$$\mathcal{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,\hat{x} \quad , \quad \mathcal{P} = \sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}}\,\hat{p} \tag{9a}$$

Položíme-li ještě

$$\hat{H} = \hbar\omega\,\mathcal{H} \tag{9b}$$

bude

$$\boxed{\mathcal{H} = \frac{1}{2}\left(\mathcal{P}^2 + \mathcal{X}^2\right)} \tag{10a}$$

a k tomu komutátor

$$\boxed{[\mathcal{X}, \mathcal{P}] = i} \tag{10b}$$

Naším úkolem nyní je, nalézt vlastní hodnoty ε a vlastní vektory $|\varphi\rangle$ hamiltoniánu $\mathcal{H}$, tzn. řešit Schrödingerovu rovnici

$$\mathcal{H}|\varphi\rangle = \varepsilon|\varphi\rangle \tag{11}$$

V terminologii potenciálových jam z kap.III jde o nalezení možných stavů částice v parabolické potenciálové jámě, neboť $V(x) \sim x^2$.

2. Schrödingerova rovnice pro harmonický oscilátor

2.1) Řešení v souřadnicové reprezentaci

Hamiltonián (10a) převedeme do souřadnicové reprezentace tak (viz kap.IV, odst.3), že za operátor souřadnice $\mathcal{X}$ vezmeme přímo proměnnou X. Diferenciální operátor pro $\mathcal{P}$ musí vyhovovat (10b). Pro původní impuls $\hat{p}$ z (8) by bylo $\hat{p} = -i\hbar\,(\partial/\partial x)$, pro transformovaný impuls $\mathcal{P}$ je

$$\mathcal{P} = -i\,\frac{d}{dX} \tag{12}$$

Schrödingerova rovnice (11) má v této reprezentaci tvar

$$\frac{1}{2}\left(-\frac{d^2}{dX^2} + X^2\right)\varphi(X) = \varepsilon\,\varphi(X) \tag{13a}$$

nebo po úpravě

$$\boxed{\frac{d^2\varphi(X)}{dX^2} + \left(2\varepsilon - X^2\right)\varphi(X) = 0} \tag{13b}$$

Vlastní vektory $|\varphi\rangle$ jsou nyní reprezentovány vlnovými funkcemi $\varphi(X)$.

Řešení této diferenciální rovnice není již tak snadné, jako tomu bylo např. u rovnic z kap.III. Nejde totiž o diferenciální rovnici s konstantními koeficienty. Protože základní myšlenky řešení se využívají i při jiných úlohách, provedeme ho zde podrobněji.

Předně potřebujeme k rovnici (13) okrajové podmínky. Získáme je z obecných požadavků kladených na vlnové funkce, které jsme shrnuli v kap.II,odst.3.4 : $\varphi(X)$ musí být pro všechna X spojitá i s 1.derivací, jednoznačná, konečná a kvadraticky integrovatelná. Protože koeficienty rovnice (13) jsou pro konečná X konečné, jsou jejími jedinými singulárními body $X=-\infty$ a $X=+\infty$, takže musíme hledat taková řešení, která jsou pro $X \to \pm\infty$ konečná. Uvidíme, že takováto řešení existují pouze pro některé hodnoty ε ; tyto hodnoty budou hledanými vlastními hodnotami operátoru $\mathcal{H}$.

Pro velká X ($X \to \pm\infty$) vyhovuje rovnici (13) řešení

$$\varphi_\infty(X) = \exp(\pm X^2/2).$$

Ověříme to prostým dosazením do (13) s tím, že zanedbáme 2ε a 1 proti X^2 ($[\exp(\pm X^2/2)]'' \to X^2\exp(\pm X^2/2)$; $(2\varepsilon - X^2) \to -X^2$). Má-li $\varphi(X)$ být konečná pro $X \to \pm\infty$, musíme ze dvou uvedených řešení vybrat pouze

$$\varphi_\infty(X) = \exp(-X^2/2) \tag{14}$$

Řešení rovnice (13) v celém intervalu X nyní budeme hledat ve tvaru

$$\varphi(X) = F(X)\exp(-X^2/2) \tag{15}$$

kde funkce F(X) musí být taková, aby pro $X \to \pm\infty$ platilo $\varphi(X) \to 0$.

Dosazením (15) do rovnice (13) a vydělením $\exp(-X^2/2)$ obdržíme diferenciální rovnici pro funkci F(X)

$$\frac{d^2F}{dX^2} - 2X\frac{dF}{dX} + (2\varepsilon - 1)F = 0 \tag{16}$$

Zdánlivě jsme nic nezískali, neboť místo jedné rovnice (tj.(13)) máme nyní jinou, na první pohled dokonce složitější. Matematicky erudovanější čtenář však v (15) pozná jednu ze známých rovnic teorie tzv. speciálních funkcí; v našem případě je to rovnice pro Hermitovy polynomy. Pro nás je však důležité seznámit se i s vlastním postupem řešení, takže se neomezíme pouze na tento odkaz.

Hledejme řešení rovnice (16) ve tvaru mocninné řady

$$F(X) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k X^k \tag{17}$$

Dosazením (17) do rovnice (16) dostaneme

$$\sum_{k=0}^{\infty} k(k-1)\, a_k X^{k-2} + \sum_{k=0}^{\infty} (2\varepsilon - 2k - 1)\, a_k X^k = 0$$

V první sumě je pro k=0 a k=1 součinitel $k(k-1)$ roven nule, takže můžeme sumaci začít až od k=2. Jestliže nyní v této sumě zaměníme k na k+2, bude se nové k měnit od 0 do ∞ a spolu s druhou sumou dá

$$\sum_{k=0}^{\infty} \left[(k+2)(k+1)\, a_{k+2} + (2\varepsilon - 2k - 1)\, a_k \right] X^k = 0 \qquad (18)$$

Aby součet mocninné řady byl pro všechna X roven nule, musí být koeficienty u všech mocnin X nulové. Pro řadu v (18) to znamená, že musí být výrazy v hranatých závorkách rovny nule a tedy

$$a_{k+2} = \frac{2k - 2\varepsilon + 1}{(k+2)(k+1)}\, a_k \qquad (19)$$

Z tohoto rekurentního vzorce můžeme postupně určovat koeficienty a_k ; dva první koeficienty - a_o, a_1 - představují zatím neurčené konstanty z obecného řešení rovnice (16).
Platí tedy

$$F(X) = a_o \left[1 + \frac{1-2\varepsilon}{1.2} X^2 + \frac{(1-2\varepsilon)(5-2\varepsilon)}{1.2.3.4} X^4 + \dots \right] +$$

$$+ a_1 \left[X + \frac{3-2\varepsilon}{2.3} X^3 + \frac{(3-2\varepsilon)(7-2\varepsilon)}{2.3.4.5} X^5 + \dots \right] =$$

$$= a_o F_o(X) + a_1 F_1(X) \qquad (20)$$

kde $F_o(X)$, $F_1(X)$ značí odpovídající řady v závorkách.

Ukažme nyní, že pro nás přijatelné jsou pouze konečné řady, tj. polynomy, $F_o(X)$, $F_1(X)$.

Pro $F_o(X)$ i $F_1(X)$ je poměr dvou následujících členů řady roven

$$\frac{a_{k+2} X^{k+2}}{a_k X^k} = \frac{2k - 2\varepsilon + 1}{(k+2)(k+1)} X^2$$

Pro velká k bude tento poměr $\approx X^2/k$. Stejný poměr členů má pro velká k rozvoj

$$\exp(X^2) = 1 + \frac{X^2}{1!} + \frac{X^4}{2!} + \dots = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{X^{2k}}{k!}$$

Kdyby řady $F_o(X)$, $F_1(X)$ zůstaly nekonečné, potom by se pro velká X chovaly podobně jako $\exp(X^2)$, takže by pro $X \to \pm\infty$ rostly nad všechny meze. Protože totéž by platilo pro vlnové funkce (15) , jsou taková řešení fyzikálně nepřijatelná. Jediným východiskem je ukončit řady pro nějaké k=n takže $F_o(X)$, resp $F_1(X)$, se stane polynomem, který spolu se součinitelem $\exp(-X^2/2)$ v (15) dá řešení $\varphi(X) \to 0$ pro $X \to \pm\infty$.

Provést to můžeme, neboť v rekurentní formuli (19) máme zatím neurčenou veličinu ε ; položíme-li ε rovno

$$\varepsilon_n = n + \frac{1}{2} \qquad (n=0,1,2,\ldots) \tag{21}$$

plyne z (19), že bude $a_{n+2} = a_{n+4} = \ldots = 0$. Pro n sudé se tak stane $F_o(X)$ polynomem stupně n, pro n liché to bude naopak $F_1(X)$. Protože volba (21) omezí vždy jen jednu z řad $F_o(X), F_1(X)$, musíme položit $a_o \neq 0$, $a_1 = 0$ pro n sudé a $a_o = 0$, $a_1 \neq 0$ pro n liché, máme-li získat fyzikálně přijatelné vlnové funkce.

Získali jsme tedy vlastní funkce hamiltoniánu (10a) ve tvaru

$$\varphi_n(X) = \exp(-X^2/2)\, f_n(X) \quad , n=0,1,2,\ldots \tag{22}$$

kde $f_n(X)$ je polynom stupně n; odpovídající vlastní hodnoty ε_n jsou dány vztahem (21). Podle (9b) jsou vlastní hodnoty původního hamiltoniánu $\hat{H}$, tj možné hodnoty energie lineárního harmonického oscilátoru, rovny $E_n = \hbar\omega\varepsilon_n$, takže

$$\boxed{E_n = (n + \frac{1}{2})\, \hbar\omega} \qquad n = 0,1,2,\ldots \tag{23}$$

Tento výsledek je v souladu s Planckovým předpokladem, že harmonický oscilátor může přijímat nebo odevzdávat energii jen po kvantech $\hbar\omega$. Nově se zde objevuje fakt, že v základním stavu, tj.pro n = 0 , je energie oscilátoru nenulová a rovna

$$E_o = \frac{\hbar\,\omega}{2}$$

Existence těchto tzv nulbodových oscilací je potvrzena mnoha experimenty, např. rozptylem světla na krystalové mříži při teplotách jdoucích k 0K aj. Skutečnost, že kvantový oscilátor nemůže být nikdy v absolutním klidu vyplývá též z relací neurčitosti: řádově musí být energie oscilátoru

$$E \geqslant \frac{\Delta p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\Delta x^2 \geqslant \frac{\Delta p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\left(\frac{\hbar}{\Delta p}\right)^2$$

Chápeme-li tuto veličinu jako funkci Δp, zjistíme snadno, že má minimum pro $\Delta p \simeq \sqrt{m\hbar\omega}$ a řádově je tedy rovna $\hbar\omega$.

Vraťme se ještě k vlastním funkcím (22). Zapíšeme je ve tvaru

$$\boxed{\varphi_n(X) = A_n \exp(-X^2/2)\, H_n(X)} \tag{24}$$

kde A_n je normalizační konstanta a $H_n(X)$ jsou Hermitovy polynomy vyhovující rovnici (získá se z (16) a (21))

$$\frac{d^2H_n}{dX^2} - 2X\frac{dH_n}{dX} + 2nH_n = 0 \tag{25}$$

Výrazy pro Hermitovy polynomy plynou z (20); koeficient a_0 pro n sudé a a_1 pro n liché se volí tak, aby koeficient u nejvyšší mocniny X v $H_n(X)$ byl roven 2^n. Několik prvních Hermitových polynomů je uvedeno v tab. 1.

Tabulka 1
Hermitovy polynomy $H_n(X)$ pro n=0,1,2,3,4,5

$H_0(X) = 1$
$H_1(X) = 2X$
$H_2(X) = 4X^2 - 2$
$H_3(X) = 8X^3 - 12X$
$H_4(X) = 16X^4 - 48X^2 + 12$
$H_5(X) = 32X^5 - 160X^3 + 120X$

Obecně, pro sudá i lichá n, lze psát

$$H_n(X) = (2X)^n - \frac{n(n-1)}{1}(2X)^{n-2} + \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{1.2}(2X)^{n-4} \dots \qquad (26)$$

Pro tři po sobě jdoucí polynomy platí rekurentní formule

$$H_n - 2X\,H_{n-1} + 2(n-1)\,H_{n-2} = 0 \qquad (27)$$

vhodná např. na výpočet Hermitových polynomů na počítači.
Často se též Hermitovy polynomy vyjadřují vztahem

$$H_n(X) = (-1)^n \exp(X^2)\frac{d^n}{dX^n}\exp(-X^2) \qquad (28)$$

Podrobnější informace o Hermitových polynomech najdete např.v [3], [13].

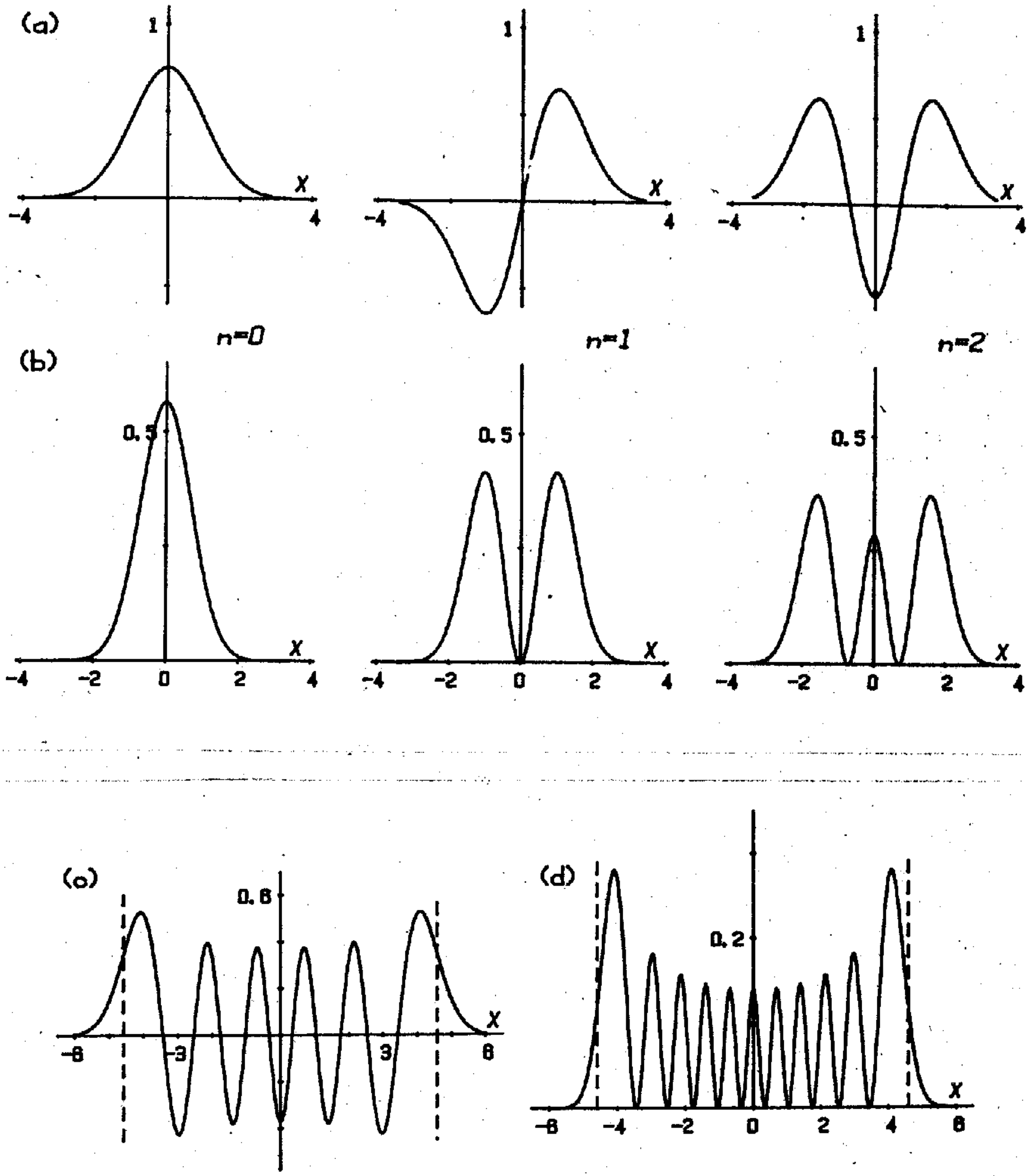
Známe-li již konkrétní tvar Hermitových polynomů, můžeme z normalizační podmínky $\int_{-\infty}^{\infty} |\varphi_n(X)|^2 dX$ určit normalizační konstantu A_n v (24). Výpočet dá ([2], [3])

$$A_n = (\,2^n\sqrt{\pi}\;n!\,)^{-1/2} \qquad (29)$$

Vrátíme-li se k původní proměnné $x=(\hbar/m\omega)^{1/2}X$, budou normalizované vlnové funkce harmonického oscilátoru rovny

$$\boxed{\varphi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/4}\frac{1}{\sqrt{2^n\sqrt{\pi}\;n!}}\,H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x\right)\exp\left[-\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)\left(\frac{x^2}{2}\right)\right]} \qquad (30)$$

Odpovídající vlastní hodnoty jsou dány výrazem (23).
Několik vlnových funkcí, spolu s příslušnou hustotou pravděpodobnosti, je v obr.3.



Obr. 3

(a) Vlnové funkce $\varphi_n(x)$ pro n=0,1,2 a (b) odpovídající hustoty pravděpodobnosti výskytu částice; $X = \sqrt{m\omega/\hbar}\ x$ a na ose y jsou vynášeny hodnoty: (a) $(\hbar/m\omega)^{1/4}\ \varphi_n(x)$, (b) $(\hbar/m\omega)^{1/2}\ \varphi_n^2(x)$.

(c) vlnová funkce $(\hbar/m\omega)^{1/4}\ \varphi_{10}(x)$ a

(d) hustota pravděpodobnosti $(\hbar/m\omega)^{1/2}\ \varphi_{10}^2(x)$

V obrázcích (c),(d) jsou čárkovaně vyznačeny body obratu klasického oscilátoru; pro oscilátor s energií E_n leží v bodech $X = \pm\ (2n+1)^{1/2}$.

2.2) Algebraické řešení

Předvedeme si nyní elegantní způsob nalezení vlastních vektorů a vlastních hodnot hamiltoniánu (10a). Nebudeme přitom potřebovat žádnou konkrétní reprezentaci operátorů $\mathcal{X}, \mathcal{P}$, ale vystačíme pouze se znalostí komutátoru (10b), který jsme získali z postulovaného komutátoru (8b).

Přejděme nejprve od operátorů $\mathcal{P}, \mathcal{X}$ k novým operátorům $\hat{a}$, $\hat{a}^+$, které definujeme takto:

$$\hat{a} = 2^{-1/2}(\mathcal{X} + i\mathcal{P}) \quad , \quad \hat{a}^+ = 2^{-1/2}(\mathcal{X} - i\mathcal{P}) \qquad (30)$$

Operátory $\mathcal{P}, \mathcal{X}$ jsou hermitovské (musí být, neboť reprezentují měřitelné veličiny), takže platí (viz (IV.43b)):

$$\mathcal{X}^+ = \mathcal{X} \quad , \quad \mathcal{P}^+ = \mathcal{P} \quad .$$

Počítejme nyní operátor hermitovsky sdružený k $\hat{a}$ (dělá se to tak, že se všechny operátory ve výrazu nahradí hermitovsky sdruženými a změní se znaménka u i):

$$(\hat{a})^+ = 2^{-1/2}(\mathcal{X}^+ - i\mathcal{P}^+) = 2^{-1/2}(\mathcal{X} - i\mathcal{P}) = \hat{a}^+$$

Vidíme, že operátory $\hat{a}$, $\hat{a}^+$, definované (31), jsou hermitovsky sdružené, nejsou však hermitovské, neboť $\hat{a} \neq \hat{a}^+$. Protože nejsou hermitovské, nemohou reprezentovat nějakou měřitelnou fyzikální veličinu (viz 2.postulát). To však neznamená, že s nimi nemůžeme s výhodou pracovat a vytvářet z nich případně operátory hermitovské, zobrazující již měřitelné veličiny. Tak např. již operátor

$$\hat{n} = \hat{a}^+ \hat{a} \qquad (32)$$

je hermitovský. Skutečně, vzpomeneme-li si, že hermitovsky sdružit součin operátorů znamená hermitovsky sdružit jednotlivé operátory a v součinu je psát v opačném pořadí, platí

$$(\hat{a}^+ \hat{a})^+ = \hat{a}^+ (\hat{a}^+)^+ = \hat{a}^+ \hat{a} \text{ , takže } \hat{n}^+ = \hat{n} \text{ .}$$

Komutátor $[\hat{a}, \hat{a}^+]$ získáme snadno z (31) a (10b):

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

$$= \frac{1}{2}\left[\mathcal{X}\mathcal{X} + i\mathcal{P}\mathcal{X} - i\mathcal{X}\mathcal{P} + \mathcal{P}\mathcal{P} - \mathcal{X}\mathcal{X} + i\mathcal{P}\mathcal{X} - i\mathcal{X}\mathcal{P} - \mathcal{P}\mathcal{P}\right] =$$

$$= -i[\mathcal{X}, \mathcal{P}] \quad , \quad \text{takže}$$

$$\boxed{[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1} \qquad (33)$$

Vyjádříme nyní hamiltonián (10a) pomocí $\hat{a}$, $\hat{a}^+$. Obrátíme-li transformace (31), dostaneme

$$\mathcal{X} = 2^{-1/2}(\hat{a}^+ + \hat{a}) \quad , \quad \mathcal{P} = i\, 2^{-1/2}(\hat{a}^+ - \hat{a}) \qquad (34)$$

Dosazením do (10a) a užitím (33) získáme

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}(\mathcal{X}^2 + \mathcal{P}^2) = \frac{1}{4}\left[(\hat{a}^+ + \hat{a})^2 - (\hat{a}^+ - \hat{a})^2\right] =$$
$$= \frac{1}{4}\left[\hat{a}^+\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}\hat{a} - \hat{a}^+\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}\hat{a}\right] =$$
$$= \frac{1}{2}(\hat{a}^+\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^+) = \hat{a}^+\hat{a} - \frac{1}{2} ,$$

takže

$$\boxed{\mathcal{H} = \hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}} \tag{35a}$$

nebo s operátorem $\hat{n}$ definovaným vztahem (32)

$$\boxed{\mathcal{H} = \hat{n} + \frac{1}{2}} \tag{35b}$$

Našim úkolem nyní je, nalézt vlastní vektory a vlastní hodnoty tohoto hamiltoniánu. K tomu nám budou ještě užitečné komutátory $[\mathcal{H},\hat{a}]$, $[\mathcal{H},\hat{a}^+]$, které snadno vypočteme takto: z komutační relace (33) plyne $\hat{a}^+\hat{a}=\hat{a}\hat{a}^+-1$, takže hamiltonián (35a) lze také psát

$$\mathcal{H} = \hat{a}\hat{a}^+ - \frac{1}{2} . \tag{35c}$$

Působení operátoru $\hat{a}$ na obě strany (35a) dá $\hat{a}\mathcal{H} = \hat{a}\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}\hat{a}$.

Naopak, necháme-li působit operátory z obou stran rovnice (35c) na $\hat{a}$ (stručně se říká, že vynásobíme rovnici (35c) operátorem $\hat{a}$ zprava, zatímco předtím jsme vynásobili rovnici (35a) operátorem $\hat{a}$ zleva), dostáváme $\mathcal{H}\hat{a} = \hat{a}\hat{a}^+\hat{a} - \frac{1}{2}\hat{a}$.

Odečteme-li od této rovnice předcházející, obdržíme hledaný komutátor

$$[\mathcal{H}, \hat{a}] = \mathcal{H}\hat{a} - \hat{a}\mathcal{H} = \hat{a}\hat{a}^+\hat{a} - \frac{1}{2}\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^+\hat{a} - \frac{1}{2}\hat{a} = -\hat{a} \tag{36a}$$

Naprosto stejným postupem najdeme, že

$$[\mathcal{H}, \hat{a}^+] = \hat{a}^+ \tag{36b}$$

Nyní již přikročíme k vlastní úloze: nalézt vlastní vektory a vlastní hodnoty $\mathcal{H}$. Předpokládejme, že existuje alespoň jeden vlastní vektor operátoru $\mathcal{H}$; označíme ho $|\nu\rangle$ a vlastní hodnotu k němu příslušnou označíme ε_ν . Tyto veličiny vyhovují Schrödingerově stacionární rovnici (11), takže platí

$$\mathcal{H}|\nu\rangle = \varepsilon_\nu|\nu\rangle \quad , \text{ tj. } \quad (\hat{a}^+\hat{a} + \tfrac{1}{2})|\nu\rangle = \varepsilon_\nu|\nu\rangle \tag{37}$$

<u>Ukážeme</u> nyní, <u>že</u> vektor, který získáme působením operátoru $\hat{a}$ na vektor $|\nu\rangle$, tj. <u>$\hat{a}|\nu\rangle$</u> , <u>je rovněž vlastním vektorem operátoru $\mathcal{H}$.</u>
Působíme-li na obě strany rovnice (37) operátorem $\hat{a}$ (vynásobíme rovnici zleva $\hat{a}$) a využijeme k úpravě komutační relaci (36a), platí

$\hat{a}\mathcal{H}|\nu\rangle = \varepsilon_\nu \hat{a}|\nu\rangle$ (ε_ν je číslo!)

$\hat{a}\mathcal{H}|\nu\rangle = (\mathcal{H}\hat{a} + \hat{a})|\nu\rangle = \mathcal{H}\hat{a}|\nu\rangle + \hat{a}|\nu\rangle = \varepsilon_\nu \hat{a}|\nu\rangle$

takže

$$\mathcal{H}\underbrace{\hat{a}|\nu\rangle} = (\varepsilon_\nu - 1)\underbrace{\hat{a}|\nu\rangle} \tag{38a}$$

Vektor $\hat{a}|\nu\rangle$ je tedy skutečně vlastním vektorem hamiltoniánu $\mathcal{H}$ a přísluší mu vlastní hodnota $\varepsilon_\nu - 1$. Stejně se dokáže, že také $\hat{a}^+|\nu\rangle$ je vlastním vektorem $\mathcal{H}$ a přísluší mu vlastní hodnota $\varepsilon_\nu + 1$, tj. platí

$$\mathcal{H}\underbrace{\hat{a}^+|\nu\rangle} = (\varepsilon_\nu + 1)\underbrace{\hat{a}^+|\nu\rangle} \tag{38b}$$

Z výsledků (38) je zřejmé, že pomocí operátorů $\hat{a}$, $\hat{a}^+$ je možné z libovolného vlastního vektoru hamiltoniánu $\mathcal{H}$ získat další vlastní vektory $\mathcal{H}$ (na nové vlastní vektory $\hat{a}|\nu\rangle$, $\hat{a}^+|\nu\rangle$ lze opět aplikovat provedený postup).

Směrem k nižším vlastním hodnotám ovšem nelze postupovat donekonečna, neboť každý fyzikální systém musí mít nějaký konečný základní stav; označíme vlastní vektor který mu v našem případě odpovídá $|0\rangle$ a k němu příslušnou vlastní hodnotu ε_0. Potom platí

$$(\hat{a}^+\hat{a} + \tfrac{1}{2})|0\rangle = \varepsilon_0|0\rangle \tag{39}$$

Vynásobíme-li tuto rovnici zleva bra-vektorem $\langle 0|$, pak za předpokladu, že $|0\rangle$ je normalizovaný (tj. $\langle 0|0\rangle = 1$) máme

$$\langle 0|\hat{a}^+\hat{a}|0\rangle + \frac{1}{2} = \varepsilon_0 \tag{40a}$$

Výraz $\langle 0|\hat{a}^+\hat{a}|0\rangle$ představuje normu vektoru $\hat{a}|0\rangle$, tj. $\|a|0\rangle\|$, (srov. (II.20) a (IV.4d)) pro kterou platí

$$\|\hat{a}|0\rangle\| \equiv (\langle\hat{a}|0\rangle| \; \hat{a}|0\rangle \equiv \langle 0|\hat{a}^+\hat{a}|0\rangle \geqslant 0 \tag{40b}$$

Rovnost $\|\hat{a}|0\rangle\| = 0$ nastává jen pro nulový vektor, tj.

$$\boxed{\hat{a}|0\rangle = 0} \tag{41}$$

Vzhledem ke zjištěnému působení operátoru $\hat{a}$ na vlastní vektory $\mathcal{H}$ (srov. (38a)) však musíme platnost rovnice (41) požadovat. Potom však z (40a) vyplývá, že

$$\varepsilon_0 = \frac{1}{2}\,. \tag{42}$$

a vrátíme-li se k původnímu hamiltoniánu $\hat{H} = \hbar\omega\mathcal{H}$ (9b), je energie základního stavu harmonického oscilátoru rovna

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \tag{43}$$

Vlastní vektory a vlastní hodnoty $\mathcal{H}$ pro excitované stavy oscilátoru dostaneme podle (38b) opakovaným působením $\hat{a}^+$ na vektor $|0\rangle$ (budeme je číslovat průběžně, takže ν v (38) nahradíme $n = 1,2,3,\ldots$):

Vlastní vektor $\mathcal{H}$	Energie (vlastní hodnota $\hat{H}$)
$\lvert 0\rangle$	$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$
$\lvert 1\rangle = \hat{a}^+\lvert 0\rangle$	$E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega = \hbar\omega\,(1+\frac{1}{2})$
$\lvert 2\rangle = \hat{a}^+\lvert 1\rangle = (\hat{a}^+)^2\lvert 0\rangle$	$E_2 = \frac{5}{2}\hbar\omega = \hbar\omega\,(2+\frac{1}{2})$
$\vdots$	$\vdots$
$\lvert n\rangle = \hat{a}^+\lvert n-1\rangle = (\hat{a}^+)^n\lvert 0\rangle$	$E_n = \frac{2n+1}{2}\hbar\omega = \hbar\omega\,(n+\frac{1}{2})$

(44)

Platí tedy pro hamiltonián $\mathcal{H}$, resp. $\hat{H} = \hbar\omega\mathcal{H}$,

$$\mathcal{H}\lvert n\rangle = (\, n + \frac{1}{2}\,)\lvert n\rangle \tag{45a}$$

$$\hat{H}\lvert n\rangle = \hbar\omega(\, n + \frac{1}{2}\,)\lvert n\rangle \tag{45b}$$

a pro <u>vlastní vektory a hodnoty operátoru $\hat{n}$</u> (32)

$$\hat{n}\lvert n\rangle = n\lvert n\rangle \quad , \text{ tj. } \quad \hat{a}^+\hat{a}\lvert n\rangle = n\lvert n\rangle \tag{46}$$

kde $n = 0,1,2,3,\dots$.

Provedeme ještě <u>normalizaci vektorů pro excitované stavy</u>. Předpokládejme, že vektor $\lvert n\rangle$ je normalizovaný, takže $\langle n|n\rangle = 1$, a určeme normalizační konstantu C_{n+1} pro vektor

$$\lvert n+1\rangle = C_{n+1}\,\hat{a}^+\lvert n\rangle \tag{47}$$

Platí rovnosti:

$$\langle n+1|n+1\rangle = |C_{n+1}|^2\,\|\hat{a}^+\lvert n\rangle\| = |C_{n+1}|^2\langle n|\hat{a}\hat{a}^+|\,n\rangle =$$

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

$$= |C_{n+1}|^2\,(1+n)$$

Aby platilo $\langle n+1|n+1\rangle = 1$, musí být

$$C_{n+1} = (n+1)^{-1/2}$$

Dosazením do (47)

$$\boxed{\begin{aligned}\hat{a}^+\lvert n\rangle &= \sqrt{n+1}\,\lvert n+1\rangle \\ \hat{a}\,\lvert n\rangle &= \sqrt{n}\,\lvert n-1\rangle\end{aligned}}$$

(48a)
(48b)

(Ponechávám již čtenáři, aby stejným způsobem dokázal (48b).)

Vyjdeme-li od normalizovaného vektoru základního stavu $\lvert 0\rangle$, potom normalizované vektory excitovaných stavů jsou

$$\lvert 1\rangle = 1^{-1/2}\,\lvert 0\rangle$$

$$\lvert 2\rangle = 2^{-1/2}\,\hat{a}^+\lvert 1\rangle = (1.2)^{-1/2}\,(\hat{a}^+)^2\,\lvert 0\rangle$$

$$|3\rangle = 3^{-1/2}\,\hat{a}^+|2\rangle = (2.3)^{-1/2}\,(\hat{a}^+)^2|1\rangle = (1.2.3)^{-1/2}\,(\hat{a}^+)^3|0\rangle$$

a obecně

$$\boxed{|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\,(\hat{a}^+)^n\,|0\rangle} \quad , \; n = 0,1,2,3,\ldots \qquad (49)$$

Tím je řešení zadané úlohy prakticky ukončeno.

Ukažme si ještě, jak při tomto postupu získáme vlnové funkce v souřadnicové reprezentaci (30). Nejprve najdeme souřadnicovou reprezentaci vektoru $|0\rangle$. Dosadíme-li do rovnice (41) souřadnicovou reprezentaci operátoru $\hat{a}$ (do (31) dosadíme X za $\mathcal{X}$ a $(-i)(d/dX)$ za $\mathcal{P}$, viz (12)) a místo $|0\rangle$ hledanou vlnovou funkci $\varphi_o(X)$, obdržíme pro $\varphi_o(X)$ diferenciální rovnici

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(X + \frac{d}{dX}\right)\varphi_o(X) = 0$$

tj.

$$\frac{d\,\varphi_o(X)}{dX} = -\,X\,\varphi_o(X)\,,$$

která má řešení

$$\varphi_o(X) = C_o\,\exp(-X^2/2)$$

Normalizační konstantu C_o určíme z podmínky

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\varphi_o(X)|^2\,dX = |C_o|^2\int_{-\infty}^{\infty}\exp(-X^2)\,dX = |C_o|^2\sqrt{\pi} = 1$$

odkud

$$C_o = \pi^{-1/4}$$

takže konečně

$$\varphi_o(X) = \pi^{-1/4}\,\exp(-X^2/2) \qquad (50a)$$

resp. po přechodu k původní proměnné x podle (9) (v normalizačním integrálu provedeme substituci $X = (m\omega/\hbar)^{1/2}x$)

$$\varphi_o(x) = \left(\frac{m\,\omega}{\pi\,\hbar}\right)^{1/4}\exp(-m\,\omega^2x^2/2\hbar) \qquad (50b)$$

Vlnové funkce excitovaných stavů - $\varphi_n(X)$ - obdržíme potom z relace (49) do níž dosadíme souřadnicovou reprezentaci $\hat{a}^+$ a $|0\rangle$:

$$\varphi_n(X) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!\sqrt{\pi}}}\left(X - \frac{d}{dX}\right)^n\exp(-X^2/2) \qquad (51)$$

Použijeme-li operátorové identity (jejich důkaz ponechávám čtenáři)

$$-\frac{d}{dX} + X = -\exp(X^2/2)\,\frac{d}{dX}\,\exp(-X^2/2)$$

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

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)

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

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 $\hat{x}_i$ $(i=1,2,\dots,N)$:

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

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

$$[\hat{x}_i\,,\,\hat{x}_j] = 0 \tag{54a}$$

$$(i,j=1,2,\dots,N)$$

$$[\hat{p}_i\,,\,\hat{p}_j] = 0 \tag{54b}$$

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

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