Curs 8

Oscilatorul armonic

- una dintre problemele importante în toate ramurile fizicii.
- o particulă care se mișcă într-un potențial $\sim x^2$, execută o mișcare de tip oscilator armonic.

$$\boxed{H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2}$$

energie cinetică   energie potențială.

Obs:
Ec. Schrödinger pentru Hamiltonianul de tip oscilator armonic poate fi rezolvată exact.

Introducem coordonatele adimensionale

$$H = \frac{\hbar\omega}{2}\left(\frac{P^2}{m\hbar\omega} + \frac{m\omega}{\hbar}\cdot x^2\right)$$

p - impulsul adimensional $p = \frac{P}{\sqrt{m\hbar\omega}} \Rightarrow \frac{P^2}{m\hbar\omega} = p^2$

q - poziție adimensională $q = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\cdot x \Rightarrow \frac{m\omega}{\hbar}x^2 = q^2$.

(p, q) - coordonate generalitate adimensionale

$$H = \frac{\hbar\omega}{2}(p^2 + q^2)$$

Introducem operatorii de creere / anihilare.

$$\boxed{a = \frac{1}{\sqrt{2}}(q + ip) \quad ; \quad a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(q - ip)}$$

$$a^+ \cdot a = \frac{1}{\sqrt{2}}(q - ip)\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}(q + ip) = \frac{1}{2}(q - ip)(q + ip)$$

$$= \frac{1}{2}\cdot\left(q^2 \underbrace{- ip\cdot q + iqp}_{} + p^2\right)$$

$$= \frac{1}{2}\left(p^2 + q^2 + i[q, p]\right)$$

$$a^+ a = \frac{1}{2}(p^2+q^2) + \frac{i}{2}[q,p].$$

$$[X, P] = i\hbar$$

$$[q,p] = \left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\cdot X, \frac{P}{\sqrt{m\hbar\omega}}\right] = \frac{1}{\hbar}[X,P] = \frac{1}{\hbar}\cdot i\hbar = i$$

$$a^+ a = \frac{1}{2}(p^2+q^2) - \frac{1}{2}$$

$$\frac{1}{2}(p^2+q^2) = a^+ a + \frac{1}{2}$$

$\Downarrow$ Hamiltonianul ptr oscilatorul armonic :

$$\boxed{H = \hbar\omega\left(a^+ a + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega\left(N + \frac{1}{2}\right) \quad ; \quad N = a^+ a}$$

$N = a^+ a$ = operatorul număr de particule, sau operatorul de ocupare.

Relațiile de comutare între a și a^+

$$[a, a^+] = \left[\frac{1}{\sqrt{2}}(q+ip), \frac{1}{\sqrt{2}}(q-ip)\right]$$

$$= \frac{1}{2}[q+ip, q-ip] = -\frac{i}{2}\underbrace{[q,p]}_{i} + \frac{i}{2}\underbrace{[p,q]}_{-i}$$

$$= \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1$$

$$\boxed{[a, a^+] = 1}$$

Operatorii care satisfac astfel de relații de comutare se numesc operatori de anihilare și creere bosonici.

<u>Valorile proprii ale energiei</u> :

Hamiltonianul depinde doar de operatorul N, deci

$$[H, N] = 0 \quad ; \quad \left[\hbar\omega\left(N+\frac{1}{2}\right), N\right] = \hbar\omega[N,N] = 0.$$

<u>obs II.</u> Doi operatori Hermitici care comută au vectori proprii comuni

$\Rightarrow H$, și N au același set de vectori proprii.

Vom nota $\{|n\rangle\}$ vectorii proprii ai lui N.

$$N|n\rangle = n \cdot |n\rangle \qquad H \cdot |n\rangle = E_n |n\rangle$$

N ↑ operatorul nr. de part. ; n ↑ valoarea proprie ; $|n\rangle$ ↑ vectorul propriu

$$\boxed{E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)}$$ – energiile proprii pentru oscilatorul armonic

<u>Relațiile de comutare între a, a^+, H.</u> $\left([a, a^+] = 1 \right)$

$$[a, H] = \left[a, \hbar\omega\left(a^+ a + \frac{1}{2}\right)\right] = \hbar\omega[a, a^+ a]$$

$$= \hbar\omega\underbrace{[a, a^+]}_{1} \cdot a = \hbar\omega \cdot a$$

$$\boxed{[a, H] = \hbar\omega a}$$

$$[a^+, H] = \hbar\omega[a^+, a^+ a] = -\hbar\omega a^+ \qquad \boxed{[a^+, H] = -\hbar\omega a^+}$$

$$H\left(a|n\rangle\right) = H \cdot a|n\rangle = (aH - \hbar\omega a)|n\rangle = (E_n - \hbar\omega)(a|n\rangle)$$

$$[a, H] = aH - Ha = \hbar\omega a \Rightarrow H \cdot a = aH - \hbar\omega a$$

$$\boxed{H\left(a|n\rangle\right) = (E_n - \hbar\omega)\left(a|n\rangle\right)}$$

$$\boxed{H\left(a^+|n\rangle\right) = (E_n + \hbar\omega)\left(a^+|n\rangle\right)}$$

$\Rightarrow \{a|n\rangle\}$ și $\{a^+|n\rangle\}$ sunt stări proprii ai lui H cu valori proprii $E_n - \hbar\omega$ și $E_n + \hbar\omega$.

Relațiile de comutare dintre a, a^+, N sunt.

$$\boxed{\begin{array}{ll} [a, N] = a; & [N, a] = -a \\ [a^+, N] = -a^+ ; & [N, a^+] = a^+ \end{array}}$$

$$N(a|n\rangle) = (aN - a)|n\rangle = (n-1)(a|n\rangle)$$

$$\boxed{N(a|n\rangle = (n-1)(a|n\rangle)} \qquad \boxed{N(a^+|n\rangle) = (n+1)\, a^+|n\rangle}$$

$\{a|n\rangle\}$ și $\{a^+|n\rangle\}$ sunt stări proprii pentru operatorul $\hat{N}$.

$$N|n\rangle = n|n\rangle \quad \to \quad N(a|n\rangle) = (n-1)(a|n\rangle)$$

$$\Rightarrow a|n\rangle \sim |n-1\rangle \qquad N|n-1\rangle = (n-1)|n-1\rangle$$

$$a|n\rangle = c_n|n-1\rangle$$

a - operator de anihilare sau operator de coborâre.

$$(a|n\rangle)^+ = \langle n|a^+$$

$$(\langle n|a^+)(a|n\rangle) = \langle n|\underbrace{a^+a}_{N}|n\rangle = \langle n|\underbrace{N|n\rangle}_{} =$$

$$= \langle n|(n|n\rangle) = n\underbrace{\langle n|n\rangle}_{1} = n.$$

$$(\langle n|a^+)(a|n\rangle) = \langle n-1|c_n^* \cdot c_n|n-1\rangle = |c_n|^2 \cdot \langle n-1|n-1\rangle$$

$$= |c_n|^2.$$

$$|c_n|^2 = n \quad \Rightarrow \quad c_n = \sqrt{n}$$

$$\boxed{a|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle}$$

Dintr-o stare $|n\rangle$, aplicând consecutiv operatorul de anihilare obținem o stare cu $|n-1\rangle$, $|n-2\rangle$... particule

$n > 0$: $\Rightarrow$ În starea $|0\rangle$ - stare de vid nu mai avem nici o particulă

$$a|0\rangle = \sqrt{0}\,|?\rangle = 0 \Rightarrow \boxed{a|0\rangle = 0}$$

În mod analog putem arăta că: $\boxed{a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle}$

Dacă aplicăm repetat a^+ asupra stării $|n\rangle$, vom genera o secvență infinită de stări $|n+1\rangle$, $|n+2\rangle$ ....

n - este un nr întreg și caract. spectrul energetic al oscilatorului armonic

$$\boxed{E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \qquad n = 0, 1, 2 \ldots}$$

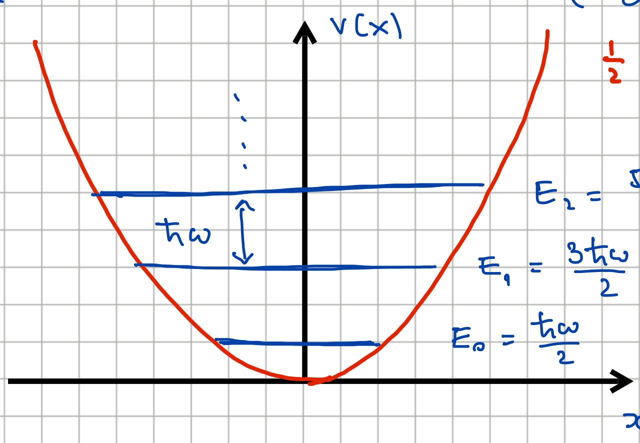
Starea de vid cu $n=0$, $|0\rangle$, are energia $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$.
(energia de zero, sau energia vidului)

Toate stările $|n\rangle$ pot fi obținute aplicând operatorul a^+ în mod succesiv.

Stările astfel obținute sunt ortonormate și formează o bază:

$$\langle n | n' \rangle = \delta_{nn'} = \begin{cases} 1, & n = n' \\ 0; & n \neq n' \end{cases} \quad \text{(ortonormare)}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n| = \mathbb{1} \quad \text{(completitudine)}$$



$E_2 = \frac{5\hbar\omega}{2}$ - a doua stare excitată.

$E_1 = \frac{3\hbar\omega}{2}$ - prima stare excitată

$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$ - energia stării fundamentale

Funcțiile de undă ale oscilatorului armonic

$$\hat{p} = \frac{\hat{P}}{\sqrt{m\hbar\omega}} = -\frac{i\hbar}{\sqrt{m\hbar\omega}} \cdot \frac{d}{dx} = -i\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \cdot \frac{d}{dx}$$

Notăm cu $\boxed{x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}}$ - lungimea caracteristică a oscilator armonic

$$\boxed{p = -i x_0 \cdot \frac{d}{dx}} \qquad q = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \cdot X = \frac{1}{x_0} \cdot X.$$

$$\boxed{q = \frac{1}{x_0} \cdot X}$$

Operatorul de anihilare este:

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(q + ip) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{1}{x_0} \cdot X + x_0 \cdot \frac{d}{dx}\right)$$

expresiile explicite ptr operatorii de anihilare / creere în spațiul real.

$$\boxed{\begin{aligned} a &= \frac{1}{\sqrt{2}\,x_0}\left(X + x_0^2 \cdot \frac{d}{dx}\right) \\ a^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}\,x_0}\left(X - x_0^2 \cdot \frac{d}{dX}\right) \end{aligned}}$$

Ptr starea de vid $|0\rangle$ avem $a|0\rangle = 0$. În reprezentarea de poziție:

$$\langle x | a | 0 \rangle = 0$$

$$\langle x | \frac{1}{\sqrt{2}\,x_0}\left(X + x_0^2 \cdot \frac{d}{dx}\right) | 0 \rangle = 0.$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}\,x_0}\left[x \langle x | 0 \rangle + x_0^2 \cdot \frac{d}{dx} \langle x | 0 \rangle\right] = 0.$$

$\langle x|0\rangle = \psi_0(x)$ reprezintă funcția de undă pțr starea de vid.

$$x \cdot \psi_0(x) + x_0^2 \cdot \frac{d\psi_0(x)}{dx} = 0. \quad \Rightarrow \quad \psi_0'(x) + \frac{x}{x_0^2}\psi_0(x) = 0.$$

$$\psi_0(x) = A \cdot e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}. \qquad \Uparrow$$

$$\psi_0'(x) = -\frac{x}{x_0^2} A e^{-\frac{x^2}{2x_0}} = -\frac{x}{x_0^2} \cdot \psi_0(x)$$

A - const. de integrare se calculează din condiția de normare a funcției de undă: $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} = \sqrt{\pi/\alpha}$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_0|^2 dx = 1 \Rightarrow A^2 \cdot \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{x_0^2}} dx = A^2\sqrt{\pi} \cdot x_0 = 1$$

$$A = \frac{1}{\pi^{1/4}} \cdot \frac{1}{\sqrt{x_0}} = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}\, x_0}} \quad \text{- const. de integrare.}$$

$$\boxed{\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} \cdot x_0}} e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}}$$

funcția de undă pentru starea fundamentală.

$\underline{\underline{n=0}}$

Funcțiile de undă pentru stările excitate $\psi_1(x), \psi_2(x) \ldots \psi_n(x)$ se obțin acționând succesiv cu operatorul a^+ asupra stării de vid.

$$\langle x|1\rangle = \langle x|a^+|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}\,x_0}\left(x - x_0^2 \cdot \frac{d}{dx}\right)\langle x|0\rangle$$

$$\psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2}\,x_0}\left(x - x_0^2 \cdot \frac{d}{dx}\right)\psi_0(x)$$

$$\psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2}\,x_0}\left(x - \cancel{x_0^2} \cdot \left(-\frac{x}{\cancel{x_0^2}}\right)\right)\psi_0(x)$$

$$\psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2}\, x_0} \cdot 2x \, \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}\, x_0}} \, e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}$$

$$\boxed{\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{\sqrt{\pi}\, x_0^3}} \cdot x \, e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}}$$

– fct. de undă ptr primul nivel excitat. $\underline{\underline{n=1}}$

$$\langle x|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle x| a^+ |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle x| (a^+)^2 |0\rangle$$

$$\langle x|3\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \langle x| a^+ |2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3 \cdot 2}} \cdot \langle x| (a^+)^2 |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3!}} \langle x| (a^+)^3 |0\rangle$$

$$\psi_n(x) = \langle x|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle x| (a^+)^n |0\rangle$$

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}\, x_0} \cdot \left(x - x_0^2 \cdot \frac{d}{dx}\right)^n \psi_0(x)$$

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}\, 2^n \cdot n!}} \cdot \frac{1}{x_0^{n+\frac{1}{2}}} \cdot \left(x - x_0^2 \cdot \frac{d}{dx}\right)^n \cdot e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}$$

<u>Polinoamele Hermite</u>

$$H_n(y) = (-1)^n \cdot e^{y^2} \cdot \frac{d^n}{dy^n} \cdot e^{-y^2}$$

polinom de ordin n

$H_0(y) = 1$ (pară)

$H_1(y) = 2y$ (impară)

$H_3(y) = 4y^2 - 2$ (pară)

Fct. de undă ptr oscilatorul armonic

$$\boxed{\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}\, 2^n \cdot n! \, x_0}} \cdot e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}} \cdot H_n\left(\frac{x}{x_0}\right)}$$

$n = 0, 1, 2, \ldots$

Starea $\psi_n(x)$ corespunde energiei $E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$.
In general $\psi_{2k}(x)$ este o funcție pară iar $\psi_{2k+1}(x)$ este o funcție impară.

Probleme: Să se evalueze valori medii ale operatorilor de poziție și impuls în starea proprie $|n\rangle$ a Hamiltonianului ptr oscilatorul armonic și să se verifice că relațiile de nedeterminare Heisenberg sunt satisfacute. $\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$.

Rez: Vom exprima operatorii de poziție și impuls X, P în funcție de operatorii de creere/anihilare.

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(q + ip) \qquad p = \frac{P}{\sqrt{m\hbar\omega}}$$

$$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(q - ip) \qquad q = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \cdot X$$

$$a + a^+ = \frac{2}{\sqrt{2}} q \quad \Rightarrow \quad q = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^+)$$

$$\boxed{X = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^+)}$$

$$a - a^+ = \frac{2i}{\sqrt{2}} p \quad \Rightarrow \quad p = -\frac{i}{\sqrt{2}}(a - a^+)$$

$$a|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle$$
$$a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$$

$$\boxed{P = -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(a - a^+)}$$

$$X|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^+)|n\rangle$$

$$X|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n}\,|n-1\rangle + \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle\right)$$

$$\langle n| X |n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\langle n|\sqrt{n}\,|n-1\rangle + \langle n|\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \right)$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\sqrt{n}\ \underbrace{\langle n|n-1\rangle}_{=0} + \sqrt{n+1}\ \underbrace{\langle n|n+1\rangle}_{=0} \right)$$

$\{|n\rangle\}$ - set ortonormat $\langle n|n\rangle = 1$ și restul zero.

$$\Rightarrow \boxed{\langle n| X |n\rangle = 0}$$

$$\langle n| P |n\rangle = -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \left(\sqrt{n}\ \underbrace{\langle n|n-1\rangle}_{=0} - \sqrt{n+1}\ \underbrace{\langle n|n+1\rangle}_{=0} \right)$$

$$\boxed{\langle n| P |n\rangle = 0}$$

$$X^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}(a+a^+)(a+a^+) = \frac{\hbar}{2m\omega}\left(a^2 + a^+a + aa^+ + a^{+2}\right)$$

$[a, a^+] = 1$

$aa^+ = a^+a + 1$

$$\boxed{X^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}\left(a^2 + a^{+2} + 2a^+a + 1\right)}$$

$$P^2 = -\frac{m\hbar\omega}{2}(a-a^+)(a-a^+) = -\frac{m\omega\hbar}{2}\left(a^2 - a^+a - aa^+ + a^{+2}\right)$$

$$= -\frac{m\hbar\omega}{2}\left(a^2 + a^{+2} - 2a^+a - 1\right)$$

$$\boxed{P^2 = \frac{m\hbar\omega}{2}\left(2a^+a + 1 - a^2 - a^{+2}\right)}$$

$a \cdot a\,|n\rangle =$

$a \cdot \sqrt{n}\,|n-1\rangle$

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

$= \sqrt{n}\ \sqrt{n-1}\ |n-2\rangle$

$\langle n| X^2 |n\rangle$

$$X^2|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \cdot \left(a^2 + a^{+2} + 2a^+a + 1\right)|n\rangle$$

$$= \frac{\hbar}{2m\omega} \cdot \left(\sqrt{n}\sqrt{n-1} \cdot |n-2\rangle + \sqrt{n+1}\sqrt{n+2}\ |n+2\rangle \right.$$

$$+ 2\sqrt{n}\sqrt{n}\,|n\rangle + |n\rangle \Big)$$

$$\boxed{\langle n|x^2|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\left(2n+1\right)}$$

$$\boxed{\langle n|p^2|n\rangle = \frac{m\hbar\omega}{2}\cdot\left(2n+1\right)}$$

$$\boxed{\langle n|x|n\rangle = 0 \qquad \langle n|p|n\rangle = 0}$$

$$\Delta x = \sqrt{\langle n|x^2|n\rangle} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\cdot\sqrt{2n+1}$$

$$\Delta p = \sqrt{\langle n|p^2|n\rangle} = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\sqrt{2n+1}$$

$$\Delta x\cdot\Delta p = \sqrt{\frac{\hbar}{2\cancel{m\omega}}}\cdot\sqrt{\frac{\cancel{m}\hbar\cancel{\omega}}{2}}\cdot(2n+1)$$

$$\boxed{\Delta x\cdot\Delta p = \frac{\hbar}{2}\left(2n+1\right)}$$

ptr $n=0 \Rightarrow \Delta x\cdot\Delta p = \frac{\hbar}{2}$

ptr $n>0 \Rightarrow \Delta x\cdot\Delta p > \frac{\hbar}{2}$

$\Rightarrow$ inegalitatea Heisenberg este satisfăcută ptr toate stările $|n\rangle$.