

Az egydimenziós harmonikus oszcillátor tárgyalása az általános formalizmus keretében

November 7, 2006

Példaképpen itt megmutatjuk, hogyan lehet a kvantumos egydimenziós harmonikus oszcillátort tárgyalni az általános formalizmus keretében.

A harmonikus oszcillátor sajátosságos és fontos szerepet tölt be a fizikában. Számos jelenséget modellezhetünk, a harmonikus oszcillátor segítségével. A kvantummechanikai harmonikus oszcillátor modell lényeges a térelmélet, molekula-vibrációk elmélete, kristályrácsok rezgései és a kvantálási eljárások szempontjából. Itt csak a leegyszerűsített egydimenziós feladattal fogunk foglalkozni.

Az elemi hullámmechanika keretében láttuk már ennek a kvantummechanikai feladatnak a megoldását. A megoldás során egy differenciálegyenletet oldottunk meg, és a láttuk, hogy az energia sajátállapotokat leíró hullámfüggvények kifejezhetők a Hermite polinomok segítségével. Az egydimenziós kvantumos oszcillátor energia-sajátértékeire azt kaptuk, hogy:

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (1)$$

Most megoldjuk a feladatot az általános formalizmusban annélkül, hogy egy adott reprezentációt választanánk. Meglátjuk, hogy a feladat megoldása egyszerűbb lesz, és a differenciálegyenletek elmélete helyett itt algebrai ismeretekre lesz szükség.

A feladat Hamilton függvénye:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{kq^2}{2}, \quad (2)$$

bevezetve az oszcillátor körfrekvenciáját:

$$k = m\omega^2 \Rightarrow H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}q^2 \quad (3)$$

A kvantummechanika keretében a H Hamilton függvényhez a kanónikus kvantálási eljárással egy operátort rendelünk:

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m} (p^2 + m^2\omega^2 q^2) \quad \Rightarrow \\ \hat{H} &= \frac{1}{2m} (\hat{p}^2 + m^2\omega^2 \hat{q}^2) \end{aligned} \quad (4)$$

A $\hat{p}$ és $\hat{q}$ operátorokra igaz, hogy:

$$[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar \quad (5)$$

Átírjuk, most a feladatot egy egyszerűbb, adimenzionális alakba, bevezetve a következő operátorokat:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{\hbar\omega} \hat{H} \quad (6)$$

$$\hat{P} = \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} \hat{p} \quad (7)$$

$$\hat{Q} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{q} \quad (8)$$

Azonnal adódik, hogy:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2m\hbar\omega} \hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2\hbar\omega} \hat{q}^2 = \frac{1}{2} \left[\frac{\hat{p}^2}{m\hbar\omega} + \frac{m\omega}{\hbar} \hat{q}^2 \right], \quad (9)$$

vagyis:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2} [\hat{P}^2 + \hat{Q}^2]. \quad (10)$$

Belátható a következő kommutálási összefüggés

$$[\hat{Q}, \hat{P}] = i, \quad (11)$$

ami az (5) kommutálási összefüggésnek az adimenzionális megfelelője.

Bevezetünk még két további operátort is:

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{Q} + i\hat{P}) \quad (12)$$

$$\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{Q} - i\hat{P}) \quad (13)$$

Az $\hat{a}$ és $\hat{a}^+$ operátorokat *lépcső-operátoroknak* nevezzük, $\hat{a}$ egy *csökkentő operátor*, $\hat{a}^+$ meg egy *növelő operátor*. (Ezen elnevezések eredete világossá válik később). Ezen két operátor segítségével felírható, hogy:

$$\hat{Q} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}^+ + \hat{a}) \quad (14)$$

$$\hat{P} = \frac{1}{\sqrt{2}} i (\hat{a}^+ - \hat{a}) \quad (15)$$

Azonnal igazolható, hogy

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1 \quad (16)$$

és belátható, hogy:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2} (\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a}). \quad (17)$$

A kommutálási összefüggések értelmében $\hat{a}\hat{a}^+ = 1 + \hat{a}^+\hat{a}$, és ennek felhasználásával:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2} [\hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}^+\hat{a} + 1] = \hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2} \quad (18)$$

Bevezetve most az $\hat{N} = \hat{a}^+\hat{a}$ jelölést:

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{N} + \frac{1}{2}. \quad (19)$$

A $\hat{\mathcal{H}}$ operátor sajátértékeit és sajátvektorait próbáljuk meghatározni. Jelöljük n -nel az $\hat{N}$ sajátértékeit és $|n\rangle$ -nel a sajátvektorokat

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle \quad (20)$$

Két fontos tételt fogunk most kijelenteni és bizonyítani az n sajátértékekre és az $|n\rangle$ sajátvektorokra vonatkozóan:

1. Tétel:

Az n sajátértékekre igaz, hogy $n \geq 0$, ha $n = 0 \Rightarrow \hat{a}|n\rangle = |\emptyset\rangle$ és ha $n > 0 \Rightarrow \hat{a}|n\rangle \neq |\emptyset\rangle$. Itt $|\emptyset\rangle$ a vektortér 'zéró-ket vektorát' jelenti (az összeadásra nézve levő semleges elem), ugyanis ezen tagot lényeges megkülönböztetni az $n = 0$ sajátértékhez tartozó $|0\rangle$ -ket vektortól! Ezen feladat tanulmányozása során a következőkben végig ezt a jelölési konvenciót használjuk!

Bizonyítás:

$$\langle n|\hat{N}|n\rangle = \langle n|\hat{a}^+\hat{a}|n\rangle = n\langle n|n\rangle = |\hat{a}|n\rangle|^2 \geq 0, \quad (21)$$

ahonnan azonnal következik, hogy $n \geq 0$. A fenti egyenletből látszik, hogy $|\hat{a}|n\rangle|^2 = 0$ ha $\hat{a}|n\rangle = |\emptyset\rangle$ és ehhez az szükséges, hogy $n = 0$. Ha $n > 0$, akkor $\hat{a}|n\rangle \neq |\emptyset\rangle$.

2. Tétel:

a. ha $n > 0$, akkor

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle \quad (22)$$

$$\hat{N}(\hat{a}|n\rangle) = (n-1)(\hat{a}|n\rangle) \quad (23)$$

b. $\hat{a}^+|n\rangle \neq |\emptyset\rangle$ és $\hat{a}^+|n\rangle \neq |0\rangle$ semmilyen n értékre, és

$$\hat{N}(\hat{a}^+|n\rangle) = (n+1)\hat{a}^+|n\rangle \quad (24)$$

Bizonyítás:

$$\hat{N}\hat{a} = \hat{a}^+\hat{a}\hat{a} = (\hat{a}\hat{a}^+ - 1)\hat{a} = \hat{a}\hat{a}^+\hat{a} - \hat{a} = \hat{a}(\hat{N} - 1) \quad (25)$$

$$\hat{N}\hat{a}^+ = \hat{a}^+\hat{a}\hat{a}^+ = \hat{a}^+(\hat{a}^+\hat{a} + 1) = \hat{a}^+(\hat{N} + 1) \quad (26)$$

Felhasználva a fenti két egyenlőséget

$$\hat{N}(\hat{a}|n\rangle) = \hat{a}(\hat{N} - 1)|n\rangle = n\hat{a}|n\rangle - \hat{a}|n\rangle = (n-1)\hat{a}|n\rangle, \quad (27)$$

ahonnan következik az (a) állításunk.

A (b) állítás bizonyításának az érdekében tekintsük az alábbi egyenlőségeket:

$$\begin{aligned} \langle n|\hat{a}\hat{a}^+|n\rangle &= \left|\hat{a}^+|n\rangle\right|^2 = \langle n|\hat{a}^+\hat{a} + 1|n\rangle = \langle n|\hat{N} + 1|n\rangle = \\ &= (n+1)\langle n|n\rangle \geq 0 \end{aligned} \quad (28)$$

A fenti skaláris szorzat (ami az $\hat{a}^+|n\rangle$ vektor normája) minimális, ha $n = 0$. Ilyen feltételek mellett ha $|n\rangle \neq |\emptyset\rangle$ az egyenlet jobboldala mindig pozitív, tehát $\hat{a}^+|n\rangle \neq |\emptyset\rangle$, ellenkező esetben ugyanis a baloldal 0-val lenne egyenlő. Bizonyítottuk tehát ezáltal a (b) állítás első részét, vagyis: $\left|\hat{a}^+|n\rangle\right|^2 > 0 \Rightarrow \hat{a}^+|n\rangle \neq |\emptyset\rangle$ semmilyen $|n\rangle$ esetre!

A (b) állítás második fele azonnal következik az alábbi egyenletekből:

$$\hat{N}(\hat{a}^+|n\rangle) = \hat{a}^+(\hat{N} + 1)|n\rangle = n\hat{a}^+|n\rangle + \hat{a}^+|n\rangle = (n+1)(\hat{a}^+|n\rangle) \quad (29)$$

Ezen egyenletből az is következik, hogy $\hat{a}^+|n\rangle \neq |0\rangle$, ugyanis n legkisebb lehetséges értéke 0 lehet, és az $\hat{a}^+$ operátor alkalmazásával mindig egy egységgel nagyobb sajátértékhez tartozó sajátvektort kapunk!

Az $\hat{N}$ operátor spektruma

Legyen $n \neq 0$, $\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$, $|n\rangle \neq |0\rangle$. Alkalmazzuk most az $\hat{a}$ operátort sorozatban $|n\rangle$ -re. Az $\hat{a}|n\rangle, \hat{a}^2|n\rangle \dots \hat{a}^k|n\rangle$ sorozatot kapjuk, amelyek $\hat{N}$ -nek is sajátvektorai és az $(n-1), (n-2) \dots (n-k)$ sajátértékekhez tartoznak. A sorozat korlátos, ugyanis n minimális értéke 0. Mivel $\hat{a}|0\rangle = |\emptyset\rangle$, ezután sorozatban a $|\emptyset\rangle$ 'ket'-et kapjuk. Ahhoz, hogy a 0 sajátérték elérhető legyen: $n \in \mathbf{N}$, **vagyis n természetes szám kell legyen.** $|n\rangle$ -ből kiindulva megszerkeszthetjük az $\hat{a}^+$ operátorral a többi sajátvektort is:

$$\begin{array}{ccccccc} \hat{a}^+|n\rangle & \hat{a}^{+2}|n\rangle & \dots & \hat{a}^{+k}|n\rangle & \text{amelyek az} \\ (n+1) & (n+2) & \dots & (n+k) & \text{sajátértékekhez tartoznak.} \end{array} \quad (30)$$

Tehát:

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle \quad n \in \mathbf{N} \quad (31)$$

$$\begin{array}{ll} \hat{N} & \text{sajátértékei: } 0, 1, 2, \dots \\ \hat{N} & \text{sajátvektorai: } |0\rangle, |1\rangle, |2\rangle \dots \end{array} \quad (32)$$

Egy sajátvektort ismerve, az $\hat{a}$ (csökkentő) és $\hat{a}^+$ (növelő) operátorok segítségével megszerkeszthető az összes többi sajátvektor. A fentiek alapján azonnal belátható, honnan erednek a $\hat{a}$ és $\hat{a}^+$ "lépcső-operátorok" elnevezései.

Ha $\langle n|n \rangle = 1$ normált

$$\hat{a}^+|n\rangle = c_n|n+1\rangle \quad (33)$$

Felvetődik az a kérdés, hogy kell megválasztani c_n -et ahhoz, hogy:

$$\langle n+1|n+1 \rangle = 1 \quad (34)$$

Belátható, hogy

$$\langle n|\hat{a}\hat{a}^+|n\rangle = |c_n|^2 \langle n+1|n+1 \rangle = |c_n|^2, \quad (35)$$

és amint láttuk (28) szerint:

$$\langle n|\hat{a}\hat{a}^+|n\rangle = (n+1)\langle n|n \rangle = (n+1) \quad (36)$$

Azonnal következik a (35) és (36) összefüggésekből, hogy

$$c_n = \sqrt{n+1} \quad (37)$$

$$\hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad (38)$$

Hasonló feladat fogalmazható meg az $\hat{a}$ csökkentő operátorra is:

$$\hat{a}|n\rangle = d_n|n-1\rangle \quad (39)$$

Ha $\langle n|n \rangle = 1$, felvetődik megint a kérdés hogyan kell megválasztani d_n értékét ahhoz, hogy:

$$\langle n-1|n-1 \rangle = 1. \quad (40)$$

Az előző esethez hasonlóan induljunk ki a következő egyenletből:

$$\langle n|\hat{a}^+\hat{a}|n\rangle = |d_n|^2 \langle n-1|n-1 \rangle = |d_n|^2 \quad (41)$$

Felhasználva az $\hat{N}$ operátor alakját

$$\langle n|\hat{a}^+\hat{a}|n\rangle = \langle n|\hat{N}|n\rangle = n\langle n|n \rangle = n, \quad (42)$$

ahonnan a (41)-el való összehasonlítás után következik, hogy:

$$|d_n|^2 = n \quad (43)$$

A normált sajátfüggvényekre felírható tehát:

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad (44)$$

Speciális esetben a $|0\rangle$ 'ket'-re felírható, hogy:

$$\hat{a}|0\rangle = |\emptyset\rangle \quad (45)$$

Kiindulva a $|0\rangle$ 'ket'-ből megszerkeszthető az összes normált sajátvektor a növelő operátor segítségével:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^+)^n |0\rangle \quad (46)$$

Azonnal belátható, hogy ezek sajátvektorai a $\hat{\mathcal{H}}$ -nak is.

$$\hat{\mathcal{H}}|n\rangle = \left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right) |n\rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right) |n\rangle \quad (47)$$

A (6) jelölés értelmében az egydimenziós harmónikus oszcillátor sajátvektorai, tehát a (46) vektorok, a sajátértékek pedig:

$$\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) |n\rangle \quad \Rightarrow \quad (48)$$

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (49)$$

A sajátértékek nem elfajultak. A $|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, \dots$ sajátvektorok egy reprezentációt definiálnak az állapotvektorok terén.

Látható tehát, hogy az általános formalizmus keretében egy elegáns eljárás segítségével, pusztán algebrai számításokkal sikerült meghatározni az egydimenziós oszcillátor energia-sajátértékeit. A sajátvektorok meghatározhatók a (46) összefüggés segítségével ha ismerjük az alapállapot sajátvektorát.