Cvičení ÚDKM - řešení

Témata:

- harmonický oscilátor

Lineární harmonický oscilátor

V klasické mechanice má Hamiltonián lineárního harmonického oscilátoru tvar:

$$H = T + V = \frac{\tilde{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \tilde{x}^2 \,. \tag{1}$$

Ke kvantové mechanice (viz přednáška) přejdeme ostříškováním operátorů hybnosti $p \to \hat{p}$ a souřadnice $x \to \hat{x}$:

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

a zavedením komutační relace

$$[\hat{\tilde{x}}, \hat{\tilde{p}}] = i \,. \tag{3}$$

Konstant v (2) se můžeme zbavit substitucí $\hat{\tilde{x}} = \lambda \hat{x}$ a $\hat{\tilde{p}} = \hat{p}/\lambda$. (I) Zjistěte, jak musíme zvolit λ, aby Hamiltonián získal tvar

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} + \frac{\hat{x}^2}{2} \,. \tag{4}$$

Dále ověřte, že komutační relace (3) zůstane zachována, tj.

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i \,. \tag{5}$$

(I) Dosazením a porovnáním získáme $\lambda = \sqrt{m\omega}$. *Pro komutátor vyjde (*λ *je jen konstanta, tj. můžeme ji vytknout dopředu)*

$$[\hat{\tilde{x}}, \hat{\tilde{p}}] = [\lambda \hat{x}, \hat{p}/\lambda] = \frac{\lambda}{\lambda}[\hat{x}, \hat{p}] = i \,.$$

Jak vyřešit LHO? Hledáme energie E_n a odpovídající vlnové funkce $|\psi_n\rangle$,

$$\hat{H} |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle \,. \tag{6}$$

Máme dvě možnosti:
(a) Přejdeme do souřadnicové reprezentace, tj. nahradíme $\hat{p} \to= -i\frac{\partial}{\partial x}$ a $\hat{x} \to x$, a vyřešíme diferenciální rovnici. Nebo lépe
(b) Vyřešíme problém LHO zavedením vhodných operátorů $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$:

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{x} + i\hat{p}) \,, \quad \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{x} - i\hat{p}) \,, \tag{7}$$

kde † značí hermitovské sdružení.

(II) Ukažte, že hamiltonián LHO lze vyjádřit pomocí operátorů $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$ jako

$$\hat{H} = \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \,. \tag{8}$$

(II) Z (7) *získáme inverzní vztahy*

$$\hat{x} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{a}^\dagger + \hat{a}\right) \,,$$
$$\hat{p} = \frac{i}{\sqrt{2}} \left(\hat{a}^\dagger - \hat{a}\right)$$

a pro druhé mocniny těchto operátorů

$$\hat{x}^2 = \frac{1}{2} \left(\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}\hat{a}\right)$$
$$\hat{p}^2 = -\frac{1}{2} \left(\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger \hat{a} - \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}\hat{a}\right) \,.$$

Dosazením do (4) *a použitím* $[\hat{a},\hat{a}^\dagger]=\hat{a}\hat{a}^\dagger-\hat{a}^\dagger\hat{a}=1$ *dostaneme*

$$\hat{H}=\frac{1}{2}\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}+\hat{a}\hat{a}^\dagger\right)=\hat{a}^\dagger\hat{a}+\frac{1}{2}\,.$$

(III) Dále také ukažte, že platí následující komutační relace

$$[\hat{a},\hat{a}^\dagger]=1\,,[\hat{H},\hat{a}]=-\hat{a}\,,[\hat{H},\hat{a}^\dagger]=\hat{a}^\dagger\,. \tag{9}$$

(III) První komutátor získáme dosazením za $\hat{a}^\dagger$, $\hat{a}$ *z* (7) *a použitím* (5)

$$\begin{aligned}[\hat{a},\hat{a}^\dagger]&=\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{x}+i\hat{p}\right),\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{x}-i\hat{p}\right)\right]\\ &=\frac{1}{2}\left([\hat{x},\hat{x}]-i\,[\hat{x},\hat{p}]+i\,[\hat{p},\hat{x}]+[\hat{p},\hat{p}]\right)\\ &=\frac{1}{2}\left(0+1+1+0\right)=1\,.\end{aligned}$$

Zbylé dva dokážeme dosazením za $\hat{H}$ *podle* (8) *a použitím výšeho dokázaného komutátoru*

$$\left[\hat{H},\hat{a}\right]=\left[\hat{a}^\dagger\hat{a}+\frac{1}{2},\hat{a}\right]=\left[\hat{a}^\dagger\hat{a},\hat{a}\right]=\hat{a}^\dagger\left[\hat{a},\hat{a}\right]+\left[\hat{a}^\dagger,\hat{a}\right]\hat{a}=\hat{a}^\dagger 0-\hat{a}=-\hat{a}$$

a

$$\left[\hat{H},\hat{a}^\dagger\right]=\left[\hat{a}^\dagger\hat{a}+\frac{1}{2},\hat{a}^\dagger\right]=\left[\hat{a}^\dagger\hat{a},\hat{a}^\dagger\right]=\hat{a}^\dagger\left[\hat{a},\hat{a}^\dagger\right]+\left[\hat{a}^\dagger,\hat{a}^\dagger\right]\hat{a}=\hat{a}^\dagger\,.$$

Tyto komutátory lze také dokázat vyjádřením přes $\hat{x}$ *a* $\hat{p}$. *To je samozřejmě taky správně, jen o něco pracnější.*

Operátory $\hat{a}$, $\hat{a}^\dagger$ mají význam snižovacích, resp. zvyšovacích operátorů, podobně jako nám již známé spinové operátory $\hat{S}_-$ a $\hat{S}_+$. Operátor $\hat{a}$ snižuje stav $|\psi_n\rangle$ odpovídající n-té hladině na stav o jedna nižší $|\psi_{n-1}\rangle$, tj. odpovídající $(n-1)$ hladině. Podobně operátor $\hat{a}^\dagger$ zvyšuje stav $|\psi_n\rangle$ odpovídající n-té hladině na stav o jedna vyšší $|\psi_{n+1}\rangle$, tj. odpovídající $(n+1)$ hladině. Tedy operátor $\hat{a}^\dagger$ zvyšuje stupeň excitace LHO, tj. "přidává" excitaci, a ho nazýváme kreačním operátorem. Operátor $\hat{a}$ naopak snižuje stupeň excitace, tj. "ubírá" excitaci, a nazýváme ho anihilačním operátorem. Pro působení těchto dvou operátorů platí

$$\hat{a}\,|\psi_n\rangle=\sqrt{n}\,|\psi_{n-1}\rangle\;, \tag{10}$$

$$\hat{a}^\dagger\,|\psi_n\rangle=\sqrt{n+1}\,|\psi_{n+1}\rangle\;. \tag{11}$$

Použitím operátorové rovnosti $[\hat{H},\hat{a}]=-\hat{a}$ zjistíme, že energetické spektrum je kvantové a jednotlivé hladiny se liší o 1:

$$[\hat{H},\hat{a}]\,|\psi_n\rangle=-\hat{a}\,|\psi_n\rangle \tag{12}$$

$$\left(\hat{H}\hat{a}-\hat{a}\hat{H}\right)|\psi_n\rangle=-\hat{a}\,|\psi_n\rangle \tag{13}$$

$$\left(\hat{H}\hat{a}-\hat{a}E_n\right)|\psi_n\rangle=-\hat{a}\,|\psi_n\rangle \tag{14}$$

$$\hat{H}\hat{a}\,|\psi_n\rangle=\left(E_n-1\right)\hat{a}\,|\psi_n\rangle\;. \tag{15}$$

Dále požadavkem existence základního stavu, tj. stavu s nejnižší energií,

$$\hat{a}\psi_0=0\,, \tag{16}$$

zjistíme, že energie n-tého stavu je dána

$$E_n=n+\frac{1}{2}\,. \tag{17}$$

Pro nejnižší stav totiž máme (a jak jsem viděli výše, hladiny jsou od sebe vzdálené o jedna)

$$\hat{a}\,|\psi_0\rangle=0 \tag{18}$$

$$\hat{a}^\dagger\hat{a}\,|\psi_0\rangle=0 \tag{19}$$

$$\left(\hat{H}-\frac{1}{2}\right)|\psi_0\rangle=0 \tag{20}$$

$$\left(E_0-\frac{1}{2}\right)|\psi_0\rangle=0\Rightarrow E_0=\frac{1}{2}\,. \tag{21}$$

Výše uvedené rovnice (10) a (11) pro působení operátorů $\hat{a}$ a $\hat{a}^\dagger$ použijeme, abychom zjistili, jak vypadají funkce tří nejnižších hladin LHO v souřadnicové reprezentaci. Vyjdeme opět z požadavku na existenci základního stavu $|\psi_0\rangle$,

$$\hat{a}\,|\psi_0\rangle = 0\,, \tag{22}$$

(čtěte jako "nejnižší stav už nelze snížit"). Dosazením za $\hat{a}$ a přechodem do souřadnicové reprezentace (tj. zleva přenásobíme $\langle x|$) získáme jednoduchou diferenciální rovnici

$$\left(x + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\psi_0(x) = 0\,, \tag{23}$$

jejíž řešením je

$$\psi_0(x) = \sqrt[4]{\frac{1}{\pi}}e^{-\frac{x^2}{2}}\,. \tag{24}$$

(IV) Odvoďte tento výsledek pomocí postupu popsaném v tomto odstavci. Jaká energie odpovídá tomuto stavu?

(IV) Vyřešíme separací proměnných:

$$\left(x + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\psi_0(x) = 0$$
$$\int \frac{\mathrm{d}\psi_0(x)}{\psi_0(x)} = -\int x\mathrm{d}x$$

odkud

$$\psi_0(x) = Ne^{-\frac{x^2}{2}}\,.$$

Konstantu N určíme z normalizace

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0(x)^*\psi_0(x)\mathrm{d}x \\ &= N^2\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}\mathrm{d}x \\ &= N^2\sqrt{\pi}\,, \end{aligned}$$

čili $N = \sqrt[4]{\pi}$, tj.

$$\psi_0(x) = \sqrt[4]{\pi}e^{-\frac{x^2}{2}}\,.$$

Odpovídající energie je

$$E_0 = \frac{1}{2}\,.$$

Vyšší, excitované, stavy získáme působením operátoru $\hat{a}^\dagger$,

$$\hat{a}^\dagger\,|\psi_n\rangle = \sqrt{n+1}\,|\psi_{n+1}\rangle\;. \tag{25}$$

(V) Ukažte, že pro první a druhý excitovaný stav (uveďte také odpovídající energie) získáme

$$\psi_1(x) = \sqrt[4]{\frac{4}{\pi}}xe^{-\frac{x^2}{2}}\,, \tag{26}$$

$$\psi_2(x) = \sqrt[4]{\frac{1}{4\pi}}(2x^2-1)e^{-\frac{x^2}{2}}\,. \tag{27}$$

(V) Podle (25), $\hat{a}^\dagger\,|\psi_n\rangle = \sqrt{n+1}\,|\psi_{n+1}\rangle$, máme

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(x - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\psi_n(x) = \sqrt{n+1}\psi_{n+1}(x)\,.$$

Čili pro $n = 0$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(x - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\psi_0(x) = \psi_1(x)$$

odkud derivováním získáme vlnovou funkci prvního excitovaného stavu

$$\psi_1(x) = \sqrt[4]{\frac{4}{\pi}} x e^{-\frac{x^2}{2}} .$$

Odpovídající energie je $E_1 = 3/2$*. Podobně pro* $n = 1$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(x - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \right) \psi_1(x) = \sqrt{2} \psi_2(x)$$

odkud derivováním a vydělením faktorem $\sqrt{2}$ *získáme vlnovou funkci druhého excitovaného stavu*

$$\psi_2(x) = \sqrt[4]{\frac{1}{4\pi}} \left(2x^2 - 1 \right) e^{-\frac{x^2}{2}}$$

s energií $E_2 = 5/2$*.*

Nakreslete si, jak tyto funkce vypadají. (VI) Ověřte, že funkce $\psi_0(x)$, $\psi_1(x)$ a $\psi_2(x)$ jsou normalizované na jedničku a že jsou navzájem (po dvojících) orthogonální, tj.

$$\langle \psi_n | \psi_k \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x) \psi_k(x) \mathrm{d}x = \delta_{nk} \tag{28}$$

(VI) Normalizace na jedničku:
$\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle = 1$ *viz (IV),*
$\langle \psi_1 | \psi_1 \rangle = 1$ *dosazením a výpočtem integrálu,*
$\langle \psi_2 | \psi_2 \rangle = 1$ *dosazením a výpočtem integrálu.*
Ortogonalita:
$\langle \psi_0 | \psi_1 \rangle = 0$ *ze symetrie (integrál liché funkce přes symetrický interval),*
$\langle \psi_0 | \psi_2 \rangle = 0$ *dosazením a výpočtem integrálu,*
$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = 0$ *ze symetrie.*

Vlastní funkce $\psi_n(x)$ LHO můžeme obecně zapsat ve tvaru

$$\psi_n(x) = A_n H_n e^{-\frac{x^2}{2}} , \tag{29}$$

kde H_n značí Hermitovy polynomy (A_n je normalizační konstanta). Je (možná) zajímavé, jak tyto vlnové funkce vypadají pro vysoká n. Odpovídající pravděpodobnost výskytu části se pak blíží klasickému výsledku. Oproti klasickému LHO však dostaneme nenulovou pravděpodobnost výskytu částice za hranicí potenciálu (podobně jako minule částice mohla pronikat do bariéry).