Entrega 4: Oscil·lador harmònic

Arnau Mas

10 de desembre de 2018

L'equació d'Schrödinger per l'oscil·lador harmònic quàntic és

$$i\hbar\partial_t|\psi\rangle = \left(\frac{1}{2m}\hat{P}^2 + \frac{1}{2}m\omega\hat{X}^2\right).$$

Els estats propis són, escrits en la base de la posició,

$$\Psi_n(x) = C_n H_n(\xi)e^{-\xi^2/2}$$

on C_n és una constant de normalització de valor

$$C_n = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}},$$

la constant α és

$$\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}},$$

i $\xi = \alpha x$. Les corresponents energies són

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

Considerem l'estat

$$\Psi(x) = \tfrac{1}{2}\Psi_0(x) + \tfrac{1}{\sqrt{2}}\Psi_1(x) - \tfrac{1}{2}\Psi_2(x).$$

(a) Tenim que l'estat $|\Psi\rangle$ evoluciona com

$$\Psi(x,t) = \tfrac{1}{2}\Psi_0(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_0 t} + \tfrac{1}{\sqrt{2}}\Psi_1(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} - \tfrac{1}{2}\Psi_2(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t}.$$

Així

$$\langle\hat{X}(t)\rangle = \langle\Psi(t)|\hat{X}|\Psi(t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)\,dx.$$

Fent servir les relacions d'ortogonalitat i de recurrència dels polinomis d'Hermite veiem que dels 9 termes de la integral, només en contribuiran 4 i resulta

$$\begin{aligned}
\langle\hat{X}(t)\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} x\left(\tfrac{1}{\sqrt{2}}\cos\left(\tfrac{E_0-E_1}{\hbar}t\right)\Psi_0(x)\Psi_1(x) - \tfrac{1}{\sqrt{2}}\cos\left(\tfrac{E_1-E_2}{\hbar}t\right)\Psi_1(x)\Psi_2(x)\right)dx \\
&= \tfrac{1}{\alpha^2\sqrt{2}}\cos\omega t\left(C_0C_1\int_{-\infty}^{\infty}\xi H_0(\xi)H_1(\xi)e^{-\xi^2}\,d\xi - C_1C_2\int_{-\infty}^{\infty}\xi H_1(\xi)H_2(\xi)e^{-\xi^2}\,d\xi\right) \\
&= \tfrac{1}{\alpha^2\sqrt{2}}\cos\omega t\left(\frac{C_0C_1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}H_1(\xi)^2e^{-\xi^2}\,d\xi - \frac{C_1C_2}{2}\int_{-\infty}^{\infty}H_2(\xi)^2e^{-\xi^2}\right) \\
&= \tfrac{1}{\alpha^2\sqrt{2}}\cos\omega t\left(\frac{C_0C_1\alpha}{2C_0^2} - \frac{C_1C_2\alpha}{2C_2^2}\right) = \frac{1-\sqrt{2}}{2\alpha}\cos\omega t.
\end{aligned}$$

Fem ara els càlculs per a $\langle \hat{P}(t)\rangle$. Abans, però, observem que

$$\partial_x \Psi_n(x) = \alpha C_n \left(\partial_\xi H_n(\xi) + \xi H_n(\xi)\right) e^{-\xi^2/2} = \alpha C_n \left(n H_{n-1}(\xi) - \tfrac{1}{2} H_{n+1}(\xi)\right) e^{-\xi^2/2}.$$

Tenim

$$\langle \hat{P}(t)\rangle = \langle \Psi(t)|\hat{P}|\Psi(t)\rangle = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\partial_x \Psi(x,t)\,dx.$$

Com abans, molts termes no contribueixen. Els termes que sobreviuen només són quatre:

$$\begin{aligned}
\langle \hat{P}(t)\rangle &= -\frac{i\hbar}{2\sqrt{2}} \left(e^{\frac{i}{\hbar}(E_0-E_1)t} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_0(x)\partial_x\Psi_1(x)\,dx + e^{\frac{i}{\hbar}(E_1-E_0)t} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1(x)\partial_x\Psi_0(x)\,dx \right. \\
&\quad \left. - e^{\frac{i}{\hbar}(E_1-E_2)t} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1(x)\partial_x\Psi_2(x)\,dx + e^{\frac{i}{\hbar}(E_2-E_1)t} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_2(x)\partial_x\Psi_1(x)\,dx \right). \\
&= -\frac{i\hbar}{2\sqrt{2}} \left(C_0C_1 e^{\frac{i}{\hbar}(E_0-E_1)t} \int_{-\infty}^{\infty} H_0(\xi)^2 e^{-\xi^2}\,d\xi - \tfrac{1}{2} C_0C_1 e^{\frac{i}{\hbar}(E_1-E_0)t} \int_{-\infty}^{\infty} H_1(\xi)^2 e^{-\xi^2}\,d\xi \right. \\
&\quad \left. - 2C_1C_2 e^{\frac{i}{\hbar}(E_1-E_2)t} \int_{-\infty}^{\infty} H_1(\xi)^2 e^{-\xi^2}\,d\xi - \tfrac{1}{2} C_1C_2 e^{\frac{i}{\hbar}(E_2-E_1)t} \int_{-\infty}^{\infty} H_2(\xi)^2 e^{-\xi^2}\,d\xi \right) \\
&= -\frac{\alpha\hbar}{2}\sin\omega t + \frac{\alpha\hbar}{\sqrt{2}}\sin\omega t = \frac{\sqrt{2}-1}{2}\alpha\hbar\sin\omega t.
\end{aligned}$$

(b) Per calcular $\langle \hat{X}^2(t)\rangle$ podem aprofitar els càlculs anteriors. A la integral ara sobreviuen quatre termes diferents:

$$\begin{aligned}
\langle \hat{X}^2(t)\rangle &= \frac{1}{4}\int_{-\infty}^{\infty} x^2\Psi_0(x)^2\,dx + \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} x^2\Psi_1(x)^2\,dx \\
&\quad + \frac{1}{4}\int_{-\infty}^{\infty} x^2\Psi_2(x)^2\,dx - \frac{1}{2}\cos\left(\tfrac{E_2-E_0}{\hbar}t\right)\int_{-\infty}^{\infty} x^2\Psi_0(x)\Psi_2(x)\,dx \\
&= \frac{1}{4}\frac{C_0^2}{4\alpha^2C_1^2} + \frac{1}{2}\left(\frac{C_1^2}{4\alpha^2C_2^2} + \frac{C_1^2}{\alpha^2C_0^2}\right) + \frac{1}{4}\left(\frac{C_2^2}{4\alpha^2C_3^2} + \frac{4C_2^2}{\alpha^2C_1^2}\right) \\
&\quad - \frac{1}{2\sqrt{2}\alpha^2}\cos 2\omega t \\
&= \frac{3}{2\alpha^2} - \frac{1}{2\sqrt{2}\alpha^2}\cos 2\omega t.
\end{aligned}$$

Per calcular $\langle \hat{P}^2(t)\rangle$ podem fer servir l'expressió del hamiltonià del sistema:

$$\langle \hat{H}\rangle = \frac{1}{2m}\langle \hat{P}^2\rangle + \frac{1}{2}m\omega^2\langle \hat{X}^2\rangle \implies \langle \hat{P}^2\rangle = 2m\langle \hat{H}\rangle - m^2\omega^2\langle \hat{X}^2\rangle$$

Tenim

$$\langle \hat{H}(t)\rangle = \langle \Psi(t)|\hat{H}|\Psi(t)\rangle = \frac{E_0}{4} + \frac{E_1}{2} + \frac{E_2}{4} = \frac{3}{2}\hbar\omega.$$

Així queda $\langle \hat{P}^2(t)\rangle = m\omega\hbar\left(\frac{3}{2} + \frac{1}{2\sqrt{2}}\cos 2\omega t\right)$.

(c) Podem calcular $\Delta\hat{X}$ i $\Delta\hat{P}$ immediatament a partir dels apartats anteriors:

$$\begin{aligned}
(\Delta\hat{X})^2 &= \frac{\hbar}{m\omega}\left(\frac{1+3\sqrt{2}}{2\sqrt{2}} - \frac{3}{4}\cos(\omega t)^2\right) \\
(\Delta\hat{P})^2 &= m\omega\hbar\left(\frac{1+3\sqrt{2}}{2\sqrt{2}} - \frac{3}{4}\sin(\omega t)^2\right).
\end{aligned}$$

(d) El teorema d'Ehrenfest ens dóna un sistema d'equacions diferencials per $\bar{x} = \langle \hat{X} \rangle$ i $\bar{p} = \langle \hat{P} \rangle$:

$$\begin{aligned} m\bar{x}' &= \bar{p} \\ \bar{p}' &= -\langle V'(\hat{X}) \rangle = -m\omega^2 \bar{x}. \end{aligned}$$

Aquestes són les equacions de l'oscil·lador harmònic clàssic, i imposant les condicions inicials $\bar{x}(0) = \langle \Psi(0) | \hat{X} | \Psi(0) \rangle$ i $\bar{p}(0) = \langle \Psi(0) | \hat{P} | \Psi(0) \rangle$ obtenim les expressions dels apartats anteriors. Això només passa perquè el potencial és quadràtic, de manera que V' és lineal i es té $\langle V'(\hat{X}) \rangle = V'(\langle \hat{X} \rangle)$. Així, en general, sempre que se satisfa aquesta condició, les mitjanes evolucionen segons les equacions clàssiques. Per a potencials més complicats això ja no és cert.