Kvanttimekaniikka: Luento 8

Martikainen Jani-Petri

Viimeksi

- Aikakehitystä
- Ehrenfestin periaate (sovellus liikemäärälle antoi jotain mikä näytti Newton II:lta)

Tänään

- Harmoninen oskillaattori
- Luomis- ja hävitysoperaattorit

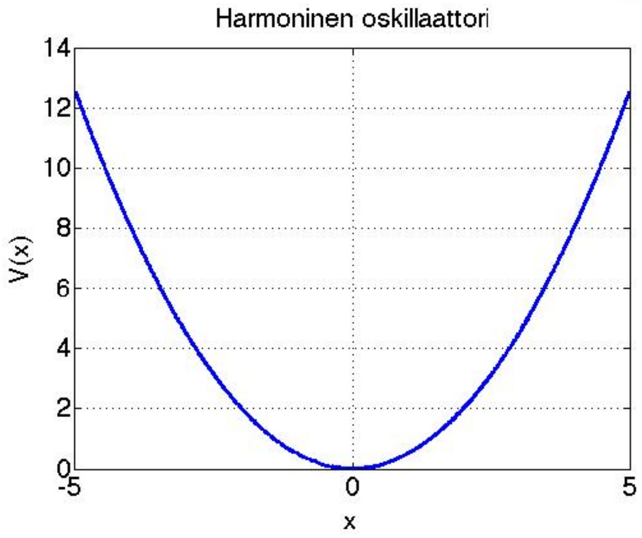
Harmoninen oskillaattori

- Potentiaali

$$V(x) = \frac{m\omega^2}{2}x^2$$

- Ajasta riippumaton Schrödingerin yhtälö energian ominaistiloille

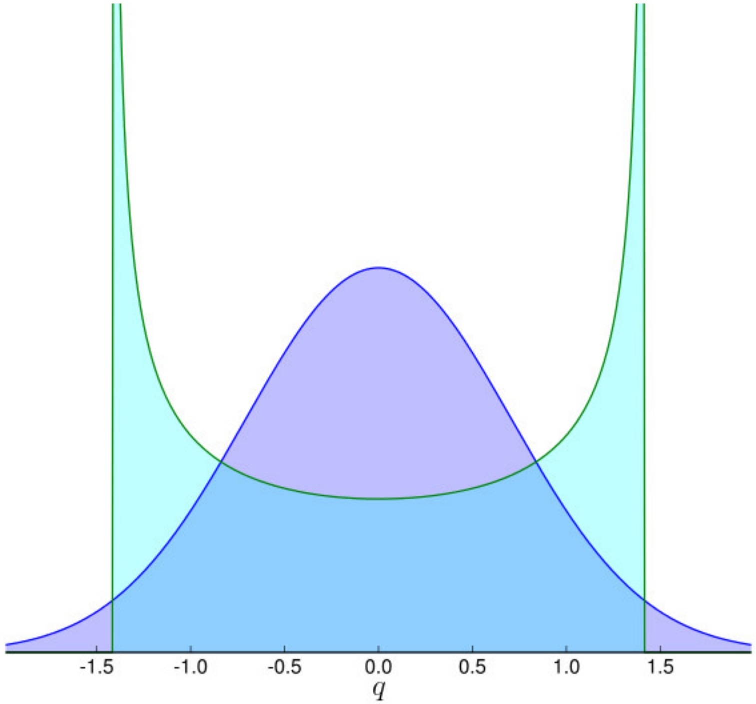
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2\psi(x) = E\psi(x)$$



Klassinen vs. kvantti

- Kvanttimekaniikassa ns. ”zero-point energy”**: perustilan energia ei ole nolla**
- Tilojen **kvantittuminen**
- Todennäköisyysjakauma hiukkasten paikalle? Yhdessä…
- …hyvin erilainen…

Todennäköisyysjakauma
löytää hiukkanen jossain harmonisessa oskillaattorissa…Miksi klassinen näyttää tuolta? Miksi divergenssi?



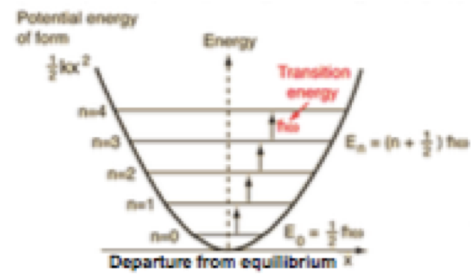
Harmoninen oskillaattori ...miksi

Materiaalifysiikan kurssin alusta...

Einsteinin malli

Kvanttimekaaninen harmoninen oskillaattori

Energiatasot (1D): $E_n = \hbar\omega(n+1/2) \quad , \quad \omega = \sqrt{\kappa/m}$



B & B Luku 20:

Partitiofunktio (1D): $Z = \sum_{n\geq 0} e^{-\beta E_n} \quad , \quad \beta = 1/(k_B T)$

Energian odotusarvo (1D): $\langle E(T)\rangle = -\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial \beta}$

$$\boxed{\langle E(T)\rangle = \hbar\omega\left[\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega}-1}+\frac{1}{2}\right]}$$

$\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega}-1} = n_B(\beta\hbar\omega)$ Bose-Einstein miehitys (B & B, Luku 29)

Viritys keskimäärin tasolle n_B tai bosoni-orbitaalilla $\hbar\omega$ n_B bosonia

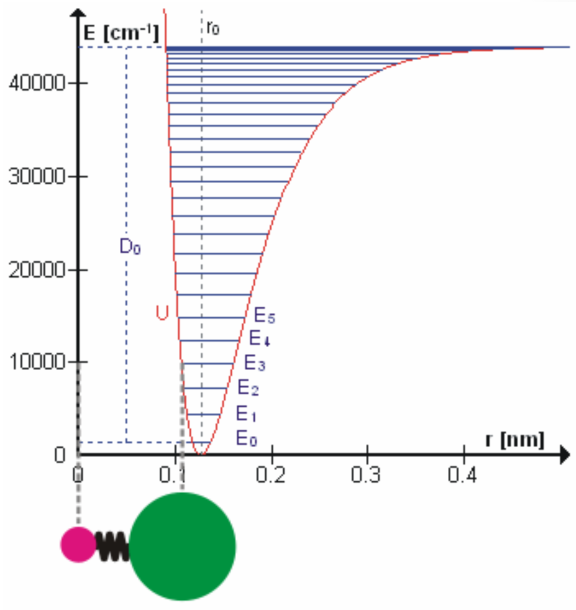
Ominaislämpö (1D): $C = \frac{1}{N}\frac{\partial N\langle E(T)\rangle}{\partial T} = -k_B\beta^2\frac{\partial\langle E(T)\rangle}{\partial \beta} = k_B(\beta\hbar\omega)^2\frac{e^{\beta\hbar\omega}}{\left(e^{\beta\hbar\omega}-1\right)^2}$

Aalto University
School of Science

Harmoninen oskillaattori:miksi?

- Ratkeaa analyyttisesti
- Voit approksimoida monia hankalampia potentiaaleja sillä
- Sähkömagneettisen kentän energiatiheys?

$$u = \frac{\epsilon_0}{2}E^2 + \frac{1}{2\mu_0}B^2$$

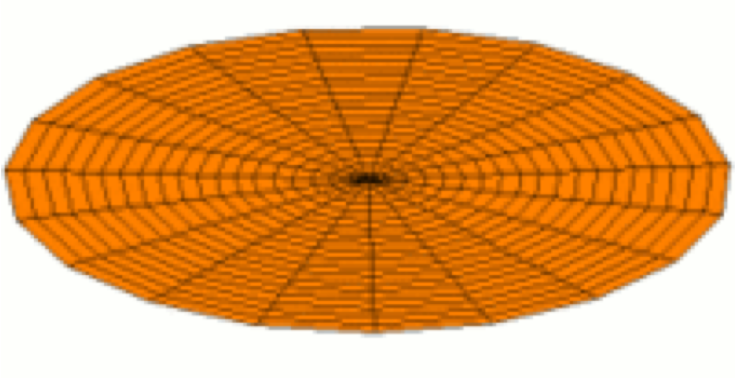


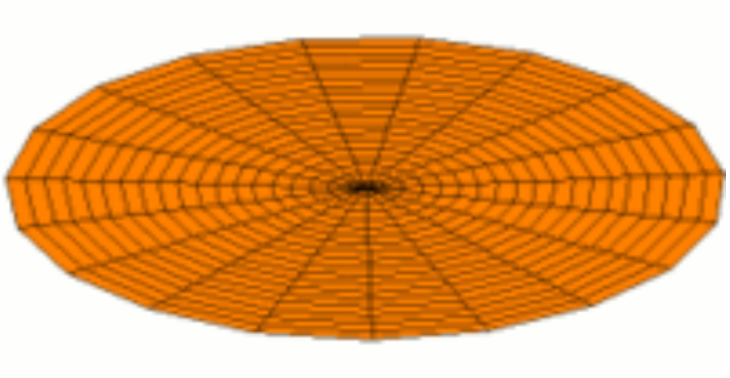
- Huomaa, että kunhan määrittelet muuttujat sopivasti tämä näyttää harmoniselta oskillaattorilta
- Kentän kvantisointi→ harmonisia oskillaattoreita!

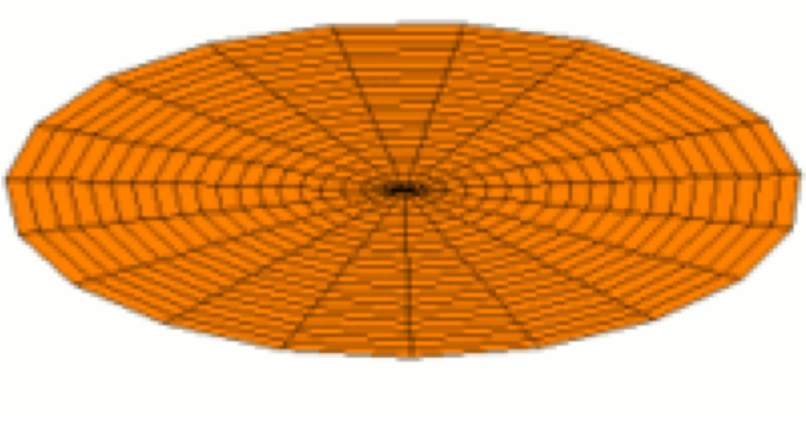
Harmoninen oskillaattori:miksi?

Lasereiden ymmärrys….

Harmoninen oskillaattori: normaalimoodit

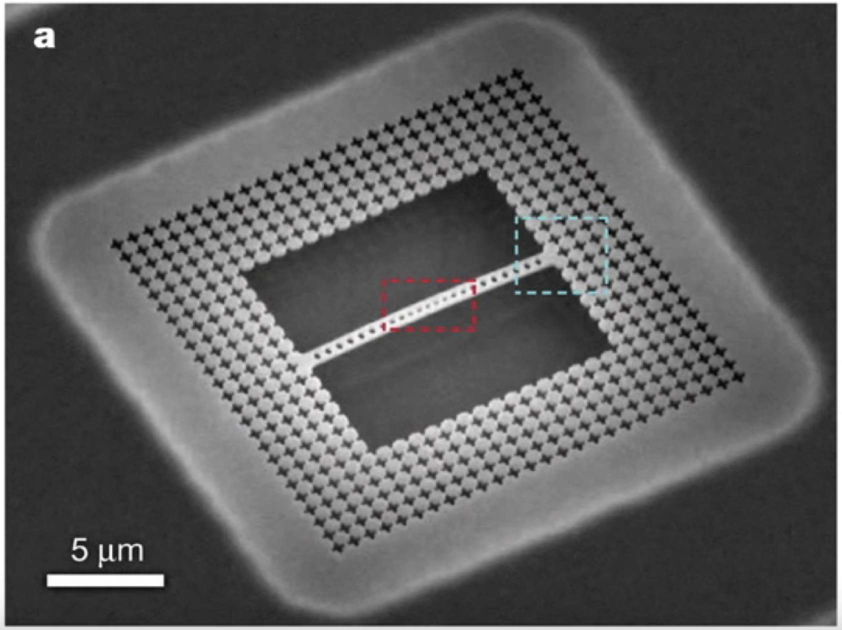






Tätä sivuavaa Aallossa ja muualla

- Physical Review Letters Sillanpää et al.
- Mikromekaaninen resonaattori jäähdytetään melkein perustilaan
- Doing the impossible video… (https://www.youtube.com/watch?v=pktWhH6m_DM&list=PLhm1bauLfPNsjPsWda8RnYReOyXBs2kdW&index=11)



Itse asiassa…

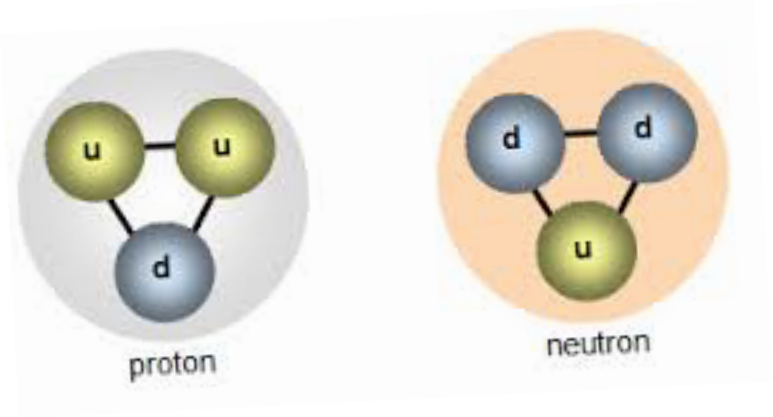
Jim Al-Khalili
@jimalkhalili

"The career of a young theoretical physicist consists of treating the harmonic oscillator in ever-increasing levels of abstraction."

4:32 p.m. · 01 Nov 16

Makroskooppinen harmoninen oskillaattori

$$\sigma = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$



Pieni!

Harmoninen oskillaattori

- Ratkaistaan nyt harmonisen oskillaattorin ominaistilat algebrallisesti
- Voi näyttää omituiselta, mutta tapa osoittautuu todella hyödylliseksi myöhemmin

Luomis- ja hävitysoperaattorit

- Määritellään operaattorit

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}\sigma}\left(\hat{x} + \frac{i\hat{p}}{m\omega}\right) \text{ havitys/annihilation}$$

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}\sigma}\left(\hat{x} - \frac{i\hat{p}}{m\omega}\right) \text{ luomis/creation}$$

- Näillä kommutaatiorelaatiot (tarkista myös itse!!):

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$$

Harmoninen oskillaattori

- Näiden operaattoreiden avulla voimme lausua Hamiltonin operaattorin uudessa muodossa (laskareissa)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} = \hbar\omega(\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1/2)$$

- Ongelma H:n ominaistiloista on siis sama kuin ongelma operaattorin

$$\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$$

ominaistiloista.

N on ns. numero-operaattori. Kohta selviää miksi.

Harmoninen oskillaattori

- Haetaan N:n ominaistiloja joilla ominaisarvo n

$$\hat{N}\phi_n = n\phi_n$$

- Toisaalta (ks. muistiinpanot!)

$$\hat{N}\hat{a}\phi_n = \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}\phi_n = (\hat{a}\hat{a}^\dagger - 1)\hat{a}\phi_n = \hat{a}(\hat{a}^\dagger\hat{a} - 1)\phi_n$$

$$\ldots \hat{a}(n-1)\phi_n = (n-1)\hat{a}\phi_n$$

- Eli $\hat{a}\phi_n$ oli myös N:n ominaistila, mutta ominaisarvolla n-1
- Siis $\hat{a}\phi_n = \phi_{n-1}$ kunhan muistamme vielä normalisoida
- Vastaavasti luomisoperaattorilla

$$\hat{a}^\dagger\phi_n = \phi_{n+1}$$

Harmoninen oskillaattori

- Harmoninen oskillaattori oli kahden hermiittisen operaattorin neliöiden summa
- Hermiittisillä reaaliset ominaisarvot joten voimme olla varmoja, että

$$\langle \hat{H} \rangle \geq 0$$

$$\langle \phi_n | \hat{H} | \phi_n \rangle = \hbar\omega(n + 1/2)$$

$$\rightarrow n \geq -1/2$$

- Tästä saamme myös

$$\hat{a}\phi_0 = \phi_{-1} = 0$$

Harmoninen oskillaattori

- Siispä

$$\hat{N}\phi_0 = \hat{a}^\dagger \hat{a}\phi_0 = 0\phi_0$$

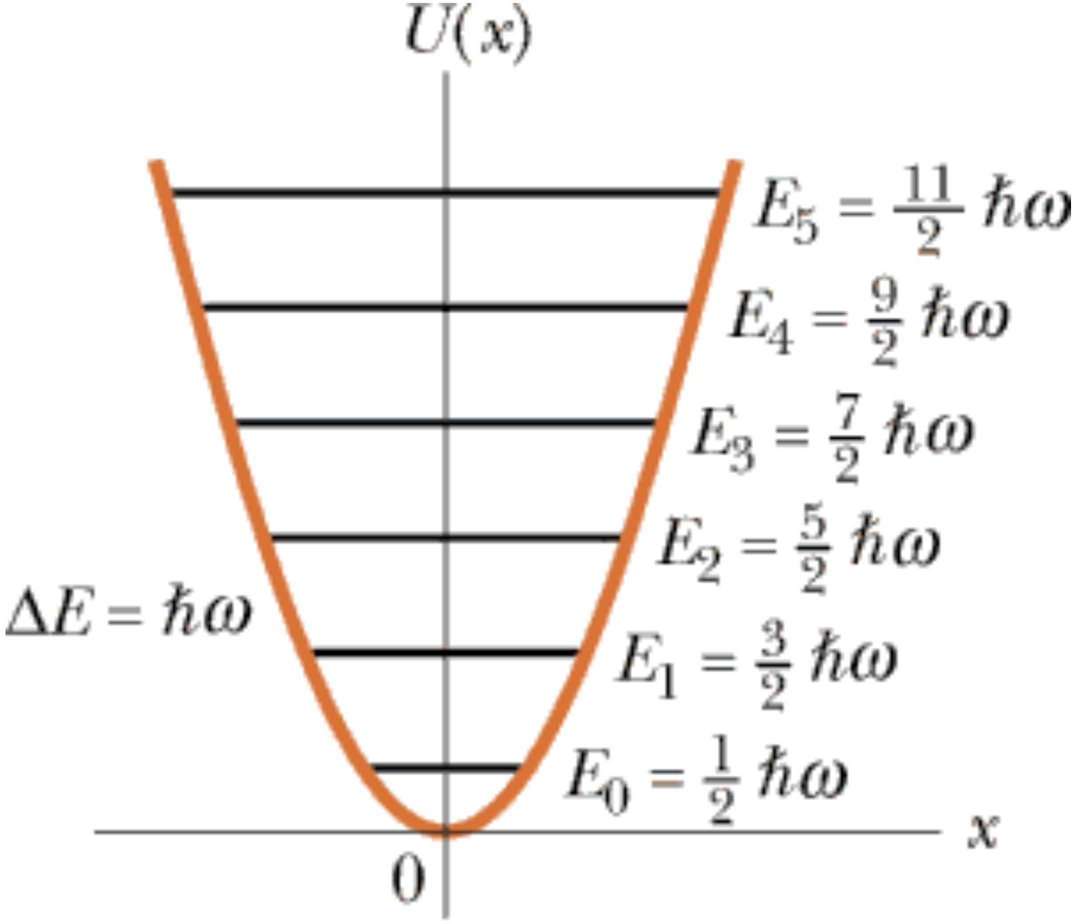
- …ja N:n ominaisarvo tuolla tilalla oli n=0.
- Siitä eteenpäin

$$\hat{N}\hat{a}^\dagger\phi_0 = \hat{a}^\dagger(\hat{a}^\dagger\hat{a}+1)\phi_0 = \hat{a}^\dagger\phi_0 = 1\phi_1$$

- Eli ϕ_1 :llä ominaisarvo 1…jne.

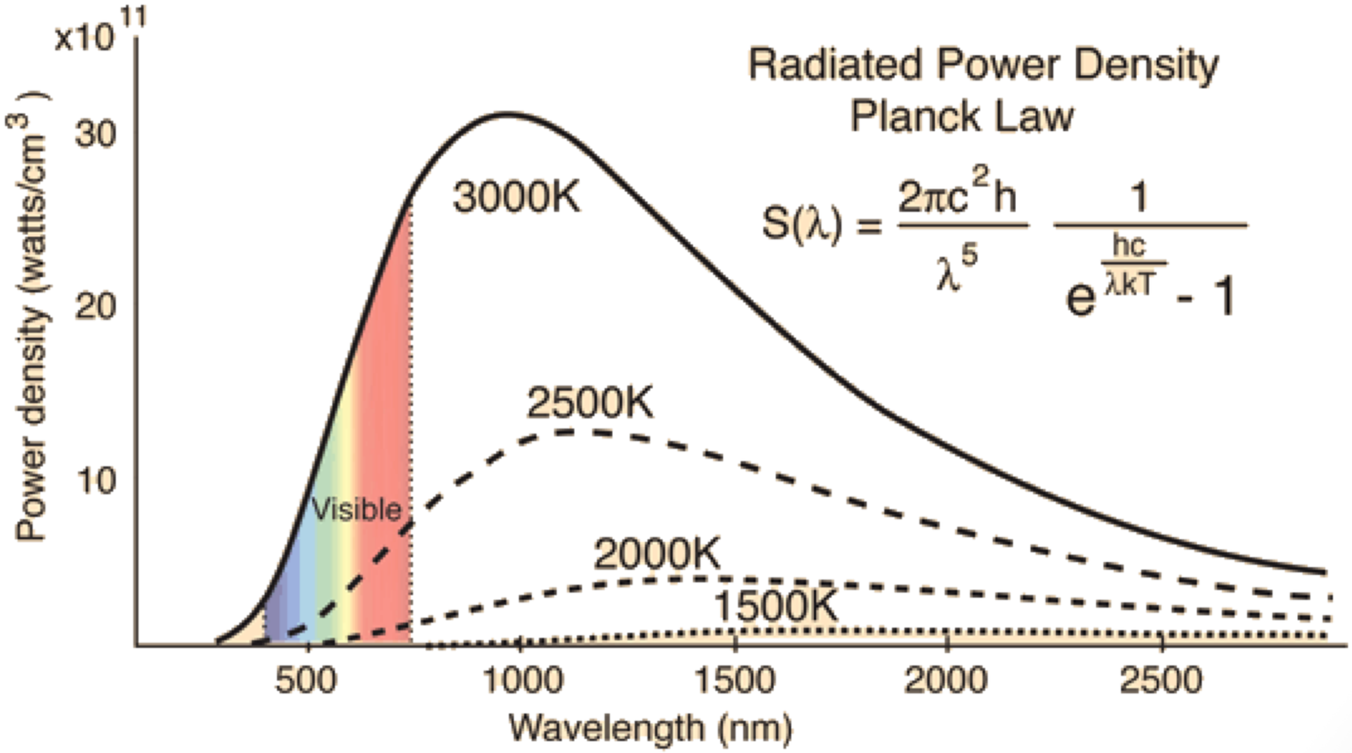
- N:n ominaisarvot ovat kokonaislukuja nollasta ylöspäin
- Energian ominaisarvot siis $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$

Energiatilat



Muistatko mustankappaleen?

Planck oletti kullekin taajuudelle diskreetit tilat $E_n = n\hbar\omega$



SM kenttä→ harmoniset oskillaatorit

→ It all makes sense now!

Harmoninen oskillaattori

- Mutta mutta ….oliko yhtälöllä

$$\hat{a}\phi_0 = \phi_{-1} = 0$$

ratkaisua?

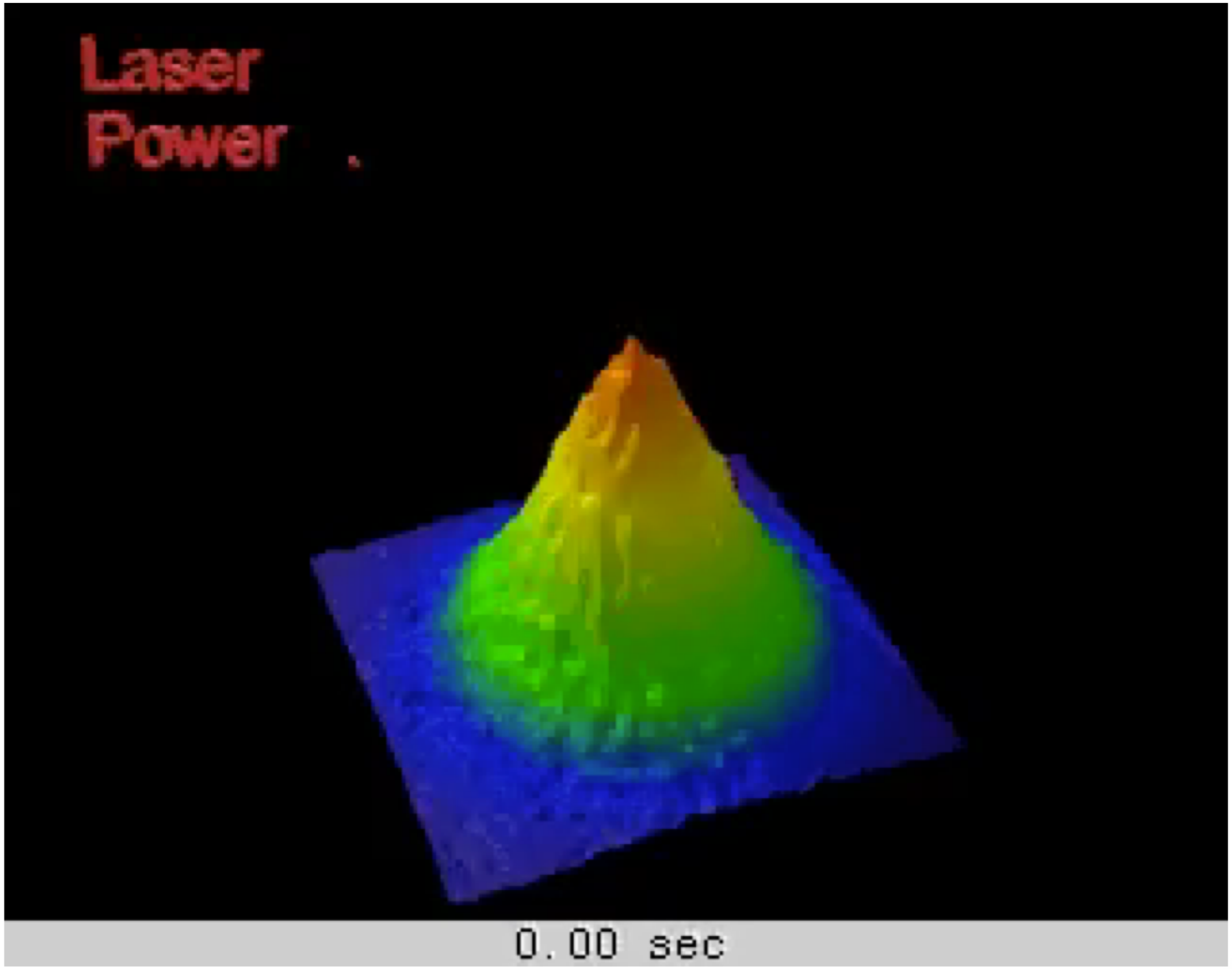
$$\frac{1}{\sqrt{2}\sigma}\left(\hat{x} + \frac{i\hat{p}}{m\omega}\right)\phi_0 = 0$$

- Muunnos $\zeta = x/\sigma$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\zeta + \frac{\partial}{\partial\zeta}\right)\phi_0(\zeta)$$

$$\rightarrow \phi_0(x) = \left(\frac{1}{\pi\sigma^2}\right)^{1/4} e^{-x^2/2\sigma^2}$$

Perustilalle oikeasti? : esimerkki



Ketterle et al. käyttäen jäähdytystä
ja optista dipoliloukkua (luento 10?)

Harmoninen oskilaattori

- Muut (normitetut) ominaistilat saa perustilasta operoimalla luomisoperaattorilla (miksi? taululla)

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n \phi_0(x)$$

- Rakenne on

$$\phi_n(x) \propto H_n(x/\sigma)e^{-x^2/2\sigma^2}$$

- Missä H_n on Hermiten polynomi. Ne löytää taulukoista, mutta pari alhaisinta voi toki laskea suoraan

$$H_0(\zeta) = 1 \ , H_1(\zeta) = 2\zeta \ , H_2(\zeta) = 4\zeta^2 - 2 \ldots$$

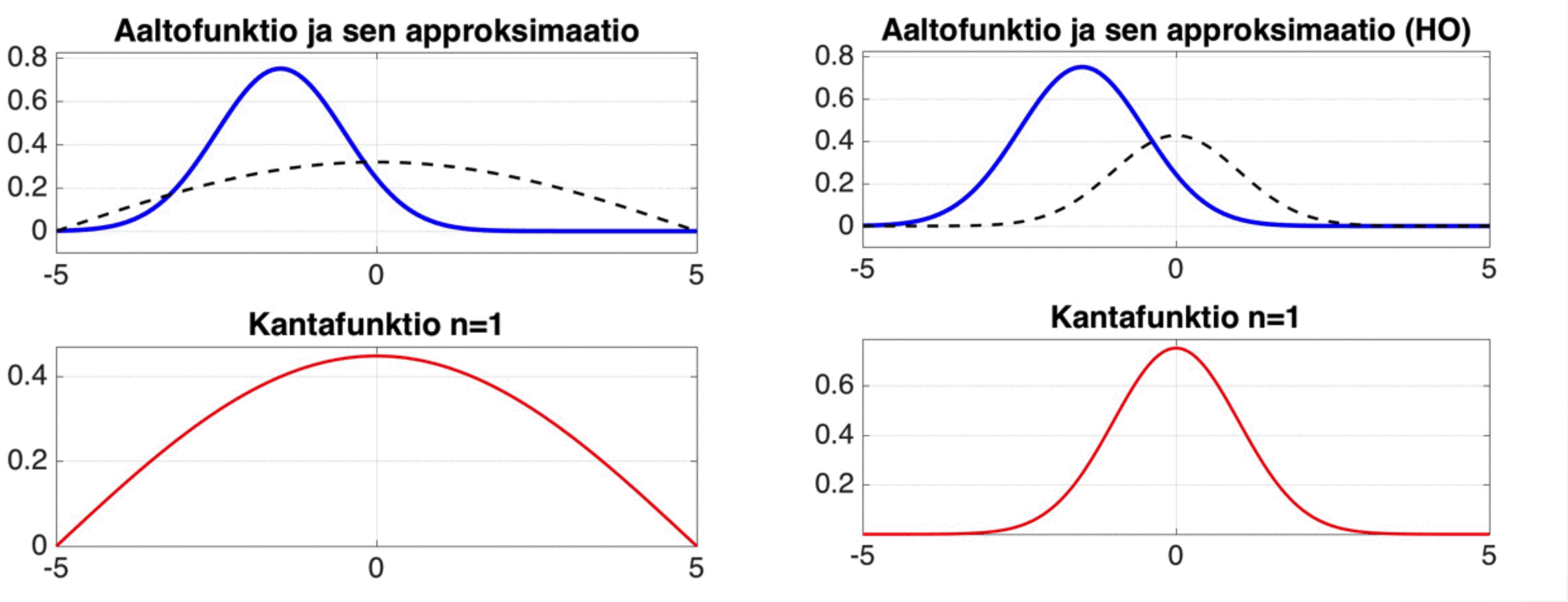
Demo näistä mathematicalla/matlabilla

Harmoninen oskillaattori

- Normituksen jälkeen nämä ominaistilat muodostavat ortonormeeratun kannan, jonka avulla voi periaatteessa esittää minkä tahansa funtion.

Harmoninen oskillaattori

- Saman funktion sarjakehitelmä laatikon ominaistilat vs. harmonisen oskillaattorin ominaistilat



Harmoninen oskillaattori

- Helpotetaan notaatiota määrittelemällä $\phi_n \to |n\rangle$
- Luomis- ja hävitysoperaattoreilla mm. seuraavat tärkeät ominaisuudet (taululla,muistiinpanot)…ymmärrä nämä!

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

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$$

Luomis- ja hävitysoperaattorit

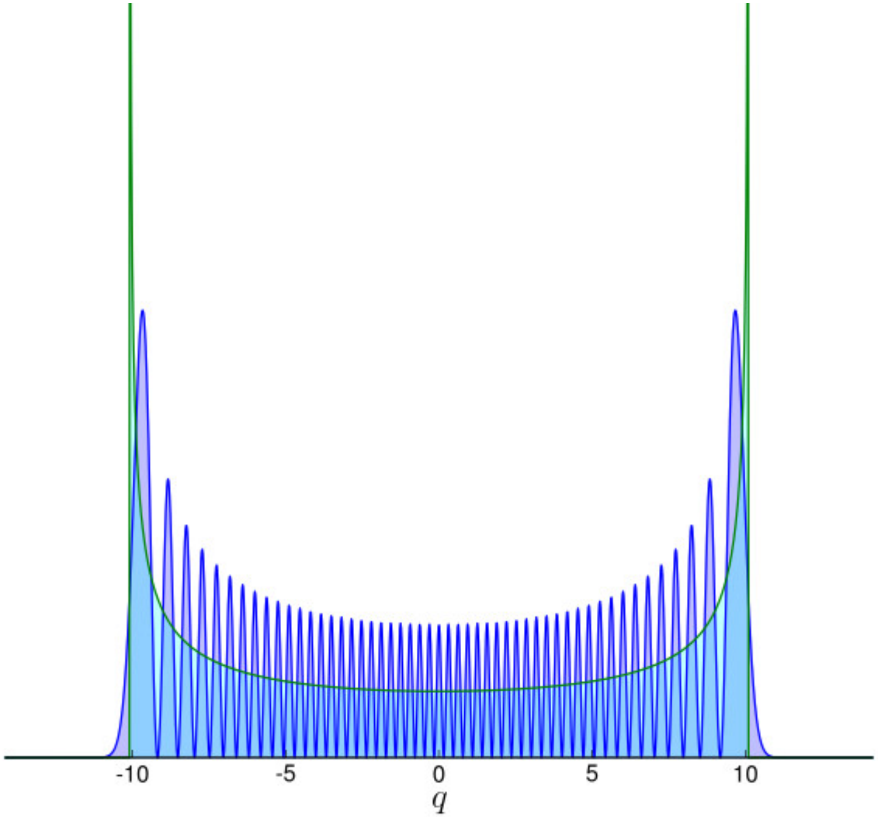
- Miten luomis- ja hävitysoperaattoreita voi käyttää odotusarvojen laskemiseen?
- …helppoa (taululla…video MyCourses)

Opettaja

Opiskelija

Klassinen vs. kvantti

- Kun tarkastelemme korkeampia viritystiloja, todennäköisyysjakauma alkaa muuten näyttää yhä klassisemmalta!

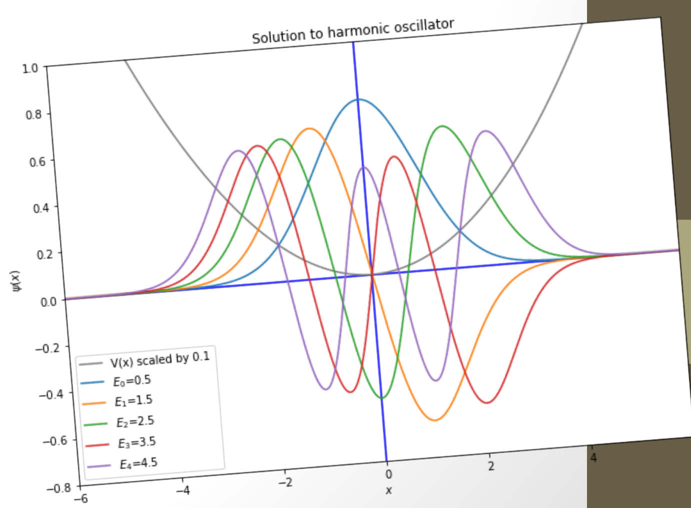


Kvanttimekaniikkaa: Jupyter notebook

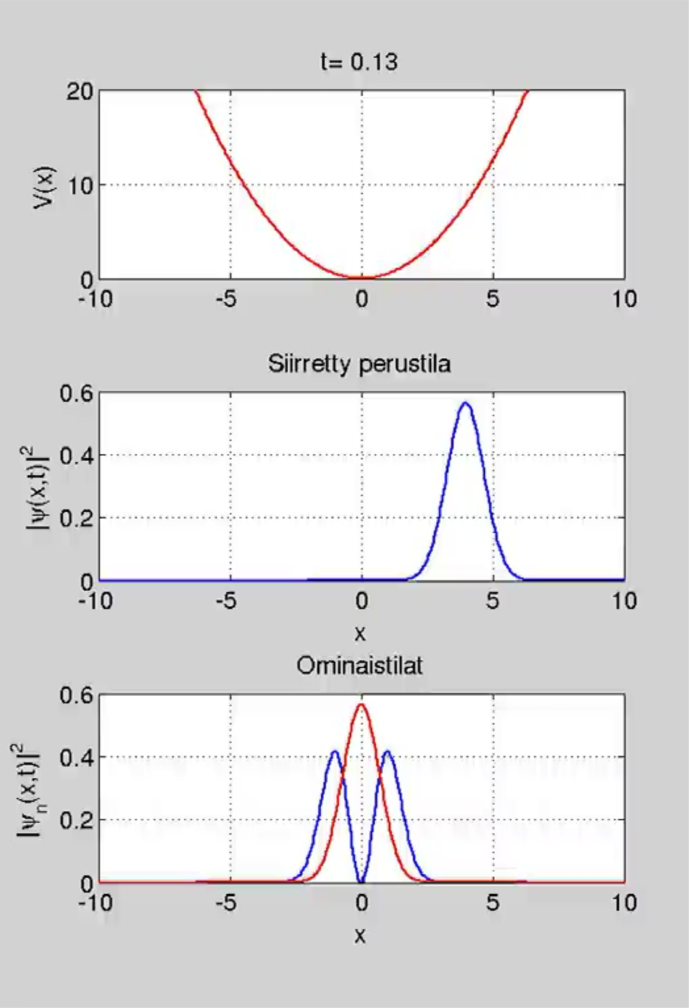
- Monia asioita on helppo laskea myös tietokoneella
- Jupyter notebookit ovat melko kätevä tapa yhdistää tekstiä, oikein editoituja kaavoja, numeriikkaa ja visualisointeja
- Ihmiset jakaneet omia notebookeja joista pääsee liikkeelle
- Esimerkiksi: https://github.com/mholtrop/QMPython
- Näitä käytetään "oikeasti". Esim. QuTiP paketti.

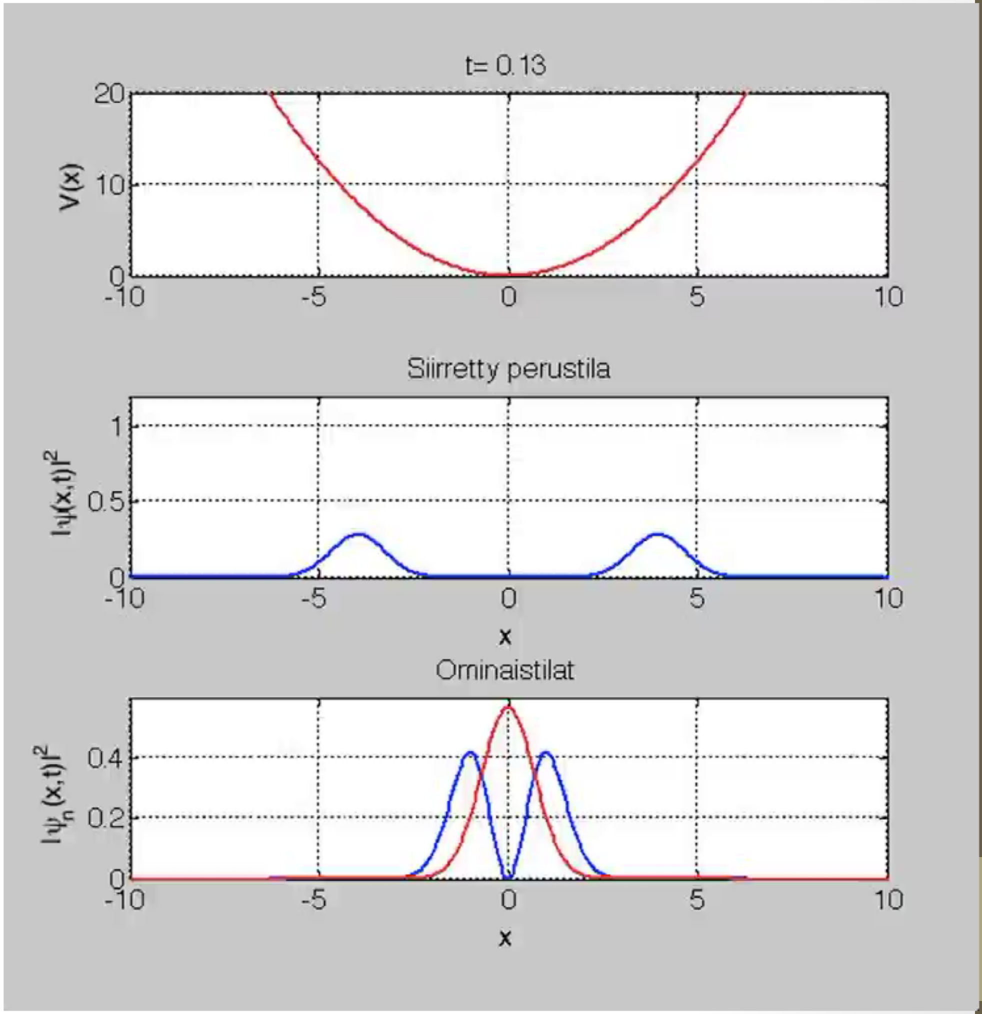
1. Asenna Python/Jupyter koneeseen (Jos asentaa Anaconda paketin, se sisältyy sinne. Polut kuntoon.)
2. Conda install "package_name" jos puuttuu
3. "jupyter notebook" ja selaimen kautta leikkimään.

https://dawes.wordpress.com/2017/04/21/teaching-quantum-mechanics-with-python/



Mikä siellä muuten oskilloi?





Tänään

- Harmoninen oskillaattori
- Luomis- ja hävitysoperaattorit

Kaikki selvää?

Harmoninen oskillaattori:
kaukana origosta

- Jos lähdemme hakemaan ratkaisuja, pari asiaa vaikuttaa selvältä
- Aaltofunktioiden täytyy kadota äärettömyydessä.
- Siinä välillä ne voivat oskilloida mikäli energia on potentiaalia

suurempi (miksi ?)

- Jos potentiaali on energiaa suurempi, jonkinlainen eksponentiaalinen (ehkä) katoaminen lienee kohtalona…
- Kun $\dfrac{m\omega^2 x^2}{2} \gg E$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\psi(x) = 0$$

$$\rightarrow \psi(x) \propto e^{-x^2/2\sigma^2} \text{ where } \sigma = \sqrt{\hbar/m\omega}$$

Harmoninen oskillaattori:kuinka?

- Ratkaistaan numeerisesti (ks. Matlab macro MyCoursesissa)
- Demo ajasta riippumattoman Schrödingerin yhtälön ratkaisusta matlabilla (ei ehkä aikaa nyt…)