1 NALOGA - *harmonski oscilator*

Izračunaj časovno odvisnost pričakovane vrednosti koordinate in gibalne količine, če je delec ob času $t = 0$ v stanju $\frac{1}{\sqrt{2}}(\mid 0 > + \mid 1 >)$ harmonskega oscilatorja.

Nalogo rešujemo na dva načina:

- z dosedaj znanimi prijemi iz kvantne mehanike;
- z uporabo anihilacijskega in kreacijskega operatorja.

1.1 Rešitev z direktnim računanjem povprečij

1.1.1 Podatki za harmonični oscilator in nekatere zveze

Harmonski oscilator je sistem, katerega potencial zapišemo kot:
$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega_0^2x^2$, kjer m pomeni maso oscilatorja, $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$ pa lastno frekvenco oscilatorja. Za izračun povprečij $< x >$ in $< p >$ pa moramo vedeti še, da se povprečna vrednost poljubnega operatorja A izračuna kot:

$$< A > = < \psi|A|\psi > = \int \psi^*(x)A\psi(x)\, dx. \tag{1}$$

Za harmonski oscilator pa nadalje velja še:

$$\begin{aligned} \psi_0(x) &= \frac{1}{\sqrt[4]{\pi x_0^2}}\, e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}} && (2) \\ \psi_1(x) &= \frac{\sqrt{2}x}{x_0}\frac{1}{\sqrt[4]{\pi x_0^2}}\, e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}} && (3) \\ E_n &= \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) && (4) \end{aligned}$$

Definirali smo $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$. $\psi_0(x)$ in $\psi_1(x)$ predstavljata valovni funkciji ničtega in prvega vzbujenega stanja harmonskega oscilatorja, E_n pa energijo n-tega vzbujenega stanja. Po uporabi enačbe 4 se takoj vidi, da je: $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$ in $E_1 = \frac{3\hbar\omega}{2}$. Oboroženi s tem se lahko lotimo časovnega razvoja valovne funkcije in izračuna povprečij.

1.1.2 Izračun $< x >$ in $< p >$

Časovni razvoj valovne funkcije se glasi:

$$\mid \psi, t > = \frac{1}{\sqrt{2}} \mid 0 > \, e^{-i\frac{E_0}{\hbar}t} \; + \; \frac{1}{\sqrt{2}} \mid 1 > \, e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t}. \tag{5}$$

Upoštevamo enačbi 1 in 5 pa dobimo:

$$\begin{aligned}
< x > &= \Big(\underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}} < 0 \mid \; e^{i\frac{E_0}{\hbar}t}}_{1} + \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}} < 1 \mid \; e^{i\frac{E_1}{\hbar}t}}_{2}\Big) |\mathbf{x}| \Big(\underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}} \mid 0 > \; e^{-i\frac{E_0}{\hbar}t}}_{3} + \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}} \mid 1 > \; e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t}}_{4}\Big) = \\
&= \frac{1}{2} < 0| \; x \mid 1 > \; e^{\frac{i}{\hbar}(E_0-E_1)t} + \frac{1}{2} < 1| \; x \mid 0 > e^{-\frac{i}{\hbar}(E_0-E_1)t} = \qquad (6) \\
&= Re(< 0| \; x \mid 1 > \; e^{\frac{i}{\hbar}t(E_0-E_1)}).
\end{aligned}$$

V zgornjem računu smo po vrsti upoštevali:

- operator $\mid x|$ pomeni kar množenje z x;
- $|stanje >^* = < stanje|$ (ko kompleksno konjugiramo ket se ta spremeni v bra);
- po enačbah 2 in 3 produkti členov 1-3 in 2-4 zaradi lihosti funkcij odpadejo (integracija teče po definicijskem področju x: od $-\infty$ do ∞;
- matrični element $< 1| \; x \mid 0 >=< 0| \; x \mid 1 >^*$ in končno $a+a^* = 2Re(a)$.

Ko izračunamo matrični element

$$\begin{aligned}
< 0| \; x \mid 1 > &= \frac{1}{\sqrt{\pi x_0^2}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sqrt{2}}{x_0} x^2 \, e^{-\frac{x^2}{x_0^2}} \; dx = \qquad (7) \\
&= x_0 \sqrt{\frac{2}{\pi}} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} t^2 \, e^{-t^2} \; dt}_{\frac{\sqrt{\pi}}{2}} = \frac{x_0}{\sqrt{2}} \; ,
\end{aligned}$$

dobimo:

$$< x >= \frac{x_0}{\sqrt{2}} Re\Big(e^{\frac{i}{\hbar}t} \overbrace{(E_0 - E_1)}^{-\hbar\omega}\Big) = \frac{x_0}{\sqrt{2}} \cos \omega t. \qquad (8)$$

Za izračun $< p >$ se skličemo na Ehrenfestov teorem:

$$\begin{aligned}
< p > &= m \frac{d < x >}{dt} = -\frac{m\omega x_0}{\sqrt{2}} \sin \omega t = \\
&= -\frac{p_0}{\sqrt{2}} \sin \omega t.
\end{aligned}$$

Uporabili smo enačbo 8, pri prehodu v drugo vrstico pa smo definirali: $m\omega = \frac{\hbar}{x_0^2}$ in $p_0 = \frac{\hbar}{x_0}$.

1.2 Rešitev s pomočjo kreacijskega in anihilacijskega operatorja

1.2.1 Definicija kreacijskega in anihilacijskega operatorja in nekatere njune lastnosti

Zapišimo:

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\frac{x}{x_0} + i\frac{p}{p_0}) \tag{9}$$

$$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\frac{x}{x_0} - i\frac{p}{p_0}) \tag{10}$$

- a - anihilacijski operator[1];
- a^+ - kreacijski operator.

Velja še:

- $[a^+, a] = -1$ oziroma komutator $[a, a^+] = 1$;
- Hamiltonov operator za harmonski oscilator ($H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2$) se izrazi kot $H = \hbar\omega(a^+a + \frac{1}{2})$;
- anihilacijski operator stanja niža: $a \mid n >= \sqrt{n} \mid n-1 >$;
- kreacijski operator stanja viša: $a^+ \mid n >= \sqrt{n+1} \mid n+1 >$;
- povezava med stanjem $\mid 0 >$ in stanjem $\mid n >$ se glasi:

$$\mid n >= \frac{(a^+)^n}{\sqrt{n!}} \mid 0 > .$$

  To vidimo takole: iz $a^+ \mid 0 >= 1 \mid 1 >$ in $a^+ \mid 1 >= \sqrt{2} \mid 2 >$ sledi: $\mid 2 >= \frac{a^+ \mid 1>}{\sqrt{2}} = \frac{a^+a^+\mid 0>}{\sqrt{2}} \implies \mid n >= \frac{(a^+)^n}{\sqrt{n!}} \mid 0 >$.

1.2.2 Izračun $< x >$ in $< p >$

Račun za $< x >$ teče do tretje vrstice kompleta enačb 6 povsem enako. Poenostavi se izračun matričnega elementa, torej enačbe 7. Za izračun pa

[1] na vajah označili z a^-

moramo izraziti še operatorja x in p z operatorjema a^+ in a. Prvič enačbi 9 in 10 seštejemo, drugič odštejemo, pa dobimo:

$$\begin{aligned} a + a^+ &= \sqrt{2}\,\frac{x}{x_0} \quad \Rightarrow \quad x = \frac{(a+a^+)x_0}{\sqrt{2}} \\ a - a^+ &= \sqrt{2}\,i\,\frac{p}{p_0} \quad \Rightarrow \quad p = \frac{(a+a^+)p_0}{\sqrt{2}i}. \end{aligned}$$

Matrični dipolni element se sedaj glasi:

$$\begin{aligned} < 0|\, x \mid 1 > &= < 0|\, \frac{1}{\sqrt{2}}\, x_0(a+a^+) \mid 1 >= \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\, x_0\,(\, < 0|\, a \mid 1 > + < 0|\, a^+ \mid 1 >) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\, x_0\,(\underbrace{< 0 \mid 0 >}_{=1} + \underbrace{< 0|\, \sqrt{2} \mid 2 >}_{=0} = \frac{1}{\sqrt{2}}\, x_0. \end{aligned}$$

Natanko to pa smo želeli tudi videti. V zgornjem računu smo upoštevali še, da so stanja ortonormirana, torej: $< i \mid j >= \delta_{i,j}$. Rezultat se ujema z rezultatom enačbe 7, torej bi se tudi rezultat za povprečni x na koncu ujemal z enačbo 8. Podobno bi lahko naredili tudi za izračun $< p >$.