

## Rozdział 27

### (U.6) Oscylator harmoniczny

#### 27.1 Rozwiązanie przez rozwinięcie w szereg

W głównej części wykładu rozwiązanie zagadnienia własnego dla hamiltonianu kwantowo-mechanicznego oscylatora harmonicznego sprowadziliśmy do równania (6.28), tj. do

$$f''(\xi) - 2\xi f'(\xi) + (\mathcal{E} - 1)f(\xi) = 0, \quad \text{gdzie} \quad \xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x. \quad (27.1)$$

Poszukiwana funkcja  $f(\xi)$  jest związana z funkcjami własnymi  $\psi(x)$  hamiltonianu wzorem

$$\psi(x) = \psi\left(x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right) = \psi(\xi) = \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) f(\xi). \quad (27.2)$$

Funkcja  $f(\xi)$  musi być "przyzwoita", taka aby funkcja falowa  $\psi(\xi)$  była funkcją normowalną, a więc musi być spełniony warunek

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi \left| \exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right) f(\xi) \right|^2 < \infty. \quad (27.3)$$

Przedstawimy teraz zupełnie inną, choć nie mniej ogólną metodę rozwiązywania równania (27.1). Podobne metody matematyczne można stosować również w innych zagadnieniach związanych z poszukiwaniem rozwiązań stacjonarnego równania Schrödingera dla innych układów fizycznych.

##### 27.1.1 Ogólna postać rozwiązań

Szukamy rozwiązań równania (27.1). Postulujemy jego rozwiązanie w postaci szeregu

$$f(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^n. \quad (27.4)$$

Wykonując niezbędne różniczkowania, podstawiamy otrzymane szeregi do równania (27.1) i dostajemy

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_n n(n-1) \xi^{n-2} + \sum_{n=0}^{\infty} a_n [(\mathcal{E} - 1) - 2n] \xi^n = 0. \quad (27.5)$$

Zauważmy, że dwa pierwsze ( $n = 0$  i  $n = 1$ ) wyrazy pierwszego szeregu zerują się. Przenumerowujemy składniki pierwszej sumy. Wprowadzamy nowy indeks sumowania  $n' = n - 2$ , ( $n' = 0, 1, 2, \dots$ ). Wówczas, zamiast (27.5) mamy

$$\sum_{n'=0}^{\infty} a_{n'+2} (n' + 2)(n' + 1) \xi^{n'} + \sum_{n=0}^{\infty} a_n [(\mathcal{E} - 1) - 2n] \xi^n = 0. \quad (27.6)$$

W obu sumach występują te same potęgi zmiennej  $\xi$ . Wobec tego, z (27.6) wynika (po opuszczeniu znaku prim)

$$\sum_{n=0}^{\infty} [a_{n+2}(n+1)(n+2) - a_n(2n - (\mathcal{E} - 1))] \xi^n = 0. \quad (27.7)$$

Warunkiem znikania szeregu jest zerowanie się współczynników. To zaś jest równoważne warunkowi

$$a_{n+2}(n+1)(n+2) = a_n(2n - (\mathcal{E} - 1)), \quad (27.8)$$

który zapiszemy w znacznie wygodniejszej postaci, jako

$$a_{n+2} = a_n \frac{2n - (\mathcal{E} - 1)}{(n+1)(n+2)}. \quad (27.9)$$

Z tego rezultatu mamy następujące wnioski.

- Relacja (27.9) ma charakter związku rekurencyjnego, z którego możemy po kolei wyznaczać współczynniki rozwiązania (27.4).
- Zadając  $a_0$ , obliczamy  $a_2$ ,  $a_4$ , itd. A więc za pomocą zadanego  $a_0$ , tworzymy szereg o potęgach parzystych.
- Analogicznie, z  $a_1$  mamy  $a_3$ ,  $a_5$ , itd. W tym wypadku generujemy szereg o potęgach nieparzystych.

Równanie różniczkowe (27.1), które tu rozwiązujemy, jest drugiego rzędu. Jego rozwiązanie musi więc zależeć od dwóch stałych dowolnych. Tymi stałymi mogą być współczynniki  $a_0$  oraz  $a_1$ . Każdy z nich generuje w rekurencyjny sposób rozwiązanie o określonej parzystości. Można zresztą tego oczekiwać, bowiem potencjał oscylatora jest funkcją parzystą, więc powinniśmy mieć właśnie takie dwie klasy rozwiązań. A zatem, mamy dwa liniowo niezależne rozwiązania o określonej parzystości

$$\psi^{(p)}(\xi) = \exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right) a_0 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{a_{2k}}{a_0} \xi^{2k}, \quad (27.10a)$$

$$\psi^{(n)}(\xi) = \exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right) a_1 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{a_{2k+1}}{a_1} \xi^{2k+1}, \quad (27.10b)$$

gdzie współczynniki  $a_0$  i  $a_1$  pełnią rolę stałych dowolnych. Wyrazy  $a_{2k}$  i  $a_{2k+1}$  obliczamy z relacji rekurencyjnej (27.9). Ogólne rozwiązanie naszego równania jest kombinacją liniową rozwiązań parzystego  $\psi^{(p)}$  i nieparzystego  $\psi^{(n)}$ .

### 27.1.2 Dyskusja rozwinięć. Kwantowanie energii

Rozważmy uzyskane szeregi zarówno dla przypadku parzystego, jak i dla nieparzystego.

- Dla parzystego  $n = 2k$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots$ , mamy szereg

$$f(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_{2k} \xi^{2k}. \quad (27.11)$$

Relacja rekurencyjna ma zaś postać

$$\frac{a_{2k+2}}{a_{2k}} = \frac{4k + 1 - \mathcal{E}}{(2k+1)(2k+2)} \xrightarrow{k \gg 1} \frac{1}{k}. \quad (27.12)$$

- Dla nieparzystego  $n = 2k + 1$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots$  sytuacja jest podobna. W tym wypadku mamy

$$f(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_{2k+1} \xi^{2k+1}. \quad (27.13)$$

Natomiast relacja rekurencyjna jest postaci

$$\frac{a_{2k+3}}{a_{2k+1}} = \frac{4k+3-\mathcal{E}}{(2k+2)(2k+3)} \xrightarrow{k \gg 1} \frac{1}{k}. \quad (27.14)$$

Widzimy więc, że w obu przypadkach po wyłączeniu pewnej ilości wstępnych wyrazów, oba szeregi zachowują się tak, że spełniona jest relacja

$$\frac{a_{n+2}}{a_n} \approx \frac{1}{k}, \quad \text{gdzie} \quad k \approx \frac{n}{2}, \quad (27.15)$$

która jest tym lepszym przybliżeniem, im większa jest liczba  $k$ . Aby lepiej zrozumieć sens powyższego zachowania się asymptotycznego otrzymanych szeregów, rozważmy teraz funkcję  $\exp(\xi^2)$ .

$$\exp(\xi^2) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\xi^2)^n}{n!} = \sum_{k=0}^{\infty} b_{2k} \xi^{2k} \quad \text{gdzie} \quad b_{2k} = \frac{1}{k!}. \quad (27.16)$$

Wobec tego dla dyskutowanej funkcji  $\exp(\xi^2)$  mamy

$$\frac{b_{2k+2}}{b_{2k}} = \frac{b_{2(k+1)}}{b_{2k}} = \frac{1}{k+1} \xrightarrow{k \gg 1} \frac{1}{k}. \quad (27.17)$$

Na podstawie analizy funkcji  $\exp(\xi^2)$  wnioskujemy, że nasze szeregi (27.11) oraz (27.13) dla dużych wartości  $k$ , dają szeregi funkcji  $f(\xi)$  asymptotycznie zbieżne do funkcji  $\exp(\xi^2)$ . Sytuacja jest niezadowolająca, bowiem zgodnie z (27.2) dostaliśmy rozwiązania w postaci iloczynu, który asymptotycznie zachowuje się jak

$$\psi(\xi) \approx \exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right) \exp(\xi^2) = \exp\left(+\frac{1}{2}\xi^2\right), \quad (27.18)$$

a więc jak funkcja nienormowalna. A zatem otrzymane rozwiązanie jest нефизyczne. Jedynym sposobem uniknięcia tej trudności jest żądanie, aby uzyskany szereg urywał się, to znaczy aby funkcja  $f(\xi)$  redukowała się do wielomianu. Istotnie szereg się urywa, jeżeli w relacji rekurencyjnej (27.9) otrzymujemy  $a_{n+2} = 0$ , począwszy od pewnego  $n$ . Tak właśnie dzieje się, gdy zażądamy, aby dla pewnego  $n$  zniknął licznik wyrażenia po prawej stronie ogólnego wzoru (27.9). Wobec tego warunek

$$2n - (\mathcal{E} - 1) = 0 \quad \text{dla pewnego } n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (27.19)$$

sprawia, że współczynniki o numerach mniejszych lub równych  $n$  są różne od zera, zaś te o indeksie większym od  $n$  stają się zerami. Funkcja  $f(\xi)$  redukuje się do wielomianu stopnia  $n$ . Tym samym potwierdza się nasz domysł, wynikający z jakościowej dyskusji rozwiązań. Warunek (27.19) możemy zapisać także w postaci

$$\mathcal{E} = 2\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad \text{gdzie } n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (27.20)$$

Powyższe równanie mówi nam, że dozwolone energie (tzn. takie, które prowadzą do fizycznie sensownych – normowalnych funkcji falowych) kwantowo-mechanicznego oscylatora harmonicznego przyjmują tylko ściśle określone, a więc skwantowane, wartości.

Wracając, do wyjściowych oznaczeń  $\mathcal{E} = 2E/\hbar\omega$ , zapisujemy warunek kwantowania energii oscylatora, w postaci

$$E = E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad \text{gdzie } n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (27.21)$$

Warunek kwantowania energii zapewnia, że szeregi się urywają (redukują do wielomianów) dając rozwiązania naszego problemu

$$\psi(\xi) = \psi_n(\xi) = \exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right) W_n(\xi), \quad (27.22)$$

gdzie  $W_n(\cdot)$  są wielomianami  $n$ -tego stopnia. Tym samym kwantowanie energii prowadzi do funkcji falowych, które są już normowalne, tak jak to być powinno. Na zakończenie dyskusji, zwróćmy uwagę, że warunek kwantyzacji energii (27.19) możemy wykorzystać w relacji rekurencyjnej (27.9), otrzymując

$$a_{k+2} = a_k \frac{2(k-n)}{(k+1)(k+2)}. \quad (27.23)$$

Jasno więc widać, że współczynniki o numerach  $k \leq n$  są niezerowe, zaś dla  $k > n$  mamy już same zera. Rzeczywiście więc rozwinięcie (27.4) dla funkcji  $f(\xi)$  urywa się i staje się ona wielomianem. Współczynniki  $a_0$  oraz  $a_1$  pełnią rolę stałych dowolnych i wyznaczają rozwiązania odpowiednio parzyste i nieparzyste.

Oczywiście z warunku kwantowania (27.19) wynika  $\mathcal{E} - 1 = 2n$ , co po wstawieniu do równania (27.1) daje

$$f''(\xi) - 2\xi f'(\xi) + 2nf(\xi) = 0. \quad (27.24)$$

przy czym już wiemy, że rozwiązaniami muszą być wielomiany. Tym samym otrzymujemy ten sam rezultat co w głównej części wykładu. Wielomiany Hermite'a spełniają powyższe równanie. Wobec tego z (27.22) wynikają funkcje falowe

$$\psi_n(\xi) = N_n \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) H_n(\xi). \quad (27.25)$$

Stałą normalizacyjną otrzymamy tak samo jak poprzednio (w głównej części wykładu). Kwantowanie energii (27.21) jest też takie samo. Wszystkie dalsze rozważania przebiegają więc identycznie jak w głównej części wykładu.

Stwierdzamy więc, że metoda szukania rozwiązań stacjonarnego równania Schrödingera za pomocą rozwinięcia w szereg prowadzi do tych samych wyników co rozwiązania konfluentnego równania hipergeometrycznego.

## 27.2 Alternatywna postać funkcji falowych

**Lemat 27.1** *Wielomiany Hermite'a spełniają wzór*

$$H_n(y) = \exp\left(\frac{1}{2}y^2\right) \left(y - \frac{d}{dy}\right)^n \exp\left(-\frac{1}{2}y^2\right) \quad (27.26)$$

który jest analogiczny do formuły Rodriguesa

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}. \quad (27.27)$$

**Dowód.** Można go przeprowadzić na wiele różnych sposobów. Podamy najprostszy – przez indukcję matematyczną. Dla  $n = 0$  formuła (27.26) oczywiście daje  $H_0(x) = 1$ , co jest poprawne. Czyli pierwszy punkt dowodu przez indukcję jest gotowy. Zakładamy słuszność wzoru (27.26) dla pewnego  $n > 0$  i badamy je dla  $n + 1$ .

$$\begin{aligned} H_{n+1}(y) &= e^{\frac{1}{2}y^2} \left( y - \frac{d}{dy} \right) e^{-\frac{1}{2}y^2} e^{\frac{1}{2}y^2} \left( y - \frac{d}{dy} \right)^n e^{-\frac{1}{2}y^2} \\ &= e^{\frac{1}{2}y^2} \left( y - \frac{d}{dy} \right) e^{-\frac{1}{2}y^2} H_n(y). \end{aligned} \quad (27.28)$$

gdzie skorzystaliśmy z założenia indukcyjnego. Dalej więc mamy

$$\begin{aligned} H_{n+1}(y) &= e^{\frac{1}{2}y^2} \left[ y e^{-\frac{1}{2}y^2} H_n(y) - \frac{d}{dy} \left( e^{-\frac{1}{2}y^2} H_n(y) \right) \right] \\ &= y H_n(y) - e^{\frac{1}{2}y^2} \left( -y e^{-\frac{1}{2}y^2} H_n(y) + e^{-\frac{1}{2}y^2} \frac{d H_n(y)}{dy} \right) \\ &= 2y H_n(y) - \frac{d H_n(y)}{dy}. \end{aligned} \quad (27.29)$$

Przekształcając dalej otrzymujemy

$$\begin{aligned} H_{n+1}(y) &= -e^{y^2} \left[ -2y e^{-y^2} H_n(y) + e^{-y^2} \frac{d}{dy} H_n(y) \right] \\ &= -e^{y^2} \left[ \left( \frac{d}{dy} e^{-y^2} \right) H_n(y) + e^{-y^2} \frac{d}{dy} H_n(y) \right] \\ &= -e^{y^2} \frac{d}{dy} \left( e^{-y^2} H_n(y) \right). \end{aligned} \quad (27.30)$$

Wielomian  $H_n(y)$  w ostatnim wyrażeniu wyrazimy wzorem Rodriguesa (27.27), dostając

$$\begin{aligned} H_{n+1}(y) &= -e^{y^2} \frac{d}{dy} \left[ e^{-y^2} (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2} \right] \\ &= (-1)^{n+1} e^{y^2} \frac{d^{n+1}}{dy^{n+1}} e^{-y^2} = H_{n+1}(y), \end{aligned} \quad (27.31)$$

co ponownie wynika ze wzoru Rodriguesa. Na mocy zasady indukcji lemat jest udowodniony. ■

Jeżeli teraz w udowodnionej relacji (27.26) dokonamy zamiany zmiennych według przepisu  $y = x \sqrt{m\omega/\hbar}$ , to wówczas otrzymamy

$$\begin{aligned} H_n \left( x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \right) &= \exp \left( \frac{m\omega x^2}{2\hbar} \right) \left[ x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} \right]^n \exp \left( -\frac{m\omega x^2}{2\hbar} \right) \\ &= \left( \frac{m\omega}{2\hbar} \right)^{n/2} \exp \left( \frac{m\omega x^2}{2\hbar} \right) \left[ x - \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dx} \right]^n \exp \left( -\frac{m\omega x^2}{2\hbar} \right) \end{aligned} \quad (27.32)$$

Stosując to wyrażenie w znanych już funkcjach falowych

$$\psi_n(x) = \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \exp \left( -\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \right) H_n \left( x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \right), \quad (27.33)$$

łatwo widzimy, że można je zapisać w dwóch równoważnych postaciach

$$\begin{aligned} \psi_n(x) &= \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \exp \left( -\frac{m\omega x^2}{2\hbar} \right) H_n \left( x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \right) \\ &= \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left( \frac{m\omega}{\hbar} \right)^{n/2} \left( x - \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dx} \right)^n \exp \left( -\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \right). \end{aligned} \quad (27.34)$$

Otrzymane alternatywne wyrażenie dla funkcji falowych kwantowo-mechanicznego oscylatora harmonicznego jest przydatne w niektórych innych zastosowaniach.

### 27.3 Szacowanie energii stanu podstawowego z zasady nieoznaczoności

Z warunku kwantowania energii  $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$  oczywiście wynika, że energia stanu podstawowego (stanu o najniższej energii) wynosi  $\hbar\omega/2$ . Pokażemy, że wartość ta jest zgodna z przewidywaniami wynikającymi z zasady nieoznaczoności. Najniższa energia oscylatora klasycznego wynosi  $E_{klas} = 0$ , co odpowiada oscylatorowi znajdującemu się w spoczynku. Sytuacja taka jest jednak niemożliwa w ramach mechaniki kwantowej.

Będziemy starać się oszacować energię kwantowo-mechanicznego oscylatora harmonicznego za pomocą zasady nieoznaczoności. Założymy dla prostoty, że oscylator znajduje się w jednym ze swoich stanów własnych  $\psi_n(x)$  danym w (27.33). Na wstępie przypomnijmy, że zasada nieoznaczoności dla położenia i pędu mówi iż

$$\sigma^2(x) \cdot \sigma^2(p) \geq \frac{\hbar^2}{4}, \quad (27.35)$$

gdzie dyspersje są określone wzorami

$$\sigma^2(x) = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2, \quad (27.36a)$$

$$\sigma^2(p) = \langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2. \quad (27.36b)$$

A zatem aby obliczyć dyspersje trzeba znaleźć najpierw wartości oczekiwane położenia i pędu. Z założenia oscylator jest w stanie własnym energii  $\psi_n$ . Na mocy rozważań z części głównej wykładu, wiemy że wartości oczekiwane położenia i pędu znikają

$$\langle x \rangle = \langle p \rangle = 0. \quad (27.37)$$

Wobec tego dyspersje dane są wzorami

$$\sigma^2(x) = \langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_n^*(x) x^2 \psi_n(x), \quad (27.38a)$$

$$\sigma^2(p) = \langle p^2 \rangle = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_n^*(x) \frac{d^2}{dx^2} \psi_n(x). \quad (27.38b)$$

Funkcje podcałkowe w obu powyższych wyrażeniach są zawsze funkcjami parzystymi. Nie ma więc żadnych powodów oczekiwać, że całki te dadzą zera. Z zasady nieoznaczoności (27.35) płynie wręcz odwrotny wniosek, obie dyspersje muszą być dodatnie. Sytuacja jest więc inna niż w przypadku klasycznym. Dyspersje (niepewności, rozmycia) położenia i pędu oscylatora, nawet w stanie o najniższej możliwej energii, nie znikają. Mówimy, że kwantowo-mechaniczny oscylator harmoniczny w stanie podstawowym (gdy  $n = 0$ ) wykonuje drgania zerowe, przy czym jego energia jest większa niż zero i wynosi  $\hbar\omega/2$ . Sprawdźmy, że zasada nieoznaczoności, i to całkiem niezależnie od naszych wcześniejszych obliczeń, pozwala przewidzieć dokładnie taką minimalną energię oscylatora.

Rozważmy teraz wartość oczekiwaną energii oscylatora, czyli wartość oczekiwaną hamiltonianu. A zatem mamy

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \left\langle \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right\rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \langle x^2 \rangle \\ &= \frac{\sigma^2(p)}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \sigma^2(x), \end{aligned} \quad (27.39)$$

gdzie wykorzystaliśmy relacje (27.38).

Na mocy zasady nieoznaczoności (27.35) mamy np.

$$\sigma^2(p) \geq \frac{\hbar^2}{\sigma^2(x)}. \quad (27.40)$$

Wobec tego w (27.39) szacujemy  $\langle E \rangle$  od góry, zastępując  $\sigma^2(p)$  w/g (27.40) przez coś większego. A więc łącząc te wzory otrzymujemy

$$\langle E \rangle \geq \frac{\hbar^2}{8my} + \frac{1}{2} m\omega^2 y, \quad (27.41)$$

gdzie dla wygody oznaczyliśmy  $y = \sigma^2(x)$ .

Znajdźmy minimalną wartość prawej strony powyższego oszacowania. Innymi słowy, będziemy manipulować parametrem  $y = \sigma^2(x) > 0$ , tak aby zminimalizować prawą stronę (27.41). A więc badamy funkcję

$$g(y) = \frac{\hbar^2}{8my} + \frac{1}{2} m\omega^2 y. \quad (27.42)$$

Jej pochodna

$$g'(y) = -\frac{\hbar^2}{8my^2} + \frac{1}{2} m\omega^2. \quad (27.43)$$

Łatwo obliczamy, że pochodna znika dla

$$y = \pm \frac{\hbar}{2m\omega}. \quad (27.44)$$

Ponieważ  $y$  jako dyspersja położenia musi być dodatnie, rozwiązanie z minusem odrzucamy. Łatwo widać, że dla  $y = \hbar/2m\omega$ , druga pochodna funkcji  $g(y)$  jest dodatnia. Zatem  $g(y)$  istotnie ma minimum. Najlepsze oszacowanie energii oscylatora w (27.41) dostaniemy podstawiając za  $y$  obliczoną wartość minimalizującą funkcję  $g(y)$ . Elementarne obliczenia prowadzą do wniosku

$$\langle E \rangle \geq \frac{1}{2} \hbar\omega, \quad (27.45)$$

co oczywiście jest zgodne z minimum energii wynikającym z warunku kwantowania.

Na zakończenie zauważmy, że równie dobrze moglibyśmy z zasady nieoznaczoności wyliczyć  $\sigma^2(x)$ , i następnie wyeliminować tę dyspersję z wyrażenia (27.39). Postępując dalej w zupełnie analogiczny sposób dostaniemy to samo oszacowanie dla wartości oczekiwanej  $\langle E \rangle$ , przy czym uzyskane minimum będzie mieć miejsce dla

$$\sigma^2(p) = \tilde{y} = \frac{1}{2} m\hbar\omega. \quad (27.46)$$

Zwróćmy także uwagę, że sytuacja opisana przez dyspersje (27.44) i (27.46) odpowiada

$$\sigma^2(x) \cdot \sigma^2(p) = \frac{\hbar}{2m\omega} \cdot \frac{m\hbar\omega}{2} = \frac{\hbar^2}{4}, \quad (27.47)$$

a więc minimalizacji zasady nieoznaczoności.

## 27.4 Operatory anihilacji i kreacji. Oscylator harmoniczny

### 27.4.1 Operatory anihilacji i kreacji – ogólna teoria

Postulujemy istnienie pewnej przestrzeni Hilberta (być może nieskończenie wielowymiarowej) w której działać będzie operator  $\hat{a}$  i jego sprzężenie  $\hat{a}^\dagger$ . Operatory  $\hat{a}$  i  $\hat{a}^\dagger$  są niehermitowskie. Dla tych dwóch operatorów postulujemy fundamentalną relację komutacyjną

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} = 1. \quad (27.48)$$

Na podstawie przedstawionych postulatów skonstruujemy przestrzeń Hilberta i zbadamy szeregiem bardzo ważnych własności operatorów  $\hat{a}$  oraz  $\hat{a}^\dagger$ . Zrobimy to udowadniając serię lematów i twierdzeń.

**Lemat 27.2** *Operator  $N = \hat{a}^\dagger\hat{a}$  ma pewien wektor własny  $|z\rangle$  odpowiadający rzeczywistej wartości własnej  $z$ , tzn.*

$$N|z\rangle = \hat{a}^\dagger\hat{a}|z\rangle = z|z\rangle, \quad \text{przy czym} \quad z \in \mathcal{R}. \quad (27.49)$$

**Dowód.** Wynika natychmiast z faktu, że operator  $N = \hat{a}^\dagger\hat{a}$  jest hermitowski. ■

**Uwaga:** Wektor  $|z\rangle$  jest wektorem własnym operatora hermitowskiego. Wektor ten można więc zawsze unormować. W dalszych rozważaniach przyjmujemy, że wektor  $|z\rangle$  jest unormowany

$$\| |z\rangle \|^2 = 1, \quad \text{lub} \quad \langle z|z\rangle = 1. \quad (27.50)$$

**Lemat 27.3** *Wartość własna operatora  $\hat{N}$  jest (rzeczywista) nieujemna.  $z \in \mathbb{R}_+$ .*

**Dowód.** Ponieważ  $|z\rangle$  oznacza unormowany wektor własny operatora  $\hat{N}$ , zatem

$$\begin{aligned} z &= z \langle z|z\rangle = \langle z|z|z\rangle = \langle z|\hat{a}^\dagger\hat{a}|z\rangle = (\langle z|\hat{a}^\dagger)(\hat{a}|z\rangle) \\ &= (\hat{a}|z\rangle)^\dagger(\hat{a}|z\rangle) = \|\hat{a}|z\rangle\|^2. \end{aligned} \quad (27.51)$$

Widzimy więc, że  $z$  jest równe normie pewnego wektora, wobec tego jest to liczba rzeczywista i nieujemna. ■

**Lemat 27.4** *Obowiązują następujące relacje komutacyjne*

$$[\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{a}] = -\hat{a}, \quad (27.52a)$$

$$[\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger. \quad (27.52b)$$

**Dowód.** Proste rachunki, w których korzystamy z kanonicznej relacji komutacyjnej (27.48), prowadzą do :

$$\begin{aligned} [\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{a}] &= \hat{a}^\dagger[\hat{a}, \hat{a}] + [\hat{a}^\dagger, \hat{a}]\hat{a} = \hat{a}^\dagger \cdot 0 + (-1)\hat{a}. \\ [\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{a}^\dagger] &= \hat{a}^\dagger[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] + [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger]\hat{a} = \hat{a}^\dagger + 0 \cdot \hat{a}, \end{aligned} \quad (27.53)$$

co kończy dowód. ■

**Lemat 27.5** *Ket  $\hat{a}|z\rangle$  jest stanem własnym operatora  $\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$ , odpowiada wartości własnej  $(z - 1)$ , to jest*

$$\hat{N}\hat{a}|z\rangle = (z - 1)\hat{a}|z\rangle. \quad (27.54)$$

**Dowód.** Jeżeli  $\hat{a} |z\rangle \neq 0$ , to wówczas mamy

$$\hat{N} \hat{a} |z\rangle = \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a} |z\rangle. \quad (27.55)$$

Ze względu na relację komutacyjną (27.52a) możemy napisać  $\hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a} = \hat{a} \hat{a}^\dagger \hat{a} - \hat{a}$ , a zatem

$$\hat{N} \hat{a} |z\rangle = \hat{a} (\hat{a}^\dagger \hat{a} - 1) |z\rangle = \hat{a} z |z\rangle - \hat{a} |z\rangle = (z - 1) \hat{a} |z\rangle. \quad (27.56)$$

Wektor  $\hat{a} |z\rangle$  jest więc stanem własnym operatora  $\hat{N}$  z wartością własną  $(z - 1)$ . ■

**Lemat 27.6** *Ket  $\hat{a}^\dagger |z\rangle$  jest stanem własnym operatora  $\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$  i odpowiada wartości własnej  $(z + 1)$ , to jest*

$$\hat{N} \hat{a}^\dagger |z\rangle = (z + 1) \hat{a}^\dagger |z\rangle. \quad (27.57)$$

**Dowód.** Dowód jest analogiczny do dowodu poprzedniego lematu, w tym przypadku jednak korzystamy z relacji komutacyjnej (27.52b) zamiast (27.52a). ■

**Lemat 27.7** *Normy wektorów  $\hat{a} |z\rangle$  oraz  $\hat{a}^\dagger |z\rangle$  są dane jako*

$$\|\hat{a} |z\rangle\| = \sqrt{z}, \quad \|\hat{a}^\dagger |z\rangle\| = \sqrt{z + 1}. \quad (27.58)$$

**Dowód.** Pierwsza norma wynika automatycznie z dowodu lematu 27.3, patrz relacja (27.51). Drugą relacją dowodzimy analogicznie

$$\|\hat{a}^\dagger |z\rangle\|^2 = (\hat{a}^\dagger |z\rangle)^\dagger (\hat{a}^\dagger |z\rangle) = \langle z | \hat{a} \hat{a}^\dagger |z\rangle. \quad (27.59)$$

Z kanonicznej relacji komutacyjnej mamy  $\hat{a} \hat{a}^\dagger = \hat{a}^\dagger \hat{a} + 1$ , wobec tego

$$\|\hat{a}^\dagger |z\rangle\|^2 = \langle z | \hat{a}^\dagger \hat{a} + 1 |z\rangle = \langle z | \hat{a}^\dagger \hat{a} |z\rangle + \langle z | z \rangle = \|\hat{a} |z\rangle\|^2 + 1 = z + 1, \quad (27.60)$$

co wynika stąd, że wektor  $|z\rangle$  jest unormowany i  $\|\hat{a} |z\rangle\|^2 = z$ , a więc mamy drugą relację (27.58), co kończy dowód. ■

**Lemat 27.8** *Jeśli wektor  $\hat{a}^n |z\rangle \neq 0$ , to jest on wektorem własnym operatora  $\hat{N}$  odpowiadającym wartości własnej  $(z - n)$ :*

$$\hat{N} \hat{a}^n |z\rangle = (z - n) \hat{a}^n |z\rangle \quad (27.61)$$

**Dowód.** Dowód przeprowadzamy przez indukcję. Przypadek  $n = 1$  wykazaliśmy w (27.54). Zasadniczą rolę w dowodzie odgrywa relacja  $\hat{N} \hat{a} = \hat{a} \hat{N} - \hat{a}$ , która wynika z (27.52a). Otrzymujemy wtedy

$$\hat{N} [\hat{a}^{n+1} |z\rangle] = \hat{N} \hat{a} [\hat{a}^n |z\rangle] = (\hat{a} \hat{N} - \hat{a}) [\hat{a}^n |z\rangle] = \hat{a} \hat{N} [\hat{a}^n |z\rangle] - \hat{a}^{n+1} |z\rangle \quad (27.62)$$

Na mocy założenia indukcyjnego dalej uzyskujemy

$$\hat{N} [\hat{a}^{n+1} |z\rangle] = \hat{a} (z - n) \hat{a}^n |z\rangle - \hat{a}^{n+1} |z\rangle = (z - n - 1) \hat{a}^{n+1} |z\rangle. \quad (27.63)$$

skąd wynika treść lematu. ■

**Lemat 27.9** *Istnieje taka liczba całkowita, że*

$$\hat{a}^n |z\rangle \neq 0, \quad \text{lecz} \quad \hat{a}^{n+1} |z\rangle = 0, \quad (27.64)$$

**Dowód.** Z poprzedniego lematu wynika, że  $\hat{a}^n |z\rangle$  jest wektorem własnym operatora  $\hat{N}$  odpowiadającym wartości własnej  $(z - n)$ . Lemat 27.3 mówi, że wartości własne  $\hat{N}$  są nieujemne. dla dostatecznie dużego  $n$  będziemy mieli  $(z - n) < 0$ . Jest to sprzeczne z lematem 27.3. Wobec tego, musi istnieć taka liczba całkowita dodatnia, że warunki (27.64) będą spełnione, co kończy dowód. ■

**Twierdzenie 27.1** *Wartości własne z operatora  $\hat{N}$  zdefiniowane w (27.49) są nieujemnymi liczbami całkowitymi. Co więcej, istnieje unormowany wektor własny  $|0\rangle$  operatora  $\hat{N}$ , taki że*

$$\hat{a} |0\rangle = 0, \quad (27.65)$$

*który nazwiemy stanem próżni.*

**Dowód.** Wektor  $\hat{a}^n |z\rangle$  jest wektorem własnym operatora  $\hat{N}$  odpowiadającym wartości własnej  $z - n$ , możemy więc go unormować i zapisać w postaci

$$|z - n\rangle = \frac{\hat{a}^n |z\rangle}{\|\hat{a}^n |z\rangle\|}. \quad (27.66)$$

Niech  $n$  będzie liczbą całkowitą taką, że spełniony jest warunek (27.64). Oznacza to, że

$$\hat{a} |z - n\rangle = 0, \quad (27.67)$$

więc norma uzyskanego wektora wynosi

$$\|\hat{a} |z - n\rangle\| = 0. \quad (27.68)$$

A zatem, z pierwszej z relacji (27.58) wynika, że

$$\|\hat{a} |z - n\rangle\| = \sqrt{z - n} = 0. \quad (27.69)$$

Implikuje to, że  $z = n$ . Wartości własne z operatora  $\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$  są więc nieujemnymi liczbami całkowitymi. Ponadto, wnioskujemy, że istnieje unormowany wektor  $|0\rangle$ , dla którego relacja (27.64) jest spełniona i to dla  $n = 0$ . ■

**Twierdzenie 27.2** *Zgodnie z twierdzeniem 27.1, przez  $|n\rangle$  oznaczamy unormowany stan własny operatora  $\hat{N}$ , który odpowiada wartości własnej  $n$  – nieujemnej liczbie całkowitej. Wówczas, wektory*

$$|n - 1\rangle = \frac{\hat{a} |n\rangle}{\sqrt{n}}, \quad \text{oraz} \quad |n + 1\rangle = \frac{\hat{a}^\dagger |n\rangle}{\sqrt{n + 1}}, \quad (27.70)$$

*są stanami własnymi operatora  $\hat{N}$ . Relacje te pozwalają na skonstruowanie wszystkich stanów własnych operatora  $\hat{N}$ , przy założeniu, że przynajmniej jeden ze stanów  $|n\rangle$  jest dany (znany). Formuły (27.70) można zapisać równoważnie jako*

$$\hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n - 1\rangle \quad (27.71a)$$

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n + 1} |n + 1\rangle \quad (27.71b)$$

**Dowód.** W lemacie 27.5 wykazaliśmy, że wektor  $\hat{a} |n\rangle$  jest stanem własnym  $\hat{N}$  należącym do wartości własnej  $(n - 1)$ . Oznacza to, że (zgodnie z wprowadzoną notacją)  $\hat{a} |n\rangle$  jest wektorem

proporcjonalnym do wektora  $|n-1\rangle$ . Pozostaje ustalić współczynnik proporcjonalności. Z lematu 27.7 wynika, że norma  $\|\hat{a}|n\rangle\| = \sqrt{n}$ . Wobec tego wektor

$$\frac{\hat{a}|n\rangle}{\|\hat{a}|n\rangle\|} = \frac{\hat{a}|n\rangle}{\sqrt{n}}, \quad (27.72)$$

jest unormowanym wektorem własnym  $\hat{N}$  z wartością własną  $(n-1)$ . A zatem jest on równy wektorowi  $|n-1\rangle$ . Pierwsza część twierdzenia jest więc dowiedziona. Drugą część dowodzimy w ten sam sposób. ■

**Lemat 27.10** Stan własny  $|n\rangle$  operatora  $\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$  można skonstruować jako

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle, \quad (27.73)$$

jeśli tylko stan próżni  $|0\rangle$  zdefiniowany w (27.65) jest znany lub dany.

**Dowód.** Dowód przeprowadzamy przez indukcję z relacji (27.71b). Dla  $n=1$  mamy

$$|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{1!}} \hat{a}^\dagger |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{1!}} \sqrt{1} |1\rangle = |1\rangle, \quad (27.74)$$

tak jak to być powinno. Dalej dla  $n+1$  dostajemy

$$\begin{aligned} |n+1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{(n+1)!}} (\hat{a}^\dagger)^{n+1} |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n+1}} \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{a}^\dagger (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle \\ &= \frac{\hat{a}^\dagger}{\sqrt{n+1}} |n\rangle = \sqrt{n+1} \frac{|n+1\rangle}{\sqrt{n+1}} = |n+1\rangle. \end{aligned} \quad (27.75)$$

gdzie wykorzystaliśmy założenie indukcyjne przy przejściu od pierwszej do drugiej linii. ■

Lemat ten jasno określa sposób konstrukcji stanów własnych operatora  $\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$ . Musimy najpierw zbudować (znaleźć) stan podstawowy – stan próżni  $|0\rangle$ , który powinien być wyznaczony jednoznacznie. Jeśli tak nie jest, to musimy dodatkowo dysponować pełnym zbiorem komutujących obserwabi, które będą klasyfikować stany próżni za pomocą dodatkowych liczb kwantowych. Znajdując w ten sposób odpowiedni unormowany stan próżni, możemy następnie zbudować stany  $|n\rangle$  stosując operator kreacji zgodnie z przepisem (27.73).

**Lemat 27.11** Stany własne  $|n\rangle$  określone w (27.73) są ortonormalne, to jest

$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm}. \quad (27.76)$$

**Dowód.** Ortogonalność wynika z faktu, że stany  $|n\rangle$  są stanami własnymi hermitowskiego operatora  $\hat{N}$ , a więc tylko potrzeba wykazać ich unormowanie. Bez straty ogólności możemy przyjąć  $n \geq m$ . Wówczas, z (27.73) dostajemy

$$\langle n|m\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!m!}} \langle 0|\hat{a}^n (\hat{a}^\dagger)^m |0\rangle. \quad (27.77)$$

Z drugiej strony mamy relacje operatorowe

$$\begin{aligned} \hat{a} (\hat{a}^\dagger)^m - (\hat{a}^\dagger)^m \hat{a} &= [\hat{a}, (\hat{a}^\dagger)^m] = \hat{a}^\dagger [\hat{a}, (\hat{a}^\dagger)^{m-1}] + [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] (\hat{a}^\dagger)^{m-1} \\ &= \hat{a}^\dagger [\hat{a}, (\hat{a}^\dagger)^{m-1}] + (\hat{a}^\dagger)^{m-1}. \end{aligned} \quad (27.78)$$

Wielokrotnie stosując takie rozumowanie, w końcu otrzymamy

$$\hat{a} (\hat{a}^\dagger)^m - (\hat{a}^\dagger)^m \hat{a} = m (\hat{a}^\dagger)^{m-1}, \quad (27.79)$$

co można też wykazać stosując indukcję matematyczną. Idąc dalej stwierdzamy, że

$$\begin{aligned}\langle n|m\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!m!}} \langle 0|\hat{a}^{n-1} [m(\hat{a}^\dagger)^{m-1} + (\hat{a}^\dagger)^m \hat{a}] |0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!m!}} m \langle 0|\hat{a}^{n-1} (\hat{a}^\dagger)^{m-1} |0\rangle,\end{aligned}\quad (27.80)$$

bowiem  $\hat{a}|0\rangle = 0$ . Powtarzając taką procedurę  $m$ -krotnie, uzyskamy w rezultacie relację

$$\langle n|m\rangle = \sqrt{\frac{m!}{n!}} \langle 0|\hat{a}^{n-m}|0\rangle. \quad (27.81)$$

Dla  $n > m$  mamy więc  $\hat{a}^{n-m}|0\rangle = 0$ , co wynika z definicji stanu próżni. Gdy  $n = m$ , to dostaniemy  $\langle n|m\rangle = \langle 0|0\rangle = 1$ . A zatem stany  $|n\rangle$  są ortogonalne (co nie jest nieoczekiwane) i unormowane, tak jak to być powinno, porównaj (27.50). ■

### 27.4.2 Operatory anihilacji i kreacji – podsumowanie

Operatory anihilacji i kreacji (niehermitowskie) są określone przez relację komutacyjną

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1. \quad (27.82)$$

Stany  $|n\rangle$  są stanami własnymi operatora  $\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$ , to jest

$$\hat{N}|n\rangle = \hat{a}^\dagger \hat{a}|n\rangle = n|n\rangle, \quad \text{przy czym} \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (27.83)$$

Stan  $|0\rangle$  nazywamy stanem próżni. Stan ten spełnia warunek

$$\hat{a}|0\rangle = 0. \quad (27.84)$$

Stany  $|n\rangle$  są ortonormalne (stany własne operatora hermitowskiego  $\hat{N}$ )

$$\langle m|n\rangle = \delta_{mn}. \quad (27.85)$$

Działanie operatorów anihilacji i kreacji na stany  $|n\rangle$  określone jest wzorami

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad (27.86a)$$

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle. \quad (27.86b)$$

Zauważmy, że relacje te są w pełni konsystentne z poprzednimi. Wzór (27.86a) zgadza się z definicją (27.84) stanu próżni. Co więcej, mamy

$$\begin{aligned}\hat{a}^\dagger \hat{a}|n\rangle &= \hat{a}^\dagger \sqrt{n}|n-1\rangle = \sqrt{n} \hat{a}^\dagger|n-1\rangle \\ &= \sqrt{n} \sqrt{(n-1)+1}|n\rangle = n|n\rangle,\end{aligned}\quad (27.87)$$

jak to być powinno, zgodnie z definicją (27.83). Elementy macierzowe operatorów anihilacji i kreacji łatwo wynikają z równania (27.86) i warunków ortonormalności. Bez trudu otrzymujemy formuły

$$\langle m|\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n} \langle m|n-1\rangle = \sqrt{n} \delta_{m,n-1}, \quad (27.88a)$$

$$\langle m|\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1} \langle m|n+1\rangle = \sqrt{n+1} \delta_{m,n+1}. \quad (27.88b)$$

Praktyczna konstrukcja przebiega w następujących zasadniczych krokach:

- budujemy operatory anihilacji i kreacji  $\hat{a}$  oraz  $\hat{a}^\dagger$ , a potem sprawdzamy relację komutacyjną (odtworząc relację kanoniczną (27.82));
- znajdujemy (konstruujemy) stan próżni  $|0\rangle$ .
- konstruujemy stany  $|n\rangle$  za pomocą relacji

$$|n\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle. \quad (27.89)$$

### 27.4.3 Zastosowanie do oscylatora harmonicznego

Zastosujemy tutaj przedstawioną powyżej teorię do konkretnego przypadku.

#### Operatory anihilacji i kreacji dla oscylatora harmonicznego

Hamiltonian kwantowo-mechanicznego oscylatora to

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2. \quad (27.90)$$

Operatory położenia i pędu spełniają kanoniczną relację komutacyjną

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar. \quad (27.91)$$

Budujemy teraz dwa operatory pomocnicze

$$\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} \quad \text{oraz} \quad \frac{\hat{p}}{\sqrt{m\omega\hbar}}, \quad (27.92)$$

i bez kłopotu sprawdzamy, że są one bezwymiarowe.

**Twierdzenie 27.3** *Dwa bezwymiarowe, niehermitowskie operatory  $\hat{b}$  oraz  $\hat{b}^\dagger$  zdefiniowane wzorami*

$$\hat{b} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} + \frac{i\hat{p}}{\sqrt{m\omega\hbar}} \right) = \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} (m\omega \hat{x} + i\hat{p}), \quad (27.93a)$$

$$\hat{b}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} - \frac{i\hat{p}}{\sqrt{m\omega\hbar}} \right) = \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} (m\omega \hat{x} - i\hat{p}), \quad (27.93b)$$

*spełniając relację komutacyjną*

$$[\hat{b}, \hat{b}^\dagger] = 1. \quad (27.94)$$

Zatem  $\hat{b}$  możemy uznać za operator anihilacji, zaś  $\hat{b}^\dagger$  za operator kreacji.

**Dowód.** Niehermitowskość i bezwymiarowość zdefiniowanych operatorów jest ewidentna. Trzeba jedynie wykazać relację komutacyjną (27.94). A zatem z definicji (27.93)

$$\begin{aligned} [\hat{b}, \hat{b}^\dagger] &= \frac{1}{2m\omega\hbar} [m\omega \hat{x} + i\hat{p}, m\omega \hat{x} - i\hat{p}] \\ &= \frac{1}{2m\omega\hbar} \{ m^2\omega^2 [\hat{x}, \hat{x}] - im\omega [\hat{x}, \hat{p}] + im\omega [\hat{p}, \hat{x}] + [\hat{p}, \hat{p}] \} \\ &= \frac{im\omega}{2m\omega\hbar} \{ - [\hat{x}, \hat{p}] + [\hat{p}, \hat{x}] \} = \frac{i}{2\hbar} \{ -i\hbar + (-i\hbar) \} = 1. \end{aligned} \quad (27.95)$$

Ponieważ operatory  $\hat{b}$  i  $\hat{b}^\dagger$  spełniają relację komutacyjną typową dla operatorów anihilacji i kreacji, więc posiadają one wszystkie niezbędne własności. Identyfikacja (nazewnictwo) wprowadzone w treści twierdzenia jest więc poprawne i uzasadnione. ■

Relacje (27.93) można łatwo odwrócić i wyrazić operatory położenia i pędu przez operatory anihilacji i kreacji

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{b} + \hat{b}^\dagger), \quad (27.96a)$$

$$\hat{p} = -i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (\hat{b} - \hat{b}^\dagger), \quad (27.96b)$$

Za pomocą tych związków możemy teraz wyrazić hamiltonian oscylatora przez operatory anihilacji i kreacji. Otrzymujemy

$$\begin{aligned}
 \hat{H} &= \frac{1}{2m} \left[ -i \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (\hat{b} - \hat{b}^\dagger) \right]^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 \left[ \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{b} + \hat{b}^\dagger) \right]^2 \\
 &= -\frac{\hbar\omega}{4} (\hat{b} - \hat{b}^\dagger)^2 + \frac{\hbar\omega}{4} (\hat{b} + \hat{b}^\dagger)^2 \\
 &= -\frac{\hbar\omega}{4} (\hat{b}\hat{b} - \hat{b}\hat{b}^\dagger - \hat{b}^\dagger\hat{b} + \hat{b}^\dagger\hat{b}^\dagger) + \frac{\hbar\omega}{4} (\hat{b}\hat{b} + \hat{b}\hat{b}^\dagger + \hat{b}^\dagger\hat{b} + \hat{b}^\dagger\hat{b}^\dagger) \\
 &= \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{b}\hat{b}^\dagger + \hat{b}^\dagger\hat{b})
 \end{aligned} \tag{27.97}$$

Z relacji komutacyjnej (27.94) wynika  $\hat{b}\hat{b}^\dagger = 1 + \hat{b}^\dagger\hat{b}$ , a zatem w końcu mamy

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} (2\hat{b}^\dagger\hat{b} + 1) = \hbar\omega \left( \hat{b}^\dagger\hat{b} + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left( \hat{N} + \frac{1}{2} \right) \tag{27.98}$$

gdzie, jak poprzednio, wprowadziliśmy operator  $\hat{N} = \hat{b}^\dagger\hat{b}$ .

**Twierdzenie 27.4** *Stany własne energii kwantowego oscylatora harmonicznego są stanami  $|n\rangle$  – stanami własnymi operatora  $\hat{N} = \hat{b}^\dagger\hat{b}$ . Wartości własne energii wynoszą*

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right). \tag{27.99}$$

**Dowód.** Dowód wynika natychmiast z relacji (27.98) i z własności operatora  $\hat{N}$  omówionych powyżej. ■

### Konstrukcja stanu próżni

Powyższe rozważania miały dość formalny charakter. Aby nadać im bardziej przejrzystą postać, będziemy teraz budować stany własne energii oscylatora w reprezentacji położeniowej, to jest będziemy szukać funkcji  $\varphi_n(x) = \langle x | n \rangle$ .

Pierwszy krokiem, według nakreślonej uprzednio procedury, musi być konstrukcja stanu próżni, szukamy więc funkcji  $\varphi_0(x) = \langle x | 0 \rangle$ . Stan próżni jest zdefiniowany równaniem (27.65) lub (27.84). Posługując się więc operatorem anihilacji  $\hat{b}$  danym w (27.93a), dostajemy

$$0 = \hat{b} | 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} (m\omega \hat{x} + i\hat{p}) | 0 \rangle. \tag{27.100}$$

W reprezentacji położeniowej równanie to przyjmuje postać

$$\begin{aligned}
 0 &= \langle x | \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} (m\omega \hat{x} + i\hat{p}) | 0 \rangle \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \left[ m\omega x + i \left( -i\hbar \frac{d}{dx} \right) \right] \varphi_0(x).
 \end{aligned} \tag{27.101}$$

Ostatni wzór stanowi elementarne równanie różniczkowe pierwszego rzędu

$$0 = \left( \lambda x + \frac{d}{dx} \right) \varphi_0(x), \quad \text{gdzie} \quad \lambda = \frac{m\omega}{\hbar}. \tag{27.102}$$

Rozwiązanie tego równania jest bardzo proste i ma postać

$$\varphi_0(x) = A_0 \exp \left( -\frac{\lambda x^2}{2} \right), \tag{27.103}$$

gdzie  $A_0$  jest stałą normalizacyjną. Jej obliczenie daje

$$1 = |A_0|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(-\frac{\lambda x^2}{2}\right) = |A_0|^2 \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}}. \quad (27.104)$$

Wybierając dowolną fazę stałej  $A_0$  jako równą zero otrzymujemy funkcję falową stanu podstawowego oscylatora. Innymi słowy mamy stan próżni w reprezentacji położeniowej

$$\varphi_0(x) = \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{\lambda x^2}{2}\right), \quad (27.105)$$

który jest właściwie unormowany.

### Konstrukcja stanów $|n\rangle$

Mając już stan próżni w reprezentacji położeniowej, możemy iść dalej i konstruować dalsze stany. Posłużymy się w tym celu relacją (27.89), którą zapisujemy w reprezentacji położeniowej

$$\varphi_n(x) = \langle x | n \rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle x | (\hat{b}^\dagger)^n | 0 \rangle. \quad (27.106)$$

Rozważmy teraz bra (formę dualną)  $\langle x | \hat{b}^\dagger$ . Na mocy (27.93b) otrzymujemy

$$\begin{aligned} \langle x | \hat{b}^\dagger &= \langle x | \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} (m\omega\hbar \hat{x} - i\hat{p}) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \langle x | \left( \hat{x} - \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right) \\ &= \sqrt{\frac{\lambda}{2}} \left[ \left( \hat{x} + \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right) | x \rangle \right]^\dagger = \sqrt{\frac{\lambda}{2}} \left[ \left( x + \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dx} \right) | x \rangle \right]^\dagger. \end{aligned}$$

Ponieważ operator różniczkowy  $d/dx$  jest antyhermitowski, więc

$$\langle x | \hat{b}^\dagger = \sqrt{\frac{\lambda}{2}} \left( x - \frac{1}{\lambda} \frac{d}{dx} \right) \langle x |. \quad (27.107)$$

Stosując  $n$ -krotnie ten fakt w (27.106)  $n$ -krotnie, otrzymujemy

$$\varphi_n(x) = \left(\frac{\lambda}{2}\right)^{n/2} \frac{1}{\sqrt{n!}} \left( x - \frac{1}{\lambda} \frac{d}{dx} \right)^n \langle x | 0 \rangle. \quad (27.108)$$

Wstawiając funkcję falową (27.105) stanu próżni (27.105), konstruujemy równanie różniczkowe określające  $n$ -ty stan własny energii oscylatora harmonicznego

$$\varphi_n(x) = \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{1}{2^n n!}} \lambda^{n/2} \left( x - \frac{1}{\lambda} \frac{d}{dx} \right)^n \exp\left(-\frac{\lambda x^2}{2}\right). \quad (27.109)$$

Jest to równanie funkcjonalne podobne do wzoru Rodriguesa (27.26) dla wielomianów Hermite'a, zaś parametr  $\lambda$  jest określony w (27.102). Stosując relację (27.32) otrzymaliśmy alternatywną postać funkcji falowych oscylatora. Powtarzając analogiczne rozważania odnośnie formuły (27.109) dostaniemy

$$\begin{aligned} \psi_n(x) &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{n/2} \left( x - \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dx} \right)^n \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) \\ &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) H_n\left(x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right). \end{aligned} \quad (27.110)$$

Możemy więc stwierdzić, że metoda wykorzystująca operatory anihilacji i kreacji prowadzi do tych samych funkcji falowych (funkcji własnych energii) co standardowe rozwiązanie zagadnienia własnego dla hamiltonianu (stacjonarnego równania Schrödingera).

### Inne zastosowania

W głównej części wykładu w pracochłonny sposób (całkując) obliczaliśmy elementy macierzowe  $\langle k|x|n\rangle$ ,  $\langle k|x^2|n\rangle$ ,  $\langle k|p|n\rangle$  oraz  $\langle k|p^2|n\rangle$ . Obliczenia te wymagały dość skomplikowanych całek. Pokażemy teraz, że za pomocą operatorów anihilacji i kreacji można przeprowadzić odpowiednie rachunki nieomal błyskawicznie.

I tak na przykład z (27.96a) mamy

$$\langle k|x|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle k|(\hat{b} + \hat{b}^\dagger)|n\rangle. \quad (27.111)$$

Dalej, na mocy (27.86) dostajemy

$$\langle k|x|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left( \sqrt{n} \langle k|n-1\rangle + \sqrt{n+1} \langle k|n+1\rangle \right). \quad (27.112)$$

Skąd, z ortonormalności stanów  $|n\rangle$  wynika

$$\langle k|x|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left( \sqrt{n} \delta_{k,n-1} + \sqrt{n+1} \delta_{k,n+1} \right). \quad (27.113)$$

Wynik ten jest oczywiście identyczny z odpowiednim elementem macierzowym liczonym w zasadniczej części wykładu przez skomplikowane całki.

Analogicznie możemy obliczyć element macierzowy  $\langle k|x^2|n\rangle$ . Musimy jednak przy tym pamiętać, że operatory anihilacji  $\hat{b}$  i kreacji  $\hat{b}^\dagger$  nie komutują. Dostajemy wówczas

$$\begin{aligned} \langle k|x^2|n\rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle k|(\hat{b} + \hat{b}^\dagger)^2|n\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle k|(\hat{b}\hat{b} + \hat{b}\hat{b}^\dagger + \hat{b}^\dagger\hat{b} + \hat{b}^\dagger\hat{b}^\dagger)|n\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} \left( \sqrt{n(n-1)} \langle k|n-2\rangle + (n+1) \langle k|n\rangle \right. \\ &\quad \left. + n \langle k|n\rangle + \sqrt{(n+1)(n+2)} \langle k|n+2\rangle \right) \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} \left( \sqrt{n(n-1)} \delta_{k,n-2} + (2n+1) \delta_{k,n} \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{(n+1)(n+2)} \delta_{k,n+2} \right), \end{aligned} \quad (27.114)$$

co znowu zgadza się z wynikiem z głównej części tekstu.

Powtarzamy podobne obliczenia dla operatora pędu. Ze wzoru (27.96b) otrzymujemy w zupełnie ten sam sposób

$$\begin{aligned} \langle k|p|n\rangle &= -i \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} \langle k|(\hat{b} - \hat{b}^\dagger)|n\rangle \\ &= -i \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (\sqrt{n} \langle k|n-1\rangle - \sqrt{n+1} \langle k|n+1\rangle) \\ &= -i \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (\sqrt{n} \delta_{k,n-1} - \sqrt{n+1} \delta_{k,n+1}). \end{aligned} \quad (27.115)$$

I wreszcie dla kwadratu operatora pędu mamy

$$\begin{aligned}
 \langle k | p^2 | n \rangle &= -\frac{m\omega\hbar}{2} \langle k | (\hat{b} - \hat{b}^\dagger)^2 | n \rangle \\
 &= -\frac{m\omega\hbar}{2} \langle k | (\hat{b}\hat{b} - \hat{b}\hat{b}^\dagger - \hat{b}^\dagger\hat{b} + \hat{b}^\dagger\hat{b}^\dagger) | n \rangle \\
 &= -\frac{m\omega\hbar}{2} \left( \sqrt{n(n-1)} \langle k | n-2 \rangle - (n+1) \langle k | n \rangle \right. \\
 &\quad \left. - n \langle k | n \rangle + \sqrt{(n+1)(n+2)} \langle k | n+2 \rangle \right) \\
 &= -\frac{m\omega\hbar}{2} \left( \sqrt{n(n-1)} \delta_{k,n-2} - (2n+1) \delta_{kn} \right. \\
 &\quad \left. + \sqrt{(n+1)(n+2)} \delta_{k,n+2} \right). \tag{27.116}
 \end{aligned}$$

Widzimy więc, że również dla operatora pędu elementy macierzowe są identyczne z relacjami wyprowadzonymi w głównym wykładzie. Prostota powyższych obliczeń jasno pokazuje jak bardzo pożyteczne są operatory anihilacji i kreacji.

\*\*\*\*\*