Løsning til øving 10 for FY1004, høsten 2007

Hamiltonoperatoren for en endimensjonal harmonisk oscillator er

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}\, m\omega^2 x^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}\, m\omega^2 x^2 = \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega\left(N + \frac{1}{2}\right) \; .$$

m er masse, x er posisjon, p er impuls, og ω er vinkelfrekvens. Størrelsen

$$\ell = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

er en karakteristisk lengde for oscillatoren. Vi innfører operatorene

$$\begin{aligned} a &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\, x + \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\, p = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{\ell} + \frac{\mathrm{i}\ell}{\hbar}\, p\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{\ell} + \ell\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right) , \\ a^\dagger &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\, x - \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\, p = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{\ell} - \frac{\mathrm{i}\ell}{\hbar}\, p\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{\ell} - \ell\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right) . \end{aligned}$$

Den kanoniske kommutasjonsrelasjonen $[x,p] = xp - px = \mathrm{i}\hbar$ gir at $[a,a^\dagger] = aa^\dagger - a^\dagger a = 1$.

Operatoren $N = a^\dagger a$ kalles en *antallsoperator*.

a) Vis at operatorene $a^\dagger a$ og $aa^\dagger$ begge er Hermiteske.
Hvorfor kan de ikke ha negative egenverdier?

Hint: Se øving 9.

Vis f.eks. generelt for to operatorer A og B at $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$, og at $(A^\dagger)^\dagger = A$.

Definisjonen på $A^\dagger$, den Hermitesk konjugerte av en operator A, er at

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\; \psi^*(A\phi) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\; (A^\dagger\psi)^*\phi$$

for vilkårlige bølgefunksjoner $\psi = \psi(x)$ og $\phi = \phi(x)$.

Ved komplekskonjugering får vi den ekvivalente betingelsen at

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\; (A\phi)^*\psi = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\; \phi^*(A^\dagger\psi)$$

for vilkårlige ψ og ϕ. Kombinasjon av disse to relasjonene gir at

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\; \psi^*(A\phi) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\; (A^\dagger\psi)^*\phi = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\; \psi^*((A^\dagger)^\dagger\phi)$$

for vilkårlige ψ og ϕ. Det betyr at $A = (A^\dagger)^\dagger$.

For å vise at $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$ går vi fram på tilsvarende måte: for vilkårlige ψ og ϕ er

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\; \psi^*((AB)^\dagger\phi) &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\; ((AB)\psi)^*\phi = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\; (A(B\psi))^*\phi \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\; (B\psi)^*(A^\dagger\phi) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\; \psi^*(B^\dagger(A^\dagger\phi)) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\; \psi^*((B^\dagger A^\dagger)\phi) \; . \end{aligned}$$

Det er nå rett fram å vise at $a^\dagger a$ og $aa^\dagger$ er Hermiteske:

$$(a^\dagger a)^\dagger = a^\dagger (a^\dagger)^\dagger = a^\dagger a \; , \qquad (aa^\dagger)^\dagger = (a^\dagger)^\dagger a^\dagger = aa^\dagger \; .$$

Både $a^\dagger a$ og $aa^\dagger$ er operatorer av formen $A^\dagger A$, med enten $A = a$ eller $A = a^\dagger$. De kan ikke ha negative egenverdier, for hvis ψ er en normert egenvektor for $A^\dagger A$ med egenverdi λ, så er $A^\dagger A\psi = \lambda\psi$, og

$$\lambda = \lambda \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ \psi^*\psi = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ \psi^*(A^\dagger A\psi) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ (A\psi)^*(A\psi) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ |A\psi|^2 \geq 0\ .$$

b) I det følgende antar vi at vi har gitt en egentilstand ψ_k til N med egenverdi k, altså at $N\psi_k = k\psi_k$.
Bruk kommutasjonsrelasjonen $[a, a^\dagger] = 1$ til å vise at ψ_k er en egentilstand for $aa^\dagger$.
Hva er egenverdien?

Vi har at $N = a^\dagger a$, og $a^\dagger a\, \psi_k = k\, \psi_k$.

Av kommutasjonsrelasjonen $aa^\dagger - a^\dagger a = 1$, skrevet som $aa^\dagger = a^\dagger a + 1$, følger da at

$$aa^\dagger\psi_k = a^\dagger a\, \psi_k + \psi_k = (k + 1)\, \psi_k\ .$$

Med andre ord: ψ_k er en egentilstand for $aa^\dagger$ med egenverdi $k + 1$.

c) Vis kommutasjonsrelasjonene $[a, N] = a$ og $[a^\dagger, N] = -a^\dagger$.
Bruk dem til å vise at $a^\dagger\psi_k$ er en egentilstand for N med egenverdi $k + 1$, og at $a\psi_k$ er en egentilstand for N med egenverdi $k - 1$.

Vi kan for eksempel bruke Leibniz-regelen $[A, BC] = [A, B]\, C + B\, [A, C]$, som vises enkelt ved direkte utregning:

$$\begin{aligned} [A, BC] &= ABC - BCA = ABC - BAC + BAC - BCA \\ &= (AB - BA)C + B(AC - CA) = [A, B]\, C + B\, [A, C]\ . \end{aligned}$$

Den gir at

$$\begin{aligned} [a, a^\dagger a] &= [a, a^\dagger]\, a + a^\dagger\, [a, a] = a\ , \\ [a^\dagger, a^\dagger a] &= [a^\dagger, a^\dagger]\, a + a^\dagger\, [a^\dagger, a] = -a^\dagger\ . \end{aligned}$$

Vi bruker at $[a, a] = a^2 - a^2 = 0$, $[a^\dagger, a^\dagger] = 0$, $[a, a^\dagger] = -[a^\dagger, a] = 1$.

De to relasjonene $[a, N] = a$ og $[a^\dagger, N] = -a^\dagger$ er forøvrig Hermitesk konjugerte av hverandre. Av den første, $a = [a, N]$, følger at

$$a^\dagger = (aN - Na)^\dagger = N^\dagger a^\dagger - a^\dagger N^\dagger = Na^\dagger - a^\dagger N = -[a^\dagger, N]\ .$$

Vi kan nå vise at $a^\dagger\psi_k$ og $a\psi_k$ er egentilstander for N, med de oppgitte egenverdiene:

$$\begin{aligned} N(a^\dagger\psi_k) &= (Na^\dagger - a^\dagger N + a^\dagger N)\psi_k = (-[a^\dagger, N] + a^\dagger N)\psi_k = (a^\dagger + a^\dagger k)\psi_k = (k + 1)a^\dagger\psi_k\ , \\ N(a\psi_k) &= (Na - aN + aN)\psi_k = (-[a, N] + aN)\psi_k = (-a + ak)\psi_k = (k - 1)a\psi_k\ . \end{aligned}$$

d) Vis at hvis ψ_k er normert, slik at

$$\langle\psi_k\, ,\, \psi_k\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ \psi_k^*\, \psi_k = 1\ ,$$

så er ψ_{k+1} og ψ_{k-1} normerte når vi definerer

$$\psi_{k+1} = \frac{1}{\sqrt{k+1}}\, a^\dagger\psi_k\ , \qquad \psi_{k-1} = \frac{1}{\sqrt{k}}\, a\psi_k\ .$$

Vi har at

$$\langle \psi_{k+1}\,,\,\psi_{k+1}\rangle = \frac{1}{k+1}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\;(a^\dagger\psi_k)^*\,(a^\dagger\psi_k) = \frac{1}{k+1}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\;\psi_k^*\,(aa^\dagger\psi_k) = 1\;,$$

fordi $aa^\dagger\psi_k = (k+1)\psi_k$. Og tilsvarende, fordi $a^\dagger a\psi_k = k\psi_k$,

$$\langle \psi_{k-1}\,,\,\psi_{k-1}\rangle = \frac{1}{k}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\;(a\psi_k)^*\,(a\psi_k) = \frac{1}{k}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\;\psi_k^*\,(a^\dagger a\psi_k) = 1\;.$$

På tilsvarende måte definerer vi

$$\psi_{k+2} = \frac{1}{\sqrt{k+2}}\,a^\dagger\psi_{k+1}\;,\qquad \psi_{k-2} = \frac{1}{\sqrt{k-1}}\,a\psi_{k-1}\;.$$

Og så videre. Alle ψ_n med $n = k, k\pm 1, k\pm 2, \ldots$ er da normerte egentilstander for N, med

$$N\psi_n = n\psi_n\;,\qquad a^\dagger\psi_n = \sqrt{n+1}\,\psi_{n+1}\;,\qquad a\psi_n = \sqrt{n}\,\psi_{n-1}\;.$$

Men vi må ta forbehold om at N ikke kan ha negative egneverdier. Den eneste måten det kan unngås på, er at en av tilstandene ψ_n har den egenskapen at

$$a\psi_n = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{\ell} + \ell\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\psi_n = 0\;,\qquad N\psi_n = (a^\dagger a)\psi_n = a^\dagger(a\psi_n) = 0\;.$$

For denne tilstanden er altså $n = 0$, og dette er grunntilstanden til den harmoniske oscillatoren. Den normerte grunntilstanden er

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{\ell}\,\sqrt[4]{\pi}}\,\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2\ell^2}} = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\,\mathrm{e}^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}\;.$$

e) Vis at energiegentilstandene til den harmoniske oscillatoren, for $n = 0, 1, 2, \ldots$, er

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n\,n!\,\ell\,\sqrt[4]{\pi}}}\;H_n\!\left(\frac{x}{\ell}\right)\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2\ell^2}}\;,$$

der H_n er det n-te Hermite-polynomet, definert ved at $H_0(u) = 1$ og

$$H_{n+1}(u) = 2u\,H_n(u) - H_n'(u)\;.$$

Finn eksplisitte uttrykk for Hermite-polynomene H_1, H_2, H_3 og H_4.

Her trenger vi et induksjonsbevis. Vi ser ved sammenligning med den oppgitte grunntilstanden ψ_0 at den oppgitte formelen for ψ_n er gyldig for $n = 0$.

Anta som induksjonshypotese at formelen er gyldig for en gitt verdi av n. Da er den gyldig for $n+1$, fordi

$$\begin{aligned}
\psi_{n+1}(x) &= \frac{1}{\sqrt{n+1}}\,a^\dagger\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n+1}}\,\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{\ell} - \ell\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\left[\frac{1}{\sqrt{2^n\,n!\,\ell\,\sqrt[4]{\pi}}}\;H_n\!\left(\frac{x}{\ell}\right)\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2\ell^2}}\right] \\
&= \frac{1}{\sqrt{2^{n+1}\,(n+1)!\,\ell\,\sqrt[4]{\pi}}}\;\left[\frac{2x}{\ell}\,H_n\!\left(\frac{x}{\ell}\right) - H_n'\!\left(\frac{x}{\ell}\right)\right]\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2\ell^2}} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2^{n+1}\,(n+1)!\,\ell\,\sqrt[4]{\pi}}}\;H_{n+1}\!\left(\frac{x}{\ell}\right)\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2\ell^2}}\;.
\end{aligned}$$

Rekursjonsformelen for Hermite-polynomene gir at

$$H_1(u) = 2u\;,\quad H_2(u) = 4u^2 - 2\;,\quad H_3(u) = 8u^3 - 12u\;,\quad H_4(u) = 16u^4 - 48u^2 + 12\;.$$

Annethvert Hermite-polynom er like, og annethvert er odde, $H_n(-u) = (-1)^n H_n(u)$.