Cvičení 9. 3. 2022

Téma: Čas, bariéra, δ potenciál, dvouhladinový systém

Časová Schrödingerova rovnice v reálném a imaginárním čase

Časová Schrödingerova rovnice má tvar

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi\,.$$

Pokud je ψ vlastní stav, působením $\hat{H}$ na ψ dostaneme energii E. (Uvažujeme časově nezávislé Hamiltoniány.) Řešením rovnice pak získáme časovou závislost

$$\psi(t) = \psi(0)e^{-iEt/\hbar}\,.$$

Pokud není ψ vlastní stav Hamiltoniánu, můžeme ho rozepsat do báze vlastních stavů ϕ_n:

$$\psi = \sum_n c_n\phi_n\,.$$

Nyní je dobré si uvědomit, že Hamiltonián je lineární operátor a na každou ϕ_n může působit nezávisle, tedy

$$\hat{H}\psi = \sum_n c_n\hat{H}\phi_n = \sum_n c_n\epsilon_n\phi_n\,,$$

kde ϵ_n jsou vlastní energie stavů ϕ_n. Z časové Schrödingerovy rovnice potom získáme

$$\psi(t) = \sum_n c_n\phi_n(0)e^{-i\epsilon_n t/\hbar}\,,$$

každá vlastní funkce se tedy vyvíjí nezávisle.

Uvažujme nyní opět kvantový rotor, nyní s vlastními funkcemi $\psi_n = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{in\phi}$. Hodnoty ϕ jsou z intervalu $(0, 2\pi)$, $n \in Z$ je kvantové číslo.

$\triangleright$ Proč tvoří vlastní funkce ortonormální bázi?

Hamiltonián rotoru je $-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}$.

$\triangleright$ Jaké závisejí vlastní energie na vlastním čísle n?

Uvažujme nyní, že částice je ve stavu $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$, číslo v ketu je vlastní číslo.

$\triangleright$ Je stav normalizovaný na 1?

$\triangleright$ Napište časovou závislost stavu $|\psi\rangle$.

$\triangleright$ Vypočtěte časovou závislost hustoty pravděpodobnosti částice ve stavu $|\psi\rangle$. Použijeme $\varrho(\phi) = \psi(\phi)^*\psi(\phi)$.

$\triangleright$ Ověřte, že časově závislá hustota pravděpodobnosti je normalizovaná na 1.

Uvažujme nyní, že budeme systém vyvíjet v čase, ale ne podle reálné osy dopředu, ale podél imaginární osy. Jako čas tedy použijeme $t = -i\tau$.

$\triangleright$ Použijte tento zvláštní čas v rovnici pro časový vývoj ψ. Co získáme pro $\tau \to \infty$?

$\triangleright$ Prohlédnutím obecné rovnice pro časovou závislost $\psi(t)$ se přesvědčte, že předešlý výsledek je obecný.

Pozn.: Vývoj v imaginárním čase k získání základního stavu se opravdu využívá, například v metodě zvané difúzní Monte Carlo, což je stochastická metoda (využívá náhodná čísla). Ale můžeme tak najít i základní stav přímou aplikací Hamiltoniánu na jednoduché potenciály.

Bariéra

Na přednášce jste viděli, že je nenulová pravděpodobnost, že částice se vyskytne v místech, kde je potenciál větší, než je její energie. Tedy pokud není potenciál nekonečný. Zopakujeme si nyní, jaké je řešení pro případ konstantního potenciálu. Nejprve si zopakujeme obecné řešení pro částici s energií vyšší než konstantní potenciál, potom rovnici upravíme pro energii částice nižší.

▷ Napište časově nezávislou Schrödingerovu rovnici pro případ konstantního potenciálu, búno položme $V = 0$. V případě volné částice je možné chápat energii jako volný parametr. Napište řešení. Pro řešení je vhodné použít vlnový vektor k ze vztahu $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$.

Pozn.: Tento vztah se nazývá dispersní relace, udává, jakou energii mají částice s vlnovým vektorem. Pro volnou částici je takto jednoduchá, pro "reálnou částici" v pevné látce složitější. Pokud je jich víc, tak takovému grafu říkáme pásová struktura.

Nyní si představme situaci, kdy pro $x > 0$ je hodnota potenciálu V_+.

▷ Napište Schrödingerovu rovnici pro tento případ.

▷ Co se stane, je-li energie částice větší než V?

▷ Jaké má rovnice řešení pro případ $E < V$?

Případ, kdy bariéra je vyšší než energie částice nastává například pro povrch materiálů. Bariéra potom odpovídá vzduchu nebo vakuu. Důležité jsou taky bariéry, které jsou konečné, tedy oblast, kde $E < V$ je jen na nějakém omezeném intervalu. V tomto případě je možné, že částice projde na druhou stranu. Tomu se bude věnovat některá z budoucích přednášek.

Pozn.: Průnik částice bariérou je častý a doslova životně důležitý, neboť jej provádějí vodíky (protony) v chemických reakcích probíhajících v našem těle. V takových případech neprobíhá tunelování pod bariérou s konstantním energetickým rozdílem, energetická bariéra má tvar spíše kopečku. V takových případech je možné přibližně vypočítat pravděpodobnost průchodu pomocí Wentzel-Kramers-Brillouinovy approximace (hlavně v 1D). Je také možné použít metodu Feynmanových dráhových integrálů, která umožňuje zahrnout i dynamiku ostatních částic (tzv. Path integral molecular dynamics). Pro představu vizte např. první video na https://www.youtube.com/user/icelcn/videos

δ potenciál

Znalost tvaru řešení Schrödingerovy rovnice pro částici s energií nižší než potenciál použijeme nyní v příkladu s potenciálem tvaru δ funkce: $V = -A\delta(x)$. V ostatních bodech má potenciál hodnotu nula. Tento potenciál má vázaný stav, tedy řešení s energií nižší než nula.

▷ Napište řešení problému v bodě mimo $x = 0$, separátně pro $x < 0$ a pro $x > 0$. Využijte přitom řešení pro $E < V$ a podmínku, že funkce musí být normalizovatelná. (Funkci ještě nenormalizujte.)

Z předešlého bodu bychom měli mít vlnovou funkci známého tvaru nicméně s volným parametrem ("vlnový vektor" k, případně energie E). Hodnotu volného parametru určíme pomocí integrace Schrödingerovy rovnice na intervalu $[-\epsilon, \epsilon]$.

▷ Napište Schrödingerovu rovnici a integrujte ji na daném intervalu. Tj. přidejte integrál $\int_{-\epsilon}^{\epsilon}$ před všechny tři členy. Řešením získáte podmínku pro k, zpětným dosazením do Schrödingerovy rovnice pak hodnotu energie.

▷ Funkci normalizujte.

▷ Jak se změní tvar vlnové funkce pro silnější potenciál (vyšší hodnota A) a pro hmotnější částici?

▷ Co by se stalo v případě, že by potenciál byl konečný?

δ potenciál pro rotor

Uvažujme nyní δ potenciál pro rotor.

$\triangleright$ Jaké jsou maticové elementy potenciálu $V = -A\delta(\phi - \pi)$?

$\triangleright$ Jaké jsou maticové elementy potenciálu $V = -A$ na intervalu $[-\epsilon, \epsilon]$, jinak nula?

Rotor a operátor $\sin\phi$

Minule jsme pro rotor odvodili maticovou reprezentaci operátoru $\hat{A} = i\frac{d}{d\phi}$, případně jeho kvadrátu, která je stejná jako kvadrát zobecněné hybnosti. Zvládli jsme i provést diagonalizaci, neboť se matice rozpadla na bloky 2×2. Operátor $\hat{B} = \sin\phi$, se kterým jsme také počítali, jsme zamluvili. Pojďme se nyní na něj podívat. Pro jednoduchost výpočtů použijeme bázové funkce jako na začátku cvičení $\psi_n = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{in\phi}$.

$\triangleright$ Převeďte operátor $\hat{B}$ do tvaru využívajícího exponenciely.

$\triangleright$ Jaké jsou střední hodnoty operátoru $\hat{B}$ pro funkce ψ_n?

$\triangleright$ Vypočtěte maticové elementy $\langle m|\hat{B}|n\rangle = \int_0^{2\pi} \psi_m^*(\phi)\hat{B}\psi_n(\phi)d\phi$.

Matici si načrtněte. Jak je vidět, každý stav interaguje s dvěma dalšími, navíc je matice nekonečná. To je v kvantové mechanice normální a problém typicky můžeme řešit tak, že uvažujeme konečnou matici, kterou numericky diagonalizujeme. Jak je to možné udělat je tady Link to Colab with diagonalization