1.

Viimeksi: Ehrenfestin periaate, tiheysmatriisi, säilymislait & symmetriat

Nyt: Schrödingerin yhtälön ratkaisu, harmonisen oskillaattori

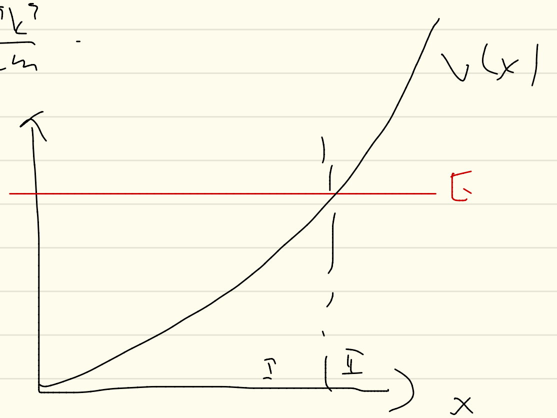
1-ulotteisen Schrödingerin yhtälön yleisiä ominaisuuksia.

$$\boxed{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right]\varphi(x)=E\varphi(x)}$$

eli $\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}=\varphi_{xx}=-k^2(x)\varphi$, $\frac{\hbar^2 k^2(x)}{2m}=E-V(x)$

tässä energia on jaettu liike- ja potentiaalienergiaan $E=T+V$

$T=\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$.

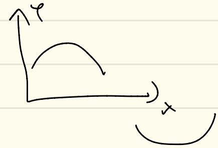


alueessa I: $T>0$

alueessa II: $T<0$

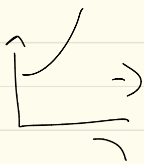
$\varphi_{xx}=-k^2(x)\varphi$ $\qquad$ $\varphi_{xx}=+k^2(x)\varphi$

- Jos liike-energia positiivinen: $\begin{cases}\varphi>0 \Rightarrow \varphi_{xx}<0\\ \varphi<0 \Rightarrow \varphi_{xx}>0\end{cases}$



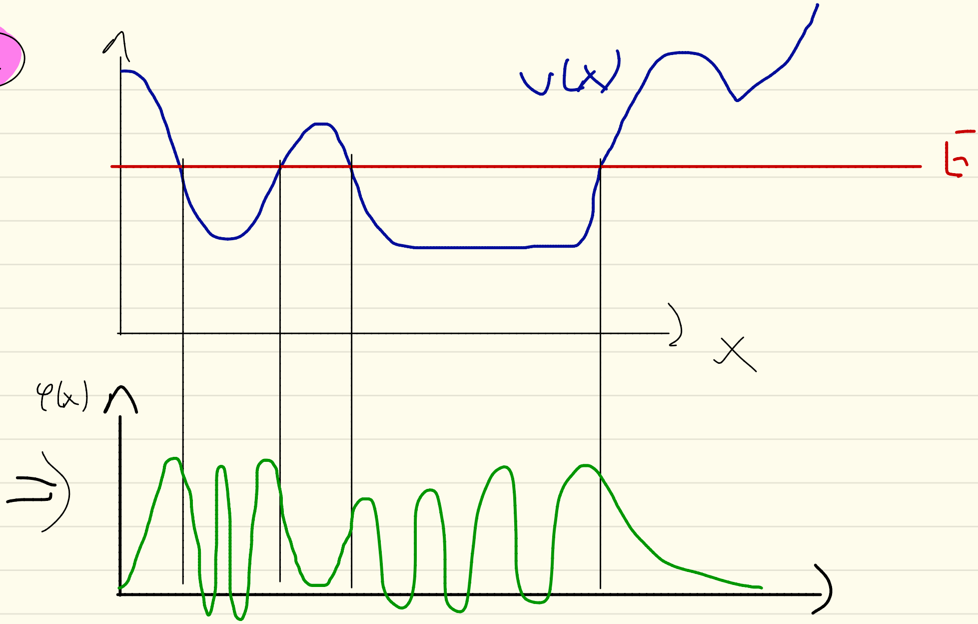
$\Rightarrow \varphi$ voi oskilloida

- Jos liike-energia negatiivinen: $\begin{cases}\varphi>0 \Rightarrow \varphi_{xx}>0\\ \varphi<0 \Rightarrow \varphi_{xx}<0\end{cases}$



→ ei oskilloi

2.

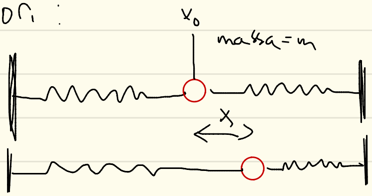


Klassisessa fysiikassa hiukkasella ei ole asiaa alueisiin missä liike-energia olisi negatiivinen.

Tämä on siis uusi kvanttimekaniikan mukana tullut asia.

· Tämä oli kvalitatiivista. Entä "the real thing"?

3. Harmoninen oskillaattori:



- $m\dfrac{d^2x}{dt^2} = -Kx$

K = jousivakio $= m\omega_0^2$

$\Rightarrow \dfrac{d^2x}{dt^2} + \omega_0^2 x^2 = 0$, kerrotaan $\dot{x} = \dfrac{dx}{dt}$:llä

$\Rightarrow \dot{x}\ddot{x} + \omega_0^2 \dot{x} x^2 = \dfrac{d}{dt}\left[\frac{1}{2}\dot{x}^2 + \omega_0^2 x^2\right] = 0$

$\Rightarrow \dfrac{E}{m} = \frac{1}{2}(\dot{x}^2 + \omega_0^2 x^2) \Rightarrow E = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 + \frac{K}{2}x^2$ = liikevakio

Kun hiukkanen pysähtyy (kääntymispisteissä), energia pelkästään potentiaalista $E = \frac{K}{2}x_0^2$.

$x^2 > x_0^2 \Rightarrow$ negatiivinen liike-energia

$\Rightarrow$ klassisesti kielletty $(m>0,\ v^2>0,\ \frac{1}{2}>0)$

- Entä kvanttimekaanisesti?
- Miksi? 1) Harmoninen oskillaattori helpoin tapa kuvata hiukkasten välisiä vuorovaikutuksia. (Esim. kiinteä aine)

2) Ratkeaa analyyttisesti

3) Teoreettinen pohja toiseen kvantisointiin eli kenttien kvanttiteoriaan. Esim.

$$\boxed{H = \frac{p^2}{2m} + \frac{K}{2}x^2 \Leftrightarrow \frac{H}{V} = \frac{B^2}{2\mu_0} + \frac{1}{2}\varepsilon_0 E^2},$$

E = sähkökenttä
B = magneettikenttä
V = tilavuus

4) Luomis- ja hävitysoperaattorit tutuksi

$\Rightarrow$ OIKEASTI NIITÄ TARVITAAN !

4. $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2$, $p \to \hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ $\Rightarrow$ $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{k}{2}x^2\psi = E\psi$

Kun $E > \frac{kx^2}{2}$ (klassisesti sallittu alue)

$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = \psi_{xx} = -k^2\psi$, kun $\frac{\hbar^2 k^2(x)}{2m} = E - \frac{k}{2}x^2 > 0$

$\Rightarrow$ ratkaisu oskilloi

Kielletyssä alueessa, $E < \frac{kx^2}{2}$:

$\psi_{xx} = k^2\psi$, $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{kx^2}{2} - E > 0$

$\Rightarrow$ ei oskilloi

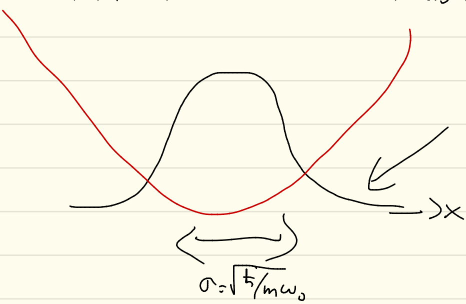
Jos $\frac{kx^2}{2} \gg E$ (aina totta riittävän kaukana) $k = m\omega_0^2$

$\psi_{xx} = \frac{mk}{\hbar^2}x^2\psi = \frac{x^2}{\sigma^4}\psi$, $\sigma^2 = \frac{\hbar}{m\omega_0} = 1/\beta^2$ $\Rightarrow$ karakteristinen pituusskaala

Valitaan σ pituuden yksiköksi : $\xi = x/\sigma$ $\Rightarrow$ $\frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{1}{\sigma^2}\frac{\partial^2}{\partial \xi^2}$ & $x^2 \to \sigma^2\xi^2$

$\frac{\partial^2\psi}{\partial\xi^2} = \xi^2\psi$, jolla ratkaisu $\psi = Ae^{\pm\frac{\xi^2}{2}} = Ae^{\pm\frac{1}{2}\left(\frac{x}{\sigma}\right)^2}$

vain (-)-merkkinen ratkaisu normittuu eli $\int|\psi|^2 < 1$



nyt tunnemme ratkaisun käytöksen jossain täällä.

5. Luomis- ja hävitysoperaattorit:

- Ratkaistaan harmoninen oskillaattori algebrallisesti
- Näyttää kummalliselta, mutta lopussa osoittautuu toimivaksi.

• $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{kx^2}{2}\psi=E\psi$, $\psi=Af(x)e^{-x^2/2\sigma^2}$ ⇒ sijoita Schrödingerin yhtälöön ⇒ yhtälö $f(x)$:lle ⇒ ehkä ratkeaa $f(x)=\sum_{n=0}^{M}a_nx^n\ldots$?

ei mennä nyt tänne vaan määritellään operaattorit

$$\hat{a}=\frac{1}{\sqrt{2}\sigma}\left(\hat{x}+\frac{i\hat{p}}{m\omega_0}\right) \quad \& \quad \hat{a}^{+}=\frac{1}{\sqrt{2}\sigma}\left(\hat{x}-\frac{i\hat{p}}{m\omega_0}\right)$$

Näille voimassa kommutaatiorelaatio $\boxed{[\hat{a},\hat{a}^{+}]=1}$ ts. $\hat{a}\hat{a}^{+}=1+\hat{a}^{+}\hat{a}$

Tämä relaatio seuraa kommutaattorista $[\hat{x},\hat{p}]=i\hbar$ (kannattaa laskea kerran läpi)

Operaattorit $\hat{a}$ ja $\hat{a}^{+}$ voidaan myös kääntää: $\hat{x}=\left(\frac{\hat{a}+\hat{a}^{+}}{\sqrt{2}}\right)\sigma$, $\hat{p}=\frac{m\omega_0}{i}\sigma\frac{(\hat{a}-\hat{a}^{+})}{\sqrt{2}}$

$$\Rightarrow \boxed{\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{k\hat{x}^2}{2}=\hbar\omega_0\left(\hat{a}^{+}\hat{a}+1/2\right)}$$

Laskareissa

Ongelma $\hat{H}$:n ominaistilojen löytämisestä siis sama kuin ongelma operaattorin $\hat{N}=\hat{a}^{+}\hat{a}$ ominaistilojen löytämisestä!

Olkoon ψ_n $\hat{N}$:n ominaistila, jonka ominaisarvo on n.
Ts. $\hat{N}\psi_n=n\psi_n$. Operoidaan $\hat{a}\psi_n$:ään $\hat{N}$:llä

$$\hat{N}\hat{a}\psi_n=\hat{a}^{+}\hat{a}\hat{a}\psi_n=(\hat{a}\hat{a}^{+}-1)\hat{a}\psi_n=\hat{a}(\hat{a}^{+}\hat{a}-1)\psi_n$$
$$=\hat{a}(\hat{N}-1)\psi_n=\hat{a}(n-1)\psi_n=(n-1)\hat{a}\psi_n$$

⇒ $\hat{a}\psi_n$ on $\hat{N}$:n ominaistila ominaisarvolla $n-1$.

6.

ts. $\hat{a}\varphi_n = \varphi_{n-1}$ (+normalisointi $\int|\varphi_{n-1}|^2 dx = 1$)

Samalla tavalla $\hat{a}\varphi_{n-1} = \varphi_{n-2}$ ...
Tämän vuoksi operaattoria $\hat{a}$ kutsutaan hävitys/lasku operaattoriksi

Vastaavasti $\hat{N}a^{+}\varphi_n = (n+1)a^{+}\varphi_n$

$\Rightarrow \hat{a}^{\dagger}\varphi_n = \varphi_{n+1}$ (+normalisointi)

$\Rightarrow \hat{a}^{\dagger}$ = luomis/nosto - operaattori.

$\hat{H}$ on summa kahdesta hermiittisen operaattorin neliöstä.
Hermiittisellä operaattorilla reaaliset om.arvot

$\Rightarrow \langle H \rangle \geq 0$

$\hat{H}\varphi_n = \hbar\omega_0(\hat{N}+1/2)\varphi_n = \hbar\omega_0(n+1/2)\varphi_n \Rightarrow \langle\varphi_n|\hat{H}|\varphi_n\rangle = \hbar\omega_0(n+1/2) \geq 0$

$\Rightarrow n \geq -1/2$

ts. om.tilat joille $n < -1/2$ häviävät. $\Rightarrow \underline{\hat{a}\varphi_0 = \varphi_{-1} = 0}$ (*)

$N\varphi_0 = \hat{a}^{\dagger}\hat{a}\varphi_0 = 0 = 0\,\varphi_0 \Rightarrow \hat{N}$:n om.arvo φ_0:ssa on 0.

$N\hat{a}^{+}\varphi_0 = a^{+}aa^{+}\varphi_0 = \hat{a}^{\dagger}(\hat{a}^{+}\hat{a}+1)\varphi_0 = a^{+}\varphi_0$

$= 1 \cdot a^{+}\varphi_0 = \varphi_1$

$\Rightarrow \varphi_1$:lle $\hat{N}$:n ominaisarvo on 1.

$\ldots \Rightarrow \hat{H}\varphi_n = \underbrace{\hbar\omega_0(n+1/2)}_{\text{energian ominaisarvot}}\varphi_n \quad (n = 0, 1, 2 \ldots)$

Mutta onko (*):llä ratkaisua?

↘

7. oliko $\hat{a}\varphi_0 = 0$:lla ratkaisua?

$$\Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}\sigma}\left(\hat{x} + \frac{\hbar}{m\omega_0}\frac{\partial}{\partial x}\right)\varphi_0 = 0$$, pituuden yksikkö $\sigma = \sqrt{\hbar/m\omega}$

$$\Rightarrow \xi = x/\sigma$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{\partial}{\partial \xi}\right)\varphi_0 = 0$$

Ratkaisu meditoimalla $\varphi_0 = A_0 e^{-\xi^2/2}$.

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\varphi_0|^2 dx = A_0^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi = \sqrt{\pi}A_0^2 \Rightarrow \underline{\varphi_0(\xi) = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\xi^2/2}} \quad \square$$

Dimensiollisessa muodossa: $\underline{\varphi_0(x) = \left(\frac{1}{\pi\sigma^2}\right)^{1/4} e^{-\frac{1}{2}(x/\sigma)^2}}$

Törmäsimme tähän jo aikaisemmin asymptoottisena ratkaisuna $\Rightarrow$ kaikki om. tilat tämän näköisiä kun $x \gg \sigma$.

$$\varphi_1 = a^\dagger\varphi_0, \quad \varphi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{a}^\dagger\varphi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}^\dagger)^2\varphi_0 \ldots \Rightarrow \varphi_n = 1/\sqrt{n!}\,(\hat{a}^\dagger)^n\varphi_0$$

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{\partial}{\partial\xi}\right) : \quad \varphi_1 = A_1\left(\xi - \frac{\partial}{\partial\xi}\right)e^{-\xi^2/2} \Rightarrow \varphi_1 = A_1 2\xi e^{-\xi^2/2}$$

$$\int |\varphi_1| d\xi = 1 \Rightarrow A_1 = \sqrt{\frac{1}{2\sqrt{\pi}}}$$

Ominaistilat: $\varphi_n = A_n\left(\xi - \frac{\partial}{\partial\xi}\right)^n\varphi_0$

$\left(\xi - \frac{\partial}{\partial\xi}\right)^n\varphi_0$ = exponentti termi $\times$ n:n kertaluvun polynomi $H_n(\xi)$

$H_n(\xi)$ - Hermiten polynomi : $\begin{cases} H_0 = 1 \\ H_1 = 2\xi \\ H_2 = 4\xi^2 - 2 \\ \vdots \end{cases}$ $H_n''(x) - 2xH_n'(x) + 2nH_n = 0$

katso taulukosta

vaihtoehtoisesti

$$\langle\varphi_n|\varphi_n\rangle = 1 \Rightarrow A_n = \sqrt{\frac{1}{2^n n!\sqrt{\pi}}}$$

Demo $\hat{a}^\dagger, \hat{a}$ operaattoreista

8.

φ_n:t muodostavat ortonormeeratun kannan (Hermiittisen operaattorin ominaistiloja)

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^* \varphi_l \, d\xi = \langle \varphi_n | \varphi_l \rangle = \delta_{nl}$$

Voidaan osoittaa, että ...

$$\begin{cases} \hat{a}\varphi_n = \sqrt{n}\,\varphi_{n-1} \\ a^+\varphi_n = \sqrt{n+1}\,\varphi_{n+1} \end{cases} \xRightarrow{\text{Dirac}} \begin{matrix} \hat{a}|\varphi_n\rangle = \sqrt{n}\,|\varphi_{n-1}\rangle \\ \hat{a}^+|\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1}\,|\varphi_{n+1}\rangle \end{matrix}$$

Merkkiä "φ" on oikeastaan turha kirjoittaa. Uusi notaatio

$$\boxed{\begin{matrix} \hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle \\ \hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \end{matrix}}$$

Tarkistetaan, että $\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$ niin kuin pitäisi olla.

$$\hat{a}^+\hat{a}|n\rangle = \hat{a}^+\sqrt{n}\,|n-1\rangle = \sqrt{n}\sqrt{n-1+1}\,|n\rangle = n|n\rangle \quad \text{OK!}$$

Miten laskisit esim. $\langle x\rangle$:n : Tapa 1 : $\langle x\rangle = \langle n|\hat{x}|n\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |\varphi_n(x)|^2 x = \ldots$

Tapa 2: $\langle x\rangle = \langle n|\hat{x}|n\rangle = \frac{\sigma}{\sqrt{2}}\langle n|\hat{a}+\hat{a}^+|n\rangle = \frac{\sigma}{\sqrt{2}}\left\{\sqrt{n}\,\underbrace{\langle n|n-1\rangle}_{0} + \sqrt{n+1}\,\underbrace{\langle n|n+1\rangle}_{0}\right\}$

$= 0$

Samalla tavalla esim. $\langle p\rangle = 0$, $\langle x^2\rangle = ?$, $\langle p^2\rangle = ?$ jne...

9.

Siis kuinka $\varphi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n \varphi_0$?

lukumäärä/numero-operaattorin ominaistilalle

$\hat{N}\varphi_n = \hat{a}^\dagger \hat{a}\varphi_n = n\varphi_n$, toisaalta $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \Rightarrow aa^\dagger = 1 + a^\dagger a$

Jos ominaistila $\varphi_n = c a^\dagger \varphi_{n-1}$, $c \in \mathbb{R}$

$$1 = \langle \varphi_n | \varphi_n \rangle = c^2 \langle \hat{a}^\dagger \varphi_{n-1} | a^\dagger \varphi_{n-1} \rangle = c^2 \langle \varphi_{n-1} | \underbrace{\hat{a}\hat{a}^\dagger}_{1+\hat{a}^\dagger \hat{a} = 1+\hat{N}} \varphi_{n-1} \rangle$$

$$1 = c^2 \langle \varphi_{n-1} | 1+\hat{N} | \varphi_{n-1} \rangle = c^2 \langle \varphi_{n-1} | 1+n-1 | \varphi_{n-1} \rangle$$

$$1 = c^2 n \langle \varphi_{n-1} | \varphi_{n-1} \rangle \Rightarrow c = 1/\sqrt{n}$$

$$\Rightarrow \varphi_n = \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{a}^\dagger \varphi_{n-1} = \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{a}^\dagger \left(\frac{1}{\sqrt{n-1}} \hat{a}^\dagger \varphi_{n-2} \right) = \dots = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n \varphi_0 \quad \square$$

Kuinka $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle$?

$$\hat{a}|n\rangle = a \frac{1}{\sqrt{n}} a^\dagger |n-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} (1+\hat{N}) |n-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} (1+n-1)|n-1\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle \quad \square$$

Kuinka $a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$?

$$|n+1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n+1}} \hat{a}^\dagger |n\rangle \Rightarrow a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \quad \square$$