

České vysoké učení technické v Praze  
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská

**Katedra matematiky**

**Obor: Matematické inženýrství - Matematická fyzika**



**Variace na harmonické téma**  
**Variations on the harmonic theme**

**BAKALÁŘSKÁ PRÁCE**

Vypracoval: Lukáš Vácha  
Vedoucí práce: Ing. Matěj Tušek, Ph.D.  
Rok: 2021





Katedra: fyziky

Akademický rok: 2020/2021

## ZADÁNÍ BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

*Student:* Lukáš Vácha

*Studijní program:* Aplikace přírodních věd

*Obor:* Matematické inženýrství, zaměření Matematická fyzika

*Název práce:* Variace na harmonické téma  
(česky)

*Název práce:* Variations on the harmonic theme  
(anglicky)

### *Pokyny pro vypracování:*

Harmonický oscilátor je zásadním modelem jak klasické tak kvantové fyziky. Libovolný dostatečně hladký potenciál lze totiž na okolí lokálního minima aproximovat právě harmonickým potenciálem. Zároveň se jedná o jeden z mála analyticky řešitelných modelů. Existuje však i řada komplikovanějších explicitně neřešitelných systémů, které lze pro změnu efektivně popsat pomocí jistých variací harmonického oscilátoru (jehož frekvence se například skokově změní). Úkolem studenta bude:

- 1) seznámit se se základními pojmy a výsledky teorie samosdružených neomezených operátorů se zaměřením na schrödingerovské operátory,
- 2) prostudovat vybrané variace kvantového harmonického oscilátoru, zejména potom provést spektrální analýzu odpovídajících hamiltoniánů.

*Doporučená literatura:*

- [1] G. Teschl: *Mathematical Methods in Quantum Mechanics*, American Mathematical Society, 2009
- [2] F.A. Berezin, M.A. Shubin: *The Schrödinger Equation*, Kluwer Academic Publishers, 1991
- [3] P. Dean: *The constrained quantum mechanical harmonic oscillator*, *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* 62, 1966
- [4] P.D. Hislop, N. Popoff, N. Raymond, M.P. Sundquist: *Band functions in the presence of magnetic steps*, *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences* 26, 2016
- [5] V. Strauss, M. Winklmeier: *On the one-dimensional harmonic oscillator with a singular perturbation*, preprint: <https://arxiv.org/abs/1506.06264>, 2015

*Jméno a pracoviště vedoucího bakalářské práce:*


Ing. Matěj Tušek, Ph.D.

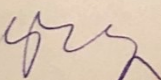
Katedra matematiky, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT v Praze

*Datum zadání bakalářské práce:* 23.10.2020

*Termín odevzdání bakalářské práce:* 07.07.2021

*Doba platnosti zadání je dva roky od data zadání.*

  
.....  
garant oboru

  
.....  
vedoucí katedry



  
.....  
děkan

V Praze dne 23.10.2020

### **Prohlášení**

Prohlašuji, že jsem svou bakalářskou práci vypracoval samostatně a použil jsem pouze podklady (literaturu, projekty, SW atd.) uvedené v příloženém seznamu.

Nemám závažný důvod proti použití tohoto školního díla ve smyslu § 60 zákona č. 121/2000 Sb., o právu autorském, o právech souvisejících s právem autorským a o změně některých zákonů (autorský zákon).

V Praze dne .....

.....

Lukáš Vácha

## **Poděkování**

Děkuji vedoucímu práce Ing. Matěji Tuškovi, Ph.D. za neocenitelné rady a pomoc při tvorbě bakalářské práce.

Lukáš Vácha

*Název práce:*

**Variace na harmonické téma**

*Autor:* Lukáš Vácha

*Studijní program:* Aplikace přírodních věd

*Obor:* Matematické inženýrství - Matematická fyzika

*Druh práce:* Bakalářská práce

*Vedoucí práce:* Ing. Matěj Tušek, Ph.D.

Katedra matematiky, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, České vysoké učení technické v Praze

*Abstrakt:* Tato práce se zabývá lineárním harmonickým oscilátorem v klasické a zejména v kvantové mechanice. Dále zkoumá kvantově-mechanické modely s podobným potenciálem. Obsahuje také řešení spekter těchto modelů, jejich vlastnosti a rozdíly proti harmonickému oscilátoru.

*Klíčová slova:* kvantový harmonický oscilátor, schrödingerovské operátory, spektrální analýza

*Title:*

**Variations on the harmonic theme**

*Author:* Lukáš Vácha

*Abstract:* The thesis deals with the linear harmonic oscillator in the classical and especially in the quantum mechanics. Further quantum-mechanical models with similar potentials are investigated. In particular, the thesis contains the spectral analysis of these models and their comparison to the standard harmonic oscillator.

*Key words:* quantum harmonic oscillator, Schrödinger's operators, spectral analysis

# Obsah

Seznam obrázků	ix
Úvod	1
<b>1 Fragmenty operátorové analýzy</b>	<b>3</b>
1.1 Základní definice a věty	3
1.2 Blochova teorie	4
<b>2 Lineární harmonický oscilátor v klasické mechanice</b>	<b>7</b>
2.1 Řešení 2. Newtonova zákona	7
2.2 Hamiltonův formalismus	8
<b>3 Lineární harmonický oscilátor v kvantové mechanice</b>	<b>9</b>
3.1 Spektrum a vlastní funkce Hamiltoniánu	10
3.2 Samosdruženost Hamiltoniánu	11
3.3 Obecné řešení bezčasové Schrödingerovy rovnice	12
<b>4 Kvantový LHO s platem okolo nuly</b>	<b>13</b>
4.1 Samosdruženost Hamiltoniánu	14
4.2 Řešení bezčasové Schrödingerovy rovnice a spektrum Hamiltoniánu	14
4.2.1 Kvadratická integrabilita vlastních funkcí	15
4.2.2 Podmínky napojení řešení na hranicích intervalů	16
4.3 Rovnice na spektrum Hamiltoniánu	16
4.4 Vlastnosti spektra	17
4.5 Poruchová teorie	17
4.5.1 Taylorův rozvoj do 1. řádu	17
4.5.2 Taylorův rozvoj funkce do 2. řádu	18
4.5.3 Porucha jako střední hodnota poruchy Hamiltoniánu	19
<b>5 Potenciál s různou frekvencí na poloosách</b>	<b>21</b>
5.1 Fyzikální motivace	21
5.2 Spektrální analýza	22
<b>6 Periodický potenciál</b>	<b>25</b>
6.1 Spektrální analýza	25
6.1.1 Závislost parametrů $a, \omega$	27
6.1.2 Derivace výsledné funkce energie	28
6.2 Alternativní postup hledání spektra	28
<b>Závěr</b>	<b>29</b>
<b>Bibliografie</b>	<b>31</b>
<b>Přílohy</b>	<b>33</b>
A Koefficient $\lambda_n''(0, \omega(2n+1))$ v Taylorově rozvoji 2. řádu z kapitoly 4.5.2	33
B Porovnání funkce $\lambda_0$ z kapitoly 4 numerickým výpočtem a Taylorovým rozvojem do 2. řádu pro různé hodnoty $\omega$	34
C Graf závislosti $\lambda(\omega_+)$ z kapitoly 5, pro různé hodnoty $\omega_-$	35
D Graf závislosti energie $\lambda(q)$ z kapitoly 6 na kvazihybnosti $q$ pro hodnotu $a = 7,5$	36



# Seznam obrázků

2.1	Pohyb LHO ve fázovém prostoru . . . . .	8
4.1	Tvar potenciálu s platem okolo nuly pro $\omega = 1, a = 1$ . . . . .	13
4.2	porovnání funkce $\lambda_0(a)$ numerickým výpočtem a Taylorovým rozvojem do 1. řádu pro $\omega = 1$ . . . . .	18
4.3	porovnání funkce $\lambda_0(a)$ numerickým výpočtem a Taylorovým rozvojem do 2. řádu pro $\omega = 1$ . . . . .	19
5.1	Zkoumaný potenciál $V(x)$ , pro $\omega_- = 1$ a $\omega_+ = 2$ . . . . .	21
5.2	graf závislosti $\lambda(\omega_+)$ , pro $\omega_- = 1$ . . . . .	23
6.1	Graf závislosti energie $\lambda(q)$ na kvazihybnosti $q$ pro $a = 1,5$ . . . . .	27



# Úvod

Lineární harmonický oscilátor (LHO) je důležitým modelem nejen v klasické, ale i v kvantové mechanice. V klasické mechanice popisuje v určitém přiblížení několik fyzikálních problémů, jako těleso na pružině nebo matematické kyvadlo. [1]

V kvantové mechanice je LHO o to důležitější, že jako jeden z mála modelů je analyticky řešitelným. Kromě toho má několik dalších významných vlastností: čistě bodové, nedegenerované spektrum, jež lze odvodit algebraicky, vlastní vektory tvoří ortonormální (ON), spočetnou bázi Hilbertova prostoru. [2]

Důležitost kvadratického potenciálu spočívá v jeho univerzalitě. Jakýkoli hladký potenciál se dá v okolí jeho lokálního minima aproximovat právě potenciálem LHO, totiž jeho Taylorovým rozvojem do 2. řádu.

Energie LHO je dána kinetickou a potenciální energií. Kinetická energie hmotného bodu je:  $T = \frac{p^2}{2M}$ , kde  $p$  je hybnost hmotného bodu a  $M$  jeho hmotnost. Potenciální energie je kvadratická v poloze, má tvar:  $V = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}M\omega^2x^2$ , zde  $k$  udává tuhost pružiny,  $\omega$  je úhlová frekvence LHO. Tento potenciál můžeme různými způsoby modifikovat.

První zkoumanou modifikací je oddálení působení potenciálu od nuly, to znamená vytvoření symetrického okolí nuly, kde dodefinujeme potenciál nulou a jinde definujeme spojitě, kvadraticky. Další úpravou je různá hodnota frekvence  $\omega$  pro kladné a záporné polohy. Tento případ by se mohl například využít pro popis spektra elektromagnetické interakce v [3]. Můžeme také zúžit kvadratický potenciál na konečný interval a na zbytku reálných čísel položit roven nekonečnu.

$$V_I(x) = \begin{cases} +\infty; & x < x_0 \\ \frac{1}{2}M\omega^2x^2; & x > x_0 \end{cases} \quad V_{II}(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}M\omega^2x^2; & |x| < x_0 \\ +\infty; & |x| > x_0 \end{cases}$$

Spektra Hamiltoniánů s potenciály  $V_I, V_{II}$  nalezneme v [4]. Nekonečný potenciál se realizuje volbou Hilbertova prostoru spolu s Dirichletovu podmínkou v hraničních bodech. Další možností je periodicky rozšířit potenciál mimo základní interval, tím se zabýváme dále v této práci. Periodický potenciál může simulovat například krystal. Kromě již zmíněných aplikací modeloval LHO také elektrony dielektrika v Lorenzově teorii interakce pevné látky se zářením, a to už před vznikem kvantové mechaniky. Také energii záření ve vakuu lze formálně popsat souborem neinteragujících LHO. [5]



# Kapitola 1

## Fragmenty operátorové analýzy

Možnými hodnotami pozorovatelných v kvantové mechanice jsou elementy spektra samosdruženého operátoru na Hilbertově prostoru, z tohoto důvodu je operátorová analýza (zejména spektrální analýza) důležitým matematickým aparátem kvantové mechaniky. Zde se zmíníme o nejdůležitějších výsledcích pro aplikaci na LHO a další zkoumané operátory v této práci.

### 1.1 Základní definice a věty

**Definice 1.1.1** (Sdružený operátor). Nechť  $\hat{A}$  je lineární operátor na Hilbertově prostoru  $\mathcal{H}$ , pak  $\psi \in \text{Dom } \hat{A}^*$  právě, když existuje  $\psi^* \in \mathcal{H}$  takové, že  $\forall \varphi \in \mathcal{H} : \langle \psi | \hat{A}\varphi \rangle = \langle \psi^* | \varphi \rangle$ . Potom  $\psi^* = \hat{A}^*\psi$  a  $\hat{A}^*$  je k  $\hat{A}$  sdružený.

$\hat{A}^*$  se značí také  $\hat{A}^\dagger$ .

**Definice 1.1.2** (Symetrický operátor).  $\hat{A}$  lineární operátor na  $\mathcal{H}$  je symetrický právě tehdy, když  $\text{Dom } \hat{A} \subset \text{Dom } \hat{A}^*$  a  $\hat{A} = \hat{A}^*$  na  $\text{Dom } \hat{A}$ .

**Definice 1.1.3** (Samosdružený operátor).  $\hat{A}$  lineární operátor na  $\mathcal{H}$  je samosdružený právě tehdy, když  $\hat{A}$  je symetrický a  $\text{Dom } \hat{A} = \text{Dom } \hat{A}^*$ .

**Definice 1.1.4** (Spektrum operátoru). Spektrum operátoru  $\hat{A}$ , je množina

$$\sigma(\hat{A}) = \{\lambda \in \mathbb{C} \mid (\hat{A} - \lambda\hat{I})^{-1} \notin \mathcal{B}(\mathcal{H})\}.$$

Spektrum dělíme na 3 disjunktní části:

$$\sigma(\hat{A}) = \sigma_p(\hat{A}) \cup \sigma_c(\hat{A}) \cup \sigma_r(\hat{A})$$

1. Bodové spektrum:

$$\lambda \in \sigma_p(\hat{A}) \Leftrightarrow (\hat{A} - \lambda\hat{I}) \text{ není injektivní.}$$

2. Spojité spektrum:

$$\lambda \in \sigma_c(\hat{A}) \Leftrightarrow (\hat{A} - \lambda\hat{I}) \text{ je injektivní, ale není surjektivní a } \overline{\text{Ran}(\hat{A} - \lambda\hat{I})} = \mathcal{H}.$$

3. Reziduální spektrum:

$$\lambda \in \sigma_r(\hat{A}) \Leftrightarrow (\hat{A} - \lambda\hat{I}) \text{ je injektivní, ale není surjektivní a } \overline{\text{Ran}(\hat{A} - \lambda\hat{I})} \neq \mathcal{H}.$$

**Tvrzení 1.** Spektrum je uzavřená množina.

*Důkaz.* Nalezneme jako v [2, věta 3.6.7]. □

**Tvrzení 2.** Reziduální část spektra je prázdná u samosdružených operátorů.

*Důkaz.* Viz v [2, věta 5.6.2]. □

**Tvrzení 3.** Necht  $\hat{A}$  je samosdružený ( $\hat{A} = \hat{A}^*$ ) lineární operátor na  $\mathcal{H}$ . Pak  $\sigma(\hat{A}) \subset \mathbb{R}$ .

*Důkaz.* Viz [6, věta 3.3.6], případně [2]. □

**Definice 1.1.5** (Esenciální a diskrétní spektrum). Esenciální spektrum samosdruženého operátoru  $\hat{A}$  (značeno  $\sigma_{ess.}$ ) je spektrum  $\hat{A}$  bez izolovaných vlastních hodnot konečné násobnosti.

Diskrétní spektrum je tvořeno izolovanými vlastními hodnotami konečné násobnosti.

Spektrum je tedy disjunktním sjednocením esenciálního a diskrétního spektra. Označíme:

$$U(\psi_1, \dots, \psi_n) = \left\{ \psi \in \text{Dom}(\hat{A}) \mid \|\psi\| = 1; \psi \in \text{span}\{\psi_1, \dots, \psi_n\}^\perp \right\}$$

**Tvrzení 4** (Min-Max). Necht  $\hat{A}$  je samosdružený operátor se zdola omezenou kvadratickou formou.  $E_1 \leq E_2 \leq E_3 \leq \dots < \inf \sigma_{ess.}(\hat{A})$ . Potom pro tyto hodnoty diskrétního spektra platí

$$E_n = \sup_{\psi_1, \dots, \psi_{n-1}} \inf_{\psi \in U(\psi_1, \dots, \psi_{n-1})} \langle \psi | \hat{A} \psi \rangle.$$

*Důkaz.* Viz [7, Theorem 4.10] □

**Definice 1.1.6** (Relativní omezenost). Operátor  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$  je relativně omezený s relativní mezí  $a$  právě tehdy, když  $\text{Dom} \hat{H}_0 \subset \text{Dom} \hat{H}'$  a existují  $a, b \geq 0$  takové, že ( $\forall \psi \in \text{Dom} \hat{H}_0$ )

$$\|\hat{H}'\psi\|^2 \leq a\|\hat{H}_0\psi\|^2 + b\|\psi\|^2$$

**Tvrzení 5** (Kato-Rellich). Necht  $\hat{H}_0$  samosdružený operátor,  $\hat{H}'$  symetrický, relativně omezený vůči  $\hat{H}_0$  s relativní mezí menší než 1. Potom  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$  je samosdružený na  $\text{Dom} \hat{H}_0$ .

*Důkaz.* Nalezneme v [7, Theorem 6.4.] nebo také v [8]. □

## 1.2 Blochova teorie

Blochova teorie se zabývá operátory s periodickou částí – Hamiltoniány s periodickým potenciálem. Zde uvedeme nejdůležitější výsledky z [8, Kapitola 2.8.].

Hamiltonián tvaru:

$$\hat{H} = -\frac{d^2}{dx^2} + \hat{V}(x),$$

kde  $V$  je reálná periodická funkce s periodou  $L$ .

$$V(x + L) = V(x); \quad \forall x \in \mathbb{R}$$

Definujeme operátor posunutí:

$$\hat{L}\psi(x) = \psi(x + L)$$

$\hat{H}$  komutuje s  $\hat{L}$ .

$$\hat{H}\psi = \lambda\psi \quad (1.1)$$

Vztah na vlastní čísla Hamiltoniánu (1.1) jako diferenciální rovnice má 2 lineárně nezávislá řešení v  $C^2(\mathbb{R})$ . Prostor řešení je invariantní vůči zobrazení  $\hat{L}$ . Lze tedy najít bázi tohoto prostoru jako vlastní funkce  $\hat{L}$ . Vztah na vlastní čísla  $\hat{L}$  je tvaru:

$$\psi(x + L) = \mu\psi(x)$$

Vlastní číslo  $\mu$  můžeme psát ve tvaru

$$\mu = e^{ipL}$$

pro jisté  $p \in \mathbb{C}$ . Z toho už lze odvodit, že vlastní funkce Hamiltoniánu jsou tvaru:

$$\psi(x) = e^{ipx}u_p(x),$$

kde  $u_p$  je jistá funkce  $L$ -periodická,  $p$  je kvazihybnost, fyzikálně se dá interpretovat jako krystalové vlnové číslo. Tento tvar nazýváme Blochovou vlnou (funkcí). Protože [8, Theorem 2.1] platí právě tehdy, když  $|\mu| = 1$ , parametr  $p$  můžeme uvažovat pouze reálný z intervalu  $p \in (-\frac{\pi}{L}, \frac{\pi}{L}]$ . Po zvolení konkrétní báze vlastních funkcí  $\hat{H}(y_1, y_2)$  lze sestavit takzvanou matici monodromie  $\mathbb{M}$ , což je maticové vyjádření operátoru  $\hat{L}$  právě v bázi  $(y_1, y_2)$ . Z Liouvillový věty víme, že  $\det \mathbb{M} = 1$  nezávisle na  $\lambda$ . Můžeme sestavit charakteristickou rovnici na vlastní čísla  $\mathbb{M}$ :

$$\mu^2 - 2D(\lambda)\mu + 1 = 0 \quad D(\lambda) = \frac{1}{2} \text{Tr}(\mathbb{M})$$

$\lambda$  předpokládáme pouze reálné a tudíž můžou nastat pouze 2 možnosti řešení:

1.  $\mu_1, \mu_2 \in \mathbb{R}$  a  $\mu_1\mu_2 = 1, \mu_1 \neq \pm 1 \Rightarrow \mu_2 \neq \pm 1$
2.  $\mu_1 = \overline{\mu_2}$  a  $|\mu_1| = |\mu_2| = 1$

Ale pouze funkce s  $\mu$  splňujícím 2. bod přispějí do úplného ortogonálního systému. Odtud:

$$\mu_{1,2} = D(\lambda) \pm \sqrt{D^2(\lambda) - 1}$$

Podmínka 2 je splněna, pokud  $|D(\lambda)| \leq 1$ . Platí tedy:

$$\sigma(\hat{H}) \subset \{\lambda \mid |D(\lambda)| \leq 1\} \quad (1.2)$$

Dokonce, jak se ukáže v [8], právě množina (1.2) bude přímo spektrum Hamiltoniánu. Z poruchové teorie víme, že  $\hat{H}$  je samosdružený na definičním oboru volného operátoru. [8]





## Kapitola 2

# Lineární harmonický oscilátor v klasické mechanice

Lineární harmonický oscilátor (LHO) modeluje v klasické mechanice například těleso na pružině, kyvadlo nebo RLC obvod. Jedná se o systém blízký k rovnovážné poloze pod vlivem síly, která se ho do této rovnovážné polohy snaží dostat. Tato síla má tvar:

$$\vec{F} = -k\vec{x},$$

kde  $k$  je tuhost pružiny, případně jinak fyzikálně interpretovatelná reálná konstanta.

### 2.1 Řešení 2. Newtonova zákona

Z 2. Newtonova zákona má pohybová rovnice tvar:

$$m \frac{d^2 \vec{x}}{dt^2} = -k\vec{x}$$

Pro každou složku polohy  $i \in \hat{3}$  řešíme:

$$m\ddot{x}_i + kx_i = 0 \tag{2.1}$$

Jedná se o obyčejnou lineární diferenciální rovnici 2. řádu s charakteristickým polynomem:

$$m\lambda^2 + k = 0$$

Jeho řešení je:

$$\lambda = \pm i \sqrt{\frac{k}{m}}$$

Obecné řešení diferenciální rovnice (2.1) je:

$$x_i(t) = A_1 e^{i\sqrt{\frac{k}{m}}t} + B_1 e^{-i\sqrt{\frac{k}{m}}t} = A_2 \sin\left(\sqrt{\frac{k}{m}}t\right) + B_2 \cos\left(\sqrt{\frac{k}{m}}t\right) = A_3 \cos\left(\sqrt{\frac{k}{m}}t + \varphi_0\right)$$

Tedy sinusoidové kmitání s úhlovou frekvencí  $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ . Z počátečních podmínek vychází konstanty  $A_3$  - amplituda kmitů a  $\varphi_0$  - počáteční fáze.

## 2.2 Hamiltonův formalismus

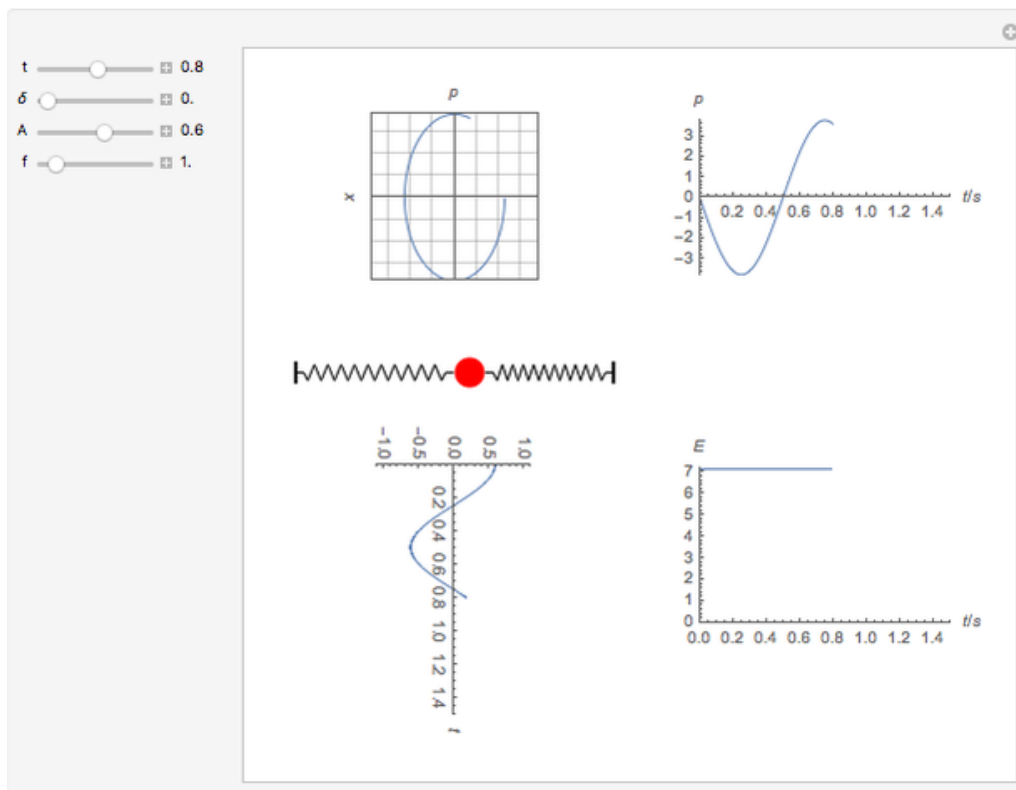
Hamiltonova funkce:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 \quad (2.2)$$

Označíme-li derivaci podle času tečkou nad funkcí, mají pohybové (Hamiltonovy) rovnice tvar:

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m} \qquad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -kx$$

První Hamiltonova rovnice je definice klasické hybnosti  $p = mv = m\dot{x}$ . Druhá Hamiltonova rovnice je ekvivalentní 2. Newtonovu zákonu:  $\dot{p} = m\ddot{x} = -kx$ . [1] Pohyb LHO ve fázovém prostoru je zobrazen na obrázku 2.1 vlevo nahoře.



**Obrázek 2.1:** Pohyb LHO ve fázovém prostoru

**Zdroj:** Wolfram Demonstrations

Přechod ke kvantové mechanice zařídí takzvaný princip korespondence. Hamiltonián v kvantové mechanice je lineární operátor na Hilbertově prostoru.

$$\hat{H} = H(\hat{P}_i, \hat{Q}_i) = H\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_i}, x_i\right)$$

Tedy stejná funkce  $H$  jako v klasické mechanice, kde dosadíme za  $p_i$  operátor hybnosti  $P = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_i}$  a za  $q_i$  operátor násobení danou souřadnicí  $x_i$ .

## Kapitola 3

# Lineární harmonický oscilátor v kvantové mechanice

Vyjdeme-li z Hamiltonovy funkce pro klasický LHO (2.2), využijeme principu korepondence a za parametr  $k$  již dosadíme  $k = M\omega^2$  dostaneme Hamiltonián:

$$\hat{H}_{fyz} = \frac{\hat{P}^2}{2M} + \frac{1}{2}M\omega^2\hat{Q}^2 = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{1}{2}M\omega^2\xi^2.$$

Takto vypadá Hamiltonián jednodimenzionálního LHO v kvantové mechanice. Jedná se o jednu částici na reálné přímce, pracujeme tedy na prostoru  $L^2(\mathbb{R}, dx)$ . Tento prostor má spočetnou ON bázi, například Hermitovy polynomy násobené exponenciálou.

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}, dx) = \overline{\text{span} \left\{ \psi_n \mid \psi_n(x) = H_n(x)e^{-\frac{x^2}{2}} \right\}}; \quad H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$$

Substitucí

$$x = \sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}} \xi \tag{3.1}$$

se lze zbavit fyzikálních konstant. Tato substituce se realizuje unitární transformací  $U$ .

$$(U\psi)(x) = \sqrt[4]{\frac{\hbar}{M\omega}} \psi \left( \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega}} x \right)$$

Takováto transformace bezčasové Schrödingerovy rovnice znamená

$$\frac{\hbar\omega}{2} \hat{H} = U^{-1} \hat{H}_{fyz} U,$$

tj. že  $\hat{H}$  a  $\hat{H}_{fyz}$  jsou unitárně ekvivalentní až na násobení konstantou  $\frac{\hbar\omega}{2}$ . Z toho víme, že mají stejná spektra až na násobení touto konstantou a jsou samosdružené právě současně na  $\text{Dom } \hat{H} = \text{Dom}(\hat{H}_{fyz}U)$

$$\hat{H}_{fyz} = \frac{\hbar\omega}{2} U \hat{H} U^{-1}$$

Fyzikální Hamiltonián lze napsat jako jednoduchou unitární transformací operátoru  $H$ , který má jednoduchý tvar a budeme ho používat dále.

$$\hat{H} = -\frac{d^2}{dx^2} + x^2 \tag{3.2}$$

Pro správné energie  $E$  (řešení rovnice v proměnné  $\xi$ ) musíme řešení  $\lambda$  rovnice s Hamiltoniánem v proměnné  $x$ , tj. (3.2), vynásobit faktorem  $\frac{\hbar\omega}{2}$ .

$$E = \frac{\hbar\omega}{2}\lambda$$

Pokud  $\psi$  je vlastní funkce  $\hat{H}$  k  $\lambda$ , pak  $U\psi$  je vlastní funkce  $\hat{H}_{fyz}$  k  $E$ .

Tento operátor patří do rodiny Schrödingerovských operátorů, tj. má v jednodimenzionálním případě tvar  $\hat{H} = -\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$ . Pro takové operátory s potenciálem splňujícím

$$\lim_{|x| \rightarrow +\infty} V(x) = +\infty$$

existuje spočetná ON báze Hilbertova prostoru  $L^2(\mathbb{R}, dx)$  tvořena jeho vlastními vektory, tedy má pouze diskrétní spektrum. [8, Theorem 3.1]

### 3.1 Spektrum a vlastní funkce Hamiltoniánu

Začneme hledat možné vlastní čísla a vlastní stavy Hamiltoniánu, k jeho samosdrženosti se dostaneme poté. Stacionární Schrödingerova rovnice:

$$\hat{H}_{fyz}\psi = E\psi \quad -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \xi^2} + \frac{1}{2} M^2 \xi^2 \psi = E\psi$$

Po použití substituce (3.1) počítáme:

$$\psi'' - x^2\psi + \frac{\lambda}{\omega}\psi = 0 \quad (3.3)$$

Hledáme řešení v  $L^2$  ( $\psi \in L^2(\mathbb{R}^n, dx)$ ), proto ve tvaru:

$$\psi(x) = u(x)e^{-\frac{x^2}{2}}$$

Funkci  $u$  hledáme jako mocninou řadu: ( $s \in \mathbb{N}_0, a_0 \neq 0$ )

$$u(x) = x^s \sum_{k=0}^{+\infty} a_k x^k$$

Dosažením řady jakožto funkce  $u$  do rovnice (3.3) vede na podmínky:

$$s(s-1) = 0 \quad s(s+1)a_1 = 0 \quad a_{k+2} = \frac{2(k+s)+1-\lambda}{(m+s+2)(m+s+1)} a_k$$

Aby řada  $u$  rostla pomaleji než  $e^{\frac{x^2}{2}}$  a tedy  $\psi \in L^2$ , musí  $\exists N \in \mathbb{N}_0$  tak, že  $\forall n > N; a_n = 0$ , to nastane právě tehdy, když  $N$  je sudé a

$$a_1 = 0 \quad 2(N+s)+1 - \frac{\lambda}{\omega} = 0$$

Potom je funkce  $u$  polynom,  $\deg(u) = N+s = n$ . Pro  $\lambda$  a  $E$  to znamená podmínky:

$$\lambda = \omega(2n+1) \quad E = \frac{1}{2}\hbar\lambda = \frac{1}{2}\hbar\omega(2n+1) = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (3.4)$$

Vlastní čísla  $\hat{H}_{fyz}$  jsou tedy  $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$ ,  $n \in \mathbb{N}_0$ , to jsou možné hodnoty energie oscilátoru. Vlastní vektory (funkce) Hamiltoniánu jsou:

$$\psi_n^{fyz}(x) = \left(\frac{M\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n \left(\sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}} x\right) e^{-\frac{M\omega x^2}{2\hbar}} \quad (3.5)$$

Takto jsou  $\psi_n$  již normalizované k 1 v  $L^2$  normě. Každá energetická hladina je nedegenerovaná, tj. dimenze podprostoru s fixní energií je 1, proto jsou množina vlastních funkcí jakožto i spektrum spočetné. Celkem množina vlastních funkcí tvoří ON bázi  $L^2$ . [9]

## 3.2 Samosdruženost Hamiltoniánu

Hamiltonián musí být kvantově-mechanickou pozorovatelnou (energie), tzn. musí být samosdruženým operátorem.

**Tvrzení 6.** Hamiltonián  $\hat{H}$  je samosdružený na:

$$\text{Dom}(\hat{H}) = \left\{ \psi \in L^2(\mathbb{R}, dx) \left| \sum_{n=0}^{+\infty} \left| \langle \psi | \psi_n \rangle \left( n + \frac{1}{2} \right) \right|^2 < +\infty \right. \right\} \quad (3.6)$$

*Důkaz.* [7] Buď  $\{\psi_n \mid n \in \mathbb{N}_0\}$  ON báze  $L^2$ , tedy  $(\forall \psi \in L^2)(\psi = \sum_{n=0}^{+\infty} \langle \psi | \psi_n \rangle \psi_n)$ .

Každému prvku  $L^2$  je jednoznačně přiřazena posloupnost  $(\langle \psi | \psi_n \rangle)_{n=0}^{+\infty} \in l^2$ . Toto zobrazení nazveme  $U : L^2 \rightarrow l^2$ , kde  $U(\psi) = (\langle \psi | \psi_n \rangle)_{n=0}^{+\infty}$  je unitární (izometrické, bijektivní).

Nový Hamiltonián  $\tilde{H} = U\hat{H}U^{-1} = \text{diag} \left( n + \frac{1}{2} \right)$  je unitárně ekvivalentní  $\hat{H}$ , tj.  $\hat{H} = \hat{H}^* \Leftrightarrow \tilde{H} = \tilde{H}^*$ .  $\tilde{H}$  je samosdružený na  $\text{Dom}(\tilde{H}) = \{a_n \in l^2 \mid a_n \left( n + \frac{1}{2} \right) \in l^2\}$ .

Dokažme, že  $\tilde{H} = \tilde{H}^*$ :

1.  $\tilde{H} \subset \tilde{H}^*$ :

$$\langle a | \tilde{H}b \rangle = \sum_{n=0}^{+\infty} \bar{a}_n \left( n + \frac{1}{2} \right) b_n = \sum_{n=0}^{+\infty} a_n \overline{\left( n + \frac{1}{2} \right) b_n} = \langle \tilde{H}a | b \rangle$$

2.  $\tilde{H}^* \subset \tilde{H}$ :

Pro každé  $b \in \text{Dom} \tilde{H}^*$  hledáme  $c \in l^2$  tak, aby:

$$(\forall a \in \text{Dom} \tilde{H}) \left( \langle b | \tilde{H}a \rangle = \langle c | a \rangle \right)$$

$$\sum_{n=0}^{+\infty} \bar{b}_n \left( n + \frac{1}{2} \right) a_n = \sum_{n=0}^{+\infty} \bar{c}_n a_n$$

Zvolme fixně  $m$ :

$$a_n = \delta_{nm}$$

$$\bar{b}_m \left( m + \frac{1}{2} \right) = \bar{c}_m$$

$$c_m = b_m \left( m + \frac{1}{2} \right)$$

$$c = \left( b_n \left( n + \frac{1}{2} \right) \right)_{n=0}^{+\infty} \in l^2 = \tilde{H}b$$

□

Ekvivalentně se tento definiční obor samosdruženosti dá zapsat takto [2]:

$$\text{Dom}(\hat{H}) = \left\{ \psi \in L^2(\mathbb{R}) \left| \psi, \psi' \text{ jsou absolutně spojité a } \left( -\frac{d^2}{dx^2} + x^2 \right) \psi \in L^2(\mathbb{R}) \right. \right\}$$

Z tohoto a z nerovnosti (4.1) lze vyvodit, že tato množina nezávisí na frekvenci  $\omega \neq 0$ .

### 3.3 Obecné řešení bezčasové Schrödingerovy rovnice

Obecné řešení rovnice (3.3) je:

$$\psi(x) = Ae^{-\frac{\omega x^2}{2}} {}_1F_1\left(\frac{1}{4} - \frac{\lambda}{4\omega}, \frac{1}{2}, \omega x^2\right) + Bxe^{-\frac{\omega x^2}{2}} {}_1F_1\left(\frac{3}{4} - \frac{\lambda}{4\omega}, \frac{3}{2}, \omega x^2\right) \quad (3.7)$$

Zde  ${}_1F_1$  jsou zobecněné hypergeometrické (Kummerovy) funkce. [10]

$${}_1F_1(a, b, z) = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{a_n}{b_n} \frac{z^n}{n!} \quad a_n = \prod_{k=0}^{n-1} (a + k) \quad b_n = \prod_{k=0}^{n-1} (b + k)$$

Aby vlastní funkce (3.7) byla kvadraticky integrabilní, musí zobecněné hypergeometrické funkce přejít v (Hermitovy) polynomy, to nastane, pokud jejich 1. argument je roven celému nekladnému číslu. To jest, že pro  $n \in \mathbb{N}_0$  nastane právě 1 z možností:

$$\frac{1}{4} - \frac{\lambda}{4\omega} = -n \quad \frac{3}{4} - \frac{\lambda}{4\omega} = -n$$

Což přesně odpovídá již vypočítanému energetickému spektru (3.4). Hypergeometrické funkce  ${}_1F_1$  mají tvar mocninné řady, jak jsme předpokládali výše. [2]

Dále se v textu budeme zabývat v úvodu zmíněnými modifikacemi potenciálu  $V$ .

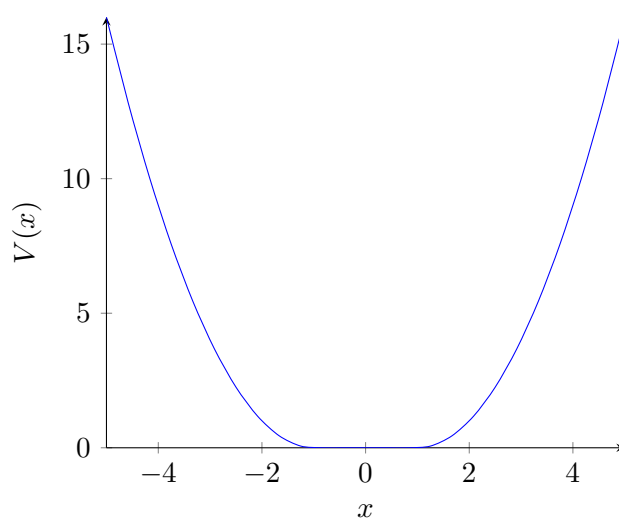
## Kapitola 4

# Kvantový LHO s platem okolo nuly

První modifikací bude vytvoření plata okolo nuly. Položme potenciál roven nule na symetrickém okolí nuly  $(-a, a)$ , kde  $a$  je kladný reálný parametr. Mimo tento interval necháme kvadratický potenciál jako LHO. Potenciál  $V$  je tedy po částech definovaná funkce:

$$V(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}M\omega^2(x+a)^2; & x < -a \\ 0; & |x| < a \\ \frac{1}{2}M\omega^2(x-a)^2; & x > a \end{cases}$$

**Obrázek 4.1:** Tvar potenciálu s platem okolo nuly pro  $\omega = 1, a = 1$ .



V další části se oprostíme od konstant  $\hbar$  a  $M$ , položme  $M = \hbar = 2$ , toho lze docílit substitucí (3.1).

## 4.1 Samosdruženost Hamiltoniánu

Hamiltonián s potenciálem  $V$  lze chápat jako Hamiltonián LHO (značíme  $H_0$ ) s určitou poruchou (značíme  $H'$ ).

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hat{H}_0 + \hat{H}' \\ \hat{H}_0 &= -\frac{d^2}{dx^2} + \omega^2 x^2 \\ \hat{H}' &= \begin{cases} 2\omega^2 ax + \omega^2 a^2; & x < -a \\ -\omega^2 x^2; & |x| < a \\ -2\omega^2 ax + \omega^2 a^2; & x > a \end{cases}\end{aligned}$$

K dokázání samosdruženosti porušeného Hamiltoniánu  $\hat{H}$  využijeme Kato-Rellichův teorém, Tvzení 5. V důkazu nebudou hrát roli fyzikální konstanty, proto zde  $\hbar$  vypustíme. Podobně jako [2, Nerovnost (7.6)]:

$$(P^2 + (\omega Q)^2)^2 = P^4 + (\omega Q)^4 + \omega^2(P^2 Q^2 + Q^2 P^2) = P^4 + (\omega Q)^4 + \omega^2(PQ^2P - 2I)$$

V posledním rovnítku jsme použili komutační relace:

$$\begin{aligned}[Q^n; P] &= niQ^{n-1} \\ -2I &= [P; [P; Q^2]] = P^2 Q^2 + Q^2 P^2 - 2PQ^2P\end{aligned}$$

Odtud již pro každé  $\psi$  ze Schwartzova prostoru plyne nerovnost:

$$\|P^2\psi\|^2 + \|(\omega Q)^2\psi\|^2 \leq \|(P^2 + (\omega Q)^2)\psi\|^2 + 2\omega^2\|\psi\|^2 \quad (4.1)$$

Nyní ověříme předpoklad Kato-Rellichova teorému. S použitím Youngovy nerovnosti odhadneme  $\forall x \in \mathbb{R}$ :

$$|\hat{H}'\psi|(x) \leq \left(|2\omega^2 ax| + |\omega^2 a^2|\right) |\psi(x)| \leq \left(\varepsilon x^2 + \frac{1}{\varepsilon}(\omega^2 a)^2 + |\omega^2 a^2|\right) |\psi(x)|$$

Označíme  $C_\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon}\omega^4 a^2 + \omega^2 a^2$ . Dále odhadujeme

$$\begin{aligned}\|\hat{H}'\psi\|^2 &= \int_{\mathbb{R}} |\hat{H}'\psi|^2(x) dx \leq \\ &\leq \int_{\mathbb{R}} \left(\varepsilon x^2 + \frac{1}{\varepsilon}\omega^4 a^2 + \omega^2 a^2\right)^2 |\psi(x)|^2 dx = \int_{\mathbb{R}} (\varepsilon x^2 + C_\varepsilon)^2 |\psi(x)|^2 dx \leq \\ &\leq 2\varepsilon^2 \int_{\mathbb{R}} x^4 |\psi(x)|^2 dx + 2C_\varepsilon^2 \int_{\mathbb{R}} |\psi(x)|^2 dx = \frac{2\varepsilon^2}{\omega^4} \|(\omega Q)^2\psi\|^2 + 2C_\varepsilon^2 \|\psi\|^2 \leq \\ &\leq \frac{2\varepsilon^2}{\omega^4} \left(\|(\omega Q)^2\psi\|^2 + \|P^2\psi\|^2\right) + 2C_\varepsilon^2 \|\psi\|^2 \leq \frac{2\varepsilon^2}{\omega^4} \|\hat{H}_\omega\psi\|^2 + \left(2C_\varepsilon^2 + \frac{4\varepsilon^2}{\omega^2}\right) \|\psi\|^2,\end{aligned}$$

kde v poslední nerovnosti jsme použili nerovnost (4.1).  $\varepsilon$  lze volit tak, aby  $\frac{2\varepsilon^2}{\omega^4} < 1$ , potom lze použít Tvzení 5. Porušený Hamiltonián  $\hat{H}$  je tedy samosdružený, a to na stejném definičním oboru jako původní Hamiltonián LHO.

## 4.2 Řešení bezčasové Schrödingerovy rovnice a spektrum Hamiltoniánu

Počítejme tedy spektrum Hamiltoniánu  $H = -\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$ , kde

$$V(x) = \begin{cases} \omega^2(x+a)^2; & x < -a \\ 0; & |x| < a \\ \omega^2(x-a)^2; & x > a \end{cases}.$$



Řešení hledáme v závislosti na kladných reálných parametrech  $a, \omega$ . Řešíme bezčasovou Schrödingerovu rovnici:

$$H\psi = \lambda\psi$$

Rovnici řešíme zvlášť na intervalech:

- I.  $(-\infty, -a)$
- II.  $(-a, a)$
- III.  $(a, +\infty)$

Na intervalech I a III vypadá Schrödingerova rovnice takto:

$$\psi'' - \omega^2 \left( x^2 \pm 2ax + a^2 - \frac{\lambda}{\omega^2} \right) \psi = 0$$

Obecné řešení diferenciální rovnice je analogické k řešení rovnice (3.3), tedy podobný výsledek jako (3.7). Konkrétně vypadá:

$$\psi(x) = c_1 e^{-\frac{\omega(x \pm a)^2}{2}} {}_1F_1 \left( \frac{1}{4} - \frac{\lambda}{4\omega}, \frac{1}{2}, \omega(x \pm a)^2 \right) + c_2 (x \pm a) e^{-\frac{\omega(x \pm a)^2}{2}} {}_1F_1 \left( \frac{3}{4} - \frac{\lambda}{4\omega}, \frac{3}{2}, \omega(x \pm a)^2 \right)$$

Řešení na intervalech je tedy:

$$\begin{aligned} \psi^I(x) &= A_1 e^{-\frac{\omega(x+a)^2}{2}} {}_1F_1 \left( \frac{1}{4} - \frac{\lambda}{4\omega}, \frac{1}{2}, \omega(x+a)^2 \right) + A_2 (x+a) e^{-\frac{\omega(x+a)^2}{2}} {}_1F_1 \left( \frac{3}{4} - \frac{\lambda}{4\omega}, \frac{3}{2}, \omega(x+a)^2 \right) \\ \psi^{III}(x) &= D_1 e^{-\frac{\omega(x-a)^2}{2}} {}_1F_1 \left( \frac{1}{4} - \frac{\lambda}{4\omega}, \frac{1}{2}, \omega(x-a)^2 \right) + D_2 (x-a) e^{-\frac{\omega(x-a)^2}{2}} {}_1F_1 \left( \frac{3}{4} - \frac{\lambda}{4\omega}, \frac{3}{2}, \omega(x-a)^2 \right) \end{aligned}$$

Na intervalu II není žádný potenciál, jde tedy o volnou částici. Řešení je:

$$\psi^{II} = B \cos(\sqrt{\lambda}x) + C \sin(\sqrt{\lambda}x)$$

#### 4.2.1 Kvadratická integrabilita vlastních funkcí

Podmínky na kvadratickou integrabilitu získáme z asymptotického chování  $\psi^I$  resp.  $\psi^{III}$  v  $-\infty$  resp.  $+\infty$ .

$$\psi^I(x \sim -\infty) \sim A_1 \alpha e^{\frac{\omega x^2}{2}} + A_1 \beta e^{-\frac{\omega x^2}{2}} + A_2 \gamma e^{\frac{\omega x^2}{2}} + A_2 \delta e^{-\frac{\omega x^2}{2}},$$

kde výrazy  $\alpha, \gamma$  mají takovýto tvar:

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma(\frac{1}{4} - \frac{\lambda}{4\omega})} \omega^{-\frac{1}{4} - \frac{\lambda}{4\omega}} x^{-\frac{1}{2} - \frac{\lambda}{2\omega}} \sum_{n=0}^{S-1} \frac{(\frac{1}{4} + \frac{\lambda}{4\omega})_n (\frac{3}{4} + \frac{\lambda}{4\omega})_n}{n!} \omega^{-n} x^{-2n} \\ \gamma &= -\frac{\sqrt{\pi}}{2\Gamma(\frac{3}{4} - \frac{\lambda}{4\omega})} \omega^{-\frac{3}{4} - \frac{\lambda}{4\omega}} x^{-\frac{1}{2} - \frac{\lambda}{2\omega}} \sum_{n=0}^{S-1} \frac{(\frac{3}{4} + \frac{\lambda}{4\omega})_n (\frac{1}{4} + \frac{\lambda}{4\omega})_n}{n!} \omega^{-n} x^{-2n} \end{aligned}$$

Funkce  $\psi^I$  je kvadraticky integrabilní, když se odečtou příspěvky s  $e^{\frac{\omega x^2}{2}}$ . Tato podmínka má tvar:

$$A_1 \alpha + A_2 \gamma = 0 \Leftrightarrow \frac{A_1}{A_2} = -\frac{\gamma}{\alpha}$$

Takže výsledná funkce na intervalu I. vypadá:

$$\psi^I = A \left( -\frac{\gamma}{\alpha} f_-(x) + g_-(x) \right) = A \left( \frac{\Gamma(\frac{1}{4} - \frac{\lambda}{4\omega})}{2\sqrt{\omega}\Gamma(\frac{3}{4} - \frac{\lambda}{4\omega})} f_-(x) + g_-(x) \right),$$

kde

$$f_{\pm}(x) = e^{-\frac{\omega(x \pm a)^2}{2}} {}_1F_1\left(\frac{1}{4} - \frac{\lambda}{4\omega}, \frac{1}{2}, \omega(x \pm a)^2\right)$$

$$g_{\pm}(x) = (x \pm a)e^{-\frac{\omega(x \pm a)^2}{2}} {}_1F_1\left(\frac{3}{4} - \frac{\lambda}{4\omega}, \frac{3}{2}, \omega(x \pm a)^2\right)$$

Analogicky pro III. interval:

$$\psi^{III}(x \sim +\infty) \sim D_1\alpha e^{\frac{\omega x^2}{2}} + D_1\beta e^{-\frac{\omega x^2}{2}} + D_2\gamma e^{\frac{\omega x^2}{2}} + D_2\delta e^{-\frac{\omega x^2}{2}}$$

$$\alpha = \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma(\frac{1}{4} - \frac{\lambda}{4\omega})} \omega^{-\frac{1}{4} - \frac{\lambda}{4\omega}} x^{-\frac{1}{2} - \frac{\lambda}{2\omega}} \sum_{n=0}^{S-1} \frac{(\frac{1}{4} + \frac{\lambda}{4\omega})_n (\frac{3}{4} + \frac{\lambda}{4\omega})_n}{n!} \omega^{-n} x^{-2n}$$

$$\gamma = \frac{\sqrt{\pi}}{2\Gamma(\frac{3}{4} - \frac{\lambda}{4\omega})} \omega^{-\frac{3}{4} - \frac{\lambda}{4\omega}} x^{-\frac{1}{2} - \frac{\lambda}{2\omega}} \sum_{n=0}^{S-1} \frac{(\frac{3}{4} + \frac{\lambda}{4\omega})_n (\frac{1}{4} + \frac{\lambda}{4\omega})_n}{n!} \omega^{-n} x^{-2n}$$

$$\psi \in L^2 \Leftrightarrow D_1\alpha + D_2\gamma = 0 \Leftrightarrow \frac{D_1}{D_2} = -\frac{\gamma}{\alpha}$$

$$\psi^{III}(x) = -D \left( -\frac{\gamma}{\alpha} f_+(x) + g_+(x) \right) = D \left( \frac{\Gamma(\frac{1}{4} - \frac{\lambda}{4\omega})}{2\sqrt{\omega}\Gamma(\frac{3}{4} - \frac{\lambda}{4\omega})} f_+(x) - g_+(x) \right)$$

Funkce  $\psi^I, \psi^{III}$  jsou kvadraticky integrabilní. [10, 11]

#### 4.2.2 Podmínky napojení řešení na hranicích intervalů

Výsledná vlastní funkce musí být  $C^1(\mathbb{R})$ , takže spojitě diferencovatelně napojme  $\psi^I, \psi^{II}, \psi^{III}$  v bodech  $\pm a$ . To jsou 4 rovnice o 4 neznámých konstantách A, B, C, D.

$$\mathbb{M} \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix} = 0$$

Soustava rovnic bez pravé strany má netriviální řešení právě tehdy, když  $\det \mathbb{M} = 0$ .

$$\det M = \begin{vmatrix} \psi^I(-a) & -\psi_1^{II}(-a) & -\psi_2^{II}(-a) & 0 \\ \psi^{II}(-a) & -\psi_1^{III}(-a) & -\psi_2^{III}(-a) & 0 \\ 0 & -\psi_1^{II}(a) & -\psi_2^{II}(a) & \psi^{III}(a) \\ 0 & -\psi_1^{III}(a) & -\psi_2^{III}(a) & \psi^{III}(a) \end{vmatrix} =$$

$$= K \begin{vmatrix} \frac{1}{2\Gamma(\frac{3}{4} - \frac{\lambda}{4\omega})} & \cos(\sqrt{\lambda}a) & -\sin(\sqrt{\lambda}a) & 0 \\ \frac{\sqrt{\omega}}{\Gamma(\frac{1}{4} - \frac{\lambda}{4\omega})} & \sqrt{\lambda} \sin(\sqrt{\lambda}a) & \sqrt{\lambda} \cos(\sqrt{\lambda}a) & 0 \\ 0 & \cos(\sqrt{\lambda}a) & \sin(\sqrt{\lambda}a) & \frac{1}{2\Gamma(\frac{3}{4} - \frac{\lambda}{4\omega})} \\ 0 & -\sqrt{\lambda} \sin(\sqrt{\lambda}a) & \sqrt{\lambda} \cos(\sqrt{\lambda}a) & -\frac{\sqrt{\omega}}{\Gamma(\frac{1}{4} - \frac{\lambda}{4\omega})} \end{vmatrix} = 0$$

### 4.3 Rovnice na spektrum Hamiltoniánu

Tato podmínka na nulovost determinantu je podmínkou na možné hodnoty  $\lambda$ . Jde o implicitní funkci  $\lambda = \lambda(a)$  s parametrem  $\omega$  zadaná rovnicí  $\Phi(a, \lambda(a)) = 0$ .

$$\Phi(a, \lambda(a)) = \left[ \frac{\omega}{\Gamma^2(\frac{1}{4} - \frac{\lambda}{4\omega})} - \frac{\lambda}{4\Gamma^2(\frac{3}{4} - \frac{\lambda}{4\omega})} \right] \sin(2\sqrt{\lambda}a) + \frac{\sqrt{\lambda\omega}}{\Gamma(\frac{3}{4} - \frac{\lambda}{4\omega})\Gamma(\frac{1}{4} - \frac{\lambda}{4\omega})} \cos(2\sqrt{\lambda}a) = 0 \quad (4.2)$$

## 4.4 Vlastnosti spektra

Zde uvedeme několik pozorování z rovnice (4.2).

$$\sigma(\hat{H}) = \left\{ \lambda \in \mathbb{R}_0^+ \left| \left[ \frac{\omega}{\Gamma^2(\frac{1}{4} - \frac{\lambda}{4\omega})} - \frac{\lambda}{4\Gamma^2(\frac{3}{4} - \frac{\lambda}{4\omega})} \right] \sin(2\sqrt{\lambda}a) + \frac{\sqrt{\lambda\omega}}{\Gamma(\frac{3}{4} - \frac{\lambda}{4\omega})\Gamma(\frac{1}{4} - \frac{\lambda}{4\omega})} \cos(2\sqrt{\lambda}a) = 0 \right. \right\}$$

Spektrum zkoumaného Hamiltoniánu je dáno rovnicí (4.2) a je čistě bodové. Možná čísla  $\lambda$  jsou nezáporná.  $\lambda = 0$  sice je řešením rovnice (4.2), ale není fyzikálně správně, protože se v tomto případě změní tvar Schrödingerovy rovnice na intervalu II, tedy i její řešení a podmínky napojení. Pro  $\lambda = 0$  vypadá obecné řešení na prostředním intervalu následovně:  $\psi^{II}(x) = Bx + C$ . Proto máme pro determinant jiný tvar.

$$\det M = \begin{vmatrix} \frac{1}{2\Gamma(\frac{3}{4})} & -a & 1 & 0 \\ \frac{\sqrt{\omega}}{\Gamma(\frac{1}{4})} & 1 & 0 & 0 \\ 0 & a & 1 & \frac{1}{2\Gamma(\frac{3}{4})} \\ 0 & 1 & 0 & -\frac{\sqrt{\omega}}{\Gamma(\frac{1}{4})} \end{vmatrix} = -\frac{\sqrt{\omega}}{\Gamma(\frac{3}{4})\Gamma(\frac{1}{4})} - \frac{2a\omega}{\Gamma^2(\frac{1}{4})} < 0; \quad \forall a \geq 0,$$

tj.  $(\forall a \geq 0)(0 \notin \sigma(\hat{H}))$ . Příklad  $a = 0$  by měl odpovídat modelu LHO bez modifikace, tj. spektru (3.4). Rovnice (4.2) přechází v:

$$\frac{\sqrt{\lambda\omega}}{\Gamma(\frac{3}{4} - \frac{\lambda}{4\omega})\Gamma(\frac{1}{4} - \frac{\lambda}{4\omega})} = 0 \Rightarrow \lambda = \omega(2n + 1); \quad n \in \mathbb{N}_0$$

Funkce  $\lambda$  lze spojitě dodefinovat v bodě  $a = 0$  limitou

$$\lim_{\nu \rightarrow -n} \frac{1}{\Gamma(\nu)} = 0; \quad \forall n \in \mathbb{N}_0$$

. Frekvence ve speciálním tvaru  $\omega = \frac{k^2\pi^2}{a^2}$ ;  $k \in \mathbb{Z}$  přímo patří do spektra.  $\lambda = \omega \in \sigma(\hat{H})$ .

## 4.5 Poruchová teorie

Rovnice (4.2) udává dokonce celou posloupnost implicitních funkcí  $\lambda_n = \lambda_n(a)$  dodefinovaných limitou (??):  $\lambda_n(0) = \omega(2n + 1)$ . Funkce jsou indexovány  $n \in \mathbb{N}_0$ , parametr vynecháváme tam, kde pracujeme se všemi těmito funkcemi. Můžeme se zajímat o Taylorův rozvoj funkce  $\lambda_n$  na pravém okolí nuly.

### 4.5.1 Taylorův rozvoj do 1. řádu

Odvodíme z derivace  $\Phi$ :

$$0 = \Phi'(a, \lambda(a)) = \frac{\partial \Phi}{\partial \lambda} \lambda' + \frac{\partial \Phi}{\partial a}$$

$$\lambda' = -\frac{\frac{\partial \Phi}{\partial a}}{\frac{\partial \Phi}{\partial \lambda}}$$

Taylorův rozvoj do 1. řádu je:

$$\lambda_n(a) \sim T_1(a) = \lambda_n(0) - \lambda'_n(0)a = \lambda_n(0) - \left. \frac{\frac{\partial \Phi}{\partial a}}{\frac{\partial \Phi}{\partial \lambda}} \right|_{a=0; \lambda=\omega(2n+1)} a$$

S pomocí Wolfram Mathematica je výsledný Taylorův rozvoj:

$$\begin{aligned}\lambda_n(a) &\sim \omega(2n+1) - \frac{2^{-n}(2n+1)\omega^{\frac{3}{2}}[-4\Gamma^2(\frac{1}{2}-\frac{n}{2}) + (2n+1)\Gamma^2(-\frac{n}{2})]}{\Gamma(-n)[2-2(2n+1)\ln 2 + 2(2n+1)\psi^{(0)}(-n)]}a = \\ &= \omega(2n+1) - a_n \frac{\omega^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}}a,\end{aligned}\quad (4.3)$$

kde  $\psi^{(0)}$  je digama funkce, logaritmická derivace Eulerovy gama funkce, tzn.  $\psi^{(0)}(x) = \frac{\Gamma'(x)}{\Gamma(x)}$ . Tady je ukázka několika konstant  $a_n$ :

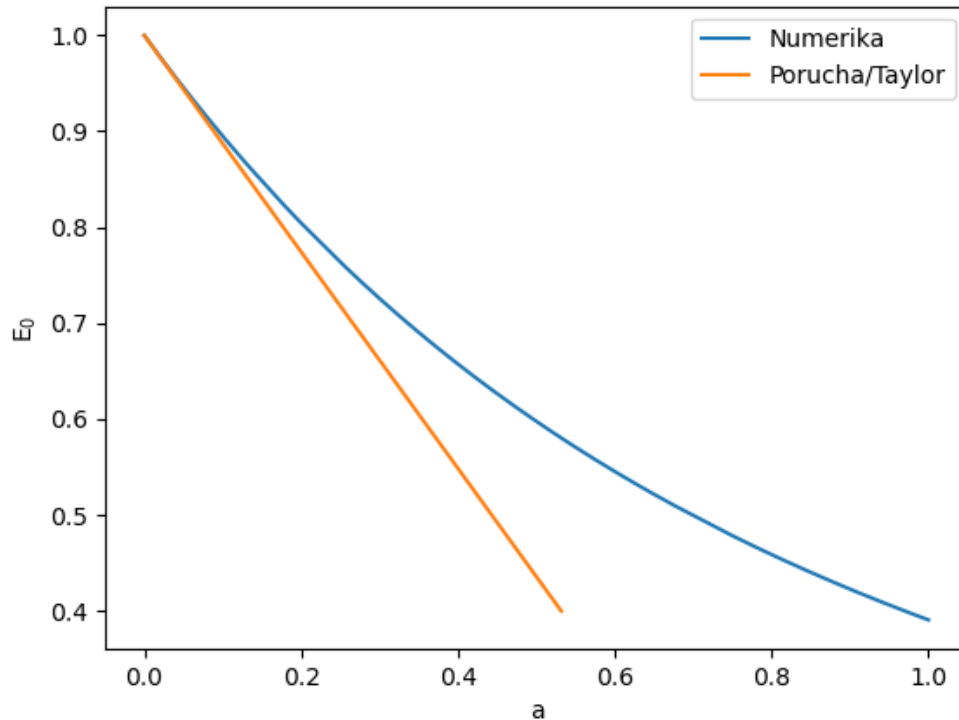
$$(a_n)_{n=0}^{10} = \left(2, 4, 5, 6, \frac{27}{4}, \frac{15}{2}, \frac{65}{8}, \frac{35}{4}, \frac{595}{64}, \frac{315}{35}, \frac{1323}{128}\right)$$

Pro základní hladinu platí:

$$\lambda_0(a) \sim \omega - \frac{2\omega\sqrt{\omega}}{\sqrt{\pi}}a \quad (4.4)$$

Graf 4.2 ukazuje porovnání funkcí  $\lambda_0(a)$  v numerickém výpočtu rovnice (4.2) – modrá a právě zmíněném Taylorovu rozvoji 1. řádu – oranžová, parametr  $\omega = 1$ .

**Obrázek 4.2:** porovnání funkce  $\lambda_0(a)$  numerickým výpočtem a Taylorovým rozvojem do 1. řádu pro  $\omega = 1$



#### 4.5.2 Taylorův rozvoj funkce do 2. řádu

Odvození 2. derivace  $\lambda$ :

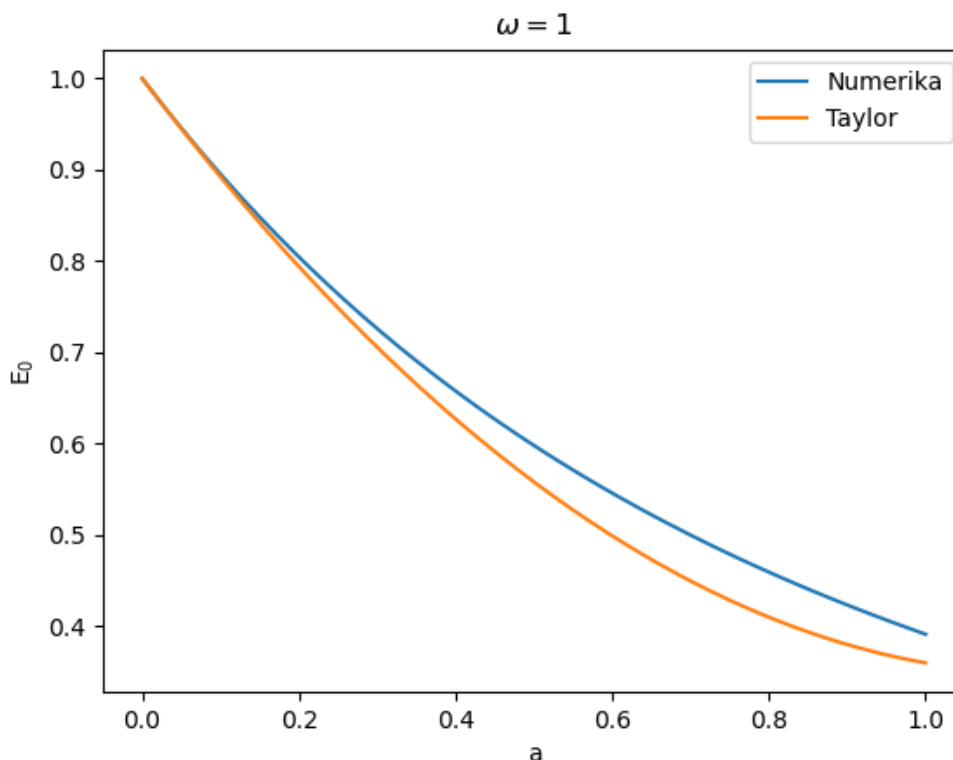
$$\begin{aligned}\Phi'' &= \frac{d^2\Phi}{da^2} = \frac{\partial^2\Phi}{\partial a^2} + 2\frac{\partial^2\Phi}{\partial a\partial\lambda}\lambda' + \frac{\partial^2\Phi^2}{\partial\lambda^2} + \frac{\partial\Phi}{\partial\lambda}\lambda'' = 0 \\ \lambda'' &= -\frac{1}{\frac{\partial\Phi}{\partial\lambda}} \left( \frac{\partial^2\Phi}{\partial a^2} + 2\frac{\partial^2\Phi}{\partial a\partial\lambda}\lambda' + \frac{\partial^2\Phi^2}{\partial\lambda^2} \right)\end{aligned}$$

Odtud je Taylorův rozvoj 2. řádu:

$$\lambda_n(a) \sim T_2(a) = \lambda_n(0) - \left. \frac{\partial \Phi}{\partial a} \right|_{a=0; \lambda=\omega(2n+1)} a + \frac{1}{2} \lambda_n''(0) a^2$$

Výsledek  $\lambda_n''(0)$  lze nalézt v příloze A,  $\psi^{(k)}$  je polygamma funkce, tj. k-tá derivace digamma funkce.

Pro nultou hladinu vypadá Taylorův rozvoj do 2. řádu:



**Obrázek 4.3:** porovnání funkce  $\lambda_0(a)$  numerickým výpočtem a Taylorovým rozvojem do 2. řádu pro  $\omega = 1$

Pro další hodnoty  $\omega$  jsou grafy k nalezení v příloze B.

### 4.5.3 Porucha jako střední hodnota poruchy Hamiltoniánu

Pro malé hodnoty parametru  $a$  lze počítat tento příklad pomocí kvantové poruchové teorie. Hamiltonián si rozepíšeme jako v kapitole 4.1, kde spektrum  $\hat{H}_0$  již známe. Potom za jistých podmínek (ověřených již v části 4.5.1) se energie dané hladiny dá zapsat jako řada

$$\lambda_n = \lambda_n^{(0)} + \lambda_n^{(1)} + \lambda_n^{(2)} + \dots, \quad (4.5)$$

kde  $\lambda_n^{(0)} = 2\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$ , což je energie LHO, a porucha 1. řádu má tvar (4.6).

**Poruchový počet do 1. řádu**

$$\lambda_n^{(1)} = \langle \psi_n | \hat{H}' | \psi_n \rangle = \langle \hat{H}' \rangle_{|n\rangle} = \int_{\mathbb{R}} \overline{\psi_n(x)} H' \psi_n(x) dx \quad (4.6)$$

Střední hodnota Hamiltoniánu na vlastní funkci hladiny  $n$  splňuje  $\lambda_n^{(1)} = \langle \psi_n | \hat{H}' | \psi_n \rangle = \langle \hat{H}' \rangle_{|n\rangle} = \int_{\mathbb{R}} \overline{\psi_n(x)} H' \psi_n(x) dx$ . Tento výraz můžeme dále upravit:

$$\lambda_n^{(1)} = \frac{\omega^{\frac{5}{2}}}{\sqrt{\pi}} \left[ \int_{-\infty}^{-a} (2ax + a^2) H_n^2(x) e^{-\omega x^2} dx - \int_{-a}^a x^2 H_n^2(x) e^{-\omega x^2} dx + \int_a^{+\infty} (-2ax + a^2) H_n^2(x) e^{-\omega x^2} dx \right],$$

kde  $H_n$  označujeme  $n$ -té Hermitovy polynomy. Pro nultou hladinu platí:

$$\begin{aligned} \lambda_0^{(1)} &= \langle \psi_0 | H' | \psi_0 \rangle = \\ &= \frac{\omega^{\frac{5}{2}}}{\sqrt{\pi}} \left[ \int_{-\infty}^{-a} (2ax + a^2) e^{-\omega x^2} dx - \int_{-a}^a x^2 e^{-\omega x^2} dx + \int_a^{+\infty} (-2ax + a^2) e^{-\omega x^2} dx \right] = \\ &= \frac{\omega^{\frac{5}{2}}}{\sqrt{\pi}} \left[ 2a \int_{-\infty}^{-a} x e^{-\omega x^2} dx - 2a \int_a^{+\infty} x e^{-\omega x^2} dx + a^2 \int_{\mathbb{R} \setminus (-a;a)} e^{-\omega x^2} dx - \int_{-a}^a x^2 e^{-\omega x^2} dx \right] = \\ &= \frac{\omega^{\frac{5}{2}}}{\sqrt{\pi}} \left[ -\frac{2}{\omega} a + \sqrt{\frac{\pi}{\omega}} a^2 - \frac{2}{3} a^3 \right] + \mathcal{O}(a^4) \end{aligned}$$

$$\lambda_n \sim \lambda_n^{(0)} + \lambda_n^{(1)} = 2\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) + \langle \psi_n | H' | \psi_n \rangle$$

$$\lambda_0 \sim \omega - \frac{2\omega\sqrt{\omega}}{\sqrt{\pi}} a + \omega^2 a^2 - \frac{2\omega^2\sqrt{\omega}}{3\sqrt{\pi}} a^3$$

Do 1. řádu tedy:

$$\lambda_0 \sim \omega - \frac{2\omega\sqrt{\omega}}{\sqrt{\pi}} a$$

### Poruchový počet do 2. řádu

Porucha do 2. řádu je teorií dána jako suma středních hodnot nediagonálních členů Hamiltoniánu dělená rozdílem energií. [12]

$$\lambda_k^{(2)} = \sum_{j \neq k} \frac{|\langle \psi_j | \hat{H}' | \psi_k \rangle|^2}{\lambda_k - \lambda_j}$$

Pro nultou hladinu:

$$\begin{aligned} \lambda_0^{(2)} &= \sum_{j \neq 0} \frac{|\langle \psi_j | \hat{H}' | \psi_0 \rangle|^2}{\lambda_0 - \lambda_j} = -\frac{1}{2\pi\sqrt{\omega}} \sum_{j=1}^{+\infty} \frac{1}{j \cdot j! 2^j} \left| \int_{\mathbb{R}} \hat{H}' H_j(\xi) e^{-\xi^2} d\xi \right|^2 \\ \lambda_0^{(2)} &= -\frac{\omega^{\frac{7}{2}}}{2\pi} \sum_{j=1}^{+\infty} \frac{1}{j \cdot j! 2^j} \left| \int_{-\infty}^{-a} \left( \frac{2a\xi}{\sqrt{\omega}} + a^2 \right) H_j(\xi) e^{-\xi^2} d\xi - \int_{-a}^a \frac{\xi^2}{\omega} H_j(\xi) e^{-\xi^2} d\xi + \right. \\ &+ \left. \int_a^{+\infty} \left( -\frac{2a\xi}{\sqrt{\omega}} + a^2 \right) H_j(\xi) e^{-\xi^2} d\xi \right|^2 = -\frac{\omega^{\frac{7}{2}}}{2\pi} \sum_{j=1}^{+\infty} \frac{1}{j j! 2^j} \left| \int_0^{+\infty} H_j \xi e^{-\frac{\xi^2}{2}} d\xi \right|^2 + \mathcal{O}(a^4) = \dots \\ &= -\frac{4\omega^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}} a^2 \sum_{m=1}^{+\infty} \frac{(2m-1)!}{2^{2m}} \left( \frac{(-1)^m {}_2F_1(1, -m, \frac{1}{2}, 2)}{m!} \right)^2 + \mathcal{O}(a^4) \end{aligned}$$

Porucha do 2. řádu:

$$\lambda_0 \sim \omega - \frac{2\omega\sqrt{\omega}}{\sqrt{\pi}} a + \omega^2 a^2 - \frac{4\omega^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}} a^2 \sum_{m=1}^{+\infty} \frac{(2m-1)!}{2^{2m}} \left( \frac{(-1)^m {}_2F_1(1, -m, \frac{1}{2}, 2)}{m!} \right)^2 \quad (4.7)$$

## Kapitola 5

# Potenciál s různou frekvencí na poloosách

V této kapitole zkoumejme systém, kde frekvence  $\omega$  je po částech konstantní funkce.

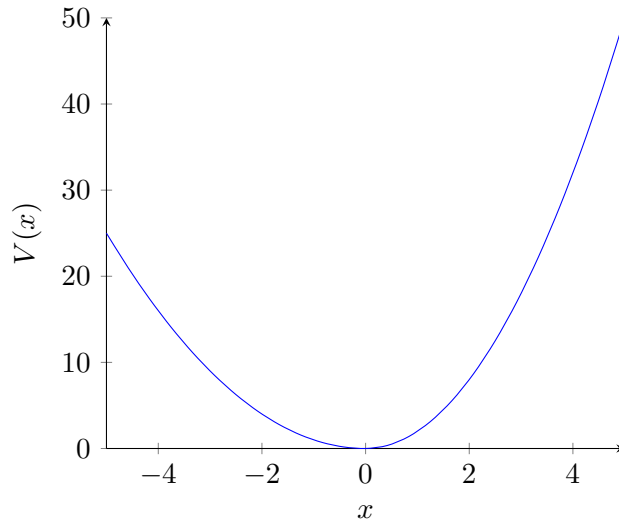
$$\omega(x) = \begin{cases} \omega_+; & x \geq 0 \\ \omega_-; & x < 0 \end{cases}$$

Potenciál pak má tvar (5.1).

$$V(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}M\omega_-^2 x^2; & x < 0 \\ \frac{1}{2}M\omega_+^2 x^2; & x > 0 \end{cases} \quad (5.1)$$

Potenciál pro  $\omega_- = 1$  a  $\omega_+ = 2$  je vidět na obrázku (5.1).

**Obrázek 5.1:** Zkoumaný potenciál  $V(x)$ , pro  $\omega_- = 1$  a  $\omega_+ = 2$



Již z kapitoly 3.2 jsme viděli, že množina, na které je  $H$  samosdružený, nezávisí na  $\omega$ . Z tohoto důvodu je zde  $H$  samosdružený na stejné množině, tj. (3.6).

### 5.1 Fyzikální motivace

V nanofyzice, např. v Ginzburg-Landauovo modelu supravodivosti nebo při kvantovém transportu dvoudimenzionálním elektronovým plynem, se vyskytují magnetické pole  $B$  na  $\mathbb{R}^2$  závislé pouze na souřadnici  $x$ . Příslušný vektorový potenciál má tvar

$\vec{A} = \begin{pmatrix} 0 \\ A_y(x) \end{pmatrix}$ . Hamiltonián je dán

$$H = (\vec{P} - \vec{A})^2 = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \left(-2i\frac{\partial}{\partial y} - A_y(x)\right)^2.$$

Zde využijeme částečnou Fourierovu transformaci vlnových funkcí:

$$\psi(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \hat{\psi}_k(x) e^{iky} dk$$

A tedy:

$$\begin{aligned} H\psi(x, y) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \left[ -\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \left(-2i\frac{\partial}{\partial y} - A_y(x)\right)^2 \right] \hat{\psi}_k(x) e^{iky} dk = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \left( -\hat{\psi}_k''(x) + (k - A_y(x))^2 \hat{\psi}_k(x) \right) e^{iky} dk \end{aligned}$$

To je rozklad operátoru  $H$  na působení operátorů  $H_k = \frac{d^2}{dx^2} (k - A_y(x))^2$ . Pro  $\vec{B}$  po částech konstantní na polovinách  $x < 0$  a  $x > 0$  odpovídá operátor  $H_0$  přesně Hamiltoniánu zavedeném na začátku této kapitoly. [13]

## 5.2 Spektrální analýza

Vlnové funkce se odvodí analogicky jako v kapitole 4, po kontrole integrability mají tvar:

$$\begin{aligned} \psi_-(x) &= A \left( -\frac{\gamma}{\alpha} f(\omega_-) + g(\omega_-) \right) = A \left( \frac{-\Gamma(\frac{1}{4} - \frac{\lambda}{4\omega_-})}{2\sqrt{\omega_-} \Gamma(\frac{3}{4} - \frac{\lambda}{4\omega_-})} f(\omega_-) - g(\omega_-) \right) \\ \psi_+(x) &= B \left( -\frac{\gamma}{\alpha} f(\omega_+) + g(\omega_+) \right) = B \left( \frac{\Gamma(\frac{1}{4} - \frac{\lambda}{4\omega_+})}{2\sqrt{\omega_+} \Gamma(\frac{3}{4} - \frac{\lambda}{4\omega_+})} f(\omega_+) - g(\omega_+) \right), \end{aligned}$$

kde funkce  $f$  a  $g$  jsou funkce  $f_{\pm}$  a  $g_{\pm}$  z kapitoly 4 takové, že  $a = 0$  a  $\omega \rightarrow \omega_{\pm}$ . Podmínky napojení vedou na:

$$\mathbb{M} \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix} = 0$$

$$\det M = 0$$

$$\det M = \begin{vmatrix} \frac{1}{2\Gamma(\frac{3}{4} - \frac{\lambda}{4\omega_-})} & -\frac{1}{2\Gamma(\frac{3}{4} - \frac{\lambda}{4\omega_+})} \\ \frac{\sqrt{\omega_-}}{\Gamma(\frac{1}{4} - \frac{\lambda}{4\omega_-})} & \frac{\sqrt{\omega_+}}{\Gamma(\frac{1}{4} - \frac{\lambda}{4\omega_+})} \end{vmatrix}$$

Výsledná rovnice omezující spektrum Hamiltoniánu má podobný tvar jako u potenciálu s platem a vychází (5.2).

$$\boxed{\det M = \frac{\sqrt{\omega_+}}{2\Gamma(\frac{3}{4} - \frac{\lambda}{4\omega_-})\Gamma(\frac{1}{4} - \frac{\lambda}{4\omega_+})} + \frac{\sqrt{\omega_-}}{2\Gamma(\frac{3}{4} - \frac{\lambda}{4\omega_+})\Gamma(\frac{1}{4} - \frac{\lambda}{4\omega_-})} = 0} \quad (5.2)$$



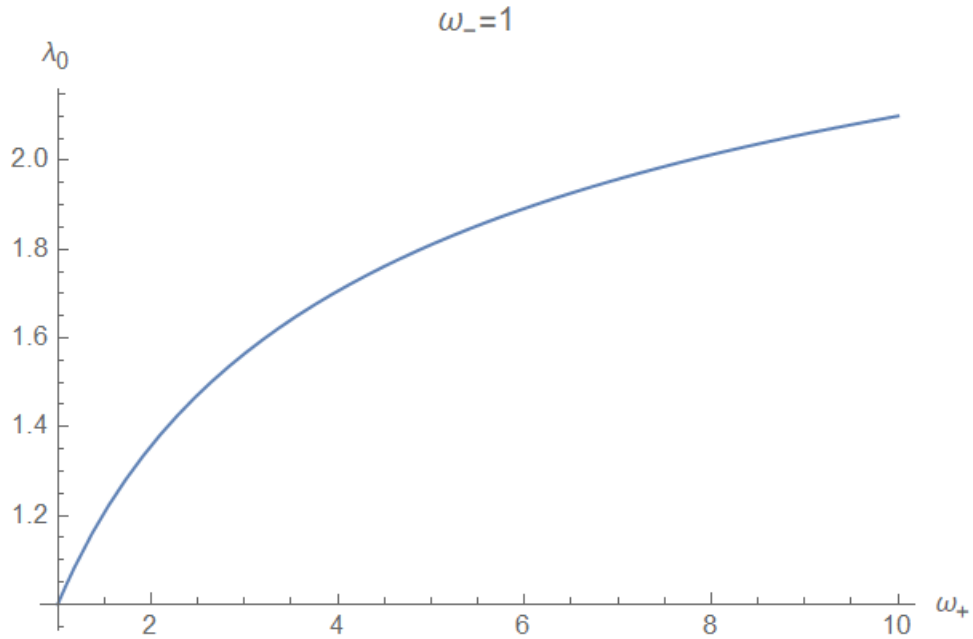
Spektrum Hamiltoniánu s potenciálem (5.1) je tedy množina (5.3).

$$\sigma(\hat{H}) = \left\{ \lambda \in \mathbb{R}_0^+ \left| \frac{\sqrt{\omega_+}}{2\Gamma(\frac{3}{4} - \frac{\lambda}{4\omega_-})\Gamma(\frac{1}{4} - \frac{\lambda}{4\omega_+})} + \frac{\sqrt{\omega_-}}{2\Gamma(\frac{3}{4} - \frac{\lambda}{4\omega_+})\Gamma(\frac{1}{4} - \frac{\lambda}{4\omega_-})} = 0 \right. \right\} \quad (5.3)$$

Případ  $\omega_+ = \omega_-$  odpovídá LHO. Zde uvádím numerické řešení této rovnice jako graf závislosti  $\lambda_0(\omega_+)$ , pro  $\omega_- = 1$  je to obrázek 5.2.

Další grafy, pro jiné hodnoty  $\omega_-$  zahrnuty v příloze C.

**Obrázek 5.2:** graf závislosti  $\lambda(\omega_+)$ , pro  $\omega_- = 1$





## Kapitola 6

# Periodický potenciál

Zde se zabýváme potenciálem

$$V(x) = \omega^2 x^2; \quad |x| < a$$

periodicky rozšířeném na celou reálnou osu, pro jisté  $a > 0$   $\omega > 0$ . Stále pokládáme  $\hbar = 2, M = 2$ .

Pomocí Kato-Rellichova teorému (5) ukážeme, že je tento Hamiltonián samosdružený na stejné množině jako volný Hamiltonián (Laplaceův operátor), tj. Sobolevův prostor  $H^2(\mathbb{R})$ . Potenciál  $V$  je omezený,  $V \leq \sup_{x \in \mathbb{R}} |V(x)| < +\infty$ . Takže platí:

$$\|\hat{V}\psi\| \leq \sup_{x \in \mathbb{R}} |V(x)| \|\psi\|$$

Takže konstanta  $a$  z Kato-Rellichova teorému je nula.

Tento periodický potenciál se vyskytuje v teorii pevných látek a může modelovat krystal. V našem, jednorozměrném, případě modeluje řetízek atomů. [14]

Bezčasová Schrödingerova rovnice má následující tvar:

$$\psi'' + (-\omega^2 x^2 + \lambda)\psi = 0$$

Obecné řešení této rovnice vypadá jako:

$$\psi(x) = Ae^{-\frac{\omega x^2}{2}} {}_1F_1\left(\frac{1}{4} - \frac{\lambda}{4\omega}, \frac{1}{2}, \omega x^2\right) + Bxe^{-\frac{\omega x^2}{2}} {}_1F_1\left(\frac{3}{4} - \frac{\lambda}{4\omega}, \frac{3}{2}, \omega x^2\right) = Af(x) + Bg(x),$$

kde opět funkce  $f$  a  $g$  jsou funkce  $f_{\pm}$  a  $g_{\pm}$  z kapitoly 4 takové, že  $a = 0$ . Zde poznamenejme, že  $f$  a  $g'$  jsou sudé a dále že  $g$  a  $f'$  jsou liché.

### 6.1 Spektrální analýza

V této sekci řešíme spektrum postupem z [15] popsáním v 1.2. Použijeme Blochův teorém: obecné řešení berme na intervalu  $(-a, a)$ , jinde je ve tvaru:

$$\psi_q(x) = e^{iqx} u_q(x),$$

kde  $u_q$  je periodická s periodou  $2a$  (stejně jako potenciál  $V$ ).  $q$  je reálný parametr, fyzikálně interpretovaný jako kvazihybnost (krystalové vlnové číslo).

$$\psi_q(x - 2a) = e^{iq(x-2a)} u_q(x - 2a) = e^{iqx} e^{-2iaq} u_q(x) = e^{iqx} e^{-2iaq} \psi_q(x) e^{-iqx} = e^{-2iaq} \psi_q(x)$$

Odtud můžeme odvodit vlnovou funkci na sousedním intervalu, jakožto:

$$\psi_q(x) = e^{2iaq} \psi_q(x - 2a); \quad x \in (a, 3a)$$

Spojité a spojitě diferencovatelné napojení v bodě  $a$  dává podmínku

$$\mathbb{M} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0 \quad (6.1)$$

na konstanty  $A, B$ . Tato podmínka v bodě  $a$  je ekvivalentní podmínce v každém bodě napojení  $a + 2a\mathbb{Z}$ , tudíž je poté vlnová funkce spojitá a spojitě diferencovatelná všude.

Aby soustava (6.1) měla řešení, tak musí determinant matice být 0. Dále skrytě počítáme se závislostí na  $\lambda$  ve funkcích  $f$  i  $g$ , ale explicitně ji v zápisu neuvádíme.

$$\det \mathbb{M} = \begin{vmatrix} f(a) - e^{2iaq} f(-a) & g(a) - e^{2iaq} g(-a) \\ f'(a) - e^{2iaq} f'(-a) & g'(a) - e^{2iaq} g'(-a) \end{vmatrix} = 0$$

Zde můžeme ze všech členů vytknout nenulový člen  $e^{iaq}$  a přepsat zbytek na goniometrické funkce. Využijeme také parity funkcí  $f$  a  $g$ .

$$\det \mathbb{M} \sim \begin{vmatrix} 2if(a) \sin(aq) & 2g(a) \cos(aq) \\ 2f'(a) \cos(aq) & 2ig'(a) \sin(aq) \end{vmatrix} \sim f(a)g'(a) \sin^2(aq) + f'(a)g(a) \cos^2(aq) = 0$$

Vlnkami jsme označili úpravu s vypuštěním nenulové konstanty. Poslední rovnost lze přepsat na (6.2).

$$\operatorname{tg}^2(aq) = -\frac{f'(a)g(a)}{f(a)g'(a)} \quad (6.2)$$

Odtud lze vyjádřit funkci  $q(\lambda)$ , která je reálná za podmínky (6.3), že pravá strana (6.2) je nezáporná.

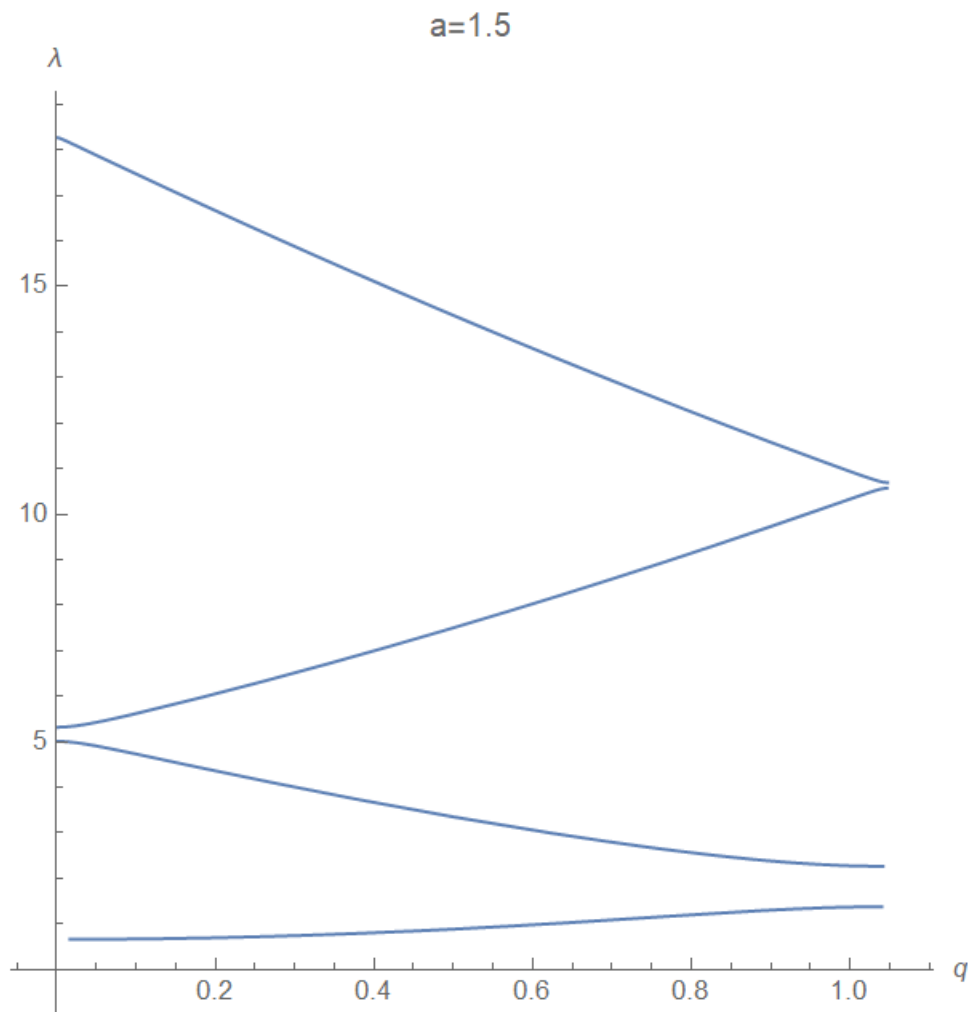
$$\frac{f'(a)g(a)}{f(a)g'(a)} \leq 0 \quad (6.3)$$

Funkce  $q$ , pak má tvar (6.4).

$$q(\lambda) = \frac{1}{a} \operatorname{arctg} \sqrt{-\frac{f'(a)g(a)}{f(a)g'(a)}} = \quad (6.4)$$

$$= \frac{1}{a} \operatorname{arctg} \sqrt{-\frac{a {}_1F_1\left(\frac{3}{4} - \frac{\lambda}{4\omega}, \frac{3}{2}, \omega a^2\right) \left[-\omega {}_1F_1\left(\frac{1}{4} - \frac{\lambda}{4\omega}, \frac{1}{2}, \omega a^2\right) + 2\omega \left(\frac{1}{2} - \frac{\lambda}{2\omega}\right) {}_1F_1\left(\frac{5}{4} - \frac{\lambda}{4\omega}, \frac{3}{2}, \omega a^2\right)\right]}{{}_1F_1\left(\frac{1}{4} - \frac{\lambda}{4\omega}, \frac{1}{2}, \omega a^2\right) \left[(1 - \omega a) {}_1F_1\left(\frac{3}{4} - \frac{\lambda}{4\omega}, \frac{3}{2}, \omega a^2\right) + a \left(\frac{1}{2} - \frac{\lambda}{6\omega}\right) {}_1F_1\left(\frac{7}{4} - \frac{\lambda}{4\omega}, \frac{5}{2}, \omega a^2\right)\right]}}$$

Funkce  $\lambda(q)$  je jen inverze k této funkci, která nelze explicitně napsat, ale lze zobrazit její graf, což vidíme na obrázku 6.1.[15]



**Obrázek 6.1:** Graf závislosti energie  $\lambda(q)$  na kvazihybnosti  $q$  pro  $a = 1,5$

Grafy pro vyšší hodnotu  $a$  je v příloze D. Tam je vidět zúžení pásů a tím chování blíže LHO.

Spektrum je potom obor hodnot funkcí v obrázku 6.1.

### 6.1.1 Závislost parametrů $a, \omega$

Lze redukovat počet parametrů potenciálu  $V$ ? Předpokládáme  $a \neq 0$ . Provedeme substituci:

$$\xi = \frac{x}{a} \qquad \omega_* = a^2 \omega \qquad \lambda_* = a^2 \lambda$$

Potenciál a Hamiltonián jsou teď na základním intervalu, tj.  $\xi \in (-1; 1)$ :

$$V(\xi) = \frac{1}{a^2} \omega_*^2 \xi^2$$

$$\hat{H} = \frac{1}{a^2} \left( -\frac{d^2}{d\xi^2} + \omega_*^2 \xi^2 \right)$$

Nyní máme nový Hamiltonián  $\hat{K} = a^2 \hat{H}$ , pro který platí stejné výsledky jako výše, jenom se změnou:

$$\omega \rightarrow \omega_* \qquad x \rightarrow \xi \qquad \lambda \rightarrow \lambda_*$$

### 6.1.2 Derivace výsledné funkce energie

Mějme funkci  $\lambda(q)$  danou implicitně  $(\det \mathbb{M})(\lambda, q) = 0$ .

$$\lambda' = \frac{\frac{\partial \det \mathbb{M}}{\partial q}}{\frac{\partial \det \mathbb{M}}{\partial \lambda}}$$

$\lambda' = 0$  pokud je čítecitel roven 0, to jest:

$$\frac{\partial \det \mathbb{M}}{\partial q} = a (f(a)g'(a) - f'(a)g(a)) \sin(2aq) = 0$$

Musí to vynulovat alespoň jeden ze členů:

$$\sin(2aq) = 0 \leftrightarrow q = \frac{k\pi}{2a}; k \in \mathbb{N}_0 \quad (6.5)$$

$$A(\lambda) = B(\lambda) \quad (6.6)$$

$$a = 0 \quad (6.7)$$

Možnost (6.5) lze pozorovat na grafech. Možnost (6.6) nemůže nastat a (6.7) je případ standardního LHO.

## 6.2 Alternativní postup hledání spektra

Zde použijeme Blochovu teorii z kapitoly 1.2 podle [8]. Bázi vlastních funkcí  $\hat{L}$  zvolíme funkce  $y_1, y_2$ , které splňují:

$$\begin{aligned} y_1(-a) &= 1 \\ y_1'(-a) &= 0 \\ y_2(-a) &= 0 \\ y_2'(-a) &= 1 \end{aligned}$$

Takové funkce jsou:

$$\begin{aligned} y_1 &= \frac{g'(a)f + f'(a)g}{f(a)g'(a) - f'(a)g(a)} \\ y_2 &= \frac{g(a)f + f(a)g}{f(a)g'(a) - f'(a)g(a)} \end{aligned}$$

Matice monodromie bude vypadat:

$$\hat{L} = \mathbb{M}(\lambda) = \begin{pmatrix} y_1(a) & y_2(a) \\ y_1'(a) & y_2'(a) \end{pmatrix}$$

Zajímá nás, jak bude vypadat stopa této matice  $\mathbb{M}(\lambda)$ , protože spektrum je:

$$\begin{aligned} \sigma(\hat{H}) &= \{\lambda \mid |D(\lambda)| \leq 1\} \\ D(\lambda) &= \frac{1}{2} \text{Tr}(\mathbb{M}(\lambda)) = \frac{f(a)g'(a) + f'(a)g(a)}{f(a)g'(a) - f'(a)g(a)} \end{aligned}$$

$\lambda$  je ze spektra Hamiltoniánu právě, když splňuje:

$$\left| \frac{f(a)g'(a) + f'(a)g(a)}{f(a)g'(a) - f'(a)g(a)} \right| = \left| \frac{1 + \frac{f'(a)g(a)}{f(a)g'(a)}}{1 - \frac{f'(a)g(a)}{f(a)g'(a)}} \right| \leq 1$$

To platí právě tehdy, když:

$$\frac{f'(a)g(a)}{f(a)g'(a)} \leq 0$$

To je přesně nerovnost (6.3). Spektrum je tedy dáno stejně oběma metodami. [8]

# Závěr

V této práci jsme představili model lineárního harmonického oscilátoru v klasické mechanice a principem korespondence přenesli do mechaniky kvantové. Pomocí zmíněných matematických nástrojů jsme následně tento model analyticky vyřešili. Hlavní část práce pak podobným způsobem postupně zkoumala 3 různé modifikace základního modelu. Vždy se ověřilo, že jejich limitní případ splývá se základním LHO. Narazili jsme na různé další vlastnosti těchto modelů a popsali je.

U všech modelů byla nakonec výsledkem podmínka na spektrum Hamiltoniánu, to byla rovnice na možné energie systému. Tato energie závisí také na poruchovém parametru, který vyjadřuje do jaké míry jsme se odchýlili od standardního LHO. Tyto rovnice nelze řešit analyticky, z toho důvodu jsme se pokusili je vyřešit alespoň numericky pro vybrané hodnoty poruchového parametru a u prvního modelu také provedli poruchovou teorii a Taylorův rozvoj. U prvních dvou modelů jsme našli spektrum bodové a u periodického potenciálu pásovou strukturu, jak se dá očekávat podle teorie.

Jak již bylo zmíněno, periodicky rozšířený kvadratický potenciál simuluje řetízek atomů. [14] Modifikace z kapitoly 5 se objevuje při Ginzburg-Landauově spektrální analýze magnetického Hamiltoniánu.

Rozšířením v tomto směru může být zkoumání dalších modifikací kvadratického potenciálu nebo bližší určení zde zmíněných fenoménů. Vypočtení poruchových počtů do vyšších řádu by byl další krok vpřed ke zjištění dalších zákonitostí. [3]





# Bibliografie

1. ŠTOLL, Ivan. *Klasická teoretická fyzika*. Praha: Univerzita Karlova, nakladatelství Karolinum, 2017. ISBN 9788024635453.
2. BLANK, Jiří; EXNER, Pavel; HAVLÍČEK, Miloslav. *Lineární operátory v kvantové fyzice*. Praha: Karolinum, 1993. ISBN 80-7066-586-6.
3. FIALOVÁ, Marie. *Spectral analysis of the Dirac operator as a tool for studying Graphene*. Czech Technical University in Prague, 2016.
4. DEAN, P. The constrained quantum mechanical harmonic oscillator. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*. 1966, roč. 62, č. 2, s. 277–286. Dostupné z DOI: 10.1017/S0305004100039840.
5. KLÍMA, Jan; VELICKÝ, Bedřich. *Kvantová mechanika I*. Univerzita Karlova v Praze, nakladatelství Karolinum, 2016. ISBN 9788024629377.
6. HERIBAN, Lukáš. *Aproximace jednorozměrných relativistických bodových interakcí pomocí nelokálních potenciálů*. 2020.
7. TESCHL, Gerald. *Mathematical methods in quantum mechanics: with applications to Schrödinger operators*. Providence, R.I: American Mathematical Society, 2009. ISBN 9780821846605.
8. BEREZIN, Feliks Aleksanarovich; SHUBIN, Mikhail Aleksandrovich. *The Schrödinger Equation*. Dordrecht: Springer Netherlands, 1991. ISBN 978-94-010-5391-4.
9. HLAVATÝ, Ladislav; ŠTEFAŇÁK, Martin. *Slabikář kvantové mechaniky*. 2018.
10. ABRAMOWITZ, Milton; STEGUN, Irene A. Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables. *Journal of the American Statistical Association*. 1964, roč. 59, č. 308, s. 1324. Dostupné z DOI: 10.2307/2282672.
11. ERDÉLYI, Arthur; SWANSON, C. A. Asymptotic forms of Whittaker's confluent hypergeometric functions. *Memoirs of the American Mathematical Society*. 1957, č. 25. Dostupné z DOI: 10.1090/memo/0025.
12. STRAUSS, Vladimir; WINKLMEIER, Monika. *On the one-dimensional harmonic oscillator with a singular perturbation*. 2015. Dostupné z arXiv: 1506.06264 [math.FA].
13. HISLOP, Peter D.; POPOFF, Nicolas; RAYMOND, Nicolas; SUNDQVIST, Mikael. Band functions in presence of magnetic steps. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*. 2016, roč. 26, č. 1, s. 161–184. Dostupné z DOI: 10.1142/S0218202516500056.
14. ABDURROUF, A.; NURHUDA, M.; WIYONO. Modelling one-dimensional crystal by using harmonic oscillator potential. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*. 2019, roč. 546, s. 052001. Dostupné z DOI: 10.1088/1757-899X/546/5/052001.
15. ŠTEFAŇÁK, Martin. Potenciál tvaru delta funkce, Diracuv hřeben. In: *Cvicení z kvantové mechaniky 2*. Praha, 2021, s. 8–16.

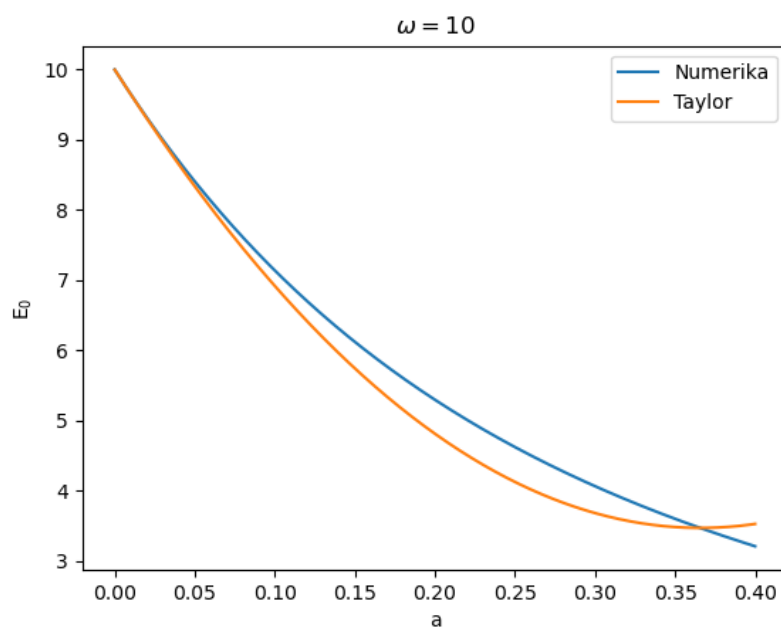
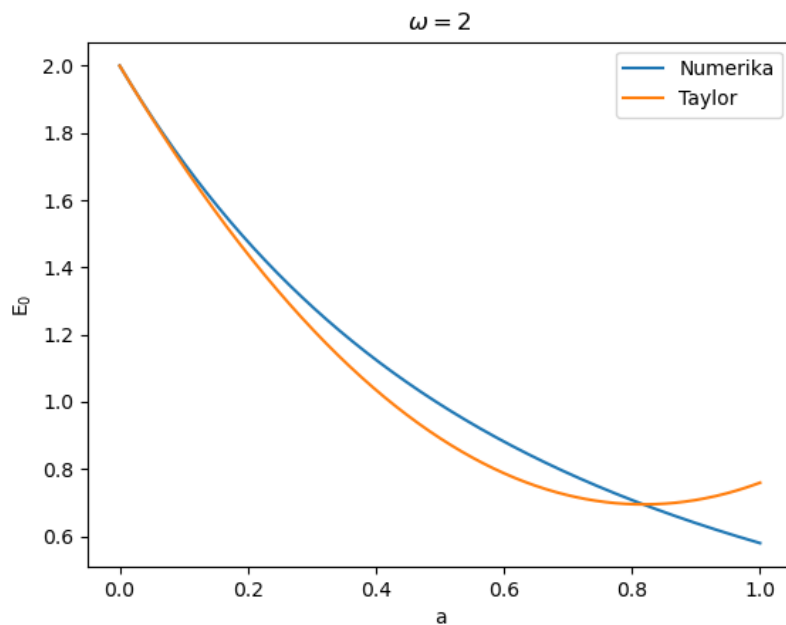


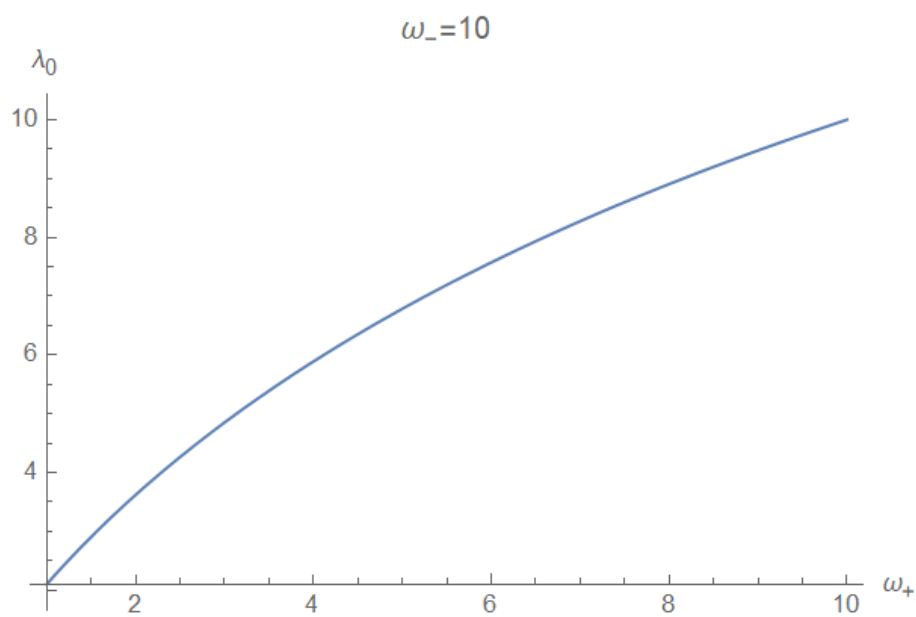
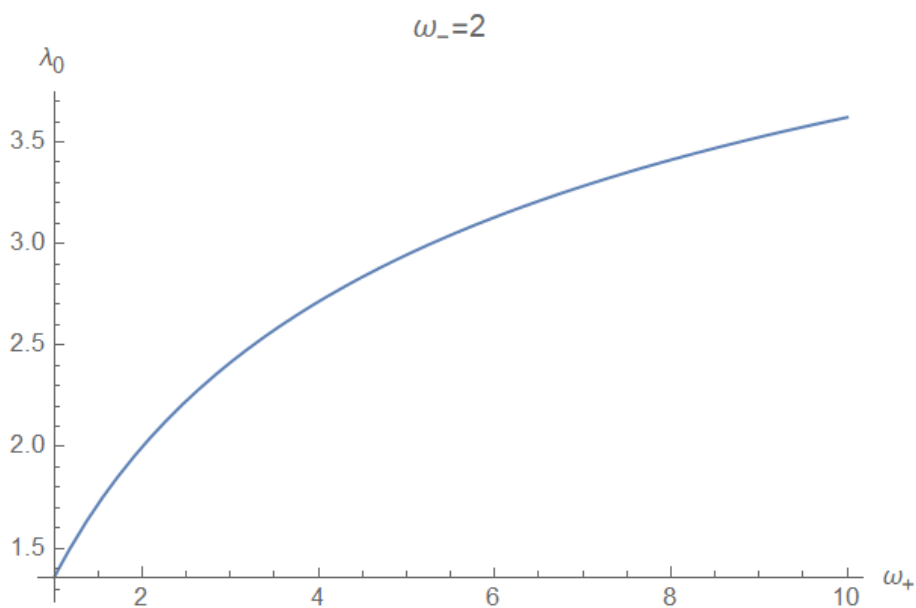
# Přílohy

## A Koeficient $\lambda_n''(0, \omega(2n+1))$ v Taylorově rozvoji 2. řádu z kapitoly 4.5.2

$$\begin{aligned} \lambda_n''(0, \omega(2n+1)) &= -\frac{2^{-2n-3}(2n+1)}{\pi\Gamma(-n)^2(-2(2n+1)\log(2) + (4n+2)\psi^{(0)}(-n) + 2)^3} \cdot 32\omega^2\Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{n}{2}\right)^4 \cdot \\ &\cdot \left( (2n+1)^2\psi^{(0)}\left(\frac{1}{2} - \frac{n}{2}\right)^2 - 3(2n+1)^2\psi^{(0)}\left(-\frac{n}{2}\right)^2 \right) - \\ &- \left( -2(2n+1)^2\psi^{(0)}\left(\frac{1}{2} - \frac{n}{2}\right)\psi^{(0)}\left(-\frac{n}{2}\right) - 4(2n+1)^2\psi^{(1)}(-n) - 8(2n+1)\psi^{(0)}\left(-\frac{n}{2}\right) - 12 \right) - \\ &- \pi 4^{n+3}(2n+1)\omega^2\Gamma(-n)^2 \cdot \\ &\cdot \left( -16n(n+1)\psi^{(1)}(-n) - 4(\psi^{(1)}(-n) + 3) + 4(2n+1)^2(\log(2) - \psi^{(0)}(-n))^2 \right) + \\ &+ 2(2n\omega + \omega)^2\Gamma\left(-\frac{n}{2}\right)^4 \cdot \\ &\cdot \left( -3(2n+1)^2\psi^{(0)}\left(\frac{1}{2} - \frac{n}{2}\right)^2 + (2n+1)^2\psi^{(0)}\left(-\frac{n}{2}\right)^2 - 4(2n+1)^2\psi^{(1)}(-n) - \right) \\ &- \left( 8(2n+1)\psi^{(0)}\left(-\frac{n}{2}\right) - 2(2n+1)\psi^{(0)}\left(\frac{1}{2} - \frac{n}{2}\right) \left( (2n+1)\psi^{(0)}\left(-\frac{n}{2}\right) + 8 \right) - 28 \right) \end{aligned}$$

## B Porovnání funkce $\lambda_0$ z kapitoly 4 numerickým výpočtem a Taylorovým rozvojem do 2. řádu pro různé hodnoty $\omega$



**C Graf závislosti  $\lambda(\omega_+)$  z kapitoly 5, pro různé hodnoty  $\omega_-$** 

**D Graf závislosti energie  $\lambda(q)$  z kapitoly 6 na kvazihybnosti  $q$  pro hodnotu  $a = 7,5$**

