Mechanika kwantowa III rok

Polecam Państwu opracowanie w wolnych chwilach nastepującego *nieobowiazkowego* projektu (z *).

Reprezentacja mechaniki kwantowej w Mathematice

Każdy stan kwantowy $|\psi>$ można przedstawić jako kombinację liniową stanów własnych $|n>$ oscylatora harmonicznego [1]

$$|\psi>= \Sigma_{i=1}^{N} \alpha_i |n_i>, \tag{1}$$

gdzie wszystkie stany $|n>$ można skonstruować ze stanu póżni przez kolenje działanie operatora kreacji $a^\dagger$

$$|n>= \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0> . \tag{2}$$

Istnieje wygodny sposób na przedstawienie sumy (**??**) w dowolnym programie algebraicznym. Na przykład w Mathematice stan (**??**) można zapisać jako listę

$$|\psi> \leftrightarrow \{N, \{\alpha_1, \ldots, \alpha_N\}, \{n_1\}, \{n_2\}, \ldots, \{n_N\}\}. \tag{3}$$

Pierwszy element tej listy określa liczbę stanów składających sie na sumę (**??**), drugi jest sam listą i zawiera zespolone (na ogół) współczynniki rozkładu (**??**), a następne elementy listy określają liczby obsadzeń kolejnych elementarnych, stanów bazowych $|n_i>$. W ten sposób określiliśmy jeszcze jedną reprezentację stanów kwantowych - reprezentację w Mathematice. Podobnie jak superpozycja (**??**) może zawierać dowolną liczbę stanów, tak samo lista (**??**) jest elastyczna i jej długość będzie się zmieniać dynamicznie w trakcie obliczeń. Zgodnie z naszą definicją stan próżni jest dany przez

$$|0> \leftrightarrow \{1, \{1.\}, \{0\}\}, \tag{4}$$

a reprezentacja dowolnego stanu elementarnego $|n>$ ma postać

$$|n> \leftrightarrow \{1, \{1.\}, \{n\}\}. \tag{5}$$

Zad.1 Zdefiniować (i uruchomić w Mathematice) podstawowe operacje na stanach kwantowych - listach: dodawanie, mnożenie przez liczbę oraz iloczyn skalarny.

$$|s_1> + |s_2> \leftrightarrow \quad add[s_1, s_2]: \quad \{lista_1, lista_2\} \rightarrow lista_3 \tag{6}$$

$$c|s_1> \leftrightarrow \quad mult[c, s_1]: \quad lista_1 \rightarrow lista_2 \tag{7}$$

$$< s_1|s_2> \leftrightarrow \quad sc[s_1, s_2]: \quad \{lista_1, lista_2\} \rightarrow liczba \tag{8}$$

[1] N jest na ogół nieskończone, naszym celem będzie zbadanie czy wartości obcięć N osiągalne na współczesnych PC-tach można już uznać za ∞.

Wsk. Stany s_1 i s_2 będą na ogół reprezentować dowolne kombinacje liniowe (**??**) wobec tego procedury *add* i *sc* muszą rozpoznawać identyczne stany elementarne w s_1 i s_2 i postępować zgodnie z regułami mechaniki kwantowej.

Zad.2 Zdefiniować (i uruchomić w Mathematice) procedury (moduły) odpowiadające operatorom kreacji, anihilacji, a także pędu i położenia

$$a^\dagger|s> \leftrightarrow \quad ac[s]: \quad lista_1 \to lista_2 \tag{9}$$

$$a|s> \leftrightarrow \quad aa[s]: \quad lista_1 \to lista_2 \tag{10}$$

$$p|s> \leftrightarrow \quad p[s]: \quad lista_1 \to lista_2 \tag{11}$$

$$x|s> \leftrightarrow \quad x[s]: \quad lista_1 \to lista_2 \tag{12}$$

$$\tag{13}$$

Wsk. Operatory te są liniowe, a operatory pędu i położenia wyrażają sie przez a i $a^\dagger$

$$x = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger), \;\; p = \frac{1}{i\sqrt{2}}(a - a^\dagger). \tag{14}$$

Zad. 3 Skonstruować (w Mathematice) bazę stanów elementarnych $|e_i>$, $i = 1, \ldots, N_{cut}$, które napinają przestrzeń Hilberta stanów o ograniczonej liczbie kwantów $n \leq N_{cut}$. Uwaga: baza musi być ortonormalna.

Zad. 4 Obliczyć (w Mathematice) reprezenatcję macierzową hamiltonianow: (a) oscylatora harmonicznego

$$H_{oh} = \frac{1}{2}(p^2 + x^2), \tag{15}$$

(b) przesuniętego oscylatora harmonicznego

$$H_{ohp} = \frac{1}{2}(p^2 + (x - c)^2), \tag{16}$$

i (c) oscylatora anharmonicznego

$$H_{an} = \frac{1}{2}(p^2 + x^2 + x^4), \tag{17}$$

w bazach z zad.3, dla kilku różnych wartości obcięcia N_{cut}. Korzystając z dostępnych w Mathematice procedur obliczyć numerycznie widmo (wartości własne) tych trzech operatorów. Prześledzić zależność kilku najniższych energii własnych od obcięcia. Porównać wyniki dla (a) i (b) ze znanym rozwiązaniem analitycznym. Wyniki dla oscylatora anharmonicznego można porównać z wynikami otrzymanymi metodą strzałów.

Projekt jest dobrowolny (!), rozwiązanie nie będzie miało bezpośredniego zwązku z zaliczeniem czy egzaminem . Natomiast, w razie zainteresowania, możemy je omówić i przedyskutować dalsze zastosowania we współczesnych teoriach kwantowych, na dodatkowym spotkaniu.

J. Wosiek