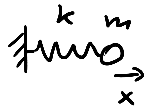
Harmonický oscilátor

- potenciál a Hamiltonián

klasický jednorozměrný HO – vratná síla $F = -kx$ → pohybová rovnice $m\ddot{x} = -kx$



kmitavý pohyb $x(t) = x_0 \cos(\omega t + \varphi)$ $\quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ $\quad \rightarrow \quad k = m\omega^2$

potenciál vratné síly $V(x) = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ $\quad$ (ověření $F = -\frac{dV}{dx} = -kx$)

→ odpovídající Hamiltonián kvantového 1D HO $\quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$

stacionární Schrödingerova rovnice 1D HO $\quad \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\psi = E\psi$

1 Řešení HO v souřadnicové reprezentaci

– budeme hledat explicitní vyjádření vlastních funkcí a vlastních energií

- převedení do bezrozměrných proměnných

charakt. energie $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ $\rightarrow$ $\varepsilon = \frac{E}{E_0}$ $\qquad$ charakt. délka $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ $\rightarrow$ $\xi = \frac{x}{x_0}$

podělení Sch.r. E_0: $\left(-\frac{\hbar}{m\omega}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega}{\hbar}x^2\right)\psi = \varepsilon\psi$ $\rightarrow$ $\left(-\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2\right)\psi = \varepsilon\psi$ $\qquad \psi'' = (\xi^2 - \varepsilon)\psi$

- odhad tvaru vlnových funkcí

1) vlastní stavy budou mít oscilující povahu v klasicky povolené oblasti, klesající mimo

2) $\psi'' = (\xi^2 - \varepsilon)\psi$ druhá derivace odpovídající přenásobení $(\xi^2 - \varepsilon)$ naznačuje zapojení exp

3) pro konstantní potenciál vychází pokles $e^{-\varkappa x}$, kvadraticky rostoucímu potenciálu bude vyhovovat rapidnější pokles

→ odhadovaný tvar: polynom × gaussovka $\quad \psi_n(\xi) \sim H_n(\xi)\, e^{-\alpha\xi^2}$ $\quad$ ↙ polynom stupně n s n uzly

- určení základního stavu

– očekáváme jednoduchý „kopeček", zkusíme $n = 0$

$$\left(e^{-\alpha\xi^2}\right)' = e^{-\alpha\xi^2}(-2\alpha\xi) \qquad \left(e^{-\alpha\xi^2}\right)'' = e^{-\alpha\xi^2}(4\alpha^2\xi^2 - 2\alpha)$$

porovnáním se Sch.r. $\alpha = \frac{1}{2}$, $\varepsilon = 1$

→ základní stav s vlnovou funkcí $\psi_0(\xi) \sim e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ $\quad \psi_0(x) \sim e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$ $\quad$ a energií $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$

- určení celé sady vlastních stavů

– dosadíme $\psi(\xi) = H_n(\xi)\, e^{-\alpha\xi^2}$ do Sch.r. $\psi'' = (\xi^2 - \varepsilon)\psi$ a vyjdou podmínky pro koeficienty H_n

$$\psi(\xi) = \sum_{j=0}^{n} a_j \xi^j e^{-\alpha\xi^2}$$ přičemž $a_n \neq 0$, aby to byl polynom stupně n

$$\psi'(\xi) = \sum_{j=0}^{n} a_j \left[j\xi^{j-1}e^{-\alpha\xi^2} + \xi^j(-2\alpha\xi)e^{-\alpha\xi^2}\right] = \sum_{j=0}^{n} a_j\left(-2\alpha\xi^{j+1} + j\xi^{j-1}\right)e^{-\alpha\xi^2}$$

$$\Psi''(\xi) = \sum_{j=0}^{n} a_j\left[\left(-2\alpha(j+1)\xi^j + j(j-1)\xi^{j-2}\right) + (-2\alpha\xi)\left(-2\alpha\xi^{j+1} + j\xi^{j-1}\right)\right]e^{-\alpha\xi^2}$$

$$= \sum_{j=0}^{n} a_j\left[4\alpha^2\xi^{j+2} - 2\alpha(2j+1)\xi^j + j(j-1)\xi^{j-2}\right]e^{-\alpha\xi^2}$$

$\Psi''(\xi)$ se má rovnat $(\xi^2-\varepsilon)\Psi = \sum_{j=0}^{n} a_j\left(\xi^{j+2} - \varepsilon\xi^j\right)e^{-\alpha\xi^2}$ pro všechna ξ

→ musí si být rovny faktory u jednotlivých členů typu $\xi^m e^{-\alpha\xi^2}$ na obou stranách rovnice

porovnáme nejprve prefaktor u nejvyšší mocniny ξ^{n+2}:

$4\alpha^2 a_n = a_n$ → musí být $\alpha = \frac{1}{2}$ jako u základního stavu

členy s ξ^{j+2} se pak na obou stranách rovnají a zůstává:

$$\sum_{j=0}^{n} a_j\left\{\left[(2j+1)-\varepsilon\right]\xi^j - j(j-1)\xi^{j-2}\right\}e^{-\frac{1}{2}\xi^2} = 0$$ (ξ^{j-2} se neuplatní pro $j = 0$ a 1)

u ξ^n je pouze příspěvek $a_n(2n+1-\varepsilon)\xi^n e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ → $\varepsilon = 2n+1$

u ξ^{n-1} je pouze příspěvek $a_{n-1}(2n-1-\varepsilon)\xi^{n-1}e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ → $a_{n-1} = 0$

u ξ^j s $j = 0,1,\dots n-2$ jsou vždy dva příspěvky $\left[a_j(2j+1-\varepsilon) - a_{j+2}(j+2)(j+1)\right]\xi^j e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$

→ vztah mezi koeficienty ob jednu pozici $a_{j+2} = -\dfrac{(\varepsilon-2j-1)}{(j+2)(j+1)}a_j$

na základě těchto vývodů lze sestavit H_n a tedy Ψ_n až na normovací faktor

postřehy: - v $H_n(\xi)$ přežijí jen sudé nebo liché mocniny ξ $(a_{n-1}=0,\ a_{n-3}=0,\ a_{n-5}=0,\ \dots)$

→ výsledná Ψ_n bude sudá nebo lichá

- Ψ_n popisuje stav s $\varepsilon = 2n+1$ a tedy $E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$ (kvůli $E = \frac{1}{2}\hbar\omega\,\varepsilon$)

- H_n a tedy i Ψ_n má n uzlů

- normované řešení Sch.r. po převedení z tvaru $H_n(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ do původního x

$$\Psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x\right)e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \qquad E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

klasicky povolená oblast

H_n jsou tzv. Hermitovy polynomy („fyzikální", ještě existuje jiný typ)

Rodriguesova formule pro H_n

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

$H_5(\xi) = 32\xi^5 - 160\xi^3 + 120\xi$

$H_4(\xi) = 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12$

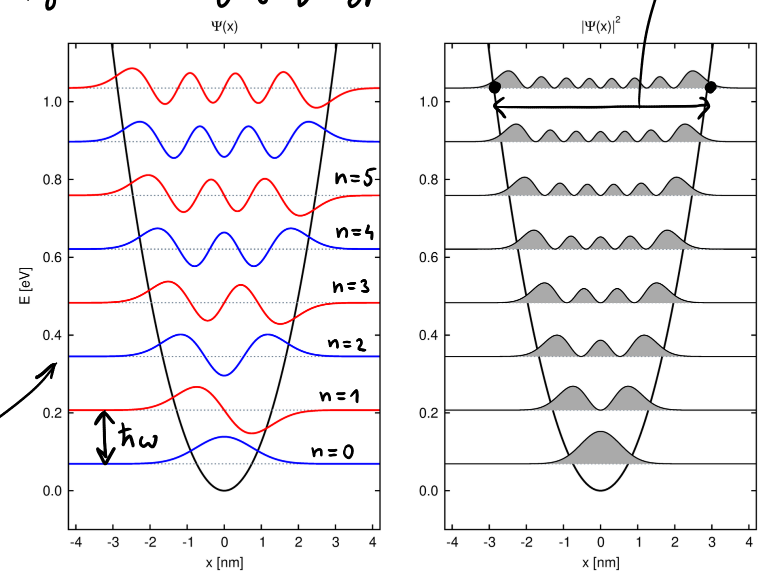
$H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi$

$H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2$

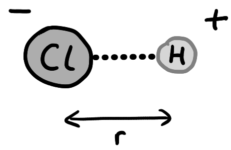
$H_1(\xi) = 2\xi$

$H_0(\xi) = 1$

$E = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$



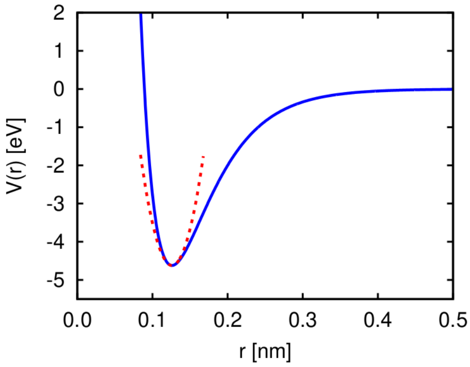
Př. kmity molekuly chlorovodíku



dvouatomová molekula obsahující ionty chlóru a vodíku

$m_H = 1.674 \cdot 10^{-27}\,kg \quad m_{Cl} = 58.9 \cdot 10^{-27}\,kg$

$\rightarrow$ redukovaná hmotnost $m = \dfrac{m_H m_{Cl}}{m_H + m_{Cl}} \approx m_H$



Vzájemná interakce iontů popsána Morseho potenciálem

$V(r) = D(e^{-2\alpha\xi} - 2e^{-\alpha\xi})$, kde $\xi = \dfrac{r - r_0}{r_0}$

parametry pro HCl: $r_0 = 0.126\,nm$, $D = 4.62\,eV$, $\alpha = 2.38$

minimum potenciálu $\rightarrow$ rovnovážná vzdálenost r_0

$$\frac{dV}{dr} = D\left[e^{-2\alpha\xi}(-2\alpha) - 2e^{-\alpha\xi}(-\alpha)\right]\frac{1}{r_0} = \frac{2D\alpha}{r_0}\left(-e^{-2\alpha\xi} + e^{-\alpha\xi}\right) = 0 \text{ pro } \xi = 0 \text{ tedy } r = r_0$$

harmonická aproximace – nahrazení potenciálu kvadratickým Taylorovým rozvojem v okolí minima

$$V(r) \approx V(r_0) + \frac{dV}{dr}\Big|_{r_0}(r - r_0) + \frac{1}{2}\frac{d^2V}{dr^2}\Big|_{r=r_0}(r - r_0)^2$$

lineární člen vypadne, protože r_0 odpovídá minimu, podstatný bude kvadratický

$$\frac{d^2V}{dr^2} = \frac{2D\alpha^2}{r_0^2}\left(2e^{-2\alpha\xi} - e^{-\alpha\xi}\right) \quad \rightarrow \quad V(r) \approx V(r_0) + \frac{1}{2}\underbrace{\frac{2D\alpha^2}{r_0^2}}_{k = m\omega^2}(r - r_0)^2$$

určení frekvence $\omega = \sqrt{\dfrac{2D\alpha^2}{m r_0^2}}$ $\quad f = \dfrac{\omega}{2\pi} \approx 9.07 \cdot 10^{13}\,Hz$

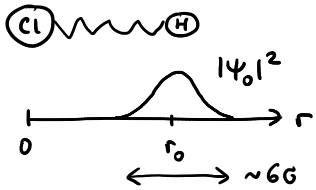
(odpovídající vlnová délka $3.3\,\mu m$ a vlnočet $3000\,cm^{-1}$ spadají do IR oblasti)

dále řešíme jako kvantový HO s danou ω a m

Pozn. Ignorujeme rotace molekuly a řešíme jako 1D problém, což odpovídá hodnotě tzv. vedlejšího kvantového čísla $l = 0$ (bude probráno v kontextu momentu hybnosti).

$\rightarrow$ odhad neurčitosti délky vazby v HCl v základním stavu (nulbodové oscilace)

základní kmitový stav HCl popsán vlnovou funkcí $\psi_0(r - r_0) = \left(\dfrac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(r - r_0)^2}$



$$|\psi_0|^2 \sim e^{-\frac{m\omega}{\hbar}(r - r_0)^2} = e^{-\frac{(r - r_0)^2}{2\sigma^2}} \qquad \sigma = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \approx 0.0075\,nm \approx 6\%\, r_0$$

$\rightarrow$ s $P = 68\%$ padne vzdálenost H a Cl do intervalu $(r_0 - \sigma, r_0 + \sigma)$

alternativně vyjádřeno pomocí neurčitosti délky vazby

$$\langle (r - r_0)^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\psi_0(x)|^2 dx = \frac{\hbar}{2m\omega} \quad \rightarrow \quad \sqrt{\langle (r - r_0)^2 \rangle} = \sigma$$

Př. Nulbodové oscilace v krystalu a Lindemannovo kritérium

Lindemannovo kritérium – krystal roztaje, pokud $\Delta r = \sqrt{\langle (r - r_0)^2 \rangle}$ překročí 10–15% r_0,

kde r_0 je vzdálenost sousedních atomů

- může nastat kvůli termálnímu chvění nebo už nulbodovým oscilacím
  ukázka - fázové diagramy He a Ne a L.k. pro krystaly vzácných plynů

② Algebraický přístup k HO

- odhalí celé spektrum HO pouze na základě $\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$ a $[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar$
  (fascinující ukázka nesmírné moci abstraktního formalismu)
- klíčovou roli hraje základní **komutátor** kvantové mechaniky $[\hat{x},\hat{p}] = \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar$
  vyčíslení v souř. reprezentaci: $[\hat{x},\hat{p}]\psi = x\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\psi - \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}(x\psi) = -\frac{\hbar}{i}\psi$

- převedení Hamiltoniánu do bezrozměrných proměnných / operátorů

  charakteristická délka a hybnost $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$, $p_0 = \sqrt{m\omega\hbar}$ $\rightarrow$ $\hat{Q} = \frac{\hat{x}}{x_0}$ $\quad \hat{P} = \frac{\hat{p}}{p_0}$

  základní komutátor $[\hat{Q},\hat{P}] = \frac{1}{x_0 p_0}[\hat{x},\hat{p}] = \frac{1}{\hbar}i\hbar = i$

  Hamiltonián $\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 = \frac{1}{2}\hbar\omega(\hat{P}^2 + \hat{Q}^2)$

- žebříkové operátory

  definujeme $\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{Q} + i\hat{P})$ a hermitovsky sdružený $\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{Q} - i\hat{P})$

  s pomocí nich $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2})$

  ověření $\hat{a}^+\hat{a} = \frac{1}{2}(\hat{Q} - i\hat{P})(\hat{Q} + i\hat{P}) = \frac{1}{2}\left[\hat{Q}^2 + \hat{P}^2 + i\overbrace{(\hat{Q}\hat{P} - \hat{P}\hat{Q})}^{[\hat{Q},\hat{P}]=i}\right] = \frac{1}{2}(\hat{Q}^2 + \hat{P}^2) - \frac{1}{2}$

  základní komutátor $[\hat{a},\hat{a}^+] = \frac{1}{2}[\hat{Q} + i\hat{P}, \hat{Q} - iP] = \frac{1}{2}i\overbrace{[P,Q]}^{-i} - \frac{1}{2}i\overbrace{[\hat{Q},\hat{P}]}^{i} = 1$

- vlastní hodnoty $\hat{a}^+\hat{a}$ (skrze ně získáme vlastní hodnoty $\hat{H}$)

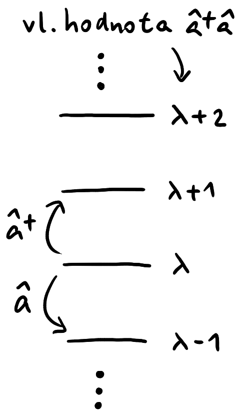
  vlastní problém $\hat{a}^+\hat{a}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$

  tvrzení: 1) λ nejsou záporné $\quad$ ověření: $\lambda = \langle\lambda|\hat{a}^+\hat{a}|\lambda\rangle =$ kvadrát normy $\hat{a}|\lambda\rangle \geq 0$

  2) $\hat{a}^+|\lambda\rangle$ je vlastní stav s vl. hodnotou $\lambda + 1$

  ověření: $(\hat{a}^+\hat{a})\hat{a}^+|\lambda\rangle = \hat{a}^+(1 + \hat{a}^+\hat{a})|\lambda\rangle = \hat{a}^+(1+\lambda)|\lambda\rangle = (\lambda+1)\hat{a}^+|\lambda\rangle$

  $[\hat{a},\hat{a}^+] = \hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a} = 1 \rightarrow \hat{a}\hat{a}^+ = 1 + \hat{a}^+\hat{a}$



  norma $\hat{a}^+|\lambda\rangle$: $\langle\lambda|\hat{a}\hat{a}^+|\lambda\rangle = \langle\lambda|1 + \hat{a}^+\hat{a}|\lambda\rangle = \lambda + 1$ pokud $\langle\lambda|\lambda\rangle = 1$

  $\rightarrow$ normovaný vl. stav s vl. hodnotou $\lambda+1$ je $|\lambda+1\rangle = \frac{1}{\sqrt{\lambda+1}}\hat{a}^+|\lambda\rangle$

  3) $\hat{a}|\lambda\rangle$ je vlastní stav $\hat{a}^+\hat{a}$ s vl. hodnotou $\lambda - 1$ (pokud je ≥ 0)

  ověření: $(\hat{a}^+\hat{a})\hat{a}|\lambda\rangle = (\hat{a}\hat{a}^+ - 1)\hat{a}|\lambda\rangle = \hat{a}\hat{a}^+\hat{a}|\lambda\rangle - \hat{a}|\lambda\rangle = (\lambda-1)\hat{a}|\lambda\rangle$

  norma $\hat{a}|\lambda\rangle$: $\langle\lambda|\hat{a}^+\hat{a}|\lambda\rangle = \lambda$ pokud $\langle\lambda|\lambda\rangle = 1$

  normovaný

  $\rightarrow$ normovaný vl. stav s vl. hodnotou $\lambda - 1$ je $|\lambda-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{\lambda}}\hat{a}|\lambda\rangle$

rafinovaná úvaha: Operátory $\hat{a}, \hat{a}^+$ vytvářejí žebříky vlastních hodnot s krokem 1.
Aby byly všechny vl. hodnoty ≥ 0 (tvrzení 1), je třeba žebříky zdola utnout, to může zařídit pouze $\hat{a}|\lambda=0\rangle = 0$ - níže už pak nejde sestoupit.

$\rightarrow$ žebřík je jediný a odvíjí se od $\lambda=0$ $\rightarrow$ vlastní hodnoty $\hat{a}^+\hat{a}$ jsou $0,1,2,3,\dots$

- vlastní hodnoty a stavy $\hat{H}$

- vlastní stavy $\hat{a}^+\hat{a}$ splňují $\hat{a}^+\hat{a}|n\rangle = n|n\rangle$ přičemž $n = 0,1,2,3,\dots$

jsou to zároveň vlastní stavy $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2})$ s vlastními energiemi $E_n = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})$

- přecházení mezi nimi je možné pomocí $\hat{a}, \hat{a}^+$: $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle$ $\hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$

- souvislost se souřadnicovou reprezentací

$|n\rangle$ odpovídá vlastní funkce $\psi_n(x)$ $\hat{a}$ odpovídá $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\hat{x}}{x_0} + i\frac{\hat{p}}{p_0}\right) \rightarrow \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{d}{dx}$

důsledky: 1) $\hat{a}|0\rangle = 0$ je dif. rovnice pro $\psi_0(x)$: $\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{d}{dx}\right)\psi_0(x) = 0$

2) $|n+1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n+1}}\hat{a}^+|n\rangle \rightarrow \psi_{n+1}(x) = \frac{1}{\sqrt{n+1}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{d}{dx}\right)\psi_n(x)$

umožní postupně sestavit celou sadu $\psi_n(x)$

Př. ukázka použití k výpočtu středních hodnot $\langle\hat{x}\rangle, \langle\hat{x}^2\rangle$ v základním stavu $|0\rangle$

přepis operátoru polohy pomocí $\hat{a}, \hat{a}^+$: $\hat{Q} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}+\hat{a}^+) \rightarrow \hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\,\hat{Q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}+\hat{a}^+)$

$\langle\hat{x}\rangle = \langle 0|\hat{x}|0\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\langle 0|\hat{a}+\hat{a}^+|0\rangle$

$= 0$ kvůli ortogonalitě $\langle 0|1\rangle = 0$

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

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

$$\langle\hat{x}^2\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\langle 0|(\hat{a}+\hat{a}^+)^2|0\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\langle 0|\underbrace{(\hat{a}+\hat{a}^+)|1\rangle}_{\sqrt{1}|0\rangle + \sqrt{2}|2\rangle} = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

3 Ehrenfestův teorém a časový vývoj HO

- Ehrenfestův teorém

- předpověď časového vývoje středních hodnot na základě komutátoru s Hamiltoniánem

střední hodnota $\langle\hat{A}\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$

- časově závislý stav $|\psi\rangle$ splňuje Schrödingerovu rovnici $i\hbar\frac{d|\psi\rangle}{dt} = \hat{H}|\psi\rangle$

- operátor $\hat{A}$ může být časově závislý (částice v nestacionárním poli), ale většinou není

časová derivace střední hodnoty

$$\frac{d\langle\hat{A}\rangle}{dt} = \frac{d}{dt}\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \left(\frac{d\langle\psi|}{dt}\right)\hat{A}|\psi\rangle + \langle\psi|\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}|\psi\rangle + \langle\psi|\hat{A}\frac{d}{dt}|\psi\rangle$$

(možno snadněji uchopit v souř. reprezentaci, kde $\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \int\psi^*(\vec{r},t)\,\hat{A}\,\psi(\vec{r},t)\,d^3\vec{r}$)

dosadíme $\frac{d}{dt}|\psi\rangle = \frac{1}{i\hbar}\hat{H}|\psi\rangle \xrightarrow{+} \frac{d}{dt}\langle\psi| = -\frac{1}{i\hbar}\langle\psi|\hat{H}$

$$\frac{d\langle\hat{A}\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\langle\psi|\hat{A}\hat{H}|\psi\rangle - \frac{1}{i\hbar}\langle\psi|\hat{H}\hat{A}|\psi\rangle + \langle\psi|\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}|\psi\rangle \rightarrow \frac{d\langle\hat{A}\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{A},\hat{H}]\rangle + \langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\rangle$$

Ehrenfestův teorém

- aplikace na HO

časový vývoj střední polohy $\langle\hat{x}\rangle$, systém řízený Hamiltoniánem $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$

$\frac{d\langle\hat{x}\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{x},\hat{H}]\rangle = \frac{1}{m}\langle\hat{p}\rangle$ (toto je univerzální výsledek pro libovolný potenciál)

$\frac{d\langle\hat{p}\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{p},\hat{H}]\rangle = -m\omega^2\langle\hat{x}\rangle$ (potřebné k uzavření soustavy ODR)

spojením vznikne diferenciální rovnice pro $\langle\hat{x}\rangle$ $\frac{d^2\langle\hat{x}\rangle}{dt^2} = -\omega^2\langle\hat{x}\rangle$

→ střední hodnota $\langle\hat{x}\rangle$ vykonává harmonický pohyb s frekvencí ω (pokud není konstantní a rovna neustále nule) – platí pro libovolný výchozí stav

výpočet potřebných komutátorů

využijeme $[\hat{x},\hat{p}] = \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar$

$$[\hat{x},\hat{H}] = \frac{1}{2m}\underbrace{[\hat{x},\hat{p}^2]}_{2i\hbar\hat{p}} + \frac{1}{2}m\omega^2\underbrace{[\hat{x},\hat{x}^2]}_{0}$$

$$[\hat{x},\hat{p}^2] = \underbrace{\hat{x}\hat{p}}_{i\hbar+\hat{p}\hat{x}}\hat{p} - \hat{p}\underbrace{\hat{p}\hat{x}}_{\hat{x}\hat{p}-i\hbar} = 2i\hbar\hat{p}$$

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

$$[\hat{p},\hat{x}^2] = \underbrace{\hat{p}\hat{x}}_{\hat{x}\hat{p}-i\hbar}\hat{x} - \hat{x}\underbrace{\hat{x}\hat{p}}_{i\hbar+\hat{p}\hat{x}} = -2i\hbar\hat{x}$$

doplněk – ukázka výpočtu středních hodnot algebraickým přístupem k HO

$\langle\hat{x}\rangle, \langle\hat{x}^2\rangle, \langle\hat{p}\rangle, \langle\hat{p}^2\rangle$ ve vlastním stavu $|n\rangle$ s energií $E_n = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})$

přepis příslušných operátorů pomocí $\hat{a}, \hat{a}^+$:

$$\hat{Q} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}+\hat{a}^+) \quad\rightarrow\quad \hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\,\hat{Q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}+\hat{a}^+)$$

$$\hat{P} = \frac{1}{\sqrt{2}i}(\hat{a}-\hat{a}^+) \quad\rightarrow\quad \hat{p} = \sqrt{m\omega\hbar}\,\hat{P} = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(\hat{a}^+-\hat{a})$$

vlastní výpočet:

$$\langle\hat{x}\rangle = \langle n|\hat{x}|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\langle n|\hat{a}+\hat{a}^+|n\rangle = 0$$

protože $(\hat{a}+\hat{a}^+)|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle + \sqrt{n+1}|n+1\rangle$ a ty jsou ortogonální na $|n\rangle$

$$\langle\hat{p}\rangle = \langle n|\hat{p}|n\rangle = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\langle n|\hat{a}^+-\hat{a}|n\rangle = 0$$ ze stejného důvodu

$$\langle\hat{x}^2\rangle = \langle n|\hat{x}^2|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\langle n|(\hat{a}+\hat{a}^+)^2|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}(2n+1) = \frac{E_n}{m\omega^2}$$

$$(\hat{a}+\hat{a}^+)(\hat{a}+\hat{a}^+)|n\rangle = (\hat{a}+\hat{a}^+)\left(\sqrt{n}|n-1\rangle + \sqrt{n+1}|n+1\rangle\right) =$$

$$= \sqrt{n}\sqrt{n-1}|n-2\rangle + \sqrt{n}\sqrt{n}|n\rangle + \sqrt{n+1}\sqrt{n+1}|n\rangle + \sqrt{n+1}\sqrt{n+2}|n+2\rangle$$

! nutno vynechat $|-1\rangle, |-2\rangle$, protože neexistují: $\hat{a}|0\rangle = 0$ a nikoli $\hat{a}|0\rangle = 0|-1\rangle$

$$\langle\hat{p}^2\rangle = (i)^2\frac{m\omega\hbar}{2}\langle n|(\hat{a}^+-\hat{a})^2|n\rangle = \frac{m\omega\hbar}{2}(2n+1) = m E_n$$

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

→ neurčitosti splňují: $\Delta x\,\Delta p = \frac{\hbar}{2}(2n+1)$