Harmonický oscilátor v souřadnicové reprezentaci

Problém HO lze vyřešit i v souřadnicové reprezentaci. Tam máme operátory $\hat{q} = q$ a $\hat{\pi} = -i\frac{\partial}{\partial q}$ a platí $\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}\left(-\frac{\partial^2}{\partial q^2} + q^2\right)$.

Vlastní problém pro **základní stav** (po vykrácení faktorů)

$$-\frac{\partial^2}{\partial q^2}\psi_0(q) + (q^2-1)\psi_0(q) = 0$$

Snadno se ověří, že řešením je Gaussova funkce $\boxed{\psi_0(q) = \frac{1}{(\pi)^{\frac{1}{4}}}e^{-\frac{q^2}{2}}}$

Ostatní funkce lze zkonstruovat pomocí kreačního operátoru $\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(q - \frac{\partial}{\partial q}\right)$ a vztahu $|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}\hat{a}^+|n-1\rangle$

Rekurentní formule

Vyjádříme pomocí $\hat{a}$ a $\hat{a}^+$

$$\psi_n(q) = \langle q|\frac{\hat{a}^+}{\sqrt{n}}|n-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2n}}(\langle q|\hat{q}|n-1\rangle - i\langle q|\hat{\pi}|n-1\rangle)$$

$$\boxed{\psi_{n+1}(q) = \sqrt{\frac{2}{n+1}}\,q\psi_n(q) - \sqrt{\frac{n}{n+1}}\psi_{n-1}(q)}$$

Pro $n = 0$ definujeme $\psi_{-1}(q) = 0$ a dostaneme $\psi_1(q) = \sqrt{2}q\psi_0(q) = \sqrt{\frac{2}{\sqrt{\pi}}}qe^{-\frac{q^2}{2}}$

Nekonečně hluboká jáma

Můžeme uvažovat obecnou 3D jámu s lineárními rozměry L_x, L_y a L_z. Hamiltonián je Hamiltoniánem volné částice $\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2+\hat{p}_z^2}{2m}$. Jde tedy o 3 nezávislé problémy a celkovou funkci lze najít separací proměnných jako produkt tří vlnových funkcí $\psi(x,y,z) = \psi_x(x)\psi_y(y)\psi_z(z)$. Jednotlivé 1D problémy se liší pouze šířkou jámy L. Vyřešme tedy 1D problém. Tento problém by vyřešen v přednášce č. 4. Vlastní funkce mají tvar $\psi_n(q) = \frac{1}{\sqrt{2}}\sin(\frac{\pi}{L}nq)$

s vlastními energiemi $E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}n^2$.

Nás teď bude zajímat symetrie řešení. Přesunutím počátku souřadnic doprostřed jámy se nic nemění, pouze je zřejmá symetrie řešení. Základní a každý stav se sudým kvantovým číslem je symetrický, tedy jde o **sudé vlnové funkce**; lichá kvantová čísla dávají **liché vlnové funkce**.

Symetrie řešení, operátor parity

Zaveďme speciální operátor $\hat{P}$, tzv. **operátor parity**, pro který platí

$$\hat{P}f(q) = f(-q).$$

Je-li operátor potenciální energie $\hat{V} = V(\hat{q})$ sudou funkcí, pak $\hat{V}$ komutuje s $\hat{P}$. Platí

$$\hat{P}V(q)\psi(q) = V(-q)\psi(-q) = V(q)\hat{P}\psi(q).$$

Také operátor $\hat{\pi}^2 = -\frac{\partial^2}{\partial x^2}$, zřejmě komutuje s $\hat{P}$.

Operátory, které komutují, mají společné vlastní vektory!

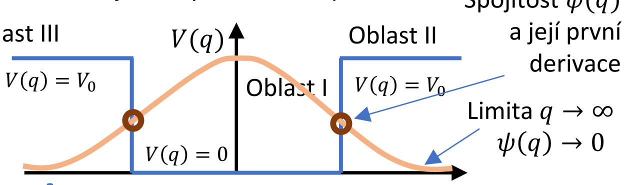
Vlastními vektory $\hat{P}$ jsou libovolné sudé a liché funkce.

$$\hat{P}f_{sudá}(q) = f_{sudá}(-q) = +1f_{sudá}(q)$$
$$\hat{P}f_{lichá}(q) = f_{lichá}(-q) = -1f_{lichá}(q)$$

Vlastní vlnové funkce Hamiltoniánů se symetrickým/sudým potenciálem mohou být pouze sudé nebo liché funkce.

Konečná potenciálová jáma

Výsledky ze shora využijeme při hledání vlastních energií a stavů následujícího symetrického potenciálu.



V každé z oblastí I, II a III řešíme Schrödingerovu rovnici s konstantním potenciálem. V oblastech II a III musí řešení mít správnou nulovou asymptotu v nekonečnu. Rovnice má tvar $\frac{\partial^2}{\partial q^2}\psi(q) = \xi\psi(q)$, kde $\xi = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_x)$ a $V_I = 0$, $V_{II} = V_{III} = V_0$ Podmínky v nekonečnech $\rightarrow \xi = \alpha^2$

$$\psi_{II}(q) = De^{-\alpha q},\ \psi_{III}(q) = De^{\alpha q}$$

Oblast I: $\psi_I(q) = A\sin(kx) + B\cos(kx)$

Budeme navazovat v bodech $q = -\frac{L}{2}$ a $q = \frac{L}{2}$.

Předpokládáme spojitou vlnovou funkci a její první derivaci, řešíme separátně případ sudé a liché vlastní funkce.

Symetrické řešení (sudé funkce):

$A = 0, C = D$ hodnoty funkcí: $De^{-\alpha\frac{L}{2}} = B\cos\left(\frac{kL}{2}\right)$

Bod $q = \frac{L}{2}$: hodnoty derivací: $\alpha De^{-\alpha\frac{L}{2}} = kB\sin\left(\frac{kL}{2}\right)$

$\alpha = k\tan\left(\frac{kL}{2}\right)$

$\boxed{u = v\tan(v)}$ $u = \frac{\alpha L}{2}, v = \frac{kL}{2}$

Hodnota u je dána energií, hodnotu v hledáme v závislosti na energie. Řešení je tedy celá křivka.

Anti-symetrické řešení (liché funkce):

$B = 0, C = -D$ hodnoty funkcí: $De^{-\alpha\frac{L}{2}} = A\sin\left(\frac{kL}{2}\right)$

Bod $q = \frac{L}{2}$: hodnoty derivací: $-\alpha De^{-\alpha\frac{L}{2}} = kB\cos\left(\frac{kL}{2}\right)$

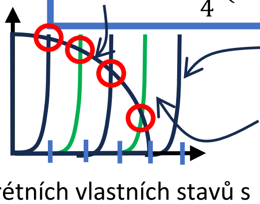
$\alpha = -k\,\mathrm{cotan}\left(\frac{kL}{2}\right)$

$\boxed{u = -v\,\mathrm{cotan}(v)}$

Uvnitř jámy, kde je $V(x) = 0$, můžeme nalézt vztah mezi k a energií. $E = \frac{k^2\hbar^2}{2m}$ dosazením do vztahu pro α dostaneme kružnici

$$\boxed{u^2 + v^2 = \frac{L^2}{4}(\alpha^2 + k^2) = \frac{mV_0L^2}{2\hbar^2} = u_0}$$

Řešení se najdou jako průsečíky křivek.



Vždy existuje alespoň jeden vázaný stav.

Počet N diskrétních vlastních stavů s energií $E < V_0$ je $N = m + 1$, kde m je největší celé číslo, pro které platí: $m\frac{\pi}{2} < \frac{mV_0L^2}{2\hbar^2}$

Zdroje:

Přednáška UKM z roku 2021: https://www.mancal.cz/teaching/introduction-to-quantum-theory-lecture/

- *Sekce videí od Harmonický oscilátor v souřadnicové reprezentaci - část 1.* : https://youtu.be/7ADyPINd2SQ
- *až po Pravoúhlá potenciální jáma konečné hloubky - část 2:* https://youtu.be/SkljaWBZEKA

Příště: **Tunelový jev**