1 A paritás operátor

Ismétlés: Két hermitikus operátor akkor és csak akkor felcserélhető, ha van közös sajátfüggvény rendszerük.

Definiáljuk a tükrözés (paritás) operátort a következőképpen:

$$P\psi(x) \equiv \psi(-x) \ . \tag{1}$$

Nyilvánvalóan fenáll, hogy $P^2 = I$, ezért P sajátértékei $\lambda = \pm 1$. A $\lambda = 1$ sajátértékhez tartozó sajátfüggvények a páros függvények

$$\psi(-x) = \psi(x) \ ,$$

míg a $\lambda = -1$ sajátértékhez a páratlan függvények tartoznak,

$$\psi(-x) = -\psi(x) \ .$$

Tétel: $pP = -Pp$, ahol p az impulzus operátor.

Bizonyítás:

$$\begin{aligned}
pP\psi(x) &= \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}P\psi(x) = \qquad (2)\\
&= \frac{\hbar}{i}\lim_{dx\to+0}\frac{P\psi(x+dx)-P\psi(x)}{dx}\\
&= \frac{\hbar}{i}\lim_{dx\to+0}\frac{\psi(-x-dx)-\psi(-x)}{dx}\\
&= -\frac{\hbar}{i}\lim_{dx\to+0}\frac{\psi(-x)-\psi(-x-dx)}{dx}\\
&= -\frac{\hbar}{i}\lim_{dx\to+0}\frac{\psi(-x+dx)-\psi(-x)}{dx}\\
&= -\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\psi(-x) = -p\psi(-x)\\
&= -Pp\psi(x) \qquad (3)
\end{aligned}$$

A bizonyításban felhasználtuk, hogy a ψ függvény folytonosan differenciálható, de közvetlenül belátható, hogy a vonzó δ-potenciál kötött állapoti sajátfüggvénye (l. Gyakorlat házi feladat) is eleme azon függvényhalmaznak, melyre a tétel fennáll.

Következmény 1:

$$p^2P = p(pP) = -(pP)p = Pp^2 \ . \tag{4}$$

azaz

$$\left[p^2, P\right] = 0 \ . \tag{5}$$

Következmény 2: A $H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$ Hamilton operátor felcserélhető a tükrözéssel, ha

$$[P, V] = 0 \ , \tag{6}$$

azaz

$$P(V(x)\psi(x)) = V(-x)\psi(-x) = V(-x)P\psi(x) = V(x)P\psi(x) \ ,$$

$\forall\ \psi$-re, tehát $V(x)$ páros függvény.

Ebben az esetben tehát a H és P operátoroknak van közös sajátfüggvény rendszerük, azaz H sajátfüggvényei szükségszerűen páros ill. páratlan függvények.

2 A lineáris harmonikus oszcillátor

Az egydimenziós harmonikus oszcillátor potenciálja

$$V(x) = \frac{1}{2}Dx^2 \ , \tag{7}$$

ahol D az erőállandó (direkciós erő). A *klasszikus mechanika* alapján, a fenti potenciálban egy m tömegű részecske $\omega = \sqrt{D/m}$ frekvenciájú harmonikus rezgést végez, így (7) a következő alakban is írható,

$$V(x) = \frac{m\omega^2}{2}x^2 \ , \tag{8}$$

azaz a Hamilton függvény

$$H\left(x, p\right) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 \ . \tag{9}$$

A $t = 0$ időpontban zérus kitérést feltételezve, az ismert klasszikus megoldás

$$x\left(t\right) = A \sin\left(\omega t\right) \ , \tag{10}$$

ahol A a rezgés amplitúdója, mely az energiával az

$$E = \frac{m\omega^2}{2}A^2 \tag{11}$$

kapcsolatban áll. Nyilvánvaló, hogy az energia ill. az amplitúdó folytonosan változhatnak.

A *kvantummechanikai* tárgyalás szerint a

$$H\psi = E\psi \tag{12}$$

sajátérték problémát kell megoldanunk, ahol koordináta reprezentációban,

$$H\left(x\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 \ . \tag{13}$$

Bevezetve a

$$q = \frac{x}{x_0} \quad \rightarrow \quad \frac{d^2}{dx^2} = \frac{1}{x_0^2}\frac{d^2}{dq^2} \quad ,$$

változó transzformációt, a Hamilton operátort

$$H(q) = -\frac{\hbar^2}{2mx_0^2}\frac{d^2}{dq^2} + \frac{m\omega^2 x_0^2}{2}q^2 \quad , \tag{14}$$

alakra hozhatjuk. Célszerű az x_0 paramétert úgy megválasztani, hogy a fenti kifejezésben a $\frac{d^2}{dq^2}$ és a q^2 tagok együtthatói, az előjeltől eltekintve, megegyezzenek, azaz,

$$\frac{\hbar^2}{2mx_0^2} = \frac{m\omega^2 x_0^2}{2} \quad \longrightarrow \quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad . \tag{15}$$

Ekkor a Hamilton operátor a

$$H(q) = \frac{\hbar\omega}{2}\left\{-\frac{d^2}{dq^2} + q^2\right\} \quad , \tag{16}$$

alakú lesz és a Schrödinger egyenletet

$$\left\{-\frac{d^2}{dq^2} + q^2\right\}\psi(q) = \eta\psi(q) \quad , \tag{17}$$

formában írhatjuk, ahol

$$\eta = \frac{2E}{\hbar\omega} \tag{18}$$

az energia helyett bevezetett dimenziótlan változó.

2.1 Megoldás Sommerfeld polinom módszerrel

Írjuk át a (17) sajátérték egyenletet a

$$\frac{d^2\psi(q)}{dq^2} + \left(\eta - q^2\right)\psi(q) = 0 \tag{19}$$

differenciálegyenletre, melynek először a $q \rightarrow \pm\infty$ határesetben vett, ún. aszimptotikus megoldását keressük,

$$\frac{d^2\psi_a(q)}{dq^2} - q^2\psi_a(q) = 0 \quad . \tag{20}$$

Felhasználva, hogy

$$\begin{aligned}\left(\frac{d}{dq} - q\right)\left(\frac{d}{dq} + q\right) &= \frac{d^2}{dq^2} + \frac{d}{dq}q - q\frac{d}{dq} - q^2 \\ &= \frac{d^2}{dq^2} - q^2 + 1 \underset{q\rightarrow\pm\infty}{\longrightarrow} \frac{d^2}{dq^2} - q^2 \quad ,\end{aligned}$$

belátható, hogy a

$$\left(\frac{d}{dq} + q\right)\psi_a(q) = 0 \quad \longrightarrow \quad \psi_a(q) = e^{-q^2/2} \tag{21}$$

a keresett reguláris aszimptotikus megoldás.

A következő lépésben az általános megoldást az aszimptotikus megoldás és egy ismeretlen függvény szorzataként keressük

$$\psi(q) = u(q)\,\psi_a(q) = u(q)\,e^{-q^2/2} \quad . \tag{22}$$

Ezt behelyettesítjük a (19) egyenletbe,

$$\frac{d^2\left(u(q)\,e^{-q^2/2}\right)}{dq^2} + \left(\eta - q^2\right)u(q)\,e^{-q^2/2} = 0 \quad . \tag{23}$$

Elvégezve a megfelelő műveleteket,

$$\frac{d\left(u(q)\,e^{-q^2/2}\right)}{dq} = u'(q)e^{-q^2/2} - qu(q)e^{-q^2/2} \tag{24}$$

$$\frac{d^2\left(u(q)\,e^{-q^2/2}\right)}{dq^2} = u''(q)e^{-q^2/2} - 2qu'(q)e^{-q^2/2} + (q^2-1)u(q)e^{-q^2/2} \quad , \tag{25}$$

az

$$u''(q) - 2qu'(q) + (\eta - 1)u(q) = 0 \quad , \tag{26}$$

egyenletet nyerjük. A továbbiakban feltételezzük, hogy az u függvényre érvényes a folytonos függvénykalkulus:

$$u(q) = \sum_{r=0}^{\infty} c_r q^r \quad , \tag{27}$$

$$u'(q) = \sum_{r=1}^{\infty} r c_r q^{r-1} \quad \longrightarrow \quad 2qu'(q) = \sum_{r=0}^{\infty} 2r c_r q^r \quad , \tag{28}$$

$$u''(q) = \sum_{r=2}^{\infty} r(r-1)\,c_r q^{r-2} = \sum_{r=0}^{\infty} (r+1)(r+2)\,c_{r+2} q^r \quad . \tag{29}$$

A fenti kifejezéseket visszahelyettesítve a (26) egyenletbe a

$$\sum_{r=0}^{\infty} \left\{(r+1)(r+2)\,c_{r+2} - 2rc_r + (\eta-1)c_r\right\} q^r = 0 \tag{30}$$

egyenletet kapjuk, melyből a

$$c_{r+2} = \frac{2r+1-\eta}{(r+1)(r+2)} c_r \tag{31}$$

rekurziós összefüggés adódik ($r = 0, 1, 2, \ldots$). Vegyük észre, hogy az u függvény hatványsorában az r-ik tag együthatója az $r+2$-ik tag együtthatóját határozza meg, így a másodrendű differenciálegyenlet két független megoldását generálhatjuk a következő választással,

$$\begin{array}{llll} c_0 = 1 \quad , & c_1 = 0 & \longrightarrow & u \text{ páros függvény} \\ c_0 = 0 \quad , & c_1 = 1 & \longrightarrow & u \text{ páratlan függvény} \quad . \end{array}$$

Mivel ψ_a páros függvény, a Schrödinger egyenlet megoldásai is vagy páros vagy páratlan függvények lesznek, összhangban a szimmetrikus potenciálra kimondott korábbi tétellel. Másrészt viszont $r \to \infty$ esetén a rekurziós összefüggés közelíthető a

$$c_{r+2} \sim \frac{2}{r} c_r \tag{32}$$

kifejezéssel, mely az e^{q^2} függvény hatványegyütthatóira jellemző rekurziós reláció:

$$e^{q^2} = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{q^{2r}}{r!} = \sum_{r=0,2,\ldots} \frac{q^r}{(r/2)!} \quad \longrightarrow \quad c_{r+2} = \frac{2}{r+2} c_r \underset{r\to\infty}{\longrightarrow} \frac{2}{r} c_r \quad .$$

Következésképpen könnyen belátható, hogy az u megoldás tetszőleges pontossággal közelíti az

$$u(q) \sim f(q) + Ce^{q^2} \quad \text{(páros)} \quad \text{vagy az} \quad u(q) \sim q\left(f(q) + Ce^{q^2}\right) \quad \text{(páratlan)} \tag{33}$$

függvényt, ahol az $f(q)$ véges, páros polinomot és a C állandót a kívánt pontossághoz lehet beállítani. Ez viszont azt jelenti, hogy a $\psi(q) = u(q)\, e^{-q^2/2}$ megoldás aszimptotikusan $e^{q^2/2}$ szerint divergál, tehát általános esetben ψ nem *reguláris* függvény. Ezt csak úgy tudjuk elkerülni, hogy a (31) rekurziós összefüggést valamely $r = n$ indexnél megállítjuk, azaz

$$\eta = 2n + 1 \quad (n = 0, 1, 2, \ldots) \tag{34}$$

választással biztosítjuk, hogy

$$c_n \neq 0 \ , \ c_{n+2} = c_{n+4} = \ldots = 0 \quad . \tag{35}$$

A η paraméter definíciójából következik, hogy a lehetséges sajátenergiák az

$$\boxed{E_n = \hbar\omega\left(n + \tfrac{1}{2}\right) \quad (n = 0, 1, 2, \ldots)} \tag{36}$$

értékeket vehetik föl. Tradicionális okokból, a megfelelő hullámfüggvényeket

$$\boxed{\psi_n(x) = N_n\, H_n(x/x_0)\; e^{-x^2/2x_0^2}} \tag{37}$$

alakban írjuk, ahol $H_n(q)$ az ún. Hermite-polinomokat jelöli:

$$\begin{array}{cc} n & H_n(q) \\ & \\ 0 & 1 \\ 1 & 2q \\ 2 & 4q^2 - 2 \\ 3 & 8q^3 - 12q \\ \vdots & \vdots \end{array} \quad .$$

Ellenőrizzük a rekurziós relációt:

$$\begin{array}{l} n = 2 \ : \ \eta = 5 \ , \ c_0 = -2 \ , \ c_2 = -2\,\dfrac{1-5}{1\cdot 2} = 4 \\ n = 3 \ : \ \eta = 7 \ , \ c_1 = -12 \ , \ c_3 = -12\,\dfrac{3-7}{2\cdot 3} = 8 \quad . \end{array}$$

A Hermite-polinomok ortogonalitási relációjából,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq \, e^{-q^2} \; H_n(q) \; H_m(q) = 2^n n! \sqrt{\pi} \, \delta_{nm} \quad , \tag{38}$$

adódik, hogy

$$N_n = \left(2^n n! \sqrt{\pi} \, x_0\right)^{-1/2} \quad . \tag{39}$$

A zérusponti energia kísérleti bizonyítéka: A kétatomos molekulák rezgési színképe A kétatomos molekulák infravörös tartományban észlelt egyenközű emissziós színképe jól magyarázható a harmonikus oszcillátor modellel. Valamely n'-ik állapotból az n-ik állapotba való ugrás esetén kibocsájtott foton energiája ugyanis

$$h\nu_f = E_{n'} - E_n = \hbar\omega(n' - n) \qquad n' > n \quad . \tag{40}$$

Az észlelt frekvenciaközökből nyilvánvalóan meghatározható a rezgés direkciós állandója:

$$\Delta\nu_f = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{D}{m}} \quad \longrightarrow \quad D = m \left(2\pi \, \Delta\nu_f\right)^2 \quad . \tag{41}$$

A $^1H\,^{35.5}C\ell$ (sósav) molekula esetén, $\Delta\nu_f = 8.65 \cdot 10^{13} \; 1/s$ $(\Delta E_f \simeq 0.3 \; eV)$, $m_H = 1.673 \cdot 10^{-27} \; kg \; \rightarrow$ $D \simeq 4.9 \; N/cm$ (a redukált tömeg figyelembevételével $D \simeq 4.713 \; N/cm$) adódik

Nagyobb energiás gerjesztéssel átmenetet indukálhatunk a sósav molekula elektronállapotai között is. Jelöljünk két ilyen állapotot A-val és B-vel. Ekkor a molekula teljes ('konfigurációs' és vibrációs) energiája

$$E(A, n) = E_A + \hbar\sqrt{\frac{D_A}{m}}\left(n + \frac{1}{2}\right) \tag{42}$$

ill.

$$E(B, n') = E_B + \hbar\sqrt{\frac{D_B}{m}}\left(n' + \frac{1}{2}\right) \tag{43}$$

tehát a visszaugrás során kisugárzott foton frekvenciája

$$\nu_{Bn' \to An} = \frac{E_B - E_A}{h} + \frac{1}{2\pi}\left[\sqrt{\frac{D_B}{m}}\left(n' + \frac{1}{2}\right) - \sqrt{\frac{D_A}{m}}\left(n + \frac{1}{2}\right)\right] \quad . \tag{44}$$

A ^1H atom helyett azonban előfordulhat a D (^2H) atom is, melynek kétszeres a tömege, viszont az elektronszerkezettől függő E_A, E_B, D_A és D_B állandók nem változnak. Az új redukált tömeget m^*-gal jelölve a színképben megjelennek a deutérium izotópra jellemző

$$\nu^*_{Bn' \to An} = \frac{E_B - E_A}{h} + \frac{1}{2\pi}\left[\sqrt{\frac{D_B}{m^*}}\left(n' + \frac{1}{2}\right) - \sqrt{\frac{D_A}{m^*}}\left(n + \frac{1}{2}\right)\right] \tag{45}$$

frekvenciák is. A fenti izotópeffektust vizsgáljuk meg az $n' = 0 \rightarrow n = 0$ (null-null) átmenetre:

$$\nu_{B0 \to A0} - \nu^*_{B0 \to A0} = \frac{1}{4\pi}\left(\frac{1}{\sqrt{m}} - \frac{1}{\sqrt{m^*}}\right)\left(\sqrt{D_B} - \sqrt{D_A}\right) \neq 0 \quad . \tag{46}$$

Nyilvánvaló azonban, hogy amennyiben a harmonikus oszcillátornak nem lenne zérusponti energiája, a null-null átmenetre nem tapasztalnánk izotópeffektust. A fenti jelenséget észlelték pl. a $B - O$ molekula vibrációs spektrumában is ($^{10}B \; \rightarrow \; ^{11}B$ ill. $^{16}O \; \rightarrow \; ^{18}O$).

2.2 Keltő és eltüntető operátorok

Már korábban levezettük a

$$\left(\frac{d}{dq}-q\right)\left(\frac{d}{dq}+q\right)=\frac{d^2}{dq^2}-q^2+1 \quad ,$$

összefüggést, mely segítségével a (16) Hamilton operátor kifejezhető

$$H\left(q\right)=\hbar\omega\left\{\frac{1}{2}\left(q-\frac{d}{dq}\right)\left(q+\frac{d}{dq}\right)+\frac{1}{2}\right\} \tag{47}$$

alakban. Célszerű bevezetni az

$$\underline{a\equiv}\frac{1}{\sqrt{2}}\left(q+\frac{d}{dq}\right)=\frac{1}{\sqrt{2}x_0}\left(x+x_0^2\frac{d}{dx}\right)=\underline{\frac{1}{\sqrt{2}x_0}\left(x+\frac{i}{m\omega}p\right)} \tag{48}$$

és

$$\underline{a^+\equiv}\frac{1}{\sqrt{2}}\left(q-\frac{d}{dq}\right)=\frac{1}{\sqrt{2}x_0}\left(x-x_0^2\frac{d}{dx}\right)=\underline{\frac{1}{\sqrt{2}x_0}\left(x-\frac{i}{m\omega}p\right)} \tag{49}$$

operátorokat, melyekkel tehát

$$\underline{H=\hbar\omega\left\{a^+a+\frac{1}{2}\right\}} \quad . \tag{50}$$

Ebben a fejezetben megmutatjuk, hogy a harmonikus oszcillátor spektruma levezethető az a és a^+ operátorok algebrai (felcserélési) tulajdonságaiból, és nem szükséges valamely konkrét reprezentációt használnunk. Ehhez csupán az

$$[x,p]=i\hbar$$

felcserélési relációt kell felhasználnunk, melyből a (48) és (49) definíciók alapján következik:

$$\begin{aligned}\underline{\left[a,a^+\right]}&=\frac{1}{2x_0^2}\left[x+\frac{i}{m\omega}p,x-\frac{i}{m\omega}p\right]\\&=\frac{m\omega}{2\hbar}\left(-\frac{i}{m\omega}\left[x,p\right]+\frac{i}{m\omega}\left[p,x\right]\right)\underline{\equiv 1} \quad .\end{aligned} \tag{51}$$

A (50) kifejezésből következménye, hogy a Hamilton operátor spektrumának alsó korlátja $\hbar\omega/2$:

$$\underline{\langle\psi|\,H\,|\psi\rangle}=\hbar\omega\left(\langle\psi|\,a^+a\,|\psi\rangle+\frac{1}{2}\right)=\hbar\omega\left(|a\psi|^2+\frac{1}{2}\right)\underline{\geq\frac{\hbar\omega}{2}} \quad . \tag{52}$$

Fennállnak továbbá a következő kommutációs relációk:

$$\underline{[H,a]=-\hbar\omega a} \quad \text{ill.} \quad \underline{\left[H,a^+\right]=\hbar\omega a^+} \quad . \tag{53}$$

Ugyanis

$$[H,a]=\hbar\omega\left[a^+a+\frac{1}{2},a\right]=\hbar\omega\left[a^+,a\right]a=-\hbar\omega a \tag{54}$$

és

$$\left[H,a^+\right]=\hbar\omega\left[a^+a+\frac{1}{2},a^+\right]=\hbar\omega a^+\left[a,a^+\right]=\hbar\omega a^+ \quad . \tag{55}$$

Legyen $|\,\psi\rangle$ H egy sajátfüggvénye E sajátértékkel. Ekkor

$$\underline{Ha|\,\psi\rangle}=aH|\,\psi\rangle-\hbar\omega a|\,\psi\rangle=\underline{(E-\hbar\omega)\,a|\,\psi\rangle} \quad , \tag{56}$$

azaz $a|\,\psi\rangle$ is sajátfüggvény $E-\hbar\omega$ sajátértékkel. Ezért hívjuk az a operátort *lefelé léptető* vagy eltüntető operátornak. Mivel azonban H spektruma alulról korlátos, léteznie kell egy $|\,\psi_0\rangle$ sajátfüggvénynek, amit az a operátor a Hilbert-tér null-elemébe ($|\,\rangle_0$) léptet, melynek normája zérus, ezért - a kvantummechanika axiómái szerint - nem reprezentálhat fizikai állapotot:

$$a|\,\psi_0\rangle=|\,\rangle_0 \quad . \tag{57}$$

Nyilvánvalóan

$$a^+a|\,\psi_0\rangle = |\,\rangle_0 \quad\longrightarrow\quad \underline{H|\,\psi_0\rangle} = \hbar\omega\left(|\,\rangle_0 + \frac{1}{2}|\,\psi_0\rangle\right) \underline{= \frac{\hbar\omega}{2}|\,\psi_0\rangle} \quad , \tag{58}$$

tehát $|\,\psi_0\rangle$ pontosan a minimális sajátértékhez tartozó sajátfüggvény.

A (56) egyenlethet hasonlóan beláthatjuk:

$$\underline{Ha^+|\,\psi\rangle} = a^+H|\,\psi\rangle + \hbar\omega a|\,\psi\rangle = \underline{(E+\hbar\omega)\,a^+|\,\psi\rangle} \quad , \tag{59}$$

azaz $a^+|\,\psi\rangle$ is sajátfüggvény $E+\hbar\omega$ sajátértékkel. Ezért az a^+ operátort *felfelé léptető* vagy keltő operátornak hívjuk. A keltő operátor segítségével szukcesszíven felépíthetjük a Hamilton operátor összes sajátfüggvényét. Az n-ik lépésben kapott hullámfüggvény sajátenergiája értelemszerűen

$$\underline{E_n = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})} \quad (n = 0,1,2,\dots) \quad . \tag{60}$$

Más sajátérték az (56) egyenlet következtében nem létezhet.

A hullámfüggények egyértelműségét a következő tétel biztosítja: *Az egydimenziós Schrödinger-egyenlet kötött állapoti (reguláris) megoldásai nem lehetnek elfajultak.*

Jelöljük az n-ik lépésben kapott hullámfüggvényt $|\,n\rangle$-nel! ($|\,\psi_0\rangle \equiv |\,0\rangle$) Ekkor

$$|\,n\rangle = A_n\,(a^+)^n\,|\,0\rangle \quad , \tag{61}$$

ahol A_n egy később meghatározandó normálási tényező. Az (50 és (60) egyenletek összevetéséből azonnal következik, hogy

$$\underline{a^+a|n\rangle = n\,|n\rangle}\,.$$

Ezért az a^+a operátort szokás "gerjesztési szám" operátornak nevezni.

Teljes indukcióval bizonyítjuk, hogy

$$\underline{a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle} \quad . \tag{62}$$

Mivel

$$\langle 0|a^+\,a|0\rangle = 0\;, \tag{63}$$

$n=1$-re

$$|\,1\rangle = c : a^+ : |\,0\rangle \;\rightarrow\; \langle 1|1\rangle = |c|^2\langle 0|a\,a^+|0\rangle = |c|^2\left(\langle 0|0\rangle + \langle 0|a^+a|0\rangle\right) = |c|^2 = 1 \;\rightarrow\; c = 1 \tag{64}$$

Tételezzük föl, hogy valamely n-re is teljesül az állítás. Ekkor

$$|\,n+1\rangle = c : a^+ : |\,n\rangle \;\rightarrow\; \langle n+1|n+1\rangle = |c|^2\langle n|a\,a^+|n\rangle = |c|^2\left(\langle n|n\rangle + \langle n|a^+a|n\rangle\right) = (n+1)|c|^2 = 1 \tag{65}$$

$$\rightarrow\; c = \frac{1}{\sqrt{n+1}}\;, \tag{66}$$

és pontosan ez az, amit bizonyítani szándékoztunk. Mostmár könnyű belátni, hogy

$$\underline{a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle} \quad . \tag{67}$$

Ugyanis:

$$a|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}a\,a^+|n-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}\left(a^+a+1\right)|n-1\rangle = \frac{(n-1)+1}{\sqrt{n}}|n-1\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad . \tag{68}$$

Ezekután a normált sajátfüggvényeket nyilvánvalóan a következő formában tudjuk felírni:

$$\underline{|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(a^+\right)^n|0\rangle} \quad . \tag{69}$$

2.2.1 A sajátfüggvények koordinátareprezentációban

Határozzuk meg először az ún. vákuumállapotot:

$$\widehat{a}\psi_0(q) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{d\psi_0(q)}{dq} + q\psi_0(q)\right) = 0 \quad , \tag{70}$$

melynek ismert megoldása

$$\psi_0(q) = c_0 \exp(-q^2/2) \quad . \tag{71}$$

A c_0 normálási konstanst a következő integrál alapján számítjuk,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x)\psi_0(x)dx = c_0^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x/x_0)^2}dx = c_0^2\, x_0 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-q^2}dq = c_0^2\sqrt{\pi}x_0 = 1 \;\rightarrow\; c_0 = (\sqrt{\pi}x_0)^{-1/2} \quad .$$

A normált sajátfüggvények tehát

$$\psi_n(x) = \left(2^n n!\sqrt{\pi}x_0\right)^{-1/2}\left(q - \frac{d}{dq}\right)^n e^{-q^2/2}|_{q=x/x_0} \quad , \tag{72}$$

vagy

$$\underline{\psi_n(x) = \left(2^n n!\sqrt{\pi}x_0\right)^{-1/2} H_n\left(\frac{x}{x_0}\right) e^{-(x/x_0)^2/2}} \quad , \tag{73}$$

ahol

$$H_n(q) = e^{q^2/2}\left(q - \frac{d}{dq}\right)^n e^{-q^2/2} \quad , \tag{74}$$

a jól ismert Hermite polinomok.

Bizonyíthatók a következő rekurziós összefüggések:

$$H_{n+1}(q) = 2qH_n(q) - H_n'(q) \quad , \tag{75}$$

$$H_n'(q) = 2nH_{n-1}(q) \quad , \tag{76}$$

és

$$2qH_n(q) = H_{n+1}(q) + 2nH_{n-1}'(q) \quad , \tag{77}$$