1 Operátory a jejich funkce, komutátory

Funkce operátoru

Funkci operátoru $\hat{\mathsf{A}}$ na základě funkce reálného argumentu $f(\xi)$ lze zavést dvěma způsoby:

1. *Rozvojem do řady.* Za předpokladu, že existuje *Maclaurinova řada* konvergující k zadané funkci, tj. rozvoj funkce $f(\xi)$ do mocninné řady v okolí bodu $\xi = 0$,

$$f(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^n, \quad a_n = \frac{1}{n!} \left. \frac{\mathrm{d}^n f(\xi)}{\mathrm{d}\xi^n} \right|_{\xi=0}, \tag{1.0.1}$$

pak se pod funkcí $f(\hat{\mathsf{A}})$ rozumí operátor

$$f(\hat{\mathsf{A}}) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \hat{\mathsf{A}}^n. \tag{1.0.2}$$

Příklad:

$$\boxed{\mathrm{e}^{\hat{\mathsf{A}}} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{\mathsf{A}}^n}{n!}} \tag{1.0.3}$$

2. *Sylvestrova formule.* Je-li operátor $\hat{\mathsf{A}}$ samosdružený se spektrálním rozkladem

$$\hat{\mathsf{A}} = \sum_k A_k \hat{\mathsf{P}}_k, \tag{1.0.4}$$

kde $\hat{\mathsf{P}}_k = |A_k\rangle\langle A_k|$ je projektor na podprostor příslušející reálné nedegenerované vlastní hodnotě A_k, a je-li funkce $f(\xi)$ definovaná na množině, která zahrnuje všechny body $\xi = A_k$, funkci operátoru $\hat{\mathsf{A}}$ lze vyjádřit jako součet

$$f(\hat{\mathsf{A}}) = \sum_k f(A_k) \hat{\mathsf{P}}_k. \tag{1.0.5}$$

Komutátor

Komutátor dvou operátorů $\hat{\mathsf{A}}$ a $\hat{\mathsf{B}}$ se zavádí jako bilineární zobrazení

$$\left[\hat{\mathsf{A}}, \hat{\mathsf{B}}\right] \equiv \hat{\mathsf{A}}\hat{\mathsf{B}} - \hat{\mathsf{B}}\hat{\mathsf{A}} \tag{1.0.6}$$

a splňuje následující dvě vlastnosti:

1. *Antisymetrie*

$$\left[\hat{\mathsf{A}}, \hat{\mathsf{B}}\right] = -\left[\hat{\mathsf{B}}, \hat{\mathsf{A}}\right], \tag{1.0.7a}$$

2. *Jacobiho identita*

$$\left[\hat{\mathsf{A}}, \left[\hat{\mathsf{B}}, \hat{\mathsf{C}}\right]\right] + \left[\hat{\mathsf{B}}, \left[\hat{\mathsf{C}}, \hat{\mathsf{A}}\right]\right] + \left[\hat{\mathsf{C}}, \left[\hat{\mathsf{A}}, \hat{\mathsf{B}}\right]\right] = 0. \tag{1.0.7b}$$

Poznámka: Skládání lineárních operátorů nad Hilbertovými prostory je z definice asociativní, tj. platí, že

$$\left(\hat{\mathsf{A}}\hat{\mathsf{B}}\right)\hat{\mathsf{C}} = \hat{\mathsf{A}}\left(\hat{\mathsf{B}}\hat{\mathsf{C}}\right). \tag{1.0.8}$$

Existují však *neasociativní algebry*, kde míru neasociativity udává *asociátor*

$$[x, y, z] \equiv (xy)z - x(yz). \tag{1.0.9}$$

Příkladem je algebra oktonionů nebo algebry používající se v teoriích superstrun (například pro popis částice pohybující se v okolí magnetického monopólu).

1.1 Komutátor součinu

Pomocí jednoduchých komutátorů vyjádřete komutátor $\left[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}\right]$.

Řešení:

Komutátor se rozepíše podle své definice (1.0.6). Poté se k němu přičte a odečte vhodně zvolený člen a získaný výraz se sdruží do dvou nových jednodušších komutátorů:

$$\begin{aligned}\left[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}\right] &= \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}\hat{B} \underbrace{+\hat{A}\hat{C}\hat{B} - \hat{A}\hat{C}\hat{B}}_{=0} \\ &= \hat{A}\left(\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{B}\right) + \left(\hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}\right)\hat{B} \\ &= \hat{A}\left[\hat{B}, \hat{C}\right] + \left[\hat{A}, \hat{C}\right]\hat{B}. \qquad (1.1.1a)\end{aligned}$$

Stejným způsobem se ukáže, že

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}\right] = \left[\hat{A}, \hat{B}\right]\hat{C} + \hat{B}\left[\hat{A}, \hat{C}\right], \qquad (1.1.1b)$$

a nakonec pro čtyři operátory

$$\begin{aligned}\left[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}\hat{D}\right] &= \hat{A}\left[\hat{B}, \hat{C}\right]\hat{D} + \hat{A}\hat{C}\left[\hat{B}, \hat{D}\right] + \left[\hat{A}, \hat{C}\right]\hat{D}\hat{B} + \hat{C}\left[\hat{A}, \hat{D}\right]\hat{B} \\ &= \hat{A}\left[\hat{B}, \hat{C}\right]\hat{D} + \hat{C}\hat{A}\left[\hat{B}, \hat{D}\right] + \left[\hat{A}, \hat{C}\right]\hat{B}\hat{D} + \hat{C}\left[\hat{A}, \hat{D}\right]\hat{B}. \qquad (1.1.1c)\end{aligned}$$

1.2 Komutátor inverzního operátoru

Vyjádřete komutátor $\left[\hat{A}, \hat{B}^{-1}\right]$ pomocí komutátoru $\left[\hat{A}, \hat{B}\right]$.

Řešení:

Každý operátor komutuje s operátorem identity, tj.

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\hat{B}^{-1}\right] = \left[\hat{A}, \hat{1}\right] = 0. \qquad (1.2.1)$$

Levá strana rovnice se rozepíše podle vztahu (1.1.1b) z předchozího příkladu,

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\hat{B}^{-1}\right] = \left[\hat{A}, \hat{B}\right]\hat{B}^{-1} + \hat{B}\left[\hat{A}, \hat{B}^{-1}\right], \qquad (1.2.2)$$

což vede k výsledku

$$\left[\hat{A}, \hat{B}^{-1}\right] = -\hat{B}^{-1}\left[\hat{A}, \hat{B}\right]\hat{B}^{-1}. \qquad (1.2.3)$$

Dalším přirozeným krokem je ukázat, že

$$\left[\hat{A}^{-1}, \hat{B}^{-1}\right] = \hat{A}^{-1}\hat{B}^{-1}\left[\hat{A}, \hat{B}\right]\hat{B}^{-1}\hat{A}^{-1} \qquad (1.2.4)$$

(o platnosti tohoto vztahu se lze též přesvědčit prostým roznásobením).

1.3 Komutátory souřadnice a hybnosti

Jsou dány dva samosdružené operátory $\hat{x}$, $\hat{p}$ (souřadnice a hybnost), které splňují komutační relaci $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$.

1. Určete $\left[\hat{x}^2, \hat{p}\right]$.
2. Určete $[\hat{x}^n, \hat{p}]$.
3. Určete $[f(\hat{x}), \hat{p}]$ a $[\hat{x}, g(\hat{p})]$.

Řešení:

1. Dosazení do vzorce pro komutátor součinu operátorů (1.1.1a) vede na
$$\left[\hat{x}^2,\hat{p}\right]=[\hat{x}\hat{x},\hat{p}]=\hat{x}\,[\hat{x},\hat{p}]+[\hat{x},\hat{p}]\,\hat{x}=2\mathrm{i}\hbar\hat{x}. \tag{1.3.1}$$

2. Zopakuje se n-krát postup z předchozího bodu:
$$[\hat{x}^n,\hat{p}]=\left[\hat{x}^{n-1}\hat{x},\hat{p}\right]=\mathrm{i}\hbar\hat{x}^{n-1}+\left[\hat{x}^{n-1},\hat{p}\right]\hat{x}=\cdots=n\mathrm{i}\hbar\hat{x}^{n-1}. \tag{1.3.2}$$

3. Využije se definice funkce operátoru (1.0.2). Za předpokladu záměnnosti sčítání řady a komutování postupně vychází
$$\begin{aligned}[f(\hat{x}),\hat{p}]&=\left[\sum_{n=0}^{\infty}\frac{f^{(n)}(0)}{n!}\hat{x}^n,\hat{p}\right]=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{f^{(n)}(0)}{n!}\,[\hat{x}^n,\hat{p}] && (1.3.2)\\ &=\mathrm{i}\hbar\sum_{n=0}^{\infty}\frac{f^{(n)}(0)}{n!}n\hat{x}^{n-1} && \left|m=n-1\right|\\ &=\mathrm{i}\hbar\sum_{m=0}^{\infty}\frac{f^{(m+1)}(0)}{m!}\hat{x}^m=\boxed{\mathrm{i}\hbar f'(\hat{x})},\end{aligned} \tag{1.3.3}$$
přičemž pod n-tou derivací funkce operátoru rozumíme
$$f^{(n)}(\hat{x})=\left.\frac{\mathrm{d}f^n(\xi)}{\mathrm{d}\xi^n}\right|_{\xi=\hat{x}}. \tag{1.3.4}$$
Analogický postup pro operátor hybnosti dá
$$\boxed{[\hat{x},f(\hat{p})]=\mathrm{i}\hbar f'(\hat{p})}. \tag{1.3.5}$$

1.4 Baker-Campbell-Hausdorffova formule

1. Jsou-li $\hat{A}$, $\hat{B}$ dva komutující operátory, $\left[\hat{A},\hat{B}\right]=0$, dokažte, že
$$e^{\hat{A}+\hat{B}}=e^{\hat{A}}\,e^{\hat{B}}=e^{\hat{B}}\,e^{\hat{A}}. \tag{1.4.1}$$

2. Pro obecné nekomutující operátory $\hat{A}$, $\hat{B}$ ověřte, že
$$e^{\hat{A}}\,\hat{B}\,e^{-\hat{A}}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\hat{K}_n}{n!}, \tag{1.4.2}$$
kde $\hat{K}_0=\hat{B}$ a $\hat{K}_{n+1}=\left[\hat{A},\hat{K}_n\right]$.

3. Dokažte, že pro libovolné nekomutující operátory $\hat{B}$, $\hat{C}$ platí
$$e^{\hat{C}\hat{B}\hat{C}^{-1}}=\hat{C}\,e^{\hat{B}}\,\hat{C}^{-1}, \tag{1.4.3}$$
a vhodnou volbou operátoru $\hat{C}$ přepište formuli (1.4.2) do jiného často užívaného tvaru
$$e^{\hat{A}}\,e^{\hat{B}}\,e^{-\hat{A}}=e^{\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\hat{K}_n}{n!}}. \tag{1.4.4}$$

4. Pokud $\hat{A}$, $\hat{B}$ navzájem nekomutují, avšak komutují se svým komutátorem,
$$\left[\hat{A},\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right]=\left[\hat{B},\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right]=0, \tag{1.4.5}$$
ukažte, že platí
$$e^{\hat{A}}\,e^{\hat{B}}=e^{\hat{A}+\hat{B}}\,e^{\hat{D}}=e^{\hat{D}}\,e^{\hat{A}+\hat{B}}=e^{\hat{A}+\hat{B}+\hat{D}}, \tag{1.4.6}$$
a nalezněte operátor $\hat{D}$.

5. Pro zcela obecné operátory $\hat{A}$ a $\hat{B}$ nalezněte operátor $\hat{F}$ tak, aby platilo
$$e^{\hat{A}}\,e^{\hat{B}}=e^{\hat{F}}. \tag{1.4.7}$$

Řešení:

1. Exponenciála operátoru se rozvine do řady podle vzorce (1.0.3):

$$
\begin{aligned}
e^{\hat{A}+\hat{B}} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\left(\hat{A}+\hat{B}\right)^n \qquad \left|\begin{matrix}\text{binomický}\\ \text{rozvoj}\end{matrix}\right| \\
&= \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{n} \frac{1}{n!} \underbrace{\binom{n}{m}}_{\frac{n!}{m!(n-m)!}} \hat{A}^m \hat{B}^{n-m} = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{n} \frac{\hat{A}^m}{m!}\frac{\hat{B}^{n-m}}{(n-m)!} \\
&= \sum_{k=0}^{\infty}\sum_{l=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^k}{k!}\frac{\hat{B}^l}{l!} = \left(\sum_{k=0}^{\infty}\frac{\hat{A}^k}{k!}\right)\left(\sum_{l=0}^{\infty}\frac{\hat{B}^l}{l!}\right) = e^{\hat{A}}\,e^{\hat{B}}\,.
\end{aligned} \tag{1.4.8}
$$

Komutativita operátorů $\hat{A}$ a $\hat{B}$ se využila pro přeskládání operátorů v binomickém rozvoji.

2. Zavede se pomocná funkce $\hat{f}(\xi) = e^{\xi\hat{A}}\,\hat{B}\,e^{-\xi\hat{A}}$.[1] Levá strana dokazované formule (1.4.2) je pak rovna $\hat{f}(1)$. Funkce $\hat{f}(\xi)$ se do rozvine do mocninné řady, jejíž jednotlivé členy se označí v souladu s pravou stranou dokazované formule

$$
\hat{f}(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\xi^n}{n!}\hat{K}_n. \tag{1.4.9}
$$

Operátorové výrazy $\hat{K}_n$ se postupně vyjádří pomocí derivací funkce $\hat{f}(\xi)$:

$$
\hat{K}_0 = \hat{f}(0) = \hat{B}, \tag{1.4.10a}
$$

$$
\begin{aligned}
\hat{K}_1 = \hat{f}'(0) &= \left\{\left(e^{\xi\hat{A}}\,\hat{A}\right)\hat{B}\,e^{-\xi\hat{A}} + e^{\xi\hat{A}}\,\hat{B}\left(-\hat{A}\,e^{-\xi\hat{A}}\right)\right\}_{\xi=0} \\
&= \left\{e^{\xi\hat{A}}\left[\hat{A},\hat{B}\right]e^{-\xi\hat{A}}\right\}_{\xi=0} \\
&= \left[\hat{A},\hat{B}\right] = \left[\hat{A},\hat{K}_0\right],
\end{aligned} \tag{1.4.10b}
$$

$$
\begin{aligned}
\hat{K}_2 = \hat{f}''(0) &= \left\{\frac{d}{d\xi}\,e^{\xi\hat{A}}\left[\hat{A},\hat{B}\right]e^{-\xi\hat{A}}\right\}_{\xi=0} \\
&= \left\{\left(e^{\xi\hat{A}}\,\hat{A}\right)\left[\hat{A},\hat{B}\right]e^{-\xi\hat{A}} + e^{\xi\hat{A}}\left[\hat{A},\hat{B}\right]\left(-\hat{A}\,e^{-\xi\hat{A}}\right)\right\}_{\xi=0} \\
&= \left[\hat{A},\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right] = \left[\hat{A},\hat{K}_1\right],
\end{aligned} \tag{1.4.10c}
$$

$$\vdots$$

$$
\hat{K}_n = \hat{f}^{(n)}(0) = \left[\hat{A},\hat{K}_{n-1}\right] = \left[\hat{A},\left[\hat{A},\cdots\left[\hat{A},\hat{B}\right]\cdots\right]\right]. \tag{1.4.10d}
$$

3. Analogicky s předchozím bodem se levá strana dokazovaného výrazu (1.4.3) rozvine do řady podle vztahu pro exponenciálu operátoru (1.0.3):

$$
e^{\hat{C}\hat{B}\hat{C}^{-1}} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\hat{C}\hat{B}\hat{C}^{-1}\right)^n = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\hat{C}\hat{B}^n\hat{C}^{-1} = \hat{C}\left(\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\hat{B}^n\right)\hat{C}^{-1} = \hat{C}\,e^{\hat{B}}\,\hat{C}^{-1}. \tag{1.4.11}
$$

Substituce $\hat{C} \equiv e^{\hat{A}}$ převede rovnici (1.4.2) do hledaného tvaru (1.4.4).

4. Pro tuto část úlohy se zavede operátorová funkce

$$
\hat{g}(\xi) \equiv e^{\xi\hat{A}}\,e^{\xi\hat{B}}\,. \tag{1.4.12}
$$

[1] Jedná se o funkci reálného parametru ξ, avšak funkční hodnota je operátor z Hilbertova prostoru $\mathcal{H}$: $\hat{f}: \mathbb{R} \mapsto \mathcal{H}$.

Její derivace je

$$\begin{aligned}
\hat{\mathsf{g}}'(\xi) &= \hat{\mathsf{A}}\,\mathrm{e}^{\xi\hat{\mathsf{A}}}\,\mathrm{e}^{\xi\hat{\mathsf{B}}} + \mathrm{e}^{\xi\hat{\mathsf{A}}}\,\hat{\mathsf{B}}\,\mathrm{e}^{\xi\hat{\mathsf{B}}} \\
&= \hat{\mathsf{A}}\,\mathrm{e}^{\xi\hat{\mathsf{A}}}\,\mathrm{e}^{\xi\hat{\mathsf{B}}} + \mathrm{e}^{\xi\hat{\mathsf{A}}}\,\hat{\mathsf{B}}\,\underbrace{\mathrm{e}^{-\xi\hat{\mathsf{A}}}\,\mathrm{e}^{\xi\hat{\mathsf{A}}}}_{\hat{1}}\,\mathrm{e}^{\xi\hat{\mathsf{B}}} \\
&= \left(\hat{\mathsf{A}} + \mathrm{e}^{\xi\hat{\mathsf{A}}}\,\hat{\mathsf{B}}\,\mathrm{e}^{-\xi\hat{\mathsf{A}}}\right)\hat{\mathsf{g}}(\xi) \\
&= \left(\hat{\mathsf{A}} + \hat{\mathsf{B}} + \xi\left[\hat{\mathsf{A}},\hat{\mathsf{B}}\right]\right)\hat{\mathsf{g}}(\xi),
\end{aligned} \tag{1.4.13}$$

přičemž poslední rovnost vyplývá z již dokázané formule (1.4.2), z jejíž nekonečné sumy díky zadanému předpokladu $\left[\hat{\mathsf{A}},\left[\hat{\mathsf{A}},\hat{\mathsf{B}}\right]\right] = 0$ zbudou jen první dva členy $\hat{\mathsf{K}}_0 \equiv \hat{\mathsf{B}}$ a $\hat{\mathsf{K}}_1 \equiv \left[\hat{\mathsf{A}},\hat{\mathsf{B}}\right]$. Levá a pravá strana výrazu vede na diferenciální rovnici pro funkci $\hat{\mathsf{g}}(\xi)$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\ln\hat{\mathsf{g}}(\xi) = \hat{\mathsf{A}} + \hat{\mathsf{B}} + \xi\left[\hat{\mathsf{A}},\hat{\mathsf{B}}\right] \tag{1.4.14}$$

s řešením

$$\hat{\mathsf{g}}(\xi) = \mathrm{e}^{\xi(\hat{\mathsf{A}}+\hat{\mathsf{B}}) + \frac{\xi}{2}[\hat{\mathsf{A}},\hat{\mathsf{B}}]} \tag{1.4.15}$$

[integrační konstantu fixuje požadavek $\hat{\mathsf{g}}(0) = \hat{1}$ vyplývající z definičního vztahu (1.4.12)]. Dosazení $\xi = 1$ dá hledaný výraz

$$\boxed{\mathrm{e}^{\hat{\mathsf{A}}}\,\mathrm{e}^{\hat{\mathsf{B}}} = \mathrm{e}^{\hat{\mathsf{A}}+\hat{\mathsf{B}}+\frac{1}{2}[\hat{\mathsf{A}},\hat{\mathsf{B}}]} = \mathrm{e}^{\hat{\mathsf{A}}+\hat{\mathsf{B}}}\,\mathrm{e}^{\frac{1}{2}[\hat{\mathsf{A}},\hat{\mathsf{B}}]}}, \tag{1.4.16}$$

kde poslední rovnost platí díky předpokladu $\left[\hat{\mathsf{A}}+\hat{\mathsf{B}},\left[\hat{\mathsf{A}},\hat{\mathsf{B}}\right]\right] = 0$. Hledaný operátor je tedy

$$\hat{\mathsf{D}} \equiv \frac{1}{2}\left[\hat{\mathsf{A}},\hat{\mathsf{B}}\right]. \tag{1.4.17}$$

5. Nejprve se dokáže platnost pomocné formule

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\,\mathrm{e}^{\hat{\mathsf{h}}(\xi)} = \int_0^1 \mathrm{e}^{(1-y)\hat{\mathsf{h}}(\xi)}\,\hat{\mathsf{h}}'(\xi)\,\mathrm{e}^{y\hat{\mathsf{h}}(\xi)}\,\mathrm{d}y, \tag{1.4.18}$$

kde $\hat{\mathsf{h}}(\xi)$ je libovolná operátorová funkce a $\hat{\mathsf{h}}'(\xi)$ její derivace.[2] Levá strana rozvinutá v řadu (1.0.3) dá

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\,\mathrm{e}^{\hat{\mathsf{h}}} &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left(\hat{1} + \hat{\mathsf{h}} + \frac{\hat{\mathsf{h}}^2}{2!} + \frac{\hat{\mathsf{h}}^3}{3!} + \cdots\right) \\
&= \hat{\mathsf{h}}' + \frac{\hat{\mathsf{h}}'\hat{\mathsf{h}} + \hat{\mathsf{h}}\hat{\mathsf{h}}'}{2!} + \frac{\hat{\mathsf{h}}'\hat{\mathsf{h}}^2 + \hat{\mathsf{h}}\hat{\mathsf{h}}'\hat{\mathsf{h}} + \hat{\mathsf{h}}^2\hat{\mathsf{h}}'}{3!} + \cdots \\
&= \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{\hat{\mathsf{h}}^n\hat{\mathsf{h}}'\hat{\mathsf{h}}^m}{(n+m+1)!}
\end{aligned} \tag{1.4.19}$$

a pravá strana vede po rozvinutí obou exponenciál na

$$\int_0^1 \mathrm{e}^{(1-y)\hat{\mathsf{h}}}\,\hat{\mathsf{h}}'\,\mathrm{e}^{y\hat{\mathsf{h}}}\,\mathrm{d}y = \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{\hat{\mathsf{h}}^n\hat{\mathsf{h}}'\hat{\mathsf{h}}^m}{n!m!}\underbrace{\int_0^1 (1-y)^n y^m \mathrm{d}y}_{\frac{n!m!}{(n+m+1)!}} = \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{\hat{\mathsf{h}}^n\hat{\mathsf{h}}'\hat{\mathsf{h}}^m}{(n+m+1)!}. \tag{1.4.20}$$

Pomocná formule (1.4.18) je tedy splněna.

[2]Funkce $\hat{\mathsf{h}}$ a její derivace $\hat{\mathsf{h}}'$ nemusejí komutovat, $\left[\hat{\mathsf{h}}(\xi),\hat{\mathsf{h}}'(\xi)\right] \neq 0$. Jako jednoduchý příklad poslouží $\hat{\mathsf{h}}(\xi) = \hat{\mathsf{U}} + \xi\hat{\mathsf{V}}$, pokud $\left[\hat{\mathsf{U}},\hat{\mathsf{V}}\right] \neq 0$.

V následujícím kroku se pomocná formule (1.4.18) zleva obloží operátorem $e^{-\hat{h}}$ a následně se použije dříve dokázaný vzorec (1.4.2),

$$e^{-\hat{h}}\,\frac{d}{d\xi}\,e^{\hat{h}} = \int_0^1 \underbrace{e^{-y\hat{h}}\,\hat{h}'\,e^{y\hat{h}}}_{\hat{h}'+y[\hat{h}',\hat{h}]+\frac{y^2}{2!}[[\hat{h}',\hat{h}],\hat{h}]+\cdots} \, dy$$
$$= \hat{h}' + \frac{1}{2!}\left[\hat{h}',\hat{h}\right] + \frac{1}{3!}\left[\left[\hat{h}',\hat{h}\right],\hat{h}\right] + \cdots . \tag{1.4.21}$$

Operátor $\hat{F}$ se bude hledat ve tvaru

$$\hat{F}(\xi) = \xi\hat{F}_1 + \xi^2\hat{F}_2 + \xi^3\hat{F}_3 + \xi^4\hat{F}_4 + \cdots . \tag{1.4.22}$$

Jednotlivé členy rozvoje se naleznou porovnáním příspěvků stejného řádu v ξ u obou stran rovnice

$$e^{-\xi\hat{B}}\,e^{-\xi\hat{A}}\,\frac{d}{d\xi}\,e^{\xi\hat{A}}\,e^{\xi\hat{B}} = e^{-\hat{F}(\xi)}\,\frac{d}{d\xi}\,e^{\hat{F}(\xi)} . \tag{1.4.23}$$

Levá strana dá díky vzorci (1.4.2)

$$e^{-\xi\hat{B}}\,e^{-\xi\hat{A}}\,\frac{d}{d\xi}\,e^{\xi\hat{A}}\,e^{\xi\hat{B}} = e^{-\xi\hat{B}}\,\hat{B}\,e^{\xi\hat{B}} + e^{-\xi\hat{B}}\,e^{-\xi\hat{A}}\,\hat{A}\,e^{\xi\hat{A}}\,e^{\xi\hat{B}}$$
$$= \hat{B} + e^{-\xi\hat{B}}\,\hat{A}\,e^{\xi\hat{B}}$$
$$= \hat{B} + \hat{A} + \xi\left[\hat{A},\hat{B}\right] + \frac{\xi^2}{2}\left[\left[\hat{A},\hat{B}\right],\hat{B}\right] + \frac{\xi^3}{6}\left[\left[\left[\hat{A},\hat{B}\right],\hat{B}\right],\hat{B}\right] + \cdots . \tag{1.4.24}$$

Pravá strana při použití pomocné formule (1.4.21) vede na

$$e^{-\hat{F}(\xi)}\,\frac{d}{d\xi}\,e^{\hat{F}(\xi)} = \hat{F}' + \frac{1}{2!}\left[\hat{F}',\hat{F}\right] + \frac{1}{3!}\left[\left[\hat{F}',\hat{F}\right],\hat{F}\right] + \cdots$$
$$= \hat{F}_1 + 2\xi\hat{F}_2 + \xi^2\left(3\hat{F}_3 - \frac{1}{2}\left[\hat{F}_1,\hat{F}_2\right]\right)$$
$$+ \xi^3\left(4\hat{F}_4 - \left[\hat{F}_1,\hat{F}_3\right] + \frac{1}{6}\left[\hat{F}_1,\left[\hat{F}_1,\hat{F}_2\right]\right]\right) + O\left(\xi^4\right), \tag{1.4.25}$$

neboť

$$\hat{F}' = \hat{F}_1 + 2\xi\hat{F}_2 + 3\xi^2\hat{F}_3 + 4\xi^3\hat{F}_4 + O\left(\xi^4\right), \tag{1.4.26a}$$
$$\left[\hat{F}',\hat{F}\right] = -\xi^2\left[\hat{F}_1,\hat{F}_2\right] - 2\xi^3\left[\hat{F}_1,\hat{F}_3\right] + O\left(\xi^4\right), \tag{1.4.26b}$$
$$\left[\left[\hat{F}',\hat{F}\right],\hat{F}\right] = \xi^3\left[\hat{F}_1,\left[\hat{F}_1,\hat{F}_2\right]\right] + O\left(\xi^4\right). \tag{1.4.26c}$$

Příspěvky stejných řádů v ξ dají

$$\hat{F}_1 = \hat{A} + \hat{B}, \tag{1.4.27a}$$
$$\hat{F}_2 = \frac{1}{2}\left[\hat{A},\hat{B}\right], \tag{1.4.27b}$$
$$\hat{F}_3 = \frac{1}{12}\left(\left[\hat{A},\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right] + \left[\hat{B},\left[\hat{B},\hat{A}\right]\right]\right), \tag{1.4.27c}$$
$$\hat{F}_4 = -\frac{1}{24}\left[\hat{A},\left[\hat{B},\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right]\right], \tag{1.4.27d}$$

takže do 4. řádu v operátorech $\hat{A}$, $\hat{B}$ platí

$$\boxed{e^{\hat{A}}\,e^{\hat{B}} = e^{\hat{A}+\hat{B}+\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]+\frac{1}{12}([\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]]+[\hat{B},[\hat{B},\hat{A}]])-\frac{1}{24}[\hat{A},[\hat{B},[\hat{A},\hat{B}]]]+\cdots}} . \tag{1.4.28}$$

Poznámka: Poslední vztah (1.4.28), a někdy i dílčí vztahy (1.4.2) se nazývají v různých zdrojích *Baker-Campbell-Hausdorffova (BCH) formule* nebo *Glauberova formule* a hrají důležitou roli v teorii grup a v kvantové mechanice v teorii koherentních stavů (koherentním stavům se věnuje kapitola 9). Metoda efektivního výpočtu koeficientů rozvoje BCH formule je popsána například v práci [7].

Poznámka: Duální vztah k BCH formuli je tzv. *Zassenhausova formule*

$$\boxed{e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}}\,e^{\hat{B}}\,e^{-\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]}\,e^{\frac{1}{6}\left([\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]]+2[\hat{B},[\hat{A},\hat{B}]]\right)}\,e^{-\frac{1}{24}\left([\hat{A},[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]]]+3[\hat{A},[\hat{B},[\hat{A},\hat{B}]]]+3[\hat{B},[\hat{B},[\hat{A},\hat{B}]]]\right)}\dots}\,. \tag{1.4.29}$$

1.5 Posunutí souřadnice

Jsou dány dva samosdružené operátory $\hat{x}$, $\hat{p}$ (souřadnice a hybnost), které splňují komutační relaci $[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar$, a operátor

$$\hat{T}(a) = e^{-\frac{i}{\hbar}a\hat{p}}, \tag{1.5.1}$$

kde a je libovolné reálné číslo.

1. Ukažte, že operátor $\hat{T}(a)$ je unitární.
2. Nalezněte, čemu se rovná $\hat{T}^{-1}(a)\,\hat{x}\,\hat{T}(a)$.
3. Spočítejte $\hat{T}(a)\psi(x)$, kde $\psi(x) \equiv \langle x|\psi\rangle$ je vlnová funkce v x reprezentaci.

Řešení:

1. Unitární operátor musí splňovat rovnost

$$\hat{T}^\dagger(a)\hat{T}(a) = \hat{T}(a)\hat{T}^\dagger(a) = \hat{1}. \tag{1.5.2}$$

Pro zadaný operátor (1.5.1)

$$\left(e^{-\frac{i}{\hbar}a\hat{p}}\right)^\dagger e^{-\frac{i}{\hbar}a\hat{p}} = e^{+\frac{i}{\hbar}a\hat{p}^\dagger}\,e^{-\frac{i}{\hbar}a\hat{p}} = e^{-\frac{i}{\hbar}a(\hat{p}-\hat{p})} = e^{\hat{0}} = \hat{1}, \tag{1.5.3}$$

kde se postupně využilo samosdruženosti operátoru $\hat{p}$ a vztahu pro exponenciálu komutujících operátorů (1.4.1).
Stejným způsobem by se ukázalo, že

$$\boxed{\begin{aligned} \hat{T}^{-1}(a) &= \hat{T}^\dagger(a) = \hat{T}(-a) \\ \hat{T}(a)\hat{T}(b) &= \hat{T}(a+b) \end{aligned}}\,. \tag{1.5.4}$$

2. K výpočtu hledaného výrazu se vyjde z BCH formule (1.4.2) s operátory

$$\hat{A} \equiv \frac{i}{\hbar}a\hat{p}, \qquad \hat{B} \equiv \hat{x}. \tag{1.5.5}$$

Díky tomu, že $\hat{A}$ a $\hat{B}$ komutují na násobek jednotkového operátoru, přispějí do BCH řady jen první dva členy

$$\hat{K}_0 = \hat{x} \tag{1.5.6a}$$

$$\hat{K}_1 = \left[\frac{i}{\hbar}a\hat{p},\hat{x}\right] = \frac{i}{\hbar}a\,[\hat{p},\hat{x}] = \frac{i}{\hbar}a\,(-i\hbar) = a \tag{1.5.6b}$$

$$\hat{K}_2 = \hat{K}_3 = \cdots = 0, \tag{1.5.6c}$$

takže

$$\boxed{\hat{T}^{-1}(a)\,\hat{x}\,\hat{T}(a) = \hat{x} + a}\,. \tag{1.5.7}$$

3. Spektrum operátoru souřadnice je dáno rovnicí $\hat{x}\,|x\rangle = x\,|x\rangle$. Z výsledku předchozího bodu vyplývá
$$\hat{x}\hat{T}(a)\,|x\rangle = \hat{T}(a)\,(\hat{x}+a)\,|x\rangle = \hat{T}(a)\,(x+a)\,|x\rangle = (x+a)\,\hat{T}(a)\,|x\rangle\,. \tag{1.5.8}$$
Stav $\hat{T}(a)\,|x\rangle$ tedy přísluší vlastní hodnotě $x+a$ operátoru $\hat{x}$, je vhodné ho označit
$$\boxed{|x+a\rangle \equiv \hat{T}(a)\,|x\rangle}. \tag{1.5.9}$$
Obdobně
$$\langle x-a| = \langle x|\,\hat{T}^\dagger(-a) = \langle x|\,\hat{T}(a). \tag{1.5.10}$$
Z posledních dvou vztahů pak plyne
$$\hat{T}(a)\psi(x) = \left\langle x\middle|\hat{T}(a)\middle|\psi\right\rangle = \langle x-a|\psi\rangle = \psi(x-a). \tag{1.5.11}$$

Poznámka: Operátor $\hat{T}(a)$ se nazývá *operátor posunutí*.

1.6 Rotace operátoru momentu hybnosti

Jsou zadány samosdružené operátory $\hat{S}_1, \hat{S}_2, \hat{S}_3$, které splňují komutační relace pro moment hybnosti,
$$\left[\hat{S}_j, \hat{S}_k\right] = \mathrm{i}\hbar\epsilon_{jkl}\hat{S}_l, \tag{1.6.1}$$
a operátor
$$\hat{R}_3(\gamma) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\gamma\hat{S}_3}, \tag{1.6.2}$$
s reálným parametrem γ. Nalezněte, čemu se rovnají výrazy
$$\hat{R}_3^{-1}(\gamma)\hat{S}_1\hat{R}_3(\gamma), \tag{1.6.3a}$$
$$\hat{R}_3^{-1}(\gamma)\hat{S}_2\hat{R}_3(\gamma). \tag{1.6.3b}$$

Řešení:

Stejně jako v předchozím příkladu 1.5 se použije BCH formule (1.4.2), v níž se za operátory $\hat{A}$, $\hat{B}$ dosadí
$$\hat{A} \equiv \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\gamma\hat{S}_3, \qquad \hat{B} \equiv \hat{S}_1. \tag{1.6.4}$$
Využití komutačních relací pro složky momentu hybnosti (1.6.1) pak dá členy BCH rozvoje v následujícím tvaru:
$$\hat{K}_0 = \hat{S}_1, \tag{1.6.5a}$$
$$\hat{K}_1 = \left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\gamma\hat{S}_3, \hat{S}_1\right] = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\gamma\left[\hat{S}_3, \hat{S}_1\right] = -\gamma\hat{S}_2, \tag{1.6.5b}$$
$$\hat{K}_2 = \left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\gamma\hat{S}_3, -\gamma\hat{S}_2\right] = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\gamma^2\left[\hat{S}_3, \hat{S}_2\right] = -\gamma^2\hat{S}_1, \tag{1.6.5c}$$
$$\hat{K}_3 = \left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\gamma\hat{S}_3, -\gamma^2\hat{S}_1\right] = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\gamma^3\left[\hat{S}_3, \hat{S}_1\right] = \gamma^3\hat{S}_2, \tag{1.6.5d}$$
$$\vdots$$
$$\hat{K}_{2k} = (-1)^k\,\gamma^{2k}\hat{S}_1, \tag{1.6.5e}$$
$$\hat{K}_{2k+1} = -\,(-1)^k\,\gamma^{2k+1}\hat{S}_2, \tag{1.6.5f}$$

kde $n \in \mathbb{N}_0$. BCH řada má v tomto případě nekonečně mnoho členů, lze ji však rozdělit na řadu sudých a na řadu lichých příspěvků, které se dají sečíst na goniometrické funkce:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathsf{R}}_3^{-1}(\gamma)\hat{\mathsf{S}}_1\hat{\mathsf{R}}_3(\gamma) &= \frac{1}{0!}\hat{\mathsf{S}}_1 - \frac{1}{1!}\gamma\hat{\mathsf{S}}_2 - \frac{1}{2!}\gamma^2\hat{\mathsf{S}}_1 + \frac{1}{3!}\gamma^3\hat{\mathsf{S}}_2 + \cdots \\
&= \underbrace{\left[\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k}{(2k)!}\gamma^{2k}\right]}_{\cos\gamma}\hat{\mathsf{S}}_1 - \underbrace{\left[\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k}{(2k+1)!}\gamma^{2k+1}\right]}_{\sin\gamma}\hat{\mathsf{S}}_2 \\
&= \boxed{\hat{\mathsf{S}}_1\cos\gamma - \hat{\mathsf{S}}_2\sin\gamma}\,. \qquad (1.6.6)
\end{aligned}$$

Stejný postup vede v případě druhého vztahu ze zadání na

$$\boxed{\hat{\mathsf{R}}_3^{-1}(\gamma)\hat{\mathsf{S}}_2\hat{\mathsf{R}}_3(\gamma) = \hat{\mathsf{S}}_1\sin\gamma + \hat{\mathsf{S}}_2\cos\gamma}\,. \qquad (1.6.7)$$

Poznámka: Operátor $\hat{\mathsf{R}}_3(\gamma)$ se nazývá *operátor natočení (rotace)* o úhel γ okolo osy z. Obdobným způsobem se definují operátory $\hat{\mathsf{R}}_1$ a $\hat{\mathsf{R}}_2$, které popisují rotace okolo souřadných os x a y.