(x)=E_n\phi_n(x) \tag{2}$$

Detta har (de normaliserade) vågfunktionslösningarna

$$\phi_n(x)=N_nH_n(\alpha x)\,e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}\qquad N_n=\sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^nn!}}\ ,\ \alpha^2=\frac{m\omega}{\hbar} \tag{3}$$

där H_n är n:te ordningens hermitepolynom. Energiegenvärdena är som bekant

$$E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)\ . \tag{4}$$

Lösningar till den tidsberoende Schrödingerekvationen svarande mot olika energiegenvärden (n=0, 1, 2, ...) kallas *energiegenfunktioner* och har formen

$$\psi_n(x,t)=\phi_n(x)\ e^{-\frac{i}{\hbar}E_nt} \tag{5}$$

En energiegenfunktion sägs representera ett *stationärtillstånd* hos systemet, eftersom motsvarande sannolikhetstäthet $P_n(x,t)\equiv|\psi_n(x,t)|^2=|\phi_n(x)|^2$ ej ändrar form med tiden. Ett system som vid $t=0$ har preparerats på ett sådant sätt att man med visshet känner dess energi (något E_n) kommer sålunda *ej* att uppvisa något dynamiskt beteende (dvs. fördelningen av mätvärden vid upprepade mätningar på systemet kommer att ha en given form som är oberoende av tidpunkten för mätningarna).

Uppgift 1: Studera de olika stationärlösningarna genom att preparera initialfördelningen så att samtliga skjutkontroller, utom den motsvarande det aktuella egentillståndet, står på noll.
Uppgift 2: Hur ser den klassiska sannolikhetsfördelningen för en harmonisk oscillator ut? Jämför med de kvantmekaniska fördelningarna för olika n.

Oscillerande vågpaket. Ofta kan ett (verkligt) kvantmekaniskt system ej prepareras till att befinna sig i ett tillstånd med en viss bestämd energi. Osäkerhet i prepareringsprocedur eller apparatur såväl som yttre störningar gör att ett begynnelsetillstånd i allmänhet beskrivs av en vågfunktion bestående av flera överlagrade (superponerade) energiegenfunktioner. Eftersom energiegenfunktionerna utgör en bas i ett ortonormerat funktionsrum kan varje godtyckligt valt begynnelsetillstånd uttryckas som en sådan superposition. För ett fripartikel-liknande system med kontinuerligt energispektrum görs vågpaket på fourierintegralform. Harmoniska oscillatorn har bundna tillstånd med ett diskret spektrum och en allmän lösning som skrivs som en summa

$$\psi(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \, \psi_n(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \, \phi_n(x) \; e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \tag{6}$$

Storleken av utvecklingskoefficienterna a_n bestäms av begynnelsetillståndet. Sannolikhetstätheten blir

$$\begin{aligned} P(x,t) &= |\psi(x,t)|^2 = \sum_{n,n'} a_n \, \phi_n(x) \; a_{n'} \phi_{n'}(x) \, e^{i(n-n')\omega t} = \{k = n - n'\} \\ &= \sum_{n=0}^{N} a_n^2 \, \phi_n^2(x) + 2 \sum_{k=1}^{N} \sum_{n=0}^{N-k} a_n \, \phi_n(x) \, a_{n+k} \, \phi_{n+k}(x) \; cos\,(k\,\omega\, t) \; . \end{aligned} \tag{7}$$

Vi har här begränsat summationen till ett begränsat antal (N st) egentillstånd. Slututtrycket kan skrivas enkelt på formen

$$P(x,t) = \sum_{k=0}^{N} f_k(x) \; cos\,(k\,\omega\, t) \tag{8}$$

där de x-beroende funktionerna $f_k(x)$ beror av initialvillkoret via koefficienterna a_n:

$$\begin{aligned} f_0(x) &= \sum_{n=0}^{N} a_n^2 \, \phi_n^2(x) \\ f_k(x) &= 2 \sum_{n=0}^{N-k} a_n \, \phi_n(x) \; a_{n+k} \, \phi_{n+k}(x) \quad k = 1, 2, 3, ..., N \, . \end{aligned} \tag{9}$$

Om mer än en koefficient är skild från noll erhålles sålunda tidsberoende lösningar.

Uppgift 3: Visa sista likheten i ekv. 7.
Uppgift 4: Studera systemets tidsberoende för olika initialvillkor. Börja med att preparera systemet genom superposition av två stationärtillstånd. Öka antalet energiegentillstånd efter hand. Studera olika viktfördelningar.
Uppgift 5: Vilken fördelning ger en rörelse hos vågpaketet som mest liknar en klassisk harmonisk oscillator?

Till er hjälp har ni två olika program som gör i princip samma sak. Det första är skrivet i C. Det andra är skrivet i Matlab. Ni kan själva jämföra prestanda, överskådlighet etc. Matlab-programmet tog c:a 2 timmar att skriva och testa. C-programmet tog längre tid...

För frågor och handledning kan ni vända er till Carlo Ruberto.

Grafiskt demonstrationsprogram 1: Handhavande

Hämta programet "oscillator" från Kvant-hemsidan. Ge kommandot:

oscillator

Programmet startar automatiskt. Placera fönstret på skärmen och tryck på vänster knapp på musen. En kontrollpanel och ett grafiskt fönster kommer upp på skärmen. Kontrollpanelens *knappar* och *skjutreglage* manövreras med en *pil-markör*, som med hjälp av musen förflyttas till önskad kontroll, med musens *vänstra* tryckknapp dras skjutreglagen till önskad nivå.

A. Initiering av begynnelsevillkor. Använd kontrollpanelens skjutkontroller för att initiera (preparera) ett begynnelsetillstånd. När önskad fördelning erhållits, klicka med pilen på *kontrollknappen* [**Prep**]. Programmet beräknar nu vågfunktionerna för ett antal tidpunkter (som en förberedelse till den grafiska presentationen), vilket tar ca. 1 sekund.

B. Starttillståndets rumsberoende ritas automatiskt ut på den grafiska delen av skärmen.

C. Stegning framåt i tiden kan göras genom att klicka på knappen [**Steg**] upprepade gånger.

D. Kontinuerlig tidsutveckling: använd [**Run**]. Rörelsen avstannar efter ca. 10 sekunder.

E. Tidssteglängden varieras med **Speed**-kontrollen.

Avloggning. Programmet stannas med kontrollknappen [**Quit**].

Grafiskt demonstrationsprogram 2: Handhavande

Hämta Matlab-filen "oscill.m" från Kvant-hemsidan. Starta Matlab och kör programmet genom att skriva "oscill" när ni är inne i Matlab. Starta er favorittexteditor för att kunna ändra i "oscill.m". Ni kan t ex ändra på definitionen av variabeln init (motsvarar skjutreglagen i program 1).