Opgave 4.1 Operatormethoden: de harmonische oscilator

Een ééndimensionale lineare harmonische oscilator bezit de volgende Hamiltoniaan:

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

De eigenfuncties $\psi_n(x)$ behorende bij de energie E_n zullen we aanduiden met $|n\rangle$. Na veel rekenwerk blijkt dat de eigenfuncties van de Hamiltoniaan geschreven kunnen worden als Hermite-polynomen (zie hoofdstuk 5 van Gasiorowicz). Het is echter mogelijk om het eigenwaardeprobleem op een elegantere manier op te lossen, namelijk met behulp van zogenaamde *stapoperatoren*. Voor de harmonisch oscillator in één dimensie zijn er twee: de annihilatieoperator $\hat{a}$ en zijn geadjugeerde, de creatieoperator $\hat{a}^\dagger$. Deze hebben de volgende vorm (let op eventuele verschillen met Gasiorowicz en college-aantekeningen):

$$\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p} \tag{2}$$

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p} \tag{3}$$

a. Laat zien dat de Hamiltoniaan geschreven kan worden als $\hat{H} = \frac{1}{2}\hbar\omega(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger)$ en vervolgens als $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2})$.

b. Stel dat $\psi_E(x)$ een eigenfunctie is van $\hat{H}$. Laat zien dat $\hat{a}\psi_E(x)$ resp. $\hat{a}^\dagger\psi_E(x)$ ook eigenfuncties zijn van $\hat{H}$ en bereken hun eigenwaarden. Je ziet zo hoe je met behulp van de stapoperatoren van de ene energie-toestand naar de andere 'stapt'.

c. Je zou onbeperkt omhoog of omlaag kunnen blijven doorstappen van de ene naar de andere toestand, ware het niet dat elk systeem een toestand moet hebben waarin zijn energie minimaal is. Die grondtoestand is gedefinieerd door $\hat{a}|0\rangle = 0$. Bereken de energie van de toestand $\hat{a}^\dagger|0\rangle$. Laat op deze toestand weer $\hat{a}^\dagger$ werken en bereken de energie van de nieuwe toestand. Geef vervolgens het energiespectrum van de harmonische oscillator.

d. We kunnen nu schrijven $(\hat{a}^\dagger)^n\ |0\rangle = c_n\ |n\rangle$. Gebruik dat $\hat{a}^n(\hat{a}^\dagger)^n = \hat{a}^{n-1}(n(\hat{a}^\dagger)^{n-1} + (\hat{a}^\dagger)^n\hat{a})$ om een recursieve relatie voor c_n af te leiden. Los die op en geef een algemene uitdrukking voor de eigentoestanden $|n\rangle$ in termen van de stapoperatoren.

e. Druk de plaats en impuls operator uit in de stap-operatoren $\hat{a}$ en $\hat{a}^\dagger$. Gebruik dit om de onzekerheid in plaats Δx en impuls Δp voor de n-de eigentoestand te vinden, waarbij de onzekerheid voor een bepaalde operator $\hat{A}$ gegeven is door

$$(\Delta\hat{A})^2 = \langle\hat{A}^2\rangle - \langle\hat{A}\rangle^2 \tag{4}$$

Controleer of aan de bekende onzekerheidsrelatie is voldaan.

We willen nu de volledige Schrödinger vergelijking oplossen $\hat{H}\psi(t) = i\hbar\partial_t\psi(t)$. De tijdsontwikkeling van bovenstaand probleem kan gemakkelijk worden bestudeerd in het Heisenbergbeeld.

f. Los daartoe de bewegingsvergelijkingen van Heisenberg op voor de operatoren $\hat{a}(t)$ en $\hat{a}^\dagger(t)$.

g. Geef de tijdsontwikkeling van de plaats, impuls en energie in de toestand $|n\rangle$.

Opgave 4.2: Symmetrie en ontaarding bij driedimensionale potentialen

Een driedimensionale Hamiltoniaan van de vorm

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V_1(x) + V_2(y) + V_3(z) \tag{5}$$

heet *separabel*, omdat je de oplossing van de bijbehorende tijdonafhankelijke Schrödingervergelijking kunt opsplitsen in drie onafhankelijke ééndimensionale Schrödingervergelijkingen. Het product van drie eigenfuncties $u_{E_1}(x)$, $u_{E_2}(y)$ en $u_{E_3}(z)$ is een eigenfunctie van het driedimensionale probleem en de bijbehorende eigenwaarde is $E_1 + E_2 + E_3$.

Op college heb je het voorbeeld gezien van een deeltje in een kubusvormige doos met ribbe L. De potentiaal is $V_j(x_j) = 0$ voor alle x_j tussen 0 en L, en oneindig daarbuiten. De Hamiltoniaan is in dit geval niet alleen separabel in de drie dimensies, maar ook symmetrisch.

a. Geef het energie-spectrum van dit systeem, leg uit wat ontaarding is en leg dan uit wat het laagste energieniveau met zesvoudige ontaarding is in dit systeem.

b. Beredeneer ook wat de drie laagste energieniveaus van dit systeem zijn die *niet* ontaard zijn.

c. Je kunt de eigentoestanden volledig karakteriseren met drie kwantumgetallen n_1, n_2 en n_3. Waarin verschilt de eigen*functie* van $|1, 0, 0>$ van de eigen*functie* van $|0, 1, 0>$?

We laten het deeltje in de doos voor wat het is en gaan nu naar een *andere* separeerbare Hamiltoniaan: de driedimensionale harmonische oscillator:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + \frac{1}{2}m\omega^2\left(x^2 + y^2 + z^2\right). \tag{6}$$

Je hebt in de vorige som voor de eendimensionale harmonische oscillator creatie- en annihilatie-operatoren $\hat{a}^\dagger$ respectievelijk $\hat{a}$ ingevoerd die lineaire combinaties van de $\hat{x}$ en de $\hat{p}_x$-operatoren zijn. In 4.1.b heb je de Hamiltoniaan vereenvoudigd in termen van $\hat{a}$ en $\hat{a}^\dagger$. Datzelfde kun je doen in het driedimensionale geval. Laten we creatie- en annihilatie-operatoren in de x-richting $\hat{a}^\dagger$ en $\hat{a}$ blijven noemen. Geheel analoog voeren we operatoren $\hat{b}^\dagger$ en $\hat{b}$ in voor de y-richting en $\hat{c}^\dagger$ en $\hat{c}$ voor de z-richting. (Operatoren behorend bij verschillende richtingen commuteren.)

d. Hoe ziet dan de Hamiltoniaan (6) eruit in termen van deze drie paar creatie- en annihilatie-operatoren?

e. Geef de eigenwaarden van de driedimensionale harmonische oscillator en beredeneer welke energieniveaus *niet* ontaard zijn.

De Hamiltoniaan (6) is die van de *symmetrische* harmonische oscillator: de 'veerconstante' is hetzelfde in alledrie de richtingen x, y en z. Als gevolg van deze symmetrie zijn ook de trillingsenergiekwanta in de drie richtingen gelijk en wel gelijk aan $\hbar\omega$. Met andere woorden, als je een energie-kwantum uit de x-richting weghaalt (mits aanwezig) en tegelijkertijd in de y-richting een kwantum toevoegt, dan is de totale energie hetzelfde gebleven, terwijl het systeem zich in een andere toestand bevindt. Voor de asymmetrische oscillator was de energie na deze operatie niet hetzelfde geweest. Hier kun je aan zien hoe ontaarding het gevolg is van een symmetrie.

f. Hoe ziet de operator eruit die de bovengenoemde operatie uitvoert? Ondersteun je bewering door de operator te laten werken op een algemene eigentoestand $|n_1, n_2, n_3>$.

g. Bereken de commutator van de hierboven gedefinieerde symmetrie-operator met de Hamiltoniaan en interpreteer het resultaat.

Het verschil tussen de symmetrie-operator en de creatie-operatoren is dat de creatie-operatoren je naar een toestand met hogere energie brengen, terwijl de symmetrie-operator je naar een toestand met dezelfde energie brengt. Analoog aan het ééndimensionale geval kun je in drie dimensies met behulp van de drie creatie-operatoren vanuit de grondtoestand alle andere toestanden 'creëren'.

h. Hoeveel symmetrie-operatoren heb je nodig om vanuit een willekeurige energie eigentoestand alle andere eigentoestanden met dezelfde energie te kunnen creëren? Geef deze operatoren en laat zien wat er gebeurt als je ze het product ervan op een toestand laat werken.