9 Oscylator harmoniczny metodą operatorów kreacji i anihilacji

9.1 Operatory kreacji i anihilacji

Spróbujmy znany nam już hamiltonian oscylatora harmonicznego

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\left(\frac{\hat{p}^2}{m} + \omega^2 m\,\hat{x}^2\right) \tag{9.1}$$

zapisać przy pomocy operatorów

$$\begin{aligned} \hat{a} &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}\hat{p}, \\ \hat{a}^\dagger &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}\hat{p}. \end{aligned} \tag{9.2}$$

Po pierwsze tak zdefiniowane operatory $\hat{a}$ i $\hat{a}^\dagger$ nie są hermitowskie. Po drugie są to obiekty bezwymiarowe, w taki bowiem sposób dobraliśmy stałe mnożące $\hat{x}$ i $\hat{p}$. Po trzecie ich komutator jest równy 1. Policzmy najpierw iloczyny:

$$\hat{a}\hat{a}^\dagger = \frac{m\omega}{2\hbar}\,\hat{x}^2 - \frac{i}{2\hbar}\,\hat{x}\,\hat{p} + \frac{i}{2\hbar}\hat{p}\,\hat{x} + \frac{1}{2m\omega\hbar}\,\hat{p}^2 \tag{9.3}$$

i

$$\hat{a}^\dagger\hat{a} = \frac{m\omega}{2\hbar}\,x^2 + \frac{i}{2\hbar}\,x\,\hat{p} - \frac{i}{2\hbar}\hat{p}\,x + \frac{1}{2m\omega\hbar}\,\hat{p}^2. \tag{9.4}$$

Pamiętając że:

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar, \tag{9.5}$$

mamy

$$\left[\hat{a}, \hat{a}^\dagger\right] = \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} = -\frac{i}{2\hbar}\,[\hat{x}, \hat{p}] + \frac{i}{2\hbar}\,[\hat{p}, \hat{x}] = 1. \tag{9.6}$$

Z kolei *antykomutator*, czyli suma

$$\left\{\hat{a}, \hat{a}^\dagger\right\} = \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} = \frac{1}{m\omega\hbar}\,\hat{p}^2 + \frac{m\omega}{\hbar}\,x^2 = \frac{2}{\hbar\omega}\frac{1}{2}\left(\frac{\hat{p}^2}{m} + \omega^2 m\,x^2\right). \tag{9.7}$$

Ostatni człon jest proporcjonalny do hamiltonianu $\hat{H}$. Stąd otrzymujemy, że

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hbar\omega\left(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}\right) = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right). \tag{9.8}$$

Aby wyprowadzić tę ostatnią formę $\hat{H}$ zastosowaliśmy relację komutacji (9.6).

9.2 Stany własne i wartości własne $\hat{H}$

Aby rozwiązać równanie Schrödingera

$$\hat{H}|\alpha >= E|\alpha > \tag{9.9}$$

musimy znaleźć spektrum operatora $\hat{a}^\dagger\hat{a}$. Oczywiście stany $|\alpha >$ są też stanami własnymi $\hat{a}^\dagger\hat{a}$:

$$\hat{a}^\dagger\hat{a}|\alpha >= \alpha|\alpha > . \tag{9.10}$$

O stanach $|\alpha >$ założymy, że są unormowane:

$$< \alpha|\alpha >= 1. \tag{9.11}$$

Zobaczmy, czy stan

$$|\beta >= \hat{a}|\alpha >$$

jest też stanem własnym operatora $\hat{a}^\dagger\hat{a}$:

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger\hat{a}|\beta > &= \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}|\alpha >= \left(\hat{a}\hat{a}^\dagger - 1\right)\hat{a}|\alpha >= \hat{a}\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} - 1\right)|\alpha > \\ &= \hat{a}\left(\alpha - 1\right)|\alpha >= \left(\alpha - 1\right)\hat{a}|\alpha >= \left(\alpha - 1\right)|\beta > . \end{aligned}$$

Widzimy zatem, że stan $|\beta >$ jest stanem własnym operatora $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ do wartości własnej $\alpha - 1$, nie wiemy jednak, czy jest unormowany. Stąd

$$\hat{a}|\alpha >= \mathcal{N}_-|\alpha - 1 > . \tag{9.12}$$

Powtarzając analogiczny rachunek dla stanu

$$\hat{a}^\dagger|\alpha >$$

otrzymamy

$$\hat{a}^\dagger|\alpha >= \mathcal{N}_+|\alpha + 1 > . \tag{9.13}$$

Spróbujmy teraz wyliczyć czynniki normujące $\mathcal{N}_\pm$. Norma stanu $|\beta >$ wynosi:

$$< \beta|\beta >=< \alpha|\hat{a}^\dagger\hat{a}|\alpha >= \alpha. \tag{9.14}$$

Zwróćmy uwagę, że we wzorze (9.14) oba operatory działają na prawo. Z drugiej strony

$$< \beta|\beta >= \mathcal{N}_-^2.$$

Stąd $\mathcal{N}_- = \sqrt{\alpha}$. Postępując podobnie

$$\mathcal{N}_+^2 =< \alpha + 1|\alpha + 1 >=< \alpha|\hat{a}\hat{a}^\dagger|\alpha >=< \alpha|\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1|\alpha >= \alpha + 1, \tag{9.15}$$

co daje $\mathcal{N}_+ = \sqrt{\alpha + 1}$.

Podsumujmy: operatory $\hat{a}$ i $\hat{a}^\dagger$ działają na stany własne operatora $\hat{H}$ w ten sposób, że obniżają lub podwyższają wartość własną α o 1. Dodatkowo domnażają taki stan własny przez wyliczony przez nas właśnie czynnik $\mathcal{N}_-$ lub $\mathcal{N}_+$. Zażądamy teraz, aby istniał stan podstawowy układu, czyli stan o minimalnej energii. Nie możemy zatem działając wielokrotnie operatorem $\hat{a}$ obniżać w nieskończoność wartości własne α . Zauważmy, że jeżeli zażądać, aby $\alpha = n$, czyli aby wartości własne operatora $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ były liczbami naturalnymi, to działając n-krotnie operatorem $\hat{a}$ na stan $|n >$ dostaniemy stan $|0\rangle$. Kolejne działanie operatorem $\hat{a}$ da 0 , ponieważ wyzeruje się czynnik $\mathcal{N}_-$. Zatem stan $|0 >$ jest stanem podstawowym oscylatora harmonicznego. Wszystkie stany wzbudzone otrzymujemy poprzez wielokrotne działanie na stan $|0 >$ operatorem $\hat{a}^\dagger$. Mamy zatem

$$\begin{aligned} \hat{a}|n &> = \sqrt{n}|n-1>, \\ \hat{a}^\dagger|n &> = \sqrt{n+1}|n+1>, \\ \hat{a}^\dagger\hat{a}|n &> = n|n> . \end{aligned} \tag{9.16}$$

Łatwo się przekonać, że unormowane stany $|n >$ mają postać:

$$|n>= \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\hat{a}^\dagger\right)^n |0> . \tag{9.17}$$

Zgodnie z naszą notacją wprowadzoną w rozdziale ?? z operatorami $\hat{a}$ i $\hat{a}^\dagger$możemy skojarzyć macierze

$$\begin{aligned} \hat{a}|n &> \sum_m |m> a_{mn}, \\ \hat{a}^\dagger|n &> \sum_m |m> a^\dagger_{mn}. \end{aligned} \tag{9.18}$$

Korzystając z (9.16) łatwo wykazać, że te nieskończenie wymiarowe macierze przyjmują następującą postać:

$$a = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}, \ a^\dagger = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}, \tag{9.19}$$

natomiast wektory $|n >$ są w tej reprezentacji zwykłymi kolumnami o 1 na n-tym miejscu

$$|n>= \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \end{bmatrix} \leftarrow n\text{-ta pozycja} . \tag{9.20}$$

Tę reprezentację stanów własnych oscylatora harmonicznego nazywamy *reprezentacją obsadzeń*, operatory $\hat{a}$ i $\hat{a}^\dagger$ noszą nazwę operatorów *kreacji* i *anihilacji*, albo jak już mówiliśmy *obniżania* i *podnoszenia*.

9.3 Własności przestrzenne stanów $|n>$

Patrząc na wzór (9.20) można odnieść wrażenie, że zgubiliśmy gdzieś informację o własnościach przestrzennych stanu kwantowego, gdyż wektory $|n>$ są wektorami liczbowymi. Zauważmy jednak, że korzystając ze związków (9.16) możemy wyliczyć wszystkie własności przestrzenne stanu kwantowego. W tym celu wyliczmy operator $\hat{x}$:

$$\begin{aligned} \hat{x} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\hat{a}^\dagger + \hat{a}\right), \\ \hat{x}^2 &= \frac{\hbar}{2m\omega} \left(\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}\right). \end{aligned} \tag{9.21}$$

Ponieważ operatory $\hat{a}$ i $\hat{a}^\dagger$ zmieniają stan obniżając lub podnosząc n:

$$\hat{x}|n> = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\hat{a}^\dagger|n> + \hat{a}|n>\right) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\sqrt{n+1}|n+1> + \sqrt{n}|n-1>\right), \tag{9.22}$$

więc

$$< m|\hat{x}|n> = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\sqrt{n+1}\delta_{m,n+1} + \sqrt{n}\delta_{m,n-1}\right). \tag{9.23}$$

Stąd:

$$< n|\hat{x}|n> = 0. \tag{9.24}$$

Ten sam wynik otrzymalibyśmy w reprezentacji położeniowej wykonując całkę

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, |\psi_n(x)|^2 x = 0, \tag{9.25}$$

ponieważ $|\psi_n(x)|^2$ jest symetryczną funkcją x. Spróbujmy policzyć średnie odchylenie kwadratowe x dla stanu podstawowego,

$$\Delta x^2 = \frac{1}{2}\frac{\hbar}{m\omega}.$$

które dane jest wzorem:

$$\begin{aligned} < n|\hat{x}^2|n> &= \frac{\hbar}{2m\omega} < n| \left(\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger + \hat{a}\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger\right)|n> \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega}\left(n + n + 1\right) \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega}\left(2n+1\right). \end{aligned} \tag{9.26}$$

Dla $n = 0$ dostajemy znany nam już wzór (??). A zatem korzystając z (9.21) możemy wyliczyć wszystkie *momenty* przestrzennego rozkładu cząstki w stanie n. Podobnie możemy wyliczyć charakterystyki pędowe stanu $|n>$.

9.4 Średnie położenie

Wróćmy do wzoru (??). Mówi on, że w stanie własnym energii średnie położenie jest zero i nie zależy od czasu. Weźmy jednak dowolny stan

$$|\psi, t\rangle = \sum_n a_n e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle \, . \tag{9.27}$$

Wówczas

$$\langle x \rangle_\psi = \sum_{m,n} a_m^* a_n e^{-i(n-m)\omega t} < m|\hat{x}|n >, \tag{9.28}$$

gdzie użyliśmy $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$. Mając na względzie (9.23) otrzymujemy

$$< m|\hat{x}|n > = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\sqrt{n+1} \delta_{m,n+1} + \sqrt{n} \delta_{m,n-1} \right)$$

$$\begin{aligned} \langle x \rangle_\psi &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sum_{n=0} \left(\sqrt{n+1} a_{n+1}^* a_n e^{i\omega t} + \sqrt{n} a_{n-1}^* a_n e^{-i\omega t} \right) \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sum_{n=1} \sqrt{n} \left(a_n^* a_{n-1} e^{i\omega t} + a_{n-1}^* a_n e^{-i\omega t} \right) \\ &= \sum_n X_n \cos(\omega t + \phi_j), \end{aligned} \tag{9.29}$$

gdzie wprowadziliśmy oznaczenie

$$\sqrt{\frac{\hbar n}{2m\omega}} a_n^* a_{n-1} = X_n e^{i\phi_n}. \tag{9.30}$$

Zatem położenie $\langle x \rangle_\psi$ oscyluje sinusoidalnie (jak w klasycznym oscylatorze).

9.5 Zmiana reprezentacji

Ale możemy też, przy pomocy związku

$$\psi_\alpha(x) = \langle x \, |\alpha\rangle$$

skonstruować funkcję falową w reprezentacji położeń. W tym celu skonstruujmy najpierw funkcję falową stanu podstawowego

$$\psi_0(x) = \langle x \, |0\rangle \, . \tag{9.31}$$

Korzystając z faktu, że operator $\hat{a}$ anihiluje stan podstawowy, napiszmy równanie różniczkowe na ψ_0:

$$< x|\hat{a}|0 > = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} < x| \left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right) |0\rangle \, = 0. \tag{9.32}$$

Zauważmy teraz, że:

$$
\begin{aligned}
<\ x|\left(\hat{x}+\frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)|0> &= \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx' < x|\left(\hat{x}+\frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)|x'><x'|0> \\
&= \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx' \left\{x'\delta(x-x')+\frac{i}{m\omega}\left(-\delta(x-x')i\hbar\frac{d}{dx'}\right)\right\}\psi_0(x') \\
&= \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx'\,\delta(x-x')\left\{x'+\frac{\hbar}{m\omega}\frac{d}{dx'}\right\}\psi_0(x') \\
&= \left\{x+\frac{\hbar}{m\omega}\frac{d}{dx}\right\}\psi_0(x)=0. \qquad (9.33)
\end{aligned}
$$

Aby otrzymać ostatnie z równań (9.29) wykonaliśmy przez części całkę z pochodnej z $\delta(x-x')$. Równanie (9.29) łatwo rozwiązać:

$$
\psi_0(x)=\mathcal{N}\,e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}. \qquad (9.34)
$$

Jest to rzeczywiście znana już nam funkcja falowa stanu podstawowego oscylatora harmonicznego (??), gdzie $\mathcal{N}^2=\sqrt{m\omega/\pi\hbar}$.

Na koniec wyliczmy funkcję $\psi_n(x)$. W tym celu wygodnie jest wprowadzić nową zmienną

$$
\xi=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x.
$$

Wówczas

$$
\hat{a}=\sqrt{\frac{1}{2}}\left(\xi+\frac{d}{d\xi}\right), \qquad \hat{a}^\dagger=\sqrt{\frac{1}{2}}\left(\xi-\frac{d}{d\xi}\right).
$$

Zauważmy, że działanie operatora $\hat{a}^\dagger$ na dowolną funkcję $f(\xi)$ daje się zapisać jako

$$
\sqrt{\frac{1}{2}}\left(\xi-\frac{d}{d\xi}\right)f(\xi)=-\sqrt{\frac{1}{2}}e^{\frac{1}{2}\xi^2}\frac{d}{d\xi}\left(e^{-\frac{1}{2}\xi^2}f(\xi)\right). \qquad (9.35)
$$

Dwukrotne działanie $\left(\hat{a}^\dagger\right)^2$ sprowadza się do

$$
\begin{aligned}
\sqrt{\frac{1}{2^2}}\left(\xi-\frac{d}{d\xi}\right)^2 f(\xi) &= \sqrt{\frac{1}{2^2}}(-)^2e^{\frac{1}{2}\xi^2}\frac{d}{d\xi}\left[e^{-\frac{1}{2}\xi^2}\left(\xi-\frac{d}{d\xi}\right)f(\xi)\right] \\
&= \sqrt{\frac{1}{2^2}}(-)^2e^{\frac{1}{2}\xi^2}\frac{d}{d\xi}\frac{d}{d\xi}\left(e^{-\frac{1}{2}\xi^2}f(\xi)\right). \qquad (9.36)
\end{aligned}
$$

Stąd już dalsza indukcja jest oczywista:

$$
\sqrt{\frac{1}{2^n}}\left(\xi-\frac{d}{d\xi}\right)^n f(\xi)=(-)^n\sqrt{\frac{1}{2^n}}e^{\frac{1}{2}\xi^2}\frac{d^n}{d\xi^n}\left(e^{-\frac{1}{2}\xi^2}f(\xi)\right). \qquad (9.37)
$$

A zatem na mocy (9.17)

$$\begin{aligned}
\psi_n(x) &= \sqrt{\frac{1}{n!2^n}}\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)^n \mathcal{N}\, e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \\
&= \mathcal{N}\sqrt{\frac{1}{n!2^n}}(-)^n e^{\frac{1}{2}\xi^2}\,\frac{d^n}{d\xi^n}\left(e^{-\xi^2}\right) \\
&= \mathcal{N}\, e^{-\frac{1}{2}\xi^2}\sqrt{\frac{1}{n!2^n}}(-)^n e^{\xi^2}\,\frac{d^n}{d\xi^n}\left(e^{-\xi^2}\right).
\end{aligned} \tag{9.38}$$

Zauważmy, że ostatni człon odtwarza znormalizowane z wagą $e^{-\xi^2/2}$ wielomiany Hermite'a.