Harmonický oscilátor

Z Hamiltoniánu pro harmonický oscilátor

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2, \qquad [\hat{x},\hat{p}] = i\hbar,$$

po substituci

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x}, \qquad \hat{P} = \sqrt{\frac{1}{\hbar m\omega}}\hat{p},$$

dostaneme

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\frac{1}{2}\hat{P}^2 + \frac{1}{2}\hat{X}^2\right), \qquad [\hat{X},\hat{P}] = i.$$

Definujeme kreační $\hat{a}$, anihilační $\hat{a}^\dagger$ operátory a počítací operátor $\hat{N}$ operátor

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} + i\hat{P}), \qquad \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} - i\hat{P}), \qquad \hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a},$$

splňující relace

$$[\hat{a},\hat{a}^\dagger] = 1, \qquad [\hat{N},\hat{a}] = -\hat{a}, \qquad [\hat{N},\hat{a}^\dagger] = -\hat{a}^\dagger,$$

Hamiltonián nyní zapíšeme jako

$$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{N} + \tfrac{1}{2}).$$

Lze ukázat, že operátor $\hat{N}$ má (nedegerované) celočíselné nezáporné vlastní hodnoty

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle, \qquad n \in \mathbb{N} \cup \{0\},$$

přičemž $|n\rangle$ značí odpovídající vlastní vektory. Kreační a anihilační operátory působí následovně

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \qquad \hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle.$$

Hamiltonián má tedy vlastní hodnoty

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle, \qquad E_n = \hbar\omega(n + \tfrac{1}{2}), \qquad n = 0, 1, 2, 3, \ldots.$$

Souřadnicová reprezentace

Vlnovou funkci pro $n = 0$ můžeme určit z podmínky, že je anihilována anihilačním operátorem a z normovací podmínky

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

což v souřadnicové reprezentaci se souřadnicí X vypadá jako

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(X + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}X}\right)\langle X|0\rangle = 0, \qquad \int \mathrm{d}X |\langle X|0\rangle|^2 = 1, \tag{1}$$

dostáváme tedy

$$\langle X|0\rangle = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-\frac{X^2}{2}}.$$

Vlastní vektory pro $n > 0$ získáme z tohoto stavu tak, že na něj budeme n-krát působit kreačním operátorem

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

V souřadnicové reprezentaci

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(X - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}X}\right) = -\frac{1}{\sqrt{2}} e^{\frac{X^2}{2}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}X} e^{-\frac{X^2}{2}}, \tag{2}$$

což po dosazení dává

$$\begin{aligned}\langle X|n\rangle = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}\sqrt{2^n n!}}\left(-e^{\frac{X^2}{2}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}X}e^{-\frac{X^2}{2}}\right)^n e^{-\frac{X^2}{2}} &= \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{X^2}{2}}\left((-1)^n e^{X^2}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}X^n}e^{-X^2}\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{X^2}{2}} H_n(X),\end{aligned}$$

kde

$$H_n(X) = (-1)^n e^{X^2}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}X^n}e^{-X^2}$$

jsou Hermiteovy polynomy.

V souřadnicové reprezentaci se souřadnicí x dostaneme

$$\langle x|n\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right).$$

Úkoly:
a) Najděte řešení (1)
b) Ukažte platnost (2)
c) Jakým způsobem přepíšeme vlnovou funkci z X-souřadnicové reprezentace do x-souřadnicové reprezentace?

Operátor hustoty harmonického oscilátoru při teplotě T

K výpočtu budeme potřebovat následující vyjádření Hermiteových polynomů

$$H_n(X) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{X^2} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}u (-2iu)^n e^{2iuX - u^2} \tag{3}$$

a dále také integrál

$$\int \mathrm{d}^N y e^{-\vec{y}^T A \vec{y} + 2\vec{b}^T \vec{y}} = \frac{\pi^{\frac{N}{2}}}{\sqrt{\det A}} e^{\vec{b}^T A^{-1} \vec{b}}. \tag{4}$$

kde $\vec{y}$ a $\vec{b}$ jsou N-dimenzionální sloupocové vektory a A je pozitivně definitní symetrická $n \times n$ matice.

Matice hustoty je

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} \sum_n |n\rangle e^{-\frac{E_n}{kT}} \langle n|$$

v s užitím $Z = \frac{1}{2 \sinh \frac{\alpha}{2}}$ dostaneme v souřadnicové reprezentaci

$$\langle Y|\hat{\rho}|X\rangle = 2 \sinh \frac{\alpha}{2} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\alpha(n+\frac{1}{2})} \frac{1}{\sqrt{\pi} 2^n n!} e^{-\frac{X^2+Y^2}{2}} H_n(X) H_n(Y). \tag{5}$$

kde $\alpha = \frac{\hbar\omega}{kT}$. Výsledkem je

$$\langle Y|\hat{\rho}|X\rangle = \sqrt{\frac{1}{\pi} \tanh \frac{\alpha}{2}} \exp\left(-\frac{1}{4} \tanh \frac{\alpha}{2} (X+Y)^2 - \frac{1}{4} \tanh \frac{\alpha}{2} (X-Y)^2 \right), \tag{6}$$

a v souřadnicích x, y

$$\langle y|\hat{\rho}|x\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar\pi} \tanh \frac{\hbar\omega}{2kT}} \exp\left(-\frac{m\omega}{4\hbar} \tanh \frac{\hbar\omega}{2kT} (x+y)^2 - \frac{m\omega}{4\hbar} \tanh \frac{\hbar\omega}{2kT} (x-y)^2 \right).$$

Úkoly:

a) Pomocí Fourierovy a zpětné Fourierovy transformace

$$f(X) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dP e^{iPX} \tilde{f}(P), \qquad \tilde{f}(P) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dX e^{-iPX} f(X)$$

dokažte (3).

b) Ukažte platnost (4), *nejdříve vhodnou substitucí odstraňte z integálu člen lineární v* $\vec{y}$ *(úpravou odobnou doplnění na čtverec), a pak užijte faktu, že symetrickou matici lze diagonalizovat pomocí ortogonální matice, tj. lze psát* $D = O^T A O$, *kde* O *je ortogonální matice* ($O^T O = \mathbf{1}$) *a* D *je diagonální matice.*

c) Odvoďte (5).

d) Jakým způsobem přepíšeme matici hustoty z X,Y*-souřadnicové reprezentace do* x,y*-souřadnicové reprezentace?*