

4 Harmonický oscilátor

4.1 Spektrum operátoru $\hat{n} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$

Je zadán operátor \hat{a} a operátor \hat{a}^\dagger k němu sdružený, které mezi sebou splňují komutační relace⁹¹⁰

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1. \quad (4.1.2)$$

Definujme operátor

$$\hat{n} \equiv \hat{a}^\dagger \hat{a}. \quad (4.1.3)$$

1. Ukažte, že operátor \hat{n} je samosdružený a pozitivně definitní.
2. Nalezněte, čemu se rovnají komutátory $[\hat{n}, \hat{a}^k]$ a $[\hat{n}, (\hat{a}^\dagger)^k]$ pro $k \in \mathbb{N}$.
3. Ukažte, čemu se rovná $\hat{a}^\dagger |n\rangle$, $\hat{a} |n\rangle$, kde $|n\rangle$ je vlastní vektor operátoru \hat{n} příslušející vlastní hodnotě n .
4. Nalezněte všechny vlastní hodnoty n operátoru \hat{n} .
5. Nalezněte normalizované vlastní vektory operátoru \hat{n} .
6. Nalezněte tvar operátorů \hat{a} a \hat{a}^\dagger v maticové realizaci.

Řešení:

1. Samosdruženost plyne z identit

$$\hat{n}^\dagger = (\hat{a}^\dagger \hat{a})^\dagger = \hat{a}^\dagger (\hat{a}^\dagger)^\dagger = \hat{a}^\dagger \hat{a} = \hat{n}. \quad (4.1.4)$$

Díky samosdruženosti existuje spektrální rozklad operátoru \hat{n} ,

$$\hat{n} |n\rangle = n |n\rangle, \quad (4.1.5)$$

kde n je reálné číslo a $|n\rangle$ odpovídající normalizovaný vlastní vektor, $\langle n|n\rangle = 1$.

Pozitivita operátoru \hat{n} znamená, že všechny jeho vlastní hodnoty jsou nezáporné. Platí

$$\langle n|\hat{n}|n\rangle = n \langle n|n\rangle = n \quad (4.1.6)$$

a zároveň

$$\langle n|\hat{n}|n\rangle = \langle n|\hat{a}^\dagger \hat{a}|n\rangle = |\hat{a}|n\rangle|^2 \geq 0, \quad (4.1.7)$$

takže opravdu

$$n \geq 0. \quad (4.1.8)$$

2. Pro $k = 1$ je

$$[\hat{n}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger \hat{a}, \hat{a}] = \underbrace{\hat{a}^\dagger [\hat{a}, \hat{a}]}_0 + \underbrace{[\hat{a}^\dagger, \hat{a}] \hat{a}}_{-1} = -\hat{a}, \quad (4.1.9)$$

⁹Vztahu (4.1.2) je třeba rozumět ve smyslu $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{1}$, kde $\hat{1}$ je operátor identity, podobně jako je tomu například u komutačních relací samosdružených operátorů souřadnice a hybnosti $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$.

¹⁰Obecněji lze uvažovat komutační relace

$$[\hat{A}, \hat{A}^\dagger] = m, \quad m \in \mathbb{R}^+. \quad (4.1.1)$$

Ty přejdou na (4.1.2) přeškálováním $\hat{a} = \hat{A}/\sqrt{m}$.

kde druhá rovnost platí díky rozvoji komutátoru (1.1.1a) a poslední rovnost vyplývá ze vztahu (4.1.2). Induktivní opakování tohoto postupu vede na

$$\begin{aligned} [\hat{n}, \hat{a}^k] &= [\hat{n}, \hat{a}^{k-1} \hat{a}] = \hat{a}^{k-1} \underbrace{[\hat{n}, \hat{a}]}_{-\hat{a}} + [\hat{n}, \hat{a}^{k-1}] \hat{a} \\ &= -\hat{a}^k + [\hat{n}, \hat{a}^{k-2} \hat{a}] \hat{a} = -\hat{a}^k + \hat{a}^{k-2} \underbrace{[\hat{n}, \hat{a}]}_{-\hat{a}} \hat{a} + [\hat{n}, \hat{a}^{k-2}] \hat{a}^2 \\ &= -2\hat{a}^k + [\hat{n}, \hat{a}^{k-3} \hat{a}] \hat{a}^2 = \dots = -k\hat{a}^k. \end{aligned} \quad (4.1.10)$$

Zcela analogicky se ukáže, že

$$\left[\hat{n}, (\hat{a}^\dagger)^k \right] = k (\hat{a}^\dagger)^k. \quad (4.1.11)$$

3. Vlastní hodnoty a vlastní vektory operátoru \hat{n} splňují rovnici (4.1.5), kde $n \geq 0$. Za předpokladu $n \neq 0$ a díky vztahu (4.1.9) platí

$$\hat{n} \hat{a} |n\rangle = (\hat{a} \hat{n} - \hat{a} \hat{n} + \hat{n} \hat{a}) |n\rangle = (\hat{a} \hat{n} + [\hat{n}, \hat{a}]) |n\rangle = (\hat{a} \hat{n} - \hat{a}) |n\rangle = (n-1) \hat{a} |n\rangle. \quad (4.1.12)$$

Analogicky pak

$$\hat{n} \hat{a}^\dagger |n\rangle = (n+1) \hat{a}^\dagger |n\rangle. \quad (4.1.13)$$

Vektory $\hat{a} |n\rangle$ a $\hat{a}^\dagger |n\rangle$ jsou tedy oba vlastními stavy operátoru \hat{n} příslušejícími vlastním hodnotám $n-1$, respektive $n+1$. Norma těchto vektorů je

$$|\langle n | \hat{a}^\dagger \hat{a} |n\rangle| = |\langle n | \hat{n} |n\rangle| = n |\langle n |n\rangle| = n, \quad (4.1.14a)$$

$$|\langle n | \hat{a} \hat{a}^\dagger |n\rangle| = |\langle n | \hat{a}^\dagger \hat{a} + 1 |n\rangle| = n+1. \quad (4.1.14b)$$

Normované vlastní vektory operátoru \hat{n} jsou tedy navzájem svázaný operátory \hat{a} a \hat{a}^\dagger :

$$|n-1\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{a} |n\rangle, \quad (4.1.15a)$$

$$|n+1\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{n+1}} \hat{a}^\dagger |n\rangle. \quad (4.1.15b)$$

4. k -násobným opakovaným působení operátoru \hat{a} na stav $|n\rangle$ se dospěje k normovanému vektoru

$$|n-k\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{n(n-1)\cdots(n-k)}} \hat{a}^k |n\rangle, \quad (4.1.16)$$

což je vlastní vektor operátoru \hat{n} příslušející vlastní hodnotě $n-k$. **Pozitivita operátoru však omezuje hodnoty k : Pro žádné k není povoleno získat vektor, který by měl odpovídat záporné vlastní hodnotě.** Jelikož k lze volit libovolně, musí spektrum operátoru bezpodmínečně obsahovat hodnotu 0, tj. musí existovat vektor $|0\rangle$ takový, že

$$\hat{n} |0\rangle = 0 |0\rangle = 0, \quad (4.1.17)$$

a tedy $\hat{a} |0\rangle = 0$. Další aplikace operátoru \hat{a} dají identicky nulu.

Spektrum operátoru \hat{n} tedy tvoří všechna nezáporná celá čísla $n \in \mathbb{N}_0$.

5. Všechny normalizované vlastní vektory $|n\rangle$ lze nagenarovat ze stavu $|0\rangle$ pomocí vícenásobného použití operátoru \hat{a}^\dagger podle (4.1.15):

$$|n\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle. \quad (4.1.18)$$

6. Dimenze Hilbertova prostoru, na kterém působí operátory \hat{a} a \hat{a}^\dagger , je nekonečná, přičemž za jeho bázi lze zvolit vektory $|n\rangle$. V maticové realizaci lze tento vektor vyjádřit jako nekonečný sloupec

$$|n\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \cdots n\text{-tá pozice} \quad (4.1.19)$$

Z algebraického vztahu mezi bázovými vektory (4.1.15) vyplývá

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & & & & & \ddots \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} & 0 & \dots \\ \vdots & & & & & \ddots \end{pmatrix} \equiv \mathbf{a}^\top. \quad (4.1.20)$$

Operátor \hat{n} je v této bázi diagonální a jeho maticové vyjádření je

$$\mathbf{n} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 3 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 4 & \dots \\ \vdots & & & & & \ddots \end{pmatrix}. \quad (4.1.21)$$

K tomuto vztahu lze rovněž dospět pronásobením nekonečných matic (4.1.20), tj. $\mathbf{n} = \mathbf{a}^\dagger \mathbf{a}$.

Poznámka: Operátory \hat{a} , \hat{a}^\dagger posouvají vlastní stav operátoru \hat{n} z vyšší vlastní hodnoty na nižší a naopak, proto se obvykle nazývají *posunovací operátory*. Při využití těchto operátorů nad Fokovými prostory (kapitola 17), kde vytvářejí a ruší částice daných vlastností, se nazývají *anihilační a kreační operátory*.

4.2 Jednorozměrný harmonický oscilátor

Harmonický oscilátor je popsán Hamiltoniánem

$$\hat{H} = \frac{1}{2M} \hat{p}^2 + \frac{1}{2} M \Omega^2 \hat{x}^2, \quad (4.2.1)$$

kde M je hmotnost kmitající částice, $\Omega = \sqrt{k/M}$ je úhlová frekvence oscilátoru, \hat{x} je operátor souřadnice a \hat{p} operátor k němu přidružené hybnosti. Oba tyto samosdružené operátory splňují kanonický komutační vztah

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar. \quad (4.2.2)$$

V harmonickém oscilátoru lze vhodně nadefinovat operátory \hat{a} , \hat{a}^\dagger , a tím ho převést na algebraický systém, který jsme vyřešili v předchozím příkladu 4.1. Hledejte \hat{a} ve tvaru

$$\hat{a} = \alpha \hat{x} + \beta \hat{p}, \quad \alpha, \beta \in \mathbb{C}. \quad (4.2.3)$$

1. Nalezněte hodnoty konstant α , β a zapište Hamiltonián \hat{H} pomocí operátorů \hat{a} , \hat{a}^\dagger .
2. Nalezněte spektrum (vlastní energie a vlastní vektory) Hamiltoniánu.
3. Vyjádřete operátory hybnosti \hat{p} a souřadnice \hat{x} pomocí operátorů \hat{a} , \hat{a}^\dagger .
4. Spočítejte střední hodnoty

$$\langle n | \hat{x} | n \rangle, \quad \langle n | \hat{p} | n \rangle, \quad \langle n | \hat{x}^2 | n \rangle, \quad \langle n | \hat{p}^2 | n \rangle, \quad (4.2.4)$$

kde $|n\rangle$ je vlastní stav Hamiltoniánu.

5. Spočítejte střední hodnoty

$$\langle n | \hat{T} | n \rangle, \quad \langle n | \hat{V} | n \rangle, \quad (4.2.5)$$

kde \hat{T} a \hat{V} jsou operátory kinetické, resp. potenciální energie oscilátoru, a srovnejte s hodnotou energie ve stavu $|n\rangle$ (virialový teorém).

6. Ověřte platnost relací neurčitosti mezi polohou a hybností.
7. Pomocí posunovacích operátorů vyjádřených v x -reprezentaci nalezněte vlnové funkce Harmonického oscilátoru.

Řešení:

1. Dosazení lineární kombinace souřadnic a hybností (4.2.3) do definice operátoru \hat{n} dá

$$\begin{aligned}\hat{n} &= \hat{a}^\dagger \hat{a} = (\alpha^* \hat{x} + \beta^* \hat{p}) (\alpha \hat{x} + \beta \hat{p}) \\ &= |\alpha|^2 \hat{x}^2 + \alpha^* \beta \underbrace{\hat{x} \hat{p}}_{\hat{p} \hat{x} + i\hbar} + \alpha \beta^* \hat{p} \hat{x} + |\beta|^2 \hat{p}^2 \\ &= |\alpha|^2 \hat{x}^2 + (\alpha^* \beta + \alpha \beta^*) \hat{p} \hat{x} + i\hbar \alpha^* \beta + |\beta|^2 \hat{p}^2.\end{aligned}\quad (4.2.6)$$

Srovnáním tohoto výrazu s Hamiltoniánem (4.2.1) je patrné, že až na konstantní člen lze Hamiltonián harmonického oscilátoru zkonstruovat z operátoru \hat{n} , pokud vymizí členy mísící souřadnici a hybnost, tj. pokud

$$\alpha^* \beta + \alpha \beta^* = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad \text{Re } \alpha^* \beta = 0. \quad (4.2.7)$$

Bez újmy na obecnosti lze zvolit α reálné a β ryze imaginární. Pak

$$\hat{H} = \gamma \hat{n} + \delta, \quad (4.2.8)$$

kde γ a δ jsou již reálná čísla.

Dodatečná podmínka plyne z komutačních relací (4.1.2),

$$\begin{aligned}1 &= [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = (\alpha \hat{x} + \beta \hat{p}) (\alpha^* \hat{x} + \beta^* \hat{p}) - (\alpha^* \hat{x} + \beta^* \hat{p}) (\alpha \hat{x} + \beta \hat{p}) \\ &= (\alpha \beta^* - \alpha^* \beta) \underbrace{\hat{x} \hat{p}}_{\hat{p} \hat{x} + i\hbar} + (\alpha^* \beta - \alpha \beta^*) \hat{p} \hat{x} \\ &= (\alpha \beta^* - \alpha^* \beta) i\hbar \\ &= 2\alpha \beta^* i\hbar,\end{aligned}\quad (4.2.9)$$

takže musí platit

$$\alpha \beta^* = \frac{1}{2i\hbar}. \quad (4.2.10)$$

Srovnáním příslušných členů výrazu (4.2.6) s Hamiltoniánem (4.2.1) a díky podmínce (4.2.10) lze přiřadit parametrům hodnoty

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{\gamma}} \sqrt{\frac{1}{2} M \Omega^2}, \quad (4.2.11a)$$

$$\beta = \frac{i}{\sqrt{\gamma}} \sqrt{\frac{1}{2M}}, \quad (4.2.11b)$$

$$\gamma = \hbar \Omega, \quad (4.2.11c)$$

$$\delta = \frac{\gamma}{2} = \frac{\hbar \Omega}{2}. \quad (4.2.11d)$$

Výsledkem je vyjádření Hamiltoniánu harmonického oscilátoru ve tvaru

$$\hat{H} = \hbar \Omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right). \quad (4.2.12)$$

2. Spektrum Hamiltoniánu lze určit na základě znalosti spektra operátoru \hat{n} (4.1.18):

$$\begin{aligned}\hat{H} |E_n\rangle &= E_n |E_n\rangle \\ \hbar \Omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} |E_n\rangle + \frac{1}{2} |E_n\rangle \right) &= E_n |E_n\rangle \\ \hbar \Omega \left(n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle &= E_n |n\rangle,\end{aligned}\quad (4.2.13)$$

takže

$$E_n = \hbar\Omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (4.2.14)$$

a vlastní vektory jsou totožné s vlastními vektory operátoru \hat{n} , $|E_n\rangle \equiv |n\rangle$.

3. Dosazení α, β a γ z (4.2.11) do (4.2.3), vede na vztahy¹¹

$$\begin{aligned} \hat{a} &= \frac{\hat{A}}{\sqrt{\hbar\Omega}} = \frac{1}{\sqrt{\hbar\Omega}} \left(\sqrt{\frac{1}{2}} M\Omega^2 \hat{x} + i\sqrt{\frac{1}{2M}} \hat{p} \right) \\ &= \sqrt{\frac{M\Omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} + \frac{i}{M\Omega} \hat{p} \right), \end{aligned} \quad (4.2.17a)$$

$$\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{M\Omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} - \frac{i}{M\Omega} \hat{p} \right). \quad (4.2.17b)$$

Sečtení a odečtení vede k inverzní transformaci od posunovacích operátorů k operátorům souřadnice a hybnosti,

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}), \quad (4.2.18a)$$

$$\hat{p} = i\sqrt{\frac{\hbar M\Omega}{2}} (\hat{a}^\dagger - \hat{a}). \quad (4.2.18b)$$

4. K výpočtu středních hodnot operátorů \hat{x} , \hat{p} se využije jejich vyjádření pomocí posunovacích operátorů (4.2.18) a poté vztahy (4.1.15):

$$\begin{aligned} \langle n|\hat{x}|n\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} \langle n|\hat{a}^\dagger + \hat{a}|n\rangle \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} (\sqrt{n+1} \langle n|n+1\rangle + \sqrt{n} \langle n|n-1\rangle) \\ &= 0, \end{aligned} \quad (4.2.19)$$

jelikož vlastní vektory $|n-1\rangle$, $|n\rangle$ a $|n+1\rangle$ jsou na sebe kolmé. Stejně tak vychází

$$\langle n|\hat{p}|n\rangle = 0. \quad (4.2.20)$$

Lze odpozorovat **pravidlo**, že střední hodnota $\langle n|f(r, s; \hat{a}, \hat{a}^\dagger)|n\rangle$, kde $f(r, s; \hat{a}, \hat{a}^\dagger)$ je funkce součinu r operátorů \hat{a} a s operátorů \hat{a}^\dagger v libovolném pořadí, je nenulová pouze tehdy, pokud $r = s$. Obecněji maticový element $\langle m|f(r, s; \hat{a}, \hat{a}^\dagger)|n\rangle$ je nenulový, pokud $m + r = n + s$.

¹¹Lze navíc zavést veličiny rozměru souřadnice a hybnosti

$$x_0 \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{M\Omega}}, \quad p_0 \equiv \frac{x_0}{\hbar} = \sqrt{\hbar M\Omega} \quad (4.2.15)$$

a vztahy (4.2.17) přepsat do bezrozměrného tvaru

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{x}}{x_0} + i\frac{\hat{p}}{p_0} \right). \quad (4.2.16)$$

Pro střední hodnoty kvadrátů operátorů souřadnice a hybnosti platí

$$\begin{aligned}
 \langle n | \hat{x}^2 | n \rangle &= \frac{\hbar}{2M\Omega} \left\langle n \left| \left(\hat{a}^\dagger + \hat{a} \right)^2 \right| n \right\rangle \\
 &= \frac{\hbar}{2M\Omega} \left\langle n \left| \underbrace{\left(\hat{a}^\dagger \right)^2}_0 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \underbrace{\hat{a}^2}_0 \right| n \right\rangle \\
 &= \frac{\hbar}{2M\Omega} \left\langle n \left| \sqrt{n+1}\sqrt{n+1} + \sqrt{n}\sqrt{n} \right| n \right\rangle \\
 &= \frac{\hbar}{2M\Omega} (2n+1), \tag{4.2.21}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \langle n | \hat{p}^2 | n \rangle &= -\frac{\hbar M\Omega}{2} \left\langle n \left| \left(\hat{a}^\dagger - \hat{a} \right)^2 \right| n \right\rangle \\
 &= -\frac{\hbar M\Omega}{2} \left\langle n \left| \underbrace{\left(\hat{a}^\dagger \right)^2}_0 - \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} + \underbrace{\left(\hat{a} \right)^2}_0 \right| n \right\rangle \\
 &= \frac{\hbar M\Omega}{2} (2n+1). \tag{4.2.22}
 \end{aligned}$$

5. Operátor kinetické energie je

$$\hat{T} = \frac{1}{2M} \hat{p}^2, \tag{4.2.23}$$

jehož střední hodnota vychází po dosazení (4.2.22)

$$\langle n | \hat{T} | n \rangle = \frac{1}{2M} \frac{\hbar M\Omega}{2} (2n+1) = \frac{1}{2} \hbar\Omega \left(n + \frac{1}{2} \right) = \frac{E_n}{2}. \tag{4.2.24}$$

Podobně potenciál

$$\hat{V} = \frac{1}{2} M\Omega^2 \hat{x}^2 \tag{4.2.25}$$

po dosazení (4.2.21) vychází

$$\langle n | \hat{V} | n \rangle = \frac{1}{2} M\Omega^2 \frac{\hbar}{2M\Omega} (2n+1) = \frac{1}{2} \hbar\Omega \left(n + \frac{1}{2} \right) = \frac{E_n}{2}. \tag{4.2.26}$$

Viriálový teorém udává vztah mezi střední hodnotou operátoru kinetické energie a operátoru potenciálu pro libovolný stav $|\psi\rangle$,¹² tedy nikoliv jen pro vlastní stav Hamiltoniánu:

$$2 \langle \psi | \hat{T} | \psi \rangle = \left\langle \psi \left| \hat{x} \frac{d}{d\hat{x}} \hat{V}(\hat{x}) \right| \psi \right\rangle. \tag{4.2.27}$$

To se v případě, že $\hat{V}(\hat{x})$ je homogenní funkce stupně s , dále zjednoduší na

$$2 \langle \psi | \hat{T} | \psi \rangle = s \langle \psi | \hat{V} | \psi \rangle. \tag{4.2.28}$$

V případě harmonického oscilátoru je $s = 2$. Pro střední hodnoty kinetické energie (4.2.24) a potenciálu (4.2.26) je viriálový teorém splněn.

6. Relace neurčitosti znějí

$$\Delta_n \hat{x}^2 \Delta_n \hat{p}^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}, \tag{4.2.29}$$

kde

$$\Delta_n \hat{x}^2 = \langle n | \hat{x}^2 | n \rangle - \langle n | \hat{x} | n \rangle^2, \tag{4.2.30a}$$

$$\Delta_n \hat{p}^2 = \langle n | \hat{p}^2 | n \rangle - \langle n | \hat{p} | n \rangle^2. \tag{4.2.30b}$$

¹²Výrazu $\frac{d}{d\hat{x}} \hat{V}(\hat{x})$ je třeba rozumět ve smyslu $\frac{d}{dx} V(x)|_{x=\hat{x}}$.

Po dosazení vypočtených středních hodnot (4.2.19), (4.2.20), (4.2.21) a (4.2.22) do relací neurčitosti vychází

$$\begin{aligned}\Delta_n \hat{x}^2 \Delta_n \hat{p}^2 &= \langle n | \hat{x}^2 | n \rangle \langle n | \hat{p}^2 | n \rangle \\ &= \frac{\hbar}{2M\Omega} (2n+1) \frac{\hbar M\Omega}{2} (2n+1) \\ &= \frac{\hbar^2}{4} (2n+1)^2.\end{aligned}\quad (4.2.31)$$

Jelikož $n \geq 0$, relace neurčitosti jsou splněny. Stav s nejmenší možnou neurčitostí je základní stav $n = 0$.

7. Operátory \hat{a} a \hat{a}^\dagger v x -reprezentaci se získají ze vztahů (4.2.17) přechodem $\hat{x} \mapsto x$ a $\hat{p} \mapsto -i\hbar d/dx$,

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{M\Omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{\hbar}{M\Omega} \frac{d}{dx} \right).\quad (4.2.32)$$

Pro základní stav harmonického oscilátoru platí

$$\hat{a} |0\rangle = 0 \xrightarrow{x\text{-reprezentace}} \hat{a}\psi_0(x) = 0,\quad (4.2.33)$$

což vede v x -reprezentaci na obyčejnou diferenciální rovnici 1. řádu

$$\left(x + \frac{\hbar}{M\Omega} \frac{d}{dx} \right) \psi_0(x) = 0.\quad (4.2.34)$$

Její řešení získané separací proměnných zní

$$\psi_0(x) = N e^{-\frac{M\Omega}{2\hbar} x^2}.\quad (4.2.35)$$

Normalizační konstanta N vychází z podmínky

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_0(x)|^2 dx = 1 \implies N = \sqrt[4]{\frac{M\Omega}{\pi\hbar}}.\quad (4.2.36)$$

Normalizovaná vlnová funkce základního stavu harmonického oscilátoru je tedy

$$\psi_0(x) = \sqrt[4]{\frac{M\Omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{M\Omega}{2\hbar} x^2}.\quad (4.2.37)$$

Vlnové funkce vzbuzených stavů se nagenergují ze základního stavu působením operátoru \hat{a}^\dagger podle vztahu (4.1.18),

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{M\Omega}{2\hbar} \right)^{\frac{n}{2}} \left(x - \frac{\hbar}{M\Omega} \frac{d}{dx} \right)^n \psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \sqrt[4]{\frac{M\Omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{M\Omega}{2\hbar} x^2} H_n \left(\sqrt{\frac{M\Omega}{\hbar}} x \right),\quad (4.2.38)$$

kde $H_n(\xi)$ je Hermitův polynom.

4.3 Stav s nenulovou výchylkou

Harmonický oscilátor je připraven ve stavu daném lineární kombinací dvou vlastních stavů Hamiltoniánu,

$$|\psi\rangle = \alpha |m\rangle + \beta |n\rangle,\quad (4.3.1)$$

kde $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$.

1. Nalezněte čísla α, β tak, aby střední hodnota operátoru polohy ve stavu $|\psi\rangle$ byla maximální možná.
2. Pro tento stav určete $\langle \psi | \hat{x} | \psi \rangle$, $\langle \psi | \hat{p} | \psi \rangle$, střední kvadratické odchylky $\Delta_\psi \hat{x}^2$, $\Delta_\psi \hat{p}^2$ a ověřte platnost relací neurčitosti.

Řešení:

1. Střední hodnota operátoru polohy \hat{x} pro harmonický oscilátor ve stavu $|\psi\rangle$ je

$$\begin{aligned}
 \langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle &= (\alpha^* \langle m| + \beta^* \langle n|) \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) (\alpha |m\rangle + \beta |n\rangle) \\
 &= \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} (\alpha^* \langle m| + \beta^* \langle n|) \left(\alpha \sqrt{m+1} |m+1\rangle + \beta \sqrt{n+1} |n+1\rangle \right. \\
 &\quad \left. + \alpha \sqrt{m} |m-1\rangle + \beta \sqrt{n} |n-1\rangle \right) \\
 &= \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} \left[\alpha^* \beta \left(\sqrt{n+1} \delta_{n+1,m} + \sqrt{n} \delta_{n-1,m} \right) \right. \\
 &\quad \left. + \alpha \beta^* \left(\sqrt{m+1} \delta_{n,m+1} + \sqrt{m} \delta_{n,m-1} \right) \right] \\
 &= \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} \left[\alpha^* \beta \left(\sqrt{m} \delta_{m,n+1} + \sqrt{m+1} \delta_{m+1,n} \right) \right. \\
 &\quad \left. + \alpha \beta^* \left(\sqrt{m} \delta_{m,n+1} + \sqrt{m+1} \delta_{m+1,n} \right) \right] \tag{4.3.2}
 \end{aligned}$$

(v posledním řádku byly přeuspořádány členy a využito δ funkcí k záměně čísel v odmocninách). Střední hodnota souřadnice je tedy nulová, pokud $|m-n| \neq 1$. Bez újmy na obecnosti stačí dále vyšetřovat případ $m = n + 1$, pro který

$$\langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle = \sqrt{\frac{\hbar m}{2M\Omega}} (\alpha^* \beta + \alpha \beta^*) = 2 \sqrt{\frac{\hbar m}{2M\Omega}} \operatorname{Re}(\alpha^* \beta). \tag{4.3.3}$$

Dalším krokem je tedy nalézt maximum této funkce vzhledem k α a β . Parametry α a β nejsou nezávislé, nýbrž jsou vázány podmínkou

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \tag{4.3.4}$$

plynoucí z normalizace vektoru $|\psi\rangle$.

Maximum lze určit dvěma způsoby:

- Absolutní hodnota součtu parametrů α a β je v přímém vztahu k reálné části součinu $\alpha^* \beta$,

$$|\alpha + \beta|^2 = (\alpha + \beta)^* (\alpha + \beta) = |\alpha|^2 + |\beta|^2 + 2 \operatorname{Re}(\alpha^* \beta) = 1 + 2 \operatorname{Re}(\alpha^* \beta). \tag{4.3.5}$$

takže namísto výrazu $2 \operatorname{Re}(\alpha^* \beta)$ se maximalizuje $|\alpha + \beta|$. Za dodatečné podmínky (4.3.4) je nejvyšší hodnoty dosaženo pro $\alpha = \beta = 1/\sqrt{2}$.

- Alternativně se dá využít polární reprezentace parametrů α a β

$$\alpha = \cos \theta e^{i\phi}, \quad \beta = \sin \theta, \tag{4.3.6}$$

kde $\theta, \phi \in [0, 2\pi)$ jsou dva úhly. Tato parametrizace automaticky splňuje podmínku (4.3.4). Střední hodnota (4.3.3) je v této parametrizaci

$$\langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle = \sqrt{\frac{\hbar m}{2M\Omega}} \sin 2\theta \cos \phi \tag{4.3.7}$$

a nabývá maximální hodnoty, pokud je $2\theta = \pi/2$ a zároveň $\phi = 0$. To odpovídá hodnotám $\alpha = \beta = 1/\sqrt{2}$.

Vektor, který maximalizuje střední hodnotu polohy, má tedy tvar

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|m\rangle + |m-1\rangle), \tag{4.3.8}$$

a střední hodnota operátoru souřadnice nabývá velikosti

$$\langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle = \sqrt{\frac{\hbar m}{2M\Omega}}. \tag{4.3.9}$$

2. Střední hodnota operátoru hybnosti pro stav $|\psi\rangle$ je

$$\langle\psi|\hat{p}|\psi\rangle = i\sqrt{\frac{\hbar M\Omega}{2}} \langle\psi|\hat{a}^\dagger - \hat{a}|\psi\rangle = 0. \quad (4.3.10)$$

3. Pro střední kvadratické odchylky je potřeba určit střední hodnoty kvadrátu operátorů souřadnice a hybnosti. K jejich výpočtu se využije již získaných vztahů (4.2.21) a (4.2.22):

$$\begin{aligned} \langle\psi|\hat{x}^2|\psi\rangle &= \frac{\hbar}{4M\Omega} (\langle n| + \langle n+1|) \left((\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^2 \right) (|n\rangle + |n+1\rangle) \\ &= \frac{\hbar}{4M\Omega} \left(\underbrace{\langle n|\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle}_{2n+1} + \underbrace{\langle n+1|\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}|n+1\rangle}_{2(n+1)+1} \right) \\ &= \frac{\hbar}{M\Omega} (n+1), \end{aligned} \quad (4.3.11a)$$

$$\langle\psi|\hat{p}^2|\psi\rangle = \hbar M\Omega (n+1). \quad (4.3.11b)$$

Střední kvadratické odchylky budou

$$\Delta_\psi \hat{x}^2 = \frac{\hbar}{M\Omega} (n+1) - \frac{\hbar}{2M\Omega} (n+1) = \frac{\hbar}{2M\Omega} (n+1), \quad (4.3.12a)$$

$$\Delta_\psi \hat{p}^2 = \hbar M\Omega (n+1) \quad (4.3.12b)$$

a relace neurčitosti pro harmonický oscilátor ve stavu $|\psi\rangle$ vycházejí

$$\Delta_\psi \hat{x}^2 \Delta_\psi \hat{p}^2 = \frac{\hbar^2}{2} (n+1)^2 > \frac{\hbar^2}{4}. \quad (4.3.13)$$

4.4 Posunutí harmonického oscilátoru

Je zadán operátor

$$\hat{T}(\alpha) = e^{-\alpha(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)}, \quad (4.4.1)$$

kde \hat{a} , \hat{a}^\dagger jsou posunovací operátory splňující komutační relace (4.1.2) a α je reálný parametr.

1. Ověřte, že operátor $\hat{T}(\alpha)$ je unitární.
2. Ukažte, čemu se rovná $\hat{T}^{-1}(\alpha) \hat{a} \hat{T}(\alpha)$ a $\hat{T}^{-1}(\alpha) \hat{a}^\dagger \hat{T}(\alpha)$.
3. Ukažte, čemu se rovná $\hat{T}^{-1}(\alpha) \hat{x} \hat{T}(\alpha)$ a $\hat{T}^{-1}(\alpha) \hat{p} \hat{T}(\alpha)$.
4. Ukažte, čemu se rovná $\hat{H}' = \hat{T}^{-1}(\alpha) \hat{H} \hat{T}(\alpha)$, kde \hat{H} je operátor harmonického oscilátoru (4.2.1). Určete spektrum \hat{H}' .
5. Nalezněte střední hodnotu operátoru souřadnice, je-li harmonický oscilátor ve stavu $|n; \alpha\rangle = \hat{T}(\alpha) |n\rangle$, kde $|n\rangle$ je vlastní vektor harmonického oscilátoru příslušející k energii E_n .

Řešení:

1. Unitarita se ověří přímo z definice za využití vztahu (1.4.1) (v obou exponenciálách se vyskytuje stejný operátor $\hat{A} \equiv \hat{a} - \hat{a}^\dagger$, který samozřejmě komutuje sám se sebou)

$$\hat{T}^\dagger(\alpha) \hat{T}(\alpha) = e^{-\alpha(\hat{a}^\dagger - \hat{a})} e^{-\alpha(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)} = e^{\alpha(\hat{a} - \hat{a}^\dagger) - \alpha(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)} = e^0 = \hat{1}. \quad (4.4.2)$$

2. Z BCH formule (1.4.2) plyne

$$\begin{aligned}
 \hat{T}^{-1}(\alpha)\hat{a}\hat{T}(\alpha) &= e^{\alpha(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)}\hat{a}e^{-\alpha(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)}+\dots \\
 &= \hat{a} + \left[\alpha(\hat{a}-\hat{a}^\dagger), \hat{a} \right] + \dots \\
 &= \hat{a} + \underbrace{\alpha[\hat{a}, \hat{a}]}_0 + \underbrace{\alpha[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]}_1 + \dots \\
 &= \hat{a} + \alpha
 \end{aligned} \tag{4.4.3}$$

(ostatní členy v rozvoji jsou nulové, jelikož komutátor odpovídající operátoru \hat{K}_1 je číslo, a tudíž vnořené komutátory vymizí). Stejný výraz vyjde i pro operátor \hat{a}^\dagger :

$$\hat{T}^{-1}(\alpha)\hat{a}^\dagger\hat{T}(\alpha) = \hat{a}^\dagger + \alpha. \tag{4.4.4}$$

3. Operátor souřadnice \hat{x} se vyjádří pomocí posunovacích operátorů (4.2.17) a poté se využije výsledků z předchozího bodu:

$$\begin{aligned}
 \hat{T}^{-1}(\alpha)\hat{x}\hat{T}(\alpha) &= \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}}\hat{T}^{-1}(\alpha)(\hat{a}^\dagger + \hat{a})\hat{T}(\alpha) \\
 &= \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}}(\hat{a}^\dagger + \hat{a} + 2\alpha) \\
 &= \hat{x} + \alpha\sqrt{\frac{2\hbar}{M\Omega}}.
 \end{aligned} \tag{4.4.5}$$

Operátor $\hat{T}(\alpha)$ je speciální verze operátoru posunutí (1.5.1) o vzdálenost

$$d = \alpha\sqrt{\frac{2\hbar}{M\Omega}} = \sqrt{2}\alpha x_0. \tag{4.4.6}$$

To lze nahlédnout i přímo ze skutečnosti, že v argumentu exponenciály operátoru \hat{T} lze vyjádřit rozdíl $\hat{a} - \hat{a}^\dagger$ pomocí operátoru hybnosti (4.2.17),

$$\hat{a} - \hat{a}^\dagger = i\sqrt{\frac{2}{\hbar M\Omega}}\hat{p}, \tag{4.4.7}$$

takže

$$\hat{T}(\alpha) = e^{-\frac{i}{\hbar}\sqrt{\frac{2\hbar}{M\Omega}}\hat{p}} = e^{-\frac{i}{\hbar}d\hat{p}}, \tag{4.4.8}$$

což je forma ekvivalentní s (1.5.1). Jelikož operátor posunutí komutuje s operátorem hybnosti, je

$$\hat{T}^{-1}(\alpha)\hat{p}\hat{T}(\alpha) = \hat{p}. \tag{4.4.9}$$

4. Ze vztahů (4.4.3) a (4.4.4) vyplývá:

$$\begin{aligned}
 \hat{H}' &= \hat{T}^{-1}(\alpha)\hbar\Omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right)\hat{T}(\alpha) \\
 &= \hbar\Omega\left(\hat{T}^{-1}(\alpha)\hat{a}^\dagger\hat{T}(\alpha)\hat{T}^{-1}(\alpha)\hat{a}\hat{T}(\alpha) + \frac{1}{2}\right) \\
 &= \hbar\Omega\left[(\hat{a}^\dagger + \alpha)(\hat{a} + \alpha) + \frac{1}{2}\right] \\
 &= \hbar\Omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right) + \underbrace{\alpha\hbar\Omega(\hat{a}^\dagger + \hat{a})}_{\sqrt{\frac{2M\Omega}{\hbar}}\hat{x}} + \alpha^2\hbar\Omega \\
 &= \hat{H} + \alpha\Omega\sqrt{2\hbar\Omega M}\hat{x} + \alpha^2\hbar\Omega.
 \end{aligned} \tag{4.4.10}$$

Hamiltonián \hat{H}' má stejné vlastní hodnoty jako \hat{H} , jelikož oba dva spolu souvisí unitární transformací danou operátorem $\hat{T}(\alpha)$. Vlastní vektory posunutého Hamiltoniánu \hat{H}' jsou

$$|n; \alpha\rangle \equiv \hat{T}^{-1}(\alpha)|n\rangle. \tag{4.4.11}$$

5. Střední hodnota operátoru \hat{x} pro harmonický oscilátor ve stavu $|n; \alpha\rangle$ vychází

$$\langle n; \alpha | \hat{x} | n; \alpha \rangle = \left\langle n \left| \underbrace{\hat{T}^{-1}(\alpha) \hat{x} \hat{T}(\alpha)}_{\hat{x}+d} \right| n \right\rangle = \underbrace{\langle n | \hat{x} | n \rangle}_0 + d \underbrace{\langle n | n \rangle}_1 = d. \quad (4.4.12)$$

4.5 Nabitý harmonický oscilátor v elektrickém poli

Částice s nábojem q se nachází v potenciálu harmonického oscilátoru, a navíc v konstantním homogenním elektrickém poli intenzity \mathcal{E} , směřujícím podél souřadné osy z . Nalezněte spektrum tohoto systému.

Řešení:

Hamiltonián harmonického oscilátoru v homogenním elektrickém poli

$$\hat{H}'(\mathcal{E}) = \frac{1}{2M} \hat{p}^2 + \frac{1}{2} M \Omega^2 \hat{x}^2 - q \mathcal{E} \hat{x} \quad (4.5.1)$$

se přepíše pomocí výsledku (4.4.10) předchozího příkladu,

$$\hat{H}'(\mathcal{E}) = \hat{H} - q \mathcal{E} \hat{x} = \hat{T}^{-1}(\alpha) \hat{H} \hat{T}(\alpha) - e_0, \quad (4.5.2)$$

kde

$$\alpha \Omega \sqrt{2\hbar\Omega M} = -q \mathcal{E} \quad \Rightarrow \quad \alpha = -\frac{q \mathcal{E}}{\Omega} \sqrt{\frac{1}{2\hbar\Omega M}}, \quad (4.5.3a)$$

$$e_0 = \alpha^2 \hbar \Omega = \frac{q^2 \mathcal{E}^2}{\Omega^2} \frac{\hbar \Omega}{2\hbar\Omega M} = \frac{q^2 \mathcal{E}^2}{2M\Omega^2}, \quad (4.5.3b)$$

$$d = -\frac{q \mathcal{E}}{M\Omega^2}. \quad (4.5.3c)$$

Vlastní hodnoty a vlastní vektory Hamiltoniánu $\hat{H}'(\mathcal{E})$ tedy jsou

$$E'_n = E_n - e_0 = \hbar \Omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{q^2 \mathcal{E}^2}{2M\Omega^2} \quad (4.5.4a)$$

$$|n\rangle' = \hat{T}^{-1} \left(-\frac{q \mathcal{E}}{\Omega} \sqrt{\frac{1}{2\hbar\Omega M}} \right) |n\rangle. \quad (4.5.4b)$$

Vlnové funkce $\psi'_n(x) \equiv \langle x | n \rangle'$ jsou oproti vlnovým funkcím harmonického oscilátoru posunuté v souřadnici o vzdálenost d , viz (1.5.11).

K výsledku lze alternativně dospět tak, že se Hamiltonián $\hat{H}'(\mathcal{E})$ upraví na úplný čtverec a převede na tvar \hat{H} vhodným přeznačením souřadnice.