HARMONIČKI OSCILATOR

Ukupna energija klasičnog jednodimenzionalnog harmoničkog oscilatora je

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

gdje su m masa čestice i ω je frekvencija titranja. Količina gibanja p i koordinata položaja x su dinamičke varijable, za koje imamo jednadžbe gibanja. Dakle, te veličine ovise o vremenu, a ukupna energija (hamiltonijan) H ne ovisi o vremenu—svaki dio hamiltonijana, tj. kinetička i potencijalna energija zasebno, ovisi o vremenu, ali njihov zbroj ne ovisi o vremenu.
Algebarski gledano, hamiltonijan H je zbroj kvadrata realnih veličina, i kao takav može se faktorizirati samo u skupu kompleksnih brojeva.
No, u kvantnoj mehanici veličine p i x su hermitski operatori za koje vrijedi komutacijsko pravilo

$$[p, x] = p x - x p = -i\hbar$$

Na desnoj strani ove jednadžbe je jedinični operator, kojega ne pišemo zbog kratkoće pisanja, nego se podrazumijeva.

Kad bismo faktorizirali klasični hamiltonijan, morali bismo uvesti linearni spoj količine gibanja p i položaja x s kompleksnim (imaginarnim) koeficijentima. Slično tomu, ako želimo faktorizirati hamilotnijan s operatorima položaja i količine, moramo uvesti linearne spojeve s imaginarnim koeficijentima. K tomu moramo uzeti u obzir da p i x ne komutiraju.

Iz tih formalnih razloga, potražit ćemo faktorizaciju hamiltonijana u obliku:

$$H = E_0 \left(A^+ A + A A^+ \right)$$

gdje je A linearni spoj od p i x, a E_0 je nekakva skala energije, koju ćemo prikladno odabrati. U ovakvu prikazu operator A je bezdimenzijski, tj. nema mjerne jedinice. Navedeni oblik hamiltonijana je po samoj svojoj građi hermitski, kakav i mora biti. Stavimo

$$A = \frac{x}{x_0} + i \frac{p}{p_0} \quad , \quad A^+ = \frac{x}{x_0} - i \frac{p}{p_0}$$

Tada imamo:

$$A^+ A \;=\; \frac{p^2}{p_0^2} - i \frac{[p, x]}{p_0 x_0} + \frac{x^2}{x_0^2} \;=\; \frac{p^2}{p_0^2} + \frac{x^2}{x_0^2} - \frac{\hbar}{p_0 x_0}$$

$$A A^+ \;=\; \frac{p^2}{p_0^2} + i \frac{[p, x]}{p_0 x_0} + \frac{x^2}{x_0^2} \;=\; \frac{p^2}{p_0^2} + \frac{x^2}{x_0^2} + \frac{\hbar}{p_0 x_0}$$

Usporedbom s početnim hamiltonijanom, dobivamo:

$$2 \frac{E_0}{p_0^2} = \frac{1}{2m} \quad , \quad 2 \frac{E_0}{x_0^2} = \frac{m \omega^2}{2}$$

odnosno $p_0 = m \omega x_0$

Da bismo odredili parametre x_0 i p_0 , postavit ćemo uvjet da komutator operatora A i A^+ bude što jednostavniji:

$$[A, A^+] = \frac{2\hbar}{p_0 x_0} = 1$$

Iz ovih jednadžbi proizlazi:

$$x_0 = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \quad , \quad p_0 = \sqrt{2\hbar m\omega} \quad , \quad E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$$

Tada hamiltonijan ima oblik:

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

Pomoću komutacijskog pravila, možemo to napisati ovako:

$$H = \hbar\omega\left(A^+ A + \frac{1}{2}\right)$$

i uvesti novi operator,

$$N = A^+ A$$

tako da imamo

$$H = \hbar\omega\left(N + \frac{1}{2}\right)$$

Dakle, spektar vrijednosti hamiltonijana, tj. vlastite energije harmoničkog oscilatora, potpuno je određen s trima operatorima: $A \;,\; A^{+} \;,\; N$. Zato moramo proučiti algebru tih triju operatora i iz te algebre dobiti vlastite vrijednosti operatora *N*.
Imamo:

$$[A, A^{+}]=1$$
$$[N, A]=-A$$
$$[N, A^{+}]=A^{+}$$

No, hajdemo konačno vidjeti čemu služi Hilbertov prostor. Dakle, tražimo vlastite vektore operatora *N*.

$$N|n\rangle=n|n\rangle$$

$$[N, A]|n\rangle=-A|n\rangle$$
$$N\,A|n\rangle-n\,A|n\rangle=-A|n\rangle \Rightarrow N\,A|n\rangle=(n-1)\,A|n\rangle \Rightarrow A|n\rangle=c_n|n-1\rangle$$

Dobili smo rezultat da djelovanje operatora *A* na vektor |*n*> daje vlastiti vektor | *n*-1>. Na sličan način dobivamo:

$$A^{+}|n\rangle=d_n|n+1\rangle$$

Za koeficijente c_n, d_n , koji su nam za sada nepoznati, dobijemo iz istih komutacijskih pravila, i definicije operatora *N,* sljedeće relacije:

$$c_n d_{n-1}=n \;\;,\;\; d_n=c_{n+1}^{*} \Rightarrow c_n=\sqrt{n} \;\;,\;\; d_n=\sqrt{n+1}$$

Iz svega ovoga slijedi:

1.) Vlastita vrijednost hamiltonijana, odnosno operatora *N* mora biti realan nenegativan broj
2.) Operator *A* snizuje vlastitu vrijednosti uvijek za 1, a ne za proizvoljni realni broj. Dakle, vlastita vrijedost *n* je nakon svakog djelovanja operatora *A* umanjena za točno 1.
3.) Broj *n* ne može biti bilo koji nenegativan broj, nego mora biti prirodni broj, zato što snižavanje energije uzastopnim djelovanjem operatora *A* ne smijemo doći do negativnih brojeva (vidi 1.)
4.) Mora postojati stanje takvo da ga operator *A* poništava. To je stanje najniže energije, za koje vrijedi:

$$A|0\rangle = 0 \quad , \quad H = E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$$

5.) Sva ostala stanja imaju energiju

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

i mogu se dobiti uzastopnim djelovanjem operatora A^+ na osnovno stanje $|0\rangle$ kako slijedi:

$$|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{0+1}} A^+|0\rangle$$

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

$$.....itd.....$$

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(A^+)^n|0\rangle$$

Iz očitih se razloga operator A naziva **operatorom poništenja**, a operator A^+ **operatorom stvaranja**.

I time je postavljeni problem u potpunosti riješen: dobili smo i vlastite vektore i vlastite energije.

Ali, što je ovo? Gdje su tu vlastite funkcije? Čemu uopće služi priča o Schrödingerovoj jednadžbi, o vjerojatnostima i svemu tome? Kamo je to nestalo?

Polako. Nikamo ništa nije nestalo. Sve je tu gdje i treba biti.

Vlastiti su vektori hamiltonijana, koje smo upravo uz mali napor dobili algebarskom metodom, vektori u apstraktnom Hilbertovom prostoru. Taj prostor je očito beskonačan jer nema **gornje granice** za prirodni broj n, tj. za vlastitu vrijednost operatora N. To znači da su ti vlastiti vektori prebrojivi, i da ih ima beskonačno mnogo. Te vektore možemo uzeti za bazu Hilbertovog prostora. Međutim, ako želimo nešto konkretno reći o vjerojatnosti nalaženja čestice u nekom prostornom intervalu, onda očito moramo imati bazu koja je vlastita baza operatora položaja x. Ta baza je također beskonačna, ali nije prebrojiva, jer nisu prebrojivi realni brojevi (matematička činjenica). Znači, naš zadatak je izraziti jednu bazu, i to prebrojivu, s pomoću vektora druge baze, i to neprebrojive.

Zato ćemo se sada pozabaviti bazom Hilbertovog prostora koja je prikladna za odgovor na pitanje: kolika je vjerojatnost da se čestica nalazi u određenom prostornom intervalu?

ORTONORMIRANA BAZA

Uz malo računanja (što ostavljamo za seminare) može se dokazati da vrijedi:

$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$$

Ova jednadžba dokazuje da vlastiti vektori operatora *N* tvore ortonormiranu bazu. No, što je s vlastitom bazom operatora položaja *x*? Da bismo operator položaja u pisanju razlikovali od njegove vlastite vrijednost, ubuduće ćemo taj operator označavati velikim slovom *X*, njegov vlastiti vektor kao $|x>$ i njegovu vlastitu vrijednost kao *x*. Dakle,

$$X|x\rangle = x|x\rangle$$

Ti vlastiti vektori također čine ortonormiranu bazu. Međutim, zato što su vlastite vrijednosti kontinuirane, moramo staviti

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x-x')$$

gdje je $\delta(x-x')$ Diracova δ-funkcija.
Zadaća je: izraziti vektore jedne baze s pomoću vektora druge baze. Upravo to kaže sljedeća jednadžba:

$$|n\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f_n(x)|x\rangle\, dx$$

Koeficijenti prijelaza iz jedne baze u drugu, $f_n(x)$, upravo su vlastite valne funkcije operatora hamiltonijana (ukupne energije) u bazi koja je vlastita baza vektora položaja.

Čemu su jednaki ti koeficijenti, i kako ih izračunati?

Vrlo jednostavno. S pomoću operatora stvaranja i poništenja. Ali, ostavimo to za pisanje po ploči.