

Entrega simulació FQI

Estudi numèric de la dinàmica de l'estat fonamental
d'un potencial harmònic

A entregar **Dijous 19 de Gener** amb grups de com a màxim 3 persones.
L'entrega s'haurà de fer a través del lliurament obert al campus virtual

1 Marc teòric. L'oscil·lador hamrònic quàntic.

L'oscil·lador harmònic és un dels sistemes físics més estudiats degut a la seva constant aparició en pràcticament tots els camps de la física. Per als curiosos, això és deu bàsicament a que els punts més interessants d'estudiar en un sistema són els punts d'equilibri estables o pous de potencial, els quals es poden aproximar a primer ordre (de forma bastant general) per potencials harmònics del tipus ax^2 .

A banda de l'oscil·lador clàssic, ara ja coneixem les solucions quàntiques de l'equació d'Schrödinger per un potencial del tipus $V = 1/2kx^2$ i per tant l'hamiltonià segueix l'expressió $H = T + V = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}kx^2$. En la representació de les x , les funcions d'ona que en són la solució n -èsima segueixen l'expressió:

$$\langle x | \Phi_n \rangle = \Phi_n(x) = A_n e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) \quad n = 1, 2, 3... \quad (1)$$

amb $A_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4}$ i H_n els polinomis d'Hermite (físics) de grau n ($1, 2x, 4x^2 - 2, \dots$) i $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$. Les corresponents energies per cada funció $\Psi_n(x)$ són:

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

Aquesta és tota la teoria que cal tenir present per poder realitzar la simulació numèrica posterior.

Before going on....

Abans de seguir, us demanem que al llarg de l'entrega sigueu honestos amb vosaltres mateixos. Veureu que en les properes línies aniran apareixent una sèrie de qüestions previes als resultats numèrics, marcades amb **QP** just abans de formular-les. Aquestes qüestions **SÓN PER VOSALTRES**, és a dir, únicament és mirara que s'hagin respost, no el contingut en si. El que realment és valorarà molt positivament que intenteu fer un esforç en justificar la vostra idea prèvia i que, un cop trobat el resultat de la simulació, sigueu capaços d'entendre perquè les coses són com són i on ha estat el vostre error en l'hipòtesi prèvia (si hi era).

2 Plantejament inicial del problema.

Durant tota la simulació el sistema a estudiar no serà propi del Hamiltonià, de manera que el nostre programa haurà de calcular l'evolució temporal de la nostra funció d'ona.

A grans trets, la metodologia que s'utilitzarà durant la pràctica serà la següent:

1. Generar de les funcions pròpies (base) del nostre sistema.
2. Definició de la funció amb la que és vol treballar.
3. Càlcul dels coeficients de $\Psi(x)$ en la base pròpia de l'Hamiltonià.
4. Càlcul de l'evolució temporal de cada coeficient.
5. Recuperar la nostra funció $\Psi(x, t)$ i calcular-n'hi algun valor esperat. És important que sempre tingueu present aquest esquema mentre realitzeu la pràctica, sobretot a l'hora d'escriure el codi.

QP 1: Donada una certa funció $\Psi(x)$ inicial, penseu en algun altre procediment possible per tal de trobar $\Psi(x, t)$. *Hint*: Escribiu l'equació d'Schrödinger depenent del temps penent la condició $\Psi(x, t = 0) = \Psi(x)$ i penseu en alguna forma més directa (sense fer ús de la descomposició en la base pròpia) de resoldre-la. Quin dels dos mètodes creieu que és millor? Discutiu-ho en termes de l'error que s'acumula en el temps.

3 Translació i kick a l'estat fonamental

En aquesta part de la simulació és vol estudiar la dinàmica de l'estat fonamental del potencial harmònic (i.e $\Psi_0(x)$ segons l'Eq.1) després de desplaçar-lo una certa distància x_0 i/o donar-li un cert moment inicial p_0 .

En mecànica quàntica, l'operador unitari kick (patada) s'escriu en la base de les x com:

$$U_{p_0} = e^{-ip_0x/\hbar} \quad (3)$$

I l'operador translació:

$$U_{x_0} = e^{-ix_0p/\hbar} \quad (4)$$

Anem doncs a començar a escriure el programa. Us recomanem que de bon principi li dieu al vostre programa quant valen les energies i les funcions pròpies i les aneu utilitzant a mesura que escrivim el programa. Un primer problema que us podeu trobar és al introduir el valor de $H_n(x)$. Amb python ja sabeu que numpy us permet generar aquests polinomis. De totes formes, si no podeu/voleu fer-ne ús, els podeu generar utilitzant l'equació de recurrència:

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x) \quad (5)$$

Amb $H_0(x) = 1$ i $H_1(x) = 2x$.

Seguint el esquema comentat en l'apartat anterior, cal ara descomposar la nostra funció d'ona inicial $\Psi(0, x)$ en la base $\{\Phi_n(x)\}$. L'expressió de la funció d'ona inicial serà:

$$\Psi_{p_0}(0, x) = U_{p_0}\Phi_0(x) \quad (6)$$

On podem substituir x_0 per p_0 en el cas de voler fer una translació.

Pregunta 1: És d'esperar que, tal i com succeeix clàssicament, pegar una patada (kick) i després fer una translació al nostre estat sigui exactament igual a fer l'operació inversa, es a dir que commuten. Demostra que efectivament és compleix en el cas quàntic.

En aquest punt molts de vosaltres us haureu adonat que teniu un petit problema amb l'operador translació. Si el voleu introduir en el programa, cal afegir una derivada dins l'exponent de l'unitària cosa que, com us podeu imaginar, suposa un autèntic martiri numèricament. Per facilitar-ho, responeu primer a aquesta pregunta:

Pregunta 2: Demostreu que l'operador translació definit a dalt, fa realment el que se li suposa, i.e $U_{x_0}f(x) = f(x - x_0)$.

Així doncs, tant per la translació com per al kick tindrem que els coeficients a $t=0$ seran:

$$C_n(0) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Phi_n^*(x) \Psi_{p_0}(0, x) \quad (7)$$

I exactament el mateix per el cas de la translació prenent altre cop x_0 per p_0 .

Seguint l'esquema cal ara evolucionar aquests coeficients segons l'equació d'Schrödinger, els quals ja haurieu de tenir molt clar en aquest punt del curs que seran:

$$C_n(t) = C_n(0) \cdot e^{\frac{-iE_n t}{\hbar}} \quad (8)$$

Ja per acabar només cal que sumeu aquestes coeficients amb les seves corresponents $\Psi_n(x)$, i recuperarem $\Phi(t, x)$:

$$\Psi(t, x) = \sum_{n=0}^N C_n(t) \Phi_n(x) \quad (9)$$

En aquest punt, ja teniu un codi que us permet calcular $\Phi(x, t)$ per tot temps, així que podeu també calcular l'evolució de qualsevol valor esperat ($\langle x \rangle$, $\langle p \rangle$, $\langle x^2 \rangle$...) i la seva evolució en el temps simplement guardant el seu valor per cada pas de temps..

Pregunta 3: Si preneu $\hbar = 1$, p_0/m i $m\omega^2 x_0$ (noteu que són energies) tots dos dins l'interval $[1, 8]$ i per valors de pas de temps $\Delta t = 0.1$, si agafeu $N = 60$ elements de la base no introduïreu cap error numèric. El valor de N (nombre d'elements de la base) afecta moltíssim al temps de càlcul, així que es importantíssim optimitzar-lo. Com podeu comprovar que N és òptim? En altres paraules, introduïu en el vostre codi unes línies abans de realitzar l'evolució temporal ¹ que garanteixin que n es prou gran com per estar segurs que la funció estigui ben aproximada (preneu N tal que el solapament entre la funció teòrica i la versió truncada sigui $\langle \Psi | \Psi_t \rangle \ll 10^{-4}$. Aquest error variarà a mesura que calculeu l'evolució temporal? Podeu recuperar la QP1 i explicar en termes d'acumulació d'error els avantatges d'aquest mètode respecte d'altres.

Noteu que en cap moment es demana realitzar l'entrega per cap valor concret de p_0 o x_0 , així que sentiu-vos lliures de fer-ho amb els valors que vulgueu. Observeu però que succeeix per p_0 , x_0 molt grans.

QP3: Que espereu que faci la partícula si li pegueu un kick o si li feu una translació? Espereu que variï Δx ? I $\langle x \rangle$? Si es que sí, com espereu que ho facin (expiqueu-ho de forma qualitativa)?. Repeteiu la discussió per l'observable \hat{p} .

Pregunta 4: Dieu-li al programa que us faci un plot de l'evolució temporal de les parts reals i imaginàries de $\Psi(x, t)$ així com la probabilitat de presència ($|\Psi(x, t)|^2$) i comenteu el seu moviment.

Un cop vista l'evolució temporal, anem a veure com evolucionen els valors esperats $\langle x \rangle$, $\langle p \rangle$, $\langle x^2 \rangle$ i $\langle p^2 \rangle$. Per a fer-ho, es recomanable guardar cada $\langle \rangle(t)$ en un vector i fer-ne el posterior plot.

QP4/Pregunta 5: Les gràfiques que es demanen per aquesta entrega són $\langle x \rangle(t)$, $\langle p \rangle(t)$, $\Delta x(t)$, $\Delta p(t)$, $\langle K \rangle(t) = \langle p^2 \rangle(t)/2m$, $\langle V \rangle(t) = k\langle x^2 \rangle/2$ i $\langle E \rangle(t) = \langle K \rangle(t) + \langle V \rangle(t)$. Seguint amb la discussió de la QP3, dibuixeu les 5 gràfiques anteriors i després, treieu les gràfiques mitjançant el programa i compareu-les amb les vostres.

Pregunta 6: Una bona representació per veure l'evolució temporal de qualsevol partícula és l'espai x-p, en el qual les coordenades d'una partícula en aquest venen determinades per la seva posició (x) en l'eix x i per el seu moment (p) en l'eix y. Per tal de tenir-ho tot en les mateixes unitats, el espai que farem servir nosaltres serà $x/\sqrt{m\omega}$ i $p\sqrt{m\omega}$. Mitjançant els valors de $\langle x \rangle(t)$ i $\langle p \rangle(t)$, discutiu com evoluciona l'estat en aquest espai. Representeu també l'incertesa de la posició i del moment en aquest espai (amb barres d'error per exemple).

Això ja casi està fet! Per acabar, únicament us queda comprovar el Teorema d'Ehrenfest, que com ja sabeu segueix:

$$\langle p \rangle = \frac{d\langle x \rangle}{dt} \quad \langle F \rangle(t) = -\frac{d\langle p \rangle}{dt} \quad (10)$$

Per tal de comprovar-ho, cal que avalueu aquestes derivades de forma numèrica com us han ensenyat a Mètodes Numèrics.

¹Si no us en sortiu no patiu, agafant $N=60$ us assegureu que no hi ha cap error i podeu seguir amb la simulació sense problemes.

Pregunta 7: Feu que el programa tregui els plots de les dos magnituds de cada costat de l'igualtat i comproveu que són iguals. És compleix el teorema d'Ehrenfest?

IMPORTANT!

Cal que repetiu tot aquest procediment per a un kick, i per a una translació. Podeu comentar que passa per diferents valors de p, x_0 i podeu intentar implementar una translació i un kick simultanis. Aquest últim apartat és valorat com puntuació extra.

Pregunta 8: Validesa del Teorema d'Ehrenfest

Sempre s'ens ha dit que la mecànica quàntica és diferència de la clàssica pel seu caràcter no determinista. Un clar exemple està en pensar amb un electró que és llença per una doble escletxa: clàssicament donats x i p inicials puc saber per on passarà exactament mentre que quànticament hem d'esperar a que l'atzar jugui el seu paper quan en mesurem la seva posició.

El teorema d'Ehrenfest sembla indicar que podem descriure la dinàmica del sistema mitjançant les equacions clàssiques en termes dels valors esperats $\langle \rangle$. Així doncs, sembla que si coneixem $\langle x \rangle$ i $\langle p \rangle$ inicials podem saber el seu valor en tot instant de temps simplement solucionant el parell d'equacions diferencials, on podem suposar per simplicitat que la força és una funció que només depèn de x ($F = F(x)$).

Proveu que per el cas de l'oscil·lador harmònic, si coneixem $\langle x \rangle_0$ i $\langle p \rangle_0$ podem trobar la seva evolució temporal. És a dir, calculeu quant val $\langle x \rangle(t)$ i $\langle p \rangle(t)$ en termes dels valors inicials.

Proveu que aquest caràcter semiclàssic no és pot inferir per una funció qualsevol i una força $F(x)$ genèrica. Quins requisits té que complir la força per a que existeixi l'anàleg del teorema d'Ehrenfest amb la dinàmica clàssica? (*Hint*: Expandiu $F(x)$ en sèrie de Taylor i calculeu-ne el seu valor esperat. Recordeu que per poder solucionar un sistema de dos EDO's cal que només apareguin 2 variables).

4 Estats de mínima indeterminació

Com ja sabeu l'estat fonamental de l'oscil·lador harmònic compleix la condició dels estats de mínima indeterminació ($\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$). Si ara canviem el valor de Δx mantenint la forma Gaussiana de la funció, aquesta nova funció ja no serà pròpia de l'Hamiltonià i evolucionarà en el temps. Malgrat aquest canvi, en $t = 0$ aquesta nova funció seguirà complint $\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$ ja que la mínima incertesa es deu a la forma Gaussiana i no al propi valor de les constants de les que depèn.

També sabeu que Δx depèn de ω , per tant, variant ω del sistema podem preparar estats Gaussians (i.e. refredant el sistema a $T=0$) d'amplada arbitrària, que segueixen saturant Heisenberg $\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$.

Aquests estats amb $\Delta x \leq \Delta x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$ s'anomenen estats "squeezed" per raons obvies. De la mateixa manera podem crear estats "squeezed" en el moment ja que $\Delta p \leq \Delta p_0 = \sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}}$.

QP5: Com creus que evolucionarà l'estat fonamental $\Psi_0(x)$ al canviar-li el valor de Δx , per exemple, duplicant-lo?

Tot i que $\Psi_0(x)$ "squeezed" ja és un dels estats que volem estudiar, com veureu a FQ II els estats més generals possibles que saturen Heisenberg són estats "squeezed" amb una translació i/o un kick:

$$\Psi(0, x) = C e^{\frac{ip_0 x}{\hbar}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4(\Delta x)^2}} \quad (11)$$

És a dir, són estats "squeezed" que poden estar desplaçats en posició i moment.

Amb $\Delta x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} e^{-\xi}$, ($\xi \in \mathbb{R}$). Noteu que el paràmetre ξ permet expandir/comprimir la nostra funció d'ona.

En general, primerament es modifica Δx i després se li proporciona un kick i una translació. És a dir, la versió desplaçada/kickejada d'una Gaussiana genèrica.

Pregunta 9: Amb aquest resultat trobeu Δp i calculeu $\Delta x \Delta p$. Coincideix amb el que us esperàveu? Calculeu també la constant de normalització C .

QP6: Segons l'equació (11), quina característica comparteixen els estats de mínima indeterminació? Quin valor ha de prendre ξ per recuperar l'estat fonamental (amb una translació i un kick) de l'oscil·lador harmònic? Quan creieu que Δx i Δp romandran constants en el temps?

Tal com hem vist, l'únic canvi respecte els altres apartats el tenim en l'incertesa de la nostra funció d'ona $\Phi(0, x)$.

Per simplificar-nos la vida i veure de forma més clara la naturalesa d'aquests estats només els heu de programar amb un kick, es a dir, aplicant U_{p_0} .

D'aquesta forma, nosaltres utilitzarem la funció:

$$\Psi(0, x) = C e^{\frac{ip_0 x}{\hbar}} e^{-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2}} \quad (12)$$

Simplement, quan calculeu els coeficients $C_n(0)$, canvieu la funció que tenieu per (12).

$$C_n(0) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Phi_n(x)^* \Psi(0, x) \quad (13)$$

Amb aquest simple canvi ja podreu veure i estudiar com evolucionen dins el pou harmònic. Uns bons valors per ξ són: $-1 < \xi < 1$.

Recordeu dels altres apartats que, un cop calculats tots els $C_n(0)$ que ens interessa utilitzar, heu de trobar la seva evolució temporal:

$$C_n(t) = C_n(0) \cdot e^{\frac{-iE_n t}{\hbar}} \quad (14)$$

I recuperem la funció $\Psi(t, x)$, ara depenent del temps:

$$\Psi(t, x) = \sum_{n=0}^N C_n(t) \Phi_n(x) \quad (15)$$

Un cop programat amb el kick introduir la translació és molt directe, simplement canvieu en la vostra funció x per $x - x_0$, si voleu podeu provar-ho i veure com es comporta. És valorarà també com feina extra.

Pregunta 10: Repetiu la pregunta 4 per aquest estat. Comenteu també el moviment d'aquest tipus d'estats. Justifiqueu perquè els estats de l'apartat anterior (Ψ_{x_0} i/o Ψ_{p_0}) s'anomenen estats semiclàssics comparant-los amb els resultats d'aquest apartat i amb el que heu trobat a la pregunta 8 (Teorema d'Ehrenfest).

QP7/Pregunta 11: Torneu a treure les gràfiques de l'exercici 5 més el gràfic $\Delta x \Delta p(t)$ per aquesta nova funció. Abans de que el programa tregui les gràfiques, justifiqueu com creieu que seràn. Després, treieu les gràfiques, compareu-les i expliqueu els resultats finals obtinguts. Interpreteu què està passant en els valors de Δx i Δp al llarg del temps. En quins punts $\Delta x \Delta p(t) = \frac{\hbar}{2}$?

Pregunta 12: Repetiu el que heu fet a la pregunta 6 per als estats d'aquest apartat, és a dir, representeu el moviment d'aquests estats en l'espai de fases $x - p$ així com la seva incertesa. Repetiu l'estudi amb i sense kick.

QUÈ CAL ENTREGAR?

Per cada grup, només cal entregar **UN** arxíu .zip o .rar amb:

1-El programa amb el que heu fet la pràctica.

2-Un arxíu pdf amb les respostes a les preguntes plantejades en aquest document. Adjunteu també en el document pdf el codi amb comentaris per tal de que podem veure que és fa en cada part del codi. Si ho trobeu necessari podeu fer un breu escrit de 5-6 línies comentant breument el codi.

Recordeu que cal entregar-ho abans del dia 19 de gener a les 23:59h via campus virtual.

Bones Festes!