Seminár z vybraných častí kvantovej teórie.

miestnosť A204 (na Katedre fyziky), piatky o 13.00
info: Peter.Bokes@stuba.sk

Obsah

1 Lagrangeove a Hamiltonove rovnice

Toto možno nevieme a tak si radšej cez to prejdime. Obšírnejšie poučenie nájdeme v [1].

1.1 Lagrangeova formulácia dynamiky

$$\delta S[x(t)] = \delta \int_{t_1}^{t_2} L(\dot{x}(t), x(t), t)dt \quad = \quad 0 \tag{1}$$

$$\frac{\delta S[x(t')]}{\delta x(t)} = \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial L}{\partial x} \quad = \quad 0 \tag{2}$$

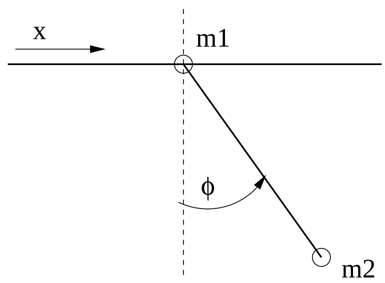
Pre N stupňov voľnosti $i = 1, ..., N$ máme analogicky

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} - \frac{\partial L}{\partial x_i} \quad = \quad 0, \quad i = 1, ..., N \tag{3}$$

Pre získanie ekvivalencie s Newtonovými rovnicami sa dá ukázať že platí $L = E_K - U$ (Kinetická - potenciálna energia), obe vyjadrené cez $\{x_i, \dot{x}_i\}_{i=1}^N$. Lagrangeove rovnice majú ale tú výhodu, že sú invariantné vzhľadom na ***ľubovolnú*** transformáciu súradníc.

###

Príklad: Nájdite pohybové rovnice pre $x(t)$ a $\phi(t)$ pre systém na obrázku. Podiskutujme ako sa prejavuje pohyb ťažiska...
Re: $L(x, \dot{x}, \phi, \dot{\phi}) = \frac{1}{2}(m_1 + m_2)\dot{x}^2 + \frac{1}{2}m_2(l^2\dot{\phi}^2 + 2l\dot{\phi}\dot{x}\cos(\phi)) + m_2 gl\cos(\phi)$



###

Uvedomme si: Lagrangeova funkcia je funkcia súradníc a rýchlostí, prip. času

$$dL(\dot{x}, x, t) = \partial_{\dot{x}} L d\dot{x} + \partial_x L dx + \partial_t L dt$$

Pre jej časovú deriváciu napr. dostaneme

$$\frac{dL}{dt} = \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\dot{x}\right) + \frac{\partial L}{\partial t} \tag{4}$$

1.2 Kánonický Hamiltonov formalizmus

Motivácia - pracujme s invariantmi.
Zovšeobecnená hybnosť p

$$p \quad = \quad \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \tag{5}$$

Lebo pri $\partial_x L = 0$ je $p = const$. Odteraz teda budeme chcieť miesto premenných $(\dot{x}, x, t)$ používať premenné (p, x, t).
Hamiltonova funkcia H (celková energia)

$$H(p, x) \quad = \quad p\dot{x} - L \tag{6}$$

Lebo pri $\partial_t L = 0$ je $H = const$, viď (4). Pre diferenciál H máme

$$dH(p, x) \quad = \quad -\dot{x}dp + \frac{\partial L}{\partial x}dx + \frac{\partial L}{\partial t}dt \quad \text{čo ak porovnáme s} \tag{7}$$

$$dH(p, x) \quad = \quad \frac{\partial H}{\partial p}dp + \frac{\partial H}{\partial x}dx + \frac{\partial L}{\partial t}dt \quad \text{priamo dostávame} \tag{8}$$

$$\dot{x} \quad = \quad \frac{\partial H}{\partial p}|_{x=const} \tag{9}$$

$$\dot{p} \quad = \quad -\frac{\partial H}{\partial x}|_{p=const} \tag{10}$$

Posledné dve rovnice úplne popisujú dynamiku, sú ekvivalentné Lagrangeovej rovnici. Pre zodpovedajúcu súradnicu x.

###
Príklad: Harmonický oscilátor s vonkajším budením silou $F = -\partial_x U(x,t)$.
Re: Lagrangeová funkcia

$$L(\dot{x}, x, t) = E_K - U = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}kx^2 - U(x,t)$$

Hybnosť

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x}$$

Hamiltonova funckia

$$H(p, x, t) = p\dot{x} - L = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 + U(x,t)$$

Hamiltonove rovnice

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -kx - \partial_x U(x,t) \quad \text{... vlastne Newtonova pohybová rovnica} \tag{11}$$

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m} \quad \text{... rýchlosť a hybnosť v štandartnom vzťahu} \tag{12}$$

###

Ak máme ľubovolnú veličinu $f(p,x)$ tak pre jej časovú zmenu máme

$$\begin{aligned} \dot{f} &= \frac{\partial f}{\partial x}\frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial f}{\partial p}\frac{\partial H}{\partial x} && (13) \\ &= -i\{f, H\} && (14) \end{aligned}$$

kde sme zaviedli Poissonove zátvorky [1]

$$\{.,.\} = i\left(\frac{\partial.}{\partial x}\frac{\partial.}{\partial p} - \frac{\partial.}{\partial p}\frac{\partial.}{\partial x}\right) \tag{15}$$

Dá sa priamočiaro dokázať že pre ľubovolné funkcie $A(p,x), B(p,x)$ a $C(p,x)$ platí

$$\begin{aligned} \{A+B, C\} &= \{A,C\} + \{B,C\} && (16) \\ \{AB, C\} &= A\{B,C\} + \{A,C\}B && (17) \end{aligned}$$

Prvá vlastnosť predstavuje linearitu vzhľadom na argumenty a druhá aplikáciu na súčin po súčiniteľoch (Leibnitzovo pravidlo). Evidentne tiež platí anti-symetria vzhľadom na zámenu poradia

$$\{A, B\} = -\{B, A\} \tag{18}$$

[1] Striktne povedané, v literatúra sa navzývajú Poissonove zátvorky výraz bez hore uvedenéj imaginárnej jednotky i ale pre naše účely bude vhodnejšia tu uvedená "pracovná" definícia.

2 Kánonické kvantovanie

Pre štúdium odporúčam [3, 4].

2.1 Kvantovanie častíc

Kvantovanie predstavuje prechod od predstavy predstavy častíc s ľubovolne presne špeficikovateľnými charakteristikami ako hybnosť, poloha či energia ku prestave častíc nachádzajúcich sa v určitom *stave* charakterizovateľnom napr. pomocou komplexnej funkcie $|\Phi\rangle = \Phi(x_1, ..., x_N)$ (viď. časť 7.1) závisiacej ich súradníc. Fyzikálnym veličinám potom odpovedajú Hermitovské operátory [2] a v stave Φ môžeme namerať ich stredné hodnoty, napr.

$$< p_1 >= \langle\Phi|\, p_1\, |\Phi\rangle = \int dx_1..dx_N \Phi^*(x_1, ..., x_N) p_1 \Phi(x_1, ..., x_N) \tag{19}$$

Predpis kánonického kvantovania berie Hamiltonove rovnice ako korektné i v kvantovej mechanike, iba súradnice x_i a k nim patriace zovšeobecnené hybnosti p_i už nie sú čísla ale nekomutujúce operátory

$$x_i p_j - p_j x_i = [x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}. \tag{20}$$

Túto nekomutáciu môžeme motivovať nasledovným pozorovaním: klasická zovšeobecnená hybnosť je konštantná ak je Hamiltonián invariantný vzhľadom na jej súradnicu x. Operátor nekonečne malého posunutia súradnice x o δ je

$$T_\delta \Phi(x_1, ..., x, ..., x_N) = \Phi(x_1, ..., x + \delta, ..., x_N) = (1 + \delta\partial_x)\Phi(x_1, ..., x, ..., x_N). \tag{21}$$

Vlastné stavy Hamiltoniánu sú v čase nemenné lebo energia stavu sa zachováva. Ak je zároveň Hamiltonián nemenný pre posunutie o δ v súradnici x bude musieť byť aj vlastným stavom operátora posunutia, t.j. ∂_x. Presne tomu ale musí zodpovedať operátor hybnosti kánonicky združenej ku x a teda dostávame že $p \sim \partial_x$. Imaginárna jednotka vstupuje aby bol operátor hybnosti Hermitovský a $\hbar$ určuje rozmer na ktorej je nekomutatívnosť podstatná ($\hbar \to 0$ zodpovedá klasickej limite).

Poznamenajme, že nekomutácia x a p si vyžaduje, aby stav bol vo všeobecnosti komplexná (a nie iba reálna) funkcia, čo sa dá ľahko vidieť pre jednu voľnú časticu.

Komutátor troch ľub. operátorov má nasledovné vlastnosti:

1. $[a, b] = [b, a]$
2. $[a + b, c] = [a, c] + [b, c]$
3. $[ab, c] = a[b, c] + [a, c]b$

Z toho vyplýva pre ľubovolný operátor $f(p, x)$ [3]

1. $[p, f(p, x)] = -i\hbar\partial_x f(p, x)$
2. $[x, f(p, x)] = i\hbar\partial_p f(p, x)$

Hamiltonove rovnice pre operátory x a p teda môžeme písať ako [4]

$$i\dot{p} = [p, H] \tag{22}$$
$$i\dot{x} = [x, H] \tag{23}$$

Tieto rovnice majú riešenie

$$p(t) = e^{iHt} p e^{-iHt} \tag{24}$$
$$x(t) = e^{iHt} x e^{-iHt} \tag{25}$$

[2]Operátor Hermitovsky združený ku operátoru A, označujeme A^+ a je definovaný tak že pre ľub. dva stavy f a g platí $\int g^* A f = \int (A^+ g)^* f$. Operátor A sa volá Hermitovský ak $A = A^+$.

[3]funkcie operátorov vždy chápeme v zmysle rozovja Taylorovho radu, t.j. $f(p) = f(0) + f'(0)p + f''\frac{pp}{2} + ...$ Ak je poradie x a p pri tom nejednoznačné, nemá f zmysel.

[4]Od teraz budeme používať jednotky kde $\hbar = 1$, rsp. energiu budeme merať v násobkoch $\hbar$.

a teda operátory sa v čase vyvýjajú pomocou unitárnej transformácie $U(t) = e^{-iHt}$. Unitárna, t.j. $U^{-1}(t)U(t) = e^{iHt}e^{-iHt} = e^{iH(t-t)} = 1$ [5]. Pomocou riešení pre $p(t)$ a $x(t)$ nakoniec dostaneme pre ľubovolný operátor $f(p,x,t) = e^{iHt}f(p,x)e^{-iHt}$ a teda

$$i\dot{f} = [f, H], \tag{26}$$

alebo

$$i\hbar\dot{f} = [f, H], \tag{27}$$

ak prejdeme k SI jednotkám. Vidíme že Poissonove zátvorky naozaj predstavujú klasickú limitu komutátoru

$$[.,.] \to \hbar\{.,.\} \tag{28}$$

Všimnime si,že kým z pohybových rovníc nám $\hbar$ vypadne a teda tvar rovníc zostane, pre operátory p a x máme

$$[x,p] = i\hbar \to 0,$$

t.j. komutujú.

Do teraz sme pracovali s predstavou, že operátory sa vyvýjajú v čase a stavy sú objekty dané pre $t = 0$. Toto nazývame tzv. Heisenbergov obraz. Ukážeme si že Schródinergova rovnica, ako ju poznáme, je ekvivalentná doposiaľ vyloženej teórii kvantovania.

$$\begin{aligned} i\dot{f}(t) &= [f(t), H] \quad \to \quad f(t) = e^{iHt}fe^{-iHt} && (29)\\ \langle\phi|\, f(t)\, |\phi\rangle &= \langle\phi|\, e^{iHt}fe^{-iHt}\, |\phi\rangle = \langle\phi(t)|\, f\, |\phi(t)\rangle && (30) \end{aligned}$$

Pričom

$$i\partial_t\, |\phi(t)\rangle = i\partial_t e^{-iHt}\, |\phi\rangle = H\, |\phi(t)\rangle \tag{31}$$

čo je Schrödingerova rovnica.

Kánonické kvantovanie má teda nasledovnú štruktúru pre systém s N súradnicami $\{x_i\}_{i=1}^N$:

1. Postavíme klasickú Lagrangeovu funkciu

$$L(\dot{x}_i, x_i).$$

2. Nájdeme hybnosti a Hamiltonovu funkciu

$$\begin{aligned} p_i &= \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \\ H(p_i, x_i) &= \sum_i \dot{x}_i p_i - L \end{aligned}$$

3. Postulujeme komutačné vzťahy

$$[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$$

4. Operátory spĺňajú dynamické rovnice

$$\begin{aligned} i\dot{p}_i &= [p_i, H] \\ i\dot{x}_i &= [x_i, H] \end{aligned}$$

Tento program teraz implementujeme na harmonický oscilátor, retiazku oscilátorov a ich dlhovlnnú limitu - vlnenie kontinua. Prv si ešte ale ukážeme ako sa dá pekne a jednoducho dostať Hamiltoniá častice v sférických súradniciach.

###

Príklad. Nájdite Hamiltonián voľnej častive v sférických súradniciach, kvantovaním Lagrangeovej funkcie častice vyjadrenej už v sférických súradniciach

$$L(r,\phi,\theta) = \frac{1}{2}m\left(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2 + r^2\sin^2(\theta)\dot{\phi}^2\right).$$

[5] $e^Ae^B = e^{A+B}$iba ak $[A,B] = 0$

Re: Všetko priamočiare, až na fakt, že kánonicky združené hybnosti treba urobiť Herminovskými explicitne. Napr. $p_r = m\dot{r}$ čo sa núka položiť $p_r = -i\hbar\partial_r$. Takýto operátor ale nie je Hermitovský (v sférických súradniciach) a tak treba vziať $p_r = -i\hbar\partial_r - \frac{i}{r}$. Tento tvar nájdeme z analýzy ne-Hermitovskosti prvého pomocou

$$\int_0^\infty r^2 dr g^*(r)(-i\hbar\partial_r)f(r).$$

použitím integrácie *per-partes*. Podobne s p_θ a p_ϕ a nakoniec dostaneme korektný Hamiltonián.
###

2.2 Rovnice harmonických kmitov, retiazky a vĺn

2.2.1 Harmonický oscilátor

Ako vieme s posledné ho príkladu,

$$\begin{aligned} H &= \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 && (32) \\ \dot{p} &= -\omega^2 x && (33) \\ \dot{x} &= \frac{p}{m} && (34) \end{aligned}$$

Po kvantovaní, v Schrödingerovom obraze riešime parciálnu diferenciálnu rovnicu

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2\right]\phi(x) = i\hbar\frac{d\phi(x)}{dt}, \tag{35}$$

alebo prípadne k tomu patriaci vlastný problém

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2\right]\phi(x) = E\phi(x) \tag{36}$$

Takto sme postupovali v našom prvom oboznámení sa s kvantovou mechanikou (napr. [3]), teraz použijeme sofistikovanejšiu metódu - tajomnú *diagonalizáciu*. Hamiltonián

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2$$

a

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

budeme riešiť zavedením operátorov

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}\left(i\frac{p}{\sqrt{m}} + \sqrt{k}x\right) && (37) \\ a^+ &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}\left(-i\frac{p}{\sqrt{m}} + \sqrt{k}x\right) && (38) \end{aligned}$$

pre ktoré máme

1. $H = \hbar\omega(a^+a + \frac{1}{2})$
2. $[a, a^+] = 1$
3. Nech $H|n\rangle = E_n|n\rangle$ potom $Ha^+|n\rangle = (E_n + \hbar\omega)a^+|n\rangle$ a podobne $Ha|n\rangle = (E_n - \hbar\omega)a^+|n\rangle$. (a preto ich voláme *kreačné* a *anihilačné* operátory)
4. H je zo spodu ohraničaný a preto musí existovať stav s najnižšou energiou pre ktorý $a|0\rangle = 0$ a teda $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$. Z toho okamžite $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$.
5. Normalizácia: $\langle n-1|\,aa^+\,|n-1\rangle = \langle n|\,n\,|n\rangle$, t.j. $|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}a^+|n-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}[a^+]^n|0\rangle$.

Týmto sme problém vyriešili. Ak chceme funkcie v x reprezentácii tak napr. pre zakl. stav

$$a\phi_0(x) = (-i\hbar\partial_x - i\omega x)\phi_0(x) = 0$$

z čoho ľahko dostaneme

$$\phi_0(x) = \left(\frac{2\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{\omega}{\hbar}x^2}.$$

Excitované stavy dostaneme podobne aplikovaním a^+ na túto funkciu.

Uvažujme teraz časový vývoj. Kým pre operátory hybnosti a polohy platili Heisenbergové rovnice v tvare

$$\dot{p} = -kx, \quad \dot{x} = \frac{p}{m}, \tag{39}$$

pre kreačné a anihilačné operátory máme rovnice

$$\begin{aligned} i\dot{a} &= [a, H] = \omega a & (40) \\ i\dot{a^+} &= [a^+, H] = -\omega a^+ & (41) \end{aligned}$$

ktoré vieme priamo integrovať na

$$a(t) = ae^{-i\omega t}, \quad a^+(t) = a^+ e^{i\omega t}. \tag{42}$$

Diagonalizácia nám rozložila dve pôvodne spojené pohybové rovnice na dve nezávislé. Zjavne, riešenie pomocou kreačných a anihilačných operátorov je velmi elegantné. Akokoľvek tajomné sa zdá ich zavedenie, k získaniu ich vzťahu ku x a p možno priamočiaro prísť ak priamo riešime vyššie uvedené pohybové rovnice pre operátory x a p (viď. napr. [2]).

Tento štýl riešenia sa dá použiť na čokoľvek, čo je ekvivalentné súboru nezávislých oscilátorov, napr. kmity mriežky - fonóny, elektro-magnetické pole - fotóny, kmity elektrónovej plazmy - plazmóny,... Tak si to prv preskúšajme na kmitoch a vlnách v 1D.

2.2.2 Kmity

Uvažujme retiazku N hmotných bodov pospájaných s harmonickými pružinami. Nech má retiazka periodické okrajová podmienky, t.j. predpokladáme že bod $n = 0$ je identický s bodom $n = N$. Lagrangeova funkcia tohto systému je

$$\begin{aligned} L(\{y_n, \dot{y}_n\}) &= \sum_n \frac{1}{2} m\dot{y}_n^2 - \frac{1}{2} k(y_n - y_{n-1})^2 & (43) \\ \ddot{y}_n &= \frac{k}{m}(y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}) & (44) \end{aligned}$$

Po kvantovaní máme $[y_n, m\dot{y}_{n'}] = i\hbar\delta_{n,n'}$ a napr. Schrödingerovu rovnicu

$$\left[\sum_n -\frac{\hbar^2}{2m}\partial^2_{y_n} + \frac{1}{2}k(y_n - y_{n-1})^2)\right] \Phi(y_1, \ldots, y_N) = E\Phi(y_1, \ldots, y_N) \tag{45}$$

Všimnime si, toto je mnoho-časticová SchR, a predsa ju vieme riešiť! [Ako je to so symetriou vzhľadom na zámenu častíc??]

Problém retiazky môžeme vyriešiť ešte pred kvantovaním diskrétnou Fourrierovou transformáciou súradníc. Týmto pretransformujeme pospájané oscilátory na súbor nezávislých oscilátorov. Momentálne má Lagrangeova funkcia v maticovom prepise tvar

$$L = \frac{1}{2}\dot{\boldsymbol{y}}\boldsymbol{A}\dot{\boldsymbol{y}} - \frac{1}{2}\boldsymbol{y}\boldsymbol{B}\boldsymbol{y} \tag{46}$$

kde

$$\begin{aligned} \boldsymbol{A} &= \begin{bmatrix} m & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & m & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & m & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} & (47) \\ \boldsymbol{B} &= \begin{bmatrix} 2k & -k & 0 & \cdots & -k \\ -k & 2k & -k & \cdots & 0 \\ 0 & -k & 2k & -k & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\ -k & 0 & \cdots & -k & 2k \end{bmatrix} & (48) \end{aligned}$$

Matice $\boldsymbol{A}$ aj $\boldsymbol{B}$ majú tú istú translačnú symetriu a dokonca $\boldsymbol{A}$ je násobkom jednotkovej matice a preto ich môžeme naraz priviesť do diagonálneho tvaru diskrétnou Fourrierovou transformáciou (viď. Appendix 7.3)

$$y_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} y_k e^{i2\pi kn/N} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{-N/2+1}^{N/2} y_k e^{i2\pi kn/N} \tag{49}$$

Použijeme pritom konvenciu druhého tvaru ktorá je založená na fakte, že napr. bod $k = N/2+1$ je ekvivalentný $k = -N/2+1$. Toto pochádza priamo s periodicity výchyliek $y_{n+N} = y_n$. Pripomenme si tiež že platí 'ortogonalita'

$$\frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1} e^{i2\pi(k-k')n/N} = \delta_{k,k'} \tag{50}$$

a že pre reálne y_j máme $y_k = y^*_{-k}$.

Po transformovaní dostaneme Lagrangeovu funkciu

$$\begin{aligned} L(\dot{y}_k, y_k) &= \sum_{k=-N/2+1}^{N/2} \frac{1}{2}m\dot{y}_k\dot{y}_{-k} - \frac{1}{2}k(2-2\cos(2\pi k/N))y_k y_{-k} & (51)\\ &= \sum_{k=-N/2+1}^{N/2} \frac{1}{2}m\dot{y}_k\dot{y}_{-k} - \frac{1}{2}m\omega_k^2 y_k y_{-k} & (52)\end{aligned}$$

Toto je suma nezávislých oscilátorov s zavedenými frekvenciami $\omega_k = \sqrt{\frac{k}{m}}2|\sin(\pi k/N)|$ (viď. obr. 1) o čom sa presvedčíme ak si napíšeme príslušné klasické Hamiltonove rovnice

$$\begin{aligned} \dot{p}_k &= -m\omega_k^2 y_{-k} & (53)\\ \dot{y}_{-k} &= \frac{1}{m}p_k, & (54)\end{aligned}$$

a môžme teda použiť výsledok predchádzajúcej časti kvantovania jednoduchého harmonického oscilátora.

Pri kvantovaní budeme pritom uvažovať ako súradnice iba y_k a nie aj y_k^*, nakoľko tieto sú už v prvých obsiahnuté. Priamo s týmto súvisí fakt, že kým v priamom priestore sme mali N súradníc $\{y_n\}$, v Fourrierovom priesotre máme zdanlivo $2N$ - $\{\Re\{y_k\}, \Im\{y_k\}$ alebo $\{y_k, y_k^*\}$. Podmienka $y_k = y^*_{-k}$ nám utvrdí že ich je $2N$ naozaj iba zdanlivo... Keď ideme kvantovať tak musíme pracovať už len s nezávislými súradnicami a preto budeme kvantovať iba y_k.

Postulujeme teda

$$[y_k, p_{k'}] = i\hbar\delta_{k,k'} \tag{55}$$

Pre finálne rozriešenie (do-diagonalizovanie) použijeme náhľad z harmonického oscilátora a položíme

$$\begin{aligned} a_k &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_k}}\left(i\frac{p_{-k}}{\sqrt{m}} + \sqrt{m}\omega_k y_k\right) & (56)\\ a_k^+ &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_k}}\left(-i\frac{p_k}{\sqrt{m}} + \sqrt{m}\omega_k y_{-k}\right) & (57)\\ & & (58)\end{aligned}$$

Čo môžeme invertovať aj na

$$\begin{aligned} y_k &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_k}}(a_k + a^+_{-k}) & (59)\\ p_k &= m\dot{y}_{-k} = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega_k}{2}}(a_k^+ - a_{-k}). & (60)\end{aligned}$$

Pre $a_k, a^+_{k'}$ z tohto ľahko dostaneme ich komutačné vzťahy

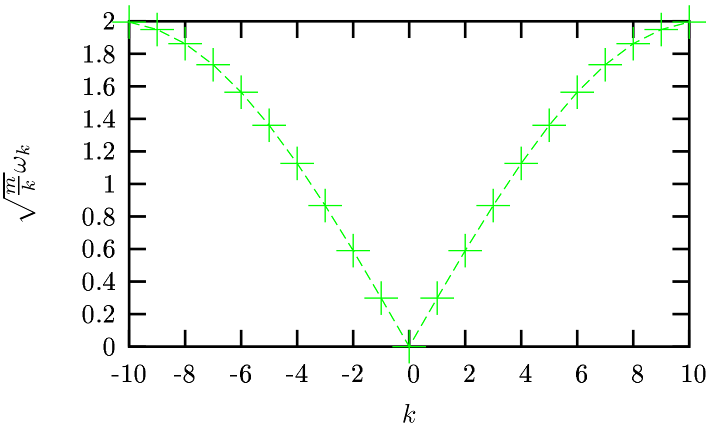
$$\begin{aligned} [a_k, a^+_{k'}] &= \delta_{k,k'}, & (61)\\ [a_k, a_{k'}] &= 0, & (62)\\ [a_k^+, a^+_{k'}] &= 0. & (63)\end{aligned}$$

Týmto získame algebraické riešenie problému retiazky v tvare

$$H = \sum_{k=-N/2+1}^{N/2} \hbar\omega_k(a_k^+ a_k + \frac{1}{2}) \quad \omega_k = \sqrt{\frac{k}{m}}2|\sin(\pi k/N)|, \quad [a_k, a^+_{k'}] = \delta_{k,k'} \tag{64}$$

a s tým súvisiace vlastné stavy tvaru

$$|n_{k1}, n_{k2}, ...\rangle \frac{\left(a^+_{k1}\right)^n_{k1}}{\sqrt{n_{k1}!}}\frac{\left(a^+_{k2}\right)^n_{k2}}{\sqrt{n_{k2}!}}...|0\rangle \tag{65}$$



Obrázok 1: Disperzný vzťah pre retiazku s $N = 21$ bodmi.

Tieto sú priamym súčinom stavov jednotlivých oscilátorov pre $k = -N/2+2, \ldots, N/2$ pretože vstupujú aditívne do Hamiltoniánu (64) a operátory pre $k \neq k'$ navzájom komutujú. Pre ľubovolné k môžeme mať akýkoľvek celočíselný počet týchto excitácií, čo je vlasnosť ktorou charakterizujeme bozóny. Preto komutačný vzťah (61) je charakteristickým pre bozóny.

Ukážeme si, že a_k^+ naozaj vytvorí excitáciu - fonón - zodpovedajúci vpravo šíriacej sa rovinnej vlne. Toto uvidíme ak prejdeme späť do reprezentácii polôh na mriežke $|n\rangle, n = 0, ..., N-1$. Pýtame sa: ak v $t = 0$ vytvoríme jeden fonón v stave k, aká je amplitúda pravdepodobnosti že v čase t ho nájdeme na mieste n? Matematicky to je

$$\langle n| e^{-iHt} a_k^+(t=0) |0\rangle = \sum_{k'} \langle n|k'\rangle \langle k'| a_k^+ e^{-i\omega_k t} |0\rangle = \sum_{k'} \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i(\frac{2\pi kn}{N} - \omega_k t)} \delta_{k,k'} \tag{66}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i(\frac{2\pi kn}{N} - \omega_k t)} \tag{67}$$

čo naozaj zodpovedá doprava idúcej rovinnej vlne.

Je užitočné vyjadriť si operátor výchlky y_n pomocou a_k a a_{-k}

$$y_n = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_k N}} \sum_{-N/2}^{N/2} a_k e^{i2\pi kn/N} + a_k^+ e^{-i2\pi kn/N} \tag{68}$$

Ak nahliadneme na tento výraz v Heisenbergovom obraze, dostávame pekné porovnanie s klasickým výsledkom pre kmity retiazky. [pre $\sqrt{\hbar}\langle a_k(t)\rangle = \sqrt{\hbar}\langle a_k^+(t)\rangle^*$ veľké, tohto reálna časť zodpovedá klasickej amplitúde oscilácii]. Z tohto náhľadu tiež vidíme že a_k a a_k^+ zodpovedajú anihilácii a kreácii kvanta kmitov (fonónu) šíriacom sa v kladnom smere, pričom z tvaru Hamiltoniánu vieme že jeho energia je $\hbar\omega_k$.

Uvedomme si ale že fonóny síce majú vlastnosti bozónov ale nie sú to fundamentálne častice. Ich bozónický charakter pochádza z faktu, že popisujú excitácie s nemenným počtom fundamentálnych častíc - hmotných bodov retiazky. Presnejšie porozumieme tejto poznámke keď sa neskôr oboznámime s technikou druhého kvantovania pre fundamentálne častice (t.j. pre nás elektróny, protóny, neutróny).

2.2.3 Vlny

Zoberme iba pomaly-meniace sa výchylky s priestorovou súradnicou Nech $y_i = y(x)$ kde $x = id$ a nech celková dĺžka segmentu je $L = Nd$. Uvažujme limitný proces $N \to \infty$, $Nd = L = const$ (Prehľad týcho prechodov pre diskrétnu Fourrierovu transformáciu je daný v Appendixe 7.2). Potom zrejme

$$\partial_x^2 y(x) = \frac{y(x-d) - 2y(x) + y(x+d)}{d^2} + \mathcal{O}(d^2), \tag{69}$$

čo je pravá strana rovnice (44) a vlnová rovnica nám prejde na tvar

$$\ddot{y} = \frac{kd^2}{m} \partial_x^2 y \tag{70}$$

s rýchlosťou šírenia vĺn $u^2 = \frac{kd^2}{m}$. Pri tejto limite v Lagrangeovej funckii - $\sum_i \to \int \frac{dx}{d}$ - a zavedením dĺžkovej hustoty hmotnosti $\mu = m/d$ a renormalizovanej tuhosti $\kappa = kd$ dostaneme (s týmito definíciami máme pre rýchlosť šírenia vĺn $u = \sqrt{\kappa/\mu}$)

$$L(y(x), \dot{y(x)}) = \int dx \frac{1}{2}\mu(\dot{y}(x))^2 - \frac{1}{2}\kappa(\partial_x y(x))^2 \tag{71}$$

Nájdením Lagrangeový rovníc poľa $y(x)$ dostaneme opäť vlnovú rovnicu. Analogicky môžeme zaviesť hybnosť $\pi(x) = \delta L/\delta\dot{y}(x)$ a dostať Hamiltonovu formuláciu.

Otázka znie, ako máme kvantovať $y(x)$ a $\pi(x)$? Kvantovanie bude zrejme limitou kvantovania diskrétnej retiazky. V prvom rade si uvedomme že

$$\omega_k = \sqrt{k/m} 2|\sin(\pi k/N)| \approx uq, \quad q = \frac{2\pi}{L}k, k = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \tag{72}$$

Keďže q zostáva diskrétne, budeme prirodzene požadovať aby stále platilo

$$[a_k, a_{k'}^+] = \delta_{k,k'} \tag{73}$$

Preveďme teraz limitu v rozklade výchylky kmitov

$$\begin{aligned} y(x) &= \lim_{N\to\infty} \sum_{-N/2}^{N/2} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_k N}} \left(a_k e^{i2\pi kn/N} + a_k^+ e^{-i2\pi kn/N}\right) && (74) \\ &= \sum_{q=-\infty}^{\infty} \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu uqL}} \left(a_q e^{iqx} + a_q^+ e^{-iqx}\right) && (75) \end{aligned}$$

Podobne, keby sme spravili pre hybnosť $\pi(x)$ by sme dostali

$$\pi(x) = \sum_q i\sqrt{\frac{\hbar\mu uq}{2L}}(a_q^+ e^{-iqx} - a_q e^{iqx}) \tag{76}$$

Teraz môžeme priamo vyčísliť komutátor hybnosti a amplitúdy poľa, použitím posledných dvoch rozvojov dostaneme

$$[y(x), \pi(x')] = i\hbar\frac{1}{L}\sum_{q=-\infty}^{\infty} e^{iq(x-x')} = i\hbar\delta(x-x'), \tag{77}$$

kde $\delta(x-x')$ je Diracova delta funkcia, pre ktorú platí

$$\delta(x-x') = \left\{ \begin{array}{ll} 0 & x \neq x' \\ \infty & x = x' \end{array} \right. , \tag{78}$$

kde nekonečnosť rozumieme v takom zmysle aby

$$\int \delta(x-x')dx = 1, \tag{79}$$

pričom v poslednej rovnici sa rozumie že x' je v intervale integrovania.

Týmto sme spätna získali kánonický predpis, ktorý je limitou diskrétnej sústavy na kontinuum. Budeme predpokladať, že tento predpis predstavuje korektné kánonické kvantovanie kontinua (poľa) vo všeobecnosti.

Pre našu 1D vlnovú rovnicu ale riešiť ale už nič nemusíme; riešenia vieme priamo pomocou limity riešení predchádzajúcej časti

$$H = \sum_q \hbar uq a_a^+ a_q \tag{80}$$

a všetko čo s tým súvisí.

2.3 Interackia elektrónu s fonónmi v jednorozmernom modeli tuhej látky

Primárny cieľ tejto podčasti je demonštrovať použite doteraz vybudovaného aparátu na jednoduchom probléme. Ako výsledok dostaneme spontánnu emisiu fonónov a z toho vyplývajúcu nestabilitu excitovaných stavov elektrónu v tuhej látke. Použijeme atómové jednotky kde $\hbar = m_e = e = 1$.

2.3.1 Hamiltonián elektrónu a mriežky

$$H = -\frac{1}{2}\partial_x^2 + \sum_n U(x - R_n^0 - y_n) + \sum_k \omega_k a_k^+ a_k \tag{81}$$

pričom $U(r)$ je potenciál elektrónu v dôsledku bodu mriežky v počiatku. Pre malé kmity mriežky máme

$$U(x - R_n^0 - y_n) = U(x - R^0) - \partial_x U(x - R_n^0) y_n + \mathcal{O}(y_n^2) \tag{82}$$

Vidíme že môžeme Hamiltonián rozdeliť na časť popisujúcu elektrón neinteragujúci s kmitmi

$$H^0 = -\frac{1}{2}\partial_x^2 + \sum_k \omega_k a_k^+ a_k \tag{83}$$

a interakčný člen

$$V = -\sum_n \partial_x U(x - R_n^0) y_n \tag{84}$$

V ďalšom budeme predpokladať že vlastné stavy H^0 už poznáme:

2.3.2 Pravdepodobnosť prechodu

Nech v $t = 0$ je elektrón-fonónový systém v stave

$$|\alpha, n(k)\rangle = \phi_\alpha(x) \Pi_k \frac{[a_k^+]^{n_k}}{\sqrt{n_k!}} |0\rangle \tag{85}$$

Naša otázka je:“Aká je pravdepodobnosť že v čase $t > 0$ ju nájdeme v inom stave $|\alpha', n'(k)\rangle$?” Hoci by sme mohli postupovať štandardne pomocou časovej poruchovej teórie (exaktne to nevieme počítať lebo náš Hamiltonián už nie je kvadratická forma), my použijeme postup ktoý je veľmi pekný a pôsobí motivačne pre zavedenie Greenových funkcií ku ktorým sa neskôr dostaneme.

Na našu otázku nám zjavne odpovie výraz

$$P_{\alpha',\alpha}(t) = |A_{\alpha',\alpha}(t)|^2 = \left| \langle \alpha', n'(k) | e^{-iHt} | \alpha, n(k) \rangle \right|^2 \tag{86}$$

Samotná amplitúda pravdepodobnosti pritom spĺňa evidentne rovnicu

$$\begin{aligned} i\partial_t A_{\alpha',\alpha}(t) &= \langle \alpha', n'(k) | H e^{-iHt} | \alpha, n(k) \rangle & (87) \\ &= \left(e_{\alpha'} + \sum_k \omega_k n'(k) \right) A_{\alpha',\alpha}(t) + \langle \alpha', n'(k) | V e^{-iHt} | \alpha, n(k) \rangle & (88) \end{aligned}$$

Problém budeme riešiť v lineárnom priblížní vzhľadom na elektrón-fonónovú interakciu V. V tom prípade bude stačiť ak sa obmedzíme na H^0 v exponente posledného člena v (88). V lineárnom priblížení teda dostávame

$$i\partial_t A_{\alpha',\alpha}(t) = \left(e_{\alpha'} + \sum_k \omega_k n'(k) \right) A_{\alpha',\alpha}(t) + \langle \alpha', n'(k) | V | \alpha, n(k) \rangle e^{-i\left(e_\alpha + \sum_k \omega_k n(k)\right)t} \tag{89}$$

ktorú vieme vyriešiť s výsledkom

$$A_{\alpha',\alpha}(t) = \delta_{\alpha',\alpha} + \int_0^t dt' \langle \alpha', n'(k) | V | \alpha, n(k) \rangle e^{-i\left\{e_\alpha - e_{\alpha'} + \sum_k \omega_k [n(k) - n'(k)]\right\}t'} \tag{90}$$

Maticový element Najprv si rozoberieme výraz

$$\langle \alpha', n'(k) | V | \alpha, n(k) \rangle \tag{91}$$

Zavedieme si označenie

$$C_{\alpha',\alpha}(k) = -\sum_n e^{ikR_n^0} \int dx \phi_{\alpha'}^*(x) \partial_x U(x - R_n^0) \phi_\alpha(x) dx. \tag{92}$$

Tento maticový element sa dá ďalej upraviť ak by sme uvážili, že stavy $\phi_\alpha(x)$ predatavujú Blochove stavy s dobre definovaným kvantovým číslom q - vlnovým vektorom z prvej Brillouinovej zóny. Týmto sa tu ale zaoberať nebudeme, tieto problémy patria ku prednáškam z FTL.

Čo je podstatné je, že maticový element teraz nadobúda tvar

$$\langle \alpha', n'(k) | V | \alpha, n(k) \rangle = \langle n'(k) | \sum_k \frac{1}{\sqrt{2m\omega_k N}} \left(C_{\alpha',\alpha}(k) a_k + C_{\alpha',\alpha}(-k) a_k^+ \right) | n(k) \rangle \tag{93}$$

pričom sme použili rozklad amplitúd výchyliek y_n podľa (68). Pretože už poznáme operovanie a_k a a_k^+ ľahko dostaneme

$$\begin{aligned} &\langle \alpha', n'(k) | V | \alpha, n(k) \rangle = \\ &\sum_k \frac{1}{\sqrt{2m\omega_k N}} \left(C_{\alpha',\alpha}(k) \sqrt{n(k)} \delta_{n'(k') - \delta_{k',k}, n(k')} + C_{\alpha',\alpha}(-k) \sqrt{n(k)+1} \delta_{n'(k') + \delta_{k',k}, n(k')} \right) \end{aligned} \tag{94}$$

Časový integrál teda dá

$$\int_0^t dt' e^{-i\Delta E t'} = \frac{1 - e^{-i\Delta E t}}{i\Delta E}, \quad \Delta E = e_\alpha - e_{\alpha'} + \sum_k \omega_k \left[n(k) - n'(k) \right].$$

Pre pravdepodobnosť prechodu budeme potrebovať kvadrát tohto výrazu pre veľký čas

$$\frac{1}{(\Delta E)^2} \left(2 - 2\cos(\Delta E t) \right) \tag{95}$$

Ak by sme teraz položili $t = \infty$ dostaneme nejasný výraz. `odiskutovať prečo...` Zmysluplný výsledok dostaneme až pre pravdepodobnosť prechodu za jednotku času

$$\frac{dP}{dt} \sim \frac{2\sin(\Delta E t)}{\Delta E} \to 2\pi \delta(\Delta E) \tag{96}$$

Anticipovaním tohto dostaneme nakoniec [`povedať prečo krížne členy zmiznú`]

$$\frac{dP_{\alpha',\alpha}(t)}{dt} = \begin{cases} 2\pi \sum_k \delta(e_\alpha - e_{\alpha'} + \omega_k) \frac{|C_{\alpha',\alpha}(k)|^2}{2m\omega_k N} n(k) & e_\alpha - e_{\alpha'} > 0 \\ 2\pi \sum_k \delta(e_\alpha - e_{\alpha'} - \omega_k) \frac{|C_{\alpha',\alpha}(-k)|^2}{2m\omega_k N} (n(k)+1) & e_\alpha - e_{\alpha'} < 0 \end{cases} \tag{97}$$

Tento výraz evidentne dáva emisiu a absorpciu a spontánnu emisiu fonónov.... `viac diskusie neskôr`

3 Popis mnohých častíc metódou druhého kvantovania

3.1 Bozóny

3.2 Fermióny

4 Kvantovanie elektro-magnetického poľa

5 Teória funkcionálu hustoty

6 Greenove funckie v mnoho-časticových problémoch vo fyzike kondenzovaných látok

7 Appendix

7.1 Hilbertov priestor stavov

Množina všetkých možných stavov tvorí *Hilbertov priestor* so skalárnym súčinom medzi dvoma stavmi Φ a Ψ v tvare

$$\langle\Phi|\Psi\rangle = \int dx_1..dx_N \Phi^*(x_1,...,x_N)\Psi(x_1,...,x_N) \tag{98}$$

Pomocou skalárneho súčinu môžeme potom nájsť bázu tohto priestoru $\{\Phi_i\}_{i=1}^{\infty}$ spĺňajúcu podmienky ortonormality

$$\langle\Phi_i|\Phi_j\rangle = \delta_{ij} \tag{99}$$

a úplnosti

$$\sum_i \Phi_i^*(x_1,...,x_N)\Phi_i(x_1',...,x_N') = \delta(x_1-x_1')...\delta(x_N-x_N') \tag{100}$$

Posledná vlastnosť sa tiež zapisuje v tvare

$$\sum_i |\Phi_i\rangle\langle\Phi_i| = \mathbf{1}. \tag{101}$$

Báz v Hilbertovom priestore exsituje veľa..., prechádzať môžeme od jednej ku druhej pomocou unitárnej transformácie

$$\Phi_i' = \sum_j U_{ij}\Phi_j, \quad \sum_k U_{ik}^+ U_{kj} = \delta_{ij}. \tag{102}$$

7.2 Rôzne limity diskrétnej Fourrierovej transformácie

Začneme tým že si zavedieme miesto indexu v reálnom priestore n súradnicu $x = nd$

$$y(x_n) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k=-N/2+1}^{N/2} y_k e^{i\frac{2\pi k}{Nd}x_n} \tag{103}$$

$$y_k = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{n=0}^{N-1} y(x_n)e^{-i\frac{2\pi k}{Nd}x_n} \tag{104}$$

miesto celočíselného k si zavedieme $q = \frac{2\pi k}{Nd}$ ktoré teraz prebieha cez hodnoty

$$q \in \left(-\frac{\pi}{d} + \frac{2\pi}{Nd}, \frac{\pi}{d}\right), \quad \Delta q = \frac{2\pi}{Nd} \tag{105}$$

Pretože máme dve sumy ktoré môžu prechádzať na integrál budeme mať 3 rôzne prípady.

$N \to \infty, d$ fixed

V tomto prípade dostávame nekonečne dlhú retiazku hmotných bodov a transformácia nadobudne tvar

$$y(x_n) = \frac{1}{\sqrt{N}}\int_{-\pi/d}^{\pi/d} \frac{Nd}{2\pi} dq y_q e^{iqx_n} \tag{106}$$

$$y_q = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{n=-\infty}^{\infty} y(x_n)e^{-iqx_n} \tag{107}$$

V sume cez n sú obe hranice položené do nekonečna lebo tie sú viazané periodickou podmienou a teda ak ide jedno musí i druhé. Nakoniec aby sme korektne ošetrili prítomnosť N v týchto výrazoch musíme zaviesť renormalizované Fourrierove obrazy

$$y(q) = \sqrt{N}y_q \tag{108}$$

čo nakoniec prinesie

$$y(x_n) = \int_{-\pi/d}^{\pi/d} \frac{d}{2\pi} dq y(q) e^{iqx_n} \tag{109}$$

$$y(q) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} y(x_n)e^{-iqx_n} \tag{110}$$

$N \to \infty, d \to 0, Nd = L$ fixed

Toto zodpovedá kontinuu s konečnou dĺžkou L a teda štandartným Fourrierovým radom.

$$y(x) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{-\infty}^{\infty} y_q e^{iqx}, \quad q = \frac{2\pi}{L} k \tag{111}$$

$$y_q = \frac{1}{\sqrt{N}} \int_0^L \frac{dx}{d} y(x) e^{-iqx} \tag{112}$$

Musíme opäť renormalizovať a to

$$y(q) = y_q d\sqrt{N} \tag{113}$$

s výsledkom

$$y(x) = \frac{1}{L} \sum_{-\infty}^{\infty} y(q) e^{iqx}, \quad q = \frac{2\pi}{L} k \tag{114}$$

$$y(q) = \int_0^L dx y(x) e^{-iqx} \tag{115}$$

$N \to \infty, d \to 0, Nd \to \infty$

Tento posledný prípad predstavuje nekonečne rozľahlé kontinuum a teda Fourierrovu transformáciu. V Fourrierovom rade spravíme posledný prechod sumy na integrál

$$y(x) = \frac{1}{L} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{L}{2\pi} dq y(q) e^{iqx} \tag{116}$$

$$y(q) = \int_{-\infty}^{\infty} dx y(x) e^{-iqx}. \tag{117}$$

Identický výsledok by sme dostali pre prechod prvej uvažovanej situácia ku $d \to 0$.

7.3 Vlastné stavy translačne invariantnej matice (Hamiltoniánu)

Tento prístup nám zdôvodní prečo používame diskrétnu Fourrierovu transformáciu na riešenie retiazky a poskytne spoločný pohľad na Blochove stavy elektrónu v tuhej látke aj rôzne módy fonónov,... Ide v princípe o grupovo-teoretický postup, ale bez akýchkoľvek "fancy" teorémov a názvoslovia.

Predpokladajme že máme systém $\boldsymbol{H}$ ktorý vyzerá identicky ak ho posunieme o d ($\boldsymbol{H}(x+d) = \boldsymbol{H}$) pričom celkovo má dĺžku L, t.j. $L = Nd$ a na koncoch je daný periodickými okrajovými podmienkami.

Ak označíme $\boldsymbol{T}_d$ ako operátor posunutia o d tak platí

$$[\boldsymbol{T}_d, \boldsymbol{H}] = 0 \tag{118}$$

a teda vlastné stavy $\boldsymbol{H}$ sú aj vlastnými stavmi $\boldsymbol{T}_d$.

Aké sú vlastné stavy $\boldsymbol{T}_d$? Nech

$$\boldsymbol{T}_d \left|\phi\right\rangle = T_d \left|\phi\right\rangle. \tag{119}$$

Potom platí že

$$\left|\phi\right\rangle = \boldsymbol{T}_d^N \left|\phi\right\rangle = T_d^N \left|\phi\right\rangle \tag{120}$$

Pretože systém po N násobnej translácii sa dostaneme do identity (Periodické okrajové podmienky). Z toho dostávame že vlastné hodnoty operátora posunutia nadobúdajú hodnoty

$$T_d = e^{2\pi i n/N}, \quad n = 0, 1, ..., N-1 \text{ alebo } n = -N/2+1, ..., N/2 \tag{121}$$

Ak do týchto vlastných hodnôt vpašujeme d môžeme ich tiež písať v tvare

$$T_d = e^{ik_n d}, \quad k_n = \frac{2\pi}{L} n, n = -N/2+1, ..., N/2 \tag{122}$$

K nim patriace vlastné stavy budeme označovať ako $\left|k_n\right\rangle$ alebo $\phi_{k_n}(x)$. Pre ne platí

$$\boldsymbol{T}_d \phi_{k_n}(x) = e^{ik_n d} \phi_{k_n}(x) = \phi_{k_n}(x+d) \tag{123}$$

Evidentne teda ak zvolíme

$$\phi_{k_n}(x) = e^{ikx} u_{k_n}(x) \tag{124}$$

bude už $u_{k_n}(x)$ funkcia periodická v x. Ak x zodpovedá jedinému diskrétnemu indexu (t.j. d posunutiu o jeden riadok v matici), ako je to pri 1D jednoduchej harmonickej retiazke, je $u_{k_n}(x)$ jednoducho konštanta.

Tým že sme našli vlastné stavy $\boldsymbol{T}_d$ našli sme zároveň aj vlastné stavy $\boldsymbol{H}$. V prípade ak posunutie symetrie obsahuje niekoľko súradníc (riadkov) $\boldsymbol{H}$, bude treba ešte do-diagonalizovať pod-bloky; pre kmity tuhých látok tomu zodpovedájú rôzne módy (optické kmity, akustické kmity...) a pre elektróny v tuhých látkach tomu zodpovedá hľadanie jednotlivých pásov pásovej štruktúry (hľadanie periodickej funkcie $u_{k_n}(x)$).

Referencie

[1] L. D. Landau a E. M. Lifshitz, *Mechanika*, Nauka 1930?.

[2] L. D. Landau a E. M. Lifshitz, *Kvantovaja mechanika*, Nauka 1937?.

[3] L. Schiff, *Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, 1955.

[4] H. Haken, *Kvantovo-poľová teória tuhých látok*, Alfa, 1987.