

Schrödingerin yhtälö aikariippuvilla reunaehdoilla

LuK-tutkielma
Turun yliopisto
Fysiikka
2024
Fil. yo. Joel Ruusuvuori
Tarkastaja:
Iiro Vilja

Turun yliopiston laatujärjestelmän mukaisesti tämän julkaisun alkuperäisyys on tarkastettu Turnitin OriginalityCheck-järjestelmällä

TURUN YLIOPISTO
Fysiikan laitos

Ruusuvuori, Joel Schrödingerin yhtälö aikariippuvilla reunaehdoilla

LuK-tutkielma, 15 s., 3 liites.
Fysiikka
Helmikuu 2024

Tutkielmassa tutkitaan yksiulotteisen äärettömän syvän potentiaalikuopan Schrödingerin yhtälöä, kun sen reunojen annetaan liikkua ajan kuluessa. Yhtälön muotoilussa hyödynnetään unitaarimuunnosta, jonka avulla ratkaistaan analyyttisesti muutama yksinkertainen esimerkki. Esitellään numeerisen analyysin avulla, miten kvanttisysteemiin voidaan vaikuttaa ohjaamalla sen reunoja. Pohditaan myös mahdollisia yleistyksiä monimutkaisempiin systeemeihin ja eri käyttökohteita.

Asiasanat: Aikariippuvat reunaehdot, Schrödingerin yhtälö, potentiaalikuoppa

Sisällys

Johdanto	1
1 Kiinteät reunat	2
2 Liikkuvat reunat	3
2.1 Reunat vakioetäisyydellä	7
2.2 Laajenevat reunat	9
3 Kvanttisyteemin ohjaaminen reunojen avulla	10
4 Pohdinta	13
5 Liite	14

Johdanto

Yksi ensimmäisistä kvanttimekaanisista systeemeistä, jonka Schrödingerin yhtälön opiskelijat oppivat ratkaisemaan, on yksiulotteinen hiukkanen vangittuna neliskantaiseen äärettömän syvään potentiaaliukuoppaan. Tämän yhtälön ratkaiseminen on helppoa ja se auttaa opiskelijaa ymmärtämään kvanttimekaanisia systeemejä yleisesti. Vaikka systeemi onkin varsin idealisoitu, se toimii silti hyvänä approksimaationa joihinkin todellisiin systeemeihin ja demonstroi mielenkiintoisia ilmiöitä ja tuloksia kvanttimekaniikassa yleisesti. Todellisten systeemien tutkiminen tällaisten yksinkertaistuksien avulla on hyvin tärkeää, sillä Schrödingerin yhtälöihin löytyy vain harvoja analyttisiä ratkaisuja.

Looginen tapa laajentaa tällaisen yksinkertaisen systeemin tutkimista on antaa sen reunojen liikkua ajan kuluessa mielivaltaisella tavalla. Kuten tullaan huomaamaan, tämä monimutkaistaa ongelmaa merkittävästi, mutta tällaisillekin systeemeille löytyy analyttisiä ratkaisuja ja mielenkiintoisia ilmiöitä. Enrico Fermi [1] esitti vuonna 1949 ensimmäiset ajatukset tämän kaltaisista systeemeistä tutkiessaan kosmisen säteilyn syntyä, jossa hiukkanen liikkuu epähomogeenisessä magneettikentässä. Myöhemmin Ulam [2] esitti ns. Fermi-kiihdyttimen (engl. Fermi accelerator), jossa pallo kimpoilee kahden oskilloivan seinän välillä käyttäytyen hyvin epäsäännöllisesti. Doescher ja Rice [3] tutkivat ensimmäisenä ongelmaa kvanttimekaanisesti tarkastelemalla laatikkoa, jonka toinen reuna liikkuu vakionopeudella, ja siitä lähtien ongelmaa on pohdittu monesta eri näkökulmasta ja monilla erilaisilla reunaehdoilla. Tämän tutkielman tavoitteena on muodostaa ja ratkaista muutaman tällaisen systeemin Schrödingerin yhtälö analyttisesti sekä esitellä numeerisia ratkaisuja ja niissä esiintyviä ilmiöitä eri käyttökohteiden valossa.

1 Kiinteät reunat

Lähdetään liikkeelle tutummasta ongelmasta kuten Di Martino [4] eli yksiulotteisesta epärelativistisesta hiukkasesta äärettömän syvässä laatikossa, jonka reunat ovat paikoillaan. Asetetaan reunat pisteisiin $a = -l/2 + d$ ja $b = l/2 + d$, joissa l on reunojen välinen etäisyys ja d niiden keskipiste. Tällöin systeemin dynamiikkaa kuvaa tavallinen aikariippuva Schrödingerin yhtälö

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = H\psi(x, t), \quad (1)$$

jossa $H = \frac{p^2}{2m} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ on Hamiltonin operaattori, m on hiukkasen massa, p on liikemääräoperaattori, i on imaginääriyksikkö, \hbar on redusoitu Planckin vakio ja $\psi(x, t)$ on hiukkasen paikasta ja ajasta riippuva aaltofunktio. Tällainen osittaisdifferentiaaliyhtälö voidaan ratkaista muuttujien separoinnilla, jolloin aaltofunktioksi saadaan $\psi(x, t) = u(x)\exp(-iEt/\hbar)$, jossa $u(x)$ on aaltofunktion paikasta riippuva osa ja E on energian ominaisarvo. Tällöin ongelma redusoituu paikkariippuvan aaltofunktion tavalliseksi differentiaaliyhtälöksi

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2} = Eu(x), \quad (2)$$

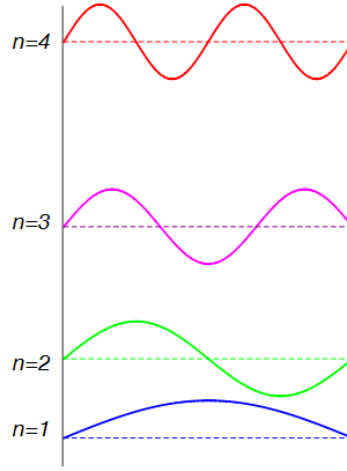
jonka yleinen ratkaisu on

$$u(x) = c_1 e^{+ikx} + c_2 e^{-ikx}, \quad (3)$$

jossa $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ ja c_1 ja c_2 ovat mielivaltaisia vakioita, jotka voidaan määrätä Dirichlet'n reunaehdoilla $u(a) = u(b) = 0$, ja normalisoimalla tilat. Tällöin saadaan

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{n\pi}{l}(x - a)\right), \quad (4)$$

jossa $n \in \mathbb{N}$. Sallitut energian arvot ovat $E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ml^2}$. Kuvassa 1 on esitetty hiukkasen neljä alinta ominaistilaa.



Kuva 1. Hiukkasen ominaistilat. [4]

2 Liikkuvat reunat

Siirrytään seuraavaksi tutkimaan liikkuvia reunoja. Tarkoituksena on muotoilla ongelma samalla tavalla kuin Di Martino [4, 5]. Valitaan taas reunat $a = -l/2 + d$ ja $b = l/2 + d$, mutta tällä kertaa annetaan niiden riippua ajasta eli $l = l(t)$ ja $d = d(t)$. Systemin Hilbertin avaruus on $L^2(I_{l,d})$ (aaltofunktiot neliöintegroituvia), jossa intervalli $I_{l,d}$ on

$$I_{l,d} = [a, b] = \left[d - \frac{l}{2}, d + \frac{l}{2} \right]. \quad (5)$$

Schrödingerin yhtälössä (1) esiintyvä operaattori p^2 operoi funktioihin, jotka kuuluvat Sobolevin avaruuteen $\mathcal{H}^2(I_{l,d})$ (funktioit neliöintegroituvia ja kahdesti derivoituvia) ja noudattavat Dirichlet'n reunaehtoja. Sen määrittelyjoukko on siis

$$D_{l,d} = \left\{ \psi \in \mathcal{H}^2(I_{l,d}) \mid \psi \left(d - \frac{l}{2} \right) = \psi \left(d + \frac{l}{2} \right) = 0 \right\}. \quad (6)$$

Tämä joukko kuitenkin riippuu ajasta, tarkoittaen, että eri ajanhetkillä systeemin aaltofunktiot kuuluvat eri avaruuksiin. Tämän takia aaltofunktion aikaderivaatassa

$$\frac{d}{dt}\psi(t) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\psi(t + \epsilon) - \psi(t)}{\epsilon}, \quad (7)$$

esiintyy kahden vektorin välinen summa, jossa vektorit kuuluvat eri Hilbertin avaruuksiin $L^2(I_{l(t),d(t)}) \neq L^2(I_{l(t+\epsilon),d(t+\epsilon)})$. Ongelma pitää siis muotoilla siten, että aikaderivaatasta saadaan järkevä.

Tämä voidaan saavuttaa upottamalla Hilbertin avaruus $L^2(I_{l,d})$ laajempaan avaruuteen $L^2(\mathbb{R})$ hyödyntämällä suoraa summaa

$$L^2(\mathbb{R}) = L^2(I_{l,d}) \oplus L^2(I_{l,d}^c), \quad (8)$$

jossa $I_{l,d}^c$ on intervallin $I_{l,d}$ komplementti. Tälle laajennetulle avaruudelle saadaan Hamiltonin operaattori

$$H_0(l, d) = \frac{p_{l,d}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \oplus_{l,d} 0, \quad (9)$$

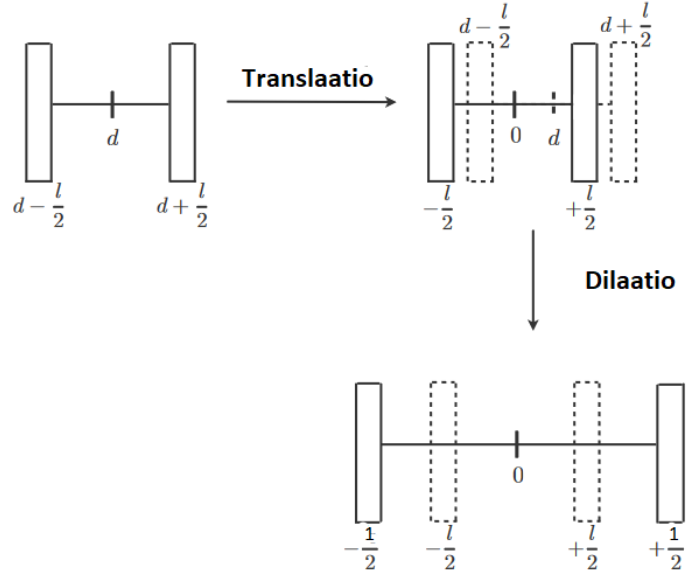
joka operoi muotoa $\psi + \chi$ oleviin aaltofunktioihin, joissa $\psi \in D_{l,d}$ ja $\chi \in L^2(I_{l,d}^c)$. Hamiltonin operaattorin on valittu olevan reunojen ulkopuolella nolla, koska olemme kiinnostuneita vain reunojen sisäpuolesta, jolloin $\chi = 0$. Nyt siis reunojen lisäksi myös systeemin Hamiltonin operaattori riippuu ajasta johtuen suoran summan aika-riippuvuudesta. Lisäksi aaltofunktioiden aikaderivaatat ovat nyt määriteltyjä, sillä ne kuuluvat kaikilla ajanhetkillä samaan avaruuteen $L^2(\mathbb{R})$. Seuraavaksi ongelma pitää muokata helpommin käsiteltävään muotoon.

Yleinen tapa ratkaista tämän kaltainen ongelma on löytää sille unitaaristi ekvivalentti muoto, jossa Schrödingerin operaattorit operoivat yhteiseen kiinteään määrittelyjoukkoon. Intervalli $I_{l,d}$ voidaan muuttaa muotoon

$$I = I_{1,0} = \left[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right], \quad (10)$$

avaruuden \mathbb{R} translaatiolla $x \rightarrow x - d$ ja dilaatiolla $x \rightarrow x/l$. Kuvassa 2 on esitetty, miten intervalli muuntuu kiinteäksi näillä muunnoksilla. Näitä vastaavat avaruuden $L^2(\mathbb{R})$ muunnokset ovat silloin

$$(\mathcal{T}(d)\psi)(x) = \psi(x - d), \quad \text{ja} \quad (\mathcal{D}(s)\psi)(x) = e^{-s/2}\psi(e^{-s}x). \quad (11)$$



Kuva 2. Intervallin muuntuminen translaation ja dilaation yhdistelmänä. Muokattu lähteestä [4]

Nämä operaattorit voidaan itsessään esittää muodossa

$$\mathcal{T}(d) = e^{-\frac{i}{\hbar}dp}, \quad \text{ja} \quad \mathcal{D}(s) = e^{-\frac{i}{\hbar}s(x \circ p)}, \quad (12)$$

jossa $x \circ p = \frac{1}{2}(xp + px)$ ja x on paikkaoperaattori. Kirjoitetaan näiden yhdistelmämuotoon

$$U(l, d) = \mathcal{D}(\ln l)^\dagger \mathcal{T}(d)^\dagger = \mathcal{D}(-\ln l) \mathcal{T}(-d), \quad (13)$$

joka muuntaa aaltofunktion muotoon

$$\begin{aligned} (U(l, d)\psi)(\xi) &= (\mathcal{D}(-\ln l) \mathcal{T}(-d)\psi)(\xi) = (\mathcal{D}(-\ln l)\psi)(\xi + d) \\ &= (\mathcal{D}(-\ln l)\tilde{\psi})(\xi) = \sqrt{l}\tilde{\psi}(l\xi) = \sqrt{l}\psi(l\xi + d). \end{aligned} \quad (14)$$

Tämä muunnos kuvaa avaruuden $L^2(I_{l,d}^c)$ avaruudeksi $L^2(I^c)$ ja joukon (6) kiinteäksi joukoksi $D = U(l, d)D_{l,d}$ eli

$$D = \left\{ \phi \in \mathcal{H}^2(I) \mid \phi\left(-\frac{1}{2}\right) = \phi\left(\frac{1}{2}\right) = 0 \right\} \subset L^2(I). \quad (15)$$

Myös Hamiltonin operaattori (9) muuntuu

$$H(l) = UH_0U^\dagger = \frac{1}{l^2} \frac{p^2}{2m} \oplus 0 = -\frac{1}{l^2} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \oplus 0, \quad (16)$$

jolloin sen määrittelyjoukko ei riipu enää ajasta. Muunnetun Hamiltonin operaattorin ominaisarvot skaalautuvat tekijän l^{-2} verran, sillä liikemääräoperaattori skaalautuu muunnoksessa

$$U(l, d)pU(l, d)^\dagger = \mathcal{D}(\ln l)^\dagger p \mathcal{D}(\ln l) = \frac{p}{l}, \quad (17)$$

sillä translaatio-operaattori $\mathcal{T}(d) = \exp(-idp/\hbar)$ kommutoi generaattorinsa p kanssa. Tämän kaavan johto on esitetty liitteessä.

Merkitään tästä lähtien selvyuden vuoksi aaltofunktioita liikkuvassa avaruudessa $\psi(x)$, jossa $x \in I_{l,d}$ ja kiinteässä avaruudessa $\phi(y)$, jossa $y = \frac{x-d}{l} \in I$ eli tarkastellaan vain laatikon sisäpuolta. Aaltofunktioiden välille voidaan muodostaa relaatio $\phi(t) = U(l, d)\psi(t)$, jonka avulla voidaan johtaa kiinteän avaruuden Schrödingerin yhtälön

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \phi &= i\hbar \left(U(l, d)\dot{\psi} + \dot{U}(l, d)\psi \right) \\ &= \left(U(l, d)H_0(l, d) + i\hbar\dot{U}(l, d) \right) \psi \\ &= \left(U(l, d)H_0(l, d)U^\dagger(l, d) + i\hbar\dot{U}(l, d)U^\dagger(l, d) \right) U(l, d)\psi \\ &= (H(l) + K(l, d)) \phi, \end{aligned} \quad (18)$$

jonka johdossa on hyödynnetty alkuperäistä Schrödingerin yhtälöä $i\hbar\dot{\psi} = H_0\psi$, pisteen tarkoittaessa aikaderivaattaa, sekä muunnoksen $U(l, d)$ unitaarisuutta. Nyt Schrödingerin yhtälöön on tullut muuntuneen Hamiltonin operaattorin lisäksi ylimääräinen geometrinen termi $K(l, d) = i\hbar\dot{U}(l, d)U^\dagger(l, d)$.

Lasketaan seuraavaksi tämän termin vaikutus yhtälöön. Kaavojen (12) ja (13) avulla voidaan kirjoittaa

$$U(l, d) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \ln(l)x \circ p\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} dp\right). \quad (19)$$

Tällöin geometrinen termi saadaan hyödyntämällä kaavaa (17)

$$\begin{aligned} K(l, d) &= i\hbar \left(\frac{i\dot{l}}{\hbar l} x \circ p U(l, d) + U(l, d) \frac{i}{\hbar} \dot{d} p \right) U^\dagger(l, d) \\ &= -\frac{\dot{l}}{l} x \circ p - \frac{\dot{d}}{l} p. \end{aligned} \quad (20)$$

Lopulliseksi Schrödingerin yhtälöksi kiinteillä reunoilla saadaan

$$i\hbar \frac{d}{dt} \phi = \left(\frac{1}{l^2} \frac{p^2}{2m} - \frac{\dot{l}}{l} x \circ p - \frac{\dot{d}}{l} p \right) \phi. \quad (21)$$

Sovelletaan tätä yhtälöä seuraavaksi muutama esimerkkiin.

2.1 Reunat vakioetäisyydellä

Seurataan myös tässä kappaleessa Di Martinoa [4, 5]. Tarkastellaan ensiksi tilannetta, jossa reunat liikkuvat tasaisella nopeudella ilman dilaatiota eli

$$\dot{l}(t) = 0, \quad d(t) = d_0 + vt, \quad (22)$$

jossa d_0 on laatikon keskipiste ajanhetkellä nolla ja v on laatikon nopeus. Tällöin Schrödingerin yhtälöksi (21) olettaen, että $l = 1$ saadaan

$$i\hbar \frac{d}{dt} \phi = \left(\frac{p^2}{2m} - vp \right) \phi, \quad (23)$$

joka on täsmälleen sama kuin Galilei muunnettu Schrödingerin yhtälö, kuten saattoi odottaakin.

Tarkastellaan seuraavaksi tasaisesti kiihtyvää laatikkoa ilman dilaatiota eli

$$\dot{l}(t) = 0, \quad d(t) = d_0 - \frac{1}{2}gt^2, \quad (24)$$

jossa g on kiihtyvyys. Jos taas $l = 1$, saadaan Schrödingerin yhtälöksi.

$$i\hbar \frac{d}{dt} \phi = \left(\frac{p^2}{2m} + gtp \right) \phi. \quad (25)$$

Yhtälön Hamiltonin operaattori riippuu nyt ajasta, joten muunnetaan se helpommin käsiteltävään muotoon tekemällä unitaarinen mittamuunnos

$$G(t) : L^2(I) \rightarrow L^2(I) : \phi \mapsto \chi = G(t)\phi, \quad (26)$$

jossa

$$\chi(y) = (G(t)\phi)(y) = e^{\frac{i}{\hbar}(mgyt - \frac{1}{6}mg^2t^3)}\phi(y). \quad (27)$$

Määrittelyjoukko D pysyy invarianttina muunnoksessa $G(t)(D) = D$. Schrödingerin yhtälö (25) muuntuu samalla tavalla kuin kaavassa (18), sillä mittamuunnos on unitaarinen eli

$$i\hbar \frac{d}{dt}\chi = \left(G(t) \left(\frac{p^2}{2m} + gtp \right) G^\dagger(t) + i\hbar \dot{G}(t) G^\dagger(t) \right) \chi, \quad (28)$$

jossa

$$G(t) \left(\frac{p^2}{2m} + gtp \right) G^\dagger(t) = \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{2}mg^2t^2, \quad (29)$$

(joka on laskettu liitteessä) ja

$$i\hbar \dot{G}(t) G^\dagger(t) = -mgx + \frac{1}{2}mg^2t^2, \quad (30)$$

jolloin lopulliseksi Schrödingerin yhtälöksi saadaan

$$i\hbar \frac{d}{dt}\chi = \left(\frac{p^2}{2m} - mgx \right) \chi, \quad (31)$$

joka kuvaa hiukksen dynamiikkaa vakiossa gravitaatiopotentiaalissa $-mgx$. Tilanne, jossa hiukkanen on kiihtyvässä laatikossa on siis oleellisesti sama kuin tilanne, jossa se on painovoimakentässä, eli Einsteinin ekvivalenssiperiaate pätee. Yhtälö (31) on separoituva ja sen paikkariippuva ratkaisu on lineaarikombinaatio Airyn funktioista. Di Martino [4] antaa ratkaisun aaltofunktion ϕ paikkariippuvalle osalle liikkuvan avaruuden muuttujan x kanssa

$$u(x) = c_1 \text{Ai} \left(\frac{x}{l} - \frac{E}{mgl} \right) + c_2 \text{Bi} \left(\frac{x}{l} - \frac{E}{mgl} \right), \quad (32)$$

jossa c_1 ja c_2 ovat vakioita

2.2 Laajenevat reunat

Tarkastellaan seuraavaksi tilannetta, jossa laatikon keskikohta pysyy paikoillaan origossa, mutta reunat etääntyvät toisistaan tasaisella nopeudella v eli

$$l(t) = l_0 + vt, \quad d(t) = 0, \quad (33)$$

jossa l_0 on reunojen etäisyys toisistaan ajanhetkellä nolla. Tällöin Schrödingerin yhtälöksi saadaan

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2ml^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + i\hbar \frac{v}{l} \left(y \frac{\partial \phi}{\partial y} + \frac{1}{2} \phi \right), \quad (34)$$

joka on samankaltainen kuin Cooneyn artikkelin [6] kaava (2.27), mutta sisältää ylimääräisen termin $\frac{1}{2}\phi$. Seurataan yhtälön ratkaisussa nyt suurimmaksi osaksi Cooneyn artikkelissa esitettyä Greenbergerin metodologiaa. Kirjoitetaan aaltofunktio muotoon $\phi(y, t) = \varphi(y, t)f(y, t)$, jossa $f(y, t)$ on integroiva tekijä. Tällöin funktiolle $\varphi(y, t)$ saadaan Schrödingerin yhtälö

$$i\hbar(f\varphi_t + f_t\varphi) = -\frac{\hbar^2}{2ml^2}(f_{yy}\varphi + 2f_y\varphi_y + f\varphi_{yy}) + i\hbar\frac{v}{l}(yf_y\varphi + yf\varphi_y + \frac{1}{2}f\varphi), \quad (35)$$

jossa alaindeksit tarkoittavat osittaisderivaattoja. Vaatimalla, että funktion φ_y kerroimet häviävät saadaan tekijälle $f(y, t)$ differentiaaliyhtälö

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{ml^2}f_y + i\hbar\frac{v}{l}yf = 0 \\ \Rightarrow \frac{f_y}{f} &= \frac{\partial}{\partial y} \ln(f) = \frac{imvly}{\hbar} \\ \Rightarrow f(y, t) &= \exp\left(i\frac{mvly^2}{2\hbar}\right), \end{aligned} \quad (36)$$

jolloin

$$\phi(y, t) = \varphi(y, t) \exp\left(i\frac{mv l(t)y^2}{2\hbar}\right). \quad (37)$$

Sijoittamalla tämä yhtälöön (35) saadaan

$$i\hbar l(t)^2 \frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2}. \quad (38)$$

Tekijästä $l(t)^2$ päästään eroon uudelleen parametrisoimalla aika. Merkitään uutta parametria $\tau(t)$, jolloin ketjusäännöllä

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t} = \frac{\partial\varphi}{\partial\tau} \frac{d\tau}{dt}. \quad (39)$$

Vaaditaan $d\tau/dt = l(t)^{-2}$ ja ratkaistaan τ

$$\tau(t) = \int_0^t l(t')^{-2} dt' = \frac{1}{v} \left(\frac{1}{l_0} - \frac{1}{l(t)} \right) = \frac{t}{l_0 l(t)} \quad (40)$$

$$\Leftrightarrow t(\tau) = \frac{l_0^2 \tau}{1 - l_0 v \tau}, \quad (41)$$

jolloin Schrödingerin yhtälöksi saadan

$$i\hbar \frac{\partial\varphi}{\partial\tau} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2\varphi}{\partial y^2}. \quad (42)$$

Tämä yhtälö on muodoltaan täsmälleen sama kuin kappaleen 1 yhtälö (1) reunojen ollessa pisteissä $a = -1/2$ ja $b = 1/2$. Tällöin yhtälön ratkaisuksi saadaan sama kuin paikoillaan olevan laatikon aaltofunktio

$$\varphi(y, \tau) = \sqrt{2} \sin \left(n\pi \left(y + \frac{1}{2} \right) \right) \exp \left(\frac{-iE_n\tau}{\hbar} \right), \quad (43)$$

jossa $E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m}$. Tämä funktio saadaan muunnettua Schrödingerin yhtälön (34) ratkaisuksi muunnoksilla (37) ja (40)

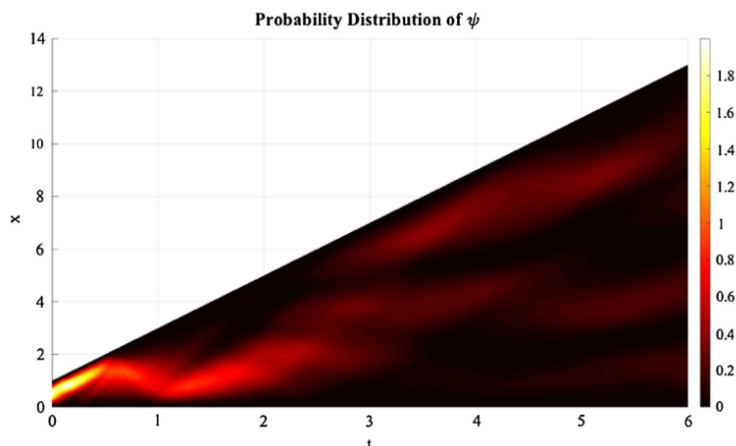
$$\phi(y, t) = \sqrt{2} \sin \left(n\pi \left(y + \frac{1}{2} \right) \right) \exp \left(i \frac{mvl(t)y^2}{2\hbar} - i \frac{E_n t}{l_0 l(t)\hbar} \right). \quad (44)$$

Lopuksi alkuperäisen liikkuvan avaruuden ratkaisu saadaan käänteismuunnoksella $\psi(x, t) = U^\dagger(l, d)\phi(x, t)$ ja $y = \frac{x-d}{l}$, joissa $d = 0$. Tällöin

$$\psi(x, t) = \sqrt{\frac{2}{l(t)}} \sin \left(n\pi \left(\frac{x}{l(t)} + \frac{1}{2} \right) \right) \exp \left(i \frac{mvx^2}{2\hbar l(t)} - i \frac{E_n t}{l_0 l(t)\hbar} \right). \quad (45)$$

3 Kvanttisysteemin ohjaaminen reunojen avulla

Kvanttimekaanisen hiukkasen tilaan voidaan vaikuttaa ohjaamalla sen reunaehtoja. Duffin ja Dijkstra [7] tutkivat numeerisesti aikariippuvia laatikoita seuraavasti. Mikä



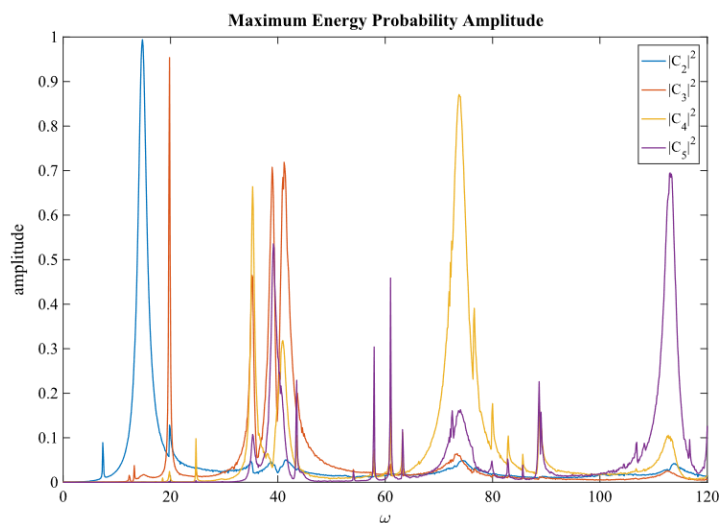
Kuva 3. Hiukkasen todennäköisyysjakauma ajan funktiona laatikossa, jonka toinen seinä liikkuu tasaisella nopeudella. [7]

tahansa kiinteän laatikon aaltofunktio voidaan esittää ominaistilojen lineaarikombinaationa

$$\psi(x, t) = \sum_n C_n u_n(x) \exp(-iE_n t/\hbar), \quad (46)$$

jossa $u_n(x) = \sqrt{2/l} \sin(n\pi x/l)$ ovat tavallisen kiinteän laatikon ominaistilat ja C_n ovat alkuehdoista riippuvat vakiot, jotka voidaan numeerisesti ratkaista antamalla niiden riippua ajasta ja sijoittamalla funktio (46) normaaliin aikariippuvaan Schrödingerin yhtälöön (1), kun $l = l(t)$. Esimerkkinä tämän avulla Duffin ja Dijkstra simuloivat tasaisella nopeudella laajenevassa laatikossa ($l(t) = 1 + 2t$) olevan hiukkasen todennäköisyysjakauman $|\psi(x, t)|^2$ ajan funktiona, joka on esitetty kuvassa 3. Simulaation alussa hiukkanen on perustilalla, mutta ajan kuluessa tummien viivojen määrä kasvaa tarkoittaen, että hiukkasen todennäköisyys täyttää korkeampia viritystiloja kasvaa. Lisäksi tällainen viritystilojen populoituminen on sitä voimakkaampaa mitä nopeammin laatikko laajenee, jolloin tarpeeksi suurilla nopeuksilla on mahdollista siirtää hiukkanen suurimmaksi osaksi pois perustilaltaan.

Duffin ja Dijkstra tutkivat samalla menetelmällä myös oskilloivaa laatikkoa $l(t) = l_0 + v \sin(\omega t)$, jossa ω on kulmataajuus, v on amplitudi ja l_0 on reunojen keskimääräinen etäisyys. He huomasivat, että sopivilla kulmataajuuden valinnoilla hiukkanen



Kuva 4. Neljän ensimmäisen viritystilan maksimi todennäköisyys kulmataajuuden ω funktiona, kun $L_0 = 1$ ja $v/L_0 = 0,05$. [7]

alkaa oskilloimaan perustilan ja tiettyjen viritystilojen välillä. Kuvassa 4 on esitetty eri viritystilojen maksimi populaatio kulmataajuuden funktiona. Kuvasta nähdään, että eri viritystiloille löytyy kapeat ja korkeat huiput, joissa ei esiinny paljoa muita viritystiloja. Hiukkanen kuitenkin palaa aina takaisin perustilaansa syklin lopussa, jonka jälkeen alkaa uusi sykli. Duffinin ja Dijkstran mukaan hiukkasen voisi periaatteessa siirtää myös pysyvästi jollekin korkeammalle energiatasolle jollakin tätä monimutkaisemmalla systeemillä esimerkiksi yhdistämällä oskilloivan reunan liikkeeseen jokin eksponentiaalisesti kiihtyvä osa.

Kvanttisynteesin ohjaaminen perustilalta jollekin tietylle viritystilalle luotettavasti on kvanttitekniikan kannalta mielenkiintoinen mahdollisuus. Duffinin ja Dijkstran mukaan edellisiä systeemejä voitaisiin soveltaa kokeellisesti esimerkiksi lasersäteilyyn perustuviin prosesseihin, kuten Rabin värähtelyyn (engl. Rabi oscillation) ja STIRAPiin (stimulated Raman adiabatic passage) [8]. Molemmissa metodeissa käytetään valoa ohjaamaan kvanttisysteemiä perustilalta halutulle viritystilalle joko suoraan tai välivaiheiden kautta. Näitä tilasiirtymiä kuitenkin rajoittavat sähköisten dipolien valintasäännöt, jolloin kaikkia tiloja ei voida populoida halutusti. Periodisesti ohjatussa laatikossa ei kuitenkaan ole tätä ongelmaa, sillä se ei riipu

valintasäännöistä, joten se voisi olla hyvä vaihtoehto. Tämän kaltaisia systeemejä on tutkittu myös useammassa ulottuvuudessa [9].

4 Pohdinta

Tässä tutkielmassa rajoitauduttiin käsittelemään yksinkertaisuuden vuoksi vain yksiulotteisia epärelativistisia äärettömän syviä potentiaalikuoppia, joiden reunat liikkuvat suhteellisen yksinkertaisilla tavoilla. Kuten kappaleessa 2 huomattiin, yksinkertaisenkin esimerkin ratkaiseminen analyttisesti vaati melko paljon matemaattista huolellisuutta ja vähänkään monimutkaisemmissa tapauksissa pitää yleensä tyytyä numeerisiin ratkaisuihin. Tämä ei kuitenkaan tarkoita, etteikö monimutkaisempiakin systeemejä voisi tutkia. Esimerkiksi yleistyksiä useampiin ulottuvuuksiin on tutkittu [9–11]. Myös erilaisia potentiaaleja on tutkittu, kuten aikariippuvaa harmonista oskillaattoria ja radiaalisesti muuntuvaa vetyatomia [11]. Lisäksi Jana ja Roy [12] ovat tutkineet eksaktisti ratkaistavissa olevia potentiaaleja hyödyntäen supersymmetriaa. Myös Klein-Gordonin yhtälöä on tutkittu liikkuvilla reunaehdoilla esimerkkinä relativistisesta versiosta [13]. Monet näistä laajennuksista kuitenkin hyödyntävät samankaltaisia metodeja kuin yksinkertaisemmissa tapauksissa. Tämä on taas yksi syy, miksi tällaisten epärealististen yksinkertaistuksien tutkiminen on niin tärkeää.

Aikariippuville reunaehdoille yleisesti löytyy myös paljon muitakin kokeellisia sovelluksia kuin mitä kappaleessa 3 esitettiin, kuten kaviteetteihin vangituissa atomeissa [14], suprajohdavissa kvantti-interferenssilaitteissa (SQUID) [15], Bose-Einstein kondensaateissa [16] ja dynaamisessa Casimirin ilmiössä mikroaaltokaviteeteissa [17], jossa fotoneja voidaan luoda tyhjiöstä muuttuvilla reunaehdoilla. Ohjatuilla reunaehdoilla on myös esitetty mahdollisuus tehdä spektroskopisia mittauksia gravitaation avulla [18], jonka avulla voitaisiin testata Einsteinin ekvivalenssiperiaatetta ja Newtonin gravitaatiolakia mikrometriensa skaalalla.

5 Liite

Muutamassa laskussa hyödynnettiin Baker-Hausdorff lemmaa [19]

$$e^X Y e^{-X} = Y + [X, Y] + \frac{1}{2!}[X, [X, Y]] + \frac{1}{3!}[X, [X, [X, Y]]] + \dots,$$

jossa X ja Y ovat operaattorita ja $[X, Y]$ niiden kommutaattori

Lasketaan tämän avulla kaava (17) eli

$$U(l, d)pU(l, d)^\dagger = \mathcal{D}(\ln l)^\dagger p \mathcal{D}(\ln l) = \frac{p}{l},$$

jossa $\mathcal{D}(s) = \exp\left(\frac{is}{2\hbar}(xp + px)\right)$. Merkitään $A = \frac{s}{2\hbar}(xp + px)$, jossa $s = \ln l$. Lasketaan kommutaattori $[iA, p]$ hyödyntäen kanonista kommutaatiorelaatiota $[x, p] = i\hbar$

$$iAp = \frac{is}{2\hbar}(xp^2 + pxp) = \frac{is}{2\hbar}(pxp + i\hbar p + p^2x + pi\hbar) = ipA - sp,$$

eli $[iA, p] = -sp$. Tällöin saadaan

$$\begin{aligned} e^{iA} p e^{-iA} &= p + [iA, p] + \frac{1}{2!}[iA, [iA, p]] + \frac{1}{3!}[iA, [iA, [iA, p]]] + \dots \\ &= p - sp + \frac{1}{2!}s^2p - \frac{1}{3!}s^3p + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-s)^n}{n!} p = e^{-s} p = \frac{p}{l}, \end{aligned}$$

Kaavan (29) laskemisessa tarvittiin relaatiota

$$G(t)pG^\dagger(t) = p - mgt,$$

jossa $G(t)$ on annettu kaavassa (27). Tässä kohtaa G :n eksponentin toinen termi kommutoi liikemääräoperaattorin kanssa, joten se voidaan jättää tarkastelusta pois. Merkitään $a = \frac{i}{\hbar}mgt$, jolloin $[ax, p] = ai\hbar$. Tällöin saadaan

$$e^{ax} p e^{-ax} = p + [ax, p] + \frac{1}{2!}[ax, [ax, p]] + \dots = p + ai\hbar = p - mgt,$$

koska kolmannelta termistä alkaen kaikki termit ovat nollia. Kaavassa (29) tarvittiin myös liikemäärän neliötä, joka saadaan suoraan edellisestä eli

$$G(t)p^2G(t) = (p - mgt)^2 = p^2 - 2mgt p + m^2g^2t^2.$$

Viitteet

- [1] E. Fermi, *Physical Review* **75**, 1169 (1949).
- [2] S. M. Ulam, *Fourth Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability* **3**, 315 (1961).
- [3] S. W. Doescher ja M. H. Rice, *American Journal of Physics* **37**, 1246 (1969).
- [4] S. Di Martino ja P. Facchi, *International Journal of Geometric Methods in Modern Physics* **12**, 1560003 (2015).
- [5] S. Di Martino, F. Anza', P. Facchi, A. Kossakowski, G. Marmo, A. Messina, B. Militello ja S. Pascazio, *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **46**, 365301 (2013).
- [6] K. Cooney, The infinite potential well with moving walls, 2017, arXiv:1703.05282 [quant-ph].
- [7] C. Duffin ja A. G. Dijkstra, *The European Physical Journal D* **73**, 221 (2019).
- [8] N. V. Vitanov, A. A. Rangelov, B. W. Shore ja K. Bergmann, *Reviews of Modern Physics* **89**, 015006 (2017).
- [9] F. Lenz, B. Liebchen, F. K. Diakonov ja P. Schmelcher, *New Journal of Physics* **13**, 103019 (2011).
- [10] F. Anzà, S. D. Martino, A. Messina ja B. Militello, *Physica Scripta* **90**, 074062 (2015).
- [11] R. A. Van Gorder, *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **479**, 20220759 (2023).
- [12] T. Jana ja P. Roy, *Physics Letters A* **372**, 2368 (2008).
- [13] O. Hamidi ja H. Dehghan, *Reports on Mathematical Physics* **73**, 11 (2014).
- [14] A. Mody, M. Haggerty, J. M. Doyle ja E. J. Heller, *Physical Review B* **64**, 085418 (2001).
- [15] J. R. Friedman, V. Patel, W. Chen, S. K. Tolpygo ja J. E. Lukens, *Nature* **406**, 43 (2000).
- [16] A. del Campo ja M. G. Boshier, *Scientific Reports* **2**, 648 (2012).
- [17] C. M. Wilson, T. Duty, M. Sandberg, F. Persson, V. Shumeiko ja P. Delsing, *Physical Review Letters* **105**, 233907 (2010).
- [18] T. Jenke, P. Geltenbort, H. Lemmel ja H. Abele, *Nature Physics* **7**, 468 (2011).
- [19] J. J. Sakurai ja J. J. Napolitano, *Modern quantum mechanics*, second edition ed. (Pearson Education India New Dehli, 2014).