Kvantová mechanika I: Domácí úkoly

Michal Grňo

29. prosince 2019

1 Cvičení 9. 10.

1.1 Zadání

Jsou dány operátory $\hat{A}$ a $\hat{B}$,

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] \neq 0,$$

$$\left[\hat{A}, \left[\hat{A}, \hat{B}\right]\right] = \left[\hat{B}, \left[\hat{A}, \hat{B}\right]\right] = 0.$$

Nalezněte, čemu se rovná operátor $\hat{C}$, pro který platí

$$\mathrm{e}^{\hat{A}}\, \mathrm{e}^{\hat{B}} = \mathrm{e}^{\hat{A}+\hat{B}}\, \mathrm{e}^{\hat{C}} = \mathrm{e}^{\hat{C}}\, \mathrm{e}^{\hat{A}+\hat{B}} = \mathrm{e}^{\hat{A}+\hat{B}+\hat{C}}.$$

1.2 Řešení

Na cvičení jsme se přesvědčili, že užitečným nástrojem při odvozování vztahů pro operátorovu exponenciolu je výraz $\mathrm{e}^{\xi \hat{A}}$ a jeho derivace podle ξ. Tohoto triku využijeme i nyní – nalezneme $\hat{X}(\xi)$ takové, aby platilo:

$$\mathrm{e}^{\hat{X}(\xi)} = \mathrm{e}^{\xi \hat{A}}\, \mathrm{e}^{\xi \hat{B}}.$$

Derivací vztahu získáme:

$$\frac{\partial}{\partial \xi}\ \mathrm{e}^{\hat{X}(\xi)} = \frac{\partial}{\partial \xi}\ \mathrm{e}^{\xi \hat{A}}\, \mathrm{e}^{\xi \hat{B}}$$

$$\hat{X}'(\xi)\, \mathrm{e}^{\hat{X}(\xi)} = \hat{A}\, \mathrm{e}^{\xi \hat{A}}\, \mathrm{e}^{\xi \hat{B}} + \mathrm{e}^{\xi \hat{A}}\ \hat{B}\, \mathrm{e}^{\xi \hat{B}}$$

$$\hat{X}'(\xi)\, \mathrm{e}^{\hat{X}(\xi)} = \left(\hat{A} + \mathrm{e}^{\xi \hat{A}}\ \hat{B}\, \mathrm{e}^{\xi \hat{B}}\, \mathrm{e}^{-\xi \hat{B}}\, \mathrm{e}^{-\xi \hat{A}}\right) \mathrm{e}^{\xi \hat{A}} \mathrm{e}^{\xi \hat{B}}$$

$$\hat{X}'(\xi)\, \mathrm{e}^{\hat{X}(\xi)} = \left(\hat{A} + \mathrm{e}^{\xi \hat{A}}\ \hat{B}\, \mathrm{e}^{-\xi \hat{A}}\right) \mathrm{e}^{\hat{X}(\xi)}$$

$$\hat{X}'(\xi) = \hat{A} + \mathrm{e}^{\xi \hat{A}}\ \hat{B}\, \mathrm{e}^{-\xi \hat{A}}$$

Využili jsme vlastnosti, že operátor $\mathrm{e}^{\hat{A}}$ je vždy regulární a jeho inverze je $\mathrm{e}^{-\hat{A}}$. Připomeneme si Glauberův vzorec:

$$\mathrm{e}^{\hat{M}}\ \hat{N} \mathrm{e}^{-\hat{M}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\ \hat{K}_n(\hat{M}, \hat{N})$$

$$\hat{K}_0(\hat{M}, \hat{N}) = \hat{N}$$

$$\hat{K}_{n+1}(\hat{M}, \hat{N}) = \left[\hat{M}, \hat{K}_n\right]$$

Dosazením do naší rovnice získáme:

$$\hat{X}'(\xi) = \hat{A} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\ \hat{K}_n(\xi\hat{A}, \hat{B})$$

$$\hat{X}'(\xi) = \hat{A} + \sum_{n=0}^{\infty} \xi^n \frac{1}{n!}\ \hat{K}_n(\hat{A}, \hat{B})$$

$$\hat{X}(\xi) = \int \left(\hat{A} + \sum_{n=0}^{\infty} \xi^n \frac{1}{n!}\ \hat{K}_n(\hat{A}, \hat{B}) \right)\ \mathrm{d}\xi$$

$$\hat{X}(\xi) = \xi\hat{A} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\xi^{n+1}}{n+1}\ \frac{1}{n!}\ \hat{K}_n(\hat{A}, \hat{B}) + \hat{X}(0)$$

Dosazením do $\mathrm{e}^{\hat{X}(\xi)} = \mathrm{e}^{\xi\hat{A}}\ \mathrm{e}^{\xi\hat{B}}$ vidíme, že $\hat{X}(0)$ musí být nula. Dosadíme-li nyní $\xi = 1$, máme tedy odvozený obecný tvar Bakerovy-Campbellovy-Hausdorffovy rovnice:

$$\mathrm{e}^{\hat{A}}\ \mathrm{e}^{\hat{B}} = \exp\left(\hat{A} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(n+1)!}\ \hat{K}_n(\hat{A}, \hat{B}) \right).$$

Nakonec použijeme ze zadání podmínku, že operátory $\hat{A}, \hat{B}$ komutují se svým komutátorem, tedy $\hat{K}_0 = \hat{B}$, $\hat{K}_1 = \left[\hat{A}, \hat{B}\right]$, $\hat{K}_n = 0$ pro $n > 1$. Konečný výsledek je tedy:

$$\mathrm{e}^{\hat{A}}\mathrm{e}^{\hat{B}} = \mathrm{e}^{\hat{A}+\hat{B}+\frac{1}{2}\left[\hat{A},\hat{B}\right]}.$$

2 Cvičení 16. 10.

2.1 Zadání první části

Mějme dvouhladinový systém popsaný Hamiltoniánem:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1,$$

$$\hat{H}_0 = \begin{pmatrix} e & 0 \\ 0 & -e \end{pmatrix},$$

$$\hat{H}_1 = \begin{pmatrix} 0 & \nu \\ \nu & 0 \end{pmatrix}.$$

Spočtěte vlastní hodnoty E_+, E_- a vlastní vektory $\left|E_+\right\rangle, \left|E_-\right\rangle$ Hamiltoniánu, zakreslete závislost $E_\pm(\nu)$, vypočtěte vektory $\left|E_\pm(\nu = 0)\right\rangle$ a $\left|E_\pm(\nu \to \infty)\right\rangle$.

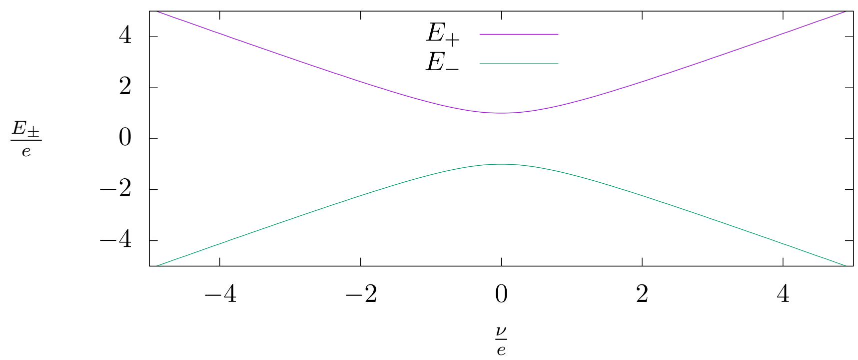
2.2 Řešení první části

Začneme nalezením vlastních energií:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} e & 0 \\ 0 & -e \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \nu \\ \nu & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e & \nu \\ \nu & -e \end{pmatrix},$$

$$\det\left(\hat{H} - E\,\hat{1}\right) = -\left(e^2 - E^2\right)\left(e^2 + E^2\right) - \nu^2 = E^2 - e^2 - \nu^2 = 0$$
$$\implies E_\pm = \pm\sqrt{e^2 + \nu^2}.$$

Závislost $E_\pm$ na ν je potom:



Pokračujeme vypočtením odpovídajících vlastních vektorů:

$$\ker\left(\hat{H} - E_+\,\hat{1}\right) = \ker\begin{pmatrix} e - E_+ & \nu \end{pmatrix} \ni \frac{1}{\sqrt{\nu^2 + (E_+ - e)^2}} \begin{pmatrix} \nu \\ E_+ - e \end{pmatrix} = \left|E_+\right\rangle,$$

$$\ker\left(\hat{H} + E_+\,\hat{1}\right) = \ker\begin{pmatrix} e + E_+ & \nu \end{pmatrix} \ni \frac{1}{\sqrt{\nu^2 + (E_+ + e)^2}} \begin{pmatrix} -\nu \\ E_+ + e \end{pmatrix} = \left|E_-\right\rangle.$$

Nakonec vypočteme vlastní vektory pro $\nu = 0$ a $\nu \to \infty$. Při $\nu = 0$ je $\hat{H} = \hat{H}_0$ a vlastní vektory známe přímo ze zadání. Případ $\nu \to \infty$ vyšetříme pomocí limity.

$$\left|E_+(\nu = 0)\right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \left|E_-(\nu = 0)\right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

$$\left|E_\pm(\nu = 0)\right\rangle = \lim_{\nu \to \infty} \frac{1}{\sqrt{\nu^2 + (E_+ \mp e)^2}} \begin{pmatrix} \pm\nu \\ E_+ \mp e \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \pm 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

2.3 Zadání druhé části

Mějme N-stavový systém s tridiagonálním Hamiltoniánem:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} e & \nu & & & \\ \nu & e & \nu & & \\ & \nu & e & \nu & \\ & & \nu & e & \ddots \\ & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}.$$

Určete jeho vlastní hodnoty a normalizované vlastní vektory. Jak se bude měnit spektrum s rostoucím N?

2.4 První pokus o řešení druhé části

Úlohu jsem se nejprve pokoušel vyřešit tak, že vyjádřím determinant tridiagonální matice v uzavřené formě. Tento postup mě sice dovedl k charakteristické rovnici Hamiltoniánu v uzavřené formě, nepodařilo se mi ji ale vyřešit pro obecné N. Postup zde přesto nechávám pro zajímavost.

Z důvodů, které budou hned zřejmé, si zadefinujeme matice $A_N, B_N \in \mathbb{C}^{N\times N}$ lišící se pouze v prvním sloupci:

$$A_N = \underbrace{\begin{pmatrix} a & b & & \\ b & a & b & \\ & b & a & \ddots \\ & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}}_{N \text{ sloupců}}, \qquad B_N = \underbrace{\begin{pmatrix} b & b & & \\ 0 & a & b & \\ & b & a & \ddots \\ & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}}_{N \text{ sloupců}}.$$

Nyní si pomocí minorů vyjádříme jejich determinanty:

$$\det \begin{pmatrix} a & b & & & \\ b & a & b & & \\ & b & a & b & \\ & & b & a & \ddots \\ & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix} = a \det \left(\begin{array}{c|cccc} & & & & \\ \hline & a & b & & \\ & b & a & b & \\ & & b & a & \ddots \\ & & & \ddots & \ddots \end{array}\right) - b \det \left(\begin{array}{c|c|ccc} & & & & \\ \hline b & & b & & \\ & & a & b & \\ & & b & a & \ddots \\ & & & \ddots & \ddots \end{array}\right),$$

$$\det \begin{pmatrix} b & b & & & \\ 0 & a & b & & \\ & b & a & b & \\ & & b & a & \ddots \\ & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix} = b \det \left(\begin{array}{c|cccc} & & & & \\ \hline & a & b & & \\ & b & a & b & \\ & & b & a & \ddots \\ & & & \ddots & \ddots \end{array}\right).$$

Totéž zapsáno v kompaktní formě:

$$\begin{aligned} \det A_N &= a \det A_{N-1} - b \det B_{N-1}, \\ \det B_N &= b \det A_{N-1}. \end{aligned}$$

$$\Longrightarrow \det A_N = a \det A_{N-1} - b^2 \det A_{N-2}.$$

Navíc vidíme, že platí:

$$\begin{aligned} \det A_1 &= a, \\ \det A_2 &= a^2 - b^2. \end{aligned}$$

Vyřešíme tedy diferenční rovnici. Charakteristický polynom rekurence[1] je:

$$p(t) = t^2 - at + b^2,$$

a jeho kořeny jsou

$$t_+ = \frac{a}{2} + \sqrt{\left(\frac{a}{2}\right)^2 - b^2}\,,$$
$$t_- = \frac{a}{2} - \sqrt{\left(\frac{a}{2}\right)^2 - b^2}\,.$$

Hledáme tedy řešení ve tvaru

$$\det A_n = c\,t_+^n + d\,t_-^n,$$

dosazením známých hodnot A_1 a A_2 získáme hodnoty konstant. Po zjednodušení výrazu dostáváme pro determinant matice A_N vztah:

$$\det A_N = \frac{1}{2^{N+1}\sqrt{a^2-4b^2}}\left(\left(a+\sqrt{a^2-4b^2}\right)^{N+1} - \left(a-\sqrt{a^2-4b^2}\right)^{N+1}\right).$$

Nyní, protože $\det\left(\hat{H} - \lambda\hat{1}\right) = \det A_n$ pro $a = e - \lambda, b = \nu$. Charakteristický polynom Hamiltoniánu je tedy:

$$p(\lambda) = \frac{1}{2^{N+1}\sqrt{-4\nu^2+(e-\lambda)^2}}\left(\left(e-\lambda+\sqrt{-4\nu^2+(e-\lambda)^2}\right)^{N+1} - \left(e-\lambda-\sqrt{-4\nu^2+(e-\lambda)^2}\right)^{N+1}\right).$$

Pomocí CAS je snadné najít řešení pro několik prvních $N \in \{1, 2, 3, \dots\}$:

$\boldsymbol{p(\lambda) = 0}$	$\boldsymbol{\lambda}$
$\boldsymbol{N = 1}$	e
$\boldsymbol{N = 2}$	$e - \nu,\ e + \nu$
$\boldsymbol{N = 3}$	$e,\ e - \sqrt{2}\nu,\ e + \sqrt{2}\nu$
$\boldsymbol{N = 4}$	$e + \frac{-1+\sqrt{5}}{2}\nu,\ e + \frac{+1+\sqrt{5}}{2}\nu,\ e + \frac{-1-\sqrt{5}}{2}\nu,\ e + \frac{+1-\sqrt{5}}{2}\nu$

Přestože řešení vypadají pravidelně, nepodařilo se mi najít vztah udávající řešení pro obecné N.

2.5 Druhý pokus o řešení druhé části

Vyjádříme-li si charakteristickou rovnici pro Hamiltonián, dostaneme:

$$\hat{H}\vec{u} = \lambda\vec{u},$$

$$\begin{pmatrix} e & \nu & & \\ \nu & e & \nu & \\ & \nu & e & \ddots \\ & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \boldsymbol{u}^1 \\ \boldsymbol{u}^2 \\ \boldsymbol{u}^3 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda\boldsymbol{u}^1 \\ \lambda\boldsymbol{u}^2 \\ \lambda\boldsymbol{u}^3 \\ \vdots \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} e\boldsymbol{u}^1 + \nu\boldsymbol{u}^2 \\ \nu\boldsymbol{u}^1 + e\boldsymbol{u}^2 + \nu\boldsymbol{u}^3 \\ \nu\boldsymbol{u}^2 + e\boldsymbol{u}^3 + \nu\boldsymbol{u}^4 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda\boldsymbol{u}^1 \\ \lambda\boldsymbol{u}^2 \\ \lambda\boldsymbol{u}^3 \\ \vdots \end{pmatrix}.$$

[1] Hlubší teorii k řešení diferenčních rovnic lze nalézt například na `https://en.wikipedia.org/wiki/Constant-recursive_sequence`

Dostáváme tedy N-tici rovnic o N neznámých:

$$\begin{aligned}
\lambda \boldsymbol{u}^1 &= e\boldsymbol{u}^1 + \nu\boldsymbol{u}^2 \\
\lambda \boldsymbol{u}^2 &= \nu\boldsymbol{u}^1 + e\boldsymbol{u}^2 + \nu\boldsymbol{u}^3 \\
&\vdots \\
\lambda \boldsymbol{u}^j &= \nu\boldsymbol{u}^{j-1} + e\boldsymbol{u}^j + \nu\boldsymbol{u}^{j+1} \\
&\vdots \\
\lambda \boldsymbol{u}^{N-1} &= \nu\boldsymbol{u}^{N-2} + e\boldsymbol{u}^{N-1} + \nu\boldsymbol{u}^N \\
\lambda \boldsymbol{u}^N &= \nu\boldsymbol{u}^{N-1} + e\boldsymbol{u}^N
\end{aligned}$$

Všimneme si, že okrajové podmínky lze zjednodušit doplněním smyšlené nulté a $(N+1)$. složky vlastního vektoru, dostáváme tak diferenční úlohu:

$$\lambda \boldsymbol{u}^j = \nu\boldsymbol{u}^{j-1} + e\boldsymbol{u}^j + \nu\boldsymbol{u}^{j+1},$$
$$\boldsymbol{u}^0 = 0, \quad \boldsymbol{u}^{N+1} = 0.$$

Z nápovědy víme, že máme řešení hledat pomocí násady[2]:

$$\boldsymbol{u}^j = c^j,$$

na levé straně má horní skript význam j-té složky vektoru, na pravé znamená j-tou mocninu.

$$\begin{aligned}
\lambda c^j &= \nu c^{j-1} + ec^j + \nu c^{j+1} \\
\lambda c &= \nu + ec + \nu c^2 \\
0 &= \nu c^2 + (e-\lambda)c + \nu
\end{aligned}$$

$$c_\pm = \frac{\lambda - e}{2\nu} \pm \sqrt{\left(\frac{\lambda - e}{2\nu}\right)^2 - 1}$$

Zajímavou vlastností kořenů je:

$$\begin{aligned}
c_+\, c_- &= \left(\frac{\lambda - e}{2\nu} + \sqrt{\left(\frac{\lambda - e}{2\nu}\right)^2 - 1}\right)\left(\frac{\lambda - e}{2\nu} - \sqrt{\left(\frac{\lambda - e}{2\nu}\right)^2 - 1}\right) \\
&= \left(\frac{\lambda - e}{2\nu}\right)^2 - \left(\left(\frac{\lambda - e}{2\nu}\right)^2 - 1\right) = 1
\end{aligned}$$

Protože máme dva kořeny, hledáme řešení ve tvaru

$$\boldsymbol{u}^j = A\, {c_+}^j + B\, {c_-}^j.$$

Dosazením do okrajových podmínek získáme:

$$\begin{aligned}
0 &= \boldsymbol{u}^0 = A\, c_+^0 + B\, c_-^0 \qquad = \mathrm{A+B} \quad \Leftrightarrow \quad B = -A \\[2ex]
0 &= \boldsymbol{u}^{N+1} \quad = \quad A\, c_+^{N+1} + B\, c_-^{N+1} \\
&\qquad\qquad\;\; = \quad A\,(c_+^{N+1} - c_-^{N+1}) \quad \Leftrightarrow \quad A = 0 \\
&\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\quad \vee \quad c_+ = c_- = 0 \\
&\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\quad \vee \quad \left({}^{c_+}\!/_{c_-}\right)^{N+1} = 1
\end{aligned}$$

[2]Násada, v cizojazyčné literatuře „ansatz“, je odhad tvaru řešení. Typicky omezuje možná řešení na užší rodinu – nemusí tedy nutně vést k nalezení všech řešení, výrazně ale usnadňuje jejich hledání. V našem případě vede použití násady k nalezení N řešení, což je maximální počet vlastních vektorů matice $N \times N$, žádné řešení nám tedy neušlo, stačí pouze zkontrolovat, že jsou to skutečně řešení původní úlohy.

Protože vlastní vektor z definice nemůže být nulový, vyřadíme řešení $A = 0,\ c_+ = c_- = 0$, zůstává nám tedy

$$\boldsymbol{u}^j = A\,(c_+^{\ j} - c_-^{\ j}), \quad \left({}^{c_+}\!/_{c_-}\right)^{N+1} = 1.$$

$$\begin{aligned}
&\left({}^{c_+}\!/_{c_-}\right)^{N+1} = 1 = \mathrm{e}^{2k\mathrm{i}\pi}, \quad k \in \mathbb{N},\\
\implies &{}^{c_+}\!/_{c_-} = \mathrm{e}^{\frac{2k}{N+1}\,\mathrm{i}\pi},\\
\implies &\left({}^{c_+}\!/_{c_-}\right)\left(c_+\,c_-\right) = \mathrm{e}^{\frac{2k}{N+1}\,\mathrm{i}\pi}, \quad \text{(s použitím } c_+\,c_- = 1)\\
\implies &c_+^{\,2} = \mathrm{e}^{\frac{2k}{N+1}\,\mathrm{i}\pi},\\
\implies &c_+ = \pm\,\mathrm{e}^{\frac{k}{N+1}\,\mathrm{i}\pi}, \quad (*)\\
\implies &c_+ = \mathrm{e}^{\frac{k}{N+1}\,\mathrm{i}\pi}, \quad c_- = \mathrm{e}^{\frac{-k}{N+1}\,\mathrm{i}\pi},\\
\implies &\boldsymbol{u}^j = A\left(\mathrm{e}^{\frac{jk}{N+1}\,\mathrm{i}\pi} - \mathrm{e}^{\frac{-jk}{N+1}\,\mathrm{i}\pi}\right), \quad k \in \{1, 2, \ldots N\}\,.
\end{aligned}$$

Kde v $(*)$ jsme využili skutečnosti, že řešení $c_+ = -\,\mathrm{e}^{\frac{k}{N+1}\,\mathrm{i}\pi}$, $c_- = -\,\mathrm{e}^{\frac{-k}{N+1}\,\mathrm{i}\pi}$ je stejné, jako řešení $c_- = +\,\mathrm{e}^{\frac{-(N+1-k)}{N+1}\,\mathrm{i}\pi}$, $c_+ = +\,\mathrm{e}^{\frac{N+1-k}{N+1}\,\mathrm{i}\pi}$, můžeme tedy přestat psát $\pm$. Na posledním řádku jsme vyřadili řešení $k = 0$ a $k = N + 1$ – v nich c_+ a c_- splývají, vlastní vektor by tedy vyšel nulový.

Podařilo se nám najít N vlastních vektorů $\vec{u}_k$, díky násadě i bez ohledu na konkrétní hodnoty e, ν, λ. Můžeme si tedy nyní vyjádřit vlastní hodnoty jako funkce $\lambda(e, \nu, k)$. Nejprve ale zjednodušíme a normalizujeme vektor $\vec{u}$:

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{u}^j = A\left(\mathrm{e}^{\frac{jk}{N+1}\,\mathrm{i}\pi} - \mathrm{e}^{\frac{-jk}{N+1}\,\mathrm{i}\pi}\right),\\
\implies &\boldsymbol{u}^j = 2\mathrm{i}A\sin\left(\frac{jk\pi}{N+1}\right),\\
\implies &\boldsymbol{u}^j = C\sin\left(\frac{jk\pi}{N+1}\right).
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&1 = \left\|\vec{u}\right\|,\\
\implies &1 = \sum_{j=1}^{N}\left(\boldsymbol{u}^j\right)^2,\\
\implies &1 = \sum_{j=1}^{N} C^2\sin^2\left(\frac{jk\pi}{N+1}\right),\\
\implies &C = \left(\sum_{j=1}^{N}\sin^2\left(\frac{jk\pi}{N+1}\right)\right)^{-1/2},\\
\implies &C = 2\left(-\sin\left(\frac{2N+1}{N+1}\,k\pi\right)\csc\left(\frac{k\pi}{N+1}\right) + 2N + 1\right)^{-1/2}.
\end{aligned}$$

Poslední krok byl navržen programem Wolfram Mathematica a numericky zkontrolován pro $N \in \{1, \dots 15\}$, csc je kosekans, platí pro něj $\csc\varphi = \frac{1}{\sin\varphi}$. Normalizační konstanta ovšem není příliš důležitá, v praxi můžeme vždy normalizovat stavový vektor numericky.

Pojďme nyní vyjádřit λ. Začneme charakteristickou rovnicí pro první souřadnici:

$$\lambda \boldsymbol{u}^1 = e\boldsymbol{u}^1 + \nu\boldsymbol{u}^2,$$

$$(\lambda - e)\,\boldsymbol{u}^1 = \nu\boldsymbol{u}^2,$$

$$\frac{\lambda - e}{\nu} = \frac{\boldsymbol{u}^2}{\boldsymbol{u}^1} = \frac{\sin\left(\frac{2k\pi}{N+1}\right)}{\sin\left(\frac{k\pi}{N+1}\right)} = 2\cos\left(\frac{k\pi}{N+1}\right),$$

$$\lambda = e + 2\nu\cos\left(\frac{k\pi}{N+1}\right).$$

Mohli jsme dělit $\boldsymbol{u}^1$, pro povolené hodnoty k nikdy není nulové. Protože vlastní číslo Hamiltoniánu odpovídá energetické hladině, máme pro energii k-tého stavu vztah:

$$E_k = e + 2\nu\cos\left(\frac{k\pi}{N+1}\right).$$

Nakonec by bylo vhodné zkontrolovat, zda násada $\boldsymbol{u}^j = c^j$ skutečně vedla na správné řešení a nalezená $\vec{u}, \lambda$ splňují charakteristickou rovnici:

$$\lambda\boldsymbol{u}^j = \nu\boldsymbol{u}^{j-1} + e\boldsymbol{u}^j + \nu\boldsymbol{u}^{j+1},$$

$$0 = \nu\boldsymbol{u}^{j-1} - 2\nu\cos\left(\frac{k\pi}{N+1}\right)\boldsymbol{u}^j + \nu\boldsymbol{u}^{j+1},$$

$$0 = \sin\left(\frac{(j-1)k\pi}{N+1}\right) + \sin\left(\frac{(j+1)k\pi}{N+1}\right) - 2\cos\left(\frac{k\pi}{N+1}\right)\sin\left(\frac{jk\pi}{N+1}\right).$$

Tato rovnost je zřejmá ze vzorce $\sin(a+b) = \cos(a)\sin(b) + \sin(a)\cos(b)$, nalezená řešení jsou tedy platná.

2.6 Výsledek druhé části

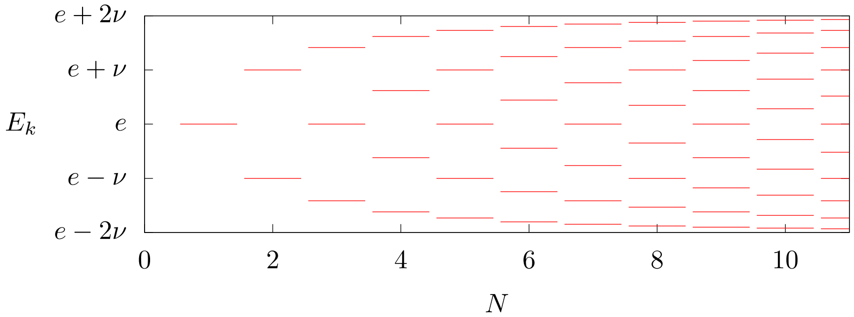
Zadaný Hamiltonián má vázané stavy $k \in \{1, \dots N\}$, jim odpovídající vlastní vektory jsou:

$$|k\rangle = C\begin{pmatrix}\sin\left({}^{k\pi}/_{N+1}\right)\\ \sin\left({}^{2k\pi}/_{N+1}\right)\\ \vdots \\ \sin\left({}^{Nk\pi}/_{N+1}\right)\end{pmatrix}, \qquad \text{kde} \quad C = 2\left(-\sin\left(\frac{2N+1}{N+1}\,k\pi\right)\csc\left(\frac{k\pi}{N+1}\right) + 2N + 1\right)^{-1/2}.$$

Energie k-tého stavu je:

$$E_k = e + 2\nu\cos\left(\frac{k\pi}{N+1}\right).$$

V grafu je vidět zhušťování energetických hladiny s rostoucím N:



Pro $N \to \infty$ je energetické spektrum spojité a energie stavů se pohybují mezi $e - 2\nu$ a $e + 2\nu$.

3 Cvičení 29. 10.