

1 Operátor a jeho funkce, komutátor

Funkce operátoru

Uvedeme dvě možnosti, jak zavést funkci operátoru \hat{A} na základě funkce reálného argumentu $f(\xi)$.

1. *Rozvojem do řady*: Předpokládejme, že existuje rozvoj funkce $f(\xi)$ do mocninné řady v okolí bodu $\xi = 0$ (*Maclaurinova řada*):

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

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

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

Příklad:

$$e^{\hat{A}} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^n}{n!} \quad (1.0.3)$$

2. *Sylvestrova formule*: Předpokládejme, že operátor \hat{A} je samosdružený a známe jeho spektrální rozklad

$$\hat{A} = \sum_k A_k \hat{P}_k, \quad (1.0.4)$$

kde $\hat{P}_k = |A_k\rangle \langle A_k|$ je projektor na podprostor příslušející reálné nedegenerované vlastní hodnotě A_k . Je-li funkce $f(\xi)$ analytická v bodech $\xi = A_k$, lze funkci operátoru A vyjádřit jako

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

Komutátor

Komutátor dvou operátorů \hat{A} a \hat{B} se definuje jako

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (1.0.6)$$

a splňuje mimo jiné tyto vlastnosti:

1. *Antisymetrie*

$$[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}] \quad (1.0.7)$$

2. *Jacobiho identita*

$$[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0. \quad (1.0.8)$$

1.1 Komutátor součinu

Pomocí jednoduchých komutátorů vyjádřete komutátor

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}]. \quad (1.1.1)$$

Řešení:

Komutátor rozepíšeme podle definice (1.0.6). Poté k němu přičteme a odečteme vhodně zvolený člen:

$$\begin{aligned} [\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] &= \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}\hat{B} + \underbrace{\hat{A}\hat{C}\hat{B} - \hat{A}\hat{C}\hat{B}}_{=0} \\ &= \hat{A}(\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{B}) + (\hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A})\hat{B} \\ &= \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}. \end{aligned} \quad (1.1.2)$$

Podobně bychom ukázali, že

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] \quad (1.1.3)$$

a pro čtyři operátory

$$\begin{aligned} [\hat{A}\hat{B}, \hat{C}\hat{D}] &= \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}]\hat{D} + \hat{A}\hat{C}[\hat{B}, \hat{D}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{D}\hat{B} + \hat{C}[\hat{A}, \hat{D}]\hat{B} \\ &= \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}]\hat{D} + \hat{C}\hat{A}[\hat{B}, \hat{D}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}\hat{D} + \hat{C}[\hat{A}, \hat{D}]\hat{B}. \end{aligned} \quad (1.1.4)$$

1.2 Komutátor inverzního operátoru

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

Řešení:

Využijeme skutečnosti, že

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{B}^{-1}] = [\hat{A}, \hat{I}] = 0, \quad (1.2.1)$$

a rozvineme tento komutátor pomocí formule (1.1.3) z předchozího příkladu:

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{B}^{-1}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{B}^{-1} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{B}^{-1}]. \quad (1.2.2)$$

Dostaneme tedy

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

Dalším přirozeným krokem je ukázat, že

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

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

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

Řešení:

1. Vyřešíme přímočarým použitím vzorce (1.1.2):

$$[\hat{x}^2, \hat{p}] = [\hat{x}\hat{x}, \hat{p}] = \hat{x}[\hat{x}, \hat{p}] + [\hat{x}, \hat{p}]\hat{x} = 2i\hbar\hat{x}. \quad (1.3.1)$$

2. Opakujeme proceduru z předchozího bodu. Dostaneme

$$[\hat{x}^n, \hat{p}] = ni\hbar\hat{x}^{n-1}. \quad (1.3.2)$$

Platnost tohoto vztahu lze formálně dokázat matematickou indukcí.

3. Využijeme definice funkce operátoru (1.0.2):

$$\begin{aligned} [f(\hat{x}), \hat{p}] &= \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} \hat{x}^n, \hat{p} \right] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} [\hat{x}^n, \hat{p}] \\ &= i\hbar \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} n\hat{x}^{n-1} = |m = n - 1| \\ &= i\hbar \sum_{m=0}^{\infty} \frac{f^{(m+1)}(0)}{m!} \hat{x}^m = i\hbar f'(\hat{x}). \end{aligned} \quad (1.3.3)$$

(pod derivací funkce operátoru rozumíme $f^{(n)}(\hat{x}) = df^{(n)}(\xi)/d\xi^n|_{\xi=\hat{x}}$).

Analogickým postupem dostaneme

$$[\hat{x}, f(\hat{p})] = i\hbar f'(\hat{p}). \quad (1.3.4)$$

1.4 Exponenciála operátorů

1. Jsou-li \hat{A} , \hat{B} dva komutující operátory, $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, dokažte, že

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} = e^{\hat{B}} e^{\hat{A}}. \quad (1.4.1)$$

2. Pro obecné nekomutující operátory \hat{A} , \hat{B} ukažte, že platí:

$$e^{\hat{A}} \hat{B} e^{-\hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{K}_n}{n!}, \quad (1.4.2)$$

kde $\hat{K}_0 = \hat{B}$ a $\hat{K}_{n+1} = [\hat{A}, \hat{K}_n]$.

Poznámka: Tento vztah se někdy nazývá *Baker-Campbell-Hausdorffova (BCH) nebo Hausdorffova formule*.

3. Dokažte, že pro libovolné nekomutující operátory \hat{B} , \hat{C} platí:

$$e^{\hat{C}\hat{B}\hat{C}^{-1}} = \hat{C} e^{\hat{B}} \hat{C}^{-1}. \quad (1.4.3)$$

Použitím posledního vztahu lze přepsat rovnici (1.4.2) do jiného, také často užívaného tvaru

$$e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} e^{-\hat{A}} = e^{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{K}_n}{n!}}. \quad (1.4.4)$$

Řešení:

1. Vyjdeme z rozvoje exponenciály operátoru (1.0.3):

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

Komutativitu operátorů \hat{A} a \hat{B} jsme využili v binomickém rozvoji.

2. Označíme $f(\xi) = e^{\xi\hat{A}} \hat{B} e^{-\xi\hat{A}}$. Levá strana BCH formule je pak rovna $f(1)$. Funkci $f(\xi)$ rozvineme do mocninné řady dané pravou stranou BCH formule, přičemž pro její koeficienty dostaneme

$$\begin{aligned} \hat{K}_0 &= f(0) = \hat{B} \\ \hat{K}_1 &= f'(0) = \left\{ \left(e^{\xi\hat{A}} \hat{A} \right) \hat{B} e^{-\xi\hat{A}} + e^{\xi\hat{A}} \hat{B} \left(-\hat{A} e^{-\xi\hat{A}} \right) \right\}_{\xi=0} = \left\{ e^{\xi\hat{A}} [\hat{A}, \hat{B}] e^{-\xi\hat{A}} \right\}_{\xi=0} \\ &= [\hat{A}, \hat{B}] = [\hat{A}, \hat{K}_0] \\ \hat{K}_2 &= f''(0) = \left\{ \frac{d}{d\xi} e^{\xi\hat{A}} [\hat{A}, \hat{B}] e^{-\xi\hat{A}} \right\}_{\xi=0} \\ &= \left\{ \left(e^{\xi\hat{A}} \hat{A} \right) [\hat{A}, \hat{B}] e^{-\xi\hat{A}} + e^{\xi\hat{A}} [\hat{A}, \hat{B}] \left(-\hat{A} e^{-\xi\hat{A}} \right) \right\}_{\xi=0} \\ &= [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = [\hat{A}, \hat{K}_1] \\ &\vdots \end{aligned} \quad (1.4.5)$$

3. Opět budeme postupovat tak, že levou stranu výrazu (1.4.3) rozvineme do řady podle vztahu (1.0.3):

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

Rovnici (1.4.4) dostaneme z (1.4.2), přiřadíme-li $\hat{C} \equiv e^{\hat{A}}$.

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

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

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.

Řešení:

1. Unitární operátor musí splňovat rovnost

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

Dosadíme vyjádření (1.5.1):

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

(postupně jsme využili samosdruženosti operátoru \hat{p} a vztahu (1.4.1)).

Stejným způsobem se přímočaře ukáže, že

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

2. Vyjdeme z rozvoje BCH formule (1.4.2). V našem případě je

$$\hat{A} \equiv \frac{i}{\hbar}a\hat{p}, \quad \hat{B} \equiv \hat{x},$$

takže

$$\begin{aligned} \hat{K}_0 &= \hat{x} \\ \hat{K}_1 &= \left[\frac{i}{\hbar}a\hat{p}, \hat{x} \right] = \frac{i}{\hbar}a(-i\hbar) = a \\ \hat{K}_2 &= \hat{K}_3 = \dots = 0. \end{aligned}$$

Výsledek tedy zní

$$\boxed{\hat{T}^{-1}(a)\hat{x}\hat{T}(a) = \hat{x} + a}. \quad (1.5.5)$$

3. Víme, že platí $\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$. Hledejme neprve, čemu je rovno $\hat{x}\hat{T}(a)|x\rangle$. Vyjdeme z výsledku předchozího bodu:

$$\hat{x}\hat{T}(a)|x\rangle = \hat{T}(a)(\hat{x} + a)|x\rangle = \hat{T}(a)(x + a)|x\rangle = (x + a)\hat{T}(a)|x\rangle. \quad (1.5.6)$$

Stav $\hat{T}(a)|x\rangle$ tedy přísluší vlastní hodnotě $x + a$ operátoru \hat{x} , označíme ho proto

$$\boxed{|x + a\rangle \equiv \hat{T}(a)|x\rangle}. \quad (1.5.7)$$

Obdobně

$$\langle x - a| = \langle x|\hat{T}^\dagger(-a) = \langle x|\hat{T}(a). \quad (1.5.8)$$

Z posledních dvou vztahů plyne

$$\hat{T}(a)\psi(x) = \langle x|\hat{T}(a)\psi\rangle = \langle x - a|\psi\rangle = \psi(x - a). \quad (1.5.9)$$

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

1.6 Rotace operátoru spinu

Jsou dány samosdružené operátory $\hat{S}_1, \hat{S}_2, \hat{S}_3$, které splňují komutační relace pro moment hybnosti,

$$[\hat{S}_j, \hat{S}_k] = i\hbar\epsilon_{jkl}\hat{S}_l, \quad (1.6.1)$$

a operátor

$$\hat{R}_3(\phi) = e^{-\frac{i}{\hbar}\phi\hat{S}_3}, \quad (1.6.2)$$

s reálným parametrem ϕ . Ukažte, čemu se rovnají výrazy

$$\hat{R}_3^{-1}(\phi)\hat{S}_1\hat{R}_3(\phi), \quad \hat{R}_3^{-1}(\phi)\hat{S}_2\hat{R}_3(\phi).$$

Řešení:

Budeme počítat první z hledaných výrazů. Stejně jako v předchozím příkladu vyjdeme z BCH formule (1.4.2), do které nyní dosadíme

$$\hat{A} \equiv \frac{i}{\hbar}\phi\hat{S}_3, \quad \hat{B} \equiv S_1.$$

Dostaneme (s využitím komutačních relací)

$$\begin{aligned} \hat{K}_0 &= \hat{S}_1, \\ \hat{K}_1 &= \left[\frac{i}{\hbar}\phi\hat{S}_3, \hat{S}_1 \right] = \frac{i}{\hbar}\phi [\hat{S}_3, \hat{S}_1] = -\phi\hat{S}_2, \\ \hat{K}_2 &= \left[\frac{i}{\hbar}\phi\hat{S}_3, -\phi\hat{S}_2 \right] = -\frac{i}{\hbar}\phi^2 [\hat{S}_3, \hat{S}_2] = -\phi^2\hat{S}_1, \\ \hat{K}_3 &= \left[\frac{i}{\hbar}\phi\hat{S}_3, -\phi^2\hat{S}_1 \right] = -\frac{i}{\hbar}\phi^3 [\hat{S}_3, \hat{S}_1] = \phi^3\hat{S}_2, \\ &\vdots \end{aligned}$$

což dosadíme do řady (1.4.2), kterou následně sečteme:

$$\begin{aligned} \hat{R}_3^{-1}(\phi)\hat{S}_1\hat{R}_3(\phi) &= \frac{1}{0!}\hat{S}_1 - \frac{1}{1!}\phi\hat{S}_2 - \frac{1}{2!}\phi^2\hat{S}_1 + \frac{1}{3!}\phi^3\hat{S}_2 + \dots \\ &= \underbrace{\left[\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k)!} \phi^{2k} \right]}_{\cos \phi} \hat{S}_1 - \underbrace{\left[\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k+1)!} \phi^{2k+1} \right]}_{\sin \phi} \hat{S}_2 \\ &= \boxed{\hat{S}_1 \cos \phi - \hat{S}_2 \sin \phi}. \end{aligned} \quad (1.6.3)$$

Analogicky pro druhý vztah:

$$\boxed{\hat{\mathbf{R}}_3^{-1}(\phi)\hat{\mathbf{S}}_2\hat{\mathbf{R}}_3(\phi) = \hat{\mathbf{S}}_1 \sin \phi + \hat{\mathbf{S}}_2 \cos \phi}. \quad (1.6.4)$$

Poznámka: Operátor $\hat{\mathbf{R}}_3(\phi)$ je *operátor rotace* o úhel ϕ okolo osy z .