Operatorji v bazi lastnih stanj harmonskega oscilatorja (LSHO)

Borut Polajnar

1 Uvod

V nadaljevanju operatorje $\hat{a}$, $\hat{a}^\dagger$, $\hat{x}$, $\hat{p}$, $\hat{T}$, $\hat{V}$ in $\hat{H}$ v bazi LSHO zapišem v matrični obliki. Posamezne matrične elemente poljubnega operatorja $\hat{A}$ računam po definiciji

$$A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle, \tag{1}$$

kjer sta $|m\rangle$ in $|n\rangle$ poljubna bazna vektorja. Vse okrajšave, ki se pojavljajo v nalogi, povezuje enačba

$$E_0 = \frac{p_o^2}{2M} = \frac{\hbar^2}{2x_0^2 M} = \frac{M\omega^2 x_0^2}{2} = \frac{\hbar\omega}{2}. \tag{2}$$

2 Izračun matričnih elementov

2.1 Operatorja $\hat{a}$ in $\hat{a}^\dagger$

Delovanje anihilacijskega operatorja na dane bazne vektorje ponazarja enačba

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle, \tag{3}$$

od koder, ob upoštevanju ortonormiranosti LSHO, očitno sledi, da imajo neničelni koeficienti matrike a obliko

$$a_{m,m+1} = \langle m|\hat{a}|m+1\rangle = \sqrt{m+1}\,\langle m|m\rangle = \sqrt{m+1}\,. \tag{4}$$

S pomočjo *Kroneckerjevega simbola* δ_m^n lahko po komponentah posledično zapišem

$$a_{mn} = \sqrt{n}\,\delta_{m+1}^n, \tag{5}$$

medtem ko ima v standardnem zapisu a obliko[1]

$$a = \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix}. \tag{6}$$

[1]Opozorilo: Štetje vrstic in stolpcev se začenja z 0 in ne z 1 kot je to običajno.

Razmere so zelo podobne pri razvoju kreacijskega operatorja $\hat{a}^\dagger$. Narava njegovega delovanja na bazne vektorje

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle, \tag{7}$$

določa neničelne matrične elemente oblike

$$a^\dagger_{m,m-1} = \langle m|\hat{a}^\dagger|m-1\rangle = \sqrt{m}\,\langle m|m\rangle = \sqrt{m}\,. \tag{8}$$

Po komponentah zapišem

$$a^\dagger_{mn} = \sqrt{n+1}\,\delta^n_{m-1}, \tag{9}$$

kar v standardni izvedbi predstavlja matriko

$$a^\dagger = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \cdot \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix}. \tag{10}$$

2.2 Operatorja $\hat{x}$ in $\hat{p}$

Operatorja koordinate $\hat{x}$ in gibalne količine $\hat{p}$ sta zvezana z $\hat{a}$ in $\hat{a}^\dagger$ z relacijami

$$\hat{x} = \frac{x_0}{\sqrt{2}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \tag{11}$$

$$\hat{p} = -i\frac{p_0}{\sqrt{2}}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger), \tag{12}$$

zato lahko uporabim rezultate prejšnjega razdelka in po komponentah zapišem

$$x_{mn} = \frac{x_0}{\sqrt{2}}(\sqrt{n}\,\delta^n_{m+1} + \sqrt{n+1}\,\delta^n_{m-1}) \tag{13}$$

$$p_{mn} = -i\frac{p_0}{\sqrt{2}}(\sqrt{n}\,\delta^n_{m+1} - \sqrt{n+1}\,\delta^n_{m-1}), \tag{14}$$

dobljene koeficinte pa lahko uredim še v matriki

$$x = \frac{x_0}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdot \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdot \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \cdot \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix} \tag{15}$$

in

$$p = -i\frac{p_0}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdot \\ -\sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdot \\ 0 & -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \cdot \\ 0 & 0 & -\sqrt{3} & 0 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix}. \tag{16}$$

2.3 Operatorji $\hat{T}$, $\hat{V}$ in $\hat{H}$

Nekoliko kompleksnejša je izpeljava matričnih elementov energijskih operatorjev. Operator kinetične energije $\hat{T}$ je funkcija operatorja gibalne količine $\hat{p}$, povezuje pa ju znana relacija

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2M}. \tag{17}$$

Za matriko T po komponentah zato neposredno sledi

$$\begin{aligned} T_{mn} &= \frac{1}{2M} p_{ms} p_{sn} \\ &= -\frac{E_0}{2}(\sqrt{s}\,\delta^s_{m+1} - \sqrt{s+1}\,\delta^s_{m-1})(\sqrt{n}\,\delta^n_{s+1} - \sqrt{n+1}\,\delta^n_{s-1}). \end{aligned} \tag{18}$$

Pri računanju desne strani si pomagam s shemo razvoja neničelnih členov

$$\begin{array}{cccc} \sqrt{n\,s}\,\delta^s_{m+1}\delta^n_{s+1} & \sqrt{(n+1)\,s}\,\delta^s_{m+1}\delta^n_{s-1} & \sqrt{n\,(s+1)}\,\delta^s_{m-1}\delta^n_{s+1} & \sqrt{(n+1)\,(s+1)}\,\delta^s_{m-1}\delta^n_{s-1} \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ s = m+1 & s = m+1 & s = m-1 & s = m-1 \\ s = n-1 & s = n+1 & s = n-1 & s = n+1 \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ n = m+2 & n = m & n = m & n = m-2 \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ \sqrt{n(n-1)}\,\delta^n_{m+2} & \sqrt{(n+1)^2}\,\delta^n_m & \sqrt{n^2}\,\delta^n_m & \sqrt{(n+2)(n+1)}\,\delta^n_{m-2} \end{array}. \tag{19}$$

Komponente T so torej oblike

$$T_{mn} = -\frac{E_0}{2}\left(\sqrt{n(n-1)}\,\delta^n_{m+2} - (2n+1)\delta^n_m + \sqrt{(n+2)(n+1)}\,\delta^n_{m-2}\right), \tag{20}$$

kar v standardnem zapisu predstavlja matriko

$$T = -\frac{E_0}{2}\begin{bmatrix} -1 & 0 & \sqrt{1\cdot 2} & 0 & 0 & \cdot \\ 0 & -3 & 0 & \sqrt{2\cdot 3} & 0 & \cdot \\ \sqrt{1\cdot 2} & 0 & -5 & 0 & \sqrt{3\cdot 4} & \cdot \\ 0 & \sqrt{2\cdot 3} & 0 & -7 & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & \sqrt{3\cdot 4} & 0 & -9 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix}. \tag{21}$$

Operator potenciala $\hat{V}$ je po drugi strani kvadratna funkcija $\hat{x}$, saj velja

$$\hat{V} = \frac{M\omega^2}{2}\hat{x}^2. \tag{22}$$

Zaradi podobnosti matrik x in p je izpeljava matričnih elementov V_{mn} skorajda identična izračunu komponent T_{mn}. Rezultat je tako

$$V_{mn} = \frac{E_0}{2}\left(\sqrt{n(n-1)}\,\delta^n_{m+2} + (2n+1)\delta^n_m + \sqrt{(n+2)(n+1)}\,\delta^n_{m-2}\right), \tag{23}$$

dobljene komponente pa lahko uredim še v matriko

$$V = \frac{E_0}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & \sqrt{1 \cdot 2} & 0 & 0 & \cdot \\ 0 & 3 & 0 & \sqrt{2 \cdot 3} & 0 & \cdot \\ \sqrt{1 \cdot 2} & 0 & 5 & 0 & \sqrt{3 \cdot 4} & \cdot \\ 0 & \sqrt{2 \cdot 3} & 0 & 7 & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & \sqrt{3 \cdot 4} & 0 & 9 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix}. \tag{24}$$

Iz definicije $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$ sedaj neposredno sledi

$$H_{mn} = E_0(2n+1)\,\delta_m^n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})\,\delta_m^n, \tag{25}$$

oziroma

$$H = \hbar\omega \begin{bmatrix} 1/2 & 0 & 0 & \cdot \\ 0 & 3/2 & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & 5/2 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix}. \tag{26}$$

Operator polne energije ima v bazi lastnih vektorjev po pričakovanju obliko diagonalne matrike z lastnimi vrednostmi energije po diagonali.

3 Računanje s končnimi matrikami

Nazadnje si poglejmo še, kako bi se spremenile matrike T, V, in H, če bi predpostavili, da imata matriki p in x končno dimenzijo $(N+1) \times (N+1)$, kar z drugimi besedami pomeni, da matrični indeksi zavzemajo vrednosti med 0 in N.

Bralca naj opomnim, da je bila za izračun matrik energijskih operatorjev odločilnega pomena shema (19). Pri podrobni preučitvi tam navedenih razvojev členov ugotovim, da izpeljava

$$\sqrt{(n+1)s}\,\delta_{m+1}^s \delta_{s-1}^n \rightarrow \begin{matrix} s = m+1 \\ s = n+1 \end{matrix} \rightarrow n = m \rightarrow (n+1)\,\delta_m^n$$

za indeksa $m = n = N$ ni konsistentna. Sumacijski indeks s bi namreč pri tej vrednosti indeksov m in n, po predpostavki za prvo puščico, moral zavzeti vrednost $N+1$, kar zaradi omejitve postavljene na dimenzionalnost prostora ni mogoče. Člen oblike $(n+1)\,\delta_m^n$ torej k vrednosti matričnih elementov T_{NN}, V_{NN} in pa H_{NN} ne more prispevati, saj ga vsota po s ne zajame. Ostali razvoji v (19) nimajo takih težav, zato po novem velja

$$2T_{NN} = 2V_{NN} = H_{NN} = NE_0 = N\frac{\hbar\omega}{2}, \tag{27}$$

medtem ko ostale elemente, še vedno lahko računam po enačbah (20), (23) in (25). Za boljšo predstavo naj predstavim matrike T, V in H za primer, ko $N = 4$. V skladu z gornjim razmišljanjem dobim

$$T = -\frac{E_0}{2}\begin{bmatrix} -1 & 0 & \sqrt{1\cdot 2} & 0 & 0 \\ 0 & -3 & 0 & \sqrt{2\cdot 3} & 0 \\ \sqrt{1\cdot 2} & 0 & -5 & 0 & \sqrt{3\cdot 4} \\ 0 & \sqrt{2\cdot 3} & 0 & -7 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3\cdot 4} & 0 & -4 \end{bmatrix}, \tag{28}$$

$$V = \frac{E_0}{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 & \sqrt{1\cdot 2} & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & \sqrt{2\cdot 3} & 0 \\ \sqrt{1\cdot 2} & 0 & 5 & 0 & \sqrt{3\cdot 4} \\ 0 & \sqrt{2\cdot 3} & 0 & 7 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3\cdot 4} & 0 & 4 \end{bmatrix} \tag{29}$$

in pa

$$H = \hbar\omega\begin{bmatrix} 1/2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 5/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 7/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 4/2 \end{bmatrix}. \tag{30}$$

Nauk te zgodbe: pri računanju s končnimi matrikami, npr. znotraj okvira kakšnega računalniškega programa, je potrebno paziti na spremembe nekaterih matričnih elementov pod pogojem omejene dimenzionalnosti.