

## 10 Oscylator harmoniczny metodą operatorów kreacji i anihilacji

### 10.1 Operatory kreacji i anihilacji

Spróbujmy znany nam już hamiltonian oscylatora harmonicznego

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \left( \frac{\hat{p}^2}{m} + \omega^2 m \hat{x}^2 \right) \quad (10.1)$$

zapisać przy pomocy operatorów

$$\begin{aligned} \hat{a} &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + i \sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}} \hat{p}, \\ \hat{a}^\dagger &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - i \sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}} \hat{p}. \end{aligned} \quad (10.2)$$

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 iloczyn:

$$\hat{a}\hat{a}^\dagger = \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{x}^2 - \frac{i}{2\hbar} \hat{x}\hat{p} + \frac{i}{2\hbar} \hat{p}\hat{x} + \frac{1}{2m\omega\hbar} \hat{p}^2 \quad (10.3)$$

i

$$\hat{a}^\dagger\hat{a} = \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{x}^2 + \frac{i}{2\hbar} \hat{x}\hat{p} - \frac{i}{2\hbar} \hat{p}\hat{x} + \frac{1}{2m\omega\hbar} \hat{p}^2. \quad (10.4)$$

Pamiętając że:

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar, \quad (10.5)$$

mamy

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} = -\frac{i}{2\hbar} [\hat{x}, \hat{p}] + \frac{i}{2\hbar} [\hat{p}, \hat{x}] = 1. \quad (10.6)$$

Z kolei *antykomutator*, czyli suma

$$\{\hat{a}, \hat{a}^\dagger\} = \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} = \frac{1}{m\omega\hbar} \hat{p}^2 + \frac{m\omega}{\hbar} \hat{x}^2 = \frac{2}{\hbar\omega} \frac{1}{2} \left( \frac{\hat{p}^2}{m} + \omega^2 m \hat{x}^2 \right). \quad (10.7)$$

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

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \hbar\omega (\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}) = \hbar\omega \left( \hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2} \right). \quad (10.8)$$

Aby wyprowadzić tę ostatnią formę  $\hat{H}$  zastosowaliśmy relację komutacji (10.6).

## 10.2 Stany własne i wartości własne $\hat{H}$

Aby rozwiązać równanie Schrödingera

$$\hat{H}|\alpha\rangle = E|\alpha\rangle \quad (10.9)$$

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

$$\hat{a}^\dagger\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle. \quad (10.10)$$

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

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = 1. \quad (10.11)$$

Zobaczmy, czy stan

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

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

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

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

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \mathcal{N}_-|\alpha - 1\rangle. \quad (10.12)$$

Powtarzając analogiczny rachunek dla stanu

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

otrzymamy

$$\hat{a}^\dagger|\alpha\rangle = \mathcal{N}_+|\alpha + 1\rangle. \quad (10.13)$$

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

$$\langle\beta|\beta\rangle = \langle\alpha|\hat{a}^\dagger\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha. \quad (10.14)$$

Zwróćmy uwagę, że we wzorze (10.14) oba operatory działają na prawo. Z drugiej strony

$$\langle\beta|\beta\rangle = \mathcal{N}_-^2.$$

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

$$\mathcal{N}_+^2 = \langle\alpha + 1|\alpha + 1\rangle = \langle\alpha|\hat{a}\hat{a}^\dagger|\alpha\rangle = \langle\alpha|\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1|\alpha\rangle = \alpha + 1, \quad (10.15)$$

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  $\alpha$  o 1. Dodatkowo domniają 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  $\alpha$ . 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  $|n\rangle$  dostaniemy stan  $|0\rangle$ . Kolejne działanie operatorem  $\hat{a}$  da 0, ponieważ wyzeruje się czynnik  $\mathcal{N}_-$ . Zatem stan  $|0\rangle$  jest stanem podstawowym oscylatora harmonicznego. Wszystkie stany wzbudzone otrzymujemy poprzez wielokrotne działanie na stan  $|0\rangle$  operatorem  $\hat{a}^\dagger$ . Mamy zatem

$$\begin{aligned}\hat{a}|n\rangle &= \sqrt{n}|n-1\rangle, \\ \hat{a}^\dagger|n\rangle &= \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \\ \hat{a}^\dagger \hat{a}|n\rangle &= n|n\rangle.\end{aligned}\tag{10.16}$$

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

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle.\tag{10.17}$$

Zgodnie z naszą notacją wprowadzoną w rozdziale 4 z operatorami  $\hat{a}$  i  $\hat{a}^\dagger$  możemy skojarzyć macierze

$$\begin{aligned}\hat{a}|n\rangle &= \sum_m |m\rangle a_{mn}, \\ \hat{a}^\dagger|n\rangle &= \sum_m |m\rangle a_{mn}^\dagger.\end{aligned}\tag{10.18}$$

Korzystając z (10.16) łatwo wykazać, że te nieskończone wymiarowe macierze przyjmują następującą postać:

$$a = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}, \quad a^\dagger = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix},\tag{10.19}$$

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

$$|n\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \end{bmatrix} \leftarrow n\text{-ta pozycja}.\tag{10.20}$$

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*.

### 10.3 Własności przestrzenne stanów $|n\rangle$

Patrząc na wzór (10.20) można odnieść wrażenie, że zgubiliśmy gdzieś informację o własnościach przestrzennych stanu kwantowego, gdyż wektory  $|n\rangle$  są wektorami liczbowymi. Zauważmy jednak, że korzystając ze związków (10.16) możemy wyliczyć wszystkie własności przestrzenne stanu kwantowego. W tym celu wyliczmy operator  $\hat{x}$ :

$$\begin{aligned}\hat{x} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}), \\ \hat{x}^2 &= \frac{\hbar}{2m\omega} (\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger + \hat{a} \hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}).\end{aligned}\quad (10.21)$$

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

$$\hat{x}|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a}^\dagger|n\rangle + \hat{a}|n\rangle) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{n+1}|n+1\rangle + \sqrt{n}|n-1\rangle), \quad (10.22)$$

więc

$$\langle m|\hat{x}|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{n+1}\delta_{m,n+1} + \sqrt{n}\delta_{m,n-1}). \quad (10.23)$$

Stąd:

$$\langle n|\hat{x}|n\rangle = 0. \quad (10.24)$$

Ten sam wynik otrzymalibyśmy w reprezentacji położeniowej wykonując całkę

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi_n(x)|^2 x = 0, \quad (10.25)$$

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:

$$\begin{aligned}\langle n|\hat{x}^2|n\rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle n|(\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger + \hat{a} \hat{a} + \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger)|n\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} (n + n + 1) \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} (2n + 1).\end{aligned}\quad (10.26)$$

Dla  $n = 0$  dostajemy znany nam już wzór (9.32). A zatem korzystając z (10.21) możemy wyliczyć wszystkie *momenty* przestrzennego rozkładu cząstki w stanie  $n$ . Podobnie możemy wyliczyć charakterystyki pędowe stanu  $|n\rangle$ .

## 10.4 Średnie położenie

Wróćmy do wzoru (10.24). Mówi on, że w stanie własnym energii średnie położenie jest zero i nie zależy od czasu. Weźmy jednak dowolny stan

$$|\psi, t\rangle = \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle. \quad (10.27)$$

Wówczas

$$\langle x \rangle_\psi = \sum_{m,n} c_m^* c_n e^{-i(n-m)\omega t} \langle m|\hat{x}|n\rangle, \quad (10.28)$$

gdzie użyliśmy  $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ . Mając na względzie (10.23) otrzymujemy

$$\begin{aligned} \langle m|\hat{x}|n\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left( \sqrt{n+1} \delta_{m,n+1} + \sqrt{n} \delta_{m,n-1} \right) \\ \langle x \rangle_\psi &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sum_{n=0} \left( \sqrt{n+1} a_{n+1}^* a_n e^{i\omega t} + \sqrt{n} a_{n-1}^* a_n e^{-i\omega t} \right) \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sum_{n=1} \sqrt{n} \left( c_n^* c_{n-1} e^{i\omega t} + c_{n-1}^* c_n e^{-i\omega t} \right) \\ &= \sum_n X_n \cos(\omega t + \phi_j), \end{aligned} \quad (10.29)$$

gdzie wprowadziliśmy oznaczenie

$$\sqrt{\frac{\hbar n}{2m\omega}} c_n^* c_{n-1} = X_n e^{i\phi_n}. \quad (10.30)$$

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

## 10.5 Zmiana reprezentacji

Ale możemy też, przy pomocy związku

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

skonstruować funkcję falową w reprezentacji położenia. W tym celu skonstruujemy najpierw funkcję falową stanu podstawowego

$$\psi_0(x) = \langle x|0\rangle. \quad (10.31)$$

Korzystając z faktu, że operator  $\hat{a}$  anihiluje stan podstawowy, napiszmy równanie różniczkowe na  $\psi_0$ :

$$\langle x|\hat{a}|0\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \langle x|\left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)|0\rangle = 0. \quad (10.32)$$

Zauważmy teraz, że:

$$\begin{aligned}
\langle x | \left( \hat{x} + \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right) | 0 \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \langle x | \left( \hat{x} + \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right) | x' \rangle \langle x' | 0 \rangle \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \left\{ x' \delta(x - x') + \frac{i}{m\omega} \left( -\delta(x - x') i \hbar \frac{d}{dx'} \right) \right\} \psi_0(x') \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \delta(x - x') \left\{ x' + \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dx'} \right\} \psi_0(x') \\
&= \left\{ x + \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dx} \right\} \psi_0(x) = 0.
\end{aligned} \tag{10.33}$$

Aby otrzymać ostatnie z równań (10.33) skorzystaliśmy ze wzoru (6.9). Równanie (10.33) łatwo rozwiązać:

$$\psi_0(x) = \mathcal{N} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}. \tag{10.34}$$

Jest to rzeczywiście znana już nam funkcja falowa stanu podstawowego oscylatora harmonicznego (9.29), 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

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

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

$$\sqrt{\frac{1}{2}} \left( \xi - \frac{d}{d\xi} \right) f(\xi) = -\sqrt{\frac{1}{2}} e^{\frac{1}{2}\xi^2} \frac{d}{d\xi} \left( e^{-\frac{1}{2}\xi^2} f(\xi) \right). \tag{10.35}$$

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

$$\begin{aligned}
\sqrt{\frac{1}{2^2}} \left( \xi - \frac{d}{d\xi} \right)^2 f(\xi) &= \sqrt{\frac{1}{2^2}} (-)^2 e^{\frac{1}{2}\xi^2} \frac{d}{d\xi} \left[ e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \left( \xi - \frac{d}{d\xi} \right) f(\xi) \right] \\
&= \sqrt{\frac{1}{2^2}} (-)^2 e^{\frac{1}{2}\xi^2} \frac{d}{d\xi} \frac{d}{d\xi} \left( e^{-\frac{1}{2}\xi^2} f(\xi) \right).
\end{aligned} \tag{10.36}$$

Stąd już dalsza indukcja jest oczywista:

$$\sqrt{\frac{1}{2^n}} \left( \xi - \frac{d}{d\xi} \right)^n f(\xi) = (-)^n \sqrt{\frac{1}{2^n}} e^{\frac{1}{2}\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} \left( e^{-\frac{1}{2}\xi^2} f(\xi) \right). \tag{10.37}$$

A zatem na mocy (10.17)

$$\begin{aligned}\psi_n(x) &= \sqrt{\frac{1}{n!2^n}} \left( \xi - \frac{d}{d\xi} \right)^n \mathcal{N} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \\ &= \mathcal{N} \sqrt{\frac{1}{n!2^n}} (-)^n e^{\frac{1}{2}\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} \left( e^{-\xi^2} \right) \\ &= \mathcal{N} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \sqrt{\frac{1}{n!2^n}} (-)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} \left( e^{-\xi^2} \right).\end{aligned}\tag{10.38}$$

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