3 Posunovací operátory, harmonický oscilátor

3.1 Jednoduchý algebraický systém

Mějme operátor $\hat{\mathsf{a}}$ a operátor $\hat{\mathsf{a}}^\dagger$ k němu sdružený, které mezi sebou splňují komutační relace[4,5]

$$\left[\hat{\mathsf{a}}, \hat{\mathsf{a}}^\dagger\right] = 1\,. \tag{3.1.2}$$

Definujme operátor

$$\hat{\mathsf{n}} \equiv \hat{\mathsf{a}}^\dagger \hat{\mathsf{a}} \tag{3.1.3}$$

1. Ukažte, že operátor $\hat{\mathsf{n}}$ je samosdružený a pozitivně definitní.
2. Nalezněte, čemu se rovnají komutátory $\left[\hat{\mathsf{n}}, \hat{\mathsf{a}}^k\right]$ a $\left[\hat{\mathsf{n}}, \hat{\mathsf{a}}^{\dagger k}\right]$, kde $k \in \ $.
3. Ukažte, čemu se rovná $\hat{\mathsf{a}}^\dagger \left|n\right\rangle$, $\hat{\mathsf{a}} \left|n\right\rangle$, kde $\left|n\right\rangle$ je vlastní vektor operátoru $\hat{\mathsf{n}}$ příslušející vlastní hodnotě n.
4. Nalezněte vlastní hodnoty n operátoru $\hat{\mathsf{n}}$.
5. Nalezněte normalizované vlastní vektory operátoru $\hat{\mathsf{n}}$.

Řešení:

1. Samosdruženost plyne z identit

$$\hat{\mathsf{n}}^\dagger = \left(\hat{\mathsf{a}}^\dagger \hat{\mathsf{a}}\right)^\dagger = \hat{\mathsf{a}}^\dagger \left(\hat{\mathsf{a}}^\dagger\right)^\dagger = \hat{\mathsf{a}}^\dagger \hat{\mathsf{a}} = \hat{\mathsf{n}}\,. \tag{3.1.4}$$

K dokázání pozitivity operátoru $\hat{\mathsf{n}}$ stačí ukázat, že všechny jeho vlastní hodnoty jsou nezáporné. Předpokládejme, že existuje normalizovaný vlastní vektor $\left|n\right\rangle$, $\left\langle n|n\right\rangle = 1$ operátoru $\hat{\mathsf{n}}$:

$$\hat{\mathsf{n}} \left|n\right\rangle = n \left|n\right\rangle\,, \tag{3.1.5}$$

kde n je nějaké číslo, které musí být reálné díky samosdruženosti operátoru $\hat{\mathsf{n}}$. Zbývá ukázat, že n je nezáporné. Platí

$$\left\langle n\middle|\hat{\mathsf{n}}\middle|n\right\rangle = n \left\langle n|n\right\rangle = n \tag{3.1.6}$$

a zároveň

$$\left\langle n\middle|\hat{\mathsf{n}}\middle|n\right\rangle = \left\langle n\middle|\hat{\mathsf{a}}^\dagger \hat{\mathsf{a}}\middle|n\right\rangle = \left|\hat{\mathsf{a}} \left|n\right\rangle\right|^2 \geq 0\,, \tag{3.1.7}$$

takže

$$n \geq 0\,. \tag{3.1.8}$$

[4] Vztahu (3.1.2) je třeba rozumět ve smyslu $\left[\hat{\mathsf{a}}, \hat{\mathsf{a}}^\dagger\right] = \hat{1}$, kde $\hat{1}$ je operátor identity, podobně jako je tomu například u komutačních relací samosdružených operátorů souřadnice a hybnosti $[\hat{\mathsf{x}}, \hat{\mathsf{p}}] = i\hbar\hat{1}$.

[5] Obecněji lze uvažovat komutační relace

$$\left[\hat{\mathsf{A}}, \hat{\mathsf{A}}^\dagger\right] = m\,, \qquad m \in \ ^+\,. \tag{3.1.1}$$

Ty přejdou na (3.1.2) přeškálováním $\hat{\mathsf{a}} = \hat{\mathsf{A}}/\sqrt{m}$.

2. Spočítáme nejprve

$$[\hat{\mathsf{n}}, \hat{\mathsf{a}}] = \left[\hat{\mathsf{a}}^\dagger \hat{\mathsf{a}}, \hat{\mathsf{a}}\right] = \hat{\mathsf{a}}^\dagger \underbrace{[\hat{\mathsf{a}}, \hat{\mathsf{a}}]}_{0} + \underbrace{\left[\hat{\mathsf{a}}^\dagger, \hat{\mathsf{a}}\right]}_{-1} \hat{\mathsf{a}} = -\hat{\mathsf{a}} \,, \tag{3.1.9}$$

kde jsme v druhé rovnosti využili rozvoje komutátoru (1.1.2) a v poslední rovnosti vztahu (3.1.2). Dále dostáváme

$$\begin{aligned}\left[\hat{\mathsf{n}}, \hat{\mathsf{a}}^k\right] &= \left[\hat{\mathsf{n}}, \hat{\mathsf{a}}^{k-1}\hat{\mathsf{a}}\right] = \hat{\mathsf{a}}^{k-1} \underbrace{[\hat{\mathsf{n}}, \hat{\mathsf{a}}]}_{-\hat{\mathsf{a}}} + \left[\hat{\mathsf{n}}, \hat{\mathsf{a}}^{k-1}\right] \hat{\mathsf{a}} \\ &= -\hat{\mathsf{a}}^k + \left[\hat{\mathsf{n}}, \hat{\mathsf{a}}^{k-2}\hat{\mathsf{a}}\right] \hat{\mathsf{a}} = -\hat{\mathsf{a}}^k + \hat{\mathsf{a}}^{k-2} \underbrace{[\hat{\mathsf{n}}, \hat{\mathsf{a}}]}_{-\hat{\mathsf{a}}} \hat{\mathsf{a}} + \left[\hat{\mathsf{n}}, \hat{\mathsf{a}}^{k-2}\right] \hat{\mathsf{a}}^2 \\ &= -2\hat{\mathsf{a}}^k + \left[\hat{\mathsf{n}}, \hat{\mathsf{a}}^{k-3}\hat{\mathsf{a}}\right] \hat{\mathsf{a}}^2 = \cdots = -k\hat{\mathsf{a}}^k \,.\end{aligned} \tag{3.1.10}$$

Zcela analogicky se ukáže, že

$$\left[\hat{\mathsf{n}}, \hat{\mathsf{a}}^{\dagger k}\right] = k\hat{\mathsf{a}}^{\dagger k} \,. \tag{3.1.11}$$

3. Vlastní hodnoty a vektory operátoru $\hat{\mathsf{n}}$ musejí splňovat rovnici (3.1.5), kde $n \geq 0$. Předpokládejme, že $n \neq 0$ a příslušející vlastní stav $|n\rangle$ je normovaný, $|\langle n|n\rangle| = 1$. Hledáme, čemu se bude rovnat, když na tento stav zapůsobíme operátorem $\hat{\mathsf{n}}\hat{\mathsf{a}}$. Využijeme přitom vztah (3.1.9):

$$\hat{\mathsf{n}}\hat{\mathsf{a}} \, |n\rangle \; = (\hat{\mathsf{a}}\hat{\mathsf{n}} + [\hat{\mathsf{n}}, \hat{\mathsf{a}}]) \, |n\rangle = (\hat{\mathsf{a}}\hat{\mathsf{n}} - \hat{\mathsf{a}}) \, |n\rangle = (n-1) \, \hat{\mathsf{a}} \, |n\rangle \;. \tag{3.1.12}$$

Analogicky bychom našli

$$\hat{\mathsf{n}}\hat{\mathsf{a}}^\dagger \, |n\rangle = (n+1) \, \hat{\mathsf{a}}^\dagger \, |n\rangle \;. \tag{3.1.13}$$

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

$$\begin{aligned}\left|\left\langle n\middle|\hat{\mathsf{a}}^\dagger\hat{\mathsf{a}}\middle|n\right\rangle\right| &= |\langle n|\hat{\mathsf{n}}|n\rangle| = n \, |\langle n|n\rangle| = n \,, \\ \left|\left\langle n\middle|\hat{\mathsf{a}}\hat{\mathsf{a}}^\dagger\middle|n\right\rangle\right| &= \left|\left\langle n\middle|\hat{\mathsf{a}}^\dagger\hat{\mathsf{a}} + 1\middle|n\right\rangle\right| = n + 1 \,.\end{aligned}$$

Normované vlastní vektory označíme

$$\boxed{\begin{aligned}|n-1\rangle &\equiv \frac{1}{\sqrt{n}} \, \hat{\mathsf{a}} \, |n\rangle \;, \\ |n+1\rangle &\equiv \frac{1}{\sqrt{n+1}} \, \hat{\mathsf{a}}^\dagger \, |n\rangle \;.\end{aligned}} \tag{3.1.14}$$

4. Opakovaným působením operátoru $\hat{\mathsf{a}}$ můžeme pokračovat dál k normovanému vektoru

$$|n-k\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{n(n-1)\cdots(n-k)}} \, \hat{\mathsf{a}}^k \, |n\rangle \;, \tag{3.1.15}$$

což je vlastní vektor operátoru $\hat{\mathsf{n}}$ příslušející vlastní hodnotě $n-k$. Pozitivita operátoru $\hat{\mathsf{n}}$ nicméně omezuje hodnoty k: stále musí být splněno, že $n - k \geq 0$. Jelikož k můžeme volit libovolně, musí spektrum tohoto operátoru obsahovat hodnotu 0, pro kterou platí

$$\hat{\mathsf{n}} \, |0\rangle = 0 \, |0\rangle = 0 \,, \tag{3.1.16}$$

a tedy další aplikace operátoru $\hat{\mathsf{a}}$ dají identicky nulu.

Spektrum operátoru $\hat{\mathsf{n}}$ jsou tedy všechna nezáporná celá čísla $n \in {}_0$.

5. Normalizované vlastní vektory $|n\rangle$ lze nagenerovat ze stavu $|0\rangle$ pomocí operátoru $\hat{\mathsf{a}}^\dagger$, viz (3.1.14):

$$\boxed{|n\rangle = \frac{\left(\hat{\mathsf{a}}^\dagger\right)^n}{\sqrt{n!}}\,|0\rangle\ .} \tag{3.1.17}$$

Poznámka: Operátory $\hat{\mathsf{a}}$, $\hat{\mathsf{a}}^\dagger$ posouvají vlastní stav operátoru $\hat{\mathsf{n}}$ z vyšší vlastní hodnoty na nižší a naopak, proto se nazývají *posunovací operátory*.

3.2 Jednorozměrný harmonický oscilátor

Harmonický oscilátor je popsán Hamiltoniánem

$$\hat{\mathsf{H}} = \frac{1}{2M}\hat{\mathsf{p}}^2 + \frac{1}{2}M\Omega^2\hat{\mathsf{x}}^2\,, \tag{3.2.1}$$

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

$$[\hat{\mathsf{x}}, \hat{\mathsf{p}}] = \mathrm{i}\hbar\,. \tag{3.2.2}$$

V harmonickém oscilátoru lze vhodně nadefinovat operátory $\hat{\mathsf{a}}$, $\hat{\mathsf{a}}^\dagger$, a tím jej převést na algebraický systém, který jsme vyřešili v předchozím příkladu 3.1. Hledejte $\hat{\mathsf{a}}$ ve tvaru

$$\hat{\mathsf{a}} = \alpha\hat{\mathsf{x}} + \beta\hat{\mathsf{p}}\,, \qquad \alpha, \beta \in \quad . \tag{3.2.3}$$

1. Nalezněte hodnoty konstant α, β a zapište Hamiltonián $\hat{\mathsf{H}}$ pomocí operátorů $\hat{\mathsf{a}}$, $\hat{\mathsf{a}}^\dagger$.

2. Napište spektrum (vlastní energie a vlastní vektory) Hamiltoniánu.

3. Vyjádřete operátory hybnosti $\hat{\mathsf{p}}$ a souřadnice $\hat{\mathsf{x}}$ pomocí operátorů $\hat{\mathsf{a}}$, $\hat{\mathsf{a}}^\dagger$.

4. Spočítejte střední hodnoty

$$\langle n|\hat{\mathsf{x}}|n\rangle\ , \tag{3.2.4}$$
$$\langle n|\hat{\mathsf{p}}|n\rangle\ , \tag{3.2.5}$$
$$\left\langle n\middle|\hat{\mathsf{x}}^2\middle|n\right\rangle\ , \tag{3.2.6}$$
$$\left\langle n\middle|\hat{\mathsf{p}}^2\middle|n\right\rangle\ , \tag{3.2.7}$$

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

5. Spočítejte střední hodnoty

$$\left\langle n\middle|\hat{\mathsf{T}}\middle|n\right\rangle\ , \tag{3.2.8}$$
$$\left\langle n\middle|\hat{\mathsf{V}}\middle|n\right\rangle\ , \tag{3.2.9}$$

   kde $\hat{\mathsf{T}}$ a $\hat{\mathsf{V}}$ jsou operátory kinetické, resp. potenciální energie oscilátoru, a srovnejte s hodnotou energie ve stavu $|n\rangle$ (viriálový 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. Nejprve vyjádříme operátor $\hat{\mathsf{n}}$. Dosadíme do (3.1.3) a dostaneme

$$\begin{aligned}\hat{\mathsf{n}} = \hat{\mathsf{a}}^\dagger\hat{\mathsf{a}} &= (\alpha^*\hat{\mathsf{x}} + \beta^*\hat{\mathsf{p}})(\alpha\hat{\mathsf{x}} + \beta\hat{\mathsf{p}}) \\ &= |\alpha|^2\hat{\mathsf{x}}^2 + \alpha^*\beta\underbrace{\hat{\mathsf{x}}\hat{\mathsf{p}}}_{\hat{\mathsf{p}}\hat{\mathsf{x}}+\mathrm{i}\hbar} + \alpha\beta^*\hat{\mathsf{p}}\hat{\mathsf{x}} + |\beta|^2\hat{\mathsf{p}}^2 \\ &= |\alpha|^2\hat{\mathsf{x}}^2 + (\alpha^*\beta + \alpha\beta^*)\hat{\mathsf{p}}\hat{\mathsf{x}} + \mathrm{i}\hbar\alpha^*\beta + |\beta|^2\hat{\mathsf{p}}^2 \,. \end{aligned} \tag{3.2.10}$$

Srovnáváme-li s Hamiltoniánem (3.2.1), vidíme, že až na konstantní člen lze Hamiltonián zkonstruovat z operátoru n, pokud vynulujeme členy mísící souřadnici a hybnost,

$$\alpha^*\beta + \alpha\beta^* = 0\,. \tag{3.2.11}$$

Z této podmínky plyne, že $\alpha^*\beta$ musí být ryze imaginární číslo. Bez újmy na obecnosti můžeme nyní zvolit α reálné a β ryze imaginární. Vidíme, že Hamiltonián musí jít zapsat ve tvaru

$$\hat{\mathsf{H}} = \gamma\hat{\mathsf{n}} + \delta\,, \tag{3.2.12}$$

kde γ a δ jsou reálná čísla.

Dále požadujeme splnění komutačních relací (3.1.2)

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

takže musí platit

$$\alpha\beta^* = \frac{1}{2\mathrm{i}\hbar}\,. \tag{3.2.13}$$

Srovnáním příslušných členů výrazu (3.2.10) s Hamiltoniánem (3.2.1) a využitím podmínky (3.2.13) lze přiřadit konstantám hodnoty

$$\begin{aligned}\alpha &= \frac{1}{\sqrt{\gamma}}\sqrt{\frac{1}{2}M\Omega^2}\,, \\ \beta &= \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{\gamma}}\sqrt{\frac{1}{2M}}\,, \\ \gamma &= \hbar\Omega\,, \\ \delta &= \frac{\gamma}{2} = \frac{\hbar\Omega}{2}\,.\end{aligned} \tag{3.2.14}$$

Výsledkem je vyjádření Hamiltoniánu

$$\boxed{\hat{\mathsf{H}} = \hbar\Omega\left(\hat{\mathsf{a}}^\dagger\hat{\mathsf{a}} + \frac{1}{2}\right)}\,. \tag{3.2.15}$$

2. Spektrum nalezneme ze vzorce (3.1.5):

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

takže

$$\boxed{E_k = \hbar\Omega\left(k + \frac{1}{2}\right)\,, \qquad k \in \ {}_0} \tag{3.2.16}$$

a vlastní vektory jsou totožné s vlastními vektory operátoru $\hat{\mathsf{n}}$.

3. Dosadíme α, β a γ z (3.2.14) do (3.2.3), čímž dostaneme[6]

$$\begin{aligned}
\hat{\mathsf{a}} = \frac{\hat{\mathsf{A}}}{\sqrt{\hbar\Omega}} &= \frac{1}{\sqrt{\hbar\Omega}}\left(\sqrt{\frac{1}{2}M\Omega^2}\,\hat{\mathsf{x}} + \mathrm{i}\sqrt{\frac{1}{2M}}\,\hat{\mathsf{p}}\right) \\
&= \sqrt{\frac{M\Omega}{2\hbar}}\left(\hat{\mathsf{x}} + \frac{\mathrm{i}}{M\Omega}\hat{\mathsf{p}}\right)\ , && (3.2.19) \\
\hat{\mathsf{a}}^\dagger &= \sqrt{\frac{M\Omega}{2\hbar}}\left(\hat{\mathsf{x}} - \frac{\mathrm{i}}{M\Omega}\hat{\mathsf{p}}\right)\ . && (3.2.20)
\end{aligned}$$

Sečtení a odečtení vede k inverzním vzorcům

$$\hat{\mathsf{x}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}}\left(\hat{\mathsf{a}}^\dagger + \hat{\mathsf{a}}\right)\ , \tag{3.2.21}$$

$$\hat{\mathsf{p}} = \mathrm{i}\sqrt{\frac{\hbar M\Omega}{2}}\left(\hat{\mathsf{a}}^\dagger - \hat{\mathsf{a}}\right)\ . \tag{3.2.22}$$

4. K výpočtu středních hodnot dosadíme vyjádření operátorů $\hat{\mathsf{x}}$, $\hat{\mathsf{p}}$ z (3.2.21)—(3.2.22) a k práci s posunovacími operátory využijeme vztahů (3.1.14):

$$\begin{aligned}
\langle n|\hat{\mathsf{x}}|n\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}}\,\left\langle n\middle|\hat{\mathsf{a}}^\dagger + \hat{\mathsf{a}}\middle|n\right\rangle \\
&= \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}}\left(\sqrt{n+1}\,\langle n|n+1\rangle + \sqrt{n}\,\langle n|n-1\rangle\right) = \\
&= 0\,, && (3.2.23)
\end{aligned}$$

jelikož vlastní vektory $|n-1\rangle$, $|n\rangle$ a $|n+1\rangle$ jsou na sebe kolmé. Podobně dostaneme

$$\langle n|\hat{\mathsf{p}}|n\rangle = 0\,. \tag{3.2.24}$$

---

[6]Lze zavést veličiny rozměru souřadnice a hybnosti

$$x_0 \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{M\Omega}}\,, \qquad p_0 \equiv \frac{x_0}{\hbar} = \sqrt{\hbar M\Omega} \tag{3.2.17}$$

a vztahy (3.2.19) přepsat do tvaru

$$\hat{\mathsf{a}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\hat{\mathsf{x}}}{x_0} + \mathrm{i}\frac{\hat{\mathsf{p}}}{p_0}\right)\ . \tag{3.2.18}$$

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

Pro kvadratické operátory dostáváme

$$\begin{aligned}
\langle n|\hat{\mathsf{x}}^2|n\rangle &= \frac{\hbar}{2M\Omega}\left\langle n\middle|\left(\hat{\mathsf{a}}^\dagger+\hat{\mathsf{a}}\right)^2\middle|n\right\rangle \\
&= \frac{\hbar}{2M\Omega}\left\langle n\middle|\underbrace{\hat{\mathsf{a}}^{\dagger 2}}_{0}+\hat{\mathsf{a}}\hat{\mathsf{a}}^\dagger+\hat{\mathsf{a}}^\dagger\hat{\mathsf{a}}+\underbrace{\hat{\mathsf{a}}^2}_{0}\middle|n\right\rangle \\
&= \frac{\hbar}{2M\Omega}\left\langle n\middle|\sqrt{n+1}\sqrt{n+1}+\sqrt{n}\sqrt{n}\middle|n\right\rangle \\
&= \frac{\hbar}{2M\Omega}(2n+1)\,, \qquad (3.2.25)\\
\langle n|\hat{\mathsf{p}}^2|n\rangle &= -\frac{\hbar M\Omega}{2}\left\langle n\middle|\left(\hat{\mathsf{a}}^\dagger-\hat{\mathsf{a}}\right)^2\middle|n\right\rangle \\
&= -\frac{\hbar M\Omega}{2}\left\langle n\middle|\underbrace{\hat{\mathsf{a}}^{\dagger 2}}_{0}-\hat{\mathsf{a}}\hat{\mathsf{a}}^\dagger-\hat{\mathsf{a}}^\dagger\hat{\mathsf{a}}+\underbrace{\hat{\mathsf{a}}^{\dagger 2}}_{0}\middle|n\right\rangle \\
&= \frac{\hbar M\Omega}{2}(2n+1)\,. \qquad (3.2.26)
\end{aligned}$$

5. Operátor kinetické energie je

$$\hat{\mathsf{T}} = \frac{1}{2M}\hat{\mathsf{p}}^2\,. \qquad (3.2.27)$$

Dosazením z (3.2.26) dostaneme

$$\left\langle n\middle|\hat{\mathsf{T}}\middle|n\right\rangle = \frac{1}{2M}\frac{\hbar M\Omega}{2}(2n+1) = \frac{1}{2}\hbar\Omega\left(n+\frac{1}{2}\right) = \frac{E_n}{2}\,. \qquad (3.2.28)$$

Podobně pro potenciál

$$\hat{\mathsf{V}} = \frac{1}{2}M\Omega^2\hat{\mathsf{x}}^2 \qquad (3.2.29)$$

dostaneme užitím (3.2.25)

$$\left\langle n\middle|\hat{\mathsf{V}}\middle|n\right\rangle = \frac{1}{2}M\Omega^2\frac{\hbar}{2M\Omega}(2n+1) = \frac{1}{2}\hbar\Omega\left(n+\frac{1}{2}\right) = \frac{E_n}{2}\,. \qquad (3.2.30)$$

Viriálový teorém udává vztah mezi střední hodnotou operátoru kinetické energie a operátoru potenciálu v libovolném stavu $|\psi\rangle$[7]:

$$2\left\langle\psi\middle|\hat{\mathsf{T}}\middle|\psi\right\rangle = \left\langle\psi\middle|\hat{\mathsf{x}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\hat{\mathsf{x}}}\hat{\mathsf{V}}(\hat{\mathsf{x}})\middle|\psi\right\rangle\,, \qquad (3.2.31)$$

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

$$2\left\langle\psi\middle|\hat{\mathsf{T}}\middle|\psi\right\rangle = s\left\langle\psi\middle|\hat{\mathsf{V}}\middle|\psi\right\rangle\,. \qquad (3.2.32)$$

V případě harmonického oscilátoru je $s = 2$ a z vyjádření středních hodnot kinetické energie (3.2.28) a potenciálu (3.2.30) vidíme, že viriálový teorém je splněn.

[7]Výrazu $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\hat{\mathsf{x}}}\hat{\mathsf{V}}(\hat{\mathsf{x}})$ je třeba rozumět ve smyslu $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}V(x)|_{x=\hat{\mathsf{x}}}$.

6. Relace neurčitosti znějí

$$\Delta x^2 \Delta p^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}\,, \tag{3.2.33}$$

kde

$$\Delta x^2 = \left\langle n \middle| \hat{\mathsf{x}}^2 \middle| n \right\rangle - \langle n|\hat{\mathsf{x}}|n\rangle^2\,, \tag{3.2.34}$$

$$\Delta p^2 = \left\langle n \middle| \hat{\mathsf{p}}^2 \middle| n \right\rangle - \langle n|\hat{\mathsf{p}}|n\rangle^2\,. \tag{3.2.35}$$

Dosadíme-li do relace neurčitosti střední hodnoty ze vztahů (3.2.23), (3.2.25), (3.2.24), (3.2.26), dostaneme

$$\begin{aligned} \Delta x^2 \Delta p^2 &= \left\langle n \middle| \hat{\mathsf{x}}^2 \middle| n \right\rangle \left\langle n \middle| \hat{\mathsf{p}}^2 \middle| n \right\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2M\Omega}(2n+1)\frac{\hbar M\Omega}{2}(nk+1) \\ &= \frac{\hbar^2}{4}(2n+1)\,. \end{aligned} \tag{3.2.36}$$

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

3.3 Stav s nenulovou polohou

Mějme harmonický oscilátor ve stavu daném lineární kombinací dvou vlastních stavů Hamiltoniánu,

$$|\psi\rangle = \alpha\,|m\rangle + \alpha\,|n\rangle\,, \tag{3.3.1}$$

kde $\alpha, \beta \in$.

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

Řešení:

1. Střední hodnota operátoru polohy ve stavu ψ je

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

(v posledním řádku jsme přeuspořádali členy a využili δ funkcí k záměně čísel v odmocninách). Vidíme, že střední hodnota souřadnice je vždy nulová, pokud $|m-n| \neq 1$. Bez újmy na obecnosti stačí vyšetřovat případ $m = n+1$, pro který

$$\langle\psi|\hat{\mathsf{x}}|\psi\rangle = \sqrt{\frac{\hbar m}{2M\Omega}}\left(\alpha^*\beta + \alpha\beta^*\right) = 2\sqrt{\frac{\hbar m}{2M\Omega}}\,\Re\left(\alpha^*\beta\right) . \tag{3.3.2}$$

Maximizujeme tuto funkci vzhledem k α a β. Tato čísla nejsou nezávislá, nýbrž jsou vázána podmínkou

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \tag{3.3.3}$$

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

- Uvědomíme si, že

  $$|\alpha+\beta|^2 = (\alpha+\beta)^*(\alpha+\beta) = |\alpha|^2 + |\beta|^2 + 2\Re\left(\alpha^*\beta\right) = 1 + 2\Re\left(\alpha^*\beta\right) . \tag{3.3.4}$$

  Místo výrazu $2\Re\left(\alpha^*\beta\right)$ maximalizujeme $|\alpha+\beta|$, který je při podmínce (3.3.3) splněn pro $\alpha = \beta = 1/\sqrt{2}$.
- Alternativně můžeme zavést substituci splňující podmínku (3.3.3)

  $$\alpha = \cos\theta\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi} \qquad \beta = \sin\theta\,, \tag{3.3.5}$$

  kde $\theta, \phi \in [0, 2\pi)$ jsou dva úhly. Střední hodnota (3.3.2) pak je

  $$\langle\psi|\hat{\mathsf{x}}|\psi\rangle = \sqrt{\frac{\hbar m}{2M\Omega}}\sin 2\theta\cos\phi\,, \tag{3.3.6}$$

  která 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 tvar

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|m\rangle + |n\rangle\right) , \tag{3.3.7}$$

přičemž musí platit $m = n+1$. Střední hodnota má velikost

$$\langle\psi|\hat{\mathsf{x}}|\psi\rangle = \sqrt{\frac{\hbar m}{2M\Omega}}\,. \tag{3.3.8}$$

2. Střední hodnota operátoru hybnosti ve stavu $|\psi\rangle$ je

$$\langle\psi|\hat{\mathsf{p}}|\psi\rangle = \mathrm{i}\sqrt{\frac{\hbar M\Omega}{2}}\left\langle\psi\middle|\hat{\mathsf{a}}^\dagger - \hat{\mathsf{a}}\middle|\psi\right\rangle = 0\,. \tag{3.3.9}$$

3. Pro střední kvadratické odchylky musíme znát střední hodnoty kvadrátu operátorů souřadnice a hybnosti. K jejich výpočtu využijeme výsledků (3.2.25) a (3.2.26):

$$\begin{aligned}
\left\langle\psi\middle|\hat{\mathsf{x}}^2\middle|\psi\right\rangle &= \frac{\hbar}{4M\Omega}\left(\langle n| + \langle n+1|\right)\left(\hat{\mathsf{a}}^{\dagger 2} + \hat{\mathsf{a}}\hat{\mathsf{a}}^\dagger + \hat{\mathsf{a}}^\dagger\hat{\mathsf{a}} + \hat{\mathsf{a}}^2\right)\left(|n\rangle + |n+1\rangle\right) \\
&= \frac{\hbar}{4M\Omega}\left(\underbrace{\left\langle n\middle|\hat{\mathsf{a}}\hat{\mathsf{a}}^\dagger + \hat{\mathsf{a}}^\dagger\hat{\mathsf{a}}\middle|n\right\rangle}_{2n+1} + \underbrace{\left\langle n+1\middle|\hat{\mathsf{a}}\hat{\mathsf{a}}^\dagger + \hat{\mathsf{a}}^\dagger\hat{\mathsf{a}}\middle|n+1\right\rangle}_{2(n+1)+1}\right) \\
&= \frac{\hbar}{M\Omega}\left(n+1\right) , &(3.3.10)\\
\left\langle\psi\middle|\hat{\mathsf{p}}^2\middle|\psi\right\rangle &= \hbar M\Omega\left(n+1\right) . &(3.3.11)
\end{aligned}$$

Střední kvadratické odchylky budou

$$\Delta x^2 = \frac{\hbar}{M\Omega}(n+1) - \frac{\hbar}{2M\Omega}(n+1) = \frac{\hbar}{2M\Omega}(n+1)\,, \tag{3.3.12}$$
$$\Delta p^2 = \hbar M\Omega(n+1) \tag{3.3.13}$$

a relace neurčitosti pro harmonický oscilátor ve stavu ψ tedy znějí

$$\Delta x^2 \Delta p^2 = \frac{\hbar^2}{2}(n+1) > \frac{\hbar^2}{4}\,. \tag{3.3.14}$$

3.4 Posunutí harmonického oscilátoru

Mějme operátor

$$\hat{\mathsf{T}}(\alpha) = \mathrm{e}^{-\alpha\left(\hat{\mathsf{a}}-\hat{\mathsf{a}}^\dagger\right)}\,, \tag{3.4.1}$$

kde $\hat{\mathsf{a}}$, $\hat{\mathsf{a}}^\dagger$ jsou posunovací operátory splňující komutační relace (3.1.2) a α je reálný parametr.

1. Ověřte, že operátor $\hat{\mathsf{T}}(\alpha)$ je unitární.
2. Ukažte, čemu se rovná $\hat{\mathsf{T}}^{-1}(\alpha)\hat{\mathsf{a}}\hat{\mathsf{T}}(\alpha)$ a $\hat{\mathsf{T}}^{-1}(\alpha)\hat{\mathsf{a}}^\dagger\hat{\mathsf{T}}(\alpha)$.
3. Ukažte, čemu se rovná $\hat{\mathsf{T}}^{-1}(\alpha)\hat{\mathsf{x}}\hat{\mathsf{T}}(\alpha)$ a $\hat{\mathsf{T}}^{-1}(\alpha)\hat{\mathsf{p}}\hat{\mathsf{T}}(\alpha)$.
4. Ukažte, čemu se rovná $\hat{\mathsf{H}}' = \hat{\mathsf{T}}^{-1}(\alpha)\hat{\mathsf{H}}\hat{\mathsf{T}}(\alpha)$, kde $\hat{\mathsf{H}}$ je operátor harmonického oscilátoru (3.2.1). Určete spektrum $\hat{\mathsf{H}}'$.
5. Nalezněte střední hodnotu operátoru souřadnice, je-li harmonický oscilátor ve stavu $|n;\alpha\rangle = \hat{\mathsf{T}}(\alpha)\,|n\rangle$, kde $|n\rangle$ je vlastní vektor harmonického oscilátoru příslušející k energii E_n.

Řešení:

1. Unitaritu ověříme přímo z definice

$$\hat{\mathsf{T}}^\dagger(\alpha)\hat{\mathsf{T}}(\alpha) = \mathrm{e}^{-\alpha\left(\hat{\mathsf{a}}^\dagger-\hat{\mathsf{a}}\right)}\,\mathrm{e}^{-\alpha\left(\hat{\mathsf{a}}-\hat{\mathsf{a}}^\dagger\right)} = \mathrm{e}^{\alpha\left(\hat{\mathsf{a}}-\hat{\mathsf{a}}^\dagger\right)-\alpha\left(\hat{\mathsf{a}}-\hat{\mathsf{a}}^\dagger\right)} = \mathrm{e}^{\hat{0}} = \hat{1} \tag{3.4.2}$$

(využili jsme vztah (1.4.1), což lze, neboť v obou exponenciálách máme stejný operátor $\hat{\mathsf{A}} \equiv \hat{\mathsf{a}} - \hat{\mathsf{a}}^\dagger$, který samozřejmě komutuje sám se sebou).

2. Aplikujeme Hausdorffovu formuli (1.4.2):

$$\begin{aligned}\hat{\mathsf{T}}^{-1}(\alpha)\hat{\mathsf{a}}\hat{\mathsf{T}}(\alpha) &= \mathrm{e}^{\alpha\left(\hat{\mathsf{a}}-\hat{\mathsf{a}}^\dagger\right)}\,\hat{\mathsf{a}}\,\mathrm{e}^{-\alpha\left(\hat{\mathsf{a}}-\hat{\mathsf{a}}^\dagger\right)} + \cdots\\ &= \hat{\mathsf{a}} + \left[\alpha\left(\hat{\mathsf{a}}-\hat{\mathsf{a}}^\dagger\right), \hat{\mathsf{a}}\right] + \cdots\\ &= \hat{\mathsf{a}} + \alpha\underbrace{\left[\hat{\mathsf{a}},\hat{\mathsf{a}}\right]}_{0} + \alpha\underbrace{\left[\hat{\mathsf{a}},\hat{\mathsf{a}}^\dagger\right]}_{1} + \cdots\\ &= \hat{\mathsf{a}} + \alpha \end{aligned} \tag{3.4.3}$$

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

$$\hat{\mathsf{T}}^{-1}(\alpha)\hat{\mathsf{A}}^\dagger\hat{\mathsf{T}}(\alpha) = \hat{\mathsf{a}}^\dagger + \alpha\,. \tag{3.4.4}$$

3. Operátor souřadnice $\hat{\mathsf{x}}$ vyjádříme pomocí posunovacích operátorů (3.2.21) a aplikujeme výsledky z předchozího bodu:

$$\begin{aligned}\hat{\mathsf{T}}^{-1}(\alpha)\hat{\mathsf{x}}\hat{\mathsf{T}}(\alpha) &= \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}}\hat{\mathsf{T}}^{-1}(\alpha)\left(\hat{\mathsf{a}}^\dagger + \hat{\mathsf{a}}\right)\hat{\mathsf{T}}(\alpha)\\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}}\left(\hat{\mathsf{a}}^\dagger + \hat{\mathsf{a}} + 2\alpha\right)\\ &= \hat{\mathsf{x}} + \alpha\sqrt{\frac{2\hbar}{M\Omega}}\,. \end{aligned} \tag{3.4.5}$$

Vidíme, že operátor $\hat{\mathsf{T}}(\alpha)$ je vlastně operátor posunutí (1.5.1) o hodnotu

$$d = \alpha\sqrt{\frac{2\hbar}{M\Omega}} = \sqrt{2}\,\alpha x_0\,. \tag{3.4.6}$$

To lze nahlédnout i přímo tak, že si uvědomíme, že v argumentu exponenciály operátoru $\hat{\mathsf{T}}$ lze vyjádřit rozdíl $\hat{\mathsf{a}} - \hat{\mathsf{a}}^\dagger$ pomocí operátoru hybnosti (3.2.22),

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

takže

$$\hat{\mathsf{T}}(\alpha) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sqrt{\frac{2\hbar}{M\Omega}}\,\hat{\mathsf{p}}} = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}d\hat{\mathsf{p}}}\,, \tag{3.4.7}$$

což je forma ekvivalentní s (1.5.1). Z tohoto vyjádření ihned vidíme, že operátor posunutí komutuje s operátorem hybnosti, a proto

$$\hat{\mathsf{T}}^{-1}(\alpha)\hat{\mathsf{p}}\hat{\mathsf{T}}(\alpha) = \hat{\mathsf{p}}\,. \tag{3.4.8}$$

4. Využijeme vztahů (3.4.3) a (3.4.4):

$$\begin{aligned}\hat{\mathsf{H}}' &= \hat{\mathsf{T}}^{-1}(\alpha)\hbar\Omega\left(\hat{\mathsf{a}}^\dagger\hat{\mathsf{a}} + \frac{1}{2}\right)\hat{\mathsf{T}}(\alpha)\\ &= \hbar\Omega\left(\hat{\mathsf{T}}^{-1}(\alpha)\hat{\mathsf{a}}^\dagger\underbrace{\hat{\mathsf{T}}(\alpha)\hat{\mathsf{T}}^{-1}(\alpha)}_{\hat{1}}\hat{\mathsf{a}}\hat{\mathsf{T}}(\alpha) + \frac{1}{2}\right)\\ &= \hbar\Omega\left[\left(\hat{\mathsf{a}}^\dagger + \alpha\right)\left(\hat{\mathsf{a}} + \alpha\right) + \frac{1}{2}\right]\\ &= \hbar\Omega\left(\hat{\mathsf{a}}^\dagger\hat{\mathsf{a}} + \frac{1}{2}\right) + \alpha\hbar\Omega\underbrace{\left(\hat{\mathsf{a}}^\dagger + \hat{\mathsf{a}}\right)}_{\sqrt{\frac{2M\Omega}{\hbar}}\,\hat{\mathsf{x}}} + \alpha^2\hbar\Omega\\ &= \hat{\mathsf{H}} + \alpha\Omega\sqrt{2\hbar\Omega M}\,\hat{\mathsf{x}} + \alpha^2\hbar\Omega\,. \end{aligned} \tag{3.4.9}$$

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

$$|n;\alpha\rangle \equiv \hat{\mathsf{T}}(\alpha)\,|n\rangle\ . \tag{3.4.10}$$

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

$$\langle n;\alpha|\hat{\mathsf{x}}|n;\alpha\rangle = \left\langle n\left|\underbrace{\hat{\mathsf{T}}^{-1}(\alpha)\hat{\mathsf{x}}\hat{\mathsf{T}}(\alpha)}_{\hat{\mathsf{x}}+d}\right|n\right\rangle = \underbrace{\langle n|\hat{\mathsf{x}}|n\rangle}_{0} + d\underbrace{\langle n|n\rangle}_{1} = d\,. \tag{3.4.11}$$

3.5 Nabitý harmonický oscilátor v elektrickém poli

Harmonický oscilátor s nábojem q se nachází v konstantním homogenním elektrickém poli intenzity $\mathcal{E}$, směřující podél souřadné osy z. Najděte spektrum tohoto systému.

Řešení:

Hamiltonián je

$$\hat{\mathsf{H}}'(\mathcal{E}) = \frac{1}{2M}\hat{\mathsf{p}}^2 + \frac{1}{2}M\Omega^2\hat{\mathsf{x}}^2 - q\mathcal{E}\hat{\mathsf{x}} \tag{3.5.1}$$

Využijeme výsledku (3.4.9) předchozího příkladu:

$$\hat{\mathsf{H}}'(\mathcal{E}) = \hat{\mathsf{H}} - q\mathcal{E}\hat{\mathsf{x}} = \hat{\mathsf{T}}^{-1}(\alpha)\hat{\mathsf{H}}\hat{\mathsf{T}}(\alpha) - e_0\,, \tag{3.5.2}$$

kde

$$\alpha\Omega\sqrt{2\hbar\Omega M} = -q\mathcal{E} \qquad \Rightarrow \qquad \alpha = -\frac{q\mathcal{E}}{\Omega}\sqrt{\frac{1}{2\hbar\Omega M}}\,, \tag{3.5.3}$$

$$e_0 = \alpha^2\hbar\Omega = \frac{q^2\mathcal{E}^2}{\Omega^2}\frac{\hbar\Omega}{2\hbar\Omega M} = \frac{q^2\mathcal{E}^2}{2M\Omega^2}\,, \tag{3.5.4}$$

$$d = -\frac{q\mathcal{E}}{M\Omega^2}\,. \tag{3.5.5}$$

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

$$E'_n = E_n - e_0 = \hbar\Omega\left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{q^2\mathcal{E}^2}{2M\Omega^2} \tag{3.5.6}$$

$$|n\rangle' = \hat{\mathsf{T}}\left(-\frac{q\mathcal{E}}{\Omega}\sqrt{\frac{1}{2\hbar\Omega M}}\right)|n\rangle\ . \tag{3.5.7}$$

Vlnové funkce jsou posunuté o vzdálenost d.

K výsledku bychom dospěli také tak, že bychom Hamiltonián $\hat{\mathsf{H}}'(\mathcal{E})$ upravili na úplný čtverec a převedli na tvar $\hat{\mathsf{H}}$ vhodným přeznačením souřadnice.