Úvod do kvantové mechaniky

Přednáška č. 7

Verze 2024.1

Klasický harmonický oscilátor

Pro pohodlnost pracujeme s bezrozměrnými veličinami.

$$q = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x, \quad \pi = \frac{1}{\sqrt{\hbar m \omega}}p \quad \Rightarrow \quad [\hat{q},\hat{\pi}] = i$$

Energie $H = \frac{\hbar\omega}{2}(\pi^2 + q^2) \leftarrow$ toto není Hamiltonián*

"Hamiltonovy" rovnice v maticovém tvaru

$$\begin{pmatrix}\dot{\pi}\\ \dot{q}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0 & -\omega\\ \omega & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\pi\\ q\end{pmatrix} \xrightarrow[\text{tvar matice}]{\text{Hledejme diagonální}} \begin{pmatrix}\dot{\alpha}\\ \dot{\beta}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\lambda_1 & 0\\ 0 & \lambda_2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix}$$

Řešením vlastního problému nalezneme (nebo alespoň snadno ověříme), že

$$\left.\begin{aligned} q &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}(\alpha + \beta),\\ \pi &= \tfrac{i}{\sqrt{2}}(\alpha - \beta),\end{aligned}\right\} \quad \begin{aligned}\alpha &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}(q + i\pi),\\ \beta &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}(q - i\pi) = \alpha^*,\end{aligned} \quad \begin{aligned}\lambda_1 &= -i\omega\\ \lambda_2 &= i\omega\end{aligned}$$

Velmi jednoduché pohybové rovnice: $\dot{\alpha} = -i\omega\alpha \Rightarrow \alpha = \alpha_0 e^{-i\omega t}$ (amplituda α_0)

$$\alpha_0 = \tfrac{1}{\sqrt{2}}(q_0 + i\pi_0) \Rightarrow q = \tfrac{1}{2}(q_0 + i\pi_0)e^{-i\omega t} + \tfrac{1}{2}(q_0 - i\pi_0)e^{i\omega t} = q_0 \cos\omega t + \pi_0 \sin \omega t$$

* Energie napsána pomocí kanonicky sdružených veličin, aby šlo o Hamiltonián. Naše rovnice oproti Hamiltonovým obsahují na pravé straně navíc faktor $\hbar^{-1}$.

Kvantový harmonický oscilátor

Spektrum, tedy hodnoty vlastních energií, harmonického oscilátoru lze získat čistě algebraicky, tedy abstraktním uvažováním o vlastnostech operátorů, bez přechodu do konkrétní reprezentace. Vyjdeme z komutační relace $[\hat{q},\hat{\pi}] = i$ a sestavíme z $\hat{q}$ a $\hat{\pi}$ stejné lineární kombinace, které diagonalizovaly klasický Hamiltonián

$$\hat{a} = \tfrac{1}{\sqrt{2}}(\hat{q} + i\hat{\pi}), \quad \hat{a}^+ = \tfrac{1}{\sqrt{2}}(\hat{q} - i\hat{\pi})$$

$$\Rightarrow \quad \hat{q} = \tfrac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a} + \hat{a}^+), \quad \hat{\pi} = \tfrac{i}{\sqrt{2}}(\hat{a} - \hat{a}^+)$$

Všude $\hat{A}^+$ je hermitovsky sdružený operátor k $\hat{A}$.

Z definice lze snadno ukázat, že $[\hat{a}^+,\hat{a}] = -1$.

$$\boxed{\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}(\hat{\pi}^2 + \hat{q}^2) = \hbar\omega\left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}\right)} \leftarrow$$

S použitím komutačních relací.

Konstrukce vlastních stavů

Hamiltonián obsahuje konstantní faktor, tzv. energii nulových kmitů, které v konstrukci vlastních stavů nehraje roli. Hledejme vlastní stavy operátoru $\hat{a}^+\hat{a}$.

Pro základní stav $|0\rangle$ zvolíme podmínku $\langle 0|\hat{a}^+\hat{a}|0\rangle = 0$

Je-li $|b\rangle = \hat{a}|0\rangle$ pak $\langle b|b\rangle = 0$ a tedy nutně $\hat{a}|0\rangle = 0 = 0|0\rangle$

Základní stav $|0\rangle$ je vlastním stavem operátoru $\hat{a}$ a také operátoru $\hat{a}^+\hat{a}$ a tím pádem též operátoru $\hbar\omega\hat{a}^+\hat{a}$, vždy s vlastním číslem 0.

Zkonstruujme jiný stav než $|0\rangle$ nebo 0. Zbývá nám operátor $\hat{a}^+$. Stav $\hat{a}^+|0\rangle$ je ortogonální na stav $|0\rangle$, protože

$$\langle 0|\hat{a}^+|0\rangle = 0$$

Důvodem je, že $\langle 0|\hat{a}^+ = (\hat{a}|0\rangle)^+ = 0$

Je to vlastní vektor Hamiltoniánu? Ano, s vlastní hodnotou $\hbar\omega$

$$\hbar\omega\hat{a}^+\hat{a}\,\hat{a}^+|0\rangle = \hbar\omega\hat{a}^+(1 + \hat{a}^+\hat{a})|0\rangle = \hbar\omega\hat{a}^+|0\rangle + 0$$

Je normalizovaný? Ano

$$\langle 0|\hat{a}\,\hat{a}^+|0\rangle = \langle 0|1 + \hat{a}^+\hat{a}|0\rangle = 1$$

První excitovaný stav $|1\rangle = \hat{a}^+|0\rangle$

Další stavy? $|2'\rangle = \hat{a}^+|1\rangle$

$$\hat{H}|2'\rangle = \hbar\omega\hat{a}^+\hat{a}\hat{a}^+|1\rangle = \hbar\omega(\hat{a}^+\hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}^+)|1\rangle = 2\hbar\omega|2'\rangle$$

Normalizace $\Rightarrow$ **Druhý excitovaný stav $|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{a}^+|1\rangle$**

Dokažme obecnou formuli pro vlastní stavy harm. oscilátoru

$$\boxed{|n\rangle = \frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle} \qquad \boxed{\begin{aligned}\hat{H}|n\rangle &= E_n|n\rangle\\ E_n &= \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)\end{aligned}}$$

Vyšší stavy se vytvářejí aplikací operátor $\hat{a}^+$ ... **kreační** či **zdvihací** operátor, a k nižším stavům se dostaneme aplikací operátoru $\hat{a}$ .... **anihilační** či **snižovací** operátor

Je-li $\hat{H}|n-1\rangle = (n-1)\hbar\omega|n-1\rangle$ a $|n\rangle = \frac{\hat{a}^+|n-1\rangle}{\sqrt{n}}$ pak

$$\begin{aligned}\hat{H}|n\rangle &= \hbar\omega\frac{\hat{a}^+\hat{a}\hat{a}^+}{\sqrt{n}}|n-1\rangle = \hbar\omega\frac{\hat{a}^+(1 + \hat{a}^+\hat{a})}{\sqrt{n}}|n-1\rangle\\ &= \hbar\omega\frac{\hat{a}^+}{\sqrt{n}}|n-1\rangle + \hbar\omega\hat{a}^+\hat{a}^+\hat{a}\frac{1}{\sqrt{n}}|n-1\rangle\\ &= \hbar\omega|n\rangle + \hbar\omega(n-1)|n\rangle = \hbar\omega|n\rangle\end{aligned}$$

Vlastnosti kreačního a anihilačního operátoru

Nejdůležitější vlastností (pro použití ve výpočtech) jsou výsledky působení na vlastní stav $|n\rangle$ harmonického oscilároru

$$\boxed{\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle}$$

Jak si to pamatovat?

V různých kontextech představuje stav $|n\rangle$ stav s n částicemi (fotony nebo tzv. fonony - elementárními excitacemi vibrací). Operátor

$$\hat{n} = \hat{a}^+\hat{a}$$

je operátorem počtu částic, tedy

$$\langle n|\hat{a}^+\hat{a}|n\rangle = n.$$

$$\begin{aligned} n &= (\langle n|\hat{a}^+)(\hat{a}|n\rangle)\\ &= (\hat{a}|n\rangle)^+(\hat{a}|n\rangle) = |\hat{a}|n\rangle|^2\\ &\Longrightarrow |\hat{a}|n\rangle| = \sqrt{n}.\end{aligned}$$

$$\boxed{\hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle}$$

Pomocí komutačních relací

$$\hat{a}\hat{a}^+ = \hat{n} + 1$$

a dál už stejným postupem.

Vlastnosti stavů harmonického oscilátoru

Energie základního stavu

$$E_0 = \langle 0|\hat{H}|0\rangle = \frac{\hbar\omega}{2}\langle 0|\hat{a}^+\hat{a}|0\rangle + \frac{\hbar\omega}{2}\langle 0|0\rangle = \frac{\hbar\omega}{2}$$

Střední hodnota souřadnice ve vlastním stavu

$$\langle\hat{q}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\langle n|\hat{a}^+|n\rangle + \langle n|\hat{a}|n\rangle) = 0 \leftarrow$$

Pro všechny vlastní stavy $|n\rangle$

Kvadratická odchylka ve stavu $|n\rangle$

$$\langle\hat{q}^2\rangle = \frac{1}{2}\langle n|(\hat{a}^+ + \hat{a})(\hat{a}^+ + \hat{a})|n\rangle = n + \frac{1}{2}$$

Ani základní stav nesedí přesně v nule - je "delokalizován"

Zdroje:

Přednáška UKM z roku 2021: https://www.mancal.cz/teaching/introduction-to-quantum-theory-lecture/

- *Sekce videí od Klasický harmonický oscilátor - část 1.* : https://youtu.be/jj1a-eSdUiI
- *až po Kvantový harmonický oscilátor - část 5*: https://youtu.be/haGz_V85WOo

Příště: **Potenciálové jámy**