

$$\left(-\frac{d}{dX} + X \right)^n = (-1)^n \exp(X^2/2) \left(\frac{d}{dX} \right)^n \exp(-X^2/2)$$

a definiční vztah (28) pro Hermitovy polynomy, dostaneme již snadno vyjádření $\varphi_n(X)$, které po přechodu od X k proměnné x souhlasí s (30).

Závěrem jen zbývá upozornit na skutečnost, že všechny vlastnosti operátorů \hat{a} , \hat{a}^+ , zavedených v tomto odstavci, jsou shodné s vlastnostmi bosonových kreačních a anihilačních operátorů z odstavce VI.4. Že této, na první pohled formální, shodě lze přiřadit velice efektivní fyzikální představu, ukážeme dále v odst.3.2.

3. Soubor nezávislých harmonických oscilátorů

3.1) Hamiltonián, jeho vlastní vektory a vlastní hodnoty

Uvažujme nyní o souboru N nezávislých (tj. vzájemně neinteragujících) harmonických oscilátorů s vlastními frekvencemi $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_N$. Celková energie tohoto souboru je prostě součtem energií jednotlivých oscilátorů, takže klasický hamiltonián souboru je součtem hamiltoniánů tvaru (7)

$$H = \sum_{i=1}^N \left[\frac{p_i^2}{2 m_i} + \frac{1}{2} m_i \omega_i^2 x_i^2 \right] \quad (52)$$

kde x_i , $p_i = m_i \dot{x}_i$ je souřadnice a hybnost i -tého oscilátoru s vlastní frekvencí ω_i .

Kvantověmechanický hamiltonián souboru \hat{H} dostaneme opět náhradou p_i operátorem \hat{p}_i a x_i operátorem \hat{x}_i ($i=1,2,\dots,N$) :

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left[\frac{\hat{p}_i^2}{2 m_i} + \frac{1}{2} m_i \omega_i^2 \hat{x}_i^2 \right] \quad (53)$$

Protože oscilátory jsou zcela nezávislé, nemůže měření na jednom z nich nijak ovlivnit stavy zbývajících $N-1$ oscilátorů; to však znamená (srov. odst. IV.3.3), že operátory vztahující se ke dvěma různým oscilátorům musí komutovat a jediné nenulové komutátory pak budou vždy (8b). Platí tedy

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0 \quad (i, j=1, 2, \dots, N) \quad (54a)$$

$$[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 \quad (54b)$$

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij} \quad (54c)$$

($\delta_{ij} = 0$ pro $i \neq j$, $\delta_{ij} = 1$ pro $i=j$).

Pro každý z oscilátorů můžeme nyní provést transformace od operátorů \hat{x}_i , \hat{p}_i k \hat{x}_i , \hat{p}_i a potom k \hat{a}_i , \hat{a}_i^\dagger podle vztahů (9) a (31) (doplníme v nich pouze index $i=1,2,\dots,N$). Hamiltonián (53) tak přejde na tvar

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \hbar \omega_i \left(\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \frac{1}{2} \right) = \sum_{i=1}^N \hbar \omega_i \left(\hat{n}_i + \frac{1}{2} \right) \quad (55)$$

kde

$$\hat{n}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \quad (56)$$

a z komutačních relací (54) dostaneme

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = 0, \quad [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0, \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij} \quad (57)$$

Vlastní funkce (vektory) a vlastní hodnoty hamiltoniánu (53) (resp. (55)), tj. řešení stacionární Schrödingerovy rovnice

$$\hat{H} \Psi(x_1, x_2, \dots, x_N) = E \Psi(x_1, x_2, \dots, x_N) \quad (58a)$$

resp. k (55)

$$\hat{H} |n_1, n_2, \dots, n_N\rangle = E |n_1, n_2, \dots, n_N\rangle, \quad (58b)$$

snadno vytvoříme z již získaného řešení pro jeden oscilátor. Hamiltonián neinteragujících oscilátorů (částic) je totiž součtem hamiltoniánů pro jednotlivé oscilátory a jak víme (srov. např. odst. VI.2), je v takovém případě mnohačásticová vlnová funkce $\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N)$ ($|n_1, n_2, \dots, n_N\rangle$) součinem jednočásticových vlnových funkcí

$$\Psi_{n_1, n_2, \dots, n_N}(x_1, x_2, \dots, x_N) = \varphi_{n_1}(x_1) \varphi_{n_2}(x_2) \dots \varphi_{n_N}(x_N) \quad (59a)$$

resp.

$$|n_1, n_2, \dots, n_N\rangle = |n_1\rangle \cdot |n_2\rangle \dots |n_N\rangle \quad (59b)$$

Vlastní hodnota energie příslušná ke stavu (59) je

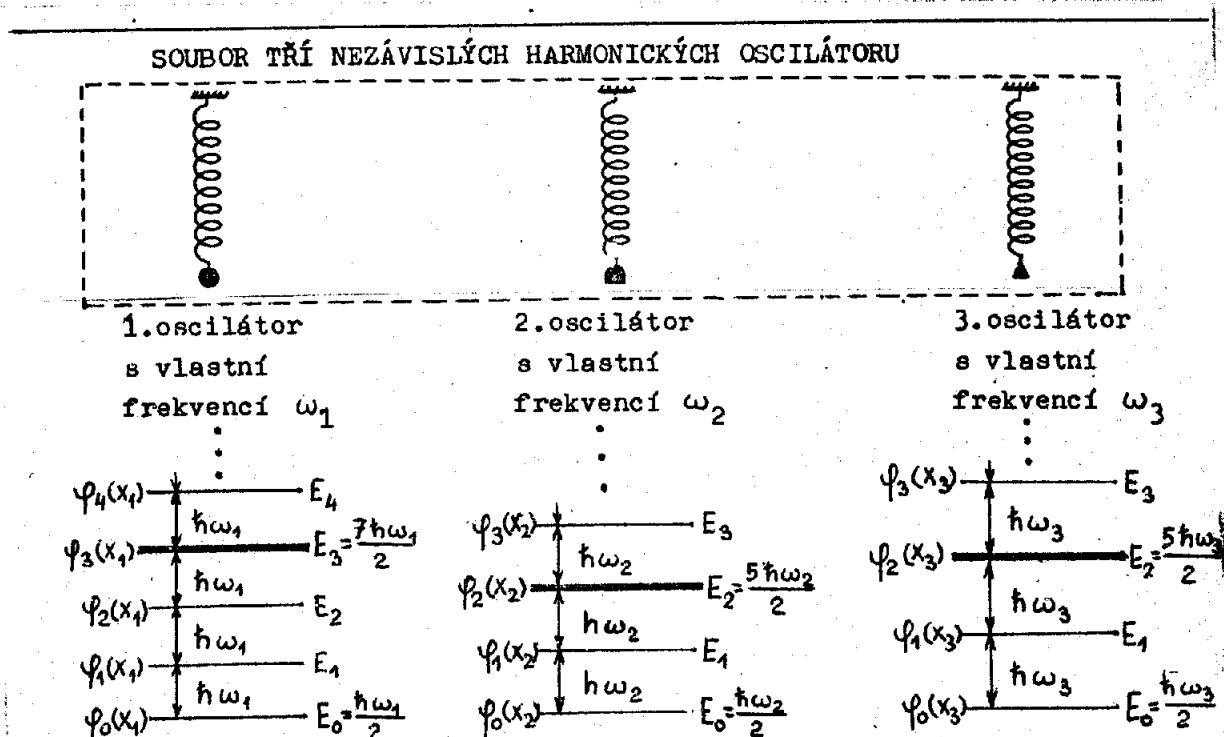
$$E_{n_1, n_2, \dots, n_N} = \hbar \omega_1 \left(n_1 + \frac{1}{2} \right) + \hbar \omega_2 \left(n_2 + \frac{1}{2} \right) + \dots + \hbar \omega_N \left(n_N + \frac{1}{2} \right) \quad (60)$$

Vlnová funkce (stavový vektor) (59) odpovídá stavu souboru v němž 1. oscilátor (s frekvencí ω_1) je ve stavu $\varphi_{n_1}(x_1)$, 2. oscilátor

(s frekvencí ω_2) je ve stavu $\varphi_{n_2}(x_2)$, ..., N-tý oscilátor (s frekvencí

ω_N) je ve stavu $\varphi_{n_N}(x_N)$. Schematické znázornění pro tři oscilátory

je v obr.4.



Obr.4

Energiová spektra tří nezávislých harmonických oscilátorů.

Je-li 1.oscilátor ve stavu $\psi_3(x_1)$, 2.oscilátor ve stavu $\psi_2(x_2)$ a 3.oscilátor ve stavu $\psi_2(x_3)$ ($n_1=3, n_2=2, n_3=2$), je vlnová funkce souboru těchto tří oscilátorů rovna ($\psi_{n_1}(x_1)$ jsou funkce (30))

$$\Psi_{3,2,2}(x_1, x_2, x_3) = \psi_3(x_1) \psi_2(x_2) \psi_2(x_3)$$

nebo vlastní vektor ($|n_1\rangle$ jsou dány (49))

$$\begin{aligned} |3,2,2\rangle &= |3\rangle|2\rangle|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3!}\sqrt{2!}\sqrt{2!}} \hat{a}_1^+ \hat{a}_1^+ \hat{a}_1^+ \hat{a}_2^+ \hat{a}_2^+ \hat{a}_3^+ \hat{a}_3^+ |0\rangle = \\ &= \frac{1}{2\sqrt{6}} (\hat{a}_1^+)^3 (\hat{a}_2^+)^2 (\hat{a}_3^+)^2 |0\rangle \end{aligned}$$

Energie souboru v tomto stavu je

$$E_{3,2,2} = \hbar \omega_1 \left(3 + \frac{1}{2}\right) + \hbar \omega_2 \left(2 + \frac{1}{2}\right) + \hbar \omega_3 \left(2 + \frac{1}{2}\right)$$

3.2) Kvazičásticové pojetí

Předchozí výsledky dovolují interpretaci, která se v posledních dvou až tří desetiletích ukázala velice plodnou např. v teorii pevných látek. Její kořeny jsou však v kvantové teorii pole. Zde se pokusíme nastínit jen základní ideu.

Rozhodneme-li se odečítat energii oscilátoru od jeho základního stavu $E_0 = \hbar\omega/2$, bude jeho energie v n -tém excitovaném stavu $|n\rangle$ rovna $n\hbar\omega$. Hamiltonián, který dává tyto vlastní hodnoty (vlastní vektory se přitom nemění), je $\hat{H}' = \hat{H} - \hbar\omega/2$, tj

$$\hat{H}' = \hbar\omega \hat{a}^+ \hat{a} - \hbar\omega \hat{n} \quad (61)$$

Pro tento hamiltonián tudíž platí (srov. (45), (46))

$$\hat{H}' |n\rangle = E'_n |n\rangle \quad (62a)$$

kde

$$E'_n = n \hbar \omega \quad (62b)$$

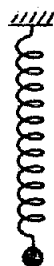
Energie oscilátoru v excitovaném stavu $|n\rangle$ (tj. E'_n) je tedy součtem n kvant energie velikosti $\hbar\omega$. Působením operátoru \hat{a}^+ na stav $|n\rangle$ dostáváme (viz (48)) stav $|n+1\rangle$, kterému přísluší energie $(n+1)\hbar\omega$; energie oscilátoru je tedy o jedno kvantum $\hbar\omega$ bohatší a protože ke vzniku (zrodu, kreaci) stavu s tímto dodatečným kvantem došlo působením operátoru \hat{a}^+ na stavový vektor $|n\rangle$, nazveme operátor \hat{a}^+ kreačním operátorem. Podobně působením operátoru \hat{a} na $|n\rangle$ dostaneme stav $|n-1\rangle$ s energií $(n-1)\hbar\omega$, tj. stav o jedno kvantum $\hbar\omega$ chudší. Působením \hat{a} na $|n\rangle$ tedy dojde k zániku (anihilaci) kvanta $\hbar\omega$ a proto nazveme \hat{a} anihilačním operátorem.

Ještě názornější je působení operátorů \hat{a} , \hat{a}^+ v souboru, který je z energetického hlediska právě studovanému ekvivalentní. Mějme ideální plyn (tj. bez interakce mezi částicemi) obsahující n stejných částic, každá s energií $\hbar\omega$. Celková energie tohoto souboru je součtem energií jednotlivých částic, tj. $n\hbar\omega$. Klasický hamiltonián tudíž je $H = n\hbar\omega$ a kvantověmechanický z něho dostaneme náhradou počtu částic v souboru n operátorem počtu částic \hat{n} . Vlastní hodnotou tohoto operátoru ve stavu s n částicemi - označíme ho $|n\rangle$ - musí být číslo n . Je zřejmé, že operátor $\hat{n} = \hat{a}^+ \hat{a}$ definovaný vztahem (32) těmito požadavkům vyhovuje. Názorný smysl mají i operátory \hat{a} , \hat{a}^+ pomocí nichž je vyjádřen: relace (48) ukazují, že působením operátoru \hat{a}^+ na stav $|n\rangle$ s n částicemi dostaneme stav $|n+1\rangle$ odpovídající souboru (ideálnímu plynu) s $n+1$ částicemi; působením \hat{a}^+ na $|n\rangle$ došlo ke kreaci (vzniku) jedné částice. Podobně působením \hat{a} na $|n\rangle$ dostaneme stav $|n-1\rangle$ s $n-1$ částicemi; působením \hat{a} na $|n\rangle$ dojde k anihilaci (zániku) jedné částice (obr.5).

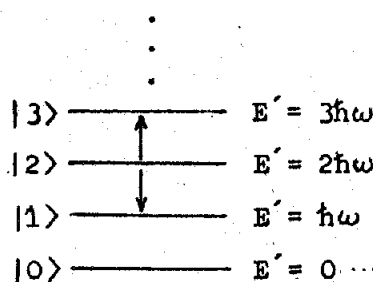
Zobecnění na soubor N nezávislých harmonických oscilátorů s vlastními frekvencemi $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_N$ je již snadné. Z energetického hlediska je soubor N oscilátorů ve stavu (59) (energií všech oscilátorů odečítáme od základního stavu)

$$|n_1, n_2, \dots, n_N\rangle \quad (63)$$

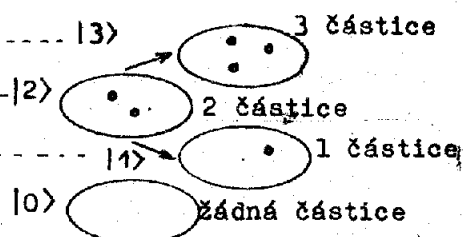
Harmonický
oscilátor
s vlastní
frekvencí ω



Jeho energiové
spektrum



Energeticky
ekvivalentní ideální
plyn obsahující
proměnný počet částic



Obr.5

Energeticky ekvivalentní soustavy: harmonický oscilátor ve stavu $|n\rangle$ a ideální plyn s n částicemi, každá s energií $\hbar\omega$. Přechodu oscilátoru do stavu $|n+1\rangle$ musí odpovídat v ekvivalentním plynu kreace částice, přechod oscilátoru do stavu $|n-1\rangle$ se naopak musí v plynu projevit anihilací částice.

ekvivalentní ideálnímu plynu v němž je

n_1 částic, každá s energií $\hbar\omega_1$

n_2 částic, každá s energií $\hbar\omega_2$

\vdots

n_N částic, každá s energií $\hbar\omega_N$

přičemž $n_i = 0, 1, 2, 3, \dots$ a $i = 1, 2, 3, \dots, N$.

Působením operátoru \hat{a}_i^+ na stav (63) dostaneme vlastní vektor stavu v němž je o jednu částici s energií $\hbar\omega_i$ více (kreace částice);

působení \hat{a}_i dá naopak stav v němž je o jednu částici s energií $\hbar\omega_i$ méně (anihilace částice). Touto problematikou jsme se ostatně již zabývali v kapitole VI, odst.4.

Na první pohled se může zdát zbytečné zavádět navíc jakýsi ideální plyn složený z nějakých fiktivních částic. Skutečností ovšem je (uvidíme to hned v odst.5), že zpravidla ani soubor nezávislých harmonických oscilátorů nelze přímo ztotožňovat s jednotlivými kmitajícími částicemi studované soustavy (např. s kmitajícími atomy v molekule nebo krystalu). Přechod k další, energeticky ekvivalentní soustavě - kvazičásticovému ideálnímu plynu - poskytuje daleko jdoucí možnosti názorné interpretace řady fyzikálních dějů, především v pevných látkách. To je však problematika ležící již mimo rámec skript; úvod k ní najdete např. v [15].