Cơ học lượng tử 3

TRẦN KHÔI NGUYÊN

VẬT LÝ LÝ THUYẾT

Ngày 7 tháng 12 năm 2024

Bài 1

Giả sử một hệ có cơ sở chỉ gồm hai trạng thái trực chuẩn $|1\rangle$ và $|2\rangle$, ứng với Hamiltonian toàn phần có biểu diễn ma trận là

$$\begin{pmatrix} E_1 & V_0 e^{i\omega t} \\ V_0 e^{-i\omega t} & E_2 \end{pmatrix}$$

trong đó V_0 là độc lập với thời gian. Ở thời điểm $t = 0$, hệ nằm trong trạng thái $|1\rangle$.

(a) Chứng tỏ rằng xác suất chuyển dời từ trạng thái $|1\rangle$ sang trạng thái $|2\rangle$ trong khoảng thời gian t bằng

$$P(t) = \frac{4V_0^2}{(E_1 - E_2 + \hbar\omega)^2} \sin^2\left(\frac{(E_1 - E_2 + \hbar\omega)}{2\hbar}\right) + O(V^4)$$

tới bậc thấp nhất khác không theo V_0.

(b) Hãy giải bài toán hai trạng thái này một cách chính xác để tìm giá trị thực của $P(t)$ và do đó phát biểu các điều kiện cần để cách tiếp cận nhiễu loạn hợp lệ ở đây.

Giải:

(a) Ta có

$$H'_{11} = H'_{22} = 0 \tag{1}$$

Ta khai triển hàm sóng dưới dạng tổ hợp tuyến tính của $|1\rangle$ và $|2\rangle$

$$\Psi(t) = c_1 |1\rangle e^{-iE_1 t/\hbar} + c_2 |2\rangle e^{-iE_2 t/\hbar} \tag{2}$$

trong đó

$$\dot{c}_1 = -\frac{i}{\hbar}\left[c_1 H'_{11} + c_2 H'_{12} e^{-i(E_2-E_1)t/\hbar}\right] \tag{3}$$

$$\dot{c}_2 = -\frac{i}{\hbar}\left[c_2 H'_{22} + c_1 H'_{21} e^{-i(E_1-E_2)t/\hbar}\right] \tag{4}$$

Đặt $\omega_{12} = \dfrac{E_1 - E_2}{\hbar} = -\omega_{21}$.

Điều kiện đầu

$$\text{Tại } t = 0 \begin{cases} c_1(0) = 1 \equiv c_1^{(0)}(t) = 1 \\ c_2(0) = 0 \equiv c_2^{(0)}(t) = 0 \end{cases} \tag{5}$$

Ta thay vào (3) và (4), được

$$\frac{dc_1^{(1)}}{dt} = 0 \Rightarrow c_1^{(1)}(t) = 1;$$

$$\frac{dc_2^{(1)}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} H'_{21} e^{i\omega_{21}t} \Rightarrow c_2^{(1)} = -\frac{i}{\hbar}\int_0^t V_0 e^{-i\omega t'} e^{i\omega_{21}t'} dt'$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow c_2^{(1)} &= -\frac{iV_0}{\hbar i(\omega_{21}-\omega)}\left[e^{i(\omega_{21}-\omega)t} - 1\right] \\ &= \frac{V_0}{\hbar(\omega - \omega_{21})}\left[e^{i(\omega_{21}-\omega)t} - 1\right] \end{aligned} \tag{6}$$

Xác suất chuyển dời từ $|1\rangle \to |2\rangle$

$$\begin{aligned} P_{12}(t) &= \left|c_2^{(1)}(t)\right|^2 \\ &= \frac{V_0^2}{(E_1 - E_2 + \hbar\omega)^2}\left[(e^{i(\omega_{21}-\omega)t} - 1)(e^{-i(\omega_{21}-\omega)t} - 1)\right] \\ &= \frac{V_0^2}{(E_1 - E_2 + \hbar\omega)^2}\left[1 - e^{-i(\omega_{21}-\omega)t} - e^{i(\omega_{21}-\omega)t} + 1\right] \\ &= \frac{V_0^2}{(E_1 - E_2 + \hbar\omega)^2}\left[2 - 2\cos\big((\omega_{21}-\omega)t\big)\right] \\ &= \frac{V_0^2}{(E_1 - E_2 + \hbar\omega)^2} 4\sin^2\left(\frac{\omega_{21}-\omega}{2}t\right) \\ &= \frac{V_0^2}{(E_1 - E_2 + \hbar\omega)^2} 4\sin^2\left(\frac{E_1 - E_2 + \hbar\omega}{2\hbar}t\right) (DPCM) \end{aligned}$$

(b) Từ phương trình (3) và (4), ta lấy đạo hàm theo t một lần nữa cho phương trình (4), dẫn đến

$$\begin{aligned}
\ddot{c}_2 &= -\frac{i}{\hbar}\dot{c}_1 V_0 e^{-i(E_1-E_2-\omega)t/\hbar} + \frac{i}{\hbar}\frac{i(E_1-E_2-\omega)}{\hbar} c_1 V_0 e^{-i(E_1-E_2-\omega)t/\hbar} \\
&= -\frac{1}{\hbar^2}\left[c_2 H'_{12} e^{-i(E_2-E_1-\omega)t/\hbar}\right] H'_{21} e^{-i(E_1-E_2+\omega)t/\hbar} - \frac{(E_1-E_2-\omega)}{\hbar^2} c_1 V_0 e^{-i(E_1-E_2-\omega)t/\hbar} \\
&= -\frac{1}{\hbar^2} c_2 V_0^2 - \frac{i(E_1-E_2)}{\hbar}\frac{\hbar}{-iH'_{21}} e^{i(E_1-E_2)t/\hbar} H'_{21} e^{-i(E_1-E_2)t/\hbar}\dot{c}_2 \\
&= -c_2\left(\frac{V_0}{\hbar}\right)^2 - i(\omega_{21}-\omega)\dot{c}_2
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \ddot{c}_2 + i(\omega_{21}-\omega)\dot{c}_2 + \frac{V_0^2}{\hbar^2} c_2 = 0 \tag{6}$$

Đặt $c_2 = e^{mt}$, nên (6) trở thành

$$m^2 e^{mt} + m e^{mt} i(\omega_{21}-\omega) + \frac{V_0^2}{\hbar^2} e^{mt} = 0,$$

với $\Delta < 0$

Điều kiện đầu

$$\begin{cases} c_1(0) = 1 \\ c_2(0) = 2 \end{cases}$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow c_2(t) &= \exp\left(i\frac{\omega_{21}-\omega}{2}t\right) A\sin\left(\frac{\Omega}{2}t\right) \\
\dot{c}_2(t) &= i\frac{\omega_{21}-\omega}{2}\exp\left(i\frac{\omega_{21}-\omega}{2}t\right) A\sin\left(\frac{\Omega}{2}t\right) + \exp\left(i\frac{\omega_{21}-\omega}{2}t\right) A\frac{\Omega}{2}\cos\left(\frac{\Omega}{2}t\right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
c_1(t) &= \frac{i\hbar}{V_0}\dot{c}_2 \exp(i\omega t)\exp(i\omega_{12} t) \\
&= \frac{i\hbar}{V_0} i\frac{\omega_{21}-\omega}{2}\exp\left(i\frac{\omega-\omega_{12}}{2}t\right) A\sin\left(\frac{\Omega}{2}t\right) + \exp\left(i\frac{\omega-\omega_{12}}{2}t\right) A\frac{\Omega}{2}\cos\left(\frac{\Omega}{2}t\right)
\end{aligned}$$

Áp dụng điều kiện đầu

$$c_1(0) = A\frac{\Omega}{2}\cos(0) = 1 \Rightarrow A = \frac{2}{\Omega}.$$

Xác suất chuyển dời từ trạng thái $|1\rangle \to |2\rangle$.

$$\begin{aligned}
P_{12}(t) &= \left|c_2(t)\right|^2 \\
&= \left(\frac{2}{\Omega}\sin\left(\frac{\Omega}{2}t\right)\right)^2
\end{aligned}$$