Хармонијски осцилатор

Класични линеарни хармонијски осцилатор (ЛХО)

Најједноставнији пример хармонијског осцилатора је честица масе m са потенцијалном енергијом која зависи само од координате x и која има облик параболе $U(x)=\frac{1}{2}kx^2$, где је k позитивна константа.

Честица бива привучена према $x=0$ равни јер ту има најнижу потенцијалну енергију (једнаку нули) што одговара положају стабилне равнотеже (приметимо да је потенцијална енергија свуда ненегативна).

Сила која је вуче: $F_x=-\frac{dU(x)}{dx}=-kx$.

Кретање честице се описује динамичком једначином $m\frac{d^2x}{dt^2}=-kx$.

$\ddot{x}+\omega^2x=0$ ($\omega^2=\frac{k}{m}$),

опште решење је $x=x_M\sin(\omega t+\varphi)$, где су x_M и φ константе које зависе од почетних услова, а ω представља угаону фреквенцију. Кретање честице је синусоидална осцилација.

Укупна енергија једнака је:

$$E=T+U=\frac{1}{2}m\left(\frac{dx}{dt}\right)^2+\frac{1}{2}kx^2$$

Помоћу $x=x_M\sin(\omega t+\varphi)$ добија се $E=\frac{1}{2}m\omega^2{x_M}^2$.

Енергија честице је *временски независна*, што је општа особина конзервативних система. Очигледно је да важи $E\geq 0$.
Укупна енергија је константна, мења се само однос кинетичке и потенцијалне енергије: кинетичка је највећа за $x=0$ када је потенцијална једнака нули (тада је $T=E$).

Када се узме да је потенцијална енергија једнака нули не у тачки $x=0$ већ у тачки $x=x_0$.

$q=x-x_0$,

$U=\frac{1}{2}k(x-x_0)^2=\frac{1}{2}kq^2$.

- Велики број система се може описати (барем приближно) једначинама хармонијског осцилатора.
- Када се год проучава понашање физичког система у близини стабилног равнотежног положаја долази се до једначина које *у лимиту малих осцилација* представљају осцилације хармонијског осцилатора.

- Резултати које добијамо за хармонијски осцилатор можемо применити на читав низ физичких појава, као, на пример, на осцилације језгара око њиховог равнотежног положаја у молекулу или осцилације атома или јона у кристалној решетки.
- Он је један од ретких примера квантних система чија се Шредингерова једначина може егзактно решити.

Пример: произвољна потенцијална енергија $U(x)$ која има минимум за $x = x_0$ може се свести на облик који одговара хармонијском осцилатору.

Развој функције у Тејлоров ред у близини x_0:

$$U(x) = U(x_0) + \left(\frac{dU}{dx}\right)_{x=x_0}(x-x_0) + \frac{1}{2}\left(\frac{d^2U}{dx^2}\right)_{x=x_0}(x-x_0)^2 + \frac{1}{3!}\left(\frac{d^3U}{dx^3}\right)_{x=x_0}(x-x_0)^3 + \ldots,$$

А) други сабирак је једнак нули (ради се о минимуму функције за који је први извод једнак нули); под условом да су осцилације мале (инфинитезималне)

Б) четврти сабирак, као и пети, шести, итд. теже нули.

В) $U(x_0)$ се може изабрати да буде нула, следи

$$U(x) = \frac{1}{2}\left(\frac{d^2U}{dx^2}\right)_{x=x_0}(x-x_0)^2 = \frac{1}{2}k(x-x_0)^2$$

што је облик потенцијалне енергије хармонијског осцилатора [и ако није једнак нули увек можемо писати $U(x) - U(x_0) = \frac{1}{2}k(x-x_0)^2$].

С обзиром да амплитуда кретања мора остати мала, укупна енергија је исто мала. Када осцилације престану бити инфинитезималне и када морамо оставити још неке чланове Тејлоровог развоја, кажемо да осцилације постају *анхармонијске*.

Вероватноћа налажења.

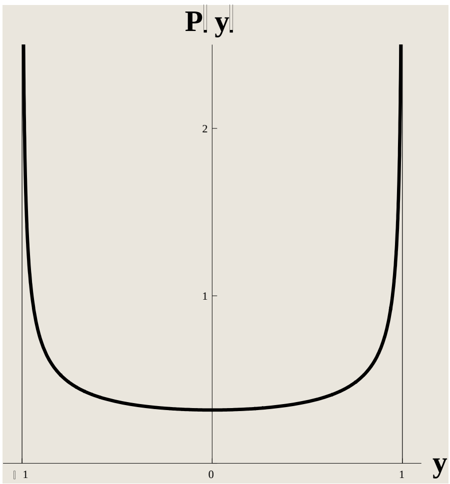
Редуковано растојање, $y = \frac{x}{x_M}$,

честица осцилује између $y = -1$ и $y = 1$.

Једначина кретања $y = \sin(\omega t + \varphi)$, што значи да је y независно од укупне енергије.

Када честица осцилује између $y = -1$ и $y = 1$ вероватноћа да ће бити нађена између неке вредности y и $y + dy$ је $P(y)dy$, где је $P(y)$ густина вероватноће.

Укупна вероватноћа једнака је $\int_{-1}^{1} P(y)dy = 1$.



Вероватноћа је пропорционална времену dt које честица проведе на том интервалу,

$$P(y)dy = Cdt = C\frac{dt}{dy}dy\,.$$

$$t = \frac{\arcsin y - \varphi}{\omega} \;\rightarrow\; \frac{dt}{dy} = \frac{1}{\omega}\frac{1}{\sqrt{1-y^2}} \;\rightarrow\; P(y) = \frac{C}{\omega\sqrt{1-y^2}},$$

$$\int_{-1}^{1} P(y)dy = \frac{C}{\omega}\int_{-1}^{1}\frac{dy}{\sqrt{1-y^2}} = \frac{C}{\omega}(\arcsin 1 - \arcsin(-1)) = \frac{C}{\omega}\left(\frac{\pi}{2}+\frac{\pi}{2}\right) = \frac{C\pi}{\omega} = 1.$$

Одавде је $C = \omega/\pi$, па је густина вероватноће:

$$P(y) = \frac{1}{\pi\sqrt{1-y^2}}$$

На слици је приказан график функције $\mathrm{P(y)}$.

Густина вероватноће има најмању вредност у равнотежном, а тежи бесконачности у амплитудним положајима.

Квантномеханички приступ: једначина својствених вредности ЛХО

Хамилтонијан $\hat{H}(\hat{X}, \hat{P}_x)$:

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}_x^{\,2}}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{X}^2$$

С обзиром да је хамилтонијан временски независан (конзервативан систем), квантно-механичко проучавање хармонијског осцилатора се своди на решавање једначине својствених вредности:

$$\hat{H}\,|\varphi\rangle = E\,|\varphi\rangle$$

која се у $\{|x\rangle\}$ репрезентацији може писати као:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right]\varphi(x) = E\varphi(x)\,.$$

Згодно је увести бездимензиону координату:

$$\boxed{\xi = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} x}$$

$$\frac{d}{dx} = \frac{d\xi}{dx}\frac{d}{d\xi} = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}\frac{d}{d\xi},\quad \frac{d^2}{dx^2} = \frac{d}{dx}\frac{d}{dx} = \frac{m\omega}{\hbar}\frac{d^2}{d\xi^2},$$ следи:

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}\left(\xi^2 - \frac{d^2}{d\xi^2}\right).$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(x)|^2 dx = 1,$$

$$\varphi(x) = \alpha \varphi(\xi),$$

$$\alpha^2 \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(\xi)|^2 d\xi = 1.$$

$\varphi(\xi)$ нормирана, $\int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(\xi)|^2 d\xi = 1$,

$\alpha = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}$. Следи:

$$\varphi(\xi) = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/4} \varphi(x).$$

$$-\frac{d^2\varphi(\xi)}{d\xi^2} + \xi^2 \varphi(\xi) = \frac{2E}{\hbar\omega}\varphi(\xi).$$

Једначина се може решити:

А) стандардном методом развијања таласне функције у степени ред по ξ (Фробенијусова метода),

Б) помоћу лествичастих оператора (оператора подизања и спуштања).

Овде ћемо изложити другу методу.

Својствене вредности хамилтонијана

Оператори $\hat{X}$, $\hat{P}_x$, $\hat{a}$, $\hat{a}^\dagger$ и $\hat{N}$

$$\hat{a} \equiv \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{1/2} \left(\hat{X} + \frac{i\hat{P}_x}{m\omega}\right) \qquad \hat{a}^\dagger = \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{1/2} \left(\hat{X} - \frac{i\hat{P}_x}{m\omega}\right).$$

У $\{|x\rangle\}$ репрезентацији, након увођења координате ξ:

$$\boxed{\hat{a} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right) \qquad \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)}.$$

$\hat{a}$ и $\hat{a}^\dagger$ нису ермитски оператори јер $\hat{a} \neq \hat{a}^\dagger$.

Међутим, оператори $\hat{a}\hat{a}^\dagger$ и $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ јесу ермитски.

$$\frac{d}{d\xi}\xi\varphi = \frac{d\xi}{d\xi}\varphi + \xi\frac{d\varphi}{d\xi} = \varphi + \xi\frac{d\varphi}{d\xi}$$

$$\hat{a}\hat{a}^\dagger\varphi = \frac{1}{2}\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right)\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)\varphi = \frac{1}{2}\left(\xi^2 - \xi\frac{d}{d\xi} + \frac{d}{d\xi}\xi - \frac{d^2}{d\xi^2}\right)\varphi = \frac{1}{2}\left(\xi^2 - \frac{d^2}{d\xi^2} + 1\right)\varphi.$$

(φ нам служи као помоћна функција да бисмо исправно диференцирали).

$$\hat{a}\hat{a}^{\dagger} = \frac{1}{2}\left(\xi^2 - \frac{d^2}{d\xi^2} + 1\right) = \frac{\hat{H}}{\hbar\omega} + \frac{1}{2}.$$
$$\hat{a}^{\dagger}\hat{a} = \frac{1}{2}\left(\xi^2 - \frac{d^2}{d\xi^2} - 1\right) = \frac{\hat{H}}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}.$$
$$[\hat{a}, \hat{a}^{\dagger}] = \hat{a}\hat{a}^{\dagger} - \hat{a}^{\dagger}\hat{a} = 1.$$

Дефинишимо оператор

$$\boxed{\hat{N} \equiv \hat{a}^{\dagger}\hat{a}}.$$
$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right).$$

Својствене вредности комутирајућих оператора $\hat{N}$ и $\hat{H}$

Обележимо са $\left|\varphi_{\nu}^{i}\right\rangle$ својствене функције оператора $\hat{N}$, чија је својствена вредност ν, где смо са i означили евентуалну дегенерацију својствене вредности ν:

$$\hat{N}\left|\varphi_{\nu}^{i}\right\rangle = \nu\left|\varphi_{\nu}^{i}\right\rangle.$$

Имају заједничке својствене функције:

$$\hat{H}\left|\varphi_{\nu}^{i}\right\rangle = \hbar\omega\left(\nu + \frac{1}{2}\right)\left|\varphi_{\nu}^{i}\right\rangle$$

са својственом вредности:

$$E_{\nu} = \hbar\omega\left(\nu + \frac{1}{2}\right).$$

Према томе, наставак нашег проучавања својствених вредности хамилтонијана базираћемо на коришћењу оператора $\hat{N}$, $\hat{a}$ и $\hat{a}^{\dagger}$.

Одређивање ν:

- ν је реалан број, јер је оператор $\hat{N}$ ермитски.
- израчунајмо средњу вредност опсервабле $\hat{N}$ у својственом стању $\left|\varphi_{\nu}^{i}\right\rangle$:

$$\left\langle \hat{N} \right\rangle_{\left|\varphi_{\nu}^{i}\right\rangle} = \left\langle \varphi_{\nu}^{i} \middle| \hat{N} \middle| \varphi_{\nu}^{i} \right\rangle = \left\langle \varphi_{\nu}^{i} \middle| \nu \middle| \varphi_{\nu}^{i} \right\rangle = \nu \left\langle \varphi_{\nu}^{i} \middle| \varphi_{\nu}^{i} \right\rangle = \nu \quad \text{и}$$

$$\left\langle \hat{N} \right\rangle_{\left|\varphi_{\nu}^{i}\right\rangle} = \left\langle \varphi_{\nu}^{i} \middle| \hat{a}^{\dagger}\hat{a} \middle| \varphi_{\nu}^{i} \right\rangle = \int \left(\hat{a}\varphi_{\nu}^{i}\right)^{*}\left(\hat{a}\varphi_{\nu}^{i}\right) d\tau = \int \left|\hat{a}\varphi_{\nu}^{i}\right|^{2} d\tau \geq 0.$$

$$\nu \geq 0.$$

Приметимо да за вредност $\nu = 0$, следи $\left\langle \hat{N} \right\rangle_{\left|\varphi_{\nu}^{i}\right\rangle} = \int \left|\hat{a}\varphi_{\nu}^{i}\right|^{2} d\tau = 0$, што захтева да $\hat{a}\left|\varphi_{0}^{i}\right\rangle = 0$.

- Да бисмо нашли даље рестрикције за вредности ν треба да дефинишемо деловање неермитских оператора $\hat{a}$ и $\hat{a}^{\dagger}$ на својствене функције $\left|\varphi_{\nu}^{i}\right\rangle$.

$$\hat{N}\hat{a} = \hat{a}^{\dagger}\hat{a}\hat{a} = (\hat{a}\hat{a}^{\dagger} - 1)\hat{a} = \hat{a}(\hat{a}^{\dagger}\hat{a} - 1) = \hat{a}(\hat{N} - 1)$$
$$\hat{N}\hat{a}^{\dagger} = \hat{a}^{\dagger}\hat{a}\hat{a}^{\dagger} = \hat{a}^{\dagger}(\hat{a}^{\dagger}\hat{a} + 1) = \hat{a}^{\dagger}(\hat{N} + 1),$$

следи:

$$\hat{N}\left[\hat{a}\left|\varphi_{\nu}^{i}\right\rangle\right] = \hat{a}(\hat{N} - 1)\left|\varphi_{\nu}^{i}\right\rangle = \hat{a}(\nu - 1)\left|\varphi_{\nu}^{i}\right\rangle = (\nu - 1)\left[\hat{a}\left|\varphi_{\nu}^{i}\right\rangle\right],$$
$$\hat{N}\left[\hat{a}^{\dagger}\left|\varphi_{\nu}^{i}\right\rangle\right] = \hat{a}^{\dagger}(\hat{N} + 1)\left|\varphi_{\nu}^{i}\right\rangle = \hat{a}^{\dagger}(\nu + 1)\left|\varphi_{\nu}^{i}\right\rangle = (\nu + 1)\left[\hat{a}^{\dagger}\left|\varphi_{\nu}^{i}\right\rangle\right]$$

следи да је $\hat{a}\left|\varphi_{\nu}^{i}\right\rangle$ својствена функција оператора $\hat{N}$ са својственом вредности $\nu - 1$.

$\hat{a}\left|\varphi_{\nu}^{i}\right\rangle$ је једнако $const\left|\varphi_{\nu-1}\right\rangle$ ако је ν недегенерисана својствена вредност, или уопштено линеарна комбинација кетова $\left|\varphi_{\nu-1}^{i}\right\rangle$ ако би ν била дегенерисана.

Оператор $\hat{a}$ мења кет $\left|\varphi_{\nu}^{i}\right\rangle$ у $\left|\varphi_{\nu-1}^{i}\right\rangle$, а оператор $\hat{a}^{\dagger}$, мења кет $\left|\varphi_{\nu}^{i}\right\rangle$ у $\left|\varphi_{\nu+1}^{i}\right\rangle$.

Ако изаберемо својствену функцију са произвољном вредношћу ν, на пример $\nu = \eta$, сукцесивном применом оператора спуштања $\hat{a}$ добијамо својствене функције $\hat{a}\left|\varphi_{\eta}^{i}\right\rangle, \hat{a}^{2}\left|\varphi_{\eta}^{i}\right\rangle, \ldots$ чије су својствене вредности, редом, $\eta - 1, \eta - 2, \ldots$

Овом процедуром бисмо дошли до својствене функције $\hat{a}^{k}\left|\varphi_{\eta}^{i}\right\rangle$ (k је позитиван цео број) чија је својствена вредност $\eta - k$ мања од јединице и ≥ 0.

Следећи корак: $\hat{a}^{k+1}\left|\varphi_{\eta}^{i}\right\rangle$ чија би својствена вредност била $\eta - k - 1$, која би тада била мања од нуле што није дозвољено.

Према томе, $\hat{a}^{k+1}\left|\varphi_{\eta}^{i}\right\rangle = 0$.

Будући да $\hat{a}\left(\hat{a}^{k}\left|\varphi_{\eta}^{i}\right\rangle\right) = 0$, а оператор спуштања даје нулу када делује на својствену функцију $\left|\varphi_{0}^{i}\right\rangle$ која одговара својственој вредности $\nu = 0$, следи да је $\hat{a}^{k}\left|\varphi_{\eta}^{i}\right\rangle = \left|\varphi_{0}^{i}\right\rangle$.

Будући да је њена својствена вредност $\eta - k$, следи $\eta - k = 0$ одакле закључујемо да η мора бити цео број.

Минимална вредност $\nu = \eta - k$ је, према томе, нула. Почевши од $\nu = 0$, ако применимо операторе подизања, добијамо сукцесивно својствене функције са својственим вредностима 1, 2, 3, ... Својствене вредности оператора $\hat{N}$ су скуп *ненегативних целих бројева*:

$$\nu = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

Уместо ν сад можемо увести ознаку n.

Дегенерација својствених вредности

Показаћемо прво да су све својствене вредности оператора $\hat{N}$ и $\hat{H}$ недегенерисане и да нема потребе писати $\left|\varphi_{\nu}^{i}\right\rangle$, где је i ознака за могућу дегенерацију, већ да својствене кетове можемо означавати са $\left|\varphi_{\nu}\right\rangle$, односно са $\left|\varphi_{n}\right\rangle$.

- **основно стање** које одговара $\nu \equiv n = 0$ је недегенерисано.

Основно стање се добија из релације $\hat{a}\left|\varphi_0^i\right\rangle = 0$:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{d}{d\xi}+\xi\right)\varphi_0^i(\xi)=0,\ \frac{d\varphi_0^i}{\varphi_0^i}=-\xi d\xi .$$

$\ln\left|\varphi_0^i\right| = -\dfrac{\xi^2}{2} + const$, $\varphi_0^i = Ce^{-\frac{\xi^2}{2}}$.

$\int\limits_{-\infty}^{\infty}\left|\varphi_0^i\right|^2 d\xi = 1$.

Из $\int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}dx = \sqrt{\pi}$, следи

$C = \pi^{-1/4}$,

$$\varphi_0^i(\xi) = \pi^{-\frac{1}{4}}e^{-\frac{\xi^2}{2}} \quad , \qquad \varphi_0^i(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/4}\varphi_0^i(\xi) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$$

Постоји само једно (линеарно независно) решење и основно стање је недегенерисано.

- Ако је основни ниво недегенерисан онда су и сви други нивои који се добијају помоћу оператора подизања такође недегенерисани. То ћемо показати тако што ћемо доказати следећу тврдњу:

Ако је својствена вредност n оператора $\hat{N}$ недегенерисана, тада је својствена вредност $n+1$ такође недегенерисана.

$\boxed{\hat{N}\left|\varphi_n\right\rangle = n\left|\varphi_n\right\rangle}$, где је својствена вредност n недегенерисана по претпоставци.

$\hat{N}\left|\varphi_{n+1}^i\right\rangle = (n+1)\left|\varphi_{n+1}^i\right\rangle$.

$\hat{a}\left|\varphi_{n+1}^i\right\rangle = C\left|\varphi_n\right\rangle$, добија се јединствена функција $\left|\varphi_n\right\rangle$. А сад, делујмо оператором $\hat{a}^\dagger$:

$\hat{a}^\dagger\hat{a}\left|\varphi_{n+1}^i\right\rangle = \hat{N}\left|\varphi_{n+1}^i\right\rangle = (n+1)\left|\varphi_{n+1}^i\right\rangle = C\hat{a}^\dagger\left|\varphi_n\right\rangle$. следи:

$$\left|\varphi_{n+1}^i\right\rangle = \frac{C}{n+1}\hat{a}^\dagger\left|\varphi_n\right\rangle .$$

Према томе, све својствене функције $\left|\varphi_{n+1}^i\right\rangle$ су пропорционалне $\hat{a}^\dagger\left|\varphi_n\right\rangle$, и према томе нису независне будући да су пропорционалне једна другој.

Ако је n недегенерисана, онда је и $n+1$ недегенерисана.

Будући да је $n=0$ недегенерисана, следи да је $n=1$ недегенерисана. Итерацијом ће и све наредне вредности 2, 3, 4,... бити недегенерисане. Сва својствена стања ћемо према томе означавати без индекса i, тј. само са $\left|\varphi_n\right\rangle$, јер су сви својствени потпростори једно-димензиони. У наставку ћемо кет $\left|\varphi_n\right\rangle$ означавати једноставније са $\left|n\right\rangle$.

$$\hat{N}\left|n\right\rangle = n\left|n\right\rangle$$

$$\hat{H}\left|n\right\rangle = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)\left|n\right\rangle$$

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

Интерпретација оператора $\hat{a}$ и $\hat{a}^\dagger$

$$\hat{a}|n\rangle = C_n|n-1\rangle$$
$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = C_n'|n+1\rangle$$

Остаје да одредимо бројеве C_n и C_n'. Урадићемо то на исти начин као код оператора $\hat{J}_+$ и $\hat{J}_-$.

- $\langle n|\hat{a}^\dagger = C_n^*\langle n-1|$.

$\langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = C_n^* C_n\langle n-1||n-1\rangle = |C_n|^2$.

Са друге стране, $\langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = \langle n|\hat{N}|n\rangle = n$.

Нека је C_n реалан и позитиван број; следи да је $C_n = \sqrt{n}$.

- $\langle n|\hat{a} = C_n'^*\langle n+1|$.

  $\langle n|\hat{a}\hat{a}^\dagger|n\rangle = C_n'^* C_n'\langle n+1||n+1\rangle = |C_n'|^2$. Са друге стране,

$\langle n|\hat{a}\hat{a}^\dagger|n\rangle = \langle n|\left(1+\hat{a}^\dagger\hat{a}\right)|n\rangle = n+1$. Следи $C_n' = \sqrt{n+1}$.

$$\boxed{\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle}$$
$$\boxed{\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle}.$$

Оператор $\hat{a}$ је *оператор спуштања* (деструкције), а оператор $\hat{a}^\dagger$ је *оператор подизања* (креације).
Оператор $\hat{a}$ мења стање тако да смањује енергију за $\hbar\omega$, а оператор $\hat{a}^\dagger$ увећава енергију за $\hbar\omega$ (зато се још зову оператори деструкције и креације, редом).

Својствена стања хамилтонијана

Својствене функције комутирајућих оператора $\hat{N}$ и $\hat{H}$

Сада можемо одредити и општи израз за стање $|n\rangle$.

$$|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{1}}\hat{a}^\dagger|0\rangle,\quad |2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{a}^\dagger|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}^\dagger)^2|0\rangle,\quad |3\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\hat{a}^\dagger|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3\cdot 2}}(\hat{a}^\dagger)^3|0\rangle,$$
$$|4\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}}\hat{a}^\dagger|3\rangle = \frac{1}{\sqrt{4\cdot 3\cdot 2}}(\hat{a}^\dagger)^4|0\rangle,\quad \ldots,\quad |n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle.$$

Ако узмемо кет $|0\rangle$ у $\{|x\rangle\}$ репрезентацији, и оператор $\hat{a}^\dagger$ у $\{|x\rangle\}$ репрезентације, добија се:

$$\varphi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\pi^{-\frac{1}{4}}\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\frac{\xi^2}{2}}.$$

Како је $\left(\xi-\frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\frac{\xi^2}{2}}=(-1)^n e^{\frac{\xi^2}{2}}\frac{d^n}{d\xi^n}e^{-\xi^2}$ (што можете показати прво за $n=1$, па за $n=2$, ... другим речима математичком индукцијом):

$$\boxed{\varphi_n(\xi)=(-1)^n\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\pi^{-\frac{1}{4}}e^{\frac{\xi^2}{2}}\frac{d^n}{d\xi^n}e^{-\xi^2}}.$$

Ово је општа формула за цео скуп својствених функција оператора $\hat{N}$ и $\hat{H}$.

Својствене функције приказане преко Ермитових полинома $H_n(\xi)$

Користећи дефиницију Ермитових полинома,

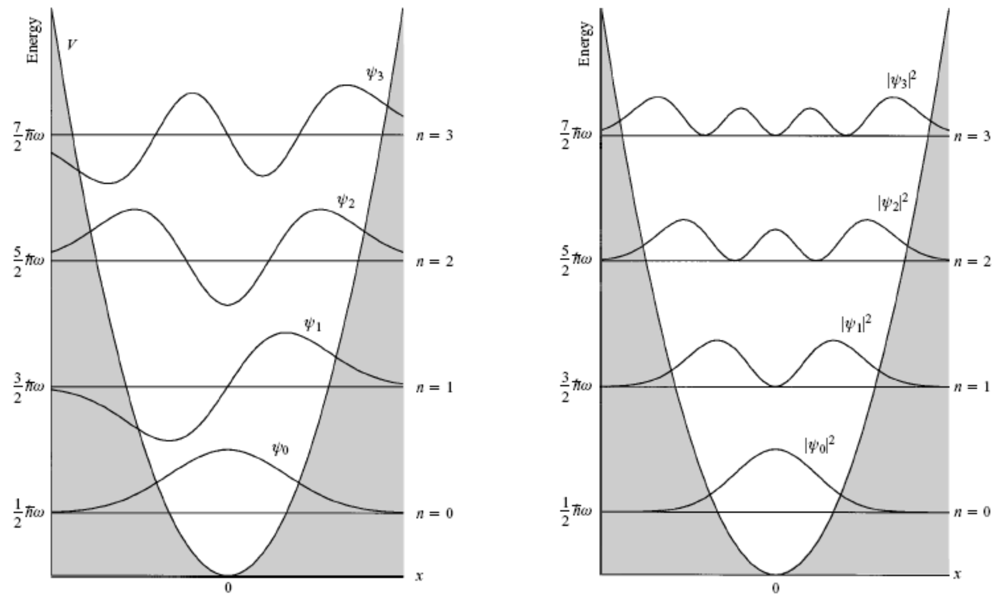
$$H_n(\xi)=(-1)^n e^{\xi^2}\frac{d^n}{d\xi^n}e^{-\xi^2},$$

$$\boxed{\varphi_n(\xi)=\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\pi^{-\frac{1}{4}}e^{-\frac{\xi^2}{2}}H_n(\xi)}$$

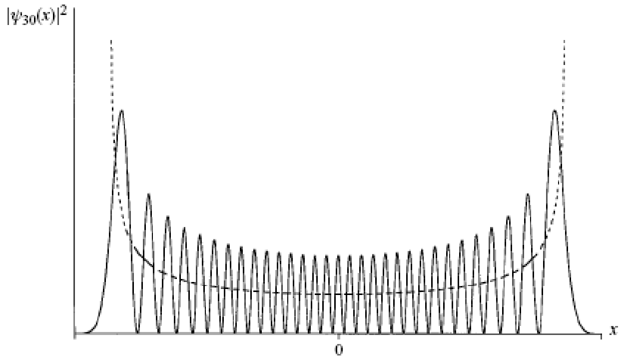
Првих пет Ермитових полинома су (изведите):

$H_0(\xi)=1$, $H_1(\xi)=2\xi$, $H_2(\xi)=4\xi^2-2$, $H_3(\xi)=8\xi^3-12\xi$, $H_4(\xi)=16\xi^4-48\xi^2+12$, $H_5(\xi)=32\xi^5-160\xi^3+120\xi$.

На слици су приказани енергетски нивои као и скициране вредности *а*) својствених функција и *б*) квадрата функција (густине вероватноћа налажења честице) за четири најнижа стања линеарног хармонијског осцилатора. Као што видимо, у основном стању, крива густине вероватноће се веома разликује од оне предвиђене „класично. Како квантни број n расте, видимо да се густина вероватноће око равнотежног положаја смањује, а расте око амплитудних положаја, што одговара класичном случају. На слици 10.3. видимо њен изглед за $n=30$.



а) **б)**



Ортонормирање и релација затварања

Будући да је $\hat{H}$ ермитски оператор, кетови $|n\rangle$ који одговарају различитим вредностима n су међусобно ортогонални. Пошто је сваки од њих нормиран, они задовољавају релацију ортонормирања:

$$\langle n'|n\rangle = \delta_{n',n}$$

Осим тога, $\hat{H}$ је опсервабла, па скуп $|n\rangle$ чини базу у ε_x. То се приказује преко релације затварања:

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = \hat{I}\,.$$

Матрични елементи оператора $\hat{X}^n$ и $\hat{P}_x^n$

Често је потребно знати вредности матричних елемената оператора $\hat{X}^n$ и $\hat{P}_x^n$ у бази $\{|n\rangle\}$. До њих долазимо тако што прво изведемо ове операторе у функцији оператора $\hat{a}$ и $\hat{a}^\dagger$.

$\hat{a}+\hat{a}^\dagger = \sqrt{\dfrac{m\omega}{2\hbar}}2\hat{X}$ и $\hat{a}-\hat{a}^\dagger = \sqrt{\dfrac{m\omega}{2\hbar}}\dfrac{2i\hat{P}_x}{m\omega}$, одакле следе изрази:

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

$$\hat{P}_x = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left(\hat{a}^\dagger - \hat{a}\right).$$

$\langle n'|\hat{a}|n\rangle = \langle n'|\sqrt{n}|n-1\rangle = \sqrt{n}\delta_{n',n-1}$ и $\langle n'|\hat{a}^\dagger|n\rangle = \langle n'|\sqrt{n+1}|n+1\rangle = \sqrt{n+1}\delta_{n',n+1}$.

Сумирајмо резултат у виду формула:

$$\langle n'|\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\delta_{n',n-1}$$

$$\langle n'|\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\delta_{n',n+1}$$

Када се експлицитно напишу матрице које репрезентују $\hat{a}$ и $\hat{a}^\dagger$ помоћу ових формула, видимо да су оне заиста ермитски конјугати. Помоћу формула могу се извести сви матрични елементи оператора $\hat{X}$ и $\hat{P}_x$. Из њих следи:

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

$$\langle n'|\hat{P}_x|n\rangle = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left(\sqrt{n+1}\delta_{n',n+1} - \sqrt{n}\delta_{n',n-1}\right)$$

тако да важи:

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

$$\langle n-1|\hat{X}|n\rangle = \sqrt{\frac{n\hbar}{2m\omega}} = \langle n|\hat{X}|n-1\rangle,$$

$$\langle n'|\hat{X}|n\rangle = 0 \text{ за } n' \neq n-1, n+1.$$

На сличан начин рачунамо матричне елементе $\langle n'|\hat{X}^2|n\rangle$, $\langle n'|\hat{P}_x^2|n\rangle$, итд. Добијају се формуле:

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

$$\langle n'|\hat{P}_x^2|n\rangle = -\frac{m\hbar\omega}{2}\left[\sqrt{(n+1)(n+2)}\delta_{n',n+2} + \sqrt{n(n-1)}\delta_{n',n-2} - (2n+1)\delta_{n',n}\right]$$

одакле следе изрази за средње вредности $\hat{X}^2$ и $\hat{P}_x^2$:

$$\langle n|\hat{X}^2|n\rangle = \frac{\hbar}{m\omega}\left(n+\frac{1}{2}\right), \qquad \langle n|\hat{P}_x^2|n\rangle = m\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right).$$

Из релација видимо да оператори $\hat{X}$ и $\hat{P}_x$ не комутирају са хамилтонијаном и $\{|n\rangle\}$ нису њихова својствена стања. Према томе, ако је хармонијски осцилатор у стационарном стању $|n\rangle$, мерење опсервабле $\hat{X}$ или $\hat{P}_x$ може дати *a priori* било који резултат. Средње вредности $\hat{X}$ или $\hat{P}_x$ у стационарном стању $|n\rangle$ једнаке су нули. Са друге стране, неодређености Δx и Δp_x на основу **Error! Reference source not found.** једнаке су:

$$(\Delta x)^2 = \frac{\hbar}{m\omega}\left(n+\frac{1}{2}\right), \qquad (\Delta p_x)^2 = m\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right),$$

па следи:

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

Видимо да је производ поново већи или једнак $\hbar/2$.

Можемо добити и средње вредности кинетичке и потенцијалне енергије хармонијског осцилатора у стању $|n\rangle$:

$$\left\langle T(\hat{P}_x^2)\right\rangle = \frac{1}{2m}\left\langle \hat{P}_x^2\right\rangle = \frac{\hbar\omega}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right) = \frac{E_n}{2}$$

$$\left\langle V(\hat{X})\right\rangle = \frac{1}{2}m\omega^2\left\langle \hat{X}^2\right\rangle = \frac{\hbar\omega}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right) = \frac{E_n}{2}.$$