

Univerzita Karlova v Praze
Matematicko-fyzikální fakulta

DIPLOMOVÁ PRÁCE

Petr Česnek

Harmonický oscilátor v různých pojetích klasické a kvantové mechaniky

Katedra částicové a jaderné fyziky

Vedoucí diplomové práce: RNDr. Jiří Novotný, CSc.

Studijní program: Učitelství M-F

Děkuji RNDr. Jiřímu Novotnému, CSc. za skvělé vedení mé diplomové práce, za inspirativní konzultace. Dále pak RNDr. Jiřímu Dolejšimu, CSc. za návrh tématu a Mgr. Tomáši Sýkorovi za všestrannou podporu.

Petr Česnek

Prohlašuji, že jsem svou diplomovou práci napsal samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů. Souhlasím se zapůjčováním práce.

V Praze dne 23. dubna 2002

Petr Česnek

Obsah

1	Klasický harmonický oscilátor	3
1.1	Základní vlastnosti klasického harmonického oscilátoru	3
1.2	Tlumený harmonický oscilátor	7
1.3	Nucené kmity. Rezonance	9
1.4	Aproximace obecného potenciálu	12
2	Klasické metody řešení harmonického oscilátoru	15
2.1	Lagrangeův formalismus	15
2.2	Hamiltonův formalismus	17
2.3	Hamiltonův-Jacobiho formalismus	20
3	Kvantový harmonický oscilátor	23
3.1	Stacionární stavy a energie kvantového harmonického oscilátoru	23
3.2	Fononová reprezentace stacionárních stavů	29
3.3	Vlastnosti stacionárních stavů	35
3.3.1	Střední hodnoty veličin ve stacionárních stavech	37
3.3.2	Vlastnosti základního stavu	39
3.4	Časová závislost stavů oscilátoru	41
3.5	Koherentní stavy	44
3.5.1	Rovnice koherentních stavů	44
3.5.2	Pravděpodobnostní rozdělení energie, souřadnice a hybnosti	51
3.5.3	Časová závislost koherentních stavů	52
4	Aplikace harmonického oscilátoru	57
4.1	Kmity krystalové mříže	57
4.1.1	Einsteinův model (1907)	59
4.1.2	Debyeův model (1912)	60
4.2	Elektromagnetické pole	62
5	Dráhový integrál	66
5.1	Definice dráhového integrálu	66
5.2	Feynmanův integrál a diskretizace času	74
5.3	Harmonický oscilátor v poli časově závislé vnější síly	82

6	Weylova reprezentace kvantové mechaniky	86
6.1	Nekomutativní fázový prostor a Wignerova funkce	86
6.2	Rovnice pro vlastní hodnoty	93
6.3	Kvantový harmonický oscilátor ve Weylově reprezentaci	95
6.3.1	Stacionární stavy	95
6.3.2	Koherentní stavy	103
6.3.3	Časová závislost	104
7	Dodatky	108
7.1	Diferenciální rovnice	108
7.2	Gaussovy a jiné integrály	109
7.3	Hermiteovy polynomy	110
7.4	Laguerrovy polynomy	111
7.5	Fourierovy transformace a Diracova δ - funkce	112
7.6	Literatura	113

Název práce: Harmonický oscilátor v různých pojetích klasické a kvantové mechaniky

Autor: Petr Česnek

Katedra: Částicové a jaderné fyziky

Vedoucí diplomové práce: RNDr. Jiří Novotný, CSc.

e-mail vedoucího: Jiri.Novotny@mff.cuni.cz

Abstrakt: Cílem této diplomové práce je seznámit se se standardními výpočty harmonického oscilátoru v klasické a kvantové mechanice včetně témat jako např. koherentní stavy, dráhový integrál nebo Weylova reprezentace kvantové mechaniky.

Klíčová slova: Harmonický oscilátor, klasická a kvantová mechanika

Title: The harmonic oscillator within various approaches of classical and quantum mechanics

Author: Petr Česnek

Department: Institute of particle and nuclear physics

Supervisor: RNDr. Jiří Novotný, CSc.

Supervisor's e-mail address: Jiri.Novotny@mff.cuni.cz

Abstract: The aim of the diploma thesis is to present standard theory of classical and quantum harmonic oscillator including such topics like coherent states, path integral and Weyl representation of quantum mechanics.

Keywords: Harmonic oscillator, classical and quantum mechanics

Kapitola 1

Klasický harmonický oscilátor

1.1 Základní vlastnosti klasického harmonického oscilátoru

Těleso vykonávající kmity, jejichž výchylka z rovnovážné polohy je harmonickou funkcí času, se nazývá harmonický oscilátor. Příkladem je částice o hmotnosti m pohybující se v potenciálu $V(x)$ závislém kvadraticky na x ; $x = x(t)$ je výchylka z rovnovážné polohy $x = 0$.

Potenciál píšme ve tvaru

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \quad (1.1)$$

Síla navracející částici do rovnovážné polohy je

$$F(x) = -\frac{dV(x)}{dx} = -kx \quad (1.2)$$

Pohyb částice je určen pohybovou rovnicí

$$m\frac{d^2x(t)}{dt^2} = -kx(t) \quad (1.3)$$

Řešení diferenciální rovnice (1.3) má podle dodatku (7.1) tvar

$$x(t) = c_1 \cos \omega t + ic_2 \sin \omega t \quad (1.4)$$

Průběh hybnosti v závislosti na čase je

$$p(t) = m\frac{dx(t)}{dt} = -m\omega c_1 \sin \omega t + im\omega c_2 \cos \omega t \quad (1.5)$$

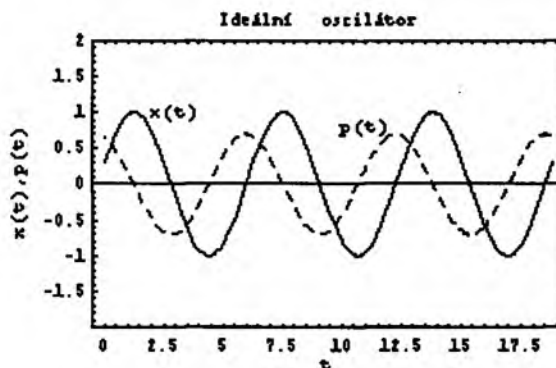
Konstanty c_1 a c_2 závisí na volbě počátečních podmínek $x(0)$ a $p(0)$. Podle (1.4) a (1.5) je $c_1 = x(0)$, $im\omega c_2 = p(0)$. Potom

$$x(t) = x(0) \cos \omega t + \frac{p(0)}{m\omega} \sin \omega t \quad (1.6)$$

$$p(t) = -m\omega x(0) \sin \omega t + p(0) \cos \omega t \quad (1.7)$$

Zvolíme-li počáteční podmínky

$$x(0) = X_o \sin \varphi \quad (1.8)$$



Obrázek 1.1: Kmity harmonického oscilátoru v závislosti na čase; výchylka a hybnost jsou fázově posunuty o úhel φ .

$$p(0) = m\omega X_o \cos \varphi \quad (1.9)$$

můžeme (1.6) a (1.7) psát ve tvaru

$$x(t) = X_o \sin(\omega t + \varphi) \quad (1.10)$$

$$p(t) = m\omega X_o \cos(\omega t + \varphi) \quad (1.11)$$

X_o je amplituda a φ počáteční fáze. Úhlová frekvence ω je dána rovnicí (1.3):

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (1.12)$$

Perioda (doba kmitu) je

$$T = \frac{2\pi}{\omega} = 2\pi \sqrt{\frac{m}{k}} \quad (1.13)$$

Částice pohybující se v potenciálu (1.1) tedy vykonává harmonické kmity. Běžným harmonickým oscilátorem je těleso na pružině. Vratná síla $F = -kx$ má opačný směr než výchylka x . Konstanta úměrnosti k , charakterizující kmitání pružiny, se nazývá tuhost.

Kinetická energie pohybu oscilátoru je

$$T(p) = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2} m\omega^2 X_o^2 \cos^2(\omega t + \varphi) \quad (1.14)$$

Potenciální energie po dosazení (1.10) do (1.1) je

$$V(x) = \frac{1}{2} kx^2 = \frac{1}{2} m\omega^2 X_o^2 \sin^2(\omega t + \varphi) \quad (1.15)$$

Celková energie je součtem kinetické a potenciální:

$$E(x, p) = T(p) + V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 X_o^2 \quad (1.16)$$

Energie klasického harmonického oscilátoru nezávisí na čase, jde o konzervativní systém. Její hodnota může dosahovat libovolné nezáporné hodnoty, neboť X_o je libovolná. V bodech obratu

$x = +X_o$, $x = -X_o$ je potenciální energie maximální, rovna E , kdežto kinetická energie je nulová. V rovnovážné poloze ($x = 0$) je naopak potenciální energie nulová a kinetická maximální.

Z (1.16) lze vyjádřit amplitudu výchylky a následně průběhy $x(t)$, $p(t)$:

$$x(t) = \frac{1}{\omega} \sqrt{\frac{2E}{m}} \sin(\omega t + \varphi) \quad (1.17)$$

$$p(t) = m \frac{dx(t)}{dt} = \sqrt{2mE} \cos(\omega t + \varphi) \quad (1.18)$$

Střední hodnoty¹ výchylky a hybnosti jsou zřejmě nulové:

$$\overline{x(t)} = \overline{p(t)} = 0 \quad (1.19)$$

Rozdělení pravděpodobnosti výskytu (souřadnice) oscilátoru můžeme určit z (1.10). Pravděpodobnost, že se nachází v elementu dx , je rovna $\frac{2dt}{T}$ (během periody T se v elementu dx nachází dvakrát). Platí tedy

$$\frac{2dt}{T} = w(x)dx \quad (1.20)$$

přičemž $w(x)$ je hledaná distribuční funkce souřadnice². Jelikož derivace výrazu (1.10) je

$$\left| \frac{dx}{dt} \right| = |X_o \omega \cos(\omega t + \varphi)| = \omega \sqrt{X_o^2 - (X_o \sin(\omega t + \varphi))^2} = \omega \sqrt{X_o^2 - x^2} \quad (1.21)$$

a $\frac{2}{T} = \frac{\omega}{\pi}$, můžeme (1.20) přepsat na tvar

$$\begin{aligned} \frac{\omega}{\pi} &= w(x) \omega \sqrt{X_o^2 - x^2} \\ w(x) &= \frac{1}{\pi \sqrt{X_o^2 - x^2}} \chi_{(-X_o, X_o)} \end{aligned} \quad (1.22)$$

Průběh $w(x)$ je zachycen na obrázku 1.2.

Rozdělovací funkce $w(x)$ splňuje normovací podmínku

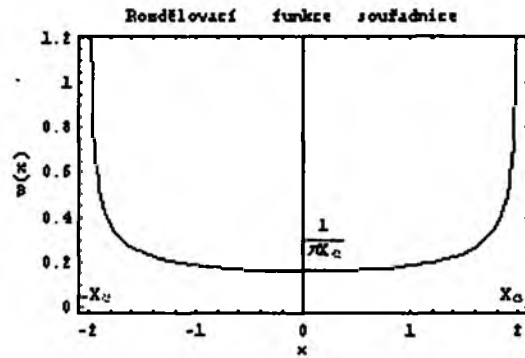
$$\int_{-\infty}^{\infty} w(x) dx = \int_{-X_o}^{X_o} w(x) dx = \frac{1}{\pi X_o} \int_{-X_o}^{X_o} \frac{1}{\sqrt{1 - (\frac{x}{X_o})^2}} dx = \frac{1}{\pi} \left[\arcsin \frac{x}{X_o} \right]_{-X_o}^{X_o} = 1 \quad (1.23)$$

Z průběhu $w(x)$ a podle poznámky (2) je zřejmé, že střední hodnota souřadnice musí být nulová, neboť $xw(x)$ je lichá funkce a $\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} xw(x) dx = 0$. Ještě nalezneme závislost hybnosti na souřadnici (užitím (1.21)):

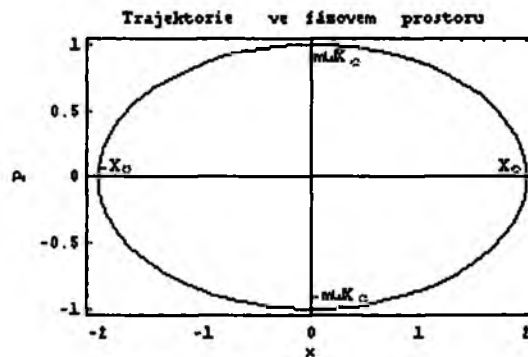
$$|p(x)| = m \left| \frac{dx}{dt} \right| = m\omega \sqrt{X_o^2 - x^2} \quad (1.24)$$

Hybnost je maximální v rovnovážné poloze a minimální (nulová) v bodech obratu. Vztah (1.24) přepíšme na tvar

$$\frac{p^2}{(m\omega X_o)^2} + \frac{x^2}{X_o^2} = 1 \quad (1.25)$$



Obrázek 1.2: Rozdělení pravděpodobnosti výskytu klasického oscilátoru v závislosti na souřadnici. Částice "tráví nejvíce času" v místech amplitud.



Obrázek 1.3: Stavy klasického oscilátoru se ve dvourozměrném fázovém prostoru pohybují po eliptické (a ekvienergetické) trajektorii.

z něhož je zřejmé, že grafem závislosti $p = p(x)$ (popř. trajektorií v dvourozměrném fázovém prostoru) je elipsa s délkami poloos X_0 a $m\omega X_0$, jak je zachyceno na obrázku 1.3.

V jisté aproximaci se jako harmonický oscilátor chová také matematické kyvadlo (hmotný bod hmotnosti m zavěšený na nehmotném vlákně délky l). To za předpokladu, že úhel φ odchylky vlákna od rovnovážné polohy je dostatečně malý. Pohybová rovnice pro takovýto systém je

$$\begin{aligned} m \frac{d^2\varphi(t)}{dt^2} l &= -mgl \sin \varphi(t) \\ \frac{d^2\varphi(t)}{dt^2} + \frac{g}{l} \sin \varphi(t) &= 0 \end{aligned} \quad (1.26)$$

Pro malé úhly φ aproximujeme $\sin \varphi(t) \simeq \varphi(t)$, což po zavedení do (1.26) dává za řešení harmonické kmity s úhlovou frekvencí

$$\omega = \sqrt{\frac{g}{l}} \quad (1.27)$$

a periodou

$$T = 2\pi \sqrt{\frac{l}{g}} \quad (1.28)$$

1.2 Tlumený harmonický oscilátor

Uvedeme-li těleso na pružině do kmitavého pohybu, dojde po určité době k utlumení pohybu. Předpokládejme, že tlumící síla je přímo úměrná rychlosti tělesa ($F_t = -bx$). Kmitání pružiny se pak řídí pohybovou rovnicí

$$\begin{aligned} m \frac{d^2x(t)}{dt^2} &= -kx(t) - b \frac{dx(t)}{dt} \\ \frac{d^2x(t)}{dt^2} + \frac{b}{m} \frac{dx(t)}{dt} + \frac{k}{m} x(t) &= 0 \end{aligned} \quad (1.29)$$

Obvykle se zavádí

$$2\delta = \frac{b}{m} \quad (1.30)$$

$$\omega_0^2 = \frac{k}{m} \quad (1.31)$$

$$\omega^2 = \omega_0^2 - \delta^2 \quad (1.32)$$

Koeficient δ je mírou útlumu, ω_0 frekvence oscilátoru bez tlumení (tzv. vlastní frekvence).

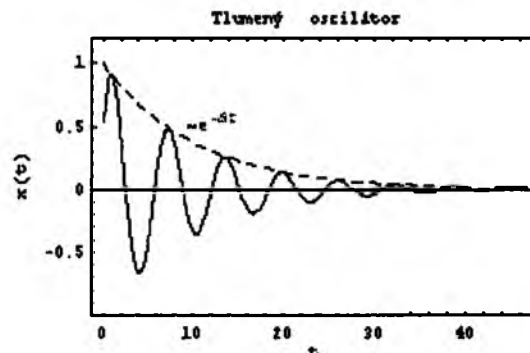
Je-li $\delta < \omega$, jde o tzv. periodický případ. Řešení charakteristické rovnice $\lambda^2 + 2\delta\lambda + \omega_0^2 = 0$ je $\lambda_{1,2} = -\delta \pm \sqrt{\delta^2 - \omega_0^2} = -\delta \pm i\omega$. Bez újmy na obecnosti volme počáteční podmínky (1.8) a (1.9) s $\varphi = \frac{\pi}{2}$, tedy

$$x(0) = X_0 \quad (1.33)$$

$$p(0) = 0 \quad (1.34)$$

¹Střední hodnota časově závislé veličiny $x(t)$ je definována: $\overline{x(t)} = \frac{1}{T} \int_0^T x(t) dt$.

²Distribuční funkce $w(x)$ udává rozdělení hustoty pravděpodobnosti souřadnice x . Můžeme z ní přímo určit střední hodnotu: $\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} xw(x) dx$.



Obrázek 1.4: Závislost výchylky na čase tlumeného harmonického oscilátoru.

Podle (7.7) dodatku (7.1) je řešení rovnice (1.29) s níže uvedeným označením tvaru

$$x(t) = e^{-\delta t} (c_1 \cos \omega t + ic_2 \sin \omega t) \quad (1.35)$$

A hybnost

$$p(t) = m \frac{dx(t)}{dt} = me^{-\delta t} ((i\omega c_2 - \delta c_1) \cos \omega t + (i\delta c_2 + \omega c_1) \sin \omega t) \quad (1.36)$$

Z počátečních podmínek (1.33) a (1.34) plyne, že $c_1 = X_o$ a $ic_2 = \frac{\delta X_o}{\omega}$, což zavedeno do (1.35) dává

$$x(t) = e^{-\delta t} X_o \left(\cos \omega t + \frac{\delta}{\omega} \sin \omega t \right) \quad (1.37)$$

Položíme-li

$$\cos \varepsilon = \frac{\omega}{\omega_o} \quad (1.38)$$

$$\sin \varepsilon = \sqrt{1 - \cos^2 \varepsilon} = \frac{\delta}{\omega_o} \quad (1.39)$$

můžeme v (1.37) psát

$$x(t) = e^{-\delta t} A \cos(\omega t - \varepsilon), \quad A = X_o \frac{\omega_o}{\omega} \quad (1.40)$$

a pro hybnost

$$p(t) = m \frac{dx(t)}{dt} = -A\omega_o e^{-\delta t} \left(\frac{\delta}{\omega_o} \cos(\omega t - \varepsilon) + \frac{\omega}{\omega_o} \sin(\omega t - \varepsilon) \right) \quad (1.41)$$

Uvážíme-li podmínky (1.38) a (1.39), dostaneme

$$p(t) = -e^{-\delta t} B \sin \omega t, \quad B = X_o \frac{\omega_o^2}{\omega} \quad (1.42)$$

Oscilátor kmitá s konstantní frekvencí $\omega = \sqrt{\omega_o^2 - \delta^2}$ a exponenciálně tlumenou amplitudou (obrázek 1.4). V ideálním případě bez tlumení jsou výchylka a rychlost fázově posunuty o $\frac{\pi}{2}$ a oscilátor kmitá podle (1.10). S rostoucím tlumením ($\delta \rightarrow \omega_o$, $\omega \rightarrow 0$) se fáze přibližují ($\varepsilon \rightarrow \frac{\pi}{2}$).

Definujeme nyní konstanty charakterizující tlumený pohyb. Útlum je definován jako poměr dvou libovolných po sobě jdoucích amplitud (využíváme toho, že perioda kmitů je konstantní):

$$\beta = \frac{A(t+T)}{A(t)} = e^{-\delta T} \quad (1.43)$$

popř. užíváme logaritmický dekrement

$$|\ln \beta| = \delta T \quad (1.44)$$

Relaxační doba τ je doba, za kterou amplituda poklesne na e-tinu své původní hodnoty, tj. $\beta = e^{-1}$. Z (1.43) pro ni plyne

$$\tau = \frac{1}{\delta} \quad (1.45)$$

Případem $\delta \geq \omega_o$ (aperiodický případ, kdy se oscilátor velmi rychle zatlumí) se dále nebudeme zabývat.

1.3 Nucené kmity. Rezonance

Předpokládejme nyní, že kmity oscilátoru jsou buzeny vnější silou harmonického průběhu $F(t) = F_o e^{i\Omega t}$. Oscilátor pak kmitá podle rovnice

$$\begin{aligned} m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} &= F(t) - kx(t) - b \frac{dx(t)}{dt} \\ \frac{d^2 x(t)}{dt^2} + 2\delta \frac{dx(t)}{dt} + \omega_o^2 x(t) &= \frac{F_o}{m} e^{i\Omega t} \end{aligned} \quad (1.46)$$

Její řešení² hledejme ve tvaru

$$x(t) = e^{-\delta t} X_o \frac{\omega_o}{\omega} e^{i(\omega t - \varepsilon)} + x_F(t) \quad (1.47)$$

v němž $x_F(t)$ je partikulární řešení diferenciální rovnice (1.46) a první člen napravo je už známé řešení (1.40) příslušné homogenní rovnice. Partikulární řešení hledejme ve tvaru

$$x_F(t) = \alpha e^{i\Omega t} = |\alpha| e^{i(\Omega t + \gamma)} \quad (1.48)$$

kde α je komplexní amplituda s argumentem γ . Po dosazení (1.48) do (1.46) obdržíme

$$\begin{aligned} \alpha(-\Omega^2 + 2i\delta\Omega + \omega_o^2) &= \frac{F_o}{m} \\ \alpha &= \frac{\frac{F_o}{m}}{\omega_o^2 - \Omega^2 + 2i\delta\Omega} \end{aligned} \quad (1.49)$$

$$|\alpha| = \frac{\frac{F_o}{m}}{\sqrt{(\omega_o^2 - \Omega^2)^2 + 4\delta^2\Omega^2}} \quad (1.50)$$

²Přitom uvažujeme pouze jeho reálnou část, stejně jako v následujících postupech.

Z (1.49) je vidět, že pro $\delta \neq 0$ je také $\gamma \neq 0$, resp. $\gamma \neq n\pi$ (n je celé číslo). Takže

$$x_F(t) = \frac{\frac{F_0}{m}}{\sqrt{(\omega_0^2 - \Omega^2)^2 + 4\delta^2\Omega^2}} e^{i(\Omega t + \gamma)} \quad (1.51)$$

Celkové řešení (1.47) potom je

$$x(t) = e^{-\delta t} X_0 \frac{\omega_0}{\omega} e^{i(\omega t - \varepsilon)} + \frac{\frac{F_0}{m}}{\sqrt{(\omega_0^2 - \Omega^2)^2 + 4\delta^2\Omega^2}} e^{i(\Omega t + \gamma)} \quad (1.52)$$

Všimněme si, že s rostoucím časem ztrácí význam první člen v (1.52) a oscilátor pak kmitá přibližně podle (1.51), tedy harmonicky, netlumeně a s frekvencí vynucující síly.

Rezonance (neboli případ, kdy amplitudy dosahují maximálních hodnot vzhledem k vnější síle) nastane, pokud

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\Omega} \left(\frac{1}{\sqrt{(\omega_0^2 - \Omega^2)^2 + 4\delta^2\Omega^2}} \right) &= 0 \\ -4\Omega(\omega_0^2 - \Omega^2) + 8\delta^2\Omega &= 0 \\ \Omega_{REZ} &= \sqrt{\omega_0^2 - 2\delta^2} \end{aligned} \quad (1.53)$$

Koeficient δ je většinou velmi malý, takže $\Omega_{REZ} \simeq \omega_0$. Systém je v rezonanci, pokud je frekvence vynucující síly blízká vlastní frekvenci oscilátoru, v případě ideálního oscilátoru rovna. Když dosadíme (1.53) do (1.52) a uvážíme-li (1.32), obdržíme rovnici kmitů při rezonanci:

$$x_{REZ}(t) = \frac{F_0}{2\delta m \omega} e^{i(\Omega_{REZ} t + \gamma)} + e^{-\delta t} X_0 \frac{\omega_0}{\omega} e^{i(\omega t - \varepsilon)} \quad (1.54)$$

Rozhodující význam po určité době ($t \gg \frac{1}{\delta}$) získává první člen v (1.54), kmity jsou tedy přibližně harmonické s frekvencí Ω_{REZ} .

Všimněme si ještě řešení (1.52), které vystihuje průběh kmitů pod vlivem vnější harmonické síly. Je výhodnější přepsat ho na tvar, v němž bude obsažena počáteční podmínka $x(0)$. Jelikož

$$x(0) = X_0 \frac{\omega_0}{\omega} e^{-i\varepsilon} + \frac{\frac{F_0}{m}}{\sqrt{(\omega_0^2 - \Omega^2)^2 + 4\delta^2\Omega^2}} e^{i\gamma} \quad (1.55)$$

můžeme (1.52) přepsat na

$$x(t) = x(0) e^{-\delta t} e^{i\omega t} + \frac{\frac{F_0}{m} e^{i\gamma}}{\sqrt{(\omega_0^2 - \Omega^2)^2 + 4\delta^2\Omega^2}} (e^{i\Omega t} - e^{-\delta t} e^{i\omega t}) \quad (1.56)$$

Stejně tak rezonanční řešení (1.54) přejde na tvar³

$$x_{REZ}(t) = x(0) e^{-\delta t} e^{i\omega t} + \frac{F_0 e^{i\gamma_{REZ}}}{2m\delta\omega} (e^{i\Omega_{REZ} t} - e^{-\delta t} e^{i\omega t}) \quad (1.57)$$

Proveďme nyní limitní přechod $\delta \rightarrow 0$, tedy přechod k ideálnímu harmonickému oscilátoru bez tlumení. Je potom $\omega \rightarrow \omega_0$ a podle (1.49) argument $\gamma \rightarrow 0$. Limitní tvar (1.56) tak je

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} x(t) = \left(x(0) - \frac{\frac{F_0}{m}}{\omega_0^2 - \Omega^2} \right) e^{i\omega_0 t} + \frac{\frac{F_0}{m}}{\omega_0^2 - \Omega^2} e^{i\Omega t} \quad (1.58)$$

³ α_{REZ} (resp. γ_{REZ}) je komplexní číslo α (resp. jeho argument), do něhož je dosazeno Ω_{REZ} tvaru (1.53).

Vyjádříme-li

$$\begin{aligned} e^{i\gamma_{REZ}} &= \cos \gamma_{REZ} + i \sin \gamma_{REZ} = \frac{\operatorname{Re} \alpha_{REZ}}{|\alpha_{REZ}|} + i \sqrt{1 - \left(\frac{\operatorname{Re} \alpha_{REZ}}{|\alpha_{REZ}|} \right)^2} = \\ &= \frac{\delta}{\sqrt{\omega_o^2 - \delta^2}} + i \sqrt{\frac{\omega_o^2 - 2\delta^2}{\omega_o^2 - \delta^2}} \end{aligned} \quad (1.59)$$

můžeme určit limitu výrazů (1.57):

$$\begin{aligned} \lim_{\delta \rightarrow 0} x_{REZ}(t) &= \lim_{\delta \rightarrow 0} \left\{ x(0) e^{-\delta t} e^{i\sqrt{\omega_o^2 - \delta^2} t} + \frac{F_o}{2m\delta\sqrt{\omega_o^2 - \delta^2}} \left(\frac{\delta}{\sqrt{\omega_o^2 - \delta^2}} + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + i \sqrt{\frac{\omega_o^2 - 2\delta^2}{\omega_o^2 - \delta^2}} \right) (e^{i\sqrt{\omega_o^2 - 2\delta^2} t} - e^{-\delta t} e^{i\sqrt{\omega_o^2 - \delta^2} t}) \right\} = x(0) e^{i\omega_o t} + \\ &\quad + \frac{F_o}{2m} \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{\left(\frac{\delta}{\sqrt{\omega_o^2 - \delta^2}} + i \sqrt{\frac{\omega_o^2 - 2\delta^2}{\omega_o^2 - \delta^2}} \right) (e^{i\sqrt{\omega_o^2 - 2\delta^2} t} - e^{-\delta t} e^{i\sqrt{\omega_o^2 - \delta^2} t})}{\delta \sqrt{\omega_o^2 - \delta^2}} \end{aligned} \quad (1.60)$$

Užitím l'Hospitalova pravidla (stačí jeden krok) dospějeme k výsledku

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} x_{REZ}(t) = \left(x(0) - i \frac{F_o}{2m\omega_o} t \right) e^{i\omega_o t} = \sqrt{x(0)^2 + \frac{F_o^2}{4m^2\omega_o^2} t^2} e^{i(\omega_o t + \varkappa)} \quad (1.61)$$

v němž je \varkappa argument komplexní amplitudy.

Netlumený oscilátor kmitá podle (1.58) periodicky, ale ne harmonicky, neboť je součtem harmonických funkcí s obecně různými frekvencemi a amplitudami. Zvolíme-li vhodně parametry $x(0)$, F_o , Ω tak, aby byly obě amplitudy stejné a frekvence ω_o , Ω blízké ($\Omega = \omega_o + \Delta\omega_o$, $\Delta\omega_o \ll \omega_o$), pak kmitá s frekvencí $\simeq \omega_o$ a pomalu se mění amplitudou (také harmonicky s frekvencí $\simeq \frac{\Delta\omega_o}{2}$)⁴.

Rezonance nastane při $\Omega \rightarrow \omega_o$. Kmity při rezonanci budou určeny limitou výrazu (1.58):

$$x_{REZ}(t) = \lim_{\Omega \rightarrow \omega_o} x(t) = x(0) e^{i\omega_o t} + \frac{F_o}{m} \lim_{\Omega \rightarrow \omega_o} \frac{e^{i\Omega t} - e^{i\omega_o t}}{\omega_o^2 - \Omega^2} \quad (1.62)$$

Jednoduchým použitím l'Hospitalova pravidla dostaneme

$$\lim_{\Omega \rightarrow \omega_o} \frac{e^{i\Omega t} - e^{i\omega_o t}}{\omega_o^2 - \Omega^2} = -i \frac{t}{2\omega_o} e^{i\omega_o t} \quad (1.63)$$

A tedy

$$x_{REZ}(t) = \left(x(0) - i \frac{F_o}{2m\omega_o} t \right) e^{i\omega_o t} \quad (1.64)$$

Opět dostáváme výsledek shodný s (1.61), který je limitou tlumeného oscilátoru při $\delta \rightarrow 0$. Netlumený oscilátor kmitá při rezonanci harmonicky s frekvencí Ω vnější síly a s amplitudou rostoucí s časem. Tuto rezonanční frekvenci jsme již spočítali, týmž limitním přechodem ve vztahu (1.53), v tomto případě pouhým dosazením $\delta = 0$.

⁴Stačí připomenout goniometrický vzorec: $\cos \alpha + \cos \beta = 2 \cos \frac{\alpha - \beta}{2} \cos \frac{\alpha + \beta}{2}$.

Ještě poznamenejme, že výsledek (1.61) také obdržíme dosazením rezonanční frekvence (1.53) do výrazu (1.58) a provedením $\delta \rightarrow 0$. Počítáme tak

$$\begin{aligned} \lim_{\Omega \rightarrow \omega_o} x(t) &= \lim_{\delta \rightarrow 0} x(\Omega_{REZ}, t) = \\ &= \lim_{\delta \rightarrow 0} \left((x(0) - \frac{F_o}{m\delta^2}) e^{i\sqrt{\omega_o^2 - \delta^2}t} + \frac{F_o}{m\delta^2} e^{i\sqrt{\omega_o^2 - 2\delta^2}t} \right) = \\ &= x(0)e^{i\omega_o t} + \frac{F_o}{m} \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{1}{\delta^2} (e^{i\sqrt{\omega_o^2 - 2\delta^2}t} - e^{i\sqrt{\omega_o^2 - \delta^2}t}) \end{aligned} \quad (1.65)$$

Tento postup je složitější⁵, nicméně vede též k výsledku (1.61).

1.4 Aproximace obecného potenciálu

Uvažujme částici v obecném potenciálu $V(x)$ závislém jen na souřadnici x (konzervativní systém) s minimem v bodě $x = x_o$. Rozvineme ho v řadu

$$V(x) = V(x_o) + \frac{dV}{dx}(x_o)(x - x_o) + \frac{1}{2} \frac{d^2V}{dx^2}(x_o)(x - x_o)^2 + \frac{1}{6} \frac{d^3V}{dx^3}(x_o)(x - x_o)^3 + \dots \quad (1.66)$$

Jelikož je v x_o minimum $V(x)$, je $\frac{dV}{dx}(x_o) = 0$ a

$$V(x) = A + \frac{1}{2}B(x - x_o)^2 + \frac{1}{6}C(x - x_o)^3 + \dots \quad (1.67)$$

kde jsme označili konstanty

$$A = V(x_o) \quad (1.68)$$

$$B = \frac{d^2V}{dx^2}(x_o) \quad (1.69)$$

$$C = \frac{d^3V}{dx^3}(x_o) \quad (1.70)$$

$B > 0$, protože v $x = x_o$ je minimum. V okolí minima potenciálu (malé hodnoty $x - x_o$) je možno aproximovat průběh $V(x)$ parabolou, tj. potenciálem harmonického oscilátoru, jak je zachyceno na obrázku 1.5:

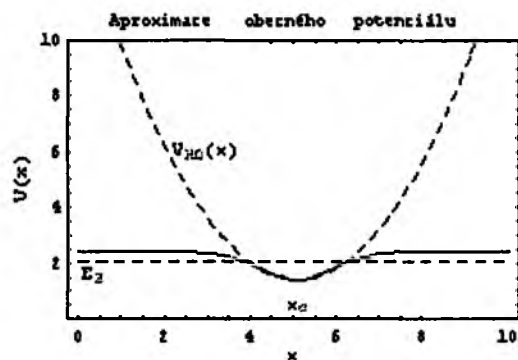
Síla působící na částici v okolí x_o je

$$F(x) = -\frac{dV(x)}{dx} = -B(x - x_o) - \frac{1}{2}C(x - x_o)^2 + \dots \quad (1.71)$$

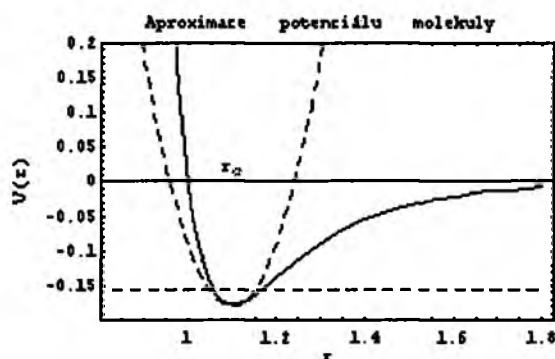
V minimu potenciálu je $F(x_o) = 0$ a v jeho okolí mají síla a výchylka opačná znaménka ($B > 0$), tato závislost je v prvním přiblížení lineární. Je-li energie částice malá, kmitá harmonicky podle rovnice

$$\begin{aligned} m \frac{d^2x(t)}{dt^2} &\simeq -B(x - x_o) \\ \frac{d^2x(t)}{dt^2} + \frac{B}{m}(x - x_o) &\simeq 0 \end{aligned} \quad (1.72)$$

⁵Je třeba užít dvakrát l'Hospitalova pravidla, výpočet této limity přenechávám čtenáři.



Obrázek 1.5: Aproximace potenciálu $V(x)$ kvadratickým potenciálem harmonického oscilátoru $V_{HO} \sim (x - x_0)^2$. Do energie cca E_2 kmitá částice harmonicky.



Obrázek 1.6: Potenciální energie atomů v dvouatomové molekule jako funkce jejich vzájemné vzdálenosti; r_0 je rovnovážná poloha, čárkovaně je zachycena harmonická aproximace.

tedy s frekvencí

$$\omega \simeq \sqrt{\frac{B}{m}} = \sqrt{\frac{1}{m} \frac{d^2V}{dx^2}(x_0)} \quad (1.73)$$

Při vyšších energiích (větších výchylkách) částice kmitá periodicky v mezích určených touto energií, ne však harmonicky.

Studujeme-li chování systému v blízkosti polohy stabilní rovnováhy, můžeme v limitě malých oscilací použít aproximaci potenciálem harmonického oscilátoru a řešit rovnice tohoto oscilátoru. Výsledky jsou použitelné na řadu fyzikálně důležitých jevů jako např. kmity atomů v molekule nebo oscilace atomů v krystalu.

Předvedeme např. klasický výpočet frekvence kmitů atomů v dvouatomové molekule s využitím výše zmíněné aproximace.

Známost závislost $V = V(r)$ zachycenou na obrázku 1.6 aproximujeme v okolí rovnovážné polohy r_0 potenciálem harmonického oscilátoru:

$$V(r) = V(r_0) + \frac{1}{2}B(r - r_0)^2, \quad B > 0 \quad (1.74)$$

Meziatomová síla je

$$F(r) = -\frac{dV(r)}{dr} = -B(r - r_o) \quad (1.75)$$

V analogii s napjatou pružinou můžeme konstantu B interpretovat jako tuhost pružiny "napjaté" mezi oběma atomy. Necht' mají oba stejnou hmotnost m , zvolme jednorozměrnou soustavu souřadnic, v níž r_1 , r_2 budou udávat polohu atomů vzhledem ke zvolenému počátku. Návrtné síly jsou stejně veliké a opačného směru. Označíme-li $r(t) = r_2(t) - r_1(t) - r_o$ (r_o je klidová vzdálenost atomů), jsou pohybové rovnice tvaru

$$m \frac{d^2 r_1(t)}{dt^2} = Br(t) \quad (1.76)$$

$$m \frac{d^2 r_2(t)}{dt^2} = -Br(t) \quad (1.77)$$

Odečtením obou rovnic (1.76) , (1.77) dostaneme

$$\frac{d^2 r(t)}{dt^2} + \frac{2B}{m} r(t) = 0 \quad (1.78)$$

tedy kmity s frekvencí

$$\omega = \sqrt{\frac{2B}{m}} \quad (1.79)$$

Systemů, které se alespoň přibližně řídí rovnicemi harmonického oscilátoru, je však mnohem více. S tím se setkáváme i při studiu elektromagnetického pole, jež lze formálně považovat za ekvivalentní souboru nezávislých harmonických oscilátorů.

Kapitola 2

Klasické metody řešení harmonického oscilátoru

V této kapitole se seznámíme s metodami řešení rovnic klasického harmonického oscilátoru ve dvou pojetích klasické mechaniky - Lagrangeově a Hamiltonově. V obou případech nejprve shrneme základní principy obou formalismů (podle [1]) a poté předvedeme jejich aplikaci na harmonický oscilátor. Obě teorie jsou ekvivalentní a musí tedy vést ke stejným výsledkům.

2.1 Lagrangeův formalismus

V soustavě N hmotných bodů je pohyb těchto bodů určen N rovnicemi

$$m_i \ddot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{F}_i, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (2.1)$$

kde m_i je jejich hmotnost a $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i, z_i)$ poloha i -tého hmotného bodu.

V případě konzervativních sil¹ lze pohybové rovnice (2.1) psát ve tvaru

$$m_i \ddot{\mathbf{r}}_i = -\text{grad}_i V(\mathbf{r}_i) \quad (2.2)$$

v němž grad_i značí gradient vzhledem k souřadnicím x_i, y_i, z_i a $V(\mathbf{r}_i)$ potenciální energii ve tvaru

$$V(\mathbf{r}_i) = \sum_{i=1}^N V_i^{(E)}(\mathbf{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1, j \neq i}^N V_{ij}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \quad (2.3)$$

První suma popisuje působení vnějších sil na soustavu, druhá charakterizuje vzájemné působení částic s respektováním principu akce a reakce. Pohyb systému v kartézských souřadnicích je podle (2.2) určen $3N$ diferenciálními rovnicemi.

Lagrangeova funkce (lagranžián) je definována

$$L(\mathbf{r}_i, \dot{\mathbf{r}}_i) = T(\dot{\mathbf{r}}_i) - V(\mathbf{r}_i) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i |\dot{\mathbf{r}}_i|^2 - V(\mathbf{r}_i) \quad (2.4)$$

jako rozdíl kinetické energie a potenciální určené vztahem (2.3). Je funkcí $6N$ proměnných.

¹Sil závislých jen na souřadnici, ne na čase (popsaných skalárním potenciálem); typickým příkladem takových sil jsou síly gravitační nebo elektrostatické.

Pohybové rovnice (2.2) jsou ekvivalentní Lagrangeovým rovnicím (II.druhu)

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial x_i} = 0 \quad (2.5)$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{y}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial y_i} = 0 \quad (2.6)$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{z}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial z_i} = 0 \quad (2.7)$$

Jde o soustavu $3N$ diferenciálních rovnic; známe-li tedy počáteční podmínky $x_i(0) = x_{i0}$, $y_i(0) = y_{i0}$, $z_i(0) = z_{i0}$, $\dot{x}_i(0) = \dot{x}_{i0}$, $\dot{y}_i(0) = \dot{y}_{i0}$, $\dot{z}_i(0) = \dot{z}_{i0}$, je jejich řešení jednoznačné a určuje stav systému v libovolném okamžiku. Jsou použitelné i na obecnější fyzikální systémy než je soustava hmotných bodů, např. i na pohyb tuhého tělesa. Předpokládáme, že má takový systém s stupňů volnosti, tj. je dán souborem zobecněných souřadnic $q_j(t)$, $j = 1, 2, \dots, s$. V Lagrangeově pojetí je vývoj systému určen množinou dvojic $\{q_j(t), \dot{q}_j(t)\}_{j=1}^s$; derivace podle času $\dot{q}_j(t)$ jsou zobecněné rychlosti.

Lagrangeova funkce

$$L(q_j, \dot{q}_j) = T(\dot{q}_j) - V(q_j) \quad (2.8)$$

závisí na $2s$ proměnných. Pohybové rovnice mají nyní tvar

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_j} = 0, \quad j = 1, 2, \dots, s \quad (2.9)$$

Odvodíme teď pohybovou rovnici harmonického oscilátoru prostředky Lagrangeova formalismu. Lagrangeova funkce nezávisí explicitně na čase a podle (2.4) má tvar

$$L(x, \dot{x}) = T(\dot{x}) - V(x) = \frac{1}{2}m \dot{x}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (2.10)$$

Lagrangeova rovnice pro harmonický oscilátor

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) - \frac{\partial L}{\partial x} &= \frac{d}{dt}(m \dot{x}) + m\omega^2 x = 0 \\ \ddot{x}(t) + \omega^2 x(t) &= 0 \end{aligned} \quad (2.11)$$

vede na očekávanou rovnici (1.3), jejímž řešením jsou harmonické kmity (1.10) s frekvencí (1.12).

V případě vynucující vnější potenciální síly má Lagrangeova funkce vyjádření

$$L(x, \dot{x}) = \frac{1}{2}m \dot{x}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - W(x) \quad (2.12)$$

kde $W(x)$ je potenciální energie vnější síly. Podle (2.9) je třeba vyřešit rovnici

$$\begin{aligned} m \ddot{x} + m\omega^2 x + \frac{\partial W}{\partial x} &= 0 \\ \ddot{x}(t) + \omega^2 x(t) &= -\frac{1}{m} \frac{\partial W(x)}{\partial x} \end{aligned} \quad (2.13)$$

Průběh $x(t)$ závisí na vnější síle. Je-li vnější síla harmonická, jde o speciální případ rovnice (1.46) pro $\delta = 0$ a jejím vyřešením bychom dospěli k výsledkům (1.58) a (1.61).

Uplatnění Lagrangeovy teorie ilustrujeme ještě na případu malých kmitů matematického kyvadla. Zobecněnou souřadnicí je zde úhel $\varphi(t)$, zobecněnou rychlostí derivace podle času $\dot{\varphi}(t)$. Lagrangeova funkce opět není explicitní funkcí času :

$$L(\varphi, \dot{\varphi}) = T(\dot{\varphi}) - V(\varphi) = \frac{1}{2}m(l \dot{\varphi})^2 + mgl \cos \varphi \quad (2.14)$$

(l je délka kyvadla). Lagrangeova rovnice je podle (2.9)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} \right) - \frac{\partial L}{\partial \varphi} &= 0 \\ ml^2 \ddot{\varphi}(t) + mgl \sin \varphi(t) &= 0 \\ \ddot{\varphi}(t) + \frac{g}{l} \sin \varphi(t) &= 0 \end{aligned} \quad (2.15)$$

Jejím řešením jsou pro malé úhly ($\sin \varphi \simeq \varphi$) harmonické kmity s frekvencí (1.27).

2.2 Hamiltonův formalismus

Lagrangeovy rovnice jsou východiskem pro Hamiltonovu teorii, jež hraje důležitou roli v teorii kvantového harmonického oscilátoru (a samozřejmě v celé kvantové teorii), o kterém bude pojednáno v příští kapitole.

Uvažujme opět systém charakterizovaný N zobecněnými souřadnicemi $q_j(t)$, $j = 1, 2, \dots, N$. Zatímco v Lagrangeově teorii jsme pracovali s dvojicemi $q_j(t)$, $\dot{q}_j(t)$, v Hamiltonově pojetí mechaniky se uvažují dvojice $q_j(t)$, $p_j(t)$, $j = 1, 2, \dots, N$. K zobecněné souřadnici $q_j(t)$ tedy přísluší tzv. konjugovaný zobecněný impuls $p_j(t)$ definovaný pomocí lagranžiánu:

$$p_j = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \quad (2.16)$$

Hamiltonova funkce (hamiltonián) systému je definován

$$H(q_j, p_j, t) = \sum_{j=1}^N p_j \dot{q}_j - L(q_j, \dot{q}_j, t) \quad (2.17)$$

Nezávisí-li hamiltonián explicitně na čase (konzervativní systémy), je roven celkové (konstantní) energii systému:

$$H(q_j, p_j) = T(p_j) + V(q_j) = E = konst. \quad (2.18)$$

Časový vývoj systému je určen Hamiltonovými kanonickými rovnicemi:

$$\dot{q}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j} \quad (2.19)$$

$$\dot{p}_j = -\frac{\partial H}{\partial q_j} \quad (2.20)$$

$$j = 1, 2, \dots, N$$

Jelikož jde o soustavu $2N$ diferenciálních rovnic prvního řádu, je jejich řešení jednoznačné a stav systému je v každém časovém okamžiku určen funkcemi $\{q_j(t), p_j(t)\}_{j=1}^N$ a počátečními podmínkami $q_j(0) = q_{j0}$, $p_j(0) = p_{j0}$.

Při vyšetřování souvislosti klasické a kvantové mechaniky má velký význam akční funkce

$$S(q_j, \dot{q}_j, t) = \int_{t_0}^t L(q_j, \dot{q}_j, t) dt \quad (2.21)$$

Hamilton ukázal, že pohybový zákon lze formulovat též takto (tzv. Hamiltonův princip):

Pohyb mechanické soustavy v časovém intervalu (t_1, t_2) probíhá tak, že pro skutečnou trajektorii $x_{klas}(t)$ nabývá funkcionál $S[x(t)] = \int_{t_1}^{t_2} L dt$ stacionární hodnoty, neboli jeho variace je nulová:

$$\delta S[x_{klas}(t)] = 0 \quad (2.22)$$

Integrální Hamiltonův princip je ekvivalentní diferenciálním rovnicím Lagrangeovým a Hamiltonovým.

Předvedeme teď uplatnění této teorie na klasickém harmonickém oscilátoru. Jde o konzervativní systém s hamiltoniánem

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 = E \quad (2.23)$$

Z jeho tvaru je zřejmé, že v dvourozměrném fázovém prostoru xp je ekvienergetickou nadplochou elipsa s délkami poloos $\frac{1}{\omega} \sqrt{\frac{2}{m}}$ a $\sqrt{2m}$.

Kanonické rovnice v tomto speciálním případě jsou

$$\dot{x}(t) = \frac{p(t)}{m} \quad (2.24)$$

$$\dot{p}(t) = -m\omega^2 x(t) \quad (2.25)$$

Z nich vyplývá

$$\begin{aligned} \ddot{x}(t) &= \frac{\dot{p}(t)}{m} = -\omega^2 x(t) \\ \ddot{x}(t) + \omega^2 x(t) &= 0 \end{aligned} \quad (2.26)$$

což je očekávaná rovnice harmonických kmitů.

Akční funkce oscilátoru je podle (2.21)

$$S[x(t), \dot{x}(t), t] = \frac{m}{2} \int_{t_0}^t (\dot{x}(t)^2 - \omega^2 x(t)^2) dt \quad (2.27)$$

Skutečná trajektorie pohybu oscilátoru v časovém intervalu $(0, T)$ je podle Hamiltonova principu extrémou funkcionálu

$$S[x(t)] = \frac{m}{2} \int_0^T (\dot{x}(t)^2 - \omega^2 x(t)^2) dt \quad (2.28)$$

Všimněme si, že např. pro trajektorie $z(t) = Ae^{\pm i\omega t}$ je funkcionál (2.28) identicky nulový. Mohlo by se tedy zdát, že trajektorie $z(t)$ jsou hledaným řešením. To je ovšem zřejmý nesmysl.

Na tomto místě je třeba zdůraznit, že vyšetřujeme stacionaritu funkcionálu $S[x(t)]$ na prostoru trajektorií s daným počátečním a koncovým bodem, tj. stacionaritu při nekonečně malé změně trajektorie $z(t)$. Akční funkce (2.27) pro $z(t)$ je sice nulová v čase, avšak variace funkcionálu (2.28) pro tutéž trajektorii je od nuly různá. To dokážeme standartním způsobem používaným ve variačním počtu. Skutečnou trajektorii označme $x_{klas}(t)$ a libovolnou jinou (blízkou) píšme ve tvaru

$$x(t) = x_{klas}(t) + \delta x(t) \quad (2.29)$$

s pevnými krajními body

$$x' = x(0) = x_{klas}(0) \quad (2.30)$$

$$x'' = x(T) = x_{klas}(T) \quad (2.31)$$

Rozepíšme variaci funkcionální akce s obecnou Lagrangeovou funkcí (nezávislou explicitně na čase) pro trajektorii (2.29):

$$\delta S[x(t)] = \int_0^T (L(x + \delta x, \dot{x} + \delta \dot{x}) - L(x, \dot{x})) dt = \int_0^T \left(\frac{\partial L}{\partial x} \delta x + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \delta \dot{x} \right) dt \quad (2.32)$$

Píšme

$$\delta x(t) = \mu \Theta(t), \quad \mu \ll 1 \quad (2.33)$$

s okrajovými podmínkami

$$\delta x(0) = \Theta(0) = 0 \quad (2.34)$$

$$\delta x(T) = \Theta(T) = 0 \quad (2.35)$$

Je potom

$$\begin{aligned} \delta S[x(t)] &= \mu \int_0^T \left(\frac{\partial L}{\partial x} \Theta(t) + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \dot{\Theta}(t) \right) dt = \\ &= \mu \int_0^T \frac{\partial L}{\partial x} \Theta(t) dt + \mu \int_0^T \left(\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \Theta(t) \right) - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) \right) dt = \\ &= \mu \int_0^T \left(\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) \right) \Theta(t) dt + \mu \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \Theta(t) \right]_{t=0}^{t=T} \end{aligned} \quad (2.36)$$

Druhý člen napravo je vzhledem k okrajovým podmínkám (2.34) a (2.35) nulový, takže² dosadíme-li do (2.36) trajektorii $z(t) = Ae^{\pm\omega t}$ s lagranžiánem harmonického oscilátoru (2.10), obdržíme nenulovou variaci tohoto funkcionálu:

$$\delta S[z(t)] = -m\mu \int_0^T (\omega^2 z(t) + \ddot{z}(t)) \Theta(t) dt = -2m\omega^2 \mu A \int_0^T e^{\pm\omega t} \Theta(t) dt \neq 0 \quad (2.37)$$

$z(t)$ proto nemůže být skutečnou trajektorií oscilátoru³. Dodejme ještě, že akci (2.28) pro trajektorii (2.29) lze psát v separovaném tvaru

$$S[x(t)] = S[x_{klas}(t)] + S[\delta x(t)] \quad (2.38)$$

²Zřejmě jde o obecný postup odvození Lagrangeových rovnic z Hamiltonova principu ($\Theta(t)$ je totiž na $(0, T)$ nenulová). Obrácenou implikací nebudeme uvádět, neboť přímo nesouvisí s uvažovaným problémem.

³Plyne to přímo z faktu, že $z(t)$ nevyhovuje Lagrangeovým rovnicím; nám však nyní šlo o ujasnění podstaty Hamiltonova principu.

neboť smíšený člen

$$\begin{aligned} m \int_0^T (\dot{x}_{klas} \delta \dot{x} - \omega^2 x_{klas} \delta x) dt &= m \int_0^T (\dot{x}_{klas} \delta \dot{x} + \ddot{x}_{klas} \delta x) dt = \\ &= m \int_0^T \frac{d}{dt} (\dot{x}_{klas} \delta x) dt = m [\dot{x}_{klas}(t) \delta x(t)]_{t=0}^{t=T} = 0 \end{aligned} \quad (2.39)$$

je kvůli okrajovým podmínkám (2.34), (2.35) nulový.

Ještě odvodíme pohybovou rovnici matematického kyvadla v Hamiltonově teorii. Hamiltonián matematického kyvadla má tvar

$$H(\varphi, p_\varphi) = \frac{1}{2} m (l \dot{\varphi})^2 - mgl \cos \varphi \quad (2.40)$$

Podle definice (2.16) s užitím lagranžiánu (2.14) je zobecněná hybnost příslušná k zobecněné souřadnici φ :

$$p_\varphi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = ml^2 \dot{\varphi} \quad (2.41)$$

Hamiltonián pak nabude tvaru

$$H(\varphi, p_\varphi) = \frac{p_\varphi^2}{2ml^2} - mgl \cos \varphi \quad (2.42)$$

Časový vývoj $\varphi(t)$ a $p_\varphi(t)$ je dán kanonickými rovnicemi (2.19) a (2.20), jež v tomto případě jsou

$$\dot{\varphi}(t) = \frac{\partial H}{\partial p_\varphi} = \frac{p_\varphi(t)}{ml^2} \quad (2.43)$$

$$\dot{p}_\varphi(t) = -\frac{\partial H}{\partial \varphi} = -mgl \sin \varphi(t) \quad (2.44)$$

z nichž okamžitě plyne

$$\begin{aligned} \ddot{\varphi}(t) &= \frac{1}{ml^2} \dot{p}_\varphi(t) = -\frac{g}{l} \sin \varphi \\ \ddot{\varphi}(t) + \frac{g}{l} \sin \varphi(t) &= 0 \end{aligned} \quad (2.45)$$

A to je rovnice, kterou jsme chtěli dostat.

2.3 Hamiltonův-Jacobiho formalismus

Akcční funkce (2.21) vyhovuje Hamiltonově-Jacobiho rovnici:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H(q_j, \frac{\partial S}{\partial q_j}, t) = 0 \quad (2.46)$$

jejíž řešení nám zprostředkuje řešení dané mechanické úlohy. Uvažujme pro harmonický oscilátor důležitý případ, kdy H nezávisí explicitně na čase. V takovém případě má Hamiltonova-Jacobiho rovnice (2.46) vždy řešení tvaru

$$S = \sigma(q_j) - Et \quad (2.47)$$

kde E je konstantní celková energie soustavy a $\sigma(q_j)$ tzv. charakteristická funkce. Po dosazení (2.47) do (2.46) dostaneme speciální tvar Hamiltonovy-Jacobiho rovnice pro konzervativní systémy:

$$H(q_j, \frac{\partial \sigma}{\partial q_j}) = E \quad (2.48)$$

Její řešení $\sigma(q_j, E, \beta_k)$; $j = 1, 2, \dots, N$; $k = 2, 3, \dots, N$, závisující také na E , β_k jako parametrech, nám umožní najít závislosti $q_j = q_j(t)$ (a prostřednictvím (2.16) také $p_j = p_j(t)$) vyřešením soustavy N rovnic:

$$t + \alpha_1 = \frac{\partial \sigma}{\partial E} \quad (2.49)$$

$$\alpha_k = \frac{\partial \sigma}{\partial \beta_k}, \quad k = 2, 3, \dots, N \quad (2.50)$$

kde konstanty $\alpha_j = q_j(0)$, $\beta_k = p_k(0)$.

Hamiltonova-Jacobiho rovnice pro harmonický oscilátor jakožto konzervativní systém je

$$H\left(x, \frac{\partial \sigma}{\partial x}\right) = E \quad (2.51)$$

S ohledem na tvar hamiltoniánu (2.23) obdržíme

$$\frac{1}{2m} \left(\left(\frac{\partial \sigma}{\partial x} \right)^2 + m^2 \omega^2 x^2 \right) = E \quad (2.52)$$

Odtud pro charakteristickou funkci vyplývá vyjádření

$$\sigma(x, E) = \int \sqrt{2mE - m^2 \omega^2 x^2} dx + \sigma_0 \quad (2.53)$$

Závislost $x = x(t)$ získáme řešením rovnice (2.49):

$$t + \alpha = \frac{\partial \sigma}{\partial E} \quad (2.54)$$

Do (2.54) dosadíme (2.53):

$$\begin{aligned} t + \alpha &= m \int \frac{dx}{\sqrt{2mE - m^2 \omega^2 x^2}} = \sqrt{\frac{m}{2E}} \int \frac{dx}{\sqrt{1 - \frac{m\omega^2}{2E} x^2}} = \\ &= \frac{1}{\omega} \arcsin \left(\omega \sqrt{\frac{m}{2E}} x \right) \end{aligned} \quad (2.55)$$

Neboli

$$x(t) = \frac{1}{\omega} \sqrt{\frac{2E}{m}} \sin \omega(t + \alpha) \quad (2.56)$$

Pro hybnost platí

$$\begin{aligned} p^2 &= \left(\frac{\partial \sigma}{\partial E} \right)^2 = 2mE - m^2 \omega^2 x^2 = 2mE (1 - \sin^2 \omega(t + \alpha)) = \\ &= 2mE \cos^2 \omega(t + \alpha) \end{aligned} \quad (2.57)$$

$$p(t) = \sqrt{2mE} \cos \omega(t + \alpha) \quad (2.58)$$

Oba výsledky (2.56), (2.58) odpovídají dříve spočteným (1.17) a (1.18). Známe-li počáteční podmínky $x(0) = x_o$, $p(0) = p_o$, můžeme určit konstanty E a α :

$$x_o = \frac{1}{\omega} \sqrt{\frac{2E}{m}} \sin \omega \alpha \quad (2.59)$$

$$p_o = \sqrt{2mE} \cos \omega \alpha \quad (2.60)$$

Odtud plyne jednak

$$p_o^2 + m^2 \omega^2 x_o^2 = 2mE$$

$$E = \frac{p_o^2}{2m} + \frac{1}{2} m^2 \omega^2 x_o^2 = konst. \quad (2.61)$$

a také

$$\frac{x_o}{p_o} = \frac{1}{m\omega} \operatorname{tg} \omega \alpha$$

$$\alpha = \frac{1}{\omega} \operatorname{arctg} \left(m\omega \frac{x_o}{p_o} \right) \quad (2.62)$$

Vztah (2.61) souhlasí s konzervativností systému.

Kapitola 3

Kvantový harmonický oscilátor

V úvodních dvou kapitolách jsme rozvinuli klasickou teorii harmonického oscilátoru. Přistoupíme nyní ke kvantovému popisu oscilátoru (literatura [2], [5]).

3.1 Stacionární stavy a energie kvantového harmonického oscilátoru

Uvažujme potenciální energii ve tvaru Taylorova rozvoje (1.67). Koná-li částice hmotnosti m malé kmity kolem rovnovážné polohy $x = 0$, můžeme se v (1.67) omezit na první dva členy:

$$V(x) = V(0) + \frac{1}{2}kx^2 \quad (3.1)$$

kde x je výchylka z rovnovážné polohy. Energii systému budeme počítat od konstantní hodnoty $V(0)$, abychom mohli Hamiltonovu funkci uvažovat ve tvaru

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (3.2)$$

v němž $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ značí vlastní frekvenci.

Hamiltonův operátor uvažovaného systému má v x -reprezentaci vyjádření

$$\hat{H}(\hat{x}, \hat{p}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{x}^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (3.3)$$

Stacionární stavy a energie kvantového harmonického oscilátoru získáme vyřešením rovnice

$$\hat{H}(\hat{x}, \hat{p})\Psi(x) = E\Psi(x) \quad (3.4)$$

Do (3.4) dosadíme hamiltonián (3.3):

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\Psi(x) &= E\Psi(x) \\ \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + \left(\frac{2E}{\hbar\omega} - \frac{m\omega}{\hbar} x^2\right)\Psi(x) &= 0 \end{aligned} \quad (3.5)$$

Je výhodné zavést bezrozměrné proměnné

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \quad (3.6)$$

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega} \quad (3.7)$$

Rovnice (3.5) pak nabývá tvaru

$$\frac{d^2\Psi(\xi)}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2)\Psi(\xi) = 0 \quad (3.8)$$

Pro $\xi \gg \lambda$ je řešení rovnice $\frac{d^2\Psi}{d\xi^2} \simeq \xi^2\Psi$ úměrné $\exp(-\frac{\xi^2}{2})$. Zkusme tedy hledat řešení (3.8) ve tvaru

$$\Psi(\xi) = g(\xi) \exp(-\frac{\xi^2}{2}) \quad (3.9)$$

Je potom $\frac{d^2\Psi}{d\xi^2} = \exp(-\frac{\xi^2}{2}) (g''(\xi) - 2\xi g'(\xi) + (\xi^2 - 1)g(\xi))$, což po dosazení do (3.8) dává

$$g''(\xi) - 2\xi g'(\xi) + (\lambda - 1)g(\xi) = 0 \quad (3.10)$$

Budeme hledat řešení (3.10) ve tvaru mocninné řady

$$g(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^n \quad (3.11)$$

Takže bude

$$g'(\xi) = \sum_{n=1}^{\infty} n a_n \xi^{n-1} = \sum_{n=0}^{\infty} (n+1) a_{n+1} \xi^n \quad (3.12)$$

$$g''(\xi) = \sum_{n=2}^{\infty} n(n-1) a_n \xi^{n-2} = \sum_{n=0}^{\infty} (n+2)(n+1) a_{n+2} \xi^n \quad (3.13)$$

Dosazením (3.12) a (3.13) do (3.10) obdržíme

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} ((n+2)(n+1)a_{n+2} - 2\xi(n+1)a_{n+1} + (\lambda-1)a_n) \xi^n &= 0 \\ \sum_{n=0}^{\infty} ((n+2)(n+1)a_{n+2} - 2na_n + (\lambda-1)a_n) \xi^n &= 0 \end{aligned} \quad (3.14)$$

Protože je ξ libovolné, musí být nulové všechny koeficienty mocninné řady (3.14):

$$(n+1)(n+2)a_{n+2} - 2na_n + (\lambda-1)a_n = 0, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.15)$$

To dává podmínku pro tyto koeficienty

$$a_{n+2} = \frac{2n+1-\lambda}{(n+1)(n+2)} a_n \quad (3.16)$$

K nalezení funkce $g(\xi)$ nám stačí určit koeficienty a_0 a a_1 . Pro $a_0 = a_1 = 0$ je podle (3.16), (3.11) a (3.9) identicky $\Psi(\xi) = 0$. Je-li nekonečně mnoho koeficientů a_n nenulových, není

splněna podmínka $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(\xi)|^2 d\xi < \infty$, tj. nelze v tomto případě najít normovací konstantu pro funkci $\Psi(\xi)$. Není tudíž možno hledat $g(\xi)$ ve tvaru nekonečné mocninné řady (3.11), ale ve tvaru polynomu. Pak existuje číslo n takové, že $a_n \neq 0$, ale $a_{n+2} = 0$. Podle (3.16) to znamená, že

$$\frac{2n+1-\lambda}{(n+1)(n+2)} = 0 \quad (3.17)$$

Musí tedy být

$$\begin{aligned} \lambda &= 2n+1 \\ \frac{2E}{\hbar\omega} &= 2n+1 \\ E_n &= \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \end{aligned} \quad (3.18)$$

Řešení rovnice (3.10) vyhovující podmínce (3.18) je dáno Hermiteovým polynomem, tj. $g(\xi) = H_n(\xi)$. Každému n odpovídá Hermiteův polynom n -tého stupně:

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} (e^{-\xi^2}) \quad (3.19)$$

Tvar prvních šesti Hermiteových polynomů je uveden v dodatku(7.3).

Zatím známe průběh funkce stacionárního stavu, zbývá najít normovací konstantu závislou na n . K tomu je třeba spočítat integrál

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n^2(\xi) e^{-\xi^2} d\xi \quad (3.20)$$

Obecný postup při integraci Hermiteových polynomů je vyložen v dodatku (7.3). Příslušné vytvořující funkce jsou

$$S_{1,2}(\xi, \sigma_{1,2}) = e^{\xi^2 - (\sigma_{1,2} - \xi)^2} \quad (3.21)$$

Po dosazení obou vytvořujících funkcí (3.21) do (3.20) počítáme integrál

$$\begin{aligned} I(\sigma_1, \sigma_2) &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{2\xi(\sigma_1 + \sigma_2) - (\sigma_1^2 + \sigma_2^2) - \xi^2} d\xi = \\ &= e^{-(\sigma_1^2 + \sigma_2^2) + (\sigma_1 + \sigma_2)^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\xi - (\sigma_1 + \sigma_2))^2} d\xi \end{aligned} \quad (3.22)$$

Integrál napravo v (3.22) je gaussovský a je roven $\sqrt{\pi}$ (viz dodatek(7.2), vztah (7.10)), proto

$$I(\sigma_1, \sigma_2) = \sqrt{\pi} e^{2\sigma_1\sigma_2} \quad (3.23)$$

Dále počítejme

$$\begin{aligned} \frac{\partial^n I(\sigma_1, \sigma_2)}{\partial \sigma_2^n} &= \sqrt{\pi} 2^n \sigma_1^n e^{2\sigma_1\sigma_2} = \sqrt{\pi} 2^n \sigma_1^n \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2\sigma_2)^k}{k!} \sigma_1^k = \\ &= \sqrt{\pi} 2^n \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2\sigma_2)^k}{k!} \sigma_1^{n+k} \end{aligned} \quad (3.24)$$

a

$$\frac{\partial^{2n} I(\sigma_1, \sigma_2)}{\partial \sigma_1^n \partial \sigma_2^n} = \sqrt{\pi} 2^n \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2\sigma_2)^k}{k!} \frac{(k+n)!}{k!} \sigma_1^k \quad (3.25)$$

Integrál (3.20) je roven výrazu

$$\left. \frac{\partial^{2n} I(\sigma_1, \sigma_2)}{\partial \sigma_1^n \partial \sigma_2^n} \right|_{\sigma_1=\sigma_2=0} = \sqrt{\pi} 2^n n! \quad (3.26)$$

neboť při $\sigma_1 = \sigma_2 = 0$ je jediný nenulový člen v sumě (3.25) pro $k = 0$.

Normované vlnové funkce stacionárních stavů harmonického oscilátoru proto jsou

$$\Psi_n(\xi) = (n! 2^n \sqrt{\pi})^{-\frac{1}{2}} H_n(\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) \quad (3.27)$$

Nalezli jsme spektrum vlastních energií (3.18) a odpovídající vlastní stavy (stacionární) hamiltoniánu dané vztahem (3.27). Každá hladina energie je přitom nedegenerovaná, neboť pro každé $n = 0, 1, 2, \dots$ existuje právě jedna hodnota E_n a příslušná vlnová funkce $\Psi_n(\xi)$. Tyto funkce jsou navzájem ortonormální, což je důsledek hermiticity operátoru $\hat{H}(\hat{x}, \hat{p})$.

Energie oscilátoru $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ je tedy kvantovaná. Hladiny jsou ekvidistantní:

$$E_{n+1} - E_n = \hbar\omega \quad (3.28)$$

Nejmenší možná hodnota energie (základní hladina) je nenulová a činí $\frac{1}{2}\hbar\omega$. To však nepřekvapuje. Stav klidu v klasickém smyslu ($x = p = 0$, tj. $E = 0$) by odporoval relacím neurčitosti. Energie stacionárních stavů mají ostrou hodnotu. Známe sice přesně součet kinetické a potenciální energie, ale jejich přesné hodnoty neznáme. Operátory $\hat{T}(\hat{p})$ a $\hat{V}(\hat{x})$ totiž nekomutují.

Vlnové funkce stacionárních stavů (3.27) pro první tři hladiny (pišme je v proměnné x)

$$\Psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \quad (3.29)$$

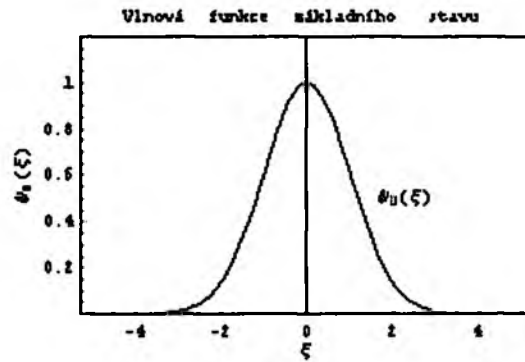
$$\Psi_1(x) = \left(\frac{4}{\pi}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^3\right)^{\frac{1}{4}} x \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \quad (3.30)$$

$$\Psi_2(x) = \left(\frac{m\omega}{4\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \left(2\frac{m\omega}{\hbar}x^2 - 1\right) \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \quad (3.31)$$

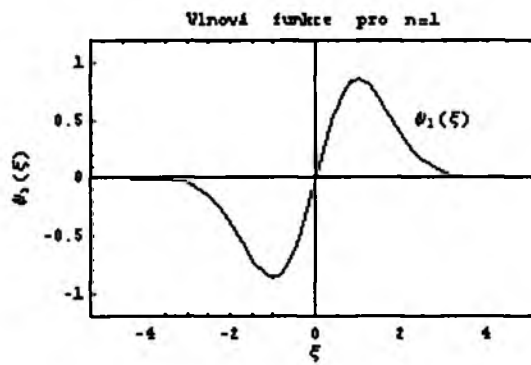
jsou zachyceny spolu s odpovídajícím rozložením hustoty pravděpodobnosti výskytu na obrázcích 3.2 až 3.6:

Vidíme, že s rostoucím n roste oblast na ose x , kde má $\Psi_n(x)$ významnou hodnotu. To odpovídá představám klasické mechaniky (amplituda pohybu roste s energií). Pro srovnání s klasickým oscilátorem uvedeme graf funkce $\Psi_{10}(x)$:

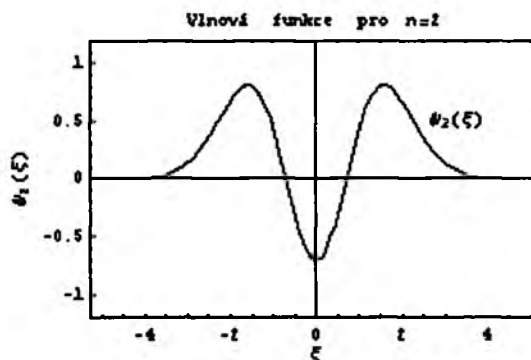
S rostoucím n se tedy kvantový harmonický oscilátor stále více podobá klasickému, jenž má v bodech $\pm x_0$ (v amplitudách) největší pravděpodobnost výskytu.



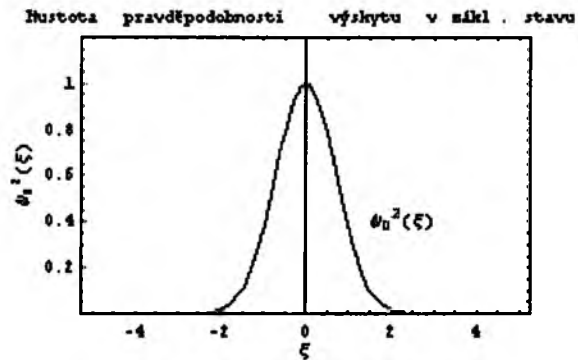
Obrázek 3.1: Vlnová funkce základního stavu harmonického oscilátoru (daná vztahem (3.29)) v závislosti na redukované souřadnici ξ .



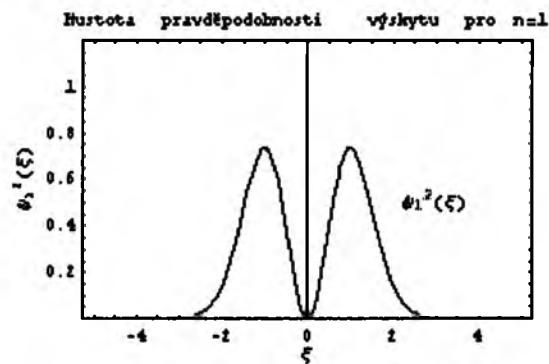
Obrázek 3.2: Vlnová funkce prvního excitovaného stavu (daná vztahem (3.30)) v závislosti na redukované souřadnici ξ .



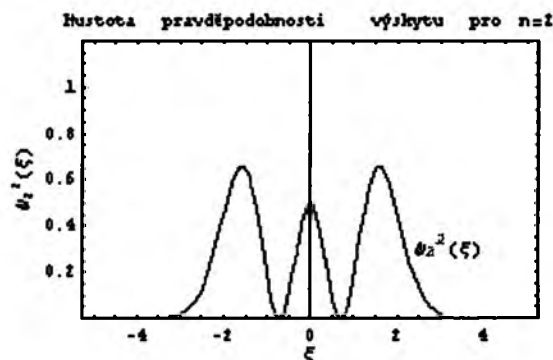
Obrázek 3.3: Vlnová funkce druhého excitovaného stavu (daná vztahem (3.31)) v závislosti na redukované souřadnici ξ .



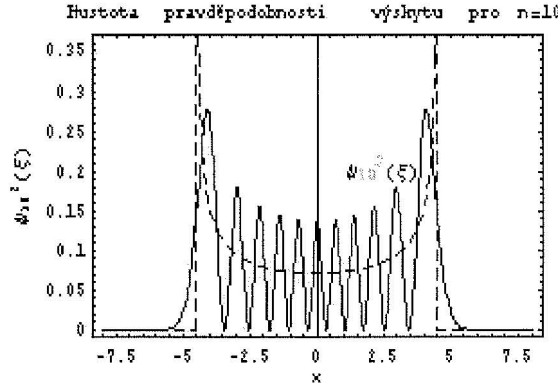
Obrázek 3.4: Rozdělení pravděpodobnosti výskytu v základním stavu kvantového oscilátoru je nejvíc odlišné od pravděpodobnostního rozdělení klasického oscilátoru (viz obrázek 1.2).



Obrázek 3.5: Rozdělení pravděpodobnosti prvního excitovaného stavu oscilátoru v závislosti na ξ .



Obrázek 3.6: Rozdělení pravděpodobnosti druhého excitovaného stavu oscilátoru v závislosti na ξ .



Obrázek 3.7: Rozdělení pravděpodobnosti výskytu v desátém excitovaném stavu oscilátoru je už mnohem bližší tvaru rozdělovací funkce klasického oscilátoru (zakreslenému čárkovaně). S rostoucí n se tato podobnost ještě zvýrazní.

Na uvedených obrázcích je vidět, že počet nulových bodů funkce $\Psi_n(x)$ roste s kvantovým číslem n . To má za následek, že i střední kinetická energie daná vztahem

$$\bar{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^*(x) \frac{d^2 \Psi_n(x)}{dx^2} dx \quad (3.32)$$

roste s n , neboť roste křivost $\Psi_n(x)$ daná druhou derivací ve vzorci (3.32). Zřejmě roste i střední potenciální energie daná integrálem

$$\bar{V} = \frac{1}{2} m \omega^2 \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^*(x) x^2 \Psi_n(x) dx = \frac{1}{2} m \omega^2 \overline{x^2} \quad (3.33)$$

Z hlediska klasické mechaniky se zdá nepochopitelné, že výchylka může být s nenulovou pravděpodobností větší než amplituda klasického pohybu. Kinetická energie klasického oscilátoru by musela být záporná (energie klasického oscilátoru je $E = \frac{1}{2} m \omega^2 X_o^2 = T + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$, tj. pro $|x| > X_o$ je $T < 0$). To ale není možné. Omezenost klasického pohybu harmonického oscilátoru tedy můžeme chápat jako důsledek faktu, že kinetická energie nemůže být záporná. V kvantovém případě je situace jiná. Jak již bylo řečeno, operátory kinetické a potenciální energie nekomutují, což má za následek "rozmazanost" souřadnice x vně intervalu klasických amplitud, kde je vlnová funkce také nenulová. Podstata problému je opět v Heisenbergových relacích neurčitosti.

3.2 Fononová reprezentace stacionárních stavů

Hermiteovy polynomy (3.19) vyhovují těmto rovnicím:

$$\frac{\partial H_n(\xi)}{\partial \xi} = 2n H_{n-1}(\xi) \quad (3.34)$$

$$\xi H_n(\xi) = n H_{n-1}(\xi) + \frac{1}{2} H_{n+1}(\xi) \quad (3.35)$$

Vlnové funkce stacionárních stavů (3.27) vynásobené redukovanou souřadnicí ξ :

$$\xi \Psi_n(\xi) = (n!2^n \sqrt{\pi})^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) \xi H_n(\xi) \quad (3.36)$$

přepíšeme s využitím (3.35) na tvar

$$\xi \Psi_n(\xi) = (n!2^n \sqrt{\pi})^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) \left(n H_{n-1}(\xi) + \frac{1}{2} H_{n+1}(\xi)\right) \quad (3.37)$$

S ohledem na tvary funkcí $\Psi_{n-1}(\xi)$, $\Psi_n(\xi)$, $\Psi_{n+1}(\xi)$ vyjádřené rekurentním vztahem (3.27) pak pro (3.37) platí

$$\xi \Psi_n(\xi) = \sqrt{\frac{n}{2}} \Psi_{n-1}(\xi) + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \Psi_{n+1}(\xi) \quad (3.38)$$

Do derivace vlnové funkce

$$\frac{\partial \Psi_n(\xi)}{\partial \xi} = (n!2^n \sqrt{\pi})^{-\frac{1}{2}} \frac{\partial H_n(\xi)}{\partial \xi} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) - \xi \Psi_n(\xi) \quad (3.39)$$

dosadíme (3.34) a získáme

$$\frac{\partial \Psi_n(\xi)}{\partial \xi} = 2n (n!2^n \sqrt{\pi})^{-\frac{1}{2}} H_{n-1}(\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) - \xi \Psi_n(\xi) \quad (3.40)$$

První člen napravo v (3.40) je roven $2\sqrt{\frac{n}{2}}\Psi_{n-1}(\xi)$, za druhý dosadíme vyjádření (3.38) a máme

$$\frac{\partial \Psi_n(\xi)}{\partial \xi} = \sqrt{\frac{n}{2}} \Psi_{n-1}(\xi) - \sqrt{\frac{n+1}{2}} \Psi_{n+1}(\xi) \quad (3.41)$$

Sečtením a odečtením rovnic (3.38) a (3.41) nám vyplynou následující dva vztahy:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{\partial}{\partial \xi}\right) \Psi_n(\xi) = \sqrt{n} \Psi_{n-1}(\xi) \quad (3.42)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi}\right) \Psi_n(\xi) = \sqrt{n+1} \Psi_{n+1}(\xi) \quad (3.43)$$

kteř lze chápat jako působení nových operátorů převádějících funkci $\Psi_n(\xi)$ na funkci $\Psi_{n-1}(\xi)$, resp. $\Psi_{n+1}(\xi)$. Přepíšeme podle definic operátorů souřadnice a hybnosti v x -reprezentaci výraz

$$\begin{aligned} \xi \pm \frac{\partial}{\partial \xi} &= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \pm \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} \left(m\omega x \pm \hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} \left(m\omega \hat{x} \pm i \hat{p}\right) \end{aligned} \quad (3.44)$$

a definujme nové operátory

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{\partial}{\partial \xi}\right) = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \left(m\omega \hat{x} + i \hat{p}\right) \quad (3.45)$$

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi}\right) = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \left(m\omega \hat{x} - i \hat{p}\right) \quad (3.46)$$

Rovnice (3.42) , (3.43) pak nabývají jednoduššího tvaru

$$\hat{a} \Psi_n = \sqrt{n} \Psi_{n-1} \quad (3.47)$$

$$\hat{a}^+ \Psi_n = \sqrt{n+1} \Psi_{n+1} \quad (3.48)$$

Z předchozího výkladu víme, že spektrum energií je diskrétní a nedegenerované. Každému stacionárnímu stavu $\Psi_n(\xi)$ náleží jednoznačně určená energie E_n a kvantové číslo n (a naopak). To umožňuje názornější popis těchto stavů. Daný stacionární stav Ψ_n budeme značit $|n\rangle$:

$$\Psi_n \leftrightarrow |n\rangle \quad (3.49)$$

a můžeme uvažovat, že n udává počet nových "částic" (přesněji kvazičástic), tzv. fononů.

Stav $|n\rangle$ je tak plně určen kvantovým číslem n . Protože je energetické spektrum ekvidis-
tantní s jednotkou $\hbar\omega$, mají všechny fonony stejnou energii $\hbar\omega$.

Operátory \hat{a} , \hat{a}^+ působí podle (3.47), resp. (3.48) na stavy $|n\rangle$, popř. na počet fononů takto:

$$\hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \quad (3.50)$$

$$\hat{a}^+ |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \quad (3.51)$$

\hat{a} tedy snižuje počet fononů o jeden. Nazývá se proto anihilační operátor. \hat{a}^+ naopak počet fononů o jeden zvyšuje a nazývá se proto kreační operátor.

Maticové elementy \hat{a} , \hat{a}^+ v reprezentaci $\{|n\rangle\}$ jsou

$$\left(\hat{a}\right)_{mn} = \langle m | \hat{a} | n \rangle = \sqrt{n} \langle m | n-1 \rangle = \sqrt{n} \delta_{m,n-1} \quad (3.52)$$

$$\left(\hat{a}^+\right)_{mn} = \langle m | \hat{a}^+ | n \rangle = \sqrt{n+1} \langle m | n+1 \rangle = \sqrt{n+1} \delta_{m,n+1} \quad (3.53)$$

Oba operátory můžeme znázornit maticemi:

$$\hat{a} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdot & \cdot & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdot & 0 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & 0 & \cdot & \cdot & 0 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \sqrt{n} & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \quad (3.54)$$

$$\hat{a}^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & \cdot \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & \cdot \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdot & \cdot & 0 & \cdot \\ \cdot & \cdot & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{n+1} & 0 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \quad (3.55)$$

které působí na stavy

$$|n\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (3.56)$$

kde číslo 1 leží na $(n + 1)$ -tém řádku shora. Např. působení kreačního operátoru na stav $|2\rangle$ je vyjádřeno součinem

$$\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} = \sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Je vidět, že skutečně platí $\hat{a}|2\rangle = \sqrt{2}|1\rangle$.

Matice (3.54) a (3.55) jsou navzájem hermitovskky sdružené, neboť platí

$$\left(\hat{a}^{\dagger}\right)_{mn} = \left(\hat{a}\right)_{nm}^* \quad (3.57)$$

Tyto matice ovšem nejsou hermitovské. Proto ani operátory \hat{a} , \hat{a}^{\dagger} nejsou hermitovské¹. A nekomutují:

$$\begin{aligned} \left[\hat{a}, \hat{a}^{\dagger}\right] &= \frac{1}{2m\hbar\omega} \left[m\omega \hat{x} + i\hat{p}, m\omega \hat{x} - i\hat{p} \right] = \\ &= \frac{1}{2m\hbar\omega} \left(\left[i\hat{p}, m\omega \hat{x} \right] - \left[m\omega \hat{x}, i\hat{p} \right] \right) = \\ &= \frac{i}{2\hbar} \left(\left[\hat{p}, \hat{x} \right] - \left[\hat{x}, \hat{p} \right] \right) = \frac{i}{2\hbar} (-2i\hbar) = \hat{1} \end{aligned}$$

Tedy

$$\left[\hat{a}, \hat{a}^{\dagger}\right] = \hat{1} \quad (3.58)$$

Prostřednictvím kreačního a anihilačního operátoru je možno vyjádřit operátory souřadnice, hybnosti a hamiltonián. Ze (3.45) a (3.46) odvodíme

$$\hat{a}^{\dagger}\hat{a} = \frac{1}{2m\hbar\omega} \left(m^2\omega^2 \hat{x}^2 + im\omega \left[\hat{x}, \hat{p} \right] + \hat{p}^2 \right) =$$

¹Podmínka hermiticity operátoru je ekvivalentní podmínce hermiticity příslušné matice: Jelikož $\left(\hat{a}\right)_{mn} = \langle m | \hat{a} | n \rangle$, $\left(\hat{a}^{\dagger}\right)_{mn} = \left(\hat{a}\right)_{nm}^* = \langle n | \hat{a} | m \rangle^*$, je $\langle m | \hat{a} | n \rangle \neq \langle n | \hat{a} | m \rangle^*$, neboli \hat{a} není hermitovský, podobně i operátor \hat{a}^{\dagger} .

$$= \frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{x}^2 - \frac{1}{2}\hbar\omega \right) = \frac{1}{\hbar\omega} \left(\hat{H} - \frac{1}{2}\hbar\omega \right)$$

A

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \quad (3.59)$$

Nebo podle (3.58)

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a} \hat{a}^\dagger - \frac{1}{2} \right) \quad (3.60)$$

A nebo

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger \right) \quad (3.61)$$

Z tohoto je zřejmé, že operátory $\hat{a}^\dagger \hat{a}$, $\hat{a} \hat{a}^\dagger$ jsou hermitovské, protože \hat{H} je hermitovský. To vyplývá i z následujících rovnic²

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} \hat{a}^\dagger |n-1\rangle = n |n\rangle \quad (3.62)$$

$$\hat{a} \hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} \hat{a} |n+1\rangle = (n+1) |n\rangle \quad (3.63)$$

Oba generují reálná vlastní čísla, takže musí být hermitovské. Významný je především první z nich a má své označení

$$\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a} \quad (3.64)$$

popř. v maticovém tvaru

$$\hat{N} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 2 & 0 & & & & \\ 0 & 0 & 3 & & & & \\ \cdot & & & \cdot & & & \\ \cdot & & & & \cdot & & \\ \cdot & & & & & n & \\ \cdot & & & & & & \cdot \end{pmatrix} \quad (3.65)$$

Splňuje podmínku hermiticity

$$\hat{N}^\dagger = \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} \right)^\dagger = \hat{a} \hat{a}^\dagger = \hat{N} \quad (3.66)$$

Komutátory \hat{N} s \hat{a} , \hat{a}^\dagger , \hat{H} jsou

$$\left[\hat{N}, \hat{a} \right] = \left[\hat{a}^\dagger \hat{a}, \hat{a} \right] = \hat{a}^\dagger \left[\hat{a}, \hat{a} \right] + \left[\hat{a}^\dagger, \hat{a} \right] \hat{a} = -\hat{a} \quad (3.67)$$

$$\left[\hat{N}, \hat{a}^\dagger \right] = \left[\hat{a}^\dagger \hat{a}, \hat{a}^\dagger \right] = \hat{a}^\dagger \left[\hat{a}, \hat{a}^\dagger \right] + \left[\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger \right] \hat{a} = \hat{a}^\dagger \quad (3.68)$$

²Z nich je názorně vidět platnost komutační relace (3.58).

$$\left[\hat{N}, \hat{H} \right] = \hbar\omega \left[\hat{a}^+ \hat{a}, \hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2} \right] = 0 \quad (3.69)$$

Rovnici (3.62) přepíšeme na tvar

$$\hat{N} |n\rangle = n |n\rangle \quad (3.70)$$

Působení tohoto operátoru na stav $|n\rangle$ produkuje vlastní číslo n udávající počet fononů v tomto stavu. Operátor \hat{N} proto budeme nazývat operátorem počtu fononů.

Z (3.70) mimo jiné vyplývá, že vlastními stavy operátoru \hat{N} jsou právě vlastní stavy operátoru \hat{H} , které již známe. To je naprosto v souladu s komutační relací (3.69). Vlastní čísla n jsou nezáporná, protože platí

$$0 \leq \left| \hat{a} |n\rangle \right|^2 = \langle n | \hat{a}^+ \hat{a} |n\rangle = \langle n | \hat{N} |n\rangle = n \quad (3.71)$$

Ve vzorcích (3.59), (3.60), (3.61) se nám podařilo převést hamiltonián na takový tvar, aby působil ne na funkce souřadnic, ale na stavy, které jsou funkcemi obsazovacích čísel. Totéž provedeme s operátory \hat{x} a \hat{p} . Ještě předtím se vraťme k hamiltoniánu (3.59) psaném ve tvaru

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right) \quad (3.72)$$

jehož aplikace na stav $|n\rangle$ dává očekávaný výsledek

$$\hat{H} |n\rangle = \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right) |n\rangle = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle = E_n |n\rangle \quad (3.73)$$

Maticové prvky \hat{H} v reprezentaci $\{|n\rangle\}$ jsou

$$\left(\hat{H} \right)_{mn} = \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right)_{mn} = \hbar\omega \left(n\delta_{mn} + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \delta_{mn} = E_n \delta_{mn} \quad (3.74)$$

Vztah (3.72) je vyjádřením hamiltoniánu \hat{H} v E -reprezentaci (tj. ve své vlastní reprezentaci), neboť je reprezentován diagonální maticí, v níž na diagonále leží jeho vlastní hodnoty E_n :

$$\left(\hat{H} \right)_{mn} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\hbar\omega & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \frac{3}{2}\hbar\omega & 0 & & & \\ 0 & 0 & \frac{5}{2}\hbar\omega & & & \\ \vdots & & & \ddots & & \\ \vdots & & & & \ddots & \\ \vdots & & & & & (n + \frac{1}{2})\hbar\omega & \\ \vdots & & & & & & \ddots \end{pmatrix} \quad (3.75)$$

Zbývá ještě najít tvar operátorů \hat{x} a \hat{p} . Sečtením rovnic (3.45) a (3.46) získáme

$$\begin{aligned} \hat{a}^+ + \hat{a} &= \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} 2m\omega \hat{x} = \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} \hat{x} \\ \hat{x} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\hat{a}^+ + \hat{a} \right) \end{aligned} \quad (3.76)$$

Jejich odečtením pak dostaneme

$$\begin{aligned} \hat{a}^+ - \hat{a} &= \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (-2i\hat{p}) = -i\sqrt{\frac{2}{m\hbar\omega}} \hat{p} \\ \hat{p} &= i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (\hat{a}^+ - \hat{a}) \end{aligned} \quad (3.77)$$

Tak jsme vyjádřili potřebné operátory, aby působily na funkce obsazovacích čísel.

Kreační operátor má ještě jednu významnou vlastnost, že totiž jeho aplikací lze vyjádřit libovolný stacionární stav. Z (3.51) plyne (dosazením $n - 1$ za n):

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{a}^+ |n-1\rangle \quad (3.78)$$

Jeho n -násobným použitím obdržíme

$$\begin{aligned} |n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n}} \frac{1}{\sqrt{n-1}} (\hat{a}^+)^2 |n-2\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \frac{1}{\sqrt{n-1}} \dots \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{1}} (\hat{a}^+)^n |0\rangle \\ |n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^+)^n |0\rangle \end{aligned} \quad (3.79)$$

Stav $|n\rangle$ lze tedy získat n -násobným opakovaným použitím kreačního operátoru na základní stav $|0\rangle$. Tuto vlastnost využijeme v následujícím článku.

3.3 Vlastnosti stacionárních stavů

V článku (3.1) jsme ukázali, že spektrum energií kvantového harmonického oscilátoru je diskrétní a nedegenerované s vlastními hodnotami $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$, $n = 0, 1, 2, \dots$. Každé z těchto hladin odpovídá stacionární stav $|n\rangle$ charakterizovaný vlnovou funkcí

$$\Psi_n = (n!2^n\sqrt{\pi})^{-\frac{1}{2}} H_n(\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) \quad (3.80)$$

V článku (3.2) jsme pak definovali kreační a anihilační operátor, jež jsou výhodné pro další odvozování vlastností stacionárních stavů oscilátoru:

Hladiny energie jsou nedegenerované

Ukážeme nejprve, že základní hladina je nedegenerovaná. Nalezneme všechny funkce Ψ_0 , které splňují $\hat{a} \Psi_0 = 0$. Použijeme přitom vztahů (3.45) a (3.47):

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \left(m\omega x + \hbar \frac{d}{dx} \right) \Psi_0 &= 0 \\ \frac{d\Psi_0}{\Psi_0} &= -\frac{m\omega}{\hbar} x dx \\ \Psi_0(x) &= A \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) \end{aligned} \quad (3.81)$$

Všechny funkce jsou lineárně závislé (liší se jen konstantou A), z čehož okamžitě vyplývá, že základní hladina je nedegenerovaná. Dále ze vztahu $\Psi_{n+1} = \frac{1}{\sqrt{n+1}} \hat{a}^+ \Psi_n$ plyne, že je-li nedegenerovaná hladina E_n , je nedegenerovaná i hladina E_{n+1} . Nyní už je zřejmá platnost dokazovaného tvrzení.

Stacionární stavy jsou ortonormální

To vyplývá přímo z faktu, že operátor \hat{H} je hermitovský. Lze to dokázat i ze vztahu (3.79). Rovnice s ní hermitovsky sdružená je

$$\langle n | = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle 0 | \hat{a}^n \quad (3.82)$$

A tedy

$$\langle m | n \rangle = \frac{1}{\sqrt{m!n!}} \langle 0 | \hat{a}^{m-1} \hat{a} \hat{a}^+ \hat{a}^{n-1} | 0 \rangle \quad (3.83)$$

Jelikož podle (3.63) je

$$\hat{a} \hat{a}^+ \hat{a}^{n-1} | 0 \rangle = (n-1+1) \hat{a}^{n-1} | 0 \rangle = n \hat{a}^{n-1} | 0 \rangle \quad (3.84)$$

dostáváme

$$\langle m | n \rangle = \frac{n}{\sqrt{m!n!}} \langle 0 | \hat{a}^{m-1} \hat{a}^{n-1} | 0 \rangle = \frac{n(n-1)}{\sqrt{m!n!}} \langle 0 | \hat{a}^{m-2} \hat{a}^{n-2} | 0 \rangle = \dots \quad (3.85)$$

Tímto rekurentním postupem dospějeme k výsledku:

(a) Pro $m = n$:

$$\langle n | n \rangle = \langle 0 | 0 \rangle = 1$$

(b) Pro $m > n$:

$$\langle m | n \rangle = \frac{n!}{\sqrt{m!n!}} \langle 0 | \hat{a}^{m-n} | 0 \rangle = 0$$

(c) Pro $m < n$:

$$\begin{aligned} \langle m | n \rangle &= \frac{1}{\sqrt{m!n!}} \frac{n!}{(n-m)!} \langle 0 | \hat{a}^{n-m} | 0 \rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{m!n!}} \frac{n!}{(n-m)!} \left(\hat{a}^{n-m} | 0 \rangle \right)^* | 0 \rangle = 0 \end{aligned}$$

Tedy platí

$$\langle m | n \rangle = \delta_{mn} \quad (3.86)$$

což jsme měli dokázat.

Stacionární stavy tvoří ortonormální bázi prostoru stavů oscilátoru.

Je to jen další důsledek hermiticity Hamiltonova operátoru. Stacionární stavy proto splňují relaci uzavřenosti

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = \hat{1} \quad (3.87)$$

kde $\hat{1}$ je operátor identity.

3.3.1 Střední hodnoty veličin ve stacionárních stavech

K výpočtům středních hodnot souřadnice a impulsu využijeme vztahů (3.76), (3.77):

$$\begin{aligned}\bar{x} &= \langle n | \hat{x} | n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle n | (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) | n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\langle n | \hat{a}^\dagger | n \rangle + \langle n | \hat{a} | n \rangle \right) = \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{n+1} \langle n | n+1 \rangle + \sqrt{n} \langle n | n-1 \rangle) = 0\end{aligned}\quad (3.88)$$

$$\bar{p} = \langle n | \hat{p} | n \rangle = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \langle n | (\hat{a}^\dagger - \hat{a}) | n \rangle = 0 \quad (3.89)$$

V obou případech jsme využili ortogonalitu stacionárních stavů vyjádřených vztahem (3.86).

Střední hodnota energie ve stavu $|n\rangle$ musí být E_n , neboť ve stacionárním stavu má energie vždy ostrou hodnotu:

$$\bar{E} = \langle n | \hat{H} | n \rangle = \hbar\omega \left(\langle n | \hat{N} | n \rangle + \frac{1}{2} \langle n | n \rangle \right) = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) = E_n \quad (3.90)$$

Jelikož operátory \hat{x} a \hat{p} nekomutují s \hat{H} , nemohou mít souřadnice ani impuls ve stacionárním stavu ostrou hodnotu. Spočítejme proto střední kvadratické odchylky Δx a Δp . K tomu stačí určit $\overline{x^2}$ a $\overline{p^2}$, jež nejsou na rozdíl od \bar{x} a \bar{p} nulové. Určíme nejdřív operátory

$$\hat{x}^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} \left(\hat{a}^\dagger + \hat{a} \right)^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} \left(\hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^2 \right) \quad (3.91)$$

$$\hat{p}^2 = -\frac{m\hbar\omega}{2} \left(\hat{a}^\dagger - \hat{a} \right)^2 = -\frac{m\hbar\omega}{2} \left(\hat{a}^{\dagger 2} - \left(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} \right) + \hat{a}^2 \right) \quad (3.92)$$

Z komutační relace (3.58) plyne

$$\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} = \hat{1} + 2\hat{a}^\dagger\hat{a} = \hat{1} + 2\hat{N} \quad (3.93)$$

takže

$$\hat{x}^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} \left(\hat{a}^{\dagger 2} + 2\hat{N} + \hat{1} + \hat{a}^2 \right) \quad (3.94)$$

$$\hat{p}^2 = -\frac{m\hbar\omega}{2} \left(\hat{a}^{\dagger 2} - 2\hat{N} - \hat{1} + \hat{a}^2 \right) \quad (3.95)$$

$$\begin{aligned}(\Delta x)^2 &= \overline{x^2} - \bar{x}^2 = \langle n | \hat{x}^2 | n \rangle - 0 = \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} \left(\langle n | \hat{a}^{\dagger 2} | n \rangle + 2\langle n | \hat{N} | n \rangle + 1 + \langle n | \hat{a}^2 | n \rangle \right)\end{aligned}\quad (3.96)$$

$$(\Delta p)^2 = \overline{p^2} - \bar{p}^2 = \langle n | \hat{p}^2 | n \rangle - 0 =$$

$$= -\frac{m\hbar\omega}{2} \left(\langle n | \hat{a}^{\dagger 2} | n \rangle - 2 \langle n | \hat{N} | n \rangle - 1 + \langle n | \hat{a}^2 | n \rangle \right) \quad (3.97)$$

Podle (3.50) a (3.51) je

$$\langle n | \hat{a}^{\dagger 2} | n \rangle = \sqrt{n+1} \langle n | \hat{a}^{\dagger} | n+1 \rangle = \sqrt{n+1} \sqrt{n+2} \langle n | n+2 \rangle = 0 \quad (3.98)$$

$$\langle n | \hat{a}^2 | n \rangle = \sqrt{n} \langle n | \hat{a} | n-1 \rangle = \sqrt{n} \sqrt{n-1} \langle n | n-2 \rangle = 0 \quad (3.99)$$

$$\langle n | \hat{N} | n \rangle = n \quad (3.100)$$

Je potom

$$(\Delta x)^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} (2n+1) = \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (3.101)$$

$$(\Delta p)^2 = \frac{m\hbar\omega}{2} (2n+1) = m\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (3.102)$$

$$\Delta x \cdot \Delta p = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \quad (3.103)$$

Z (3.103) mimo jiné vyplývá známá nerovnost $\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$. Minimum nastává pro $n = 0$, tj. pro základní stav. To je zřejmé už z obrázků v článku (3.1) - s rostoucím n se podstatná část $|\Psi_n|^2$ stále více "roztahuje" a Δx se zvětšuje.

Pro srovnání uvažujme klasický oscilátor s amplitudou X_{\max} a energií $E = E_n$:

$$X_{\max}^2 = \frac{2E}{m\omega^2} = 2 \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{\hbar}{m\omega} = 2 (\Delta x)^2 \quad (3.104)$$

$$P_{\max}^2 = 2mE = 2 \left(n + \frac{1}{2} \right) m\hbar\omega = 2 (\Delta p)^2$$

$$\Delta x = \frac{\sqrt{2}}{2} X_{\max} \quad (3.105)$$

$$\Delta p = \frac{\sqrt{2}}{2} P_{\max} \quad (3.106)$$

Obě odchylky mají velikost řádu intervalu, v němž probíhá klasický pohyb. Zde je největší pravděpodobnost výskytu, jak plyne z obrázků v článku (3.1).

Stacionární stavy nemají ekvivalent v klasické mechanice, přesto jistá analogie existuje, a to s pohybem, jenž je ve fázovém prostoru popsán rovnicemi

$$x_{\text{klas}}(t) = X_o \sin(\omega t + \varphi) \quad (3.107)$$

$$p_{\text{klas}}(t) = P_o \cos(\omega t + \varphi) \quad (3.108)$$

$$\begin{aligned} \overline{x_{\text{klas}}} &= \frac{1}{T} \int_0^T x_{\text{klas}}(t) dt \\ &= X_o \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \sin \varphi d\varphi = 0 \end{aligned} \quad (3.109)$$

$$\begin{aligned}\overline{p_{klas}} &= \frac{1}{T} \int_0^T p_{klas}(t) dt \\ &= P_o \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \cos \varphi d\varphi = 0\end{aligned}\quad (3.110)$$

$$\begin{aligned}\overline{x_{klas}^2} &= \frac{1}{T} \int_0^T x_{klas}^2(t) dt \\ &= X_o^2 \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \sin^2 \varphi d\varphi = \frac{X_o^2}{2}\end{aligned}\quad (3.111)$$

$$\begin{aligned}\overline{p_{klas}^2} &= \frac{1}{T} \int_0^T p_{klas}^2(t) dt \\ &= P_o^2 \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \cos^2 \varphi d\varphi = \frac{P_o^2}{2}\end{aligned}\quad (3.112)$$

Z těchto vzorců je už patrná uvedená analogie.

Uřídíme ještě střední hodnoty kinetické a potenciální energie v kvantovém stavu $|n\rangle$:

$$\overline{T} = \frac{1}{2m} \overline{p^2} = \frac{1}{2m} (\Delta p)^2 = \frac{1}{2m} m \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{2} \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (3.113)$$

$$\overline{V} = \frac{1}{2} m \omega^2 \overline{x^2} = \frac{1}{2} m \omega^2 (\Delta x)^2 = \frac{1}{2} m \omega^2 \frac{\hbar}{m \omega} \left(n + \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{2} \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (3.114)$$

$$\overline{T} = \overline{V} = \frac{1}{2} E_n \quad (3.115)$$

Poslední rovnice vyjadřuje speciální případ tzv. viriálového teorému.

3.3.2 Vlastnosti základního stavu

Energie základního stavu (tzv. energie nulových kmitů):

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega \quad (3.116)$$

Vlnová funkce základního stavu:

$$\Psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \exp \left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \right) \quad (3.117)$$

V základním stavu nabývá součin neurčitostí souřadnice a impulsu podle (3.103) své minimální hodnoty

$$(\Delta x \cdot \Delta p)_{n=0} = \frac{\hbar}{2} \quad (3.118)$$

Ačkoli je základní stav svým průběhem pravděpodobnostního rozdělení polohy nejvíce vzdálen klasickému oscilátoru, je nejlepším přiblížením klasickému popisu bodu ve fázovém prostoru xp .

Pravděpodobnostní rozdělení souřadnice v základním stavu už známe:

$$w(x) = |\Psi_0(x)|^2 = Q_x \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right), \quad Q_x = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \quad (3.119)$$

Nalezneme též pravděpodobnostní rozdělení hybnosti. Od vyjádření Ψ_0 v x -reprezentaci přejdeme k jejímu tvaru v p -reprezentaci:

$$\Psi_0(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_0(x) \exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right) dx \quad (3.120)$$

Dosadíme za $\Psi_0(x)$ vyjádření (3.117):

$$\Psi_0(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 - \frac{ip}{\hbar}x\right) dx \quad (3.121)$$

V dodatku (7.2) je odvozen vztah pro gaussovské integrování

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\alpha x^2 - i\beta x) dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \exp\left(-\frac{\beta^2}{4\alpha}\right) \quad (3.122)$$

s jehož aplikací na (3.121) obdržíme

$$\Psi_0(p) = (\pi m \hbar \omega)^{-\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{p^2}{2m\hbar\omega}\right) \quad (3.123)$$

Pravděpodobnostní rozdělení hybnosti je

$$w(p) = |\Psi_0(p)|^2 = Q_p \exp\left(-\frac{p^2}{m\hbar\omega}\right), \quad Q_p = \frac{1}{\sqrt{\pi m \hbar \omega}} \quad (3.124)$$

Formule (3.119) a (3.124) mají podobný průběh. Dosadíme do nich amplitudy klasického pohybu X_{\max} , P_{\max} :

$$X_{\max}^2 = \frac{2E_0}{m\omega^2} = \frac{\hbar\omega}{m\omega^2} = \frac{\hbar}{m\omega} \quad (3.125)$$

$$P_{\max}^2 = 2mE_0 = m\hbar\omega \quad (3.126)$$

$$w(X_{\max}) = \frac{Q_x}{e} \quad (3.127)$$

$$w(P_{\max}) = \frac{Q_p}{e} \quad (3.128)$$

V místech klasických amplitud tedy klesá hustota pravděpodobnosti výskytu a hybnosti na e -tinu své maximální hodnoty v bodech $x = 0$, $p = 0$, jak je patrné z obrázku 3.8:

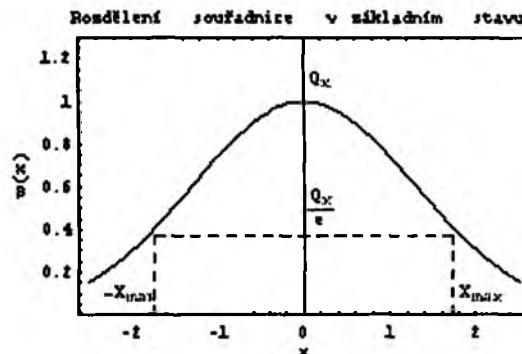
Odhadněme součin neurčitostí $\Delta x \cdot \Delta p$ v základním stavu:

$$(\Delta x)_{n=0} \simeq X_{\max} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad (3.129)$$

$$(\Delta p)_{n=0} \simeq P_{\max} = \sqrt{m\hbar\omega} \quad (3.130)$$

$$(\Delta x \cdot \Delta p)_{n=0} \simeq \hbar \quad (3.131)$$

Přesná hodnota činí podle (3.118) $\frac{1}{2}\hbar$; pro srovnání: u první hladiny je to $\frac{3}{2}\hbar$.



Obrázek 3.8: Pravděpodobnostní rozdělení souřadnice v základním stavu.

3.4 Časová závislost stavů oscilátoru

Stacionární stav harmonického oscilátoru³ v čase $t > 0$ je dán vlnovou funkcí

$$|n, t\rangle = \exp\left(-i\frac{E_n t}{\hbar}\right) |n\rangle \quad (3.132)$$

tj. jeho fáze se mění harmonicky v čase s frekvencí $\omega_n = \frac{E_n}{\hbar}$. Oscilátor se však může nacházet v obecném stavu

$$|\Phi, t\rangle = \sum_n c_n(t) |n\rangle \quad (3.133)$$

jenž je superpozicí stacionárních stavů typu (3.132), tvořících bázi prostoru možných stavů, s amplitudami (obecně komplexními):

$$c_n(t) = c_n(0) \exp\left(-i\frac{E_n t}{\hbar}\right) \quad (3.134)$$

měnícími se harmonicky v čase. Stav (3.133) už není stacionární, neboť nemá ostrou hodnotu energie. Jeho energie má některou z hodnot $E_0, E_1, \dots, E_n, \dots$, a to s pravděpodobnostmi po řadě $|c_0(t)|^2 = |c_0(0)|^2, \dots, |c_n(t)|^2 = |c_n(0)|^2, \dots$. Tyto pravděpodobnosti podle (3.134) na čase nezávisí.

Uvažujme dále Heisenbergovu reprezentaci operátorů. Unitární operátor

$$\hat{U}(t) = \exp\left(-\frac{it}{\hbar} \hat{H}\right) \quad (3.135)$$

transformuje počáteční vlnovou funkci $|\Phi, 0\rangle$ na funkci $|\Phi, t\rangle$ v libovolném čase $t > 0$:

$$|\Phi, t\rangle = \hat{U}(t) |\Phi, 0\rangle \quad (3.136)$$

Heisenbergův operátor

$$\hat{F}(t) = \hat{U}^\dagger(t) \hat{F} \hat{U}(t) \quad (3.137)$$

³Následující argumentace se netýkájí pouze harmonického oscilátoru, ale platí v obecném případě kvantového systému.

se vyvíjí v čase podle vztahu

$$i\hbar \frac{d\hat{F}(t)}{dt} = [\hat{F}(t), \hat{H}], \quad \hat{F}(0) = \hat{F} \quad (3.138)$$

Pro $\hat{F}(t) = \hat{a}(t)$ přechází rovnice (3.138) na speciální tvar

$$i\hbar \frac{d\hat{a}(t)}{dt} = [\hat{a}(t), \hat{H}], \quad \hat{a}(0) = \hat{a} \quad (3.139)$$

Anihilační operátor nekomutuje s hamiltoniánem (využijeme (3.67)):

$$[\hat{a}, \hat{H}] = \hbar\omega [\hat{a}, \hat{N}] = \hbar\omega \hat{a} \quad (3.140)$$

Podle (3.137) je

$$\hat{a}(t) = \hat{U}^\dagger(t) \hat{a} \hat{U}(t) \quad (3.141)$$

Do (3.141) dosadíme za \hat{a} z (3.140):

$$\hat{a}(t) = \frac{1}{\hbar\omega} \hat{U}^\dagger(t) [\hat{a}, \hat{H}] \hat{U}(t) = \frac{1}{\hbar\omega} \left(\hat{U}^\dagger(t) \hat{a} \hat{H} \hat{U}(t) - \hat{U}^\dagger(t) \hat{H} \hat{a} \hat{U}(t) \right) \quad (3.142)$$

Vložením identity $\hat{U}(t) \hat{U}^\dagger(t) = \hat{1}$ mezi operátory \hat{a}, \hat{H} obdržíme

$$\hat{a}(t) = \frac{1}{\hbar\omega} \left[\hat{U}^\dagger(t) \hat{a} \hat{U}(t), \hat{U}^\dagger(t) \hat{H} \hat{U}(t) \right] = \frac{1}{\hbar\omega} \left[\hat{a}(t), \hat{U}^\dagger(t) \hat{H} \hat{U}(t) \right] \quad (3.143)$$

Jelikož $\hat{U}(t)$ komutuje s \hat{H} ⁴, tj. $\hat{U}(t) \hat{H} = \hat{H} \hat{U}(t)$, čili

$$\hat{U}^\dagger(t) \hat{H} \hat{U}(t) = \hat{U}^\dagger(t) \hat{U}(t) \hat{H} = \hat{H} \quad (3.144)$$

dostaneme pro $\hat{a}(t)$ v (3.143) komutační relaci

$$\hat{a}(t) = \frac{1}{\hbar\omega} [\hat{a}(t), \hat{H}] \quad (3.145)$$

Z porovnání (3.139) a (3.145) plyne diferenciální operátorová rovnice

$$i\hbar \frac{d\hat{a}(t)}{dt} = \hbar\omega \hat{a}(t) \quad (3.146)$$

jejímž řešením je

$$\hat{a}(t) = \hat{a} e^{-i\omega t} \quad (3.147)$$

Analogickým postupem získáme pro kreační operátor vyjádření

$$\hat{a}^\dagger(t) = \hat{a}^\dagger e^{i\omega t} \quad (3.148)$$

⁴To je zřejmé z definičního vztahu (3.135), rozvineme-li operátor $\hat{U}(t)$ v mocninnou řadu v proměnné t .

Do obou rovnic zaved'eme vztahy (3.45), (3.46):

$$\hat{a}(t) = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} e^{-i\omega t} \left(m\omega \hat{x} + i\hat{p} \right) \quad (3.149)$$

$$\hat{a}^\dagger(t) = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} e^{i\omega t} \left(m\omega \hat{x} - i\hat{p} \right) \quad (3.150)$$

Heisenbergovské operátory $\hat{x}(t)$, $\hat{p}(t)$ lze vyjádřit prostřednictvím $\hat{a}(t)$, $\hat{a}^\dagger(t)$:

$$\hat{x}(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\hat{a}^\dagger(t) + \hat{a}(t) \right) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\hat{a}^\dagger e^{i\omega t} + \hat{a} e^{-i\omega t} \right) \quad (3.151)$$

$$\hat{p}(t) = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \left(\hat{a}^\dagger(t) - \hat{a}(t) \right) = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \left(\hat{a}^\dagger e^{i\omega t} - \hat{a} e^{-i\omega t} \right) \quad (3.152)$$

Tvar hamiltoniánu v Heisenbergově reprezentaci zřejmě zůstává stejný. Je vyjádřen prostřednictvím součinu $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ a z (3.147) a (3.148) je evidentní, že $\hat{a}^\dagger(t)\hat{a}(t) = \hat{a}^\dagger\hat{a}$.

Určeme nyní střední hodnoty veličin v obecném stavu (3.133). Střední hodnota energie je

$$\begin{aligned} \overline{E_\Phi} &= \langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle = \sum_n \sum_m c_m^*(0) c_n(0) \langle m | \hat{H} | n \rangle = \\ &= \sum_n \sum_m c_m^*(0) c_n(0) E_n \delta_{mn} = \sum_n |c_n(0)|^2 E_n \end{aligned} \quad (3.153)$$

Střední hodnota energie nezávisí na čase. Z (3.153) a obecné definice střední hodnoty plyne už zmíněné tvrzení o tom, že pravděpodobnost naměření energie E_n v nestacionárním stavu $|\Phi, t\rangle$ je rovna kvadrátu velikosti příslušného koeficientu v rozvoji (3.133).

Střední hodnoty souřadnice a impulsu už na čase závisí:

$$\overline{x_\Phi(t)} = \langle \Phi | \hat{x}(t) | \Phi \rangle = \sum_n \sum_m c_m^*(0) c_n(0) \langle m | \hat{x}(t) | n \rangle \quad (3.154)$$

$$\overline{p_\Phi(t)} = \langle \Phi | \hat{p}(t) | \Phi \rangle = \sum_n \sum_m c_m^*(0) c_n(0) \langle m | \hat{p}(t) | n \rangle \quad (3.155)$$

Z (3.151) a (3.152) plyne

$$\langle m | \hat{x}(t) | n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\langle m | \hat{a}^\dagger | n \rangle e^{i\omega t} + \langle m | \hat{a} | n \rangle e^{-i\omega t} \right) \quad (3.156)$$

$$\langle m | \hat{p}(t) | n \rangle = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \left(\langle m | \hat{a}^\dagger | n \rangle e^{i\omega t} - \langle m | \hat{a} | n \rangle e^{-i\omega t} \right) \quad (3.157)$$

A podle (3.50), (3.51) je

$$\langle m | \hat{a}^\dagger | n \rangle = \sqrt{n+1} \langle m | n+1 \rangle = \sqrt{n+1} \delta_{m,n+1} \quad (3.158)$$

$$\langle m | \hat{a} | n \rangle = \sqrt{n} \langle m | n-1 \rangle = \sqrt{n} \delta_{m,n-1} \quad (3.159)$$

Spojením těchto vzorců získáme střední hodnoty

$$\begin{aligned}\overline{x_{\Phi}(t)} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sum_n \sum_m c_m^*(0) c_n(0) (\sqrt{n+1} \delta_{m,n+1} e^{i\omega t} + \sqrt{n} \delta_{m,n-1} e^{-i\omega t}) = \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(e^{i\omega t} \sum_n \sqrt{n+1} c_{n+1}^*(0) c_n(0) + e^{-i\omega t} \sum_n \sqrt{n} c_{n-1}^*(0) c_n(0) \right)\end{aligned}\quad (3.160)$$

$$\begin{aligned}\overline{p_{\Phi}(t)} &= i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \sum_n \sum_m c_m^*(0) c_n(0) (\sqrt{n+1} \delta_{m,n+1} e^{i\omega t} - \sqrt{n} \delta_{m,n-1} e^{-i\omega t}) = \\ &= i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \left(e^{i\omega t} \sum_n \sqrt{n+1} c_{n+1}^*(0) c_n(0) - e^{-i\omega t} \sum_n \sqrt{n} c_{n-1}^*(0) c_n(0) \right)\end{aligned}\quad (3.161)$$

3.5 Koherentní stavy

Zajímejme se nyní blíže o stavy oscilátoru, které minimalizují relace neurčitosti, tzv. koherentní stavy. V těchto stavech nabývá součin neurčitostí $\Delta x \Delta p$ minimální hodnoty $\frac{\hbar}{2}$. Budou tedy nejlepším přiblížením bodu ve fázovém prostoru.

3.5.1 Rovnice koherentních stavů

Jeden koherentní stav už známe- základní stav $|0\rangle$. To plyne přímo z (3.118). Z tohoto zároveň vyplývá, že jiný stacionární stav už nemůže být koherentním.

Nalezneme tvar lineární kombinace (3.133), aby byl tento obecný nestacionární stav koherentním. Vyjdeme z definice a budeme opět uvažovat Heisenbergovu reprezentaci. Pomocí operátorů $\hat{x}(t)$, $\hat{p}(t)$ můžeme vypočítat neurčitosti $\Delta x(t)$, $\Delta p(t)$ a najít podmínky, při nichž jejich součin nabývá minimum $\frac{\hbar}{2}$. Podle (3.151) a (3.152) máme

$$\hat{x}(t)^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} \left(\hat{a}^{\dagger}(t)^2 + 2\hat{a}^{\dagger}(t)\hat{a}(t) + \hat{1} + \hat{a}(t)^2 \right)\quad (3.162)$$

$$\hat{p}(t)^2 = -\frac{m\hbar\omega}{2} \left(\hat{a}^{\dagger}(t) - 2\hat{a}^{\dagger}(t)\hat{a}(t) - \hat{1} + \hat{a}(t)^2 \right)\quad (3.163)$$

Ve stavu $|\Phi, t\rangle$ je

$$(\Delta x(t))^2 = \overline{x(t)^2} - \overline{x(t)}^2 = \langle \Phi, 0 | \hat{x}(t)^2 | \Phi, 0 \rangle - \langle \Phi, 0 | \hat{x}(t) | \Phi, 0 \rangle^2\quad (3.164)$$

$$(\Delta p(t))^2 = \overline{p(t)^2} - \overline{p(t)}^2 = \langle \Phi, 0 | \hat{p}(t)^2 | \Phi, 0 \rangle - \langle \Phi, 0 | \hat{p}(t) | \Phi, 0 \rangle^2\quad (3.165)$$

Do obou rovnic dosadíme tvary operátorů (3.151) a (3.152). Máme⁵

$$(\Delta x(t))^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} \left[\langle \Phi | \hat{a}^{\dagger 2} | \Phi \rangle - \langle \Phi | \hat{a}^{\dagger} | \Phi \rangle^2 + \langle \Phi | \hat{a}^2 | \Phi \rangle - \langle \Phi | \hat{a} | \Phi \rangle^2 + 1 + 2 \left(\langle \Phi | \hat{a}^{\dagger} \hat{a} | \Phi \rangle - \langle \Phi | \hat{a}^{\dagger} | \Phi \rangle \langle \Phi | \hat{a} | \Phi \rangle \right) \right]\quad (3.166)$$

⁵Použijeme zjednodušující značení: $|\Phi, 0\rangle \rightarrow |\Phi\rangle$, $\hat{a}(t) \rightarrow \hat{a}$, $\hat{a}^{\dagger}(t) \rightarrow \hat{a}^{\dagger}$. Položení $t = 0$ v obou operátorech znamená, že budeme nejprve odvozovat rovnici koherentních stavů v čase $t = 0$.

$$(\Delta p(t))^2 = -\frac{m\hbar\omega}{2} \left[\begin{aligned} &\langle \Phi | \hat{a}^{\dagger 2} | \Phi \rangle - \langle \Phi | \hat{a}^{\dagger} | \Phi \rangle^2 + \langle \Phi | \hat{a}^2 | \Phi \rangle - \langle \Phi | \hat{a} | \Phi \rangle^2 - 1 \\ &- 2 \left(\langle \Phi | \hat{a}^{\dagger} \hat{a} | \Phi \rangle - \langle \Phi | \hat{a}^{\dagger} | \Phi \rangle \langle \Phi | \hat{a} | \Phi \rangle \right) \end{aligned} \right] \quad (3.167)$$

Kvůli přehlednosti zavedeme další zjednodušující označení

$$f(t) = \langle \Phi | \hat{a}^{\dagger 2} | \Phi \rangle - \langle \Phi | \hat{a}^{\dagger} | \Phi \rangle^2 \quad (3.168)$$

$$g(t) = \langle \Phi | \hat{a}^{\dagger} \hat{a} | \Phi \rangle - \langle \Phi | \hat{a}^{\dagger} | \Phi \rangle \langle \Phi | \hat{a} | \Phi \rangle \quad (3.169)$$

$$h(t) = \langle \Phi | \hat{a}^2 | \Phi \rangle - \langle \Phi | \hat{a} | \Phi \rangle^2 \quad (3.170)$$

Potom je součin neurčitostí roven

$$\begin{aligned} (\Delta x(t)\Delta p(t))^2 &= -\frac{\hbar^2}{4} (f(t)^2 + 2f(t)h(t) + h(t)^2 - 4g(t)^2 - 4g(t) - 1) = \\ &= \frac{\hbar^2}{4} \left(4(g(t) + \frac{1}{2})^2 - (f(t) + h(t))^2 \right) \end{aligned} \quad (3.171)$$

Rovnice (3.171) nabývá svého minima $\frac{\hbar^2}{4}$ v libovolném čase, jestliže

$$g(t) = 0 \quad (3.172)$$

$$f(t) + h(t) = 0 \quad (3.173)$$

Znamená to tedy, že

$$\langle \Phi | \hat{a}^{\dagger} \hat{a} | \Phi \rangle = \langle \Phi | \hat{a}^{\dagger} | \Phi \rangle \langle \Phi | \hat{a} | \Phi \rangle \quad (3.174)$$

$$\langle \Phi | \hat{a}^{\dagger 2} | \Phi \rangle + \langle \Phi | \hat{a}^2 | \Phi \rangle = \langle \Phi | \hat{a}^{\dagger} | \Phi \rangle^2 + \langle \Phi | \hat{a} | \Phi \rangle^2 \quad (3.175)$$

Ke stavu $|\Phi\rangle$ přidejme stavy $|\Psi_i\rangle$, $i = 1, 2, \dots$ tak, aby byl celý systém

$$S = \{|\Psi_i\rangle, i = 0, 1, 2, \dots, \Psi_0 = \Phi\}$$

úplný a ortonormální. Vložením relace uzavřenosti⁶

$$\sum_{i=0, \Psi_0=\Phi}^{\infty} |\Psi_i\rangle \langle \Psi_i| = \hat{1} \quad (3.176)$$

do podmínky (3.174) mezi kreační a anihilační operátor obdržíme

$$\sum_{i=0, \Psi_0=\Phi}^{\infty} \langle \Phi | \hat{a}^{\dagger} | \Psi_i \rangle \langle \Psi_i | \hat{a} | \Phi \rangle = \langle \Phi | \hat{a}^{\dagger} | \Phi \rangle \langle \Phi | \hat{a} | \Phi \rangle \quad (3.177)$$

Jelikož jsou operátory \hat{a} , \hat{a}^{\dagger} hermitovsky sdružené, čili

$$\langle \Phi | \hat{a}^{\dagger} | \Psi_i \rangle = \langle \Psi_i | \hat{a} | \Phi \rangle^* \quad (3.178)$$

⁶Je ekvivalentní podmínce úplnosti a ortonormality systému S .

$$\langle \Phi | \hat{a}^\dagger | \Phi \rangle = \langle \Phi | \hat{a} | \Phi \rangle^* \quad (3.179)$$

můžeme psát (3.177) ve tvaru

$$\left| \langle \Phi | \hat{a} | \Phi \rangle \right|^2 + \sum_{i=1}^{\infty} \left| \langle \Psi_i | \hat{a} | \Phi \rangle \right|^2 = \left| \langle \Phi | \hat{a} | \Phi \rangle \right|^2 \quad (3.180)$$

Všechny sčítance jsou nezáporné, takže musí platit

$$\langle \Psi_i | \hat{a} | \Phi \rangle = 0 \text{ pro } i = 1, 2, \dots \quad (3.181)$$

Stav $\hat{a} | \Phi \rangle$ je tedy kolmý na všechny stavy $\langle \Psi_i |$. Protože je systém S úplný, lze tento stav vyjádřit jako lineární kombinaci stavů tohoto systému:

$$\hat{a} | \Phi \rangle = \alpha | \Phi \rangle + \sum_{j=1}^{\infty} \alpha_j | \Psi_j \rangle \quad (3.182)$$

v níž α, α_j jsou obecná komplexní čísla. Násobením rovnice (3.182) zleva vektory $\langle \Psi_i |$ dostaneme s přihlédnutím k (3.181) a ortogonalitě systému S :

$$\alpha_i = 0 \text{ pro } i = 1, 2, \dots \quad (3.183)$$

Rovnice (3.182) se pak výrazně zjednoduší:

$$\hat{a} | \Phi \rangle = \alpha | \Phi \rangle \quad (3.184)$$

Koherentní stav splňující podmínku (3.174)⁷ je určen podle (3.184) komplexním číslem α , a proto bývá zvykem značit ho $|\alpha\rangle$:

$$\hat{a} |\alpha\rangle = \alpha |\alpha\rangle \quad (3.185)$$

Nejprve vyšetříme koherentní stavy v čase $t = 0$ a časovou závislost spočteme aplikací operátoru $\hat{U}(t)$ na počáteční stav, tj spočteme $|\alpha, t\rangle = \hat{U}(t) |\alpha\rangle$. Budeme tak moci prozkoumat základní stav v obecnějším pojetí, neboť ten je nejjednodušším příkladem koherentního stavu, nebo demonstrovat souvislost mezi ním a stavy $|\alpha\rangle$, např. stejné pravděpodobnostní rozdělení souřadnice a impulsu. Ale nepředbíhejme.

Koherentní stav $|\alpha\rangle$ je, jak plyne z (3.185), vlastním stavem anihilačního operátoru \hat{a} . Vlastní čísla α jsou obecně komplexní, což je v souladu s tím, že tento operátor není hermitovský. Naproti tomu vlastní stavy kreačního operátoru neexistují. Rovnost

$$\hat{a}^\dagger |\alpha\rangle = \alpha |\alpha\rangle \quad (3.186)$$

snadno dovedeme ke sporu. Rovnice hermitovsky sdružená k (3.50) je

$$\langle n | \hat{a}^\dagger = \sqrt{n} \langle n-1 | \quad (3.187)$$

$$\langle 0 | \hat{a}^\dagger = 0 \quad (3.188)$$

⁷Druhá podmínka (3.175) je automaticky splněna.

Aplikací těchto dvou rovnic s uplatněním vyšetřované rovnice (3.186) dostáváme

$$\alpha \langle n | \alpha \rangle = \sqrt{n} \langle n-1 | \alpha \rangle, \text{ pro } n > 0 \quad (3.189)$$

$$0 = \alpha \langle 0 | \alpha \rangle, \text{ pro } n = 0 \quad (3.190)$$

Je-li $\alpha = 0$, je podle (3.189) $\langle n | \alpha \rangle = 0$ pro všechna $n > 0$. Je-li $\alpha \neq 0$, platí pro $n > 0$:

$$\sqrt{n} \langle n-1 | \alpha \rangle = \alpha \langle n | \alpha \rangle, \langle 0 | \alpha \rangle = 0 \quad (3.191)$$

Rekurentním postupem dospějeme k výsledku $\langle n | \alpha \rangle = 0$ pro všechna $n = 0, 1, 2, \dots$. A protože stavy $\{|n\rangle\}_0^\infty$ tvoří úplný ortogonální systém, není jiná možnost než $|\alpha\rangle = |0\rangle$. Tento stav ovšem také nevyhovuje rovnici (3.186), neboť $\hat{a}^+ |0\rangle = |1\rangle$. Názornější představa spočívá v analogii, kterou známe z lineární algebry, a sice s vektory na vektorovém prostoru. V d -dimenzionálním prostoru existuje jediný d -rozměrný vektor, který je kolmý (ve smyslu nulovosti skalárního součinu) na všechny báze vektory - a to je právě nulový vektor.

Díky úplnosti systému stacionárních stavů je možno vyjádřit libovolný koherentní stav $|\alpha\rangle$ ve tvaru⁸:

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \langle n | \alpha \rangle |n\rangle \quad (3.192)$$

kde $\langle n | \alpha \rangle$ jsou koeficienty této lineární kombinace. Vynásobíme-li rovnici (3.185) zleva stavem $\langle n |$ a užijeme-li (3.50), získáme souvislost mezi $(n+1)$ -tým a n -tým koeficientem rozvoje (3.192):

$$\begin{aligned} \langle n | \hat{a} | \alpha \rangle &= \alpha \langle n | \alpha \rangle \\ \sqrt{n+1} \langle n+1 | \alpha \rangle &= \alpha \langle n | \alpha \rangle \\ \langle n+1 | \alpha \rangle &= \frac{\alpha}{\sqrt{n+1}} \langle n | \alpha \rangle \end{aligned} \quad (3.193)$$

Snadno potom rekurentním postupem dospějeme k vyjádření n -tého koeficientu pomocí nultého:

$$\begin{aligned} \langle n | \alpha \rangle &= \frac{\alpha}{\sqrt{n}} \langle n-1 | \alpha \rangle = \frac{\alpha}{\sqrt{n}} \frac{\alpha}{\sqrt{n-1}} \langle n-2 | \alpha \rangle = \dots \\ &= \frac{\alpha}{\sqrt{n}} \frac{\alpha}{\sqrt{n-1}} \dots \frac{\alpha}{\sqrt{2}} \frac{\alpha}{\sqrt{1}} \end{aligned}$$

Tedy

$$\langle n | \alpha \rangle = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \langle 0 | \alpha \rangle \quad (3.194)$$

Dosad'me teď tyto koeficienty do (3.192):

$$|\alpha\rangle = \langle 0 | \alpha \rangle \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \quad (3.195)$$

Nultý koeficient určíme z normovací podmínky:

$$1 = |\langle 0 | \alpha \rangle|^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = |\langle 0 | \alpha \rangle|^2 \exp(|\alpha|^2)$$

⁸Jde o speciální případ rozvoje (3.133) pro $t = 0$.

$$\langle 0 | \alpha \rangle = \exp\left(-\frac{1}{2} |\alpha|^2\right) \quad (3.196)$$

Neboli

$$|\alpha\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2} |\alpha|^2\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \quad (3.197)$$

To je rozvoj libovolného koherentního stavu v bázi stacionárních stavů. Můžeme si to opět představit tak, že koeficienty $\exp(-\frac{1}{2} |\alpha|^2) \alpha^n / \sqrt{n!}$ jsou souřadnicemi vektoru $|\alpha\rangle$ v dané bázi ortonormálních vektorů $|n\rangle$.

Všimněme si, že skalární součin dvou koherentních stavů $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ je nenulový i pro $\alpha \neq \beta$:

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \beta \rangle &= \exp\left(-\frac{1}{2} (|\alpha|^2 + |\beta|^2)\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha^* \beta)^n}{n!} = \\ &= \exp\left(-\frac{1}{2} (|\alpha|^2 + |\beta|^2 - 2\alpha^* \beta)\right) = \\ &= \exp\left(-\frac{1}{2} |\alpha - \beta|^2\right) \exp\frac{1}{2} (\alpha^* \beta - \beta^* \alpha) \end{aligned} \quad (3.198)$$

Z toho je zřejmé, že koherentní stavy nejsou navzájem ortogonální. Přesto tvoří úplný systém na prostoru stavů. Abychom to dokázali, počítejme integrál $\int |\alpha\rangle \langle \alpha| d^2\alpha$, v němž $\alpha = \alpha_1 + i\alpha_2 = r \exp i\varphi$, $d^2\alpha = d\alpha_1 d\alpha_2 = r dr d\varphi$:

$$\begin{aligned} \int |\alpha\rangle \langle \alpha| d^2\alpha &= \int \exp(-|\alpha|^2) \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} |n\rangle \langle m| \frac{\alpha^n (\alpha^*)^m}{\sqrt{n!m!}} d^2\alpha = \\ &= \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} \exp(-r^2) \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} |n\rangle \langle m| \frac{r^{n+m}}{\sqrt{n!m!}} \exp i(n-m)\varphi r dr d\varphi = \\ &= 2\pi \delta_{nm} \int_0^{\infty} \exp(-r^2) \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} |n\rangle \langle m| \frac{r^{n+m+1}}{\sqrt{n!m!}} dr = \\ &= 2\pi \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n| \frac{1}{n!} \int_0^{\infty} r^{2n+1} \exp(-r^2) dr = \pi \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n| = \pi \hat{1} \end{aligned}$$

Koherentní stavy tedy splňují relaci uzavřenosti

$$\frac{1}{\pi} \int |\alpha\rangle \langle \alpha| d^2\alpha = \hat{1} \quad (3.199)$$

Libovolný stav $|\Psi\rangle$ lze vyjádřit nejenom v bázi $\{|n\rangle\}_0^{\infty}$, ale i ve "spojité" bázi $\{|\alpha\rangle, \alpha \in C\}$:

$$|\Psi\rangle = \hat{1} |\Psi\rangle = \frac{1}{\pi} \int \langle \alpha | \Psi \rangle |\alpha\rangle d^2\alpha \quad (3.200)$$

s koeficienty (souřadnicemi) $\frac{1}{\pi} \langle \alpha | \Psi \rangle$. Můžeme tedy říci, že koherentní stavy tvoří neortonormální bázi na Hilbertově prostoru stavů.

V závěru článku (3.2) se nám podařilo vyjádřit libovolný stacionární stav $|n\rangle$ n -násobnou aplikací kreačního operátoru na základní stav. Podobně zkonstruujeme operátor, který nám ze základního stavu vytvoří libovolný koherentní stav. Dosadíme nejprve (3.79) do (3.197):

$$|\alpha\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha \hat{a}^\dagger)^n}{n!} |0\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2 + \alpha \hat{a}^\dagger\right) |0\rangle \quad (3.201)$$

Nevýhodou operátoru $\exp(-\frac{1}{2}|\alpha|^2 + \alpha \hat{a}^\dagger)$, jenž transformuje stav $|0\rangle$ na obecný koherentní stav $|\alpha\rangle$, je, že není unitární, tzn. nezachovává skalární součin těchto stavů. Proto definujeme operátor

$$\hat{D}(\alpha) = \exp\left(\alpha \hat{a}^\dagger - \alpha^* \hat{a}\right) \quad (3.202)$$

který je unitární, neboť operátor $\hat{d} = i(\alpha \hat{a}^\dagger - \alpha^* \hat{a})$ je hermitovský:

$$\hat{d}^\dagger = -i(\alpha^* \hat{a} - \alpha \hat{a}^\dagger) = \hat{d} \quad (3.203)$$

Využitím tzv. Campbell-Baker-Hausdorffovy identity (CBH)

$$\exp(\hat{u} + \hat{v}) = \exp\left(-\frac{1}{2}[\hat{u}, \hat{v}]\right) \exp \hat{u} \exp \hat{v} \quad (3.204)$$

pro operátory \hat{u}, \hat{v} splňující

$$[\hat{u}, [\hat{u}, \hat{v}]] = [\hat{v}, [\hat{u}, \hat{v}]] = 0 \quad (3.205)$$

získáme pro operátor $\hat{D}(\alpha)$ vyjádření

$$\hat{D}(\alpha) = \exp\left(-\frac{1}{2}[\alpha \hat{a}^\dagger, -\alpha^* \hat{a}]\right) \exp(\alpha \hat{a}^\dagger) \exp(-\alpha^* \hat{a}) \quad (3.206)$$

Podmínka (3.205) je pro $\hat{u} = \alpha \hat{a}^\dagger, \hat{v} = -\alpha^* \hat{a}$ splněna. Protože

$$[\alpha \hat{a}^\dagger, -\alpha^* \hat{a}] = \alpha^* \alpha [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = |\alpha|^2 \quad (3.207)$$

můžeme (3.206) přepsat na tvar

$$\hat{D}(\alpha) = \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2 + \alpha \hat{a}^\dagger\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\alpha^* \hat{a})^n}{n!} \quad (3.208)$$

Aplikujeme tento operátor na základní stav:

$$\hat{D}(\alpha) |0\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2 + \alpha \hat{a}^\dagger\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\alpha^*)^n}{n!} \hat{a}^n |0\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2 + \alpha \hat{a}^\dagger\right) |0\rangle \quad (3.209)$$

neboť nenulový je v uvedené sumě pouze nultý člen (je roven $|0\rangle$). Srovnáním s (3.201) zjistíme, že platí

$$|\alpha\rangle = \hat{D}(\alpha) |0\rangle \quad (3.210)$$

což je analogie vztahu (3.79). Zkonstruovali jsme tak operátor, který transformuje stav $|0\rangle$ na libovolný stav $|\alpha\rangle$. Je unitární, tedy splňuje

$$\hat{D}^+ \hat{D} = \hat{D} \hat{D}^+ = \hat{1} \quad (3.211)$$

a zachovává tedy skalární součin libovolných stavů $|\alpha_1\rangle, |\alpha_2\rangle$:

$$|\tilde{\alpha}_1\rangle = \hat{D} |\alpha_1\rangle$$

$$|\tilde{\alpha}_2\rangle = \hat{D} |\alpha_2\rangle$$

$$\langle \tilde{\alpha}_1 | \tilde{\alpha}_2 \rangle = \langle \alpha_1 | \hat{D}^+ \hat{D} | \alpha_2 \rangle = \langle \alpha_1 | \alpha_2 \rangle \quad (3.212)$$

a v důsledku toho i normu. Zřejmě platí

$$\hat{D}^+ (\alpha) = \hat{D}^{-1} (\alpha) = \hat{D} (-\alpha) \quad (3.213)$$

K odvození komutačních relací operátoru $\hat{D} (\alpha)$ s operátory kreace a anihilace využijeme relace

$$[\hat{u}, \exp \hat{v}] = \int_0^1 \exp(s \hat{v}) [\hat{u}, \hat{v}] \exp((1-s) \hat{v}) ds \quad (3.214)$$

Podle tohoto a definice operátoru $\hat{D} (\alpha)$ platí

$$\begin{aligned} [\hat{a}, \hat{D}(\alpha)] &= \int_0^1 \exp(s(\alpha \hat{a}^\dagger - \alpha^* \hat{a})) [\hat{a}, \alpha \hat{a}^\dagger - \alpha^* \hat{a}] \cdot \\ &\cdot \exp((1-s)(\alpha \hat{a}^\dagger - \alpha^* \hat{a})) ds = \alpha \exp(\alpha \hat{a}^\dagger - \alpha^* \hat{a}) = \alpha \hat{D} (\alpha) \end{aligned} \quad (3.215)$$

A podobně

$$[\hat{a}^\dagger, \hat{D}(\alpha)] = \alpha^* \hat{D} (\alpha) \quad (3.216)$$

Aplikací vztahu (3.210) můžeme ověřit výsledek skalárního součinu dvou koherentních stavů. Znovu přitom uplatníme identitu (3.204):

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \beta \rangle &= \langle 0 | \hat{D}^+ (\alpha) \hat{D} (\beta) | 0 \rangle = \langle 0 | \exp \left((\beta - \alpha) \hat{a}^\dagger - (\beta - \alpha)^* \hat{a} \right) \cdot \\ &\cdot \exp \left(\frac{1}{2} \left[\alpha^* \hat{a} - \alpha \hat{a}^\dagger, \beta \hat{a}^\dagger - \beta^* \hat{a} \right] \right) | 0 \rangle = \\ &= \langle 0 | \hat{D} (\beta - \alpha) | 0 \rangle \exp \frac{1}{2} (\alpha^* \beta - \beta^* \alpha) = \langle 0 | \beta - \alpha \rangle \exp \frac{1}{2} (\alpha^* \beta - \beta^* \alpha) \end{aligned} \quad (3.217)$$

Je patrné, že tento výsledek je shodný s (3.198). Můžeme ho také chápat jako ověření platnosti (CBH) identity (3.204).

3.5.2 Praviděpodobnostní rozdělení energie, souřadnice a hybnosti

Protože je koherentní stav lineární kombinací stacionárních stavů, nelze mu přiřadit určitý počet fononů jako v případě stacionárního stavu. Můžeme ovšem spočítat střední počet fononů ve stavu $|\alpha\rangle$:

$$\bar{n} = \langle \alpha | \hat{N} | \alpha \rangle = \langle \alpha | \hat{a}^\dagger \hat{a} | \alpha \rangle = \langle \alpha | \alpha^* \alpha | \alpha \rangle = |\alpha|^2 \quad (3.218)$$

Praviděpodobnost, že se koherentní stav (3.197) bude nacházet ve stavu $|n\rangle$ s energií $E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar\omega$, je rovna kvadrátu velikosti koeficientu u tohoto stavu:

$$w_\alpha(n) = \exp(-|\alpha|^2) \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = \exp(-\bar{n}) \frac{\bar{n}^n}{n!} \quad (3.219)$$

Praviděpodobnostní rozdělení energetických hladin v koherentním stavu je tedy Poissonovo s parametrem \bar{n} .

Stav $|\alpha\rangle$ má v x -reprezentaci vyjádření

$$\langle x | \alpha \rangle = \exp(-\frac{1}{2} |\alpha|^2) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \Psi_n(x) \quad (3.220)$$

v němž

$$\Psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} (n!2^n)^{-\frac{1}{2}} H_n\left(x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right) \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \quad (3.221)$$

takže dohromady

$$\langle x | \alpha \rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \exp(-\frac{1}{2} |\alpha|^2) \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{\alpha}{\sqrt{2}}\right)^n H_n\left(x\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\right) \quad (3.222)$$

Řadu vpravo můžeme sečíst pomocí vytvořující funkce (viz dodatek (7.3)):

$$S(z, \sigma) \equiv \exp\left(z^2 - (\sigma - z)^2\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(z) \sigma^n \quad (3.223)$$

Zde položíme $z = x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$, $\sigma = \frac{\alpha}{\sqrt{2}}$. Potom je

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{\alpha}{\sqrt{2}}\right)^n H_n\left(x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right) = \exp\left(-\frac{\alpha^2}{2} + \alpha x\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\right) \quad (3.224)$$

α je komplexní číslo tvaru $\alpha_1 + i\alpha_2$:

$$\begin{aligned} \langle x | \alpha \rangle &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \exp\left(-\frac{1}{2}(\alpha_1^2 + \alpha_2^2)\right) \cdot \\ &\cdot \exp\left(-\frac{\alpha_1^2}{2} - i\alpha_1\alpha_2 + \frac{\alpha_2^2}{2} + \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\alpha_1x + i\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\alpha_2x\right) = \\ &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}\left(x - \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\alpha_1\right)^2\right) \exp\left(i\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\alpha_2x\right) \exp(-i\alpha_1\alpha_2) \end{aligned} \quad (3.225)$$

V čase $t = 0$ je

$$\begin{aligned}\bar{x}_\alpha &= \langle \alpha | \hat{x}(0) | \alpha \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle \alpha | (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) | \alpha \rangle = \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\langle \alpha | \hat{a}^\dagger | \alpha \rangle + \langle \alpha | \hat{a} | \alpha \rangle \right)\end{aligned}\quad (3.226)$$

Jelikož je $\hat{a} | \alpha \rangle = \alpha | \alpha \rangle$ a $\langle \alpha | \hat{a}^\dagger = \langle \alpha | \alpha^*$, máme

$$\bar{x}_\alpha = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\alpha^* + \alpha) = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \alpha_1 \quad (3.227)$$

Dosadíme-li (3.227) do (3.225), můžeme určit pravděpodobnostní rozdělení souřadnice x ve stavu $|\alpha\rangle$:

$$w_\alpha(x) = \langle x | \alpha \rangle \langle \alpha | x \rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar} (x - \bar{x}_\alpha)^2\right) = |\Psi_0(x - \bar{x}_\alpha)|^2 \quad (3.228)$$

Analogickým postupem získáme rozdělení hybnosti ve stavu $|\alpha\rangle$:

$$w_\alpha(p) = \frac{1}{\sqrt{\pi m \hbar \omega}} \exp\left(-\frac{(p - \bar{p}_\alpha)^2}{m \hbar \omega}\right) \quad (3.229)$$

kde

$$\bar{p}_\alpha = \langle \alpha | \hat{p}(0) | \alpha \rangle = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \langle \alpha | (\hat{a}^\dagger - \hat{a}) | \alpha \rangle = -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} 2i\alpha_2 = \sqrt{2m\hbar\omega}\alpha_2 \quad (3.230)$$

Průběh rozdělení x a p v koherentních stavech je stejný jako v základním stavu, je pouze posunut do \bar{x}_α a \bar{p}_α . Ve speciálním případě základního stavu, kdy $\bar{x}_0 = \bar{p}_0 = 0$, přecházejí vztahy (3.228) a (3.229) na (3.119) a (3.124).

3.5.3 Časová závislost koherentních stavů

Ve Schrödingerově reprezentaci je vývoj stavu $|\alpha\rangle$ v čase dán rovnicí (3.136):

$$|\alpha, t\rangle = \hat{U}(t) |\alpha\rangle \quad (3.231)$$

v němž je unitární operátor $\hat{U}(t)$ definován vztahem (3.135). Máme tedy

$$|\alpha, t\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right) |\alpha\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right)^k |\alpha\rangle \quad (3.232)$$

Do (3.232) dosadíme rozvoj $|\alpha\rangle$ (3.197) a uvažme, že $\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$:

$$|\alpha, t\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2} |\alpha|^2\right) \sum_{k=0}^{\infty} \left(-\frac{it}{\hbar}\right)^k \frac{1}{k!} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \hat{H}^k |n\rangle =$$

$$\begin{aligned}
&= \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right) \sum_{n=0}^{\infty} \left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(-\frac{it}{\hbar} E_n\right)^k \right) \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = \\
&= \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right) \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-i\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)t\right) \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle
\end{aligned} \tag{3.233}$$

Položíme-li

$$\tilde{\alpha}(t) = \alpha \exp(-i\omega t) \tag{3.234}$$

obdržíme s ohledem na rovnost $|\alpha\rangle = |\tilde{\alpha}(t)\rangle$:

$$|\alpha, t\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}|\tilde{\alpha}(t)|^2\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\tilde{\alpha}(t)^n}{\sqrt{n!}} \exp(-i\frac{\omega}{2}t) = \exp(-i\frac{\omega}{2}t) |\alpha \exp(-i\omega t)\rangle \tag{3.235}$$

Stav $|\alpha\rangle$ se tedy v čase mění tak, že komplexní číslo α rotuje v komplexní rovině s frekvencí ω . Znamená to, že koherentní stavy přecházejí plynule, periodicky jeden v druhý.

Stacionární stavy se vyznačují tím, že střední hodnoty veličin v nich nezávisí na čase. V koherentních stavech tomu tak není (samozřejmě kromě základního stavu).

Střední hodnota energie

Hamiltonián má na rozdíl od operátorů souřadnice a impulsu tu výhodu, že v Heisenbergově reprezentaci nezávisí na čase. V reprezentaci obsazovacích čísel je to vyjádřeno tím, že v sobě obsahuje pouze smíšený člen součinu kreačního a anihilačního operátoru, neboli

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger(t) \hat{a}(t) + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right) \tag{3.236}$$

Takže střední hodnota energie bude jednoduše

$$\overline{E_\alpha} = \langle \alpha | \hat{H} | \alpha \rangle = \hbar\omega \left(\langle \alpha | \hat{N} | \alpha \rangle + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left(|\alpha|^2 + \frac{1}{2} \right) \tag{3.237}$$

tedy konstantní v čase, protože ačkoli se koherentní stavy v čase navzájem mění, absolutní velikost komplexního čísla α jež tento stav určuje, se nemění. To však nepřekvapí, uvědomíme-li si, že stav $|\alpha, t\rangle$ je speciálním případem obecného nestacionárního stavu (3.133), jehož střední energie na čase nezávisí. Mohli jsme tudíž vyjít přímo z obecného stavu (3.153) a dosadit do něj koeficienty $c_n(0)$ rozvoje $|\alpha, t\rangle$ např. z (3.233):

$$|c_n(0)|^2 = \exp(-|\alpha|^2) \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} \tag{3.238}$$

a tedy

$$\begin{aligned}
\overline{E_\alpha} &= \sum_{n=0}^{\infty} |c_n(0)|^2 E_n = \exp(-|\alpha|^2) \hbar\omega \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} \left(n + \frac{1}{2}\right) = \\
&= \frac{1}{2} \hbar\omega + \exp(-|\alpha|^2) \hbar\omega |\alpha|^2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(|\alpha|^2)^{n-1}}{(n-1)!} = \hbar\omega \left(|\alpha|^2 + \frac{1}{2} \right)
\end{aligned} \tag{3.239}$$

Energie harmonického oscilátoru závisí kvadraticky na souřadnici i hybnosti, $E = E(x^2, p^2)$. Proto obecně nelze psát $\overline{E} = E(\overline{x^2}, \overline{p^2})$. V případě koherentních stavů (v čase $t = 0$) to však je možné. Vyjádříme-li si totiž ze vzorců (3.227) a (3.230) složky komplexního čísla α v závislosti na $\overline{x_\alpha}$ a $\overline{p_\alpha}$, dostaneme

$$\overline{E_\alpha} = \frac{\hbar\omega}{2} + \hbar\omega (\alpha_1^2 + \alpha_2^2) = \frac{\hbar\omega}{2} + \left(\frac{1}{2}m\omega^2\overline{x^2} + \frac{\overline{p^2}}{2m} \right) \quad (3.240)$$

Dodejme ještě, že $\overline{E_\alpha}$ může nabývat jakékoli hodnoty, neboť α je libovolné komplexní číslo.

Střední hodnota souřadnice a hybnosti

V Heisenbergově reprezentaci má operátor $\hat{x}(t)$ vyjádření (3.151) a střední hodnota souřadnice je

$$\begin{aligned} \overline{x_\alpha(t)} &= \langle \alpha | \hat{x}(t) | \alpha \rangle = \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\langle \alpha | \hat{a}^\dagger | \alpha \rangle \exp i\omega t + \langle \alpha | \hat{a} | \alpha \rangle \exp(-i\omega t) \right) = \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\alpha^* \exp i\omega t + \alpha \exp(-i\omega t)) \end{aligned} \quad (3.241)$$

Zapišeme-li komplexní číslo α v goniometrickém tvaru $|\alpha| \exp i\varphi$, obdržíme výsledek

$$\begin{aligned} \overline{x_\alpha(t)} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} |\alpha| (\exp i(\omega t - \varphi) + \exp(-i(\omega t - \varphi))) = \\ &= |\alpha| \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \cos(\omega t - \varphi) \end{aligned} \quad (3.242)$$

jenž lze psát ve tvaru

$$\overline{x_\alpha(t)} = X_o^\alpha \cos(\omega t - \varphi) \quad (3.243)$$

kde

$$X_o^\alpha = |\alpha| \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \quad (3.244)$$

Opět se můžeme přesvědčit, že jde o speciální tvar obecného výsledku (3.160). Počáteční amplitudy v rozvoji (3.233) jsou

$$c_n(0) = \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right) \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \quad (3.245)$$

$$c_{n+1}^*(0) = \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right) \alpha^* \frac{\alpha^{*n}}{\sqrt{(n+1)!}} \quad (3.246)$$

$$c_{n-1}^*(0) = \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right) \frac{1}{\alpha^*} \frac{\alpha^{*n}}{\sqrt{(n-1)!}} \quad (3.247)$$

a podle (3.160) je

$$\overline{x_\alpha(t)} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right).$$

$$\begin{aligned} & \cdot \left(\exp i\omega t \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} \alpha^* + \exp(-i\omega t) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2(n-1)}}{(n-1)!} \alpha \right) = \\ & = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\alpha^* \exp i\omega t + \alpha \exp(-i\omega t)) \end{aligned} \quad (3.248)$$

V případě hybnosti obdržíme shodný výsledek

$$\overline{p_\alpha(t)} = P_o^\alpha \sin(\omega t - \varphi) \quad (3.249)$$

s amplitudou

$$P_o^\alpha = |\alpha| \sqrt{2m\hbar\omega} \quad (3.250)$$

Snadno mimo jiné ověříme, že v základním stavu ($\alpha = 0$) jsou střední hodnoty souřadnice a hybnosti nulové.

Znamená to, že střední hodnoty x a p vykonávají harmonické kmity s frekvencí ω a amplitudami X_o^α , P_o^α , jejichž velikost můžeme určit porovnáním (3.244) a (3.250) s výrazem pro střední energii (3.237):

$$X_o^\alpha = \sqrt{|\alpha|^2 \frac{2\hbar}{m\omega}} = \sqrt{\left(\frac{E_\alpha}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}\right) \frac{2\hbar}{m\omega}} = \frac{1}{\omega} \sqrt{\frac{2E_\alpha - \hbar\omega}{m}} \quad (3.251)$$

$$P_o^\alpha = \sqrt{|\alpha|^2 2m\hbar\omega} = \sqrt{\left(\frac{E_\alpha}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}\right) 2m\hbar\omega} = \sqrt{2mE_\alpha - m\hbar\omega} \quad (3.252)$$

To připomíná klasické řešení harmonického oscilátoru. Amplitudy klasického oscilátoru jsou podle (1.17) a (1.18):

$$X_o^{klas} = \frac{1}{\omega} \sqrt{\frac{2E}{m}} \quad (3.253)$$

$$P_o^{klas} = \sqrt{2mE} \quad (3.254)$$

Střední hodnoty x a p v koherentním stavu konají harmonické kmity podle rovnic

$$\overline{x_\alpha(t)} = \frac{1}{\omega} \sqrt{\frac{2E_\alpha - \hbar\omega}{m}} \cos(\omega t - \varphi) \quad (3.255)$$

$$\overline{p_\alpha(t)} = \sqrt{2mE_\alpha - m\hbar\omega} \sin(\omega t - \varphi) \quad (3.256)$$

Stejně jako x a p u klasického oscilátoru jsou $\overline{x_\alpha}$ a $\overline{p_\alpha}$ fázově posunuty o $\frac{\pi}{2}$. Splňují také klasické rovnice pohybu

$$\frac{d\overline{x_\alpha(t)}}{dt} = -\sqrt{\frac{2E_\alpha - \hbar\omega}{m}} \sin(\omega t - \varphi) = -\frac{\overline{p_\alpha(t)}}{m} \quad (3.257)$$

$$\frac{d\overline{p_\alpha(t)}}{dt} = \sqrt{m\omega^2} \sqrt{2E_\alpha - \hbar\omega} \cos(\omega t - \varphi) = m\omega^2 \overline{x_\alpha(t)} \quad (3.258)$$

To plyne i z výrazu pro časovou změnu operátorů v Heisenbergově reprezentaci. Podle (3.138) je speciálně

$$\frac{d}{dt} \hat{x}(t) = \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{x}(t), \hat{H} \right] \quad (3.259)$$

$$\frac{d}{dt} \hat{p}(t) = \frac{1}{i\hbar} [\hat{p}(t), \hat{H}] \quad (3.260)$$

a dosadíme-li za \hat{H} vyjádření (3.59), za $\hat{x}(t)$ (3.151), spočteme komutátor

$$\begin{aligned} [\hat{x}(t), \hat{H}] &= \hbar\omega \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left([\hat{a}, \hat{a}^\dagger \hat{a}] \exp(-i\omega t) + [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger \hat{a}] \exp(i\omega t) \right) = \\ &= \frac{i\hbar}{m} \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \left(\hat{a} \exp(-i\omega t) - \hat{a}^\dagger \exp(i\omega t) \right) = \frac{i\hbar}{m} \hat{p}(t) \end{aligned} \quad (3.261)$$

a po dosazení do (3.259) dostaneme

$$\frac{d}{dt} \hat{x}(t) = \frac{1}{m} \hat{p}(t) \quad (3.262)$$

odkud bezprostředně vyplývá tvrzení (3.257). Druhá rovnice (3.258) se dokáže obdobně.

To, že je základní stav speciálním případem koherentních stavů, je zřejmé např. z (3.237), kde pro $\alpha = 0$ je $\overline{E_0} = \frac{1}{2}\hbar\omega = E_0$. Po dosazení této hodnoty do (3.255) a (3.256) obdržíme očekávané hodnoty $\overline{x_0} = \overline{p_0} = 0$.

Kapitola 4

Aplikace harmonického oscilátoru

Tato kapitola, která je stručným výtahem z [2] a [3], má za cíl ukázat uplatnění teorie harmonického oscilátoru (kvantového) v některých partiích fyziky.

4.1 Kmity krystalové mříže

V ideální krystalové mříži kmitá N atomů s frekvencemi Ω v rozsahu do cca $10^{13} Hz$. V teorii pevných látek se dokazuje, že tento systém N vázaných oscilátorů lze převést na systém $3N$ nezávislých lineárních oscilátorů.

Osvědčuje se zde tzv. harmonická aproximace potenciálu

$$V_j(u_j) = \frac{1}{2} m_j \Omega_j(\mathbf{k}) u_j^2 \quad (4.1)$$

pro malé výchylky u_j z rovnovážné polohy. V této aproximaci nezávislých oscilátorů má hamiltonián tvar

$$\hat{H}(\hat{u}_j, \hat{p}_j) = \sum_{j=1}^{3N} \hat{H}_j = - \sum_{j=1}^{3N} \left(\frac{\hbar^2}{2m_j} \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} - \frac{1}{2} m_j \Omega_j(\mathbf{k})^2 u_j^2(x_j) \right) \quad (4.2)$$

Každému kmitu j -tého oscilátoru s vlnovým vektorem \mathbf{k} a frekvencí $\Omega_j(\mathbf{k})$ tak přísluší posloupnost energií

$$\varepsilon_j(T) = \hbar \Omega_j(\mathbf{k}) \left(n_j(T) + \frac{1}{2} \right) \quad (4.3)$$

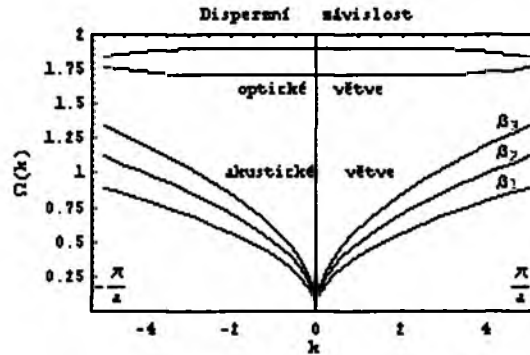
v níž čísla $n_j(T)$, závislá na teplotě a nabývající hodnot $0, 1, 2, \dots$, udávají stupeň excitace kmitu j, \mathbf{k} (tj. počet fononů s energií $\hbar \Omega_j$ a (kvazi)hybností $\hbar \mathbf{k}$ j -tého oscilátoru). Díky tvaru hamiltoniánu (4.2) bude celková energie mříže rovna součtu energií¹ všech oscilátorů

$$E(T) = \sum_{j=1}^{3N} \varepsilon_j(T) = \hbar \sum_{j=1}^{3N} \Omega_j(\mathbf{k}) \left(n_j(T) + \frac{1}{2} \right) \quad (4.4)$$

Při teplotě $T = 0$ (základní stav) jsou všechna obsazovací čísla $n_j(0) = 0$ a

$$U_0 \equiv E(0) = \frac{\hbar}{2} \sum_{j=1}^{3N} \Omega_j \quad (4.5)$$

¹Příslušnými vlnovými funkcemi se nebudeme zabývat.



Obrázek 4.1: Disperzní závislost $\Omega = \Omega(\mathbf{k})$ (v první Brillouinově zóně); a je mřížková konstanta.

je energie nulových kmitů (ačkoli je nenulová). Základnímu stavu tedy odpovídá nenulová energie. Neexistuje proto absolutní klid atomů v mřížce. Nejde o paradox, stačí totiž uvážit relace neurčitosti, jež absolutní klid vylučují. Pokud bychom jakýmkoli způsobem odebrali látce energii, nikdy se nám nepodaří přivést ji do stavu s nulovou vnitřní energií. Látka si vždy ponechá alespoň energii U_0 . Proto např. neexistuje helium v pevném skupenství ani při nulové teplotě Kelvinovy stupnice. Energie nulových kmitů tuto mřížku "roztaví".

Při teplotě $T > 0$ (excitované stavy) jsou zpravidla všechna obsazovací čísla $n_j > 0$.

Jak už bylo řečeno, danému kmitu j -tého oscilátoru přísluší vlnčet \mathbf{k} a frekvence $\Omega_j(\mathbf{k})$. Vlnčetu ale obecně odpovídá více možných hodnot Ω . Disperzní závislost $\Omega = \Omega(\mathbf{k})$ obsahuje tři tzv. akustické větve. Je-li mřížka tvořena více typy atomů, má navíc ještě $3s - 1$ tzv. optických větví (s je počet atomů v primitivní buňce):

V případě akustických větví je disperzní závislost přibližně lineární (směrnici označme β):

$$\Omega_{ak} = \beta |\mathbf{k}| \quad (4.6)$$

Těmto kmitům odpovídají vlny s vlnovou délkou $\lambda = \frac{2\pi}{k}$ a rychlostí β , jejíž experimentálně zjištěná hodnota byla přibližně rovna rychlosti akustických vln². Odtud je zřejmý důvod názvu těchto větví. Tyto vlny budou odpovídat akustickým kmitům, pokud $\lambda \gg a$ (pro malá k), ale ne při $\lambda \simeq a$. To má mimo jiné za následek omezení možných frekvencí kmitajících atomů:

$$\Omega_{\max} = \frac{2\pi\beta}{\lambda_{\min}} \simeq \frac{2\pi\beta}{a} \simeq 10^{13} \text{ Hz} \quad (4.7)$$

Pro srovnání: z obrázku 4.1 plyne odhad (v případě všech atomů stejného druhu)

$$\Omega_{\max} \simeq \frac{\pi\beta}{a} \quad (4.8)$$

Klasická fyzika předpovídá vnitřní energii soustavy rovnu

$$U(T) = 3Nk_B T = 3RT \quad (4.9)$$

²Připomeňme, že je rovna $\sqrt{\frac{Y}{\rho}}$, kde Y je Youngův modul pružnosti v tahu a ρ hustota látky.

($k_B = 1,38 \cdot 10^{-23} JK^{-1}$ je Boltzmannova konstanta a $R = 8,31 JK^{-1}mol^{-1}$) a měrné teplo při konstantním objemu nezávislé na teplotě:

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = 3Nk_B = 3R \quad (4.10)$$

Hodnoty (4.9) a (4.10) vyplývají také z klasického ekvipartičního teorému: kmitající atom má 6 stupňů volnosti a na každý z nich připadá porce energie $\frac{1}{2}k_B T$, celkově $3Nk_B T$. Vztah (4.10) je znám pod názvem Dulongův-Petitův zákon.

Experimenty však zcela jasně ukazovaly pokles C_V při klesající teplotě, u teplot $T \rightarrow 0$ dokonce závislost $C_V \sim T^3$. Historie objasňování záhady měrných tepel je poměrně známá, proto se omezíme jen na stručný fyzikální rozbor problému. Z (4.4) určíme vnitřní energii

$$U(T) = \overline{E(T)} = \hbar \sum_{j=1}^{3N} \Omega_j \overline{n_j(T)} + \frac{\hbar}{2} \sum_{j=1}^{3N} \Omega_j \quad (4.11)$$

Druhý člen napravo je energie nulových kmitů U_0 . Spektrum frekvencí Ω_j je prakticky spojitě (kvazikontinuum; a proto je taky spojitě spektrum energií) a můžeme tedy v (4.11) přejít k integraci:

$$U(T) = U_0 + \hbar \int_G \Omega \overline{n(T, \Omega)} dG(\Omega) \quad (4.12)$$

kde $G(\Omega)$ je počet kmitových stavů s frekvencemi $\omega \leq \Omega$. Veličinu

$$g(\Omega) = \frac{dG(\Omega)}{d\Omega} \quad (4.13)$$

můžeme nazvat hustotou stavů. Udává počet kmitových stavů vztažených na jednotkovou frekvenci.

Fonony jsou (kvazi)částice bosonového typu (v libovolném stavu jich může být libovolný počet), takže se řídí Bose-Einsteinovou statistikou:

$$\overline{n(\Omega, T)} = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\Omega}{k_B T}\right) - 1} \quad (4.14)$$

Zavedením (4.13) a (4.14) do (4.12) dostaneme pro vnitřní energii

$$U(T) = U_0 + \hbar \int_0^{\Omega_{\max}} \frac{\Omega g(\Omega) d\Omega}{\exp\left(\frac{\hbar\Omega}{k_B T}\right) - 1} \quad (4.15)$$

Je otázkou, jaký tvar bude mít hustota $g(\Omega)$. K tomu je třeba znát frekvenční spektrum. Používá se dvou modelů, Einsteinův a Debyeův, které jsou v relativně dobrém souladu s experimenty.

4.1.1 Einsteinův model (1907)

Einstein předpokládal, že všechny atomy kmitují se stejnou frekvencí Ω_E . Hustota stavů má potom tvar Diracovy δ -funkce:

$$g_E(\Omega) = A_E \delta(\Omega - \Omega_E) \quad (4.16)$$

příčemž konstanta A_E plyne z podmínky

$$3N = \int_0^\infty g_E(\Omega) d\Omega = A_E \quad (4.17)$$

Dosazením této hustoty do (4.15) získáme³

$$U(T) = U_0 + 3N \frac{\hbar\Omega_E}{\exp\left(\frac{\hbar\Omega_E}{k_B T}\right) - 1} \quad (4.18)$$

a pro specifické teplo

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V = \frac{3N}{k_B} \left(\frac{\hbar\Omega_E}{T}\right)^2 \frac{\exp\frac{\hbar\Omega_E}{k_B T}}{\left(\exp\left(\frac{\hbar\Omega_E}{k_B T}\right) - 1\right)^2} \quad (4.19)$$

Pro dostatečně velké teploty ($k_B T \gg \hbar\Omega_E$) je možno užít aproximaci

$$\exp\frac{\hbar\Omega_E}{k_B T} \simeq 1 + \frac{\hbar\Omega_E}{k_B T} \quad (4.20)$$

čímž dostaneme pro specifické teplo hodnotu, která se v limitě $T \rightarrow \infty$ rovná klasické hodnotě (4.10):

$$C_V \simeq 3Nk_B \left(1 + \frac{\hbar\Omega_E}{k_B T}\right) \simeq 3Nk_B = 3R \quad (4.21)$$

Při $T \rightarrow \infty$ je $C_V \rightarrow \infty$, což vystihuje podstatu závislosti $C_V = C_V(T)$, ale neodpovídá zcela experimentu a nevysvětluje přesně závislost $C_V \sim T^3$ v blízkosti nulové teploty.

V Einsteinově modelu je $\Omega = \Omega_E = konst$ nezávisle na \mathbf{k} a toto přiblížení tak relativně dobře vysvětluje vznik optických větví u látek s více typy atomů. Jinak ale není příliš realistický.

4.1.2 Debyeův model (1912)

V Debyeově modelu se předpokládají různé frekvence atomů v rozsahu $(0, \Omega_{\max})$, takže je tento model aproximací akustických kmitů. Z (4.6) plyne

$$\left(\frac{\Omega}{\beta}\right)^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 \quad (4.22)$$

Jelikož směrnicí β považujeme za konstantní, jsou plochy $\Omega = konst$ v \mathbf{k} -prostoru (tj. s reciprokými vzdálenostmi na osách) kulové plochy o poloměru $\frac{\Omega}{\beta}$. Lze tedy očekávat, že počet stavů s frekvencemi $\omega \leq \Omega$ je úměrný objemu koule s tímto poloměrem:

$$G_D(\Omega) \sim \left(\frac{\Omega}{\beta}\right)^3 \quad (4.23)$$

To znamená, že debyeovská hustota stavů bude

$$g_D(\Omega) = \frac{dG(\Omega)}{d\Omega} = \frac{A_D}{\beta^3} \Omega^2 \quad (4.24)$$

³Nebo prostým sečtením řady (4.11), kde $\Omega_j = \Omega_E$ pro všechna $j = 1, 2, \dots, 3N$.

Zde je podstatná závislost $g_D(\Omega) \sim \Omega^2$. Velikost Ω_{\max} plyne z podmínky

$$3N = \int_0^{\Omega_{\max}} g_D(\Omega) d\Omega = \frac{A_D}{3} \left(\frac{\Omega_{\max}}{\beta} \right)^3 \Rightarrow \Omega_{\max} = 3\beta \left(\frac{N}{A_D} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (4.25)$$

Můžeme tuto hodnotu porovnat s odhadem (4.7), popř. (4.8) a dostaneme úměrnost

$$N \sim \frac{1}{a^3} \quad (4.26)$$

kteřá je při konstantním objemu krystalu v souladu s geometrií mřížky (a je mřížková konstanta).

Uřídíme vnitřní energii. Dosadíme hustotu (4.24) do (4.15):

$$U(T) = U_0 + \frac{A_D}{\beta^3} \hbar \int_0^{\Omega_{\max}} \frac{\Omega^3 d\Omega}{\exp\left(\frac{\hbar\Omega}{k_B T}\right) - 1} \quad (4.27)$$

Zavedeme substituci

$$y = \frac{\hbar\Omega}{k_B T} \quad (4.28)$$

Je potom

$$U(T) = U_0 + \frac{A_D k_B^4 T^4}{\beta^3 \hbar^3} \int_0^{y_{\max}} \frac{y^3 dy}{\exp y - 1} \quad (4.29)$$

Rozeberme tento vztah podrobněji:

(1) Pro dostatečně vysoké teploty, kdy $\exp y \simeq 1 + y$, je

$$\begin{aligned} U(T) &\simeq U_0 + \frac{A_D k_B^4 T^4}{\beta^3 \hbar^3} \int_0^{y_{\max}} y^2 dy = U_0 + \frac{A_D k_B^4 T^4}{3\beta^3 \hbar^3} \left(\frac{\hbar\Omega_{\max}}{k_B T} \right)^3 = \\ &= U_0 + \frac{A_D}{3} \left(\frac{\Omega_{\max}}{\beta} \right)^3 k_B T \end{aligned} \quad (4.30)$$

a podle podmínky (4.25) je

$$U(T) \simeq U_0 + 3Nk_B T \quad (4.31)$$

$$C_V(T) \simeq 3Nk_B = 3R \quad (4.32)$$

(2) Pro nízké teploty je $y_{\max} \rightarrow \infty$ a použijeme-li rovnosti

$$\int_0^{\infty} \frac{y^3 dy}{\exp y - 1} = \frac{\pi^4}{15} \quad (4.33)$$

obdržíme přibližné vztahy (opět využijeme (4.25)):

$$U(T) \simeq U_0 + \frac{3\pi^4}{5} \frac{Nk_B^4}{\hbar^3 \Omega_{\max}^3} T^4 \quad (4.34)$$

$$C_V \simeq \frac{12\pi^4}{5} \frac{Nk_B^4}{\hbar^3 \Omega_{\max}^3} T^3 \quad (4.35)$$

I v Debyeově modelu se při $T \rightarrow \infty$ blíží měrné teplo klasické limitě $3R$. Navíc také vysvětluje závislost $C_V \sim T^3$, jejíž průběh byl experimentálně měřen, a také vznik akustických větví. Debyeův model vystihuje lépe skutečnost než Einsteinův.

Úplné shody s experimentem však nebylo dosaženo, neboť spektrální hustoty $g_E(\Omega)$, $g_D(\Omega)$ mají sice podobný, ale přece jen složitější průběh než jsme v obou případech uvažovali.

V reálném krystalu se projevuje vliv ostatních členů v potenciálu mřížky ($\sim Cu_j^3 + Du_j^4 + \dots$). To má zajímavé důsledky:

(a) nepatrné posunutí energetického (frekvenčního) spektra

(b) teplotní roztažnost: Důsledkem nesymetričnosti potenciálu roste, resp. klesá střední vzdálenost kmitajících

atomů a látka se proto s rostoucí teplotou roztahuje, resp. zkracuje.

(c) Ve skutečném (anharmonickém) potenciálu už atomy nejsou nezávislé a mohou si vyměňovat část energie.

To ale znamená, že dochází k vzájemné interakci fononů. Mimochodem, proto je tepelná vodivost krystalu konečná. Neinteragující fonony by totiž tepelnou energii přenášely beze ztrát.

Fonony interagují navzájem, ale mohou také zprostředkovávat interakci mezi elektrony (vznikají pak tzv. Cooperovy páry elektronů). Na základě této myšlenky byla formulována mikroskopická teorie supravodivosti, známá jako teorie BCS, nazvaná podle autorů Baardena, Coopera a Schrieffera (rok 1957). Ale to už je jiná historie...

4.2 Elektromagnetické pole

Přirozený způsob přechodu od klasického ke kvantovému popisu elektromagnetického pole spočívá v rozkladu pole na oscilátory. Není naším cílem vyložit v tomto článku teorii elektromagnetického pole, ale aplikovat dosavadní poznatky o harmonickém oscilátoru. Proto se omezíme spíše na prezentaci výsledků před jejich odvozováním.

Volné elektromagnetické pole budeme popisovat potenciály zvolenými v té kalibraci, v níž je skalární potenciál nulový a vektorový $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ splňuje podmínku

$$\operatorname{div} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (4.36)$$

Z vektorového potenciálu lze určit rozložení elektrického a magnetického pole:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad (4.37)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \operatorname{rot} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \quad (4.38)$$

Vektorový potenciál vyhovuje rovnici

$$\Delta \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} = 0 \quad (4.39)$$

Pokud uvažujeme pole uzavřené v objemu V , je jejím řešením vektorový potenciál tvaru sumy přes diskrétní soubor vlnových vektorů⁴:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \left(\mathbf{a}_{\mathbf{k}, \sigma}(t) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \mathbf{a}_{\mathbf{k}, \sigma}^*(t) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \right) =$$

⁴Složky vlnového vektoru \mathbf{k} nabývají diskrétních hodnot $k_n = 2\pi V^{-\frac{1}{3}} n$, ($n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$).

$$= \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \left(\mathbf{e}(\mathbf{k}, \sigma) a_{\mathbf{k}, \sigma}(t) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \mathbf{e}^*(\mathbf{k}, \sigma) a_{\mathbf{k}, \sigma}^*(t) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \right) \quad (4.40)$$

kde $\omega_{\mathbf{k}} = c|\mathbf{k}|$ a pro každý vektor \mathbf{k} jsme označili dva navzájem kolmé jednotkové vektory polarizace $\mathbf{e}(\mathbf{k}, \sigma)$ ⁵:

$$\mathbf{e}(\mathbf{k}, \sigma) \cdot \mathbf{e}(\mathbf{k}, \sigma') = \delta_{\sigma\sigma'} \quad (4.41)$$

$$\mathbf{e}(\mathbf{k}, \sigma) \mathbf{e}^*(\mathbf{k}, \sigma) = 1, \quad \sigma, \sigma' = 1, 2 \quad (4.42)$$

Oba jsou přitom kolmé na \mathbf{k} (tj. na směr šíření vlny):

$$\mathbf{e}(\mathbf{k}, \sigma) \cdot \mathbf{k} = 0 \quad (4.43)$$

Koeficienty $a_{\mathbf{k}, \sigma}(t)$ závisí na čase exponenciálně

$$a_{\mathbf{k}, \sigma}(t) = a_{\mathbf{k}, \sigma}(0) e^{-i\omega_{\mathbf{k}} t} \quad (4.44)$$

Je tedy možno rozvinout volné elektromagnetické pole na postupné vlny, z nichž každá je určena vlnočtem \mathbf{k} a polarizací $\mathbf{e}(\mathbf{k}, \sigma)$. Pole je přitom plně určeno zadáním vektorů $\mathbf{a}_{\mathbf{k}, \sigma}(t)$.

Zavedme dále kanonické proměnné vyjádřené prostřednictvím koeficientů (4.44):

$$\mathbf{Q}_{\mathbf{k}, \sigma} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega_{\mathbf{k}}}} \left(\mathbf{a}_{\mathbf{k}, \sigma}(t) + \mathbf{a}_{\mathbf{k}, \sigma}^*(t) \right) \quad (4.45)$$

$$\mathbf{P}_{\mathbf{k}, \sigma} = i\sqrt{\frac{\varepsilon_0\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{2}} \left(\mathbf{a}_{\mathbf{k}, \sigma}^*(t) - \mathbf{a}_{\mathbf{k}, \sigma}(t) \right) \quad (4.46)$$

Vektory $\mathbf{Q}_{\mathbf{k}}$ a $\mathbf{P}_{\mathbf{k}}$ jsou kolmé na \mathbf{k} , tj. leží v rovině kolmé na směr šíření vlny. V této rovině mají dvě nezávislé složky $\sigma = 1, 2$. Směr obou vektorů určuje směr polarizace příslušné vlny.

Přechod ke kvantové teorii se realizuje nahrazením uvedených proměnných operátory⁶:

$$a_{\mathbf{k}, \sigma}(t) \longrightarrow \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma}(t) \quad (4.47)$$

přičemž platí komutační relace

$$\left[\hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma}(t), \hat{a}_{\mathbf{k}', \sigma'}^{\dagger}(t) \right] = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\sigma\sigma'} \quad (4.48)$$

$$\left[\hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma}(t), \hat{a}_{\mathbf{k}', \sigma'}(t) \right] = 0 \quad (4.49)$$

Kanonické proměnné (4.45) a (4.46) se pak transformují na operátory

$$\hat{Q}_{\mathbf{k}, \sigma} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega_{\mathbf{k}}}} \left(\hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma}(t) + \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger}(t) \right) \quad (4.50)$$

$$\hat{P}_{\mathbf{k}, \sigma} = i\sqrt{\frac{\varepsilon_0\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{2}} \left(\hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger}(t) - \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma}(t) \right) \quad (4.51)$$

⁵V případě lineární polarizace je vektor \mathbf{e} reálný a přímo určuje směr polarizace, v případě kruhové (popř. eliptické) polarizace je komplexní s určitým vztahem mezi reálnou a imaginární složkou.

⁶Tento přechod platí až na faktor (závislý také na \mathbf{k}) před operátorem $\hat{a}_{\mathbf{k}}$.

splňující komutační relaci

$$\left[\hat{Q}_{\mathbf{k},\sigma}, \hat{P}_{\mathbf{k}',\sigma'} \right] = i\hbar \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\sigma\sigma'} \quad (4.52)$$

A nebo

$$\hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}(t) = \frac{1}{\sqrt{2\varepsilon_0\omega_{\mathbf{k}}}} \left(\omega \hat{Q}_{\mathbf{k},\sigma} + i \hat{P}_{\mathbf{k},\sigma} \right) \quad (4.53)$$

$$\hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}^+(t) = \frac{1}{\sqrt{2\varepsilon_0\omega_{\mathbf{k}}}} \left(\omega \hat{Q}_{\mathbf{k},\sigma} - i \hat{P}_{\mathbf{k},\sigma} \right) \quad (4.54)$$

Klasické výrazy pro energii

$$H = \frac{1}{2} \int \left(\varepsilon_0 |\mathbf{E}|^2 + \frac{1}{\mu_0} |\mathbf{B}|^2 \right) d^3\mathbf{r} = \frac{1}{2} \int \left(\varepsilon_0 \left(\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right)^2 + \frac{1}{\mu_0} (\text{rot} \mathbf{A})^2 \right) d^3\mathbf{r} \quad (4.55)$$

a celkovou hybnost

$$\mathbf{P} = \varepsilon_0 \int \mathbf{E} \times \mathbf{B} d^3\mathbf{r} = \varepsilon_0 \int \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \times \text{rot} \mathbf{A} d^3\mathbf{r} \quad (4.56)$$

se transformují na operátory už známé

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \left(\hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma} + \frac{1}{2} \right) = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \left(\hat{N}_{\mathbf{k},\sigma} + \frac{1}{2} \right) \quad (4.57)$$

$$\mathbf{P} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \hbar\mathbf{k} \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \hbar\mathbf{k} \hat{N}_{\mathbf{k},\sigma} \quad (4.58)$$

v němž je

$$\hat{N}_{\mathbf{k},\sigma} = \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma} \quad (4.59)$$

operátorem počtu fotonů s hybností $\hbar\mathbf{k}$ a polarizací $\mathbf{e}(\mathbf{k},\sigma)$.

Určení energie a impulsu pole nevyžaduje zvláštní výpočty, protože se redukuje na úlohu nalezení energetických hladin lineárních harmonických oscilátorů. Můžeme ihned pro energii a hybnost pole psát

$$E = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \left(N_{\mathbf{k},\sigma} + \frac{1}{2} \right) \quad (4.60)$$

$$\mathbf{P} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \hbar\mathbf{k} N_{\mathbf{k},\sigma} \quad (4.61)$$

Kvantování elektromagnetického pole tedy spočívá v zavedení světelných kvant- fotonů. Volné elektromagnetické pole tak můžeme pokládat za soubor částic, z nichž každá má energii $E = \hbar\omega$ a hybnost $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$, tj. $p = \hbar k = \frac{E}{c}$. Čísla $N_{\mathbf{k},\sigma}$ určují počet fotonů s danou hybností $\hbar\mathbf{k}$ a polarizací $\mathbf{e}(\mathbf{k},\sigma)$. Tato obsazovací čísla plní úlohu nezávislých proměnných a operátory působí na funkce těchto čísel. Operátor krece $\hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}^+$ o jednotku zvětšuje počet fotonů ve stavu \mathbf{k},σ ($N_{\mathbf{k},\sigma} \rightarrow N_{\mathbf{k},\sigma} + 1$), operátor anihilace $\hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}$ naopak o jedničku zmenšuje. Oba jsou vázány komutační relací

$$\left[\hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}, \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}^+ \right] = \hat{1} \quad (4.62)$$

Fotony jsou bosony, tj. v libovolném stavu se jich může nacházet libovolný počet. Při velkých číslech $N_{\mathbf{k},\sigma}$ jsou velké maticové elementy kreačních a anihilačních operátorů a jedničku napravo v (4.62) lze zanedbat, čímž tyto operátory přecházejí v komutující klasické amplitudy v rozvoji (4.40) a vlastnosti kvantové soustavy se blíží klasickým.

Všimněme si ještě vztahu (4.60). Energie pole bez fotonů (vakuový stav) $E_0 = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \frac{1}{2} \hbar \omega_{\mathbf{k}}$ je nekonečně velká, protože existuje nekonečný počet možných stavů pole. Fyzikální smysl však mají pouze energetické rozdíly mezi stavy. Proto můžeme energii pole vztahovat k její vakuové hodnotě.

Nakonec ještě uvedeme výrazy operátorů veličin elektromagnetického pole:

$$\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{\sqrt{2\varepsilon_0 c V}} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \frac{\mathbf{e}(\mathbf{k}, \sigma)}{\sqrt{k}} \left(\hat{a}_{\mathbf{k},\sigma} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}} t)} + \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}} t)} \right) \quad (4.63)$$

$$\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, t) = i \sqrt{\frac{\hbar c}{2\varepsilon_0 V}} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \sqrt{k} \mathbf{e}(\mathbf{k}, \sigma) \left(\hat{a}_{\mathbf{k},\sigma} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}} t)} - \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}} t)} \right) \quad (4.64)$$

$$\hat{\mathbf{B}}(\mathbf{r}, t) = i \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 c V}} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \left(\frac{\mathbf{k}}{k} \times \mathbf{e}(\mathbf{k}, \sigma) \right) \left(\hat{a}_{\mathbf{k},\sigma} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}} t)} - \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}} t)} \right) \quad (4.65)$$

a z nich plynoucí komutační relace:

$$\left[\hat{\mathbf{A}}_i(\mathbf{r}, t), \hat{\mathbf{A}}_j(\mathbf{r}', t) \right] = \left[\hat{\mathbf{E}}_i(\mathbf{r}, t), \hat{\mathbf{E}}_j(\mathbf{r}', t) \right] = \left[\hat{\mathbf{B}}_i(\mathbf{r}, t), \hat{\mathbf{B}}_j(\mathbf{r}', t) \right] = 0 \quad (4.66)$$

$$\left[\hat{\mathbf{E}}_i(\mathbf{r}, t), \hat{\mathbf{B}}_i(\mathbf{r}', t) \right], \quad i, j = x, y, z \quad (4.67)$$

$$\left[\hat{\mathbf{B}}_x(\mathbf{r}, t), \hat{\mathbf{B}}_y(\mathbf{r}', t) \right] = i \mu_0 \hbar \frac{\partial}{\partial z'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (4.68)$$

Navzájem kolmé složky vektorů \mathbf{E} a \mathbf{B} tedy nemohou současně nabývat ostrých hodnot v tomtéž bodě prostoru.

Rovinné vlny $\frac{\hbar}{\sqrt{2\varepsilon_0 V \omega_{\mathbf{k}}}} \mathbf{e}(\mathbf{k}, \sigma) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}} t)}$ vystupující ve výrazu (4.63) můžeme interpretovat jako vlnové funkce fotonů s hybností $\hbar \mathbf{k}$ a polarizací $\mathbf{e}(\mathbf{k}, \sigma)$. Nelze je však chápat jako amplitudy pravděpodobnosti jejich lokalizace v prostoru.

Kapitola 5

Dráhový integrál

Kapitola o dráhovém integrálu se opírá o výsledky prezentované v [4] a [7].

5.1 Definice dráhového integrálu

Hlavní ideou při zavedení formalismu dráhového integrálu, k němuž došlo poté, co byl v roce 1948 publikován Feynmanův článek *Space time approach to non – relativistic quantum mechanics*, bylo reprezentovat kvantověmechanickou amplitudu pravděpodobnosti přechodu systému mezi dvěma konfiguracemi \mathbf{x}' a \mathbf{x}'' za čas T jako sumu amplitud pravděpodobností od jednotlivých klasických trajektorií s pevným počátečním a koncovým bodem ve tvaru

$$K(\mathbf{x}'', \mathbf{x}', T) = \sum_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}', \mathbf{x}(T)=\mathbf{x}''} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[\mathbf{x}(t)]\right) \quad (5.1)$$

v němž $S[\mathbf{x}(t)]$ je klasická akce jako funkcionál klasické trajektorie $\mathbf{x}(t)$. Pro trajektorie $\mathbf{x}(t)$ blízké klasické se akce $S[\mathbf{x}(t)]$ mění pomalu (Hamiltonův princip) a příspěvky ve formálně zavedené sumě (5.1) se sčítají prakticky se stejnou fází a mají proto rozhodující význam.

Sumu přes trajektorie ve formuli (5.1) můžeme interpretovat jako integrál na prostoru klasických trajektorií v d -dimenzionálním prostoru s pevným počátečním a koncovým bodem:

$$K(\mathbf{x}'', \mathbf{x}', T) = \int_{\mathbf{x}(t)} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[\mathbf{x}(t)]\right) D\mathbf{x}(t) \quad (5.2)$$

Libovolnou trajektorii píšme ve tvaru

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}_{klas}(t) + \delta\mathbf{x}(t) \quad (5.3)$$

kde $\mathbf{x}_{klas}(t)$ je skutečná trajektorie, která je řešením klasické pohybové rovnice a vyhovuje Hamiltonovu principu

$$\delta S[\mathbf{x}_{klas}(t)] = 0 \quad (5.4)$$

V případě hamiltoniánu jednorozměrného harmonického oscilátoru kvadraticky závislého na x (hovoříme pak o tzv. gaussovských dráhových integrálech) jsme ukázali (viz (2.39)), že akci pro obecnou trajektorii (5.3) lze psát v separovaném tvaru

$$S[\mathbf{x}(t)] = S[\mathbf{x}_{klas}(t)] + S[\delta\mathbf{x}(t)] \quad (5.5)$$

Potom pro dráhový integrál (5.2) obdržíme vyjádření

$$\begin{aligned} K(x'', x', T) &= \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[x_{klas}(t)]\right) \int \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[\delta x(t)]\right) D\delta x(t) = \\ &= \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[x_{klas}(t)]\right) \int \exp\frac{i}{\hbar} \left(\int_0^T L(\delta x(t), \delta \dot{x}(t), t) dt\right) D\delta x(t) \end{aligned} \quad (5.6)$$

Ve formuli (5.6) označme předexponenciální faktor

$$F(x'', x', T) = \int \exp\frac{i}{\hbar} \left(\int_0^T L(\delta x(t), \delta \dot{x}(t), t) dt\right) D\delta x(t) \quad (5.7)$$

který je tedy určen integrálem přes kvantové fluktuace kolem klasické trajektorie. Dráhový integrál tak budeme hledat ve tvaru

$$K(x'', x', T) = F(x'', x', T) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[x_{klas}(t)]\right) \quad (5.8)$$

Protože má mít význam amplitudy pravděpodobnosti přechodu systému ze stavu s ostrou hodnotou souřadnice $|x\rangle$ do stavu $|x''\rangle$ za čas T (proto se také o dráhovém integrálu hovoří jako o propagátoru), musí být roven

$$K(x'', x', T) = \langle x'' | \hat{U}(T) | x' \rangle \quad (5.9)$$

ve kterém je

$$\hat{U}(T) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} T\right) \quad (5.10)$$

evoluční operátor systému s hamiltoniánem \hat{H} .

Na Hilbertově prostoru stavů $|x\rangle$ platí pro skalární součin

$$\langle x'' | x' \rangle = \delta(x'' - x') \quad (5.11)$$

Vložení relace uzavřenosti

$$\int |x\rangle \langle x| dx = \hat{1} \quad (5.12)$$

a podmínky unitarity evolučního operátoru

$$\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{1} \quad (5.13)$$

do (5.11) dostaneme

$$\int \langle x'' | \hat{U} | x \rangle \langle x | \hat{U}^\dagger | x' \rangle dx = \delta(x'' - x') \quad (5.14)$$

Z definice hermitovskys sdruženého operátoru

$$\langle x | \hat{U}^\dagger | x' \rangle = \langle x' | \hat{U} | x \rangle^* \quad (5.15)$$

a (5.14) plyne podmínka

$$\int K(x'', x, T) K^*(x', x, T) dx = \delta(x'' - x')$$

$$\int F(x'', x, T) F^*(x', x, T) \exp \frac{i}{\hbar} (S[x_{klas}(t)](x'', x, T) - S[x_{klas}(t)](x', x, T)) dx = \delta(x'' - x') \quad (5.16)$$

Pro $x'' \rightarrow x'$ lze v prvním přiblížení psát

$$S[x_{klas}(t)](x'', x, T) - S[x_{klas}(t)](x', x, T) = \frac{\partial S[x_{klas}(t)](x', x, T)}{\partial x'} (x'' - x') \quad (5.17)$$

Zavedeme-li ještě substituci

$$y = \frac{\partial^2 S[x_{klas}(t)](x', x, T)}{\partial x' \partial x} \quad (5.18)$$

$$dy = \frac{\partial^2 S[x_{klas}(t)](x', x, T)}{\partial x' \partial x} dx$$

přejde (5.16) na tvar

$$\int |F(x', x, T)|^2 \exp \left(\frac{i}{\hbar} y (x'' - x') \right) \left(\frac{\partial^2 S[x_{klas}(t)](x', x, T)}{\partial x' \partial x} \right)^{-1} dy = \delta(x'' - x') \quad (5.19)$$

Vzhledem k integrální reprezentaci δ -funkce (viz dodatek (7.5)):

$$\delta(x'' - x') = \frac{1}{2\pi\hbar} \int \exp \left(\frac{i}{\hbar} y (x'' - x') \right) dy \quad (5.20)$$

tak musí platit (dosadíme $x'' \rightarrow x'$, $x' \rightarrow x$)

$$|F(x', x, T)| = \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar} \frac{\partial^2 S[x_{klas}(t)](x'', x', T)}{\partial x'' \partial x'}} \quad (5.21)$$

Spočteme-li akci klasické trajektorie (z podmínky stacionarity akce), můžeme jejím prostřednictvím přímo určit propagátor¹ ze vzorce²

$$K(x'', x', T) = \sqrt{\frac{i}{2\pi\hbar} \frac{\partial^2 S[x_{klas}(t)](x'', x', T)}{\partial x'' \partial x'}} \exp \left(\frac{i}{\hbar} S[x_{klas}(t)](x'', x', T) \right) \quad (5.22)$$

Uřídíme nejprve propagátor volné částice. Její trajektorie $x_{klas}(t)$ mezi zafixovanými body x' a x'' vyhovuje pohybové rovnici

$$m \ddot{x}_{klas}(t) = 0 \quad (5.23)$$

s okrajovými podmínkami

$$x_{klas}(0) = x', \quad x_{klas}(T) = x'' \quad (5.24)$$

Řešení (5.23) bude zřejmě tvaru

$$x_{klas}(t) = At + B \quad (5.25)$$

¹Předexponenciální faktor (5.21) je podle tohoto vztahu určen až na fázi. Na konkrétních příkladem uvidíme, že fáze musí být právě taková, jaká je uvedena v následujícím vzorci (5.22).

²Zobecnění pro dráhový integrál v d -dimenzionálním případě dává formuli: $K(x'', x', T) = \det \left(\frac{i}{2\pi\hbar} \frac{\partial^2 S[x_{klas}(t)](x'', x', T)}{\partial x'_i \partial x'_j} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left(\frac{i}{\hbar} S[x_{klas}(t)](x'', x', T) \right)$, kde uvedený determinant je tzv. van Vleckův determinant.

Konstanty A, B plynou z podmínek (5.24):

$$A = \frac{x'' - x'}{T}, B = x' \quad (5.26)$$

Skutečná trajektorie proto bude

$$x_{klas}(t) = (x'' - x') \frac{t}{T} + x' \quad (5.27)$$

A klasická akce pro tuto trajektorii je

$$\begin{aligned} S[x_{klas}(t)](x'', x', T) &= \frac{m}{2} \int_0^T \dot{x}_{klas}(t)^2 dt = \frac{m}{2} \left(\frac{x'' - x'}{T} \right)^2 \int_0^T dt \\ &= \frac{m(x'' - x')^2}{2T} \end{aligned} \quad (5.28)$$

Užitím (5.22) dostaneme předexponenciální faktor

$$F_{vol}(x'', x', T) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar T}} \quad (5.29)$$

Podle (5.8) získáme propagátor volné částice

$$K_{vol}(x'', x', T) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar T}} \exp \frac{im(x'' - x')^2}{2\hbar T} \quad (5.30)$$

Uvažujme prostor trajektorií $x(t)$ s nulami na krajích ($x(0) = 0, x(T) = 0$), v zájmu stručnosti ho značme \mathcal{L} . Roli nezávislé proměnné tu bude hrát čas. V tomto případě se spokojíme se spojitostí trajektorií (tzn. nevylučujeme "špičaté" trajektorie).

Na prostoru \mathcal{L} definujeme skalární součin trajektorií $x(t), y(t) \in \mathcal{L}$:

$$(x(t) | y(t)) = \int_0^T x(t)y(t)dt \quad (5.31)$$

Předpokládejme, že existuje spočetná množina funkcí $\{z_n(t)\}_{n=1}^\infty$, ortonormální ve smyslu

$$(z_m(t) | z_n(t)) = \delta_{mn} \quad (5.32)$$

speciálně, že pro funkce $z_n(t)$ platí normovací podmínka

$$\int_0^T z_n^2(t)dt = 1 \quad (5.33)$$

Na \mathcal{L} definujeme operátor

$$\hat{O} = m \left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2 \right) \quad (5.34)$$

jehož působení na klasickou trajektorii dává nulu:

$$\hat{O} x_{klas}(t) = 0 \quad (5.35)$$

Tato podmínka je ekvivalentní podmínce (5.4), vyjadřující klasický Hamiltonův princip. V analogii s kvantovou mechanikou předpokládejme, že operátor \hat{O} generuje bázové trajektorie prostřednictvím rovnice

$$\hat{O} z_n(t) = O_n z_n(t) \quad (5.36)$$

s vlastními čísly O_n . Libovolnou, tedy i "fluktuální" trajektorii $\delta x(t)$, splňující samozřejmě okrajové podmínky $\delta x(0) = \delta x(T) = 0$ a zavedenou v (5.3), můžeme vyjádřit ve tvaru

$$\delta x(t) = \sum_n a_n z_n(t) \quad (5.37)$$

V maticovém zápisu bude mít vektor této trajektorie souřadnice

$$\delta x(t) = (a_1, a_2, \dots) \quad (5.38)$$

a prvky matice O v O -reprezentaci budou

$$O_{mn} = \int_0^T z_m(t) \hat{O} z_n(t) dt = O_n \delta_{mn} \quad (5.39)$$

tj. tento operátor bude reprezentován nekonečnou diagonální maticí s vlastními čísly na diagonále.

Vraťme se k obecném vyjádření (5.7) předexponenciálního faktoru a určíme jeho tvar v případě jednorozměrného harmonického oscilátoru:

$$F(x'', x', T) = \int \exp \frac{i}{\hbar} S[\delta x(t)] D\delta x(t) \quad (5.40)$$

s akcí

$$S[\delta x(t)] = \frac{m}{2} \int_0^T \left(\dot{\delta x}(t)^2 - \omega^2 \delta x(t)^2 \right) dt \quad (5.41)$$

Jelikož platí okrajové podmínky

$$\delta x(0) = \delta x(T) = 0 \quad (5.42)$$

je

$$\begin{aligned} 0 &= \delta x(T) \dot{\delta x}(T) - \dot{\delta x}(0) \delta x(0) = \int_0^T \frac{d}{dt} \left(\delta x(t) \dot{\delta x}(t) \right) dt = \\ &= \int_0^T \left(\dot{\delta x}(t)^2 + \delta x(t) \ddot{\delta x}(t) \right) dt \end{aligned} \quad (5.43)$$

a tedy

$$\begin{aligned} S[\delta x(t)] &= -\frac{m}{2} \int_0^T \left(\delta x(t) \ddot{\delta x}(t) + \omega^2 \delta x(t)^2 \right) dt = \\ &= -\frac{1}{2} \int_0^T \delta x(t) m \left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2 \right) \delta x(t) dt = -\frac{1}{2} \int_0^T \delta x(t) \hat{O} \delta x(t) dt \end{aligned} \quad (5.44)$$

Předexponenciální faktor jednorozměrného harmonického oscilátoru je pak roven

$$F(x'', x', T) = \int \exp \left(-\frac{i}{2\hbar} \int_0^T \delta x(t) \hat{O} \delta x(t) dt \right) D\delta x(t) \quad (5.45)$$

Funkcionální míru $D\delta x(t)$ na prostoru trajektorií tvaru (5.37) můžeme chápat jako nekonečný součin tvaru $J \prod_n da_n$, v němž je J jakobián odpovídající přechodu mezi integračními proměnnými. Po dosazení (5.37) do (5.45) máme

$$F(x'', x', T) = J \prod_{n=1}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(-\frac{i}{2\hbar} \int_0^T \sum_{k=1}^{\infty} a_k z_k(t) \sum_{l=1}^{\infty} a_l \hat{O} z_l(t) dt \right) da_n \quad (5.46)$$

Protože je $\hat{O} z_l(t) = O_l z_l(t)$, máme

$$\begin{aligned} F(x'', x', T) &= J \prod_{n=1}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(-\frac{i}{2\hbar} O_n a_n^2 \right) da_n = \\ &= J \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{i}} \prod_{n=1}^{\infty} O_n^{-\frac{1}{2}} = J \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{i \det O}} \end{aligned} \quad (5.47)$$

V tomto vzorci ale vystupuje determinant

$$\det O = \prod_n O_n \quad (5.48)$$

který může divergovat. Tento problém vzápětí objasníme.

Na Hilbertově prostoru \mathcal{L} všech trajektorií volné částice se zafixovaným počátečním a koncovým bodem definujeme nyní operátor

$$\hat{O}_{vol} = m \frac{d^2}{dt^2} \quad (5.49)$$

který také zřejmě splňuje

$$\hat{O}_{vol} x_{klas}(t) = 0 \quad (5.50)$$

pro klasickou trajektorii volné částice. Provedeme stejnou formální konstrukci jako v předchozím případě operátoru \hat{O} a získáme předexponenciální faktor propagátoru volné částice ve tvaru

$$F_{vol}(x'', x', T) = J \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{i \det O_{vol}}} \quad (5.51)$$

s determinanem

$$\det O_{vol} = \prod_n O_{vol,n} \quad (5.52)$$

který však může stejně jako (5.48) divergovat. Jejich poměr však už ne:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \frac{O_n}{O_{vol,n}} = \left(\frac{F(x'', x', T)}{F_{vol}(x'', x', T)} \right)^{-2} \quad (5.53)$$

a dává konečnou hodnotu. Za $F_{vol}(x'', x', T)$ dosadíme už vypočtenou hodnotu (5.29) a s označením

$$\det {}_R O = \prod_{n=1}^{\infty} \frac{O_n}{O_{vol,n}} = \frac{\det O}{\det O_{vol}} \quad (5.54)$$

dostaneme vyjádření předexponenciálního faktoru oscilátoru pomocí regularizovaného determinantu

$$F(x'', x', T) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar T}} \det_R^{-\frac{1}{2}} O \quad (5.55)$$

Regularizovaný determinant (5.54) je součinem vlastních hodnot operátoru \hat{O} normovaných na vlastní hodnoty operátoru \hat{O}_{vol} . Tento determinant už nediverguje. V zavedeném formalismu je tedy třeba normovat předexponenciální faktor oscilátoru na předexponenciální faktor volné částice. K jeho určení musíme najít vlastní čísla obou uvedených operátorů ve svých vlastních reprezentacích. Limitním přechodem $\omega \rightarrow 0$ (tj. $\hat{O} \rightarrow \hat{O}_{vol}$) se pak musí tento výraz redukovat na případ volné částice.

Vlastní funkce a čísla operátoru \hat{O} získáme vyřešením rovnice (5.36) s dosazením tvaru (5.34) tohoto operátoru

$$\begin{aligned} m \frac{d^2 z_n(t)}{dt^2} + m\omega^2 z_n(t) &= O_n z_n(t) \\ \frac{d^2 z_n(t)}{dt^2} + (\omega^2 - \frac{O_n}{m}) z_n(t) &= 0 \end{aligned} \quad (5.56)$$

Vlastní funkce budou tvaru

$$z_n(t) = Z_n \sin \omega_n t \quad (5.57)$$

se zavedeným značením

$$\omega_n^2 = \omega^2 - \frac{O_n}{m} \quad (5.58)$$

Vzhledem k okrajovým podmínkám (5.42) a (5.37) musí platit

$$z_n(0) = z_n(T) = 0 \quad (5.59)$$

Této podmínce vyhovují frekvence

$$\omega_n = n \frac{\pi}{T} \quad (5.60)$$

a odpovídající vlastní čísla

$$O_n = m \left(\omega^2 - \left(\frac{n\pi}{T} \right)^2 \right) \quad (5.61)$$

Z normovací podmínky (5.33) pro funkce (5.57) plyne:

$$\begin{aligned} 1 &= Z_n^2 \int_0^T \sin^2 \omega_n t dt = Z_n^2 \left(\frac{T}{2} - \frac{1}{4\omega_n} \sin 2\omega_n T \right) = Z_n^2 \frac{T}{2} \\ \Rightarrow Z_n &= \sqrt{\frac{2}{T}} \end{aligned} \quad (5.62)$$

Vlastní funkce operátoru \hat{O} tedy jsou

$$z_n(t) = \sqrt{\frac{2}{T}} \sin \left(n\pi \frac{t}{T} \right) \quad (5.63)$$

Snadno nahlédneme, že vlastní čísla operátoru \hat{O}_{vol} budou

$$O_{vol,n} = -m \left(\frac{n\pi}{T} \right)^2 \quad (5.64)$$

Můžeme tak určit regularizovaný determinant

$$\det {}_R O = \prod_{n=1}^{\infty} \frac{O_n}{O_{vol,n}} = \prod_{n=1}^{\infty} \frac{\omega^2 - \left(\frac{n\pi}{T}\right)^2}{-\left(\frac{n\pi}{T}\right)^2} = \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 - \frac{\omega^2 T^2}{n^2 \pi^2}\right) \quad (5.65)$$

Využijeme zde tzv. Eulerovu identitu

$$\prod_{n=1}^{\infty} \left(1 - \frac{x^2}{n^2 \pi^2}\right) = \frac{\sin x}{x} \quad (5.66)$$

a obdržíme

$$\det {}_R O = \frac{\sin \omega T}{\omega T} \quad (5.67)$$

Odtud a z formule (5.55) konečně dostaneme předexponenciální faktor harmonického oscilátoru

$$F(x'', x', T) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar T}} \sqrt{\frac{\omega T}{\sin \omega T}} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T}} \quad (5.68)$$

Pro $\omega \rightarrow 0$ tento výraz reprodukuje předexponenciální faktor propagátoru volné částice daný vztahem (5.29).

Zbývá ještě najít klasickou trajektorii $x_{klas}(t)$. V naší symbolice tak budeme řešit rovnici (5.35):

$$\begin{aligned} \hat{O} x_{klas}(t) &= 0 \\ \frac{d^2 x_{klas}(t)}{dt^2} + \omega^2 x_{klas}(t) &= 0 \end{aligned} \quad (5.69)$$

s okrajovými podmínkami

$$x_{klas}(0) = x', \quad x_{klas}(T) = x'' \quad (5.70)$$

Řešení rovnice (5.69) bude tvaru

$$x_{klas}(t) = A_1 \sin \omega t + A_2 \cos \omega t \quad (5.71)$$

Z okrajových podmínek plyne

$$x' = A_2 \quad (5.72)$$

$$x'' = A_1 \sin \omega T + A_2 \cos \omega T \quad (5.73)$$

což zavedeno do (5.71) dává výsledek

$$\begin{aligned} x_{klas}(t) &= \frac{x'' - x' \cos \omega T}{\sin \omega T} \sin \omega t + x' \cos \omega t = \\ &= \frac{x''}{\sin \omega T} \sin \omega t + x' \left(\cos \omega t - \frac{\cos \omega T}{\sin \omega T} \sin \omega t \right) = \\ &= \frac{x''}{\sin \omega T} \sin \omega t + \frac{x'}{\sin \omega T} \sin \omega(T - t) \end{aligned} \quad (5.74)$$

Klasická akce pro tuto trajektorii je

$$S[x_{klas}(t)] = \frac{m}{2} \int_0^T (\dot{x}_{klas}(t)^2 - \omega^2 x_{klas}(t)^2) dt =$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{m\omega^2}{2\sin^2\omega T} \int_0^T (x''^2 \cos 2\omega t + x'^2 \cos 2\omega(t-T) - 2x'x'' \cos(2\omega t - \omega T)) dt = \\
&= \frac{m\omega}{2\sin\omega T} (\cos\omega T(x'^2 + x''^2) - 2x'x'') \quad (5.75)
\end{aligned}$$

Tím máme spočtené všechny mezivýsledky potřebné k určení propagátoru harmonického oscilátoru podle formule (5.8):

$$K(x'', x', T) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin\omega T}} \exp\left(\frac{i m \omega}{2\hbar \sin\omega T} (\cos\omega T(x'^2 + x''^2) - 2x'x'')\right) \quad (5.76)$$

V limitě $\omega \rightarrow 0$ odtud vyplyne propagátor volné částice (5.30).

Dva členy propagátoru (5.76) jsou singulární pro $T \rightarrow n\frac{\pi}{\omega}$ (n je celé číslo). Limita tohoto propagátoru pro $T \rightarrow 0$ však existuje. Píšeme-li $T = n\frac{\pi}{\omega} + \tau$, je $\sin\omega T = (-1)^n \sin\omega\tau$ a $\cos\omega T = (-1)^n \cos\omega\tau$. Označíme-li dále $\alpha(\tau)^2 = \frac{2i\hbar \sin\omega\tau}{m\omega}$, můžeme psát

$$K(x'', x', n\frac{\pi}{\omega} + \tau) = \frac{1}{\sqrt{\pi\alpha(\tau)}} \exp\left(-\frac{1}{\alpha(\tau)^2} (\cos\omega\tau(x'^2 + x''^2) - (-1)^n 2x'x'')\right) \quad (5.77)$$

Při $\tau \rightarrow 0$ je

$$\cos\omega\tau(x'^2 + x''^2) - (-1)^n 2x'x'' \rightarrow (x'' - (-1)^n x')^2 \quad (5.78)$$

a podle dodatku () je pro $\tau \rightarrow 0$

$$K(x'', x', n\frac{\pi}{\omega} + \tau) \rightarrow \delta(x'' - (-1)^n x') \quad (5.79)$$

Tento výsledek můžeme interpretovat, vrátíme-li se k řešení klasické pohybové rovnice (5.69) s okrajovými podmínkami (5.70). Ta má totiž řešení pouze v případě, že $x' = x_{klas}(0)$ a $x'' = x_{klas}(n\frac{\pi}{\omega})$ splňují podmínku (dosad' $T = n\frac{\pi}{\omega}$ do (5.72) a (5.73)):

$$x'' = (-1)^n x' \quad (5.80)$$

5.2 Feynmanův integrál a diskretizace času

Pohlédneme-li znovu na definici dráhového integrálu (5.1), vidíme, že se zde sčítá přes nekonečně mnoho trajektorií. Sám Feynman se ho pokusil interpretovat jako integrál na prostoru klasických trajektorií v konfiguračním prostoru s nějakou mírou $D\mathbf{x}(t)$. Za předpokladu, že hamiltonián obecného systému má tvar

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \hat{V}(\mathbf{x}) \quad (5.81)$$

ve kterém je separována závislost na operátorech impulsu a souřadnice, odvodil formuli odpovídající reprezentaci (5.1):

$$K(\mathbf{x}'', \mathbf{x}', T) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{nm}{2\pi i \hbar T}\right)^{\frac{nd}{2}} \int \prod_{j=1}^{n-1} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^n \left(m(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_{j-1})^2 \frac{n}{2T} - V(\mathbf{x}_{j-1}) \frac{T}{n}\right)\right) d^d \mathbf{x}_j \quad (5.82)$$

nebo ve vžitém značení s (neexistující) funkcionální mírou $D\mathbf{x}(t)$:

$$K(\mathbf{x}'', \mathbf{x}', T) = \int_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}'}^{\mathbf{x}(T)=\mathbf{x}''} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^T \left(\frac{m}{2} \dot{\mathbf{x}}(t)^2 - V(\mathbf{x}(t))\right) dt\right) D\mathbf{x}(t) \quad (5.83)$$

V této formulaci je tedy Feynmannův dráhový integrál limitou konečnoměrných integrálů z výrazů, které formálně představují "diskrétní aproximace" integrandu (5.83). Podařilo se mu tak nahradit nekonečný počet integračních proměnných $\mathbf{x}(t)$ konečně mnoha proměnnými-hodnotami $\mathbf{x}_j = \mathbf{x}(j\frac{T}{n})$, které získáme nahrazením časového kontinua sadou "mřížových bodů" $\{0, \frac{T}{n}, \dots, j\frac{T}{n}, \dots, T\}$.

Diskrétní aproximace pro dráhový integrál jednorozměrného harmonického oscilátoru je

$$K_n(x'', x', T) = \left(\frac{nm}{2\pi i \hbar T}\right)^{\frac{n}{2}} \int \prod_{j=1}^{n-1} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^n \left(m(x_j - x_{j-1})^2 \frac{n}{2T} - m\omega^2 x_{j-1}^2 \frac{n}{2T}\right)\right) dx_j \quad (5.84)$$

Označíme-li

$$\varepsilon = \frac{T}{n} \quad (5.85)$$

$$y_j = \sqrt{\frac{m}{\hbar\varepsilon}} x_j, \text{ pro } j = 1, 2, \dots, n-1 \quad (5.86)$$

$$y_0 = \sqrt{\frac{m}{\hbar\varepsilon}} x' \quad (5.87)$$

$$y_n = \sqrt{\frac{m}{\hbar\varepsilon}} x'' \quad (5.88)$$

dostaneme vyjádření

$$K_n(x'', x', T) = \sqrt{\frac{m}{\hbar\varepsilon}} \left(\frac{1}{2\pi i}\right)^{\frac{n}{2}} \int \prod_{j=1}^{n-1} \exp\left(\frac{i}{2} \sum_{j=1}^n \left((y_j - y_{j-1})^2 - \omega^2 y_{j-1}^2 \varepsilon^2\right)\right) dy_j \quad (5.89)$$

Rozepíšeme kvadratickou formu v exponenciále (5.89):

$$\begin{aligned} & \frac{i}{2} \sum_{j=1}^n y_j^2 - i \sum_{j=1}^n y_j y_{j-1} + \frac{i}{2} \sum_{j=0}^{n-1} (1 - \omega^2 \varepsilon^2) y_j^2 = \\ & = \frac{i}{2} (y_0^2 + y_n^2 - \omega^2 \varepsilon^2 y_0^2) - i y_n y_{n-1} - i \sum_{j=1}^{n-1} \left(\left(1 - \frac{\omega^2 \varepsilon^2}{2}\right) y_j^2 - y_j y_{j-1} \right) \end{aligned} \quad (5.90)$$

Abychom mohli užít obecnou formuli

$$\int \exp\left(-\frac{1}{2} \mathbf{y} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{y}^T + \mathbf{b} \cdot \mathbf{y}^T\right) d^d \mathbf{y} = \det\left(\frac{2\pi}{\mathbf{A}}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{1}{2} \mathbf{b} \cdot \mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{b}^T\right) \quad (5.91)$$

definujeme $(n - 1)$ -rozměrnou matici

$$\mathbf{A}_{n-1} = \begin{pmatrix} -2ai & i & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ i & -2ai & i & & & & \cdot \\ 0 & i & -2ai & & & & \cdot \\ \cdot & & & \cdot & & & \cdot \\ \cdot & & & & \cdot & & 0 \\ \cdot & & & & & \cdot & i \\ 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 & i & -2ai \end{pmatrix} \quad (5.92)$$

kde jsme označili

$$a = 1 - \frac{1}{2}\omega^2\varepsilon^2 \quad (5.93)$$

a $(n - 1)$ -rozměrné vektory

$$\mathbf{b} = -i(y_0, 0, \dots, 0, y_n) \quad (5.94)$$

$$\mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_{n-1}) \quad (5.95)$$

Snadno se přesvědčíme, že platí

$$-\frac{1}{2}\mathbf{y} \cdot \mathbf{A}_{n-1} \cdot \mathbf{y}^T = i \sum_{j=1}^{n-1} (ay_j^2 - y_j y_{j-1}) + iy_0 y_1 \quad (5.96)$$

a

$$\mathbf{b} \cdot \mathbf{y}^T = -iy_0 y_1 - iy_{n-1} y_n \quad (5.97)$$

Pomocí (5.96) a (5.97) můžeme přepsat (5.90) na tvar

$$\frac{i}{2} (y_0^2 + y_n^2 - \omega^2\varepsilon^2 y_0^2) - \frac{1}{2}\mathbf{y} \cdot \mathbf{A}_{n-1} \cdot \mathbf{y}^T + \mathbf{b} \cdot \mathbf{y}^T \quad (5.98)$$

A (5.89) můžeme psát s označením (5.87) a (5.88) ve tvaru

$$K_n(x'', x', T) = \sqrt{\frac{m}{\hbar\varepsilon}} \left(\frac{1}{2\pi i} \right)^{\frac{n}{2}} \cdot$$

$$\int \exp \left(-\frac{1}{2}\mathbf{y} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{y}^T + \mathbf{b} \cdot \mathbf{y}^T + \frac{im}{2\hbar\varepsilon} (x'^2 + x''^2 - \omega^2\varepsilon^2 x'^2) \right) d^{n-1}\mathbf{y} \quad (5.99)$$

Pro determinant matice (5.92) platí

$$\det \mathbf{A}_{n-1} = (-2ai)^{n-1} \det \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{2a} & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ -\frac{1}{2a} & 1 & -\frac{1}{2a} & & & & \cdot \\ 0 & -\frac{1}{2a} & 1 & & & & \cdot \\ \cdot & & & \cdot & & & \cdot \\ \cdot & & & & \cdot & & 0 \\ \cdot & & & & & \cdot & -\frac{1}{2a} \\ 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 & -\frac{1}{2a} & 1 \end{pmatrix} \quad (5.100)$$

$(n-1)$ -rozměrnou matici vpravo označme \mathbf{B}_{n-1} a její determinant b_{n-1} . Rozvineme ho podle prvního řádku v (5.100):

$$b_{n-1} = \det \mathbf{B}_{n-2} - \frac{1}{2a} \det \begin{pmatrix} -\frac{1}{2a} & -\frac{1}{2a} & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & 1 & -\frac{1}{2a} & 0 & & & \cdot \\ 0 & -\frac{1}{2a} & 1 & -\frac{1}{2a} & & & \cdot \\ \cdot & & & \cdot & & & \cdot \\ \cdot & & & & \cdot & & 0 \\ \cdot & & & & & 1 & -\frac{1}{2a} \\ 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 & -\frac{1}{2a} & 1 \end{pmatrix} \quad (5.101)$$

Tentokrát provedeme rozvoj podle prvního sloupce v (5.101):

$$b_{n-1} = \det \mathbf{B}_{n-2} - \left(\frac{1}{2a}\right)^2 \det \mathbf{B}_{n-3} = b_{n-2} - \frac{1}{4a^2} b_{n-3} \quad (5.102)$$

To je rekurentní rovnice s počátečními podmínkami

$$b_0 = b_1 = 1 \quad (5.103)$$

Kořeny příslušné charakteristické rovnice

$$\lambda^2 - \lambda + \frac{1}{4a^2} = 0 \quad (5.104)$$

jsou

$$\lambda_{1,2} = \frac{a \pm i\sqrt{1-a^2}}{2a} \quad (5.105)$$

Obecné řešení rovnice (5.102) je tvaru³

$$b_n = C_1 \lambda_1^n + C_2 \lambda_2^n \quad (5.106)$$

v němž C_1 a C_2 jsou konstanty plynoucí z počátečních podmínek (5.103):

$$1 = b_0 = C_1 + C_2 \quad (5.107)$$

$$1 = b_1 = C_1 \lambda_1 + C_2 \lambda_2 \quad (5.108)$$

Dosadíme řešení této soustavy do (5.106):

$$b_{n-1} = \frac{1-\lambda_2}{\lambda_1-\lambda_2} \lambda_1^{n-1} + \frac{\lambda_1-1}{\lambda_1-\lambda_2} \lambda_2^{n-1} \quad (5.109)$$

Protože je podle (5.105) $\lambda_1 + \lambda_2 = 1$, platí

$$b_{n-1} = \frac{\lambda_1}{\lambda_1-\lambda_2} \lambda_1^{n-1} + \frac{-\lambda_2}{\lambda_1-\lambda_2} \lambda_2^{n-1} = \frac{\lambda_1^n - \lambda_2^n}{\lambda_1 - \lambda_2} \quad (5.110)$$

Pohlédneme ještě na tvar kořenů (5.105), je zde totiž výhodné položit (definovat β)

$$a = \cos \beta \quad (5.111)$$

³Jde o obecné řešení rekurentních rovnic v případě, kdy je $\lambda_1 \neq \lambda_2$; povšimněte si analogie s řešením diferenciálních rovnic.

Potom je

$$\beta(n) = \arccos a = \arccos\left(1 - \frac{1}{2}\omega^2\varepsilon^2\right) = \omega\varepsilon + o(\varepsilon^2) \quad (5.112)$$

Kořeny (5.105) nabývají vyjádření

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2a} \left(\cos \beta \pm i\sqrt{1 - \cos^2 \beta} \right) = \frac{1}{2a} \exp(\pm i\beta) \quad (5.113)$$

Neboli podle (5.110)

$$b_{n-1} = \left(\frac{1}{2a}\right)^{n-1} \frac{\exp(in\beta) - \exp(-in\beta)}{\exp(i\beta) - \exp(-i\beta)} = \left(\frac{1}{2a}\right)^{n-1} \frac{\sin n\beta}{\sin \beta} \quad (5.114)$$

$$\det \mathbf{A}_{n-1} = (-2ai)^{n-1} b_{n-1} = (-i)^{n-1} \frac{\sin n\beta}{\sin \beta} \quad (5.115)$$

Výraz (5.99) přejde s využitím formule (5.91) na tvar

$$K_n(x'', x', T) = \sqrt{\frac{m}{\hbar\varepsilon}} \left(\frac{1}{2\pi i}\right)^{\frac{n}{2}} \det\left(\frac{2\pi}{\mathbf{A}_{n-1}}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot \exp\left(\frac{1}{2}\mathbf{b} \cdot \mathbf{A}_{n-1}^{-1} \cdot \mathbf{b}^T + \frac{im}{2\hbar\varepsilon} (x'^2 + x''^2 - \omega^2\varepsilon^2 x'^2)\right) \quad (5.116)$$

Nejprve spočteme s uvážením (5.115)

$$\begin{aligned} & \lim_{n \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{m}{\hbar\varepsilon}} \left(\frac{1}{2\pi i}\right)^{\frac{n}{2}} \det\left(\frac{2\pi}{\mathbf{A}_{n-1}}\right)^{\frac{1}{2}} = \\ & = \sqrt{\frac{m}{\hbar T}} \sqrt{\lim_{n \rightarrow \infty} n \left(\frac{1}{2\pi i}\right)^n (2\pi)^{n-1} \det^{-1} \mathbf{A}_{n-1}} = \\ & = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar T}} \sqrt{\lim_{n \rightarrow \infty} n (-i)^n (-i)^{1-n} \frac{\sin \beta}{\sin n\beta}} = \\ & = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar T \sin \omega T}} \sqrt{\lim_{n \rightarrow \infty} n \sin \frac{\omega T}{n}} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T}} \end{aligned} \quad (5.117)$$

neboť podle l'Hospitalova pravidla je

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n \sin \frac{\omega T}{n} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\omega T \left(\frac{1}{n}\right)' \cos \frac{\omega T}{n}}{\left(\frac{1}{n}\right)'} = \omega T \quad (5.118)$$

Spočteme kvadratickou formu v exponenciále výrazu (5.116):

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2}\mathbf{b} \cdot \mathbf{A}_{n-1}^{-1} \cdot \mathbf{b}^T + \frac{im}{2\hbar\varepsilon} (x'^2 + x''^2 - \omega^2\varepsilon^2 x'^2) = \\ & = -\frac{m}{2\hbar\varepsilon} \left(x'^2 (\mathbf{A}_{n-1}^{-1})_{1,1} + x''^2 (\mathbf{A}_{n-1}^{-1})_{n-1,n-1} \right) - \\ & \quad -\frac{m}{2\hbar\varepsilon} x' x'' \left((\mathbf{A}_{n-1}^{-1})_{1,n-1} + (\mathbf{A}_{n-1}^{-1})_{n-1,1} \right) + \end{aligned}$$

$$+\frac{im}{2\hbar\varepsilon} (x'^2 + x''^2 - \omega^2\varepsilon^2 x'^2) \quad (5.119)$$

Prvky inverzní matice \mathbf{A}_{n-1}^{-1} můžeme určit např. pomocí tzv. adjungované matice⁴ \mathbf{A}_{n-1}^{adj} a věty z algebry

$$\mathbf{A}_{n-1}^{-1} = (\det \mathbf{A}_{n-1})^{-1} \mathbf{A}_{n-1}^{adj} \quad (5.120)$$

Nám stačí určit pouze čtyři "rohové" prvky matice \mathbf{A}_{n-1}^{-1} . Potřebné prvky adjungované matice jsou

$$\left(\mathbf{A}_{n-1}^{adj}\right)_{1,1} = \left(\mathbf{A}_{n-1}^{adj}\right)_{n-1,n-1} = \det \mathbf{A}_{n-2} \quad (5.121)$$

$$\left(\mathbf{A}_{n-1}^{adj}\right)_{1,n-1} = \left(\mathbf{A}_{n-1}^{adj}\right)_{n-1,1} = (-1)^{1+n-1} i^{n-2} = -(-i)^n \quad (5.122)$$

A prvky inverzní matice jsou

$$\left(\mathbf{A}_{n-1}^{-1}\right)_{1,1} = \left(\mathbf{A}_{n-1}^{-1}\right)_{n-1,n-1} = \frac{\det \mathbf{A}_{n-2}}{\det \mathbf{A}_{n-1}} = i \frac{\sin(n-1)\beta}{\sin n\beta} \quad (5.123)$$

$$\left(\mathbf{A}_{n-1}^{-1}\right)_{1,n-1} = \left(\mathbf{A}_{n-1}^{-1}\right)_{n-1,1} = \frac{-(-i)^n}{\det \mathbf{A}_{n-1}} = i \frac{\sin \beta}{\sin n\beta} \quad (5.124)$$

Kvadratická forma v exponenciále výrazu (5.116) je (dosadíme (5.123) a (5.124) do (5.119)):

$$\begin{aligned} & \frac{im}{2\hbar\varepsilon} \left(\left(1 - \frac{\sin(n-1)\beta}{\sin n\beta}\right) (x'^2 + x''^2) - 2 \frac{\sin \beta}{\sin n\beta} x'x'' - \omega^2\varepsilon^2 x'^2 \right) = \\ & = \frac{im}{2\hbar T} \left(n \left(1 - \frac{\sin\left(\frac{n-1}{n}\omega T\right)}{\sin \omega T}\right) (x'^2 + x''^2) - 2n \frac{\sin \frac{\omega T}{n}}{\sin \omega T} x'x'' - \left(\frac{\omega T}{n}\right)^2 x'^2 \right) \end{aligned} \quad (5.125)$$

Podle (5.118) je $\lim_{n \rightarrow \infty} n \sin \frac{\omega T}{n} = \omega T$ a s dalším využitím l'Hospitalova pravidla máme

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} n \left(1 - \frac{\sin\left(\frac{n-1}{n}\omega T\right)}{\sin \omega T}\right) &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\frac{d}{dn} \left(1 - \frac{\sin\left(\frac{n-1}{n}\omega T\right)}{\sin \omega T}\right)}{\frac{d}{dn} \left(\frac{1}{n}\right)} = \\ &= \frac{\omega T}{\sin \omega T} \lim_{n \rightarrow \infty} \cos\left(\frac{n-1}{n}\omega T\right) = \omega T \frac{\cos \omega T}{\sin \omega T} \end{aligned} \quad (5.126)$$

Limita výrazu (5.125) pro $n \rightarrow \infty$ tedy je

$$\frac{im\omega}{2\hbar \sin \omega T} (\cos \omega T (x'^2 + x''^2) - 2x'x'') \quad (5.127)$$

Spojením výrazů (5.117) a (5.127) obdržíme pro limitu výrazu (5.116) vyjádření

$$\begin{aligned} K(x'', x', T) &= \lim_{n \rightarrow \infty} K_n(x'', x', T) = \\ &= \int_{x(0)=x'}^{x(T)=x''} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^T \frac{m}{2} (x(t)^2 - \omega^2 x(t)^2) dt\right) Dx(t) = \end{aligned}$$

⁴Připomeňme, že pro její prvky A_{kl}^{adj} platí: $A_{kl}^{adj} = (-1)^{k+l} \det X_{lk}$, kde X_{lk} je algebraický doplněk prvku A_{lk} matice \mathbf{A} .

$$= \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin \omega T}} \exp\left(\frac{i m \omega}{2\hbar \sin \omega T} (\cos \omega T (x'^2 + x''^2) - 2x'x'')\right) \quad (5.128)$$

Tato formule vyjadřuje Feynmannův dráhový integrál jednorozměrného harmonického oscilátoru a souhlasí s výsledkem (5.76).

Všimněme si blíže rovnice (5.91). Není obtížné přesvědčit se, že kvadratická forma v exponenciále napravo je rovna

$$-\frac{1}{2} \mathbf{y}_* \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{y}_*^T + \mathbf{b} \cdot \mathbf{y}_*^T \quad (5.129)$$

kde \mathbf{y}_* reprezentuje stacionární bod, tj. takové \mathbf{y} , jež v exponenciále výrazu (5.91) splňuje soustavu rovnic

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} \left(-\frac{1}{2} \mathbf{y} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{y}^T + \mathbf{b} \cdot \mathbf{y}^T \right) = 0 \quad (5.130)$$

Derivace součtu výrazů (5.96) a (5.97)

$$\frac{\partial}{\partial y_k} \left(i \sum_{j=1}^{n-1} (a y_k^2 - y_k y_{k-1}) - i y_{n-1} y_n \right) \quad (5.131)$$

je pro $k = 2, 3, \dots, n-1$ rovna

$$i (2a y_k - y_{k-1} - y_{k+1}) \quad (5.132)$$

přičemž platí okrajové podmínky (5.87) a (5.88). Podmínka (5.130) tak nabývá tvaru

$$2a y_k - y_{k-1} - y_{k+1} = 0$$

$$2\left(1 - \frac{1}{2} \omega^2 \varepsilon^2\right) x_k - x_{k-1} - x_{k+1} = 0 \quad (5.133)$$

$$(x_{k+1} - x_k) - (x_k - x_{k-1}) + \omega^2 \varepsilon^2 x_k = 0$$

$$\frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{x(t+\varepsilon) - x(t)}{\varepsilon} - \frac{x(t) - x(t-\varepsilon)}{\varepsilon} \right) + \omega^2 x(t) = 0 \quad (5.134)$$

Přechodem $n \rightarrow \infty$, (tj. $\varepsilon \rightarrow 0$) dospějeme k rovnici

$$\frac{d^2 x(t)}{dt^2} + \omega^2 x(t) = 0, \quad x(0) = x', \quad x(T) = x'' \quad (5.135)$$

Podmínka stacionarity určité trajektorie tak dává klasickou pohybovou rovnici oscilátoru. Její řešení je proto výše zmíněnou trajektorií. Řešení rekurentní rovnice (5.133) je tvaru

$$x_k = Q_1 \lambda_1^k + Q_2 \lambda_2^k \quad (5.136)$$

kde

$$\lambda_{1,2} = a \pm i \sqrt{1 - a^2} = \cos \beta \pm i \sin \beta = \exp(\pm i \beta) \quad (5.137)$$

jsou kořeny charakteristické rovnice $\lambda^2 - 2a\lambda + 1 = 0$ příslušející rovnici (5.133) a Q_1, Q_2 konstanty, které určíme z počátečních podmínek $x_0 = x', x_n = x''$:

$$x' = Q_1 + Q_2 \quad (5.138)$$

$$x'' = Q_1 \exp i n \beta + Q_2 \exp(-i n \beta) \quad (5.139)$$

Odtud plyne

$$x'' = Q_1 \exp in\beta + (x' - Q_1) \exp(-in\beta) = 2iQ_1 \sin n\beta + x' \exp(-in\beta)$$

$$Q_1 = \frac{x'' - x' \exp(-in\beta)}{2i \sin n\beta} \quad (5.140)$$

$$Q_2 = x' - Q_1 = -\frac{x'' - x' \exp in\beta}{2i \sin n\beta} \quad (5.141)$$

Řešení rovnice (5.133)

$$x_k = \frac{x'' - x' \exp(-in\beta)}{2i \sin n\beta} \exp ik\beta - \frac{x'' - x' \exp in\beta}{2i \sin n\beta} \exp(-ik\beta) \quad (5.142)$$

přechází v limitě $n \rightarrow \infty$ na řešení diferenciální rovnice (5.135):

$$\begin{aligned} x(t) &= \frac{x'' - x' \exp(-i\omega T)}{2i \sin \omega T} \exp i\omega t - \frac{x'' - x' \exp i\omega T}{2i \sin \omega T} \exp(-i\omega t) = \\ &= \frac{x'' \exp(-i\omega t)}{2i \sin \omega T} - \frac{x' \exp(-i\omega(T-t))}{2i \sin \omega T} - \frac{x'' \exp i\omega t}{2i \sin \omega T} + \frac{x' \exp i\omega(T-t)}{2i \sin \omega T} = \\ &= \frac{x''}{\sin \omega T} \sin \omega t + \frac{x'}{\sin \omega T} \sin \omega(T-t) \end{aligned} \quad (5.143)$$

Na závěr ještě učiníme poznámku o souvislosti matice (5.92) a operátoru (5.34). Uvažujme diskrétní aproximaci trajektorie $x(t)$, neboli $(n-1)$ -rozměrný vektor

$$\mathbf{x} = (x_1(\varepsilon), \dots, x_j(j\varepsilon), \dots, x_{n-1}((n-1)\varepsilon)), \quad \varepsilon = \frac{T}{n} \quad (5.144)$$

a počítejme součin

$$\frac{m}{i\varepsilon^2} \mathbf{A}_{n-1} \cdot \mathbf{x}^T \quad (5.145)$$

j -tá souřadnice výsledného vektoru (jakožto součinu matice s vektorem) (5.145) je

$$\begin{aligned} \frac{m}{i\varepsilon^2} (\mathbf{A}_{n-1} \cdot \mathbf{x}^T)_j &= \frac{m}{\varepsilon^2} (x_{j-1} - 2ax_j + x_{j+1}) = \\ &= \frac{m}{\varepsilon^2} (x_{j-1} - 2x_j + x_{j+1}) + m\omega^2 x_j = \\ &= m \left(\frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{x_{j+1} - x_j}{\varepsilon} - \frac{x_j - x_{j-1}}{\varepsilon} \right) + \omega^2 x_j \right) \end{aligned} \quad (5.146)$$

Je odtud vidět, že ve spojitě limitě $n \rightarrow \infty$ ($\varepsilon \rightarrow 0$) přechází matice $\frac{m}{i\varepsilon^2} \mathbf{A}_{n-1}$ v diferenciální operátor \hat{O} .

5.3 Harmonický oscilátor v poli časově závislé vnější síly

Jako aplikaci formule (5.22) spočítáme propagátor harmonického oscilátoru ve vnějším homogenním, časově závislém poli s hamiltoniánem

$$H(x, p, t) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - F(t)x \quad (5.147)$$

a budící silou $F(t)$. Akce je v tomto případě

$$S[x(t)] = \int_0^T \left(\frac{m}{2} \dot{x}(t)^2 - \frac{m}{2}\omega^2 x(t)^2 + F(t)x(t) \right) dt \quad (5.148)$$

V rovnici (5.22) vystupuje akce podél klasické trajektorie. Je třeba tuto trajektorii nalézt, neboli řešit klasickou rovnici

$$\ddot{x}(t) + \omega^2 x(t) = \frac{F(t)}{m}, \quad x(0) = x', \quad x(T) = x'' \quad (5.149)$$

Její řešení hledíme opět ve tvaru $x(t) = x_{klas}(t) + x_F(t)$, kde $x_{klas}(t)$ je řešení (5.74) homogenní rovnice (5.69):

$$x_{klas}(t) = \frac{x''}{\sin \omega T} \sin \omega t + \frac{x'}{\sin \omega T} \sin \omega(T-t) \quad (5.150)$$

a $x_F(t)$ je partikulární řešení rovnice (5.149) s pravou stranou, s okrajovými podmínkami $x_F(0) = x_F(T) = 0$. Standartní metodou pro získání takového řešení je tzv. metoda Greenovy funkce. Najdeme-li nejprve řešení rovnice

$$\frac{d^2 G_0(t, s)}{dt^2} + \omega^2 G_0(t, s) = \delta(t-s), \quad G_0(0, s) = 0, \quad G_0(T, s) = 0 \quad (5.151)$$

je partikulární řešení

$$x_F(t) = \frac{1}{m} \int_0^T G_0(t, s) F(s) ds \quad (5.152)$$

Standartní výraz pro Greenovu funkci lineárního diferenciálního operátoru druhého řádu je

$$G_0(t, s) = W^{-1} (\Theta(s-t)\Psi_0(t)\Psi_T(s) + \Theta(t-s)\Psi_0(s)\Psi_T(t)) \quad (5.153)$$

kde

$$\begin{aligned} \Theta(s-t) &= 1 \text{ pro } s > t \\ &= 0 \text{ pro } s \leq t \end{aligned} \quad (5.154)$$

je skoková funkce, $\Psi_0(t)$ a $\Psi_T(t)$ jsou lineárně nezávislá řešení homogenní rovnice k rovnici (5.149), splňující počáteční podmínky

$$\Psi_0(0) = 0, \quad \dot{\Psi}_0(0) = 1 \quad (5.155)$$

$$\Psi_T(0) = 0, \quad \dot{\Psi}_T(T) = 1 \quad (5.156)$$

a W jejich wronskián:

$$W = \det \begin{pmatrix} \Psi_0(t) & \Psi_T(t) \\ \dot{\Psi}_0(t) & \dot{\Psi}_T(t) \end{pmatrix} \quad (5.157)$$

Snadno zjistíme, že

$$\Psi_0(t) = \frac{1}{\omega} \sin \omega t \quad (5.158)$$

$$\Psi_T(t) = \frac{1}{\omega} \sin \omega(t - T) \quad (5.159)$$

a jejich wronskián

$$W = \frac{1}{\omega} \det \begin{pmatrix} \sin \omega t & \sin \omega(t - T) \\ \cos \omega t & \cos \omega(t - T) \end{pmatrix} = \frac{1}{\omega} \sin \omega T \quad (5.160)$$

Pro $T = n\frac{\pi}{\omega}$ je $W = 0$, obě řešení jsou lineárně nezávislá a vzorec (5.153) nelze použít. Greenova funkce v tomto případě neexistuje, proto budeme nejprve předpokládat $T \neq n\frac{\pi}{\omega}$. Potom je

$$G_0(t, s) = \frac{1}{\omega \sin \omega T} (\Theta(s - t) \sin \omega t \sin \omega(s - T) + \Theta(t - s) \sin \omega s \sin \omega(t - T)) \quad (5.161)$$

Při výpočtu klasické akce (5.148) podél trajektorie $x(t) = x_{klas}(t) + x_F(t)$ využijeme rovnosti

$$\dot{x}(t)^2 = \frac{d}{dt} (x(t) \dot{x}(t)) - x(t) \ddot{x}(t) \quad (5.162)$$

Dostáváme tak

$$S[x(t)] = \frac{m}{2} [x(t) \dot{x}(t)]_0^T - \frac{m}{2} \int_0^T x(t) \left(\ddot{x}(t) + \omega^2 x(t) - \frac{2F(t)}{m} \right) dt \quad (5.163)$$

Protože $\ddot{x}(t) + \omega^2 x(t) = \frac{F(t)}{m}$, máme pro akci

$$S[x(t)] = \frac{m}{2} [x(t) \dot{x}(t)]_0^T + \frac{1}{2} \int_0^T x_{klas}(t) F(t) dt + \frac{1}{2} \int_0^T x_F(t) F(t) dt \quad (5.164)$$

Rozepišme prostřední člen ve výrazu (5.164). Vzhledem k (5.149) platí

$$F(t) = m \left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2 \right) x_F(t),$$

můžeme tedy psát

$$\int_0^T x_{klas}(t) F(t) dt = m \int_0^T x_{klas}(t) \dot{x}_F(t) dt + m\omega^2 \int_0^T x_{klas}(t) x_F(t) dt \quad (5.165)$$

Dvojitým užitím integrace per partes získáme

$$\begin{aligned} \int_0^T x_{klas}(t) \dot{x}_F(t) dt &= [x_{klas}(t) x_F(t)]_0^T - \int_0^T \dot{x}_{klas}(t) x_F(t) dt = \\ &= [x_{klas}(t) x_F(t) - \dot{x}_{klas}(t) x_F(t)]_0^T + \int_0^T \ddot{x}_{klas}(t) x_F(t) dt \end{aligned} \quad (5.166)$$

První člen v (5.166) napravo je vzhledem k okrajovým podmínkám $x_F(0) = x_F(T) = 0$ nulový, takže (5.165) nabývá tvaru

$$m [x_{klas}(t) x_F(t)]_0^T + m \int_0^T (\ddot{x}_{klas}(t) + \omega^2 x_{klas}(t)) x_F(t) dt =$$

$$= m [x_{klas}(t) \dot{x}_F(t)]_0^T \quad (5.167)$$

protože druhý člen nalevo je pro klasickou trajektorii nulový. (5.167) spolu s (5.152) dosadíme do klasické akce (5.164):

$$S[x(t)] = \frac{m}{2} [x(t) \dot{x}(t) + x_{klas}(t) \dot{x}_F(t)]_0^T + \frac{1}{2m} \int_0^T G_0(t, s) F(t) F(s) dt ds \quad (5.168)$$

Ještě rozepišme první člen v (5.168). Ten je s dalším využitím okrajových podmínek roven

$$\begin{aligned} & \frac{m}{2} [(x_{klas}(t) + x_F(t)) (\dot{x}_{klas}(t) + \dot{x}_F(t)) + x_{klas}(t) \ddot{x}_F(t)]_0^T = \\ & = \frac{m}{2} [x_{klas}(t) \dot{x}_{klas}(t) + 2x_{klas}(t) \dot{x}_F(t) + \dot{x}_F(t)^2]_0^T \end{aligned} \quad (5.169)$$

Použijme znovu (5.167) a pro první člen v akci (5.168) obdržíme vyjádření

$$\frac{m}{2} [x_{klas}(t) \dot{x}_{klas}(t)]_0^T + \int_0^T x_{klas}(t) F(t) dt \quad (5.170)$$

Konečný výraz pro akci podél trajektorie $x(t) = x_{klas}(t) + x_F(t)$ je

$$\begin{aligned} S[x(t)] &= \frac{m}{2} [x_{klas}(t) \dot{x}_{klas}(t)]_0^T + \\ &+ \int_0^T x_{klas}(t) F(t) dt + \frac{1}{2m} \int_0^T G_0(t, s) F(t) F(s) dt ds \end{aligned} \quad (5.171)$$

Po dosazení do poslední formule za derivaci

$$\dot{x}_{klas}(t) = \frac{\omega}{\sin \omega T} (x'' \cos \omega t - x' \cos \omega(T-t)) \quad (5.172)$$

a Greenovu funkci (5.161) dostaneme

$$\begin{aligned} S[x_{klas}(t)](x'', x', T) &= \frac{m\omega}{2 \sin \omega T} \cdot \\ &\{ \cos \omega T (x'^2 + x''^2) - 2x'x'' + \frac{2x'}{m\omega} \int_0^T F(t) \sin \omega(T-t) dt + \\ &+ \frac{2x''}{m\omega} \int_0^T F(t) \sin \omega t dt + \frac{1}{m^2 \omega^2} \cdot \\ &\int_0^T F(t) F(s) (\Theta(s-t) \sin \omega t \sin \omega(s-T) + \Theta(t-s) \sin \omega s \sin \omega(t-T)) ds dt \} \end{aligned} \quad (5.173)$$

Předexponenciální faktor je podle (5.22)

$$F(x', x, T) = \sqrt{\frac{i}{2\pi\hbar} \frac{\partial^2 S[x_{klas}(t)](x'', x', T)}{\partial x'' \partial x'}} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T}} \quad (5.174)$$

a je stejný jako u volného harmonického oscilátoru, neboť nezávisí na průběhu vynucující síly. Nyní stačí (5.173) a (5.174) dosadit do obecné formule propagátoru (5.22) a získáme propagátor harmonického oscilátoru v poli vnější síly:

$$K(x'', x', T) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T}}$$

$$\begin{aligned} & \cdot \exp \left(\frac{i m \omega}{2 \hbar \sin \omega T} (\cos \omega T (x'^2 + x''^2) - 2 x' x'') \right) \cdot \\ & \cdot \exp \left(\frac{i}{\hbar} S[x_{klas}(t)](x'', x', T) \right) \end{aligned} \quad (5.175)$$

kde $S[x_{klas}(t)](x'', x', T)$ je akce určená vztahem (5.173). Tento propagátor má význam amplitudy přechodu z počátečního do koncového stavu pod vlivem vnějšího zdroje $F(t)$.

Kapitola 6

Weylova reprezentace kvantové mechaniky

Při prezentaci tohoto pojetí kvantové mechaniky a jeho aplikaci na harmonický oscilátor jsem byl inspirován výsledky v článku [6].

6.1 Nekomutativní fázový prostor a Wignerova funkce

Až doposud jsme při budování teorie harmonického oscilátoru využívali poznatků kvantové teorie, která vychází z předpokladu, že lze každé fyzikální veličině přiřadit operátor podle daných pravidel. Tato teorie byla zformulována především Heisenbergem, Schrödingerem a Diracem.

Zkusme nyní pohlédnout na tuto teorii trochu z jiného úhlu. Pokusme se fyzikální veličině přiřadit nějakou funkci, která by tuto veličinu reprezentovala podobně jako operátory. Přitom budeme požadovat zachování zákonů kvantové mechaniky.

Přiřaďme nyní libovolnému operátoru $\hat{F}(\hat{x}, \hat{p})$ funkci $f(x, p)$ na (dvoudimenzionálním) fázovém prostoru. Je přirozené požadovat, aby bylo toto přiřazení vzájemně jednoznačné.

Nejprve vezměme libovolnou funkci $f(x, p)$. Definujme příslušný operátor tímto způsobem

$$\hat{F}(\hat{x}, \hat{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \widetilde{f(\alpha, \beta)} e^{\frac{i}{\hbar}(\alpha\hat{x} + \beta\hat{p})} d\alpha d\beta \quad (6.1)$$

v němž je $\widetilde{f(\alpha, \beta)}$ Fourierovým obrazem funkce $f(x, p)$ (tentokrát funkce dvou proměnných) definovaný následovně

$$\widetilde{f(\alpha, \beta)} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}(\alpha x + \beta p)} f(x, p) dx dp \quad (6.2)$$

Hledejme naopak k danému operátoru $\hat{F}(\hat{x}, \hat{p})$ odpovídající funkci $f(x, p)$. K tomuto účelu spočítáme stopu trochu pozměněného operátoru v x -reprezentaci:

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left(\hat{F}(\hat{x}, \hat{p}) e^{-\frac{i}{\hbar}(\alpha\hat{x} + \beta\hat{p})} \right) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}(\alpha x + \beta p)} \\ &\cdot f(x, p) \text{Tr} \left(e^{-\frac{i}{\hbar}(\alpha\hat{x} + \beta\hat{p})} e^{\frac{i}{\hbar}(\alpha\hat{x} + \beta\hat{p})} \right) dx dp d\alpha d\beta = \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i\hbar}{2}(\alpha'\beta - \alpha\beta')} e^{-\frac{i}{\hbar}(\alpha x + \beta p)} \cdot f(x, p) \left(\int_{-\infty}^{\infty} \langle x' | e^{\frac{i}{\hbar}(\beta - \beta')\hat{p}} e^{\frac{i}{\hbar}(\alpha - \alpha')\hat{x}} | x' \rangle dx' \right) dx dp d\alpha d\beta \quad (6.3)$$

Vložením relace uzavřenosti pro vlastní stavy hybnosti $\int_{-\infty}^{\infty} |p'\rangle \langle p'| dp' = \hat{1}$ mezi obě exponenciely a s uvážením toho, že platí

$$e^{\frac{i}{\hbar}(\alpha - \alpha')\hat{x}} |x'\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}(\alpha - \alpha')x'} |x'\rangle \quad (6.4)$$

$$e^{\frac{i}{\hbar}(\beta - \beta')\hat{p}} |p'\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}(\beta - \beta')p'} |p'\rangle \quad (6.5)$$

(o jejich platnosti se snadno přesvědčíme rozepsáním obou exponenciál do mocninné řady), obdržíme pro stopu

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i\hbar}{2}(\alpha'\beta - \alpha\beta')} e^{-\frac{i}{\hbar}(\alpha x + \beta p)} f(x, p) e^{\frac{i}{2\hbar}(\alpha - \alpha')(\beta - \beta')} \cdot \left(\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar}((\alpha - \alpha')x' + (\beta - \beta')p')} \langle x' | p' \rangle \langle p' | x' \rangle dx' dp' \right) dx dp d\alpha d\beta \quad (6.6)$$

Je $\langle x' | p' \rangle \langle p' | x' \rangle = \frac{1}{2\pi\hbar}$ a proto se (6.6) zjednoduší s využitím (7.51) v dodatku (7.5) na tvar

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i\hbar}{2}(\alpha'\beta - \alpha\beta')} e^{\frac{i}{2\hbar}(\alpha - \alpha')(\beta - \beta')} e^{-\frac{i}{\hbar}(\alpha x + \beta p)} \cdot \\ & f(x, p) \delta(\alpha - \alpha') \delta(\beta - \beta') dx dp d\alpha d\beta = \\ & = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}(\alpha x + \beta p)} f(x, p) dx dp = \frac{1}{2\pi\hbar} \widetilde{f(\alpha, \beta)} \end{aligned} \quad (6.7)$$

To je vyjádření stopy (6.3), z něhož plyne

$$\widetilde{f(\alpha, \beta)} = (2\pi\hbar) \text{Tr} \left(\hat{F}(\hat{x}, \hat{p}) e^{-\frac{i}{\hbar}(\alpha \hat{x} + \beta \hat{p})} \right) \quad (6.8)$$

což je Fourierův obraz hledané funkce.

Transformační formule, jež vzájemně jednoznačně přiřazují operátoru funkci a naopak, jsou

$$f(x, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \text{Tr} \left(\hat{F}(\hat{x}, \hat{p}) e^{-\frac{i}{\hbar}(\alpha \hat{x} + \beta \hat{p})} \right) e^{\frac{i}{\hbar}(\alpha x + \beta p)} d\alpha d\beta \quad (6.9)$$

$$\hat{F}(\hat{x}, \hat{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}(\alpha x + \beta p)} f(x, p) dx dp \right) e^{\frac{i}{\hbar}(\alpha \hat{x} + \beta \hat{p})} d\alpha d\beta \quad (6.10)$$

Chceme-li vyjádření stopy operátoru $\hat{F}(\hat{x}, \hat{p})$ prostřednictvím jemu odpovídající funkce $f(x, p)$, stačí integrovat rovnici (6.9) přes x a p :

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x, p) dx dp &= 2\pi\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\alpha) \delta(\beta) \text{Tr} \left(\hat{F}(\hat{x}, \hat{p}) e^{-\frac{i}{\hbar}(\alpha \hat{x} + \beta \hat{p})} \right) d\alpha d\beta = \\ &= 2\pi\hbar \text{Tr} \hat{F}(\hat{x}, \hat{p}) \end{aligned} \quad (6.11)$$

Uved' me konkrétní příklady na aplikaci formulí (6.9) a (6.10). Ověříme, že operátoru \hat{x} přísluší funkce $f(x, p) = x$. Je totiž

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left(\hat{x} e^{-\frac{i}{\hbar}(\alpha\hat{x} + \beta\hat{p})} \right) &= e^{\frac{i\hbar}{2}\alpha\beta} \int_{-\infty}^{\infty} \langle x' | e^{-\frac{i}{\hbar}\beta\hat{p}} e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha\hat{x}} \hat{x} | x' \rangle dx' = \\ &= e^{\frac{i\hbar}{2}\alpha\beta} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}\beta p'} e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha x'} x' \langle x' | p' \rangle \langle p' | x' \rangle dx' dp' = \\ &= (2\pi\hbar) e^{\frac{i\hbar}{2}\alpha\beta} (i\hbar) \delta'(\alpha) \delta(\beta) \end{aligned} \quad (6.12)$$

A podle (6.9)

$$\begin{aligned} f(x, p) &= i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i\hbar}{2}\alpha\beta} \delta'(\alpha) \delta(\beta) e^{\frac{i}{\hbar}(\alpha x + \beta p)} d\alpha d\beta = \\ &= i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \delta'(\alpha) e^{\frac{i}{\hbar}\alpha x} d\alpha = \int_{-\infty}^{\infty} x \delta(\alpha) e^{\frac{i}{\hbar}\alpha x} d\alpha = x \end{aligned} \quad (6.13)$$

A obráceně: funkci $f(x, p) = x$ náleží operátor \hat{x} :

$$\begin{aligned} \hat{F}(\hat{x}, \hat{p}) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}(\alpha x + \beta p)} x dx dp \right) e^{\frac{i}{\hbar}(\alpha\hat{x} + \beta\hat{p})} d\alpha d\beta = \\ &= i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \delta'(\alpha) \delta(\beta) e^{\frac{i\hbar}{2}\alpha\beta} e^{\frac{i}{\hbar}\alpha\hat{x}} e^{\frac{i}{\hbar}\beta\hat{p}} d\alpha d\beta = i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \delta'(\alpha) e^{\frac{i}{\hbar}\alpha\hat{x}} d\alpha = \hat{x} \end{aligned} \quad (6.14)$$

Stejný postup lze aplikovat i na hybnost p . Výsledek (6.13) nás může vést k domněnce, že fyzikální veličině $F(x, p)$ náleží v tomto pojetí funkce $F(x, p)$ téhož tvaru. Je to opravdu tak, ukažme si to na příkladu energie klasického harmonického oscilátoru. Zobecnění pro libovolnou funkci pak bude evidentní. Při výpočtu budeme používat předchozí postupy.

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left(\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega \hat{x}^2 \right) e^{-\frac{i}{\hbar}(\alpha\hat{x} + \beta\hat{p})} \right) &= \frac{e^{\frac{i\hbar}{2}\alpha\beta}}{2\pi\hbar} \cdot \\ \left(\frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} p^2 e^{-\frac{i}{\hbar}\beta p} dp \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha x} dx + \frac{1}{2}m\omega^2 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha x} dx \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}\beta p} dp \right) &= \\ = (-\hbar^2) e^{\frac{i\hbar}{2}\alpha\beta} (2\pi\hbar) \left(\frac{1}{2m} \delta(\alpha) \delta''(\beta) + \frac{1}{2}m\omega^2 \delta''(\alpha) \delta(\beta) \right) \end{aligned} \quad (6.15)$$

A dále

$$\begin{aligned} E(x, p) &= \\ (-\hbar^2) \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i\hbar}{2}\alpha\beta} \left(\frac{1}{2m} \delta(\alpha) \delta''(\beta) + \frac{1}{2}m\omega^2 \delta''(\alpha) \delta(\beta) \right) e^{\frac{i}{\hbar}(\alpha x + \beta p)} d\alpha d\beta &= \\ = -\hbar^2 \left(\frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \delta''(\beta) e^{\frac{i}{\hbar}\beta p} d\beta + \frac{1}{2}m\omega^2 \int_{-\infty}^{\infty} \delta''(\alpha) e^{\frac{i}{\hbar}\alpha x} d\alpha \right) &= \\ = \frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} p^2 \delta(\beta) d\beta + \frac{1}{2}m\omega^2 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \delta(\alpha) d\alpha = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \end{aligned} \quad (6.16)$$

Zajímavá je otázka komutativity dvou funkcí $f(x, p)$, $g(x, p)$. Počítejme součin operátorů \hat{F} a \hat{G} , odpovídajících těmto funkcím podle transformačního pravidla (6.10). Proměnné týkající se operátoru \hat{F} značme s jednou čárkou, proměnné v operátoru \hat{G} očárkujeme dvakrát:

$$\hat{F}\hat{G} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^4} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x', p') e^{-\frac{i}{\hbar}(\alpha' x' + \beta' p')} e^{\frac{i}{2\hbar}(\alpha'' \beta' - \alpha' \beta'')} e^{-\frac{i}{\hbar}(\alpha'' x'' + \beta'' p'')} \cdot g(x'', p'') dx' dx'' dp' dp'' \right) e^{\frac{i}{\hbar}(\alpha \hat{x} + \beta \hat{p})} d\alpha' d\alpha'' d\beta' d\beta'' \quad (6.17)$$

Označili jsme zde $\alpha \equiv \alpha' + \alpha''$, $\beta \equiv \beta' + \beta''$. Prostřední exponenciála v integrandu vnitřního integrálu je důsledkem použití (CBH) vzorce pro součin obou operátorů. Exponenciely v tomto integrandu lze psát ve tvaru

$$e^{-\frac{i}{\hbar}(\alpha' x' + \beta' p')} \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i\hbar}{2} \right)^n \left(\frac{1}{\hbar^2} \right)^n (\alpha'' \beta' - \alpha' \beta'')^n \right) e^{-\frac{i}{\hbar}(\alpha'' x'' + \beta'' p'')} \quad (6.18)$$

Po n -tém derivování (6.18) platí

$$e^{-\frac{i}{\hbar}(\alpha' x' + \beta' p')} \left(\overleftarrow{\partial}_x \overrightarrow{\partial}_{p''} - \overleftarrow{\partial}_{p'} \overrightarrow{\partial}_{x''} \right)^n e^{-\frac{i}{\hbar}(\alpha'' x'' + \beta'' p'')} = e^{-\frac{i}{\hbar}(\alpha' x' + \beta' p')} \left(\frac{1}{\hbar^2} \right)^n (\alpha'' \beta' - \alpha' \beta'')^n e^{-\frac{i}{\hbar}(\alpha'' x'' + \beta'' p'')} \quad (6.19)$$

s tím, že ∂_x , resp. ∂_p značí derivaci podle x , resp. p a šipka směřuje k funkci, na niž tyto operátory působí. Dosadíme teď (6.19) do (6.18):

$$e^{-\frac{i}{\hbar}(\alpha' x' + \beta' p')} e^{\frac{i\hbar}{2} \left(\overleftarrow{\partial}_x \overrightarrow{\partial}_{p''} - \overleftarrow{\partial}_{p'} \overrightarrow{\partial}_{x''} \right)} e^{-\frac{i}{\hbar}(\alpha'' x'' + \beta'' p'')} \quad (6.20)$$

Je vhodné psát (6.17) ve tvaru

$$\hat{F}\hat{G} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^4} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x, p) * g(x, p) e^{-\frac{i}{\hbar}(\alpha x + \beta p)} dx dp \right) e^{\frac{i}{\hbar}(\alpha \hat{x} + \beta \hat{p})} d\alpha d\beta \quad (6.21)$$

kde jsme zavedli tzv. Weylův symbol pro součin funkcí $f(x, p)$ a $g(x, p)$:

$$* \equiv e^{\frac{i\hbar}{2} \left(\overleftarrow{\partial}_x \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_x \right)} \quad (6.22)$$

Je proto na místě upozornit, že součinu dvou operátorů obecně neodpovídá prostý součin příslušných funkcí:

$$\hat{F}\hat{G} \rightarrow f(x, p) * g(x, p) \quad (6.23)$$

Operátor $*$ můžeme rozvinout v řadu

$$* = 1 + \frac{i\hbar}{2} \left(\overleftarrow{\partial}_x \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_x \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{i\hbar}{2} \right)^2 \left(\overleftarrow{\partial}_x \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_x \right)^2 + \dots \quad (6.24)$$

Neobsahují-li funkce $f(x, p)$, $g(x, p)$ smíšené členy xp , je jejich *-součin roven

$$f * g = fg + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{i\hbar}{2}\right)^n \left(\frac{\partial^n f}{\partial x^n} \frac{\partial^n g}{\partial p^n} + (-1)^n \frac{\partial^n g}{\partial x^n} \frac{\partial^n f}{\partial p^n}\right) \quad (6.25)$$

Je-li alespoň jedna z funkcí $f(x, p)$, $g(x, p)$ lineární v x a p a neobsahují-li smíšené členy xp , má jejich *-součin poměrně přívětivý tvar:

$$f * g = fg + \frac{i\hbar}{2} \left(\frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial g}{\partial p} - \frac{\partial g}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial p}\right) = fg + \frac{i\hbar}{2} \{f, g\}_{Poisson} \quad (6.26)$$

$$g * f = gf + \frac{i\hbar}{2} \{g, f\}_{Poisson} = fg - \frac{i\hbar}{2} \{f, g\}_{Poisson} \quad (6.27)$$

Závorky napravo jsou Poissonovy závorky funkcí $f(x, p)$ a $g(x, p)$. Z obou posledních rovnic plyne komutační relace pro tyto dvě funkce:

$$[f(x, p), g(x, p)]_* = i\hbar \{f(x, p), g(x, p)\}_{Poisson} \quad (6.28)$$

Například známá relace mezi operátory souřadnice a hybnosti se v tomto formalismu reprodukuje na očekávaný tvar

$$[x, p]_* = i\hbar \{x, p\}_{Poisson} = i\hbar \quad (6.29)$$

Ještě odvoďme pravidla pro snadnější počítání s *-součinem. Ten totiž obsahuje derivace v exponenciále. Využijeme-li proto identity

$$e^{a\partial_x} f(x, p) = f(x + a, p) \quad (6.30)$$

$$e^{a\partial_p} f(x, p) = f(x, p + a) \quad (6.31)$$

můžeme tento součin počítat podle následujících vzorců:

$$f(x, p) * g(x, p) = f(x, p) g\left(x - \frac{i\hbar}{2} \overleftarrow{\partial}_p, p + \frac{i\hbar}{2} \overleftarrow{\partial}_x\right) \quad (6.32)$$

$$f(x, p) * g(x, p) = f\left(x + \frac{i\hbar}{2} \overrightarrow{\partial}_p, p - \frac{i\hbar}{2} \overrightarrow{\partial}_x\right) g(x, p) \quad (6.33)$$

$$f(x, p) * g(x, p) = f\left(x, p - \frac{i\hbar}{2} \overrightarrow{\partial}_x\right) g\left(x, p + \frac{i\hbar}{2} \overleftarrow{\partial}_x\right) \quad (6.34)$$

$$f(x, p) * g(x, p) = f\left(x + \frac{i\hbar}{2} \overrightarrow{\partial}_p, p\right) g\left(x - \frac{i\hbar}{2} \overleftarrow{\partial}_p, p\right) \quad (6.35)$$

Součin * dvou funkcí na fázovém prostoru xp evidentně není komutativní. A jak jsme se už zmínili, každá z těchto funkcí, odpovídající dané fyzikální veličině, má tvar shodný s tím, který má tato veličina v klasické mechanice. Jinak řečeno, pracujeme s klasickými prvky na "neklasickém", popř. "deformovaném" fázovém prostoru. Ona "deformace" je způsobena nekomutativitou operace * na tomto prostoru. To nás vede k poznatku, že kvantovou mechaniku můžeme chápat jako mechaniku na nekomutativním fázovém prostoru. Jako bychom se řídili klasickými zákony a kvantověmechanické "odlišnosti" by byly způsobeny zmíněnou deformací.

Dále si můžeme všimnout, že v klasické limitě $\hbar \rightarrow 0$ přechází *-součin na prostý (komutativní) součin a deformace fázového prostoru mizí.

Naskýtá se otázka, jakým prostředkem budeme popisovat stavy systému, co bude analogií vlnové funkce, popř. matice hustoty. Máme předpis (6.9) o tom, kterak k operátoru zavést funkci na (dvourozměrném) fázovém prostoru. Nabízí se proto možnost stejným způsobem zkonstruovat funkci k operátoru matice hustoty čistého stavu. Proto se omezíme na systémy s nedegenerovanými spektry vlastních hodnot, což je i případ stacionárních stavů lineárního harmonického oscilátoru. Můžeme očekávat, že bude mít nalezená funkce specifické vlastnosti, a budeme na ni klást určité požadavky, jako např. její normalizaci.

Nechť je tedy $\hat{\varrho} = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ matice hustoty čistého stavu. Stopu operátoru v reprezentaci stacionárních stavů

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left(|\Psi\rangle\langle\Psi| e^{-\frac{i}{\hbar}(\alpha\hat{x} + \beta\hat{p})} \right) &= e^{\frac{i}{2\hbar}\alpha\beta} \langle\Psi| e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha\hat{x}} e^{-\frac{i}{\hbar}\beta\hat{p}} |\Psi\rangle = \\ &= e^{\frac{i}{2\hbar}\alpha\beta} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x') e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha x'} e^{-\beta\frac{\partial}{\partial x'}} \Psi(x') dx' \end{aligned} \quad (6.36)$$

dosadíme do obecné formule (6.9):

$$\tilde{\varrho}(x, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{2\hbar}\alpha\beta} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x') e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha x'} \Psi(x' - \beta) dx' \right) e^{\frac{i}{\hbar}(\alpha x + \beta p)} d\alpha d\beta \quad (6.37)$$

a dostáváme

$$\begin{aligned} \tilde{\varrho}(x, p) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x') \Psi(x' - \beta) e^{\frac{i}{\hbar}\beta p} \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar}\alpha(\frac{\beta}{2} + x - x')} d\alpha \right) d\beta dx' = \\ &= 2 \int_{-\infty}^{\infty} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x' - \beta) e^{\frac{i}{\hbar}\beta p} \delta(\beta - 2(x' - x)) d\beta \right) \Psi^*(x') dx' = \\ &= 2 \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(2x - x') e^{\frac{2i}{\hbar}(x' - x)p} \Psi^*(x') dx' \end{aligned} \quad (6.38)$$

Kvůli větší přehlednosti zavedme novou proměnnou

$$y = \frac{2}{\hbar}(x - x') \quad (6.39)$$

čímž se (6.38) zjednoduší:

$$\tilde{\varrho}(x, p) = \hbar \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipy} \Psi^*(x - \frac{\hbar}{2}y) \Psi(x + \frac{\hbar}{2}y) dy \quad (6.40)$$

Funkce $\tilde{\varrho}(x, p)$ ale není normalizovaná na jedničku:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\varrho}(x, p) dx dp &= 2\pi\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \delta(y) \Psi^*(x - \frac{\hbar}{2}y) \Psi(x + \frac{\hbar}{2}y) dx dy = \\ &= 2\pi\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) \Psi(x) dx = 2\pi\hbar \end{aligned} \quad (6.41)$$

Původní operátor matice hustoty proto nahradíme

$$\hat{\varrho} \longrightarrow \frac{\tilde{\varrho}}{2\pi\hbar}$$

Nově přiřazená funkce již zřejmě je normovaná na jedničku:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varrho(x, p) dx dp = 1 \quad (6.42)$$

Stav v kvantové mechanice popsany vlnovou funkcí $\Psi(x)$ je v "deformované mechanice" dán funkcí typu

$$\varrho(x, p) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipy} \Psi^*(x - \frac{\hbar}{2}y) \Psi(x + \frac{\hbar}{2}y) dy \quad (6.43)$$

zvanou obvykle Wignerova funkce (WF). V klasické limitě $\hbar \rightarrow 0$ udává rozdělení hustoty pravděpodobnosti výskytu v tomto stavu.

Její integrací přes p , resp. x obdržíme pravděpodobnostní rozdělení souřadnice, resp. impulsu v tomto stavu:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varrho(x, p) dp = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(y) \Psi^*(x - \frac{\hbar}{2}y) \Psi(x + \frac{\hbar}{2}y) dy = |\Psi(x)|^2 \quad (6.44)$$

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \varrho(x, p) dx &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipy} \Psi^*(x - \frac{\hbar}{2}y) \Psi(x + \frac{\hbar}{2}y) dy dx = \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(u) \Psi(v) e^{\frac{i}{\hbar}pv} e^{-\frac{i}{\hbar}pv} du dv = \left| \widetilde{\Psi(p)} \right|^2 \end{aligned} \quad (6.45)$$

Uved'me dva příklady Wignerovy funkce:

(1) WF pro vlastní funkce souřadnice odpovídající vlastní hodnotě x' , tj. pro $\Psi_{x'}(x) = \delta(x - x')$:

$$\begin{aligned} \varrho_{x'}(x, p) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipy} \delta(x - x' - \frac{\hbar}{2}y) \delta(x - x' + \frac{\hbar}{2}y) dy = \\ &= \frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipy} \delta(2(x - x') - \hbar y) \delta(2(x - x') + \hbar y) dy = \\ &= \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{2i}{\hbar}(x-x')p} \delta(x - x') = \frac{1}{2\pi} \delta(x - x') \end{aligned} \quad (6.46)$$

(2) WF pro vlastní funkce hybnosti (v x -reprezentaci) s vlastní hodnotou p' , tj. pro $\Psi_{p'}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}p'x}$:

$$\begin{aligned} \varrho_{p'}(x, p) &= \frac{\hbar}{(2\pi\hbar)^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipy} e^{-\frac{i}{\hbar}p'(x - \frac{\hbar}{2}y)} e^{\frac{i}{\hbar}p'(x + \frac{\hbar}{2}y)} dy = \\ &= \frac{\hbar}{(2\pi\hbar)^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p'-p)y} dy = \frac{1}{2\pi\hbar} \delta(p - p') \end{aligned} \quad (6.47)$$

6.2 Rovnice pro vlastní hodnoty

Rovnice

$$\hat{F} |\Psi\rangle = F |\Psi\rangle \quad (6.48)$$

je ekvivalentní rovnici

$$f(x, p) * \varrho_F(x, p) = F \varrho_F(x, p) \quad (6.49)$$

protože stačí jen násobit (6.48) vektorem $\langle \Psi |$ zprava. Rovnici $\langle \Psi | \hat{F} = F \langle \Psi |$, hermitovsky sdruženou s (6.48) (\hat{F} je hermitovský, tedy platí $\hat{F}^\dagger = \hat{F}$), vynásobme vektorem $|\Psi\rangle$ zprava a po převedení do našeho jazyka obdržíme

$$\varrho_F(x, p) * f(x, p) = F \varrho_F(x, p) \quad (6.50)$$

Z (6.49) a (6.50) plyne mimo jiné pro "komutátor":

$$[f(x, p), \varrho_F(x, p)]_* = f(x, p) * \varrho_F(x, p) - \varrho_F(x, p) * f(x, p) = 0 \quad (6.51)$$

Funkce $f(x, p)$ tedy komutuje se svou vlastní WF. WF $\varrho_F(x, p)$ musí ještě splňovat podmínku

$$\varrho_F(x, p) * \varrho_F(x, p) = \varrho_F(x, p) \quad (6.52)$$

Jako příklad řešme rovnici

$$x * \varrho_{x'}(x, p) = x' \varrho_{x'}(x, p) \quad (6.53)$$

tj. hledíme vlastní funkce souřadnice x . Přitom víme, že bychom tak měli dospět k výsledku (6.46). Při řešení rovnice (6.53) využijeme pravidlo (6.33):

$$\begin{aligned} x * \varrho_{x'}(x, p) &= \left(x + \frac{i\hbar}{2} \overleftarrow{\partial}_p\right) \varrho_{x'}(x, p) = x' \varrho_{x'}(x, p) \\ \frac{\partial \varrho_{x'}(x, p)}{\partial p} &= \frac{2i}{\hbar} (x - x') \varrho_{x'}(x, p) \end{aligned} \quad (6.54)$$

Řešení této parciální diferenciální rovnice je tvaru

$$\varrho_{x'}(x, p) = a_{x'}(x - x') e^{\frac{2i}{\hbar}(x-x')p} \quad (6.55)$$

Funkci $a_{x'}(x - x')$ můžeme určit buď z podmínky (6.52), nebo jednodušeji z (6.51):

$$\begin{aligned} \varrho_{x'}(x, p) * x &= x' \varrho_{x'}(x, p) \\ \varrho_{x'}(x, p) \left(x - \frac{i\hbar}{2} \overleftarrow{\partial}_p\right) &= x' \varrho_{x'}(x, p) \\ \varrho_{x'}(x, p) (x - x') &= \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial \varrho_{x'}(x, p)}{\partial p} \\ \varrho_{x'}(x, p) (x - x') &= -\varrho_{x'}(x, p) (x - x') \\ 2a_{x'}(x - x') \cdot (x - x') &= 0 \\ a_{x'}(x - x') &= \frac{1}{2\pi} \delta(x - x') \end{aligned} \quad (6.56)$$

Koeficient $\frac{1}{2\pi}$ byl určen tak, aby byla $\varrho_{x'}(x, p)$ normovaná. Dosazením (6.56) do (6.55) (exponenciální člen v (6.55) se tak zruší) dostaneme vlastní WF shodnou s dříve určenou podle (6.46):

$$\varrho_{x'}(x, p) = \frac{1}{2\pi} \delta(x - x') \quad (6.57)$$

Počítáme-li rozdělení hybnosti (integrací přes x), dospějeme ke konstantní hodnotě $\frac{1}{2\pi}$. To je v souladu s relacemi neurčitosti; neurčitost hybnosti ve stavech s ostrou hodnotou souřadnice je nekonečně veliká. Problém nastane u rozdělení souřadnice. Formálně ho můžeme psát jako $\delta^2(x - x')$, jenže tento výraz není dobře definován¹. Vraťme se proto k rovnici (6.53). V kvantové mechanice to vede k rovnici $\hat{x} |x'\rangle \langle x'| = x' |x'\rangle \langle x'|$, v níž $|x'\rangle \langle x'| = \delta(x - x')$ je (neexistující) stav s ostrou hodnotou souřadnice x' . V uvedené rovnici se však vyskytuje operátor $|x'\rangle \langle x'|$, který není dobře definován². Tento problém můžeme odstranit pomocí "korigující" funkce $\zeta(x')$; operátor $\int_{-\infty}^{\infty} \zeta(x') |x'\rangle \langle x'| dx'$ už má dobrý smysl.

Vedlejší podmínku (6.52) v tomto případě také nelze uvažovat v tomto tvaru. Výrazu nalevo odpovídá v kvantové mechanice operátor, který nemá dobrý smysl: $|x'\rangle \langle x'| x'\rangle \langle x'| = \delta(0) |x'\rangle \langle x'|$ (tento výraz je třeba chápat v uvozovkách). Je vidět, že podmínka (6.52) pro matici hustoty $\hat{\varrho} = |\Psi\rangle \langle \Psi|$ je korektní, jen pokud platí $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$. To však není u vlastních stavů souřadnice splněno. K ošetření této podmínky počítejme

$$|x'\rangle \langle x'| \cdot |\tilde{x}'\rangle \langle \tilde{x}'| = \delta(x' - \tilde{x}') |x'\rangle \langle x'| = \delta(x' - \tilde{x}') |x'\rangle \langle x'| \quad (6.58)$$

(čárka značí vlastní hodnotu souřadnice).

Přeformulovaná podmínka (6.52) pro vlastní WF souřadnice je proto

$$\varrho_{x'}(x, p) * \varrho_{\tilde{x}'}(x, p) = \delta(x' - \tilde{x}') \varrho_{x'}(x, p) \quad (6.59)$$

Hledejme znovu předexponenciální funkci $a_{x'}(x - x')$ v (6.55) z podmínky (6.59):

$$\begin{aligned} \delta(x' - \tilde{x}') a_{x'}(x - x') e^{\frac{2i}{\hbar}(x-x')p} &= a_{x'}(x - x') e^{\frac{2i}{\hbar}(x-x')p} * a_{\tilde{x}'}(x - \tilde{x}') e^{\frac{2i}{\hbar}(x-\tilde{x}')p} = \\ &= a_{x'}(x - x') e^{\frac{2i}{\hbar}(x-x')(p - \frac{i\hbar}{2} \bar{\partial}_x)} a_{\tilde{x}'}(x - \tilde{x}') e^{\frac{2i}{\hbar}(x-\tilde{x}')(p + \frac{i\hbar}{2} \bar{\partial}_x)} = \\ &= a_{x'}(x - x') e^{\frac{2i}{\hbar}(x-x')p} e^{-(2x-x'-\tilde{x}')\bar{\partial}_x} a_{\tilde{x}'}(2x - x' - \tilde{x}') e^{\frac{2i}{\hbar}(2x-x'-\tilde{x}')p} = \\ &= a_{x'}(\tilde{x}' - x) e^{\frac{2i}{\hbar}(\tilde{x}'-x)p} a_{\tilde{x}'}(2x - x' - \tilde{x}') e^{\frac{2i}{\hbar}(2x-x'-\tilde{x}')p} \end{aligned}$$

Tedy

$$\delta(x' - \tilde{x}') a_{x'}(x - x') = a_{x'}(\tilde{x}' - x) a_{\tilde{x}'}(2x - x' - \tilde{x}') \quad (6.60)$$

V nově zavedených proměnných $\eta \equiv x - x'$, $\tilde{\eta} \equiv x - \tilde{x}'$ budeme hledat funkci $a(\eta)$ splňující

$$a(-\tilde{\eta}) a(\eta + \tilde{\eta}) = \delta(\tilde{\eta} - \eta) a(\eta) = \delta(\tilde{\eta} - \eta) a(\tilde{\eta}) \quad (6.61)$$

Tato rovnice je splněna pro $a(\eta) = \delta(\eta)$. O tom se přesvědčíme např. integrací obou stran rovnice (6.61) přes proměnnou $\tilde{\eta}$. Na obou stranách pak obdržíme $\delta(\eta)$.

¹Formálně bychom totiž mohli psát " $\delta^2(x - x') = \delta(0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx''$ ".

²Jeho působení na libovolný stav $|\Psi\rangle$ dává stav $|\varphi\rangle = \langle x' | \Psi \rangle |x'\rangle$, který není prvkem Hilbertova prostoru stavů. Nesplňuje totiž podmínku $\langle \varphi | \varphi \rangle < \infty$.

Postup nalezení vlastních WF hybnosti zde předvádět nebudeme, protože je včetně výsledků analogický výše uvedenému postupu.

V kvantové mechanice se střední hodnota veličiny $G(x, p)$ v systému, jenž je popsán maticí hustoty $\hat{\rho} = \frac{|\Psi\rangle\langle\Psi|}{2\pi\hbar}$, vypočítá jako stopa³ operátoru $\hat{G}\hat{\rho}$:

$$\bar{G} = \frac{\text{Tr} \left(\hat{G}\hat{\rho} \right)}{\text{Tr} \hat{\rho}} = \text{Tr} \left(\hat{G} |\Psi\rangle\langle\Psi| \right) = \langle\Psi| \hat{G} |\Psi\rangle \quad (6.62)$$

Z tohoto a (6.11) okamžitě plyne pro střední hodnotu veličiny $G(x, p)$

$$\bar{G} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} g(x, p) * \rho(x, p) dx dp \quad (6.63)$$

Pořadí *-násobených funkcí v integrandu (6.63) lze zaměnit, aniž se změní hodnota \bar{G} . To i přesto, že obecně neplatí komutativita obou funkcí vůči *-součinu (pouze pokud je $\rho(x, p)$ vlastní WF-funkcí funkce $f(x, p)$)⁴. Protože ale předpokládáme, že všechny funkce $f(x, p)$ na nekomutativním fázovém prostoru splňují $f(x, p) \rightarrow 0$, je-li $x \rightarrow \pm\infty$ nebo $p \rightarrow \pm\infty$, jsou všechny členy v integrandu (6.63) obsahující alespoň první derivaci (podle x nebo p) po integraci nulové. Střední hodnotu libovolné veličiny $G(x, p)$ tedy spočteme podle jednoduchého vzorce

$$\bar{G} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} g(x, p) \rho(x, p) dx dp \quad (6.64)$$

6.3 Kvantový harmonický oscilátor ve Weylově reprezentaci

6.3.1 Stacionární stavy

K WF stacionárních stavů harmonického oscilátoru dospějeme dvěma způsoby: prostým dosazením vlnových funkcí stacionárních stavů (3.27) do obecného vyjádření (6.43) nebo řešením rovnice (6.49) pro vlastní WF Hamiltonovy funkce $H(x, p)$.

Při prvním postupu dosazujeme (3.27) do (6.43) s využitím substituce

$$x \pm \frac{\hbar}{2}y \longrightarrow \xi \pm \frac{1}{2}\sqrt{m\hbar\omega}y \quad (6.65)$$

takže počítáme integrál

$$\begin{aligned} \rho_n(x, p) &= \frac{1}{2\pi} (n!2^n\sqrt{\pi})^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} H_n\left(\xi - \frac{1}{2}\sqrt{m\hbar\omega}y\right) H_n\left(\xi + \frac{1}{2}\sqrt{m\hbar\omega}y\right) \cdot \\ &\cdot e^{-\frac{1}{2}\left(\xi - \frac{1}{2}\sqrt{m\hbar\omega}y\right)^2} e^{-\frac{1}{2}\left(\xi + \frac{1}{2}\sqrt{m\hbar\omega}y\right)^2} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} dy = \frac{1}{2\pi} (n!2^n\sqrt{\pi})^{-1} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} e^{-\xi^2}. \end{aligned}$$

³Obecně platí, že stopa operátoru nezávisí na volbě reprezentace.

⁴Pro střední hodnotu platí též $\bar{G} = \text{Tr} \left(\hat{\rho}\hat{G} \right)$, přestože oba operátory obecně nekomutují. Komutativita \hat{G} a $\hat{\rho} = \frac{|\Psi\rangle\langle\Psi|}{2\pi\hbar}$ nastane, pokud je $|\Psi\rangle$ vlastní funkcí hermitovského operátoru \hat{G} : $\hat{G}|\Psi\rangle\langle\Psi| = |\Psi\rangle\langle\Psi|\hat{G} = |\Psi\rangle\langle\Psi|\hat{G}$.

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{m\hbar\omega}{4}y^2 - ipy} H_n(\xi - \frac{1}{2}\sqrt{m\hbar\omega}y) H_n(\xi + \frac{1}{2}\sqrt{m\hbar\omega}y) dy \quad (6.66)$$

Integrál napravo obsahující součin Hermiteových polynomů budeme řešit standartním postupem předvedeným v dodatku (7.3) pomocí vytvořující funkce Hermiteových polynomů v proměnných označených takto

$$u = \xi - \frac{1}{2}\sqrt{m\hbar\omega}y \quad (6.67)$$

$$v = \xi + \frac{1}{2}\sqrt{m\hbar\omega}y \quad (6.68)$$

Obě vytvořující funkce jsou

$$S(u, \lambda) = e^{u^2 - (\lambda - u)^2} = e^{2\lambda\xi - \lambda\sqrt{m\hbar\omega}y - \lambda^2} \quad (6.69)$$

$$S(v, \mu) = e^{v^2 - (\mu - v)^2} = e^{2\mu\xi + \mu\sqrt{m\hbar\omega}y - \mu^2} \quad (6.70)$$

Význam koeficientů λ , μ je uveden v dodatku (7.3). Budeme pracovat s integrálem

$$\begin{aligned} I(\lambda, \mu) &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{m\hbar\omega}{4}y^2 - ipy} S(u, \lambda) S(v, \mu) dy = \\ &= e^{2\xi(\lambda + \mu) - \lambda^2 - \mu^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{m\hbar\omega}{4}y^2 - ipy} dy \end{aligned} \quad (6.71)$$

V dodatku (7.2) je dále odvozen Gaussův integrál pro $\alpha \in R$ a $\beta \in C$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha y^2 - \beta y} dy = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{\frac{\beta^2}{4\alpha}} \quad (6.72)$$

Máme tedy

$$\begin{aligned} I(\lambda, \mu) &= 2\sqrt{\frac{\pi}{m\hbar\omega}} e^{2\xi(\lambda + \mu) - \lambda^2 - \mu^2 + \frac{1}{m\hbar\omega} (ip + \sqrt{m\hbar\omega}(\lambda - \mu))^2} = \\ &= 2\sqrt{\frac{\pi}{m\hbar\omega}} e^{2\xi(\lambda + \mu) + \frac{2ip}{\sqrt{m\hbar\omega}}(\lambda - \mu) - 2\lambda\mu - \frac{p^2}{m\hbar\omega}} \end{aligned} \quad (6.73)$$

Odtud vyplývá

$$\begin{aligned} \frac{\partial^n I(\lambda, \mu)}{\partial \lambda^n} &= 2\sqrt{\frac{\pi}{m\hbar\omega}} 2^n \left(\left(\xi + \frac{ip}{\sqrt{m\hbar\omega}} \right) - \mu \right)^n \cdot \\ &\cdot e^{2\lambda \left(\xi + \frac{ip}{\sqrt{m\hbar\omega}} \right) + 2\mu \left(\xi - \frac{ip}{\sqrt{m\hbar\omega}} \right) - 2\lambda\mu - \frac{p^2}{m\hbar\omega}} \end{aligned} \quad (6.74)$$

Zavedeme-li výhodně proměnnou

$$z(\lambda, \mu) = 2 \left(\left(\xi + \frac{ip}{\sqrt{m\hbar\omega}} \right) - \mu \right) \left(\left(\xi - \frac{ip}{\sqrt{m\hbar\omega}} \right) - \lambda \right) \quad (6.75)$$

a využijeme-li jejího rozepsaného tvaru

$$z(\lambda, \mu) = 2 \left(\xi^2 + \frac{p^2}{m\hbar\omega} \right) - 2\mu \left(\xi - \frac{ip}{\sqrt{m\hbar\omega}} \right) - 2\lambda \left(\xi + \frac{ip}{\sqrt{m\hbar\omega}} \right) + 2\lambda\mu \quad (6.76)$$

můžeme (6.74) přepsat do tvaru

$$\frac{\partial^n I(z)}{\partial \lambda^n} = 2\sqrt{\frac{\pi}{m\hbar\omega}} \frac{z(\lambda, \mu)^n}{\left(\left(\xi - \frac{ip}{\sqrt{m\hbar\omega}}\right) - \lambda\right)^n} e^{-z(\lambda, \mu)} e^{2\xi^2 + \frac{p^2}{m\hbar\omega}} \quad (6.77)$$

A dále

$$\begin{aligned} \frac{\partial^{2n} I(z)}{\partial \mu^n \partial \lambda^n} &= \left(\frac{\partial z}{\partial \mu}\right)^n \frac{\partial^n}{\partial z^n} \left(\frac{\partial^n I(z)}{\partial \lambda^n}\right) = \\ &= (-2)^n \left(\left(\xi - \frac{ip}{\sqrt{m\hbar\omega}}\right) - \lambda\right)^n \frac{\partial^n}{\partial z^n} \left(\frac{\partial^n I(z)}{\partial \lambda^n}\right) = \\ &= 2\sqrt{\frac{\pi}{m\hbar\omega}} e^{2\xi^2 + \frac{p^2}{m\hbar\omega}} (-2)^n \frac{\partial^n}{\partial z^n} \left(e^{-z(\lambda, \mu)} z(\lambda, \mu)^n\right) \end{aligned} \quad (6.78)$$

Tento výraz je možno zapsat prostřednictvím tzv. Laguerrových polynomů $L_n(z)$ (viz dodatek (7.4)), splňujících

$$L_n(z) = \frac{1}{n!} e^z \frac{\partial^n}{\partial z^n} (e^{-z} z^n) \quad (6.79)$$

na přehlednější tvar

$$\frac{\partial^{2n} I(z)}{\partial \mu^n \partial \lambda^n} = 2\sqrt{\frac{\pi}{m\hbar\omega}} e^{z(0,0) - \frac{p^2}{m\hbar\omega}} (-2)^n n! e^{-z(\lambda, \mu)} L_n(z(\lambda, \mu)) \quad (6.80)$$

Integrál v (6.66) napravo je roven výrazu

$$\frac{\partial^{2n} I(z)}{\partial \mu^n \partial \lambda^n} \Big|_{\lambda=\mu=0} = 2\sqrt{\frac{\pi}{m\hbar\omega}} (-2)^n n! e^{-\frac{p^2}{m\hbar\omega}} L_n(z(0, 0)) \quad (6.81)$$

Po dosazení (6.81) do (6.66) získáme WF n -tého stacionárního stavu oscilátoru (značme dále $z(0, 0) \equiv z$):

$$\varrho_n(x, p) = \frac{(-1)^n}{\pi\hbar} e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2 - \frac{p^2}{m\hbar\omega}} L_n\left(\frac{2}{\hbar}(m\omega x^2 + \frac{p^2}{m\omega})\right) \quad (6.82)$$

popř.

$$\varrho_n(z) = \frac{(-1)^n}{\pi\hbar} e^{-\frac{z}{2}} L_n(z) \quad (6.83)$$

kde

$$z = \frac{2}{\hbar}(m\omega x^2 + \frac{p^2}{m\omega}) \quad (6.84)$$

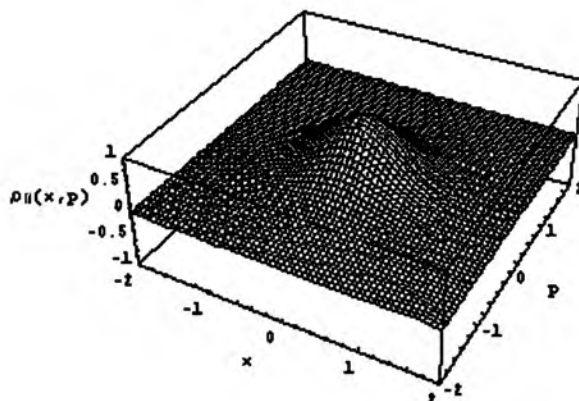
První čtyři Laguerrovy polynomy jsou

$$L_0(z) = 1 \quad (6.85)$$

$$L_1(z) = 1 - z \quad (6.86)$$

$$L_2(z) = 1 - 2z + \frac{z^2}{2} \quad (6.87)$$

$$L_3(z) = 1 - 3z + z^2 - \frac{z^3}{6} \quad (6.88)$$



Obrázek 6.1: Wignerova funkce základního stavu harmonického oscilátoru v závislosti na x a p má charakteristický gaussovský tvar.

Funkce základního stavu je

$$\varrho_0(x, p) = \frac{1}{\pi\hbar} e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2 - \frac{p^2}{m\hbar\omega}} \quad (6.89)$$

Rozdělení souřadnice a hybnosti v základním stavu je

$$w_0(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \varrho_0(x, p) dp = \frac{1}{\pi\hbar} \sqrt{\pi m\hbar\omega} e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} \quad (6.90)$$

$$w_0(p) = \int_{-\infty}^{\infty} \varrho_0(x, p) dx = \frac{1}{\pi\hbar} \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}} e^{-\frac{p^2}{m\hbar\omega}} = \frac{1}{\sqrt{\pi m\hbar\omega}} e^{-\frac{p^2}{m\hbar\omega}} \quad (6.91)$$

To souhlasí s výsledky (3.119) a (3.124).

Na obrázcích 6.1-6.4 jsou zachyceny grafy Wignerových funkcí stacionárních stavů harmonického oscilátoru pro $n = 0, 1, 2, 3$.

Druhý způsob nalezení funkcí $\varrho_n(x, p)$ je řešit Schrödingerovu rovnici:

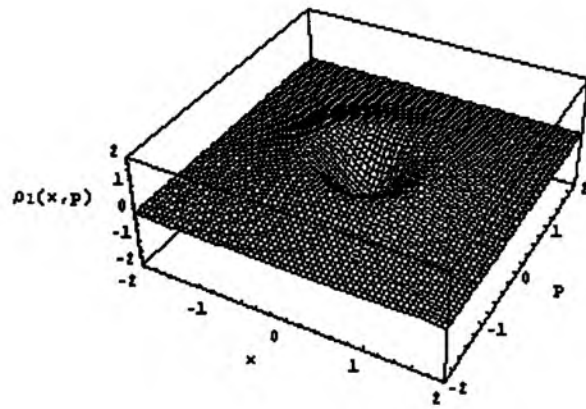
$$H(x, p) * \varrho_n(x, p) = E_n \varrho_n(x, p) \quad (6.92)$$

$$\left(\frac{1}{2m} \left(p - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 \left(x + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} \right)^2 \right) \varrho_n(x, p) = E_n \varrho_n(x, p) \quad (6.93)$$

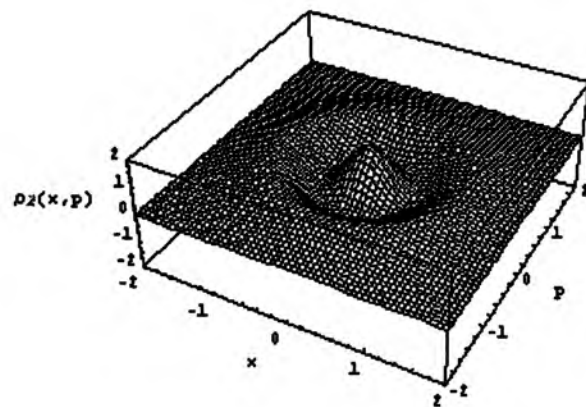
Výraz vlevo má reálnou a imaginární složku, celá rovnice (6.93) se rozpadá na dvě:

$$\frac{\hbar^2}{4} \left(\frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 \frac{\partial^2}{\partial p^2} \right) \varrho_n(x, p) = (H(x, p) - E_n) \varrho_n(x, p) \quad (6.94)$$

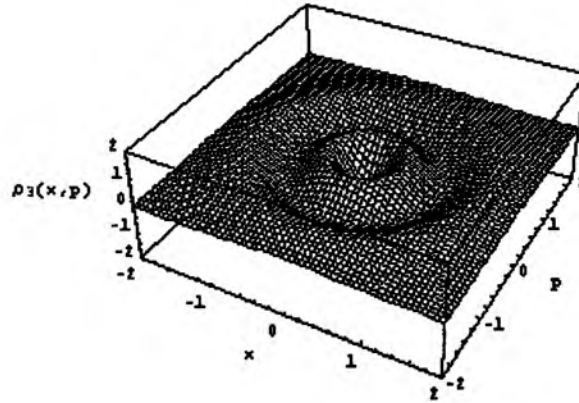
$$\left(\frac{1}{2} m\omega^2 x \frac{\partial}{\partial p} - \frac{1}{2m} p \frac{\partial}{\partial x} \right) \varrho_n(x, p) = 0 \quad (6.95)$$



Obrázek 6.2: Wignerova funkce stacionárního stavu $n = 1$.



Obrázek 6.3: Wignerova funkce stacionárního stavu $n = 2$.



Obrázek 6.4: Wignerova funkce stacionárního stavu $n = 3$.

Obecné řešení rovnice (6.95) je tvaru $\varrho_n(z(x, p))$, kde $z = \frac{2}{\hbar} \left(m\omega x^2 + \frac{p^2}{m\omega} \right)$ a jeho konkrétní tvar je dán rovnicí (6.94). Jelikož

$$\frac{\partial \varrho_n(z)}{\partial x} = \varrho'_n(z) \frac{\partial z}{\partial x} = \frac{4m\omega}{\hbar} x \varrho'_n(z) \quad (6.96)$$

$$\frac{\partial \varrho_n(z)}{\partial p} = \varrho'_n(z) \frac{\partial z}{\partial p} = \frac{4}{m\hbar\omega} p \varrho'_n(z) \quad (6.97)$$

$$\frac{\partial^2 \varrho_n(z)}{\partial x^2} = \varrho''_n(z) \left(\frac{\partial z}{\partial x} \right)^2 + \varrho'_n(z) \frac{\partial^2 z}{\partial x^2} = \left(\frac{4m\omega}{\hbar} \right)^2 x^2 \varrho''_n(z) + \frac{4m\omega}{\hbar} \varrho'_n(z) \quad (6.98)$$

$$\frac{\partial^2 \varrho_n(z)}{\partial p^2} = \varrho''_n(z) \left(\frac{\partial z}{\partial p} \right)^2 + \varrho'_n(z) \frac{\partial^2 z}{\partial p^2} = \left(\frac{4}{m\hbar\omega} \right)^2 p^2 \varrho''_n(z) + \frac{4}{m\hbar\omega} \varrho'_n(z) \quad (6.99)$$

přechází rovnice (6.94) na tvar

$$2 \left(m\omega^2 x^2 + \frac{p^2}{m} \right) \varrho''_n(z) + \hbar\omega \varrho'_n(z) = (H(z) - E_n) \varrho_n(z)$$

$$\hbar\omega (z \varrho''_n(z) + \varrho'_n(z)) = \left(\frac{\hbar\omega}{4} z - E_n \right) \varrho_n(z)$$

$$\left(z \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial}{\partial z} - \frac{z}{4} + \frac{E_n}{\hbar\omega} \right) \varrho_n(z) = 0 \quad (6.100)$$

Zkusme hledat funkci $\varrho_n(z)$ ve tvaru

$$\varrho_n(z) = Q_n e^{-\frac{z}{2}} q_n(z) \quad (6.101)$$

Je

$$\frac{\partial \varrho_n(z)}{\partial z} = Q_n e^{-\frac{z}{2}} \left(q'_n(z) - \frac{1}{2} q_n(z) \right) \quad (6.102)$$

$$\frac{\partial^2 \varrho_n(z)}{\partial z^2} = Q_n e^{-\frac{z}{2}} \left(\frac{1}{4} q_n(z) - q_n'(z) + q_n''(z) \right) \quad (6.103)$$

a po dosazení (6.101), (6.102) a (6.103) do (6.100) máme

$$z \left(\frac{1}{4} q_n(z) - q_n'(z) + q_n''(z) \right) + q_n'(z) - \frac{1}{2} q_n(z) + \left(\frac{E_n}{\hbar\omega} - \frac{z}{4} \right) q_n(z) = 0$$

$$z q_n''(z) + (1-z) q_n'(z) + \left(\frac{E_n}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \right) q_n(z) = 0 \quad (6.104)$$

Řešením této rovnice jsou podle dodatku (7.4) Laguerrovy polynomy $L_n(z)$. Normovací konstanta Q_n v (6.101) vyplývá z podmínky

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{z(x,p)}{2}} L_n(z(x,p)) dx dp = \frac{1}{Q_n} \quad (6.105)$$

Zavedme značení

$$z \equiv r^2 = X^2 + P^2 \quad (6.106)$$

kde

$$X = \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x \quad (6.107)$$

$$P = \sqrt{\frac{2}{m\hbar\omega}} p \quad (6.108)$$

Je potom $dx dp = \frac{\hbar}{2} dX dP$ a integrál (6.105) přejde na tvar

$$\frac{\hbar}{2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}(X^2+P^2)} L_n(r^2(X,P)) dX dP \quad (6.109)$$

Je zřejmě výhodné přejít k polárním souřadnicím:

$$[X, P] \longrightarrow [r, \Theta] \quad (6.110)$$

$$X = r \cos \Theta \quad (6.111)$$

$$P = r \sin \Theta \quad (6.112)$$

Potom můžeme výraz (6.109) přepsat do tvaru

$$\frac{\hbar}{2} \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} e^{-\frac{r^2}{2}} L_n(r^2) r dr d\Theta = \pi \hbar \int_0^{\infty} e^{-\frac{r^2}{2}} L_n(r^2) r dr \quad (6.113)$$

Tento integrál počítejme opět pomocí vytvořující funkce (tentokrát Laguerrových polynomů)

$$S(r^2, \sigma) = \frac{1}{1-\sigma} e^{-\frac{\sigma r^2}{1-\sigma}} \quad (6.114)$$

postupem diskutovaným v dodatku (7.4). Počítáme nejprve

$$I(\sigma) = \frac{\pi \hbar}{1-\sigma} \int_0^{\infty} e^{-\frac{r^2}{2}} e^{-\frac{\sigma r^2}{1-\sigma}} r dr = \frac{\pi \hbar}{1-\sigma} \int_0^{\infty} r e^{-\frac{1+\sigma}{2} r^2} dr =$$

$$= \frac{(-\pi\hbar)}{1-\sigma} \cdot \frac{1-\sigma}{1+\sigma} \left[e^{-\frac{1}{2}\frac{1+\sigma}{1-\sigma}r^2} \right]_{r=0}^{r=\infty} = \frac{\pi\hbar}{1+\sigma} \quad (6.115)$$

A odtud

$$\frac{\partial^n I(\sigma)}{\partial \sigma^n} = \pi\hbar \frac{(-1)^n n!}{(1+\sigma)^{n+1}} \quad (6.116)$$

Integrál v (6.105) je roven

$$\frac{1}{n!} \frac{\partial^n I(\sigma)}{\partial \sigma^n} \Big|_{\sigma=0} = (-1)^n \pi\hbar \quad (6.117)$$

Normovací konstanta proto je

$$Q_n = \frac{(-1)^n}{\pi\hbar} \quad (6.118)$$

A funkce stacionárních stavů jsou stejné jako v (6.83).

Hamiltonovu funkci je též možno vyjádřit ve tvaru

$$H(x, p) = \hbar\omega \left(a^+(x, p) * a(x, p) + \frac{1}{2} \right) \quad (6.119)$$

s kreační

$$a^+(x, p) = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (m\omega x - ip) \quad (6.120)$$

a anihilační funkci

$$a(x, p) = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (m\omega x + ip) \quad (6.121)$$

splňujícími komutační relaci

$$[a(x, p), a^+(x, p)]_* = 1 \quad (6.122)$$

a které zvyšují, resp. snižují o jedničku kvantové číslo stacionárního stavu, popř. stupeň Laguerrova polynomu ve vyjádření WF stacionárního stavu:

$$a^+(x, p) * \varrho_n(x, p) * a(x, p) = (n+1)\varrho_{n+1}(x, p) \quad (6.123)$$

$$a(x, p) * \varrho_n(x, p) * a^+(x, p) = n\varrho_{n-1}(x, p) \quad (6.124)$$

Specielně

$$\begin{aligned} a(x, p) * \varrho_0(x, p) &= \frac{1}{\pi\hbar\sqrt{2m\hbar\omega}} (m\omega x + ip) \cdot \\ &\cdot \left(1 + \frac{i\hbar}{2} \left(\overleftarrow{\partial}_x \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_x \right) \right) e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2 - \frac{p^2}{m\hbar\omega}} = \\ &= \frac{1}{\pi\hbar\sqrt{2m\hbar\omega}} \left(m\omega x + ip + \frac{i\hbar}{2} \left(-\frac{2p}{\hbar} + i\frac{2m\omega}{\hbar} \right) \right) e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2 - \frac{p^2}{m\hbar\omega}} = 0 \end{aligned} \quad (6.125)$$

WF n -tého stavu je generována n -násobným $*$ -součinem kreační funkce $*$ -násobené WF základního stavu:

$$\varrho_n(x, p) = \frac{1}{\sqrt{n!}} a^{+(*n)}(x, p) * \varrho_0(x, p) \quad (6.126)$$

6.3.2 Koherentní stavy

Jsou generovány prostřednictvím rovnice

$$a(x, p) * \varrho_\alpha(x, p) = \alpha \varrho_\alpha(x, p) \quad (6.127)$$

$$\left(m\omega \left(x + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} \right) + i \left(p - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial x} \right) \right) \varrho_\alpha(x, p) = \sqrt{2m\hbar\omega} (\alpha_1 + i\alpha_2) \varrho_\alpha(x, p) \quad (6.128)$$

Oddělíme-li reálnou a imaginární část této rovnice, obdržíme soustavu dvou parciálních diferenciálních rovnic

$$\frac{\partial \varrho_\alpha(x, p)}{\partial x} + 2\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x - \sqrt{2}\alpha_1 \right) \varrho_\alpha(x, p) = 0 \quad (6.129)$$

$$\frac{\partial \varrho_\alpha(x, p)}{\partial p} + \frac{2}{\sqrt{m\hbar\omega}} \left(\frac{p}{\sqrt{m\hbar\omega}} - \sqrt{2}\alpha_2 \right) \varrho_\alpha(x, p) = 0 \quad (6.130)$$

Řešení první, resp. druhé z nich je tvaru

$$\varrho_\alpha(x, p) = C_\alpha^{\text{Re}}(p) e^{-\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x - \sqrt{2}\alpha_1\right)^2} \quad (6.131)$$

$$\varrho_\alpha(x, p) = C_\alpha^{\text{Im}}(x) e^{-\left(\frac{p}{\sqrt{m\hbar\omega}} - \sqrt{2}\alpha_2\right)^2} \quad (6.132)$$

Celkové řešení musí být

$$\varrho_\alpha(x, p) = N_\alpha e^{-\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x - \sqrt{2}\alpha_1\right)^2 - \left(\frac{p}{\sqrt{m\hbar\omega}} - \sqrt{2}\alpha_2\right)^2} \quad (6.133)$$

přičemž normovací konstanta N_α plyne z podmínky

$$\begin{aligned} \frac{1}{N_\alpha} &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x - \sqrt{2}\alpha_1\right)^2} dx \cdot \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\left(\frac{p}{\sqrt{m\hbar\omega}} - \sqrt{2}\alpha_2\right)^2} dp = \\ &= \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}} \sqrt{\pi\hbar m\omega} = \pi\hbar \end{aligned} \quad (6.134)$$

WF koherentního stavu $|\alpha\rangle$ má tedy vyjádření

$$\varrho_\alpha(x, p) = \frac{1}{\pi\hbar} e^{-\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x - \sqrt{2}\alpha_1\right)^2 - \left(\frac{p}{\sqrt{m\hbar\omega}} - \sqrt{2}\alpha_2\right)^2} \quad (6.135)$$

Ve speciálním případě $\alpha = 0$ přechází na funkci (6.89) základního stavu.

Můžeme k ní samozřejmě dospět i pouhým dosazením vlnové funkce koherentního stavu $|\alpha\rangle$ v posunuté proměnné $\xi \pm \frac{1}{2}\sqrt{m\hbar\omega}y$:

$$\begin{aligned} \Psi_\alpha(\xi \pm \frac{1}{2}\sqrt{m\hbar\omega}y) &= \pi^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} e^{-\frac{1}{2}(\xi \pm \frac{1}{2}\sqrt{m\hbar\omega}y)^2} \cdot \\ &\cdot \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\alpha}{\sqrt{2}} \right)^n \frac{1}{n!} H_n \left(\xi \pm \frac{1}{2}\sqrt{m\hbar\omega}y \right) \end{aligned} \quad (6.136)$$

do obecného tvaru Wignerovy funkce (6.43). Sumu napravo v (6.136) sečteme pomocí vytvořující funkce pro Hermiteův polynom $H_n(\xi \pm \frac{1}{2}\sqrt{m\hbar\omega}y)$:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\alpha}{\sqrt{2}}\right)^n \frac{1}{n!} H_n \left(\xi \pm \frac{1}{2}\sqrt{m\hbar\omega}y\right) = e^{\sqrt{2}\alpha(\xi \pm \frac{1}{2}\sqrt{m\hbar\omega}y) - \frac{\alpha^2}{2}} \quad (6.137)$$

Odpovídající WF je

$$\begin{aligned} \varrho_{\alpha}(\xi, p) &= \\ \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipy} \Psi_{\alpha}^* \left(\xi - \frac{1}{2}\sqrt{m\hbar\omega}y\right) \Psi_{\alpha} \left(\xi + \frac{1}{2}\sqrt{m\hbar\omega}y\right) \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} dy &= \\ = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-|\alpha|^2 - \xi^2 + \sqrt{2}\xi(\alpha + \alpha^*) - \frac{1}{2}(\alpha^2 + \alpha^{*2})} &= \\ \cdot \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{4}m\hbar\omega y^2 - i(p - \sqrt{2}\sqrt{m\hbar\omega}\alpha_2)y} dy &= \\ = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \sqrt{\frac{4\pi}{m\hbar\omega}} e^{-|\alpha|^2 - \xi^2 + 2\sqrt{2}\xi\alpha_1 + \alpha_2^2 - \alpha_1^2} e^{-\frac{1}{m\hbar\omega}(p - \sqrt{2}\sqrt{m\hbar\omega}\alpha_2)^2} & \quad (6.138) \end{aligned}$$

$$\varrho_{\alpha}(\xi, p) = \frac{1}{\pi\hbar} e^{-(\xi - \sqrt{2}\alpha_1)^2 - (\frac{p}{\sqrt{m\hbar\omega}} - \sqrt{2}\alpha_2)^2} \quad (6.139)$$

Je zde $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$, tato funkce je tedy shodná s výše spočtenou funkcí (6.135).

6.3.3 Časová závislost

Operátory fyzikálních veličin v Heisenbergově reprezentaci závisí na čase. Jejich vývoj je dán pohybovou rovnicí (3.138). Protože jsme každému operátoru přiřadili funkci, budou tyto funkce také na čase závislé. Přitom můžeme vycházet z obecných poznatků o časové závislosti stavů oscilátoru a pouze je přepsat ve formalismu deformované mechaniky.

Časová závislost funkce $f(x, p, t)$ tak bude dána vztahem (jde o analogii vztahu (3.137)):

$$f(x, p, t) = u_*^{-1}(x, p, t) f(x, p, 0) u_*(x, p, t) \quad (6.140)$$

s evoluční funkcí

$$\begin{aligned} u_*(x, p, t) &= e_*^{-\frac{it}{\hbar}H(x,p)} = 1 - \frac{it}{\hbar}H(x,p) + \left(\frac{it}{\hbar}\right)^2 H(x,p) * H(x,p) - \\ &- \left(\frac{it}{\hbar}\right)^3 H(x,p) * H(x,p) * H(x,p) + \dots \quad (6.141) \end{aligned}$$

Počítat $f(x, p, t)$ přímo ze vzorce (6.140) je složité, protože obsahuje nekonečný součet *součinů. Využijme proto vztahu (3.138) přepsaného do naší symboliky:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{df(x, p, t)}{dt} &= [f(x, p, t), H(x, p)]_* = \\ &= f(x, p, t) * H(x, p) - H(x, p) * f(x, p, t) ; f(x, p, 0) = f(x, p) \quad (6.142) \end{aligned}$$

Pro WF typu (6.43) jde o analogii kvantové Liouvilleovy rovnice pro časový vývoj matice hustoty.

Rozepíšme pravou stranu výrazu (6.142):

$$\begin{aligned}
 & f(x, p, t) * H(x, p) - H(x, p) * f(x, p, t) = \\
 & f(x, p, t) \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i\hbar}{2} \right)^n \sum_{k=0}^n \left(\overleftarrow{\partial}_x \overrightarrow{\partial}_p \right)^{n-k} (-1)^k \left(\overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_x \right)^k \right) H(x, p) - \\
 & - H(x, p) \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i\hbar}{2} \right)^n \sum_{k=0}^n \left(\overleftarrow{\partial}_x \overrightarrow{\partial}_p \right)^{n-k} (-1)^k \left(\overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_x \right)^k \right) f(x, p, t) \quad (6.143)
 \end{aligned}$$

Uvažujme Hamiltonovu funkci $H(x, p)$ harmonického oscilátoru a obecné funkce $f(x, p, t)$. Tento hamiltonián obsahuje pouze kvadratické členy v x a p a neobsahuje smíšené členy. Nenulové členy v sumě (6.143) mohou být pro každé n takové, jež mají $k = 0$ nebo $k = n$. Snadno nahlédneme, že v tomto případě hamiltoniánu harmonického oscilátoru lze tuto sumu psát ve tvaru

$$\begin{aligned}
 \frac{df(x, p, t)}{dt} &= \{f(x, p, t), H(x, p)\}_{\text{Pois}} = \\
 &= \frac{\partial f(x, p, t)}{\partial x} \frac{\partial H(x, p)}{\partial p} - \frac{\partial f(x, p, t)}{\partial p} \frac{\partial H(x, p)}{\partial x} \quad (6.144)
 \end{aligned}$$

Specielně

$$\frac{dx(t)}{dt} = \frac{\partial H(x, p)}{\partial p} \quad (6.145)$$

$$\frac{dp(t)}{dt} = -\frac{\partial H(x, p)}{\partial x} \quad (6.146)$$

To jsou klasické Hamiltonovy rovnice; uvedené funkce splňují zákony klasické mechaniky a $x(t)$ a $p(t)$ jsou proto klasické trajektorie na (komutativním, popř. "nedeformovaném") fázovém prostoru. Po dosazení obou rovnic do (6.144) dostaneme

$$\frac{df(x, p, t)}{dt} = \frac{\partial f(x, p, t)}{\partial x} \frac{dx(t)}{dt} + \frac{\partial f(x, p, t)}{\partial p} \frac{dp(t)}{dt} \quad (6.147)$$

z čehož bezprostředně vyplývá charakter závislosti funkce $f(x, p, t)$ harmonického oscilátoru na čase (nezávisí explicitně na čase):

$$f(x, p, t) = f(x(t), p(t), 0) \quad (6.148)$$

kde $x(t)$ a $p(t)$ jsou řešeními (6.145) a (6.146), v případě harmonického oscilátoru tedy

$$x(t) = x \cos \omega t - \frac{p}{m\omega} \sin \omega t \quad (6.149)$$

$$p(t) = p \cos \omega t + m\omega x \sin \omega t \quad (6.150)$$

přičemž $x(0) = x$, $p(0) = p$.

Ilustrujme předchozí výklad na obecném koherentním stavu (6.135). Dosadíme do něj (6.149) a (6.150):

$$\varrho_{\alpha}(x, p, t) = \varrho_{\alpha}(x(t), p(t), 0) =$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{\pi\hbar} e^{-\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\left(x \cos \omega t - \frac{p}{m\omega} \sin \omega t\right) - \sqrt{2}\alpha_1\right)^2 - \left(\frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}\left(p \cos \omega t + m\omega x \sin \omega t\right) - \sqrt{2}\alpha_2\right)^2} = \\
&= \frac{1}{\pi\hbar} e^{-2|\alpha|^2} e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2 - \frac{p^2}{m\hbar\omega}} e^{2\sqrt{2}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x(\alpha_1 \cos \omega t + \alpha_2 \sin \omega t)} \cdot \\
&\quad e^{2\sqrt{2}\frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}p(-\alpha_1 \sin \omega t + \alpha_2 \cos \omega t)} \tag{6.151}
\end{aligned}$$

To je obecný tvar WF koherentního stavu oscilátoru, určeného komplexním číslem $\alpha = \alpha_1 + i\alpha_2$.

Střední hodnota souřadnice bude

$$\begin{aligned}
\overline{x_\alpha(t)} &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} x \rho_\alpha(x, p, t) dx dp = \\
&= \frac{1}{\pi\hbar} e^{-2|\alpha|^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-ax^2 - bp^2 + c(t)x + d(t)p} dx dp \tag{6.152}
\end{aligned}$$

kde jsme označili

$$a = \frac{m\omega}{\hbar} \tag{6.153}$$

$$b = \frac{1}{m\hbar\omega} \tag{6.154}$$

$$c(t) = 2\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} (\alpha_1 \cos \omega t + \alpha_2 \sin \omega t) \tag{6.155}$$

$$d(t) = 2\sqrt{\frac{2}{m\hbar\omega}} (-\alpha_1 \sin \omega t + \alpha_2 \cos \omega t) \tag{6.156}$$

abychom mohli použít vzorce odvozeného v dodatku (7.2):

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-ax^2 - bp^2 + cx + dp} dx dp = \frac{1}{\sqrt{ab}} \frac{\pi c}{2a} e^{\frac{1}{4}\left(\frac{c^2}{a} + \frac{d^2}{b}\right)} \tag{6.157}$$

Dostáváme tak

$$\begin{aligned}
\overline{x_\alpha(t)} &= e^{-2|\alpha|^2} e^{2\left((\alpha_1 \cos \omega t + \alpha_2 \sin \omega t)^2 + (-\alpha_1 \sin \omega t + \alpha_2 \cos \omega t)^2\right)} \cdot \\
&\cdot \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} (\alpha_1 \cos \omega t + \alpha_2 \sin \omega t) = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} (\alpha_1 \cos \omega t + \alpha_2 \sin \omega t) \tag{6.158}
\end{aligned}$$

Zapišme komplexní číslo α v goniometrickém tvaru $\alpha = |\alpha| e^{i\varphi}$, tj. $\alpha_1 = |\alpha| \cos \varphi$, $\alpha_2 = |\alpha| \sin \varphi$. Potom

$$\overline{x_\alpha(t)} = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} |\alpha| \cos(\omega t - \varphi) \tag{6.159}$$

To je správný výsledek, jak se můžeme přesvědčit pohledem na (3.242). Analogickým postupem můžeme spočítat i střední hodnotu hybnosti. O něco složitější je výpočet střední hodnoty energie v koherentním stavu $\rho_\alpha(x, p, t)$. Zachovejme přitom výše uvedené značení:

$$\begin{aligned}
\overline{E_\alpha} &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} H(x, p) \rho_\alpha(x, p, t) dx dp = \\
&= \frac{1}{\pi\hbar} e^{-2|\alpha|^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right) e^{-ax^2 - bp^2 + c(t)x + d(t)p} dx dp =
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{\pi\hbar} e^{-2|\alpha|^2} \frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2+c(t)x} dx \int_{-\infty}^{\infty} p^2 e^{-bp^2+d(t)p} dp + \\
&+ \frac{1}{\pi\hbar} e^{-2|\alpha|^2} \frac{1}{2} m\omega^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-bp^2+d(t)p} dp \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-ax^2+c(t)x} dx
\end{aligned} \tag{6.160}$$

V dodatku (7.2) jsou odvozeny integrály

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2+cx} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{\frac{c^2}{4a}} \tag{6.161}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-ax^2+cx} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{\frac{c^2}{4a}} \left(\frac{1}{2a} + \frac{c^2}{4a^2} \right) \tag{6.162}$$

jejichž aplikací na (6.160) obdržíme

$$\begin{aligned}
\overline{E_\alpha} &= \frac{1}{\pi\hbar} e^{-2|\alpha|^2} \sqrt{\frac{\pi}{a}} \sqrt{\frac{\pi}{b}} e^{\frac{1}{4} \left(\frac{c^2}{a} + \frac{d^2}{b} \right)} \cdot \\
&\cdot \left(\frac{1}{2m} \left(\frac{1}{2b} + \frac{d^2}{4b^2} \right) + \frac{1}{2} m\omega^2 \left(\frac{1}{2a} + \frac{c^2}{4a^2} \right) \right) = \\
&= \frac{1}{2m} \left(\frac{m\hbar\omega}{2} + 2m\hbar\omega (\alpha_1^2 \sin^2 \omega t - \alpha_1\alpha_2 \sin 2\omega t + \alpha_2^2 \cos^2 \omega t) \right) + \\
&+ \frac{1}{2} m\omega^2 \left(\frac{\hbar}{2m\omega} + 2\frac{\hbar}{m\omega} (\alpha_1^2 \cos^2 \omega t + \alpha_1\alpha_2 \sin 2\omega t + \alpha_2^2 \sin^2 \omega t) \right) = \\
&= \frac{\hbar\omega}{2} + \hbar\omega (\alpha_1^2 + \alpha_2^2) = \hbar\omega \left(|\alpha|^2 + \frac{1}{2} \right)
\end{aligned} \tag{6.163}$$

Také tento výsledek souhlasí s dříve spočtenou hodnotou (3.237).

Na závěr si znázorníme stavy harmonického oscilátoru do přehledné tabulky

Stav: Určen	Stacionární $ n\rangle$ <i>přirozeným číslem n</i>	→	Základní $n = \alpha = 0$	←	Koherentní $ \alpha\rangle$ <i>komplexním číslem α</i>
Je řešením rovnice	$\hat{H} n\rangle = E_n n\rangle$	→	$\hat{H} 0\rangle = E_0 0\rangle$ $\hat{a} 0\rangle = 0$	←	$\hat{a} \alpha\rangle = \alpha \alpha\rangle$
Obecný tvar	$ n\rangle = (n!2^n\sqrt{\pi})^{-\frac{1}{2}}$ $\cdot H_n(\xi) \exp(-\frac{\xi^2}{2})$ $\xi = x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$	→	$ 0\rangle = \pi^{-\frac{1}{4}} \exp(-\frac{\xi^2}{2})$	←	$ \alpha\rangle = \exp(-\frac{1}{2} \alpha ^2)$ $\cdot \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} n\rangle$
Wignerova funkce	$\varrho_n(z) = \frac{(-1)^n}{\pi\hbar} e^{-\frac{z}{\hbar}} L_n(z)$ $z = \frac{2}{\hbar}(m\omega x^2 + \frac{p^2}{m\omega})$	→	$\varrho_0(z) = \frac{1}{\pi\hbar} e^{-\frac{z}{\hbar}}$	←	$\varrho_\alpha(x, p) = \frac{1}{\pi\hbar}$ $\cdot e^{-(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x - \sqrt{2}\alpha_1)^2}$ $\cdot e^{-(\frac{p}{\sqrt{m\hbar\omega}} - \sqrt{2}\alpha_2)^2}$ <i>Střední hodnoty sou- řadnice a hybnosti se mění harmonicky v čase s amplitudami</i>
Střední hodnoty veličin	<i>Nezávisí na čase</i> $\bar{x}_n = \bar{p}_n = 0$ $\bar{E}_n = E_n$	→	<i>Nezávisí na čase</i> $\bar{x}_0 = \bar{p}_0 = 0$ $\bar{E}_0 = E_0$	←	$ \alpha \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}$, resp. $ \alpha \sqrt{2m\hbar\omega}$. <i>Střední energie je konst. :</i> $\bar{E}_\alpha = \hbar\omega \left(\alpha ^2 + \frac{1}{2}\right)$ <i>Relaci uzavřenosti:</i>
Splňují	<i>Relaci uzavřenosti:</i> $\sum_n n\rangle \langle n = \hat{1}$				<i>Relaci uzavřenosti:</i> $\frac{1}{\pi} \int \alpha\rangle \langle \alpha d^2\alpha = \hat{1}$

Kapitola 7

Dodatky

7.1 Diferenciální rovnice

Obecné řešení diferenciální rovnice s časově nezávislými reálnými koeficienty:

$$\frac{d^{(n)}x(t)}{dt^n} + a_1 \frac{d^{(n-1)}x(t)}{dt^{n-1}} + \dots + a_{n-1} \frac{dx(t)}{dt} + a_n x(t) = b(t) \quad (7.1)$$

je tvaru

$$x(t) = x_0(t) + \sum_{i=1}^n c_i y_i(t) \quad (7.2)$$

kde $x_0(t)$ je partikulární řešení rovnice (7.1), $\{y_i(t)\}_{i=1}^n$ systém nezávislých řešení téže rovnice s nulovou pravou stranou (tzv. fundamentální systém) a c_i obecně komplexní koeficienty určené počátečními podmínkami

$$\left\{ x^{(i)}(0) = x_{i0} \right\}_{i=1}^n \quad (7.3)$$

K rovnici (7.1) přísluší tzv. charakteristická rovnice proměnné λ :

$$\lambda^n + a_1 \lambda^{n-1} + \dots + a_{n-1} \lambda + a_n = 0 \quad (7.4)$$

Jsou-li její kořeny λ_i navzájem různé, je fundamentální systém

$$\left\{ e^{\lambda_i t} \right\}_{i=1}^n \quad (7.5)$$

Bliže se věnujme speciálnímu případu diferenciální rovnice druhého řádu s nulovou pravou stranou:

$$\frac{d^2x(t)}{dt^2} + a_1 \frac{dx(t)}{dt} + a_2 x(t) = 0 \quad (7.6)$$

Je-li řešením příslušné charakteristické rovnice $\lambda^2 + a_1 \lambda + a_2 = 0$ dvojice komplexně sdružených čísel $\lambda_{1,2} = \alpha \pm i\beta$, je obecné řešení rovnice (7.6) tvaru

$$x(t) = c_1 e^{(\alpha+i\beta)t} + c_2 e^{(\alpha-i\beta)t} = e^{\alpha t} (C_1 \cos \beta t + iC_2 \sin \beta t) \quad (7.7)$$

(označili jsme zde $C_{1,2} = c_1 \pm c_2$).

Speciálním (a velmi důležitým) případem rovnice (7.6) je rovnice typu

$$\frac{d^2 x(t)}{dt^2} + \omega^2 x(t) = 0 \quad (7.8)$$

Zde je $\alpha = 0$, $\beta = \omega$, tj. jejím řešením bude rovnice tvaru

$$x(t) = C_1 \cos \omega t + i C_2 \sin \omega t \quad (7.9)$$

Konstanty C_1 a C_2 jsou v obou případech dány počátečními podmínkami $x(0) = x_0$, $\frac{dx}{dt}(0) = x'_0$.

7.2 Gaussovy a jiné integrály

V textu využíváme určitých integrálů těchto typů:

(1) Gaussovy integrály:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}, \quad \alpha > 0 \quad (7.10)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^3}}, \quad \alpha > 0 \quad (7.11)$$

Obě funkce v integrandu jsou sudé, proto integrály z nich v mezích od 0 do $\pm\infty$ mají poloviční hodnotu než v (7.10) nebo (7.11).

(2)

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2 - i\beta x} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{-\frac{\beta^2}{4\alpha}}, \quad \alpha > 0, \beta \in (-\infty, \infty) \quad (7.12)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2 - \beta x} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{\frac{\beta^2}{4\alpha}}, \quad \alpha > 0, \beta \in (-\infty, \infty) \quad (7.13)$$

Důkaz. V prvním případě využijeme substituce $u = x + \frac{i\beta}{2\alpha}$. Je potom $\alpha u^2 + \frac{\beta^2}{4\alpha} = \alpha x^2 + i\beta x$, $du = dx$. Podle (7.10) je vyšetřovaný integrál roven

$$e^{-\frac{\beta^2}{4\alpha}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha u^2} du = e^{-\frac{\beta^2}{4\alpha}} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \quad (7.14)$$

Podobně ve druhém případě užijeme substituce $u = x + \frac{\beta}{2\alpha}$ a postupujeme stejně.

(3)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\alpha x^2 - \beta p^2 + \gamma x + \delta p} dx dp = \frac{1}{\sqrt{\alpha\beta}} \frac{\pi\gamma}{2\alpha} e^{\frac{1}{4}\left(\frac{\gamma^2}{\alpha} + \frac{\delta^2}{\beta}\right)},$$

$$\alpha, \beta > 0, \gamma, \delta \in (-\infty, \infty) \quad (7.15)$$

Důkaz. Tento integrál je roven součinu integrálů

$$\int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\alpha x^2 + \gamma x} dx \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta p^2 + \delta p} dp \quad (7.16)$$

Druhý z nich je podle (7.13) roven $\sqrt{\frac{\pi}{\beta}} e^{\frac{\beta^2}{4\beta}}$. První rozepíšeme :

$$e^{\frac{\gamma^2}{4\alpha}} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \left(x - \frac{\gamma}{2\alpha}\right) e^{-\alpha\left(x - \frac{\gamma}{2\alpha}\right)^2} dx + \frac{\gamma}{2\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha\left(x - \frac{\gamma}{2\alpha}\right)^2} dx \right) = \frac{\gamma}{2\alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{\frac{\gamma^2}{4\alpha}} \quad (7.17)$$

v němž je první integrál v závorce nulový (po substituci $u = x - \frac{\gamma}{2\alpha}$ totiž v integrandu obdržíme lichou funkci) a druhý je podle (7.10) roven $\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$.

(4)

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2 - \beta x} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{\frac{\beta^2}{4\alpha}} \left(\frac{1}{2\alpha} + \frac{\beta^2}{4\alpha^2} \right), \quad \alpha > 0, \beta \in (-\infty, \infty) \quad (7.18)$$

Důkaz.

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2 - \beta x} dx &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\left(x + \frac{\beta}{2\alpha}\right)^2 - \frac{\beta}{\alpha} x - \frac{\beta^2}{4\alpha^2} \right) e^{-\alpha\left(x + \frac{\beta}{2\alpha}\right)^2 + \frac{\beta^2}{4\alpha}} dx = \\ &= e^{\frac{\beta^2}{4\alpha}} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \left(x + \frac{\beta}{2\alpha}\right)^2 e^{-\alpha\left(x + \frac{\beta}{2\alpha}\right)^2} dx - \right. \\ &\quad \left. - \frac{\beta}{\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\alpha\left(x + \frac{\beta}{2\alpha}\right)^2} dx - \frac{\beta^2}{4\alpha^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha\left(x + \frac{\beta}{2\alpha}\right)^2} dx \right) \end{aligned} \quad (7.19)$$

Oba krajní integrály jsou Gaussovy a jsou rovny $\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^3}}$, resp. $\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$. Prostřední je podle výpočtu v (3) roven

$$e^{\frac{\beta^2}{4\alpha}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2 - \beta x} dx = -\frac{\beta}{2\alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \quad (7.20)$$

Vyšetřovaný integrál je pak roven

$$e^{\frac{\beta^2}{4\alpha}} \left(\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^3}} + \frac{\beta^2}{2\alpha^2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} - \frac{\beta^2}{4\alpha^2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \right) = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{\frac{\beta^2}{4\alpha}} \left(\frac{1}{2\alpha} + \frac{\beta^2}{4\alpha^2} \right) \quad (7.21)$$

7.3 Hermiteovy polynomy

Rovnici

$$\frac{d^2 f(z)}{dz^2} - 2z \frac{df(z)}{dz} + (\lambda - 1) f(z) = 0 \quad (7.22)$$

vyhovují tzv. Hermiteovy polynomy $H_n(z)$, ($n = 0, 1, 2, \dots$) splňující

$$H_n(z) = (-1)^n e^{z^2} \frac{d^n}{dz^n} e^{-z^2} \quad (7.23)$$

Hermiteův polynom n -tého stupně splňuje následující rovnice:

$$H_n(-z) = (-1)^n H_n(z) \quad (7.24)$$

$$\frac{d^2 H_n(z)}{dz^2} - 2z \frac{dH_n(z)}{dz} + 2n H_n(z) = 0 \quad (7.25)$$

$$z H_n(z) = n H_{n-1}(z) + \frac{1}{2} H_{n+1}(z) \quad (7.26)$$

$$\frac{dH_n(z)}{dz} = 2nH_{n-1}(z) \quad (7.27)$$

Hermiteovy polynomy vyhovují relacím ortogonality:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} H_n(z) H_m(z) dz = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{mn} \quad (7.28)$$

Při výpočtu řady integrálů z výrazů obsahujících Hermiteovy polynomy se s výhodou využívá tzv. vytvořující funkce:

$$S(z, \sigma) \equiv e^{z^2 - (\sigma - z)^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(z)}{n!} \sigma^n \quad (7.29)$$

Zřejmě platí

$$H_n(z) = \left. \frac{\partial^n S(z, \sigma)}{\partial \sigma^n} \right|_{\sigma=0} \quad (7.30)$$

Při integraci výrazu obsahujícího Hermiteův polynom proto postupujeme tak, že nejprve spočteme integrál $I(\sigma)$, který získáme integrací výrazu, v němž byla provedena záměna $H_n(z) \rightarrow S(z, \sigma)$. Hledaný integrál je pak roven výrazu

$$\left. \frac{\partial^n I(\sigma)}{\partial \sigma^n} \right|_{\sigma=0} \quad (7.31)$$

Uveďme ještě tvar prvních šesti Hermiteových polynomů:

$$H_0(z) = 1 \quad (7.32)$$

$$H_1(z) = 2z \quad (7.33)$$

$$H_2(z) = 4z^2 - 2 \quad (7.34)$$

$$H_3(z) = 8z^3 - 12z \quad (7.35)$$

$$H_4(z) = 16z^4 - 48z^2 + 12 \quad (7.36)$$

$$H_5(z) = 32z^5 - 160z^3 + 120z \quad (7.37)$$

7.4 Laguerrovy polynomy

Rovnice

$$z \frac{d^2 f(z)}{dz^2} + (1 - z) \frac{df(z)}{dz} - \lambda f(z) = 0 \quad (7.38)$$

má právě jedno řešení vyhovující podmínce $f(0) = 1$, a to tzv. Laguerrovy polynomy, jež splňují

$$L_n(z) = \frac{1}{n!} e^z \frac{d^n}{dz^n} (e^{-z} z^n) \quad (7.39)$$

popř.

$$L_n(z) = \sum_{k=0}^n (-1)^k \binom{n}{n-k} \frac{z^k}{k!} \quad (7.40)$$

Vytvořující funkce pro Laguerrovy polynomy je

$$S(z, \sigma) \equiv \frac{1}{1-\sigma} e^{-\frac{z\sigma}{1-\sigma}} = \sum_{n=0}^{\infty} L_n(z) \sigma^n \quad (7.41)$$

Při integraci Laguerrových polynomů postupujeme podobně jako v případě Hermiteových polynomů s tím, že výsledek je v tomto případě (vzhledem k sumě (7.41)) roven

$$\frac{1}{n!} \frac{\partial^n I(\sigma)}{\partial \sigma^n} \Big|_{\sigma=0} \quad (7.42)$$

První čtyři Laguerrovy polynomy jsou

$$L_0(z) = 1 \quad (7.43)$$

$$L_1(z) = 1 - z \quad (7.44)$$

$$L_2(z) = 1 - 2z + \frac{z^2}{2} \quad (7.45)$$

$$L_3(z) = 1 - 3z + z^2 - \frac{z^3}{6} \quad (7.46)$$

7.5 Fourierovy transformace a Diracova δ - funkce

K jednodimenzionální vlnové funkci $\Psi(x)$ je její Fourierova transformace $\widetilde{\Psi}(p)$ definována s touto konvencí

$$\widetilde{\Psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}px} \Psi(x) dx \quad (7.47)$$

Inverzní transformace je

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar}px} \widetilde{\Psi}(p) dp \quad (7.48)$$

Říkáme že funkce $\widetilde{\Psi}(p)$ je Fourierovým obrazem funkce $\Psi(x)$.

Klíčová pro naše další úvahy je transformace δ -funkce. Z její definice

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0) f(x) dx = f(x_0) \quad (7.49)$$

plyne, že jejím Fourierovým obrazem je konstanta:

$$\widetilde{\Psi}_{\delta}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}px} \delta(x - x_0) dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar}px_0} \quad (7.50)$$

Inverzní transformace je

$$\delta(x - x_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar}px} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar}px_0} dp = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar}p(x-x_0)} dp \quad (7.51)$$

popř.

$$\delta(x - x_0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-x_0)} dk \quad (7.52)$$

Uvedme některé vztahy týkající se δ -funkce

$$\delta(c(x - x_0)) = \frac{1}{|c|} \delta(x - x_0), \quad c \in R \quad (7.53)$$

specielně

$$\delta(-x) = \delta(x) \quad (7.54)$$

$$g(x)\delta(x - x_0) = g(x_0)\delta(x - x_0) \quad (7.55)$$

(poslední vzorec se dokáže integrací a přihlédnutím k definici (7.49))

Ještě se nám bude hodit n -tá derivace funkce (7.48):

$$\Psi^{(n)}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar}px} p^n \widetilde{\Psi}(p) dp \quad (7.56)$$

která pro δ -funkci nabývá tvaru

$$\delta^{(n)}(x - x_0) = \frac{1}{2\pi\hbar} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar}p(x-x_0)} p^n dp \quad (7.57)$$

popř.

$$\delta^{(n)}(x - x_0) = \frac{i^n}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-x_0)} k^n dk \quad (7.58)$$

V kapitole o dráhovém integrálu využíváme limity

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{\pi\alpha}} \exp\left(-\frac{1}{\alpha^2}(x - x_0)\right) = \delta(x - x_0) \quad (7.59)$$

Definujeme ještě Fourierův obraz funkce dvou proměnných $f(x, p)$:

$$\widetilde{f}(\alpha, \beta) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}(\alpha x + \beta p)} f(x, p) dx dp \quad (7.60)$$

Inverzní transformace potom je

$$f(x, p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(\alpha x + \beta p)} \widetilde{f}(\alpha, \beta) d\alpha d\beta \quad (7.61)$$

7.6 Literatura

- [1] Brdička M., Hladík A., *Teoretická mechanika*, Academia, Praha, 1987
- [2] Davydov A.S., *Kvantová mechanika*, Nauka, Moskva, 1973
- [3] Formánek J., *Úvod do kvantové teorie*, Academia, Praha, 1983
- [4] Novotný J., nc25.troja.mff.cuni.cz/ucjf/iso-8859-2/teorie/postscript/text23.ps
- [5] Perelomov A.M., Zel'dovich Y.B., *Quantum Mechanics*
- [6] Zachos C., *Deformation Quantization : Quantum Mechanics lives and works in phase space*,
arXiv: hep-th/0110114v2

[7] Holstein B.R., *The harmonic oscillator propagator*, Am.J.Phys.66(7), July 1998