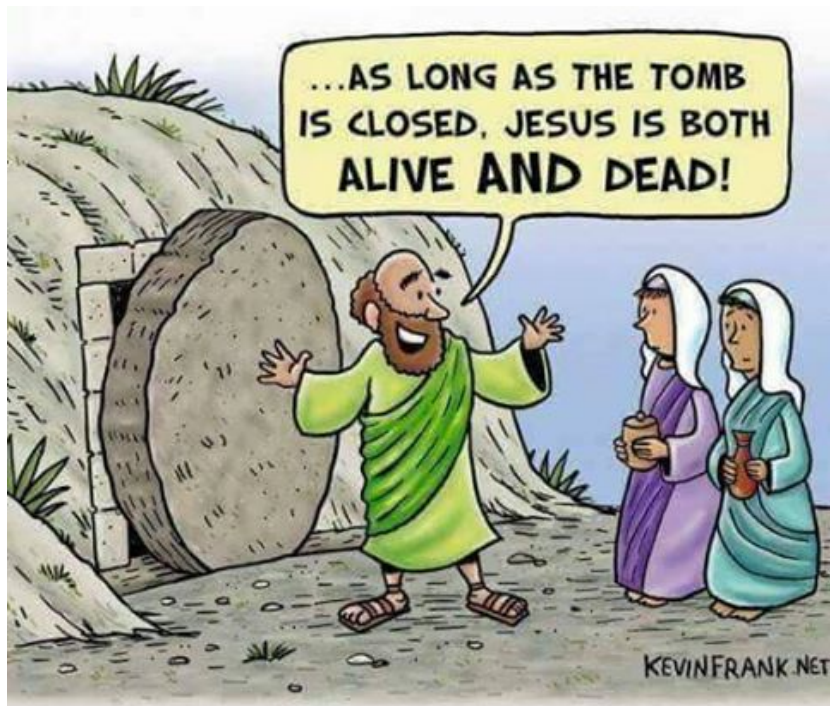


Příklady z kvantové mechaniky a vybraná řešení

Jiří Kvita 2017 – 2022, Dalibor Javůrek 2017/2018

12. září 2022



Saint Schrodinger, the forgotten disciple.

Obsah

1	Cvičení	4
1.1	Cvičení 1	4
1.2	Cvičení 2	4
1.3	Cvičení 3	6
1.4	Cvičení 4 – 5	7
1.5	Cvičení 6	10
1.6	Cvičení 7	11
1.7	Cvičení 8	11
1.8	Cvičení 9	12
1.9	Cvičení 10	13
1.10	Cvičení 11	14
1.11	Cvičení 12	15
1.12	Cvičení 13	16
1.13	Cvičení 14 – Gaussovský balík	18
1.14	Cvičení – Matematika I	19
1.15	Cvičení – Matematika II	20
2	Formalizmus	21
2.1	Braketový formalizmus	21
2.1.1	Brakety	21
2.1.2	Od vlastních stavů hybnosti k P a X reprezentacím	23
2.1.3	Vlastní stavy operátoru polohy	24
2.1.4	Vlastní stavy Hamiltoniánu	25
2.1.5	Diskrétní a spojitě reprezentace	26
2.1.6	Souvislost X a P reprezentací	27
2.1.7	Operátor hybnosti v X -reprezetaci	28
2.2	Operátory	29
2.2.1	Základy	29
2.2.2	Pokročilejší operátorový počet	30
3	Některé (ne)řešené úlohy	31
3.1	Harmonický oscilátor	31
3.1.1	Algebra posunovacích operátorů	31
3.1.2	Neřešené příklady	31
3.1.3	Koherentní stavy	32
3.1.4	Relativistická korekce	33
3.1.5	Anharmonický oscilátor	34
3.2	Moment hybnosti	34
3.2.1	Připomenutí	34
3.2.2	Příklady	35

3.2.3	X -reprezentace, sférické harmoniky	36
3.3	Spin	39
3.4	Atom vodíku	40
3.5	Řešení zkušební písemky	42
3.5.1	Příklad – Harmonické superpozice, 4b	42
3.5.2	Příklad – Časový vývoj v jámě, 4b	42
3.5.3	Příklad – Matice spinu J , 1b	43
3.5.4	Larmorova porucha, 3b	44
4	Doplňky	47
4.1	Laplaceův operátor	47
4.2	Delta funkce	47
4.3	Vlnové funkce a hustoty pravděpodobnosti pro částici v 1D nekonečně hluboké potenciálové jámě	49
4.4	Stacionární stavy 2 a 3 rozměrné nekonečně hluboké potenciálové jámy .	51
4.5	Vlnové funkce harmonického oscilátoru	53
4.6	Částice v pravoúhlé (konečně hluboké) potenciálové jámě	55
4.7	Průřezy orbitalů atomu vodíku	59

Kapitola 1

Cvičení

1.1 Cvičení 1

Úkoly

- Zopakovat a popsat stručně stav fyziky (klasická vlnová versus částicová) a experimenty, které vedly ke vzniku kvantové mechaniky.
- Provést stručné vysvětlení vlnové korpuskulární hypotézy.
- Uvést zákony, které platí pro kvantové systémy a částice – zákon zachování energie a zákon zachování hybnosti. S nimi se bude pracovat v dalších příkladech.
- Atom vodíku řešen klasicky, nejprve s udáním velikosti Bohrova poloměru (U-0-13), následně i s kvantováním hybnosti a n -násobku vln. délky elektronu podél obvodu kruhové dráhy.
- Zavést konstantu jemné struktury

$$\alpha \equiv \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \doteq \frac{1}{137}$$

a s její pomocí vyjádřit Bohrův poloměr a energii základního stavu atomu vodíku.

- Zavést konverzní konstantu $\hbar c \doteq 197 \text{ MeV fm}$
- Zejména ukažte, že n -tá excitovaná hladina pro vodíkpodobné atomy (jednoelektronové vázané stavy s nábojem jádra $Z|e|$) má energii $E_n = Z^2 E_1/n^2$, kde $E_1 = -\frac{1}{2}\alpha^2 m_e c^2$, kde m_e je (klidová) hmota elektronu.

1.2 Cvičení 2

Seznam příkladů k procvičení

- Comptonův rozptyl (U-0-7) – ze zákonů zachování hybnosti a energie fyzikálně vysvětlit a odvodit vzorec

$$\lambda' - \lambda = 4\pi\kappa \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right), \quad (1.1)$$

kde $\kappa = \frac{\hbar}{m_e c}$ je redukovaná Comptonova vlnová délka elektronu $\kappa \equiv \frac{\lambda_e}{2\pi} \doteq 386 \text{ fm}$.

Seznam domácích úkolů 1

(dle Formánka) Případné další údaje či konstanty k úlohám níže si dohledejte:)

- Určete vlnovou délku viditelného světla, UV a Röntgenova záření a záření gama ze zářiče ^{60}Co a dopočítejte energie těchto fotonů v elektronvoltech.
- Spočítejte kolik fotonů emituje každou sekundu anténa rádiové stanice o výkonu 1 W vysílající na krátkých vlnách (cca 30 m). Jakou energii má každý z těchto fotonů?
- Odvoďte vztah pro vlnovou délku elektronu, protonu a alfa částice, pokud by byla každá z nich urychlena napětím U .
- Určete rychlost a vlnovou délku alfa částice z Rutherfordova experimentu a srovnajte s 1. kosmickou rychlostí a s dnes známým poloměrem jádra zlata.

Seznam domácích úkolů 2

(dle Formánka) Případné další údaje či konstanty k úlohám níže si dohledejte:)

- Jakou energii (v elektronvoltech) a vlnovou délku má gama záření z procesu anihilace elektron-pozitronového páru $e^+e^- \rightarrow 2\gamma$?
- Určete vlnovou délku molekuly kyslíku ve vzduchu při pokojové teplotě. Pomněte na ekvipartiční teorém:) Určete vlnovou délku střely o hmotnosti 1 μg letící rychlostí zvuku.
- Pro jakou energii elektronů popř. neutronů (v elektronvoltech) byste se rozhodli, pokud byste chtěli pozorovat interferenční jevy spojené s "odrazem" těchto částic od krystalu?

Seznam domácích úkolů 3

- V zobrazovacím programu vynesete spektrální hustotu energie E_ω a E_λ záření absolutně černého tělesa (jde o množství energie v jednotce objemu v intervalu $(\lambda, \lambda + d\lambda)$ respektive $(\omega, \omega + d\omega)$) jako funkci vlnové délky a kruhové frekvence, které jsou dány Planckovým zákonem pro hustotu energie

$$\begin{aligned}\rho_\nu(\nu)d\nu &= \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1} d\nu \\ \rho_\lambda(\lambda)d\lambda &= \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda kT}\right) - 1} d\lambda \\ \rho_\omega(\omega)d\omega &= \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{\hbar\omega}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1} d\omega,\end{aligned}$$

a ukažte, že vztahy spolu souvisí Jacobiánem přechodu od spektrální hustoty jako funkce ν k funkci λ či ω , s hustotou se tedy zachází jako s výrazem pod integrálem, tj. např.

$$\rho_\lambda(\lambda)d\lambda \equiv \rho_\nu(\nu(\lambda))d\lambda \left| \frac{d\nu}{d\lambda} \right|$$

1.3 Cvičení 3

Úkoly

- Heuristické odvození Schrödingerovy rovnice pro vlnové řešení dle Weinberga. Z klasického výrazu pro celkovou energii částice hmoty m

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{x})$$

(Hamiltonova funkce, Hamiltonián) přejdeme k Hamiltonově operátoru

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{x})$$

kde (v tzv. x -reprezentaci, jak uvidíme později) položením

$$\hat{p} \equiv -i\hbar\nabla$$

(details viz Apendix 4.1) získáme

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{x})$$

- Časová Schrödingerova rovnice

$$\hat{H}\Psi(\vec{x}, t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{x}, t)}{\partial t}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{x})\right]\Psi(\vec{x}, t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{x}, t)}{\partial t}$$

- Z ní separací časové proměnné

$$\Psi(\vec{x}, t) \equiv \psi(\vec{x})\Phi(t)$$

dojdeme k rovnosti

$$\frac{\hat{H}\psi(\vec{x})}{\psi(\vec{x})} = \frac{i\hbar\frac{d\Phi(t)}{dt}}{\Phi(t)} \equiv E$$

(levá a prostřední část závisejí čistě na souřadnici či čase, a musejí tak být rovny konstantě, která má rozměr energie) a získáme jednak rovnici

$$i\hbar\frac{d\Phi(t)}{dt} = E\Phi(t),$$

jejíž řešení je

$$\Phi(t) \sim e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

a tedy

$$\Psi(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x})e^{-i\frac{E}{\hbar}t},$$

ale konečně také bezčasovou Schrödingerovu rovnici

$$\hat{H}\psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x})$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{x})\right]\psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x}).$$

na kterou lze nahlížet jako na úlohu pro vlastní funkce (stacionární stavy) operátoru celkové energie (Hamiltoniánu) a příslušná vlastní čísla, která udávají dovolené hodnoty energetických hladin studovaného systému (často diskrétní, tj. kvantovány).

Dokažte, že pro (uvažujme nyní pro jednoduchost pouze diskrétní spektrum)

$$\hat{H}\psi_n(\vec{x}) = E_n \psi_n(\vec{x})$$

je libovolná lineární kombinace

$$\Psi(\vec{x}, t) = \sum_n c_n \Psi_n(\vec{x}, t) = \sum_n c_n \psi_n(\vec{x}) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}, \quad c_n \in \mathbb{C}$$

také řešením časové (ale ne bezčasové!) Schrödingerovy rovnice, a pokud přijmeme Schrödingerovu rovnici jako pohybovou rovnici kvantové mechaniky, musíme přijmou i libovolnou superpozici jako možný fyzikální stav. Toto je pozorováno i experimentálně a vede k přirozenému popisu interferenčních jevů v mikrosvětě.

- Řešení Schrödingerovy rce pro částici v nekonečně hluboké jámě: vlastní funkce a vlastní energie: n -tý stacionární stav částice v nekonečně hluboké jámě šířky a je dán normalizovanou vlnovou funkcí

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}$$

a příslušné dovolené energie jsou dány

$$E_n = E_0 n^2, \quad \text{kde} \quad E_0 \equiv \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}.$$

Seznam domácích úkolů

- Aplikovat kvantovací formulku částice v nekonečně hluboké jámě a spočítat energetický rozdíl prvních dvou hladin dle modelu částice v nekonečné jámě pro typické hmotnosti a rozměry následujících objektů:
 - Elektron na úsečce velikosti rozměru atomu vodíku.
 - Alfa částice a rozměr jádra uranu $r = r_0 A^{1/3}$, kde $r_0 \approx 1$ fm.
 - Atom železa uvnitř Fullerenu C60.
 - Basketbalový míč v tělocvičně.

Pozn: Pracujte v elektronvoltech a s klidovými energiemi.

1.4 Cvičení 4 – 5

Úkoly

- Definovat co to je normalizace stavu.
- Normalizujte superpozici

$$\psi = C [\alpha \psi_1 + \beta \psi_2], \quad \alpha, \beta \in \mathbb{C}$$

tj. nalezněte C tak, ψ bude normalizovaný stav, pokud $\psi_{1,2}$ jsou normalizované ve smyslu $\int_{\mathbb{R}} \psi_{1,2}^* \psi_{1,2} dx = 1$ a kolmé ve smyslu $\int_{\mathbb{R}} \psi_1^* \psi_2 dx = 0$.

- Definice statistické hustoty pravděpodobnosti a vysvětlení, že $|\psi|^2 = \psi^*\psi$ je prostorová hustota pravděpodobnosti nalezení částice v elementu objemu.
- Zopakovat vlastní stavy a vlastní energie částice v jednorozměrné nekonečně hluboké potenciálové jámě. V bezčasové i v časové formě.

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right), \psi_n(x, t) = \psi_n(x)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}, E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \quad (1.2)$$

- Formulovat princip korespondence mezi pozorovatelnými veličinami v klasické a kvantové mechanice ($A \rightarrow \hat{A}$). Formulovat výpočet střední hodnoty a kvadratické odchylky v QM.

$$A(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \rightarrow \hat{A}(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{q}}), \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla, \hat{\mathbf{q}} = \mathbf{q}. \quad (1.3)$$

$$\langle A \rangle_\psi = \frac{\int_{\mathbb{R}^3} d^3x \psi^*(\mathbf{x}, t)(\hat{A}\psi(\mathbf{x}, t))}{\int_{\mathbb{R}^3} d^3x \psi^*(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})} \quad (1.4)$$

- Formulovat princip superpozice – každý kvantový stav $\psi(\mathbf{x})$, který je kombinací vlastních stavů operátoru některé pozorovatelné (např. \hat{A} , $\hat{A}\psi_n = \lambda_n\psi_n$) je principiálně fyzikálně realizovatelný.

$$\psi(\mathbf{x}) = \sum_n c_n \psi_n(\mathbf{x}). \quad (1.5)$$

Pozor! Vlastní stavy $\psi_n(\mathbf{x})$ se vyvíjejí v čase podle Schrodingerovy rovnice a tím i stav ψ .

Příklady k procvičení

- Normalizujte stav

$$\psi(x) = A \left[3i\psi_1(x) + e^{i\delta}\psi_3(x) \right], \quad (1.6)$$

kde ψ_n je n -tý vlastní stav operátoru energie pro částici v nekonečné potenciálové jámě

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right). \quad (1.7)$$

- Spočítejte $\langle H \rangle_\psi(t)$ pro časově závislý stav z rovnice (1.6) a ukažte, že nezávisí na čase. Využijte faktu, že platí

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n, E_n = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2ma^2}, \quad (1.8)$$

kde a je šířka potenciálové jámy.

- Vypočítejte $\langle p \rangle_{\psi_n}$ a $\langle x \rangle_{\psi_n}$ v n -tém vlastním stavu ψ_n operátoru celkové energie (Hamiltoniánu).
- Spočítejte $\langle x \rangle_\psi$ a $\langle p \rangle_\psi$ pro stav volné částice v nekonečné potenciálové jámě

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{5}}(\psi_1 + 2\psi_2). \quad (1.9)$$

- Dokažte, že $\langle H \rangle_\psi$ nezávisí na čase pro libovolnou superpozici $\psi = \sum_n c_n \psi_n(x, t)$, kde $\psi_n(x, t)$ jsou časově závislé stavy volné částice v nekonečné potenciálové jámě. Na tomto příkladu ukažte, že platí

$$\langle H \rangle_\psi = \sum_n E_n |c_n|^2. \quad (1.10)$$

Interpretujte $|c_n|^2$ jako pravděpodobnost nalezení částice ve stavu ψ_n :

$$\mathcal{P}_{\psi_n} = |(\psi_n, \psi)|^2. \quad (1.11)$$

- Ukažte, že požadavek normalizace stavu

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n = \int_{\mathbb{R}} \psi^*(x) \psi(x) dx = 1$$

vede na podmínku

$$\sum_n |c_n|^2 = 1, \quad (1.12)$$

za předpokladu, že platí $\int_{\mathbb{R}} \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx = \delta_{mn}$ (ortonormální funkce).

- Pro stavy volné částice v potenciálové jámě dokažte, že platí (Griffiths, str. 33)

$$\int_0^a \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx = \delta_{mn}. \quad (1.13)$$

- Normalizujte rovinné vlny

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{x}) \equiv N \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\vec{x} \cdot \vec{p}) \right]$$

na delta funkci, tj. najděte N tím, že spočtete

$$I(\vec{p}, \vec{p}') \equiv (\psi_{\vec{p}'}, \psi_{\vec{p}}) \equiv \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \psi_{\vec{p}'}^*(x) \psi_{\vec{p}}(x)$$

a požadujte rovnost výrazu $\delta(\vec{p} - \vec{p}')$ Pracujte nejprve v jedné dimenzi a v limitě

$$\int_{\mathbb{R}} dx = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{-R}^R dx.$$

Dostanete se na funkci $\sin(ax)/x$ jejíž limita pro velké a vede na delta funkci. Měli byste získat výsledek a normalizované vlastní stavy hybnosti v 1D

$$(\psi_{p'}, \psi_p) = \delta(p - p') \quad (1.14)$$

$$\psi_{p'}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{px}{\hbar}} \quad (1.15)$$

a ve 3D

$$(\psi_{\vec{p}'}, \psi_{\vec{p}}) = \delta^3(\vec{p} - \vec{p}') \quad (1.16)$$

$$\psi_{\vec{p}'}(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\frac{\vec{p} \cdot \vec{x}}{\hbar}} \quad (1.17)$$

- Griffiths Example 2.2, str. 35. Časový vývoj funkce z počátečního stavu $\psi(x, 0)$. Řešení dekompozicí do vlastních stavů (zobecněné Fourierovy řady).

Seznam domácích úkolů

- Griffiths Problem 1.17, str. 22, kromě (f).
- Griffiths Problem 1.4, str. 14.

1.5 Cvičení 6

Úkoly

- Zopakovat definici operátorů \hat{p}_i a \hat{x}_i v x reprezentaci.
- Definice komutátoru dvojice operátorů $[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ a antikomutátoru $\{\hat{A}, \hat{B}\} \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$.
- Definovat co to znamená, že dvě pozorovatelné jsou nekompatibilní – jejich operátory nekomutují. Tzn. měření jedné veličiny ovlivní měření druhé. Současně nemohou jednoznačně určit kvantový stav např. jako u atomu vodíku.
- Definice samosdruženého operátoru: k operátoru \hat{A} , který zobrazuje z a do Hilbertova prostoru \mathcal{H} definujeme hermitovsky sdružený operátor \hat{A}^\dagger tak, že pro všechny stavy $\psi, \chi \in \mathcal{H}$ platí

$$(\chi, \hat{A}\psi) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \chi^*(\mathbf{r})(\hat{A}\psi(\mathbf{r})) = (\hat{A}^\dagger\chi, \psi) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x (\hat{A}^\dagger\chi(\mathbf{r}))^*\psi(\mathbf{r}),$$

tj. působení operátoru na pravou část skalárního součinu musí být ekvivalentní působení hermitovsky sdruženého operátoru na levou část skalárního součinu.

Příklady k procvičení

- $[\hat{p}_i, \hat{x}_j]$ spočítat v x reprezentaci při působení na testovací funkci $\psi(\mathbf{r})$.
- Ukažte, že platí

$$\begin{aligned} [\hat{A} + \hat{B}, \hat{C}] &= [\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{B}, \hat{C}] \\ [\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] &= [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}] \\ [\hat{A}, \hat{B}] &= -[\hat{B}, \hat{A}] \\ [\hat{A}, \hat{A}] &= \hat{0} \\ [\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] &= [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] \\ &= \{\hat{A}, \hat{B}\}\hat{C} - \hat{B}\{\hat{A}, \hat{C}\}\hat{C} \end{aligned}$$

- Dokažte, že

$$\int_{\mathbb{R}} \chi^*(x) \hat{p} \psi(x) dx = \int_{\mathbb{R}} (\hat{p} \chi(x))^* \psi(x) dx, \quad (1.18)$$

na základě toho, že platí $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \chi(x), \psi(x) = 0$, kde $\hat{p} = -i\hbar\partial_x$. Řešte pomocí per-partes.

- Spočítejte pomocí matematické indukce

$$[\hat{x}, \hat{p}^n], [\hat{x}^n, \hat{p}]. \quad (1.19)$$

Seznam domácích úkolů

- Dokažte, že platí $[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0$ (Jacobiho identita).
- Pomocí příkladů z hodiny $[\hat{x}, \hat{p}^n]$ a $[\hat{x}^n, \hat{p}]$ odvoďte komutátory $[\hat{x}, F(\hat{p})]$ a $[G(\hat{x}), \hat{p}]$.

1.6 Cvičení 7

Příklady k procvičení

- Určete normalizační konstantu A Gaussovského balíku a dále časový vývoj tohoto stavu $\psi(x, t)$ a hustotu pravděpodobnosti $\rho(x, t)$ je-li v čase $t = 0$ dán funkcí

$$\psi(x, t = 0) = Ae^{-ax^2}; a \in \mathbb{R}, a > 0. \quad (1.20)$$

Časový vývoj určete pomocí rozkladu vlnové funkce $\psi(x, t)$ do vlastních stavů operátoru hybnosti

$$\psi_p(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{px}{\hbar}} \quad (1.21)$$

jako

$$\psi(x, t) = \int_{\mathbb{R}} g(p)\psi_p(x, t) dp. \quad (1.22)$$

- Griffiths Prob. 1.15 str. 22. – nezachování hustoty pravděpodobnosti pro komplexní potenciál, model nestabilní částice.

1.7 Cvičení 8

- Vlnové funkce lineárního harmonického oscilátoru jsou dány

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}, \quad \xi \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$$

a díky relaci ortogonalit pro Hermitovy polynomy

$$\int_{\mathbb{R}} H_n(\xi) H_m(\xi) e^{-\xi^2} d\xi = \sqrt{\pi} 2^n n! \delta_{nm}$$

splňují

$$\int_{\mathbb{R}} \psi_n^*(x) \psi_m(x) dx = \delta_{nm}.$$

- Pro koeficienty jejich rozvoje do polynomů ξ^j platí rekurzivní vztah

$$a_{j+2} = \frac{-2(n-j)}{(j+2)(j+1)} a_j.$$

Odvoďte pomocí něj první 3 Hermitovy polynomy.

- Hermitovy polynomy splňují

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \quad (1.23)$$

$$H_{n+1}(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - 2n H_{n-1}(\xi) \quad (1.24)$$

- Spočítejte podle výše uvedených vztahů Hermitovy polynomy $H_3(\xi)$, $H_4(\xi)$ a $H_5(\xi)$
- Platí dále

$$H_n(\xi) = \left(2\xi - \frac{d}{d\xi}\right)^n \cdot 1 \quad (1.25)$$

$$H'_n(\xi) = 2n H_{n-1}(\xi) \quad (1.26)$$

$$H_{n+1}(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - H'_n(\xi) \quad (1.27)$$

$$H_n(\xi) = 2^n e^{-\frac{1}{4}D_\xi^2} \xi^n, \quad D_\xi \equiv \frac{d}{d\xi} \quad (1.28)$$

- Výsledky, ke kterým byste se měli dobrat:

$$H_0(\xi) = 1 \quad (1.29)$$

$$H_1(\xi) = 2\xi \quad (1.30)$$

$$H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2 \quad (1.31)$$

$$H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi \quad (1.32)$$

$$H_4(\xi) = 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12 \quad (1.33)$$

$$H_5(\xi) = 32\xi^5 - 160\xi^3 + 120\xi \quad (1.34)$$

$$H_6(\xi) = 64\xi^6 - 480\xi^4 + 720\xi^2 - 120 \quad (1.35)$$

1.8 Cvičení 9

Příklady k procvičení

- Ukažte, že projekční operátor $\hat{P}_\varphi \equiv |\varphi\rangle\langle\varphi|$, kde $\langle\varphi|\varphi\rangle = 1$, je hermitovský ($\hat{P}_\varphi^\dagger = \hat{P}_\varphi$) a idempotentní ($\hat{P}_\varphi^2 = \hat{P}_\varphi$).
- Dokažte, že hermitovské operátory mají reálná vlastní čísla, a že vlastní vektory příslušné různým vlastním číslům jsou na sebe kolmé.
- Dokažte, že libovolné dva operátory \hat{A} a \hat{B} , které spolu komutují $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, mají společné vlastní vektory.
- Napište rozklad stavového vektoru $|\psi\rangle$ ve spočetné bázi $|\varphi_n\rangle$ z definice

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |\varphi_n\rangle \quad (1.36)$$

- Odvoďte z rozkladu výpočet koeficientů rozkladu $c_n = \langle\varphi_n|\psi\rangle$.
- Odvoďte rozkladovou formuli vložení relace úplnosti

$$\hat{\mathbb{1}} = \sum_{n=0}^{\infty} |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| \quad (1.37)$$

a s pomocí definičního vztahu pro rozkladové koeficienty $c_n = \langle\varphi_n|\psi\rangle$.

- Stejně jako v minulém příkladě proveďte rozklad vektoru $\langle\psi|$ do spojitě báze $|p\rangle$, $p \in \mathbb{R}$.

- Normalizujte stav

$$|\psi\rangle = \alpha|\varphi_1\rangle + \beta|\varphi_2\rangle, \quad (1.38)$$

kde $\langle\varphi_m|\varphi_n\rangle = \delta_{mn}$.

- Spočítejte z vlastností delta funkce (viz Doplněk 4.2)

$$\int_{\mathbb{R}} f(x)g(x)\delta(x-x') dx. \quad (1.39)$$

- Dokažte v nějaké maticové reprezentaci, že platí $\text{Tr}\{\hat{A}\hat{B}\} = \text{Tr}\{\hat{B}\hat{A}\}$
- Ukažte, že \hat{A}^\dagger je ve spočetné bázi (reprezentaci) $|n\rangle$ reprezentován maticí A^\dagger , která je dána hermitovským sdružením matice A : $A^\dagger \equiv A^{\top*}$, kde $(A)_{mn} \equiv \langle m|\hat{A}n\rangle$ je maticovým elementem operátoru \hat{A} v bázi $|n\rangle$.
- Operátor \hat{A} je v bázi svých vlastních stavů $|n\rangle$ dán diagonální maticí.
- Dokažte, že $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$, a to jak pomocí přenášení oprátorů z první do druhé složky skalárního součinu, tak v nějaké diskrétní maticové reprezentaci, a ukažte si, že v ní je hermitovské sdružení dáno transpozicí a komplexním sdružením.

1.9 Cvičení 10

Příklady k procvičení

- Spočítejte vlastní čísla a vlastní vektory Hamiltoniánu

$$\hat{H} = a(|1\rangle\langle 1| - |2\rangle\langle 2| + |1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|) \quad (1.40)$$

v reprezentaci $Z = \{|1\rangle, |2\rangle\}$. Pozn. Jde o vyjádření operátoru \hat{H} v bázi $Z = \{|1\rangle, |2\rangle\}$ (jde o matici).

- Dokažte Schwartzovu nerovnost

$$|\langle\varphi|\psi\rangle|^2 \leq \langle\varphi|\varphi\rangle\langle\psi|\psi\rangle, \quad \forall|\varphi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}. \quad (1.41)$$

a to zavedením

$$|\chi\rangle \equiv |\psi\rangle - |\phi\rangle \frac{\langle\phi|\psi\rangle}{\langle\phi|\phi\rangle} \quad (1.42)$$

a s využitím pozorování, že

$$0 \leq \langle\chi|\chi\rangle\langle\phi|\phi\rangle. \quad (1.43)$$

- Jsou definovány operátory \hat{A} a \hat{B} v bázi $Z = \{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ tímto způsobem

$$A = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & -a & 0 \\ 0 & 0 & -a \end{pmatrix}, B = \begin{pmatrix} b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -ib \\ 0 & ib & 0 \end{pmatrix}, \quad a, b \in \mathbb{R}. \quad (1.44)$$

- Nalezněte jejich vlastní čísla λ_j a vlastní vektory \mathbf{x}_{λ_j} .
- Ukažte, že matice A a B komutují (tím pádem \hat{A} i \hat{B} komutují).
- V případě, že oba operátory komutují, sestavte vlastní vektory tak, aby byly společné pro obě matice.

1.10 Cvičení 11

Příklady k procvičení

Jde o opakování z minulých cvičení

- Čemu je v bracketovém formalismu rovno $\psi(x)$. Odpověď: $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$.
- Čemu je rovno $\langle x|p\rangle$? Odpověď:

$$\langle x|p\rangle = \langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{px}{\hbar}}. \quad (1.45)$$

- Spočítejte komutátory
 - $[\hat{p}, \hat{x}]$
 - $[\hat{T}, \hat{p}]$, kde operátor kinetické energie $\hat{T} \equiv p^2/(2m)$
 - $[\hat{T}, \hat{x}]$
 - $[\hat{V}, \hat{x}]$
 - $[\hat{V}, \hat{p}]$
- a dále $\langle p|x\rangle = \langle x|p\rangle^*$.
- Zapište $|\psi\rangle$ v bázi $|x\rangle$, $|p\rangle$ a spočetné bázi $|n\rangle$
- Stanovte relaci mezi $\langle x|\psi\rangle = \psi(x)$ a $\langle p|\psi\rangle = \psi(p)$
- Spočítejte

$$\int_{\mathbb{R}} f(x) \frac{|g'(x-a)|}{[h(x+b)]^2} \delta(x-a) dx, \quad a, b, c \in \mathbb{C}, f, g, h : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}. \quad (1.46)$$

- Zapište Hamiltonián

$$\hat{H} = a|1\rangle\langle 2| + b|1\rangle\langle 1| + d|2\rangle\langle 1| + c|2\rangle\langle 2| \quad (1.47)$$

v reprezentaci $Z = \{|1\rangle, |2\rangle\}$. Určete podmínky, za jakých Hamiltonián \hat{H} může představovat Hamiltonián reálného kvantového systému (Hermitovskost).

- Vyjádřete Hamiltonián L.H.O. $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}_+\hat{a}_- + 1/2)$ ve Fockově reprezentaci (bázi Fockových stavů) $|n\rangle$, tj. jako matici.
- Vyjádřete operátor souřadnice \hat{x} v reprezentaci stavů $|n\rangle$, pokud víte, že

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}_+ + \hat{a}_-). \quad (1.48)$$

Seznam domácích úkolů

- Vyjádřete operátory hybnosti \hat{p} a souřadnice \hat{x} a jejich kvadráty pomocí kreačních a anihilačních operátorů.

1.11 Cvičení 12

Úkoly

- Věta o integrálu pohybu v QM: \hat{A} je hermitovský operátor ($\hat{A}^\dagger = \hat{A}$) na Hilbertově prostoru \mathcal{H} příslušící pozorovatelné A a navíc platí $[\hat{A}, \hat{H}] = 0$ (komutuje s Hamiltoniánem), pak veličina A je integrálem pohybu (zachovává se v čase) a platí

$$\frac{d\langle A \rangle_\psi}{dt} = 0, \quad \forall \psi \in \mathcal{H}. \quad (1.49)$$

Důkaz se provede pomocí Schrodingerovy rovnice a rovnice k ní hermitovsky sdružené. Dokazuje se rovnost $d/dt \langle A \rangle_\psi = 0$.

- Ehrenfestovy teorémy: Zákony klasické mechaniky jsou kompatibilní s QM ve středních hodnotách: $\forall \psi \in \mathcal{H}$

$$\frac{d\langle x \rangle_\psi}{dt} = \frac{\langle p \rangle_\psi}{m} \quad \dots \text{vztah mezi rychlostí a hybností} \quad (1.50)$$

$$\frac{d\langle p \rangle_\psi}{dt} = \left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle_\psi \quad \dots \text{analogie Newtonova zákonu síly} \quad (1.51)$$

- Viriálový teorém v 1D:

$$\frac{d\langle xp \rangle_\psi}{dt} = \langle T \rangle_\psi - \left\langle x \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle_\psi. \quad (1.52)$$

a speciálně pro stacionární stavy

$$\langle T \rangle_\psi = \left\langle x \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle_\psi. \quad (1.53)$$

- Stacionární stav je vlastním stavem Hamiltoniánu $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$, a jeho časový vývoj lze zapsat

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\omega t} |\psi(0)\rangle, \quad \hat{H} |\psi(t)\rangle = \hbar\omega |\psi(t)\rangle. \quad (1.54)$$

což se v x -reprezentaci zapíše jako

$$\psi(x, t) = e^{-i\omega t} \psi(x, 0), \quad \hat{H}\psi(x, t) = \hbar\omega \psi(x, t). \quad (1.55)$$

- Pro libovolný stacionární ψ stav a libovolnou pozorovatelnou A platí

$$\frac{d\langle A \rangle_\psi}{dt} = 0. \quad (1.56)$$

- Pro stacionární stavy ψ a potenciál $\hat{V}(\hat{x})$, který je homogenní funkcí \hat{x} s -tého řádu ($\hat{V}(k\hat{x}) = k^s \hat{V}(\hat{x})$) platí 1D viriálový teorém ve tvaru

$$2\langle T \rangle_\psi = s\langle V \rangle_\psi. \quad (1.57)$$

Důkaz plyne z obecného viriálového teorému.

Seznam domácích úkolů

- Dokažte, že potenciál lineárního harmonického oscilátoru

$$\hat{V}_1(\hat{x}) = \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \quad (1.58)$$

je homogenní funkcí. Určete řád této funkce s . Spočtěte $\langle T \rangle_\psi$, $\langle V \rangle_\psi$ v obecném stacionárním stavu ψ .

1.12 Cvičení 13

Příklady k procvičení

- Určete měřitelné hodnoty spinu v libovolném směru \mathbf{n} v rovině xz a vlastní stavy příslušící možným vlastním hodnotám. Vysvětlete fyzikální situaci. Náповěda:

$$\hat{S}_{\mathbf{n}} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}, \quad (1.59)$$

kde trojice Pauliho matic je ve standardní reprezentaci dána

$$\boldsymbol{\sigma} = \left[\left(\begin{array}{cc} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{array} \right), \left(\begin{array}{cc} 0 & -i \\ i & 0 \end{array} \right), \left(\begin{array}{cc} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{array} \right) \right] \quad (1.60)$$

je projekcí operátoru spinu $\hat{\mathbf{S}}$ do směru \mathbf{n} . V našem případě je \mathbf{n} obecný vektor v rovině xz :

$$\mathbf{n} = \begin{pmatrix} \sin \beta \\ 0 \\ \cos \beta \end{pmatrix}, \beta \in (0, 2\pi). \quad (1.61)$$

- Spočtěte tvar matice $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a}$ a její determinant, kde $\mathbf{a} = (a_x, a_y, a_z)$.
- Pro σ_1 a σ_2 (σ_2 a σ_3) ukažte, že platí

$$[\sigma_j, \sigma_k] = 2i \varepsilon_{jkl} \sigma_l \quad (1.62)$$

$$\{\sigma_j, \sigma_k\} = 2\delta_{jk} \mathbb{1} \quad (1.63)$$

$$\text{Tr } \sigma_j = 0 \quad (1.64)$$

$$\det \sigma_j = -1 \quad (1.65)$$

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} \mathbb{1} + i \varepsilon_{ijk} \sigma_k \quad (1.66)$$

- Ukažte, že libovolná matice z $\mathbb{C}^{(2,2)}$ se dá zapsat jako lineární kombinace matic $\mathbb{1}$, σ_j , $\in \{1, 2, 3\}$. Náповěda: Ukažte, že uvedené matice tvoří bázi $\mathbb{C}^{(2,2)}$. Postupujte tak, že obecnou matici \mathbb{A} zapíšete jako lineární kombinaci Pauliho matic

$$\mathbb{A} \equiv a_0 \mathbb{1} + \sum_{j=1}^3 a_j \sigma_j,$$

následně vynásobte maticí jednotkovou nebo jednou z Pauliho matic σ_j a "vytracujte", tj spočítejte stopu pravé a levé strany.

- Ukažte, že platí

$$(\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma})(\mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})\mathbb{1} + i(\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (1.67)$$

- Dokažte, že vlastní čísla všech Pauliho matic jsou $\lambda = \pm 1$, a to buď explicitně pro každou matici zvlášť, anebo s pomocí zápisu

$$\sigma_k = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$$

a vyjádřením stopy a determinantu matice pomocí a, b, c, d a konečně zápisem charakteristického polynomu pomocí stopy a determinantu Pauliho matic.

- Spočtěte $\exp(i\varphi\sigma_1)$ pomocí Taylorova rozvoje exponenciály a s využitím toho, že $\sigma_1^2 = \mathbb{1}$ a tedy

$$\sigma_1^{2k+1} = \sigma_1$$

Příklady za domácí úkol

- Krabice obsahující částici je rozdělena přepážkou na dvě části. Jestliže se částice nachází v levé (pravé) části krabice, nachází se částice ve stavu $|L\rangle$ ($|R\rangle$). Nejobecnější stavový vektor systému $|\psi\rangle$ je zapsán jako

$$|\psi\rangle = |R\rangle\langle R|\psi\rangle + |L\rangle\langle L|\psi\rangle \equiv \alpha|R\rangle + \beta|L\rangle. \quad (1.68)$$

Co musí platit pro koeficienty α, β ?

Průchod částice skrze přepážku je popsán (interakčním) Hamiltoniánem

$$\hat{H} = \Delta(|L\rangle\langle R| + |R\rangle\langle L|), \quad \Delta \in \mathbb{R}. \quad (1.69)$$

- Vyjádřete Hamiltonián jako matici \mathbf{H} v reprezentaci $\{|R\rangle, |L\rangle\}$ dimenze 2. Kterou matici Vám připomíná?
- Najděte normalizované vlastní vektory Hamiltoniánu \hat{H} a jeho vlastní čísla.
- Určete časový vývoj stavu $|\psi\rangle$, který se v čase $t = 0$ nachází v obecné superpozici $|\psi\rangle = \alpha|R\rangle + \beta|L\rangle$, $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$. Řešte jak pomocí rozkladu stavů $|L\rangle$ a $|R\rangle$ do vlastních stavů energie, tak pomocí exponenciály matice, víte-li, že evoluční operátor lze zapsat jako

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

a časový vývoj je dán

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi(0)\rangle$$

- Spočítejte pravděpodobnost (jako funkci času) nalezení stavu připraveného v čase $t = 0$ jako $|\psi(t = 0)\rangle = |L\rangle$ ve stavu $|R\rangle$.
- Pozměněná úloha: určete časový vývoj stavu $|\psi\rangle$, který se v čase $t = 0$ nachází v obecné superpozici $|\psi\rangle = \alpha|R\rangle + \beta|L\rangle$ za předpokladu, že Hamiltonián je ve tvaru

$$\hat{H} = \Delta|L\rangle\langle R|. \quad (1.70)$$

Ukažte, že takovýto Hamiltonián není hermitovským (samosdruženým) operátorem.

Ukažte, že pro stav $|\psi(t)\rangle$ se nezachovává v čase pravděpodobnost:

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle \neq 0. \quad (1.71)$$

1.13 Cvičení 14 – Gaussovský balík

Zadání: Pro volnou částici hmoty m počtete

- Časovou evoluci $\psi(x, t)$.
- Normalizační konstantu A .
- Hustotu pravděpodobnosti $\rho(x, t)$.
- Střední hodnoty $\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$, $\langle p \rangle$, $\langle p^2 \rangle$.
- Spočtete střední kvadratické odchylky Δx , Δp a určete velikost součinu $\Delta x \Delta p$ a ověřte platnost relací neurčitosti.

a to pro případ, kdy v čase $t = 0$ je vlnová funkce částice dána Gaussovským balíkem s počátečním impulzem $\hbar k_0$

$$\psi(x, t = 0) = A e^{-ax^2} e^{ik_0 x}. \quad (1.72)$$

Výsledky:

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \frac{A}{\sqrt{1 + i\delta(t)}} \exp \left[\frac{-ax^2 + ik_0 x - E_0 t}{1 + i\delta(t)} \right] \\ A &= \left(\frac{2a}{\pi} \right)^{1/4}, \quad \delta(t) = \frac{2a\hbar t}{m}, \quad E_0 = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} \end{aligned} \quad (1.73)$$

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &= \frac{A^2}{\sqrt{1 + \delta(t)^2}} \exp \left[-\frac{(x - v_0 t)^2}{2\sigma(t)^2} \right] \\ v_0 &= \frac{\hbar k_0}{m}, \quad \sigma(t) = \sqrt{\frac{1 + \delta(t)^2}{4a}} \end{aligned} \quad (1.74)$$

$$\langle x \rangle_\psi = v_0 t \quad (1.75)$$

$$\langle x^2 \rangle_\psi = \sigma(t)^2 + v_0^2 t^2 = \sigma(t)^2 + \langle x \rangle_\psi^2 \quad (1.76)$$

$$\langle p \rangle_\psi = \hbar k_0 \quad (1.77)$$

$$\langle p^2 \rangle_\psi = \hbar^2 a + \hbar^2 k_0^2 = \hbar^2 a + \langle p \rangle_\psi^2 \quad (1.78)$$

$$\Delta p \Delta x = \frac{\hbar}{2} \sqrt{1 + \delta(t)^2} \quad (1.79)$$

Tip1: Využijte toho, že

$$I(a) \equiv \int_{\mathbb{R}} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \quad J(a) \equiv \int_{\mathbb{R}} x^2 e^{-ax^2} dx = -\frac{\partial}{\partial a} I(a)$$

Tip2: Při počítání $\langle p^2 \rangle_\psi$ je efektivnější použít p -reprezentaci.

1.14 Cvičení – Matematika I

Úkoly

- Popsat teorii lineárních diferenciálních rovnic s počátečními podmínkami – definice D.R., jednoznačnost a tvar řešení.
- Věta derivace integrálu podle parametru.

Seznam příkladů k procvičení – Domácí úkol pro ty, kteří neabsolvovali SLO/CMF

- $\psi' = ax\psi$ – separace proměnných, řešení v reálném a komplexním oboru zvlášť.
- Jakobián přechodu mezi kartézskými, polárními a sférickými souřadnicemi, vysvětlení, že se hodí při integraci funkce více proměnných.
- $\psi' = 0$.

- $\psi' = \psi$ v reálném a komplexním oboru.
- $\psi' = k\psi$.
- $\psi'' = -k^2\psi$.
- Spočítejte Jakobián transformace do sférických souřadnic z definice inverzních vztahů

$$\begin{aligned}x &= r \sin \theta \cos \phi \\y &= r \sin \theta \sin \phi \\z &= r \cos \theta\end{aligned}$$

a tedy že

$$\int_{\mathbb{R}^3} dx dy dz = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi = \int_0^{2\pi} \int_{-1}^{+1} \int_0^\infty r^2 dr d\cos \theta d\phi$$

- Spočítejte integrál:

$$I(a) = \int_{\mathbb{R}} e^{-ax^2} dx,$$

- Spočítejte integrály:

$$J_n(a) = \int_{\mathbb{R}} x^n e^{-ax^2} dx, \quad n = 1, 2, 3, 4.$$

(řešte jako $I^2(a)$ pomocí transformace do polárních souřadnic, a J_n jako parametrický integrál derivací podle parametru).

1.15 Cvičení – Matematika II

Úkoly

- Definice hustoty pravděpodobnosti a její vlastnosti

$$\int_{\mathbb{R}} \rho(x) dx = 1, \quad dP = \rho(x) dx, \quad P(a, b) = \int_a^b \rho(x) dx.$$

- Definice výpočtu střední hodnoty veličiny, které je přidělen kvantově mechanický operátor, princip převodu klasické pozorovatelné na hermitovský operátor
- Definice gamma funkcí $\Gamma(n)$ a $\Gamma(n/2)$ pro výpočet složitějších integrálů.

Seznam příkladů k procvičení

- Formánek 1.3 a), b), c), 1.5

Seznam domácích úkolů

- Formánek 1.4 a) – e)

Kapitola 2

Formalizmus

2.1 Braketový formalizmus

2.1.1 Brakety

Pro abstraktí vektor z Hilbertova prostoru budeme používat symbol (tzv. "ket"vektor)

$$|\psi\rangle \in \mathcal{H}$$

a pro jeho duál z duálního prostoru symbol (tzv. "bra"vektor)

$$\langle\psi| \in \mathcal{H}'$$

kde duál je lineární formou, a působením duálu na vektor získáme skalární součin

$$\langle\phi|\psi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle^* \in \mathbb{C}$$

Jde o skalární součin na komplexním prostoru, pro který požadujeme

$$\langle\phi|\alpha\psi\rangle = \alpha\langle\phi|\psi\rangle$$

$$\langle\alpha\phi|\psi\rangle = \alpha^*\langle\phi|\psi\rangle$$

a to mj. proto, aby $\langle\psi|\psi\rangle \geq 0$ a šlo tedy definovat normu vektoru jako $\|\psi\| \equiv \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}$. Skalární součin je dále lineární ve smyslu

$$\langle\phi|\alpha\psi + \beta\chi\rangle = \alpha\langle\phi|\psi\rangle + \beta\langle\phi|\chi\rangle$$

$$\langle\alpha\psi + \beta\chi|\phi\rangle = \alpha^*\langle\psi|\phi\rangle + \beta^*\langle\chi|\phi\rangle.$$

Tabulka identit a pravidel pro počítání s vektory je v Tabulce 2.1.

Vektorový formalizmus	Braketový formalizmus
Skalární součin	
$\vec{x}^\dagger \vec{y} = \sum_i x_i y_i$ na reálném prostoru	
$\vec{x}^\dagger \vec{y} = \sum_i x_i^* y_i = (\vec{x}^\dagger \vec{y})^*$ (komplexní prostor)	
popř. někdy též $(x, y) = (y, x)^*$	$\langle \psi \phi \rangle = \langle \phi \psi \rangle^*$
zajišťuje reálnost kvadrátu normy, a tedy i velikosti vektoru	
$ \vec{x} ^2 = \vec{x}^\dagger \vec{x} = \sum x_i ^2$	$ \psi ^2 = \langle \psi \psi \rangle$
Dále platí, že pro $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$:	
$(\alpha x, y) = \alpha^* (x, y)$	$\langle \alpha \psi \phi \rangle = \alpha^* \langle \psi \phi \rangle$
$(x, \alpha y) = \alpha (x, y)$	$\langle \psi \alpha \phi \rangle = \alpha \langle \psi \phi \rangle$
Báze	
konečná	
$\{\vec{x}_i\}_{i=1}^n$	$\{ \phi_i\rangle\}_{i=1}^n$
spočetná	
$\{\vec{x}_i\}_{i=1}^\infty$	$\{ \phi_i\rangle\}_{i=1}^\infty$
ortogonální	
$\vec{x}_i^\dagger \vec{x}_j = \delta_{ij} a_i, a_i \in \mathbb{C}$	$\langle \phi_i \phi_j \rangle = \delta_{ij} a_i, a_i \in \mathbb{C}$
ortonormální	
$\vec{x}_i^\dagger \vec{x}_j = \delta_{ij}$	$\langle \phi_i \phi_j \rangle = \delta_{ij}$ či ještě schematictěji $\langle i j \rangle = \delta_{ij}, i, j \in \mathbb{N}, \{ k\rangle\}_{k=1}^\infty$ pro spojitou bázi $ x\rangle, x \in \mathbb{R}$ která je ortonormální $\langle x x' \rangle = \delta(x - x')$
Rozklad do báze	
$\vec{x} = \sum x_i \vec{e}_i,$	$ \psi\rangle = \sum c_i \phi_i\rangle,$
kde souřadnice $x_i = \vec{e}_i \cdot \vec{x}$	kde souřadnice $c_i = \langle \phi_i \psi \rangle$
a tedy $\vec{x} = \sum \vec{e}_i \vec{e}_i \cdot \vec{x}$	$ \psi\rangle = \sum \phi_i\rangle \langle \phi_i \psi \rangle$
Relace uzavřenosti	
rozklad platí pro jakýkoli vektor \vec{x} či ket $ \psi\rangle$	
a můžeme tedy izolovat identitu (relaci uzavřenosti)	
$\mathbb{1} = \sum \vec{e}_i \vec{e}_i$	$\hat{\mathbb{1}} = \sum \phi_i\rangle \langle \phi_i $
(maticová identita)	(operátorová identita)
	Pro spojitou bázi $ x\rangle, x \in \mathbb{R}$
	$\hat{\mathbb{1}} = \int_{-\infty}^{\infty} x\rangle \langle x dx$

Tabulka 2.1: Tabulka identit z vektorových prostorů.

2.1.2 Od vlastních stavů hybnosti k P a X reprezentacím

Pracujme pro jednoduchost v jedné dimenzi. V braketovém formalismu lze zapsat skalární součin vlastních stavů operátoru hybnosti

$$\hat{p}\psi_p(x) = p\psi_p(x)$$

jako $\langle\psi_{p'}|\psi_p\rangle$. Protože jsme však již našli (viz vztah 1.14), že rovinné vlny jsou normalizovány k δ funkci, musí platit také

$$\langle\psi_{p'}|\psi_p\rangle = (\psi_{p'}, \psi_p) = \delta(p - p')$$

mj. také proto, že výsledek skalárního součinu nezávisí na volbě báze či reprezentace. Značme dále pro jednoduchost

$$|\psi_p\rangle \equiv |p\rangle,$$

pro které opět platí

$$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle, \quad p \in \mathbb{R}, \quad |p\rangle \in \mathcal{H}.$$

Pokusme se nyní rozepsat nějaký obecný stav částice $|\psi\rangle$ jako lineární kombinaci vlastních stavů operátoru hybnosti, tj. zapsat si superpozici (vlnový balík; provést rozklad do rovinných vln)

$$|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} g(p)|p\rangle dp$$

kde $g(p)$ je obecně komplexní váhovací funkce udávající zastoupení hybnosti p ve stavu $|\psi\rangle$, přesněji jde o amplitudu pravděpodobnosti naměření hybnosti p ve stavu $|\psi\rangle$. Provedením skalárního součinu obou stran rovnice se stavem $\langle p' |$ dostaneme

$$\langle p' | \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}} g(p) \langle p' | p \rangle dp = \int_{\mathbb{R}} g(p) \delta(p' - p) dp = g(p')$$

Je tedy $g(p) = \langle p | \psi \rangle \equiv \tilde{\psi}(p) \in \mathbb{C}$ a dosazením zpět do superpozice

$$|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} \langle p | \psi \rangle |p\rangle dp = \int_{\mathbb{R}} |p\rangle \langle p | \psi \rangle dp = \hat{\mathbb{1}} |\psi\rangle.$$

Z libovolnosti uvažovaného stavu $|\psi\rangle$ získáváme důležitou operátorovou identitu

$$\hat{\mathbb{1}} = \int_{\mathbb{R}} |p\rangle \langle p| dp,$$

kterou nazýváme relací uzavřenosti (úplnosti) pro bázi danou vektory $|p\rangle$.

Pravděpodobnost naměření hybnosti částice v intervalu $(p, p + dp)$ ve stavu $|\psi\rangle$ je pak rovna kvadrátu velikosti amplitudy, tj.

$$\mathcal{P}_{P \in (p, p+dp)} = |\langle p | \psi \rangle|^2 = \langle p | \psi \rangle \langle p | \psi \rangle^* = \langle \psi | p \rangle \langle p | \psi \rangle = |g(p)|^2 = |\tilde{\psi}(p)|^2,$$

kde $\tilde{\psi}(p) \equiv \langle p | \psi \rangle$ je **vlnová funkce v P -reprezentaci**.

Ve 3D pak platí

$$\langle \vec{p}' | \vec{p} \rangle = \delta^{(3)}(\vec{p} - \vec{p}') \quad (2.1)$$

$$\hat{\mathbb{1}} = \int_{\mathbb{R}^3} |\vec{p}\rangle \langle \vec{p}| d^3p. \quad (2.2)$$

2.1.3 Vlastní stavy operátoru polohy

Obdobně postupujme pro vlastní stavy operátoru souřadnice, které interpretujeme jako stav, kdy se částice nachází v místě x :

$$\hat{x}|x'\rangle = x'|x'\rangle, \quad x' \in \mathbb{R}, \quad |x'\rangle \in \mathcal{H}.$$

Průmět libovolného stavu do báze vlastních vektorů operátoru souřadnice budeme nazývat vlnovou funkcí $\psi(x) \equiv \langle x|\psi\rangle$ neb právě ta vyjadřuje amplitudu (infinitesimální) pravděpodobnosti nalezení částice ve stavu $|\psi\rangle$ v místě x (reprezentováno stavem $|x\rangle$). Speciálně pak nám již známé vlastní funkce operátoru hybnosti $\psi_p(x)$ souvisí s abstraktními kety $|p\rangle$ následovně

$$\psi_p(x) \equiv \langle x|p\rangle.$$

Podívejme se nyní na normalizaci vlastních stavů polohy s tím, že si mezi bra a ket vložíme relaci uzavřenosti 2.1.2:

$$\langle x'|x\rangle = \langle x'|\hat{1}|x\rangle = \int_{\mathbb{R}} \langle x'|p\rangle \langle p|x\rangle dp$$

Protože

$$\begin{aligned} \langle x'|p\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{px'}{\hbar}}, & \langle p|x\rangle &= \langle x|p\rangle^* = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-i\frac{px}{\hbar}} \\ \langle x'|x\rangle &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{\mathbb{R}} e^{i\frac{p(x'-x)}{\hbar}} dp = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} e^{ik(x'-x)} dk \end{aligned}$$

Z integrální reprezentace δ funkce (viz Doplněk 4.2) však víme, že

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} e^{ikx} dk$$

a dostáváme tedy

$$\langle x'|x\rangle = \delta(x - x').$$

Zcela analogicky jako u vlastních stavů hybnosti nyní můžeme rozvést libovolný stav do superpozice vlastních stavů polohy

$$|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} h(x)|x\rangle dx$$

kde $h(x)$ je obecně komplexní váhovací funkce udávající míru zastoupení stavu, kdy se částice nachází v místě x , ve stavu $|\psi\rangle$, přesněji jde o amplitudu pravděpodobnosti změření polohy x ve stavu $|\psi\rangle$. Provedením skalárního součinu obou stran rovnice se stavem $\langle x'|$ dostaneme

$$\langle x'|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} h(x)\langle x'|x\rangle dx = \int_{\mathbb{R}} h(x)\delta(x' - x) dx = h(x')$$

Je tedy $h(x) = \langle x|\psi\rangle \equiv \psi(x) \in \mathbb{C}$ a dosazením zpět do superpozice

$$|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} \langle x|\psi\rangle |x\rangle dx = \int_{\mathbb{R}} |x\rangle \langle x|\psi\rangle dp = \hat{1}|\psi\rangle.$$

Z libovolnosti uvažovaného stavu $|\psi\rangle$ získáváme důležitou operátorovou identitu

$$\hat{1} = \int_{\mathbb{R}} |x\rangle \langle x| dx,$$

kterou nazýváme relací uzavřenosti (úplnosti) pro bázi danou vektory $|x\rangle$.

Pravděpodobnost naměření polohy částice v intervalu $(x, x + dx)$ ve stavu $|\psi\rangle$ je pak rovna kvadrátu velikosti amplitudy, tj.

$$\mathcal{P}_{X \in (x, x+dx)} = |\langle x|\psi\rangle|^2 = \langle x|\psi\rangle\langle x|\psi\rangle^* = \langle \psi|x\rangle\langle x|\psi\rangle = |h(x)|^2 = |\psi(x)|^2 = \rho(x),$$

kde $\psi(x) \equiv \langle x|\psi\rangle$ je **vlnová funkce v X -reprezentaci**.

Ve 3D pak platí

$$\langle \vec{x}'|\vec{x}\rangle = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}') \quad (2.3)$$

$$\hat{\mathbb{1}} = \int_{\mathbb{R}^3} |\vec{x}\rangle\langle \vec{x}| d^3x. \quad (2.4)$$

Obě báze složené z vlastních stavů hybnosti či souřadnice jsou tedy úplné spojité báze umožňující rozepsat libovolný stav jako jejich superpozici.

2.1.4 Vlastní stavy Hamiltoniánu

Aneb diskrétní energiová báze (reprezentace).

Zkusme si nějaký obecný stav $|\psi\rangle$ promítnout do vlastních stavů operátoru celkové energie. Nechť tedy známe diskrétní spektrum a vlastní stavy nějakého Hamiltoniánu

$$\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$$

popř. v progresivnějším značení

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle,$$

pro které platí (kvůli samosdruženosti \hat{H})

$$E_n = E_n^* \quad (2.5)$$

$$\langle n|m\rangle \equiv \langle \psi_n|\psi_m\rangle = \delta_{nm}. \quad (2.6)$$

Průměty

$$\langle \psi_n|\psi\rangle \equiv c_n$$

jsou diskrétní sadou obecně komplexních čísel, které určují amplitudu pravděpodobnosti naměření energie E_n ve stavu $|\psi_n\rangle$, "lidově řečeno", "jak moc je stav $|\psi_n\rangle$ zastoupen ve stavu $|\psi\rangle$ ". Opravdu, rozepsáním $|\psi_n\rangle$ jako lineární kombinace stacionárních stavů získáme $|\psi\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle$ a provedením skalárního součinu obou stran rovnice s bra-vektorem $\langle \psi_m|$ dostaneme

$$\langle \psi_m|\psi\rangle = \sum_n c_n \langle \psi_m|\psi_n\rangle = \sum_n c_n \delta_{mn} = c_m$$

Tj. $c_n = \langle \psi_n|\psi\rangle$ a

$$\hat{\mathbb{1}}|\psi\rangle = \sum_n |\psi_n\rangle c_n = \sum_n |\psi_n\rangle\langle \psi_n|\psi\rangle.$$

Z libovolnosti $|\psi\rangle$ můžeme z výrazu "extrahovat" důležitou **relaci uzavřenosti**

$$\hat{\mathbb{1}} = \sum_n |\psi_n\rangle\langle \psi_n|.$$

Diskrétní sada čísel $c_n = \langle n|\psi\rangle$ plně reprezentuje stav $|\psi\rangle$. Ze znalosti všech koeficientů c_n v čase $t = 0$ také známe časový vývoj stavu $|\psi\rangle$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n |n\rangle e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}.$$

2.1.5 Diskrétní a spojitě reprezentace

Vztah

$$|\psi\rangle = \hat{A}|\chi\rangle$$

si nyní prozkoumáme v projekci na nějakou úplnou diskrétní bázi $\{|\phi_i\rangle\}_{i=1}^{\infty}$ pro kterou platí relace uzavřenosti

$$\sum_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i| = \hat{\mathbb{1}}.$$

Průmětem do stavu $|\phi_n\rangle$ získáme

$$\langle\phi_n|\psi\rangle = \langle\phi_n|\hat{A}\chi\rangle \quad (2.7)$$

$$\langle\phi_n|\psi\rangle = \langle\phi_n|\hat{A}\hat{\mathbb{1}}\chi\rangle \quad (2.8)$$

$$\langle\phi_n|\psi\rangle = \langle\phi_n|\hat{A}\sum_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i|\chi\rangle \quad (2.9)$$

$$\underbrace{\langle\phi_n|\psi\rangle}_{\psi_n \in \mathbb{C}} = \sum_i \underbrace{\langle\phi_n|\hat{A}|\phi_i\rangle}_{A_{ni} \in \mathbb{C}} \underbrace{\langle\phi_i|\chi\rangle}_{\chi_i \in \mathbb{C}} \quad (2.10)$$

$$\psi_n = \sum_i A_{ni}\chi_i \quad (2.11)$$

$$\vec{\chi} = \mathbb{A}\vec{\chi}, \quad (2.12)$$

$$(2.13)$$

tj. algebraickou rovnicí, kterou můžeme vyjádřit maticově, a kde $A_{ni} \equiv \langle\phi_n|\hat{A}|\phi_i\rangle$ je maticový element operátoru \hat{A} v bázi $\{|\phi_i\rangle\}_{i=1}^{\infty}$.

Pokud provedeme průmět do nějaké spojitě báze splňující relaci uzavřenosti

$$\hat{\mathbb{1}} = \int_{\mathbb{R}} |x\rangle\langle x| dx$$

pak analogicky obdržíme

$$\langle x|\psi\rangle = \langle x|\hat{A}\chi\rangle \quad (2.14)$$

$$\langle x|\psi\rangle = \langle x|\hat{A}\hat{\mathbb{1}}\chi\rangle \quad (2.15)$$

$$\langle x|\psi\rangle = \langle x|\hat{A}\int_{\mathbb{R}} |x'\rangle\langle x'|\chi\rangle dx' \quad (2.16)$$

$$\underbrace{\langle x|\psi\rangle}_{\psi(x) \in \mathbb{C}} = \int_{\mathbb{R}} \underbrace{\langle x|\hat{A}|x'\rangle}_{A(x,x') \in \mathbb{C}} \underbrace{\langle x'|\chi\rangle}_{\chi(x') \in \mathbb{C}} dx' \quad (2.17)$$

$$\psi(x) = \int_{\mathbb{R}} A(x,x')\chi(x') dx', \quad (2.18)$$

$$(2.19)$$

tj. integrální rovnici, kde $A(x,x')$ je maticový element operátoru \hat{A} v bázi $\{|\phi_i\rangle\}_{i=1}^{\infty}$.

Pouze pokud bude navíc operátor lokální, tj. $A(x,x') = \delta(x-x')A(x)$, pak se poslední vztah zjednoduší na

$$\psi(x) = A(x)\chi(x),$$

což nastává např. pro Hamiltonián či operátor hybnosti, který má v X -reprezentaci tvar

$$p(x,x') = -i\hbar \delta(x-x') \frac{d}{dx} \quad (2.20)$$

$$p(x) = -i\hbar \frac{d}{dx} \quad (2.21)$$

$$(2.22)$$

a lokálnost hamiltoniánu vyplývá z rozumného požadavku lokálnosti potenciálu (částice "cítí" potenciál místě, kde se nachází, a hodnoty potenciálu v jiných místech na to nemají vliv).

2.1.6 Souvislost X a P reprezentací

$$\begin{aligned}
 \psi(x) \equiv \langle x|\psi \rangle &= \langle x|\mathbb{1}|\psi \rangle \\
 &= \int_{\mathbb{R}} \langle x|p \rangle \langle p|\psi \rangle dp \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} e^{i\frac{px}{\hbar}} \tilde{\psi}(p) dp \\
 &= \sum_n \underbrace{\langle x|n \rangle}_{\psi_n(x)} \underbrace{\langle n|\psi \rangle}_{c_n} \\
 &= \sum_n \psi_n(x) c_n \\
 &= \int_{\mathbb{R}} dx' \langle x|x' \rangle \langle x'|\psi \rangle \\
 &= \int_{\mathbb{R}} dx' \delta(x-x') \psi(x')
 \end{aligned}$$

kde $\psi(x) \equiv \langle x|\psi \rangle$ je vlnová funkce v X -reprezentaci, zatímco $\tilde{\psi}(p) \equiv \langle p|\psi \rangle$ je vlnová funkce v P -reprezentaci, a souvisí spolu Fourierovou transformací.

V X -reprezentaci mají operátory souřadnice a hybnosti tvar

$$\begin{aligned}
 \hat{x} &\equiv x \\
 \hat{p} &\equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}
 \end{aligned}$$

zatímco v P -reprezentaci

$$\begin{aligned}
 \hat{x} &\equiv i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \\
 \hat{p} &\equiv p.
 \end{aligned}$$

Ukažte si s pomocí nějaké testovací funkce $\varphi(p)$, že operátory v P -reprezentaci splňují stejnou kanonickou komutační relaci $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ jako v X -reprezentaci.

2.1.7 Operátor hybnosti v X -reprezetaci

Podívejme se, jakou funkci získáme působením operátoru hybnosti, čímž zjistíme jeho vyjádření v X -reprezetaci ($\equiv \hat{p}_X$):

$$\langle x | \hat{p} | \psi \rangle \equiv \hat{p}_X \psi(x) = \int_{\mathbb{R}} \langle x | \hat{p} | p \rangle \langle p | \psi \rangle dp \quad (2.23)$$

$$= \int_{\mathbb{R}} p \langle x | \hat{p} \rangle \langle p | \psi \rangle dp \quad (2.24)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} p e^{i\frac{px}{\hbar}} \tilde{\psi}(p) dp \quad (2.25)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} \tilde{\psi}(p) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} e^{i\frac{px}{\hbar}} dp \quad (2.26)$$

$$= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \int_{\mathbb{R}} \tilde{\psi}(p) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{px}{\hbar}} dp \quad (2.27)$$

$$= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x), \quad (2.28)$$

$$(2.29)$$

kde $\tilde{\psi}(p) \equiv \langle p | \psi \rangle$ je vlnová funkce v P -reprezetaci, a Fourierovský integrál

$$\psi(x) \equiv \int_{\mathbb{R}} \tilde{\psi}(p) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{px}{\hbar}} dp$$

je právě převodním vztahem mezi X - a P -reprezetacemi. Jest tedy skutečně

$$\hat{p}_X = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}.$$

2.2 Operátory

2.2.1 Základy

Operátor je zobrazení z Hilbertova prostoru opět do Hilbertova prostoru:

$$\hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H},$$

tj. např.

$$\hat{A}|\psi\rangle = |\phi\rangle.$$

Pro představu můžete uvažovat např. v analogii matice působící na vektory

$$A\vec{x} = \vec{y}$$

Zajímat nás budou operátory lineární, pro které

$$\forall \alpha, \beta \in \mathbb{C} : \hat{A}[\alpha|\psi\rangle + \beta|\phi\rangle] = \alpha\hat{A}|\psi\rangle + \beta\hat{A}|\phi\rangle$$

Součinem dvou operátorů rozumíme postupné působení na nějaký testovací vektor

$$\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle \equiv \hat{A}(\hat{B}|\psi\rangle)$$

speciálně

$$\hat{A}^2|\psi\rangle \equiv \hat{A}\hat{A}|\psi\rangle$$

a pro libovolnou funkci $f(x)$ s dobře definovaným mocninným rozvojem $f(x) = \sum_k a_k x^k$ můžeme definovat libovolnou operátorovou funkci

$$f(\hat{A}) \equiv \sum_{k=0}^{\infty} a_k \hat{A}^k$$

a speciálně např.

$$e^{\hat{A}} \equiv \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^k}{k!}.$$

K operátoru \hat{A} definujeme operátor hermitovsky sdružený \hat{A}^\dagger tak, že

$$\forall |\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H} : \langle \phi | \hat{A} \psi \rangle = \langle \hat{A}^\dagger \phi | \psi \rangle.$$

Platí dále

$$|\psi\rangle^\dagger \equiv \langle \psi| \tag{2.30}$$

$$(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A} \tag{2.31}$$

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger \tag{2.32}$$

$$\tag{2.33}$$

Pokud navíc platí $\hat{H} \equiv \hat{H}^\dagger$, nazýváme takovýto operátor samosdruženým, hermitovským, samoadjungovaným, symetrickým (až na drobné matematické nuance):

- Ukažte, že samosdružené operátory mají reálná vlastní čísla, a mohou tak hrát roli operátorů příslušejících fyzikálním pozorovatelným veličinám.
- Ukažte v X -reprezentaci, že operátory hybnosti a polohy jsou samosdružené.

- Ukažte, že operátor je diagonální v reprezentaci svých vlastních vektorů.
- Ukažte, že vlastní vektory hermitovského operátoru příslušející k různým vlastním číslům jsou na sebe kolmé. Toto ospravedlňuje často užívané báze vektory, pro které často uvažujeme jejich ortonormalitu, tj.

$$\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \delta_{mn}.$$

2.2.2 Pokročilejší operátorový počet

Pro exponenciálu obecně nekomutujících operátorů platí Hausdorffova formule

$$e^{i\hat{A}}\hat{B}e^{-i\hat{A}} = \hat{B} + i[\hat{A}, \hat{B}] + \frac{i^2}{2!}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \dots + \frac{i^n}{n!}[\hat{A}, [\hat{A}, [\dots \hat{A}, \hat{B} \dots]]]$$

popř. ekvivalentně

$$e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \dots + \frac{1}{n!}[\hat{A}, [\hat{A}, [\dots \hat{A}, \hat{B} \dots]]]$$

Dále, pokud \hat{A} a \hat{B} komutují se svým komutátorem, tj.

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

platí zjednodušená Campbell–Baker–Hausdorffova (CBH) formule

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

Ukažte si dále, že lze v X -reprezentaci definovat operátory souřadnice a hybnosti jako $\hat{x}' = x$ a $\hat{p}' \equiv \hat{p} + f(x) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} + f(x)$, kde $f(x)$ je libovolná funkce, přičemž stále bude platit $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ a relaci $\hat{p}' \equiv -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} + f(x)$ lze chápat jako unitární transformaci původního operátoru hybnosti

$$\hat{p}' \equiv \exp[-iF(x)]\hat{p}\exp[iF(x)], \quad F(x) \equiv \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^x f(x') dx'$$

a to s využitím výsledku

$$[F(\hat{x}), \hat{p}] = i\hbar F'(x).$$

Zkuste převést (s využitím tohoto výsledku pro operátory $i\hat{A}$ a $i\hat{B}$ a Eulerova vzorce) na tvar připomínající součtový vzorec operátorové funkce $\cos \hat{A} \cos \hat{B}$ a $\cos \hat{A} \sin \hat{B}$.

Kapitola 3

Některé (ne)řešené úlohy

3.1 Harmonický oscilátor

3.1.1 Algebra posunovacích operátorů

Pro připomenutí si uvedme některé vztahy pro kreační a anihilační operátory a vlastní stavy harmonického oscilátoru.

$$H = \hbar\omega \left(a_{\pm} a_{\mp} \pm \frac{1}{2} \right) \quad (3.1)$$

$$a_{\pm} \equiv \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} [\mp ip + m\omega x] = a_{\mp}^{\dagger} \quad (3.2)$$

$$1 = [a_{-}, a_{+}] \quad (3.3)$$

$$a_{+}|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \quad a_{-}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad (3.4)$$

$$p = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(a_{+} - a_{-}), \quad x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a_{+} + a_{-}) \quad (3.5)$$

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle, \quad E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (3.6)$$

$$a_{+}a_{-}|n\rangle = n|n\rangle \quad (3.7)$$

$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm} \quad (3.8)$$

3.1.2 Neřešené příklady

- Ukažte přímo z komutátoru $[a_{-}, a_{+}] = 1$ popř. ještě i s využitím

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]$$

že platí, a to ať už vyjdete z libovolného tvaru Hamiltoniánu $H = \hbar\omega (a_{\pm}a_{\mp} \pm \frac{1}{2})$, následující komutační relace:

$$[a_{+}, H] = -\hbar\omega a_{+}, \quad [a_{-}, H] = \hbar\omega a_{-}.$$

Můžete řešit i s pomocí vyjádření posunovacích operátorů pomocí operátorů \hat{x} a \hat{p} a využít kanonickou komutační relaci $[\hat{x}, \hat{p}]$.

- S využitím vyjádření operátoru souřadnice pomocí kreačních a anihilačních operátorů ukažte, že ve stacionárních stavech pro střední hodnoty polohy a hybnosti platí

$$\langle n|x|n\rangle = 0, \quad \langle n|p|n\rangle = 0$$

- Obdobně ukažte, že ve stacionárních stavech pro střední hodnoty kinetické a potenciální energie platí

$$\langle n|V|n\rangle = \frac{1}{2}E_n = \langle n|T|n\rangle$$

- Nakonec ověřte, že pro rozptyly měření souřadnice a hybnosti ve stacionárních stavech platí

$$(\Delta x)(\Delta p) = \frac{\hbar}{2}(2n+1) \geq \frac{\hbar}{2}$$

tj. relace neurčitosti jsou ze všech stacionárních stavů minimalizovány pouze pro základní stav.

- Zapište, jak vypadají maticové elementy operátorů H , x a p v bázi stacionárních stavů, tj, spočtěte

$$H_{mn} \equiv \langle m|H|n\rangle, \quad x_{mn} \equiv \langle m|x|n\rangle, \quad p_{mn} \equiv \langle m|p|n\rangle.$$

Které z těchto matic jsou diagonální? Popř. také spočtěte

$$x_{mn}^2 \equiv \langle m|x^2|n\rangle, \quad p_{mn}^2 \equiv \langle m|p^2|n\rangle.$$

- Jak bychom modifikovali definici kreačních a anihilačních operátorů pro posunutý harmonický oscilátor v potenciálu

$$V = \frac{1}{2}m\omega^2(x - x_0)^2$$

a jaká by byla střední hodnota $\langle n|x|n\rangle$?

3.1.3 Koherentní stavy

Vlastní stavy $|\alpha\rangle$ anihilačního operátoru a_- příslušně k obecně komplexnímu vlastnímu číslu $\alpha \in \mathbb{C}$

$$a_-|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$$

mají řadu zajímavých vlastností. Jde o stavy, jejichž střední hodnoty vykonávají klasický pohyb (harmonické kmity), a minimalizují relace neurčitosti (a tato vlastnost se zachovává v čase). Jde tedy o "nejklasičtější" stavy.

Ukažte, že z jejich definice plyne pro koeficienty rozvoje c_n jejich stavu do báze stacionárních stavů

$$|\alpha\rangle \equiv \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle$$

rekurzivní vztah

$$c_{n+1} = \frac{\alpha}{\sqrt{n+1}} c_n$$

a vhodnou volbou (uvidíme později) $c_0 \equiv e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}}$ bude

$$c_n = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}},$$

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle.$$

což lze s pomocí vztahu

$$|n\rangle = \frac{a_+^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle$$

zapsat pomocí kreačních operátorů také jako

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n a_+^n}{n!} |0\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} e^{\alpha a_+} |0\rangle.$$

- Ukažte, že platí

$$\langle\beta|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2+|\beta|^2}{2}+\alpha\beta^*}$$

- Zapište časový vývoj stavu $|\alpha(t)\rangle$.
- Ukažte, že, s využitím vyjádření operátoru souřadnice pomocí kreačních a anihilačních operátorů, pro střední hodnotu souřadnice v koherentním stavu platí

$$\langle\alpha(t)|x|\alpha(t)\rangle = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}|\alpha|\cos(\omega t - \delta),$$

kde $\alpha \equiv |\alpha|e^{i\delta}$.

- Spočítejte střední hodnotu energie v koherentním stavu, tj. $\langle\alpha|H|\alpha\rangle$.
- Spočítejte střední hodnotu hybnosti v koherentním stavu, tj. $\langle\alpha|p|\alpha\rangle$.

3.1.4 Relativistická korekce

Z Taylorova rozvoje výrazu pro relativistickou energii

$$E = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} = mc^2\sqrt{1 + \frac{p^2}{m^2c^2}} \approx mc^2 \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{p}{mc} \right)^2 - \frac{1}{8} \left(\frac{p}{mc} \right)^4 \right],$$

kde m je klidová hmotnost, můžeme výraz

$$H_I \equiv -\frac{p^4}{8m^3c^2}$$

chápat jako poruchu, první relativistickou opravu ke spektru např. právě harmonického oscilátoru. Relativistická korekce pro energie stacionárních stavů harmonického oscilátoru je tedy v prvním řádu poruchové teorie dána střední hodnotou

$$E_n^{(1)} = \langle n|H_I|n\rangle = -\frac{1}{8m^3c^2} \langle n|p^4|n\rangle.$$

Jest

$$\begin{aligned} p &= i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(a_+ - a_-) \\ p^2 &= -\frac{m\hbar\omega}{2}(a_+a_+ + a_-a_- - a_+a_- - a_-a_+) \\ p^4 &= \left(\frac{m\hbar\omega}{2}\right)^2 (\dots), \end{aligned}$$

kde z členů v závorce přispějí do střední hodnoty mezi stavy $|n\rangle$ jen takové, které obsahují stejný počet kreačních a anihilačních operátorů. Protože

$$a_+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \quad a_-|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle,$$

budou relevantní členy s nenulovým příspěvkem

$$\begin{aligned} \langle n | [\underbrace{a_+ a_+ a_- a_-}_{n(n-1)} + \underbrace{a_- a_- a_+ a_+}_{(n+1)(n+2)} + \underbrace{a_+ a_- a_+ a_-}_{n^2} + \underbrace{a_- a_+ a_- a_+}_{(n+1)^2} + \underbrace{a_+ a_- a_- a_+}_{n(n+1)} + \underbrace{a_- a_+ a_+ a_-}_{n(n+1)}] | n \rangle = \\ = 6n^2 + 6n + 3 \end{aligned}$$

a tedy po jednoduchých úpravách

$$E_n^{(1)} = -\frac{3}{16} \frac{(\hbar\omega)^2}{mc^2} \left(n(n+1) + \frac{1}{2} \right).$$

Všimněte si, jak je relativistická korekce potlačena klidovou energií částice, že je záporná, a úměrná $n(n+1)$.

3.1.5 Anharmonický oscilátor

Jako další cvičení si spočítejte první opravu k energii pro anharmonický oscilátor, tj. s kubickou či kvartickou poruchou, tj. $H_I = \beta x^3$ nebo $H_I = \gamma x^4$.

3.2 Moment hybnosti

3.2.1 Připomenutí

Operátory momentu hybnosti

$$L_i \equiv \epsilon_{ijk} x_j p_k = -i\hbar \epsilon_{ijk} x_j \frac{\partial}{\partial x_k}$$

splňují komutační relace

$$[L_i, L_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} L_k.$$

Moment hybnosti je kvantován ve smyslu, že kvadrát momentu hybnosti může nabývat pouze hodnot

$$\hbar^2 \ell(\ell+1), \quad \ell = 0, 1, 2, \dots$$

a jeho projekce do jedné vybrané osy může nabývat hodnot $m\hbar$, kde

$$m = -\ell, \dots, \ell.$$

Stejně komutační relace se pak postulují i pro operátory vnitřního momentu hybnosti, tj. spinu, přičemž dovolené hodnoty spinu jsou $s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$. Společné vlastní stavy operátorů $L^2 \equiv L_1^2 + L_2^2 + L_3^2$ a L_3 splňují

$$L^2 |\ell, m\rangle = \hbar^2 \ell(\ell+1) |\ell, m\rangle \quad (3.9)$$

$$L_3 |\ell, m\rangle = m\hbar |\ell, m\rangle \quad (3.10)$$

a jsou ortonormální, tj.

$$\langle \ell, m | \ell', m' \rangle = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}.$$

3.2.2 Příklady

Dokažte s pomocí definice $L_i \equiv \epsilon_{ijk} x_j p_k = -i\hbar \epsilon_{ijk} x_j \frac{\partial}{\partial x_k}$ a pomocí kanonických komutačních relací

$$[x_i, x_j] = 0, \quad [p_i, p_j] = 0, \quad [x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}$$

následující komutační relace

- $[L_i, x_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} x_k$
- $[L_i, p_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} p_k$
- Pomocí výše uvedených komutátorů ověřte, že $[L_i, L_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} L_k$.

Dle definice posunovacích operátorů

$$L_{\pm} \equiv L_1 \pm iL_2,$$

kteří "skáčou" ze stavu $|\ell, m\rangle$ do stavů s kvantovým číslem m změněným o jednotku, tj.

$$L_{\pm} |\ell, m\rangle = \mathcal{A}_{\ell, m}^{\pm} |\ell, m \pm 1\rangle, \quad \mathcal{A}_{\ell, m}^{\pm} = \hbar \sqrt{(\ell \mp m)(\ell \pm m + 1)},$$

nalezněte inverzní vztahy, tj. vyjádřete operátory L_1 a L_2 pomocí L_{\pm} , a spočtěte s jejich pomocí následující úlohy.

- Dokažte, že $\langle \ell, m | L_{1,2} | \ell, m \rangle = 0$ a také $\langle \ell, m | L_{\pm} | \ell, m \rangle = 0$
- Spočtěte střední hodnoty $L_{1,2}$ ve stavu, který je dán superpozicí

$$|\chi\rangle = \mathcal{C} [\alpha |\ell, m\rangle + \beta |\ell, m - 1\rangle].$$

Nejprve si normalizujte stav, a následně se přesvědčte, že pro střední hodnotu hermitovského operátoru opravdu dostáváte reálné číslo. Speciálně byste měli najít, že

$$\langle \chi | L_2 | \chi \rangle = \hbar \sqrt{(\ell + m)(\ell - m + 1)} \frac{\text{Im}\{\alpha^* \beta\}}{|\alpha|^2 + |\beta|^2}$$

tj. aby výsledek nebyl nula, musí mít alespoň jedno z čísel α, β netriviální imaginární část, ale také nemohou být obě ryze imaginární.

- Spočtěte $\langle \ell, m | L_{1,2}^2 | \ell, m \rangle$.
- S použitím těchto výsledků ověřte relace neurčitosti mezi středními kvadratickými odchylkami operátorů L_1 a L_2 ve stavech $|\ell, m\rangle$, tj. ověřte, že

$$(\Delta L_1)^2 (\Delta L_2)^2 \geq \left(\left\langle \ell, m \left| \frac{[L_1, L_2]}{2i} \right| \ell, m \right\rangle \right)^2$$

kde např.

$$(\Delta L_1)^2 \equiv \langle \ell, m | (L_1 - \langle L_1 \rangle)^2 | \ell, m \rangle = \langle L_1^2 \rangle - \langle L_1 \rangle^2$$

a dokažte, že v nich dochází k rovnosti pro stavy s extrémními vahami, tj. když $m = \pm \ell$.

- Z vyjádření $L^2 = L_{\pm} L_{\mp} + L_3^2 \mp \hbar L_3$ ověřte, že $L^2 |\ell, m\rangle = \hbar^2 \ell(\ell + 1) |\ell, m\rangle$
- Spočtěte maticový element $\langle \ell, m | L_{1,2} | \ell, m' \rangle$ a vyjádřete jej jako funkci ℓ a m .

3.2.3 X -reprezentace, sférické harmoniky

Polohový vektor v kartézských souřadnicích $\vec{x} \equiv (x, y, z)$ je v polárních souřadnicích

$$x = r \sin \theta \cos \phi \quad (3.11)$$

$$y = r \sin \theta \sin \phi \quad (3.12)$$

$$z = r \cos \theta \quad (3.13)$$

a pro operátory momentu hybnosti platí

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \quad (3.14)$$

$$\hat{L}_3 = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}. \quad (3.15)$$

$$(3.16)$$

Analogie abstraktních rovnic 3.18 jsou v X -reprezentaci rovnice

$$\hat{L}^2 Y_{\ell, m}(\theta, \phi) = \hbar^2 \ell(\ell + 1) Y_{\ell, m}(\theta, \phi) \quad (3.17)$$

$$\hat{L}_3 Y_{\ell, m}(\theta, \phi) = m\hbar Y_{\ell, m}(\theta, \phi) \quad (3.18)$$

tj.

$$-\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] Y_{\ell, m}(\theta, \phi) = \hbar^2 \ell(\ell + 1) Y_{\ell, m}(\theta, \phi) \quad (3.19)$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} Y_{\ell, m}(\theta, \phi) = m\hbar Y_{\ell, m}(\theta, \phi) \quad (3.20)$$

a tedy po zavedení separace proměnných $Y_{\ell, m}(\theta, \phi) \equiv \Theta_{\ell, m}(\theta) \Phi_m(\phi)$

$$-\left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right] \Theta_{\ell, m}(\theta) = \ell(\ell + 1) \Theta_{\ell, m}(\theta) \quad (3.21)$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \Phi_m(\phi) = m\hbar \Phi_m(\phi) \quad (3.22)$$

jejichž řešeními jsou kulové funkce (nazývané též sférické harmoniky)

$$Y_{\ell, m}(\theta, \phi) \equiv \langle \vec{x} | \ell, m \rangle.$$

a řešením rovnice 3.22

$$\Phi_m(\phi) = C e^{im\phi}$$

a z důvodů periodicity

$$\Phi_m(\phi + 2\pi) = \Phi_m(\phi)$$

musí být m celé číslo a tedy ℓ přirozené (včetně nuly). Orbitální moment hybnosti (tedy takový, který je spjat s nějakou rotací v reálném prostoru) tedy může nabývat pouze hodnot $\hbar\sqrt{\ell(\ell + 1)}$ kde $\ell = 0, 1, 2, \dots$

Sférické harmoniky mají tvar

$$Y_{\ell, m}(\theta, \phi) \sim P_\ell^m(\cos \theta) e^{im\phi}$$

kde tzv. přidružené Legendreovy polynomy

$$P_\ell^m(x) \equiv (1 - x^2)^{|m|/2} \left(\frac{d}{dx} \right)^{|m|} P_\ell(x)$$

a kde Legendreovy polynomy

$$P_\ell(x) \equiv \frac{1}{2^\ell \ell!} \left(\frac{d}{dx} \right)^\ell (x^2 - 1)^\ell.$$

Nejde v pravém smyslu o polynomy, neb $P_\ell^m(x)$ mohou obsahovat faktory typu $\sqrt{1-x^2}$, pro $P(\cos \theta)$ jde však o polynomy v $\cos \theta$ a $\sin \theta$.

Platí dále normalizace

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{\ell m}^*(\theta, \phi) Y_{\ell' m'}(\theta, \phi) \sin \theta \, d\theta d\phi = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}$$

několik prvních kulových funkcí má tvar

$$Y_{00} = + \left(\frac{1}{4\pi} \right)^{1/2} \quad (3.23)$$

$$Y_{10} = + \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{1/2} \cos \theta \quad (3.24)$$

$$Y_{1\pm 1} = \mp \left(\frac{3}{8\pi} \right)^{1/2} \cos \theta e^{\pm i\phi} \quad (3.25)$$

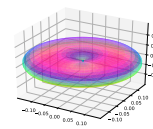
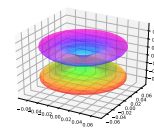
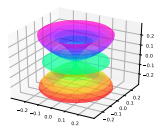
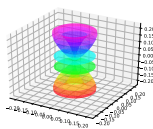
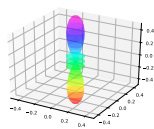
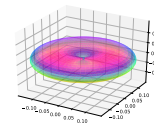
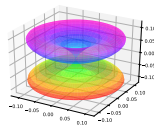
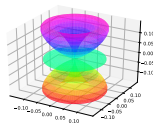
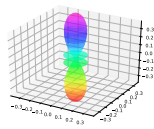
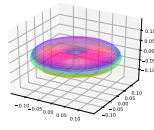
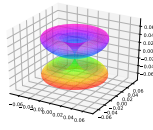
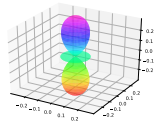
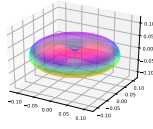
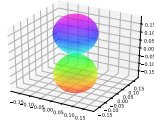
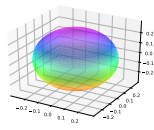
$$Y_{20} = + \left(\frac{5}{16\pi} \right)^{1/2} (3 \cos^2 \theta - 1) \quad (3.26)$$

$$Y_{2\pm 1} = \mp \left(\frac{15}{8\pi} \right)^{1/2} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi} \quad (3.27)$$

$$Y_{2\pm 2} = + \left(\frac{15}{32\pi} \right)^{1/2} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi} \quad (3.28)$$

a jejich kvadráty jsou formou sférického grafu (kdy jako velikost poloměru je vynesena hodnota $|Y|^2$ v daném směru) na Obr. 3.1.

Ukažte z vyjádření 3.14, že dostanete očekávaný výsledek po působení operátoru \hat{L}^2 na funkce 3.25, 3.26 a 3.27.



$m = 0$

$m = 1$

$m = 2$

$m = 3$

$m = 4$

Obrázek 3.1: Kvadráty sférických harmonických funkcí pro (shora dolů) $\ell = 0 \dots 4$.

3.3 Spin

Vlastní vektory operátoru \hat{S}_3 budeme značit jako

$$\left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle \equiv |+\rangle \equiv |\chi_+\rangle \equiv |\uparrow\rangle$$

$$\left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \equiv |-\rangle \equiv |\chi_-\rangle \equiv |\downarrow\rangle$$

a z definice pro ně platí

$$\hat{S}_3|\pm\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}|\pm\rangle$$

Ukažte, že ze standardního vyjádření Pauliho matic v bázi vlastních vektorů matice σ_3

$$\boldsymbol{\sigma} = \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right] \quad (3.29)$$

a tedy také

$$S_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

lze zpětně získat tvar operátorů $\hat{\boldsymbol{S}}$ ve tvaru např.

$$\hat{S}_3 = \frac{\hbar}{2} [|+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|]$$

Nalezněte obdobně tvary operátorů \hat{S}_\pm a nakonec i $\hat{S}_{1,2}$ dle jejich vyjádření pomocí \hat{S}_\pm .

3.4 Atom vodíku

Spektrum energie je $E_n = -\frac{1}{2n^2}\alpha^2 m_e c^2$, $n = 1, 2, \dots$, $\alpha \doteq 1/137$ je konstanta jemné struktury $\alpha \equiv \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}$. Vlnová funkce atomu vodíku

$$\psi_{n\ell m}(\mathbf{x}) \equiv Y_{\ell m}(\theta, \phi) R_{n\ell}(r) \equiv \langle \mathbf{x} | \psi_{n\ell m} \rangle,$$

$r = \sqrt{\mathbf{x} \cdot \mathbf{x}}$, a protože $Y_{\ell m}$ je vlastní funkce operátoru \hat{L}_3 i $\hat{\mathbf{L}}^2$, platí také

$$\hat{L}_3 |\psi_{n\ell m}\rangle = m\hbar |\psi_{n\ell m}\rangle \quad (3.30)$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2 |\psi_{n\ell m}\rangle = \hbar^2 \ell(\ell+1) |\psi_{n\ell m}\rangle \quad (3.31)$$

$$\hat{L}_{\pm} |\psi_{n\ell m}\rangle = \mathcal{A}_{\ell, m}^{\pm} |\psi_{n, \ell, m \pm 1}\rangle \quad (3.32)$$

$$\mathcal{A}_{\ell, m}^{\pm} \equiv \hbar \sqrt{(\ell \mp m)(\ell \pm m + 1)} \quad (3.33)$$

$$\hat{H} |\psi_{n\ell m}\rangle = E_n |\psi_{n\ell m}\rangle. \quad (3.34)$$

Lze také značit $|\psi_{n\ell m}\rangle \equiv |n\ell m\rangle$:)

Operátory \hat{H} , $\hat{\mathbf{L}}^2$ a \hat{L}_3 tvoří největší množinu vzájemně komutujících operátorů,

$$0 = [\hat{L}_3, \hat{\mathbf{L}}^2] \quad (3.35)$$

$$0 = [\hat{H}, \hat{\mathbf{L}}^2] \quad (3.36)$$

$$0 = [\hat{H}, \hat{L}_3], \quad (3.37)$$

a tedy tzv. úplnou množinu pozorovatelných (ÚMP). Existují jejich společné vlastní funkce, a v těchto stavem mohou fyzikální veličiny spojené s těmito operátory nabývat ostrých hodnot. Jde o integrály pohyby, v těchto stacionárních stavech tyto veličiny mají časově nezávislé střední hodnoty. Podotkněme, že existuje ještě jeden integrál pohybu, kterým je Runge-Lenzův vektor který je potřeba do operátorové podoby vyantisymetrizovat (kvůli nekomutativitě $\hat{\mathbf{x}}$ a $\hat{\mathbf{L}}$) na tvar

$$\hat{\mathbf{R}} \equiv -\frac{Z\alpha\hbar c}{r}\hat{\mathbf{x}} + \frac{1}{2m}(\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{L}} - \hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{p}})$$

Pomocí něj lze dokonce odvodit kvantování energií atomu vodíku čistě algebraicky (Pauli, Weinberg).

Příklad:

Stav atomu vodíku je v čase $t = 0$ popsán superpozicí

$$|\psi(0)\rangle \equiv \mathcal{C} [2|\psi_{100}\rangle + |\psi_{211}\rangle - i|\psi_{310}\rangle]$$

1. Normalizujte stav za předpokladu $\langle \psi_{n\ell m} | \psi_{n'\ell'm'} \rangle = \delta_{nn'} \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}$.
2. Určte, jaké hodnoty
 - (a) energie
 - (b) čtverce momentu hybnosti
 - (c) projekce m.h. do směru osy z

můžete v tomto stavu naměřit v čase $t = 0$.

3. Zapište stav v čase $t > 0$. Pracujte buď v ketech nebo si zkuste i zápis v X -reprezentaci pomocí $\psi_{n\ell m}(\mathbf{x})$.

4. Spočítejte nyní střední hodnoty veličin z bodu 2, a to ve stavu $|\psi(t)\rangle$, $t > 0$.
5. Nakonec, pomocí posunovacích operátorů momentu hybnosti spočítejte střední hodnotu projekce m.h. do osy x , tj. $\langle L_1 \rangle_{\psi(t)}$

Bude se vám hodit zadefinovat si $\omega_{23} \equiv \frac{E_3 - E_2}{\hbar}$.

Příklad:

Vlnové funkce atomů vodíkového typu, tj. vázané stavy elektronu v Coulombickém poli náboje $Z|e|$ jádra, mají chování

$$\psi_{n\ell m}(r, \theta, \phi) \sim P_\ell^{|m|}(\cos \theta) e^{im\phi} \left(\frac{2Zr}{na}\right)^\ell L_{2\ell+1}^{n-\ell-1} \left(\frac{2Zr}{na}\right) e^{-Zr/na}$$

kde $P_\ell^{|m|}$ je přidružený Legendreův polynom, $L_{2\ell+1}^{n-\ell-1}$ je přidružený Laguerřův polynom, a $a \equiv \frac{\hbar}{Z\alpha mc}$, tj. $a \doteq 137 \cdot \lambda_{\text{Compton}}/Z \equiv a_B/Z$, kde a_B je Bohřův poloměr vodíku, cca 0,0529 nm.

Laguerřův polynom stupně je definován jako

$$L_q \equiv e^x \left(\frac{d}{dx}\right)^q (e^{-x} x^q)$$

a k němu přidružený polynom stupně $q - p$ je

$$L_{q-p}^p \equiv (-1)^p \left(\frac{d}{dx}\right)^p L_q(x)$$

Uvědomte si, že vlnová funkce v počátku, tj. $\psi_{n\ell m}(0, \theta, \phi)$ je nenulová pouze pro s -stavy, tj. $\ell = 0$. Hustota pravděpodobnosti je tím "rozložitější", čím vyšší je daná energetická hladina daná číslem n , a tím "semknutější" okolo jádra, čím je větší Z , pohledem na faktory v exponentu.

Průřezy vybranými hustotami $|\psi_{n\ell m}(\mathbf{x})|^2$ v rovině $y = 0$ jsou vyobrazeny v Apendixu 4.7.

3.5 Řešení zkušební písemky

3.5.1 Příklad – Harmonické superpozice, 4b

Nalezněte střední hodnoty energie, souřadnice a hybnosti, a to jako funkci času, pro superpozici vlastních stavů energie harmonického oscilátoru, která je v čase $t = 0$ dána

$$|\psi(t=0)\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (|n\rangle + |n+1\rangle) .$$

Pokud bude potřeba, s výhodou využijte vyjádření

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a}_+ + \hat{a}_-) , \quad \text{a} \quad \hat{p} = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (\hat{a}_+ - \hat{a}_-)$$

a vyhledejte si výsledky působení operátorů \hat{a}_\pm na obecný stav $|n\rangle$ včetně normalizace. Nakonec, s využitím poznámek запиšte tvar odpovídající vlnové funkce v x -reprezentaci obecně pro $t > 0$.

Řešení: časový vývoj stavu je dán

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|n\rangle e^{-iE_n t/\hbar} + |n+1\rangle e^{-iE_{n+1} t/\hbar})$$

S využitím

$$E_{n+1}/\hbar - E_n/\hbar = \omega$$

Střední hodnota hybnosti pak vyjde

$$\langle p \rangle_\psi(t) \equiv \langle \psi(t) | \hat{p} | \psi(t) \rangle = -\sqrt{n+1} \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \sin \omega t$$

Střední hodnota energie vyjde nezávislá na čase, neboť kvůli kolmosti stavů zůstanou jen diagonální elementy, kde se časová závislost vyruší. Vyjde

$$\langle H \rangle_\psi(t) = \frac{1}{2} \hbar\omega \left[\left(n + \frac{1}{2} \right) + \left(n + 1 + \frac{1}{2} \right) \right] = \hbar\omega (n + 1) .$$

Nakonec, střední hodnota souřadnice bude záviset harmonicky na funkci kosinus.

3.5.2 Příklad – Časový vývoj v jámě, 4b

Určete časový vývoj střední hodnoty hybnosti ve stavu, který je superpozicí dvou nejnižších vlastních stavů energie částice v nekonečně hluboké jámě, přičemž stavy přispívají do vlnové funkce v poměru $1 : \sqrt{2}$. Normalizujte stav.

Jaké jsou možné výsledky měření energie, a s jakou pravděpodobností je nalezneme? Nápověda: запиšte si nejprve vlnovou funkci v čase $t = 0$, dodejte časovou závislost, a následně spočítejte střední hodnotu hybnosti. Tato nápověda u zkuškové písemky nutně nebude:) Můžete také pracovat s obecnou superpozicí popř. i obecným n a m , a konkrétní koeficienty dosadit až v závěru.

Pomněte, že n -tý stacionární stav částice v nekonečně hluboké jámě šířky a je dán

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}$$

a příslušné dovolené energie jsou dány

$$E_n = E_0 n^2, \quad \text{kde} \quad E_0 \equiv \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} .$$

Řešení:

Ze zadání lze snadno odvodit, že

$$\psi(t=0) = \frac{1}{\sqrt{3}} (\psi_1 + \sqrt{2}\psi_2)$$

a tedy

$$\psi(t) = \frac{1}{\sqrt{3}} (\psi_1 e^{-iE_1 t/\hbar} + \sqrt{2}\psi_2 e^{-iE_2 t/\hbar})$$

Pro výpočet střední hodnoty hybnosti je potřeba znát maticové elementy operátoru hybnosti mezi stavy ψ_k , $k = 1, 2$, obecně tedy potřebujeme znát

$$p_{nm} \equiv \langle \psi_n | \hat{p} | \psi_m \rangle.$$

V x -reprezentaci vede působení $p = -i\hbar \frac{d}{dx}$ na stavy v jámě na funkci kosinus, a potřebujeme obecně spočítat integrál z výrazu

$$\sin(n\pi x/a) \cos(m\pi x/a).$$

S využitím

$$2 \sin x \cos y = \sin(x+y) + \sin(x-y)$$

vychází $p_{nn} = 0$ a pro $n \neq m$

$$p_{nm} = \frac{i\hbar m}{a} \left[\frac{(-1)^{n+m} - 1}{n+m} + \frac{(-1)^{n-m} - 1}{n-m} \right]$$

a tedy pouze pro právě jedno z m či n liché vyjde

$$p_{nm} = -\frac{4i\hbar mn}{a(n^2 - m^2)}$$

a jinak nula. Všimněme si, že dle očekávání $p_{nm} = p_{mn}^*$. Nakonec vyjde

$$\langle p \rangle_\psi(t) \equiv \langle \psi(t) | \hat{p} | \psi(t) \rangle = \frac{16\sqrt{2}\hbar}{9a} \sin\left(\frac{3\pi^2\hbar}{2ma^2}t\right).$$

Zkuste si ověřit, že střední hodnota souřadnice se bude harmonicky měnit jako sinus, a střední hodnota energie na čase záviset nebude.

3.5.3 Příklad – Matice spinu J , 1b

Nalezněte matici S_3 příslušnou operátoru \hat{S}_3 projekce spinu částice se spinem J do třetí souřadné osy, a to v maticové reprezentaci v bázi $|J, M\rangle$, tj. $(S_3)_{M,N} \equiv \langle J, M | \hat{S}_3 | J, N \rangle$ s využitím toho, že jde o vlastní vektory právě \hat{S}_3 .

Nápověda: uvědomte si, že poslední tvrzení znamená, že $\hat{S}_3 |J, M\rangle = M\hbar |J, M\rangle$.

Nakonec, napište explicitně tuto matici pro případ spinu 1 (např. pion π^+) a 3/2 (např. rezonance Δ^{++}).

Řešení: Maticové elementy operátoru \hat{S}_3 si v bázi jeho vlastních vektorů, o kerých víme, že $\hat{S}_3 |J, M\rangle = M\hbar |J, M\rangle$ můžeme uspořádat do matice, kterou si zdefinujeme jako

$$(S_z)_{MM'} = \langle J, M | \hat{S}_z | J, M' \rangle$$

a tedy

$$S_z \equiv \begin{pmatrix} \langle J, M | \hat{S}_z | J, M \rangle & \langle J, M | \hat{S}_z | J, M - 1 \rangle & \cdots & \langle J, M | \hat{S}_z | J, -M \rangle \\ \langle J, M - 1 | \hat{S}_z | J, M \rangle & \langle J, M - 1 | \hat{S}_z | J, M - 1 \rangle & \cdots & \langle J, M - 1 | \hat{S}_z | J, -M \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle J, -M | \hat{S}_z | J, M \rangle & \langle J, -M | \hat{S}_z | J, M - 1 \rangle & \cdots & \langle J, -M | \hat{S}_z | J, -M \rangle \end{pmatrix}$$

Tato matice je díky ortogonalitě $\langle J, M | J, M' \rangle = \delta_{MM'}$ dána diagonální maticí

$$(S_z)_{MM'} = M\hbar \delta_{MM'}$$

a tedy

$$S_z = \hbar \begin{pmatrix} M & \cdot & \cdots & \cdot \\ \cdot & M - 1 & \cdots & \cdot \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \cdot & \cdot & \cdots & -M \end{pmatrix}$$

Touto maticí převedeme působí operátoru \hat{S}_3 na obecné spinové vektory $|\chi\rangle$ v Hilbertově prostoru na maticové násobení $2J + 1$ rozměrných vektorů χ , které jsou vyjádřením $|\chi\rangle$ ve stejné bázi jako matice:

$$\chi \equiv \begin{pmatrix} \langle J, M | \chi \rangle \\ \langle J, M - 1 | \chi \rangle \\ \vdots \\ \langle J, -M + 1 | \chi \rangle \\ \langle J, -M | \chi \rangle \end{pmatrix}.$$

Nakonec,

$$S_z^{(J=1)} = \hbar \begin{pmatrix} -1 & \cdot & \cdot \\ \cdot & 0 & \cdot \\ \cdot & \cdot & -1 \end{pmatrix}, \quad S_z^{(J=3/2)} = \hbar \begin{pmatrix} 3/2 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & 1/2 & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & -1/2 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & -3/2 \end{pmatrix}$$

3.5.4 Larmorova porucha, 3b

... aneb Srovnejte si příště v labu pole.

Uvažujme hamiltonián odpovídající potenciální energii částice se spinem $1/2$ v homogenním magnetickém poli orientovaném podél osy z

$$H_0 \equiv -\gamma B S_z$$

s vlastními stavy $\chi_{\pm}^{(0)}$ a jim odpovídající energie $E_{\pm}^{(0)} = \mp \gamma B \hbar / 2$. Uvažujme nyní dodatečnou poruchu danou přítomností slabého magnetického pole ve směru osy x

$$H_I \equiv -\varepsilon \gamma B S_x, \quad |\varepsilon| \ll 1.$$

Ukažte, že první oprava k energii vlastních stavů χ_{\pm} neporušeného hamiltoniánu je v rámci stacionární poruchové teorie nulová. Dále spočtěte první korekci $\chi_{\pm}^{(1)}$ k neporušeným spinorům $\chi_{\pm}^{(0)}$ a druhou korekci k jejich energiím $E_{\pm}^{(2)}$. Zapište celkovou opravenou energii resp. opravený stav do Vámi nalezeného prvního resp. druhého řádu poruchové teorie.

Pracujte s výhodou buď v maticové reprezentaci v bázi vlastních vektorů operátoru S_3 nebo si vyjádřete operátor S_x z definic posunovacích operátorů

$$S_{\pm} = S_x \pm iS_y$$

a využijte toho, že

$$S_{\pm}|s, m\rangle = \mathcal{A}_{s,m}^{\pm}|s, m \pm 1\rangle, \quad \mathcal{A}_{s,m}^{\pm} = \hbar\sqrt{(s \mp m)(s \pm m + 1)}.$$

Opakování: Nedegenerovaná poruchová teorie:

Rozdělme hamiltonián systému H na část H_0 , kterou umíme řešit (známe jeho vlastní vektory a příslušné energie), tj. známe

$$\hat{H}_0 |\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(0)}\rangle,$$

a na část H_I , která je obtížně řešitelná a současně "malá" vůči H_0 (ve smyslu velikosti příspěvku k celkové energii).

Rozvinutím v nějakém malém parametru poruchy získáme rozvoj pro energie a stavy plné ulohy

$$\hat{H} |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle \tag{3.38}$$

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \dots \tag{3.39}$$

$$|\psi_n\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + |\psi_n^{(1)}\rangle + \dots \tag{3.40}$$

$$\tag{3.41}$$

přičemž lze zajistit, že $|\psi_n^{(1)}\rangle$ neobsahuje příměs $|\psi_n^{(0)}\rangle$.

V prvním řádu poruchové teorie je pak oprava k energii dána střední hodnotou poruchy v neporušeném stavu

$$E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} | H_I | \psi_n^{(0)} \rangle.$$

Tato oprava však může být nulová, a často je potřeba vyhodnotit druhou opravu k energii, která je rovna

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \psi_m^{(0)} | H_I | \psi_n^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}.$$

První oprava ke stavu je pak rovna

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m^{(0)} | H_I | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |\psi_m^{(0)}\rangle.$$

Řešení: Protože volný hamiltonián je úměrný S_z , jsou neporušené energie

$$E_{\pm}^{(0)} = \mp \gamma B \frac{\hbar}{2}$$

a vlastní vektory $\chi_{\pm}^{(0)}$ jsou i vlastními vektory H_0 .

V našem příkladě je první oprava k energii je nulová (ukážte si ale explicitně!), neboť maticový element poruchy je nulový mezi každým ze stavů

$$\chi_+^{(0)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{a} \quad \chi_-^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Pro druhou opravu energie potřebujeme vyhodnotit maticové elementy jako např.

$$E_+^{(2)} = \frac{|\langle \chi_-^{(0)} | H_I | \chi_+^{(0)} \rangle|^2}{E_+^{(0)} - E_-^{(0)}} = -\frac{\hbar}{4} \varepsilon^2 \gamma B$$

Obdobně pro opravu vlnové funkce, a celkově

$$E_+^{(2)} = \mp \frac{\hbar}{4} \varepsilon^2 \gamma B$$

$$\chi_{\pm}^{(1)} = \pm \frac{\varepsilon}{2} \chi_{\mp}^{(0)}$$

popř. celkové opravené energie a spinory

$$E_{\pm} \approx \mp \frac{\hbar}{2} \gamma B \left(1 + \frac{\varepsilon^2}{2} \right)$$

$$\chi_{\pm} = \chi_{\pm}^{(0)} \pm \frac{\varepsilon}{2} \chi_{\mp}^{(0)}$$

$$\chi_+ \approx \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\varepsilon}{2} \end{pmatrix} \quad \text{a} \quad \chi_- \approx \begin{pmatrix} -\frac{\varepsilon}{2} \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Kapitola 4

Doplňky

4.1 Laplaceův operátor

V kartézských (René Descartes) souřadnicích je gradient

$$\nabla \equiv \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

a Laplaceův operátor lze vyjádřit jako

$$\Delta \equiv \nabla \cdot \nabla \equiv \nabla^2 = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Ve sférických souřadnicích pak

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \quad (4.1)$$

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2}. \quad (4.2)$$

4.2 Delta funkce

Delta funkce je zobecněnou funkcí, přesněji distribucí, jejíž smysl je v "působení" na nějakou pěknou (hladkou, integrovatelnou) funkci "pod integrálem".

Její definice je

$$\int_{\mathbb{R}} f(x) \delta(x-a) dx = f(a) \equiv (f, \delta_a)$$

a speciálně tedy

$$\int_{\mathbb{R}} f(x) \delta(x) dx \equiv (f, \delta) = f(0),$$

$$\int_{\mathbb{R}} \delta(x) dx = 1.$$

Derivace delta funkce: z integrace per partes a z podmínky normalizovatelnosti testovací funkce (tj. funkce musí v nekonečnách ubývat k nule)

$$(f, \delta'(x)) = -(f', \delta)$$

tj. např.

$$\int_{\mathbb{R}} f(x) \delta'(x-a) dx = -f'(a)$$

Další práce s delta funkcí:

$$\delta(g(x)) = \sum_{x_0} \frac{\delta(x - x_0)}{|g'(x_0)|},$$

kde x_0 jsou kořeny rovnice $g(x) = 0$. Speciálně pak např.

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x).$$

Delta funkce je symetrická

$$\delta(x - y) = \delta(y - x).$$

Příklad: upravte integrály

$$\int_{\mathbb{R}} f(p) \delta(\sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} - E) dp, \quad \int_{\mathbb{R}} f(p) g(p) \delta(p^2 c^2 + m^2 c^4 - E^2) dp$$

Integrální reprezentace delta funkce:

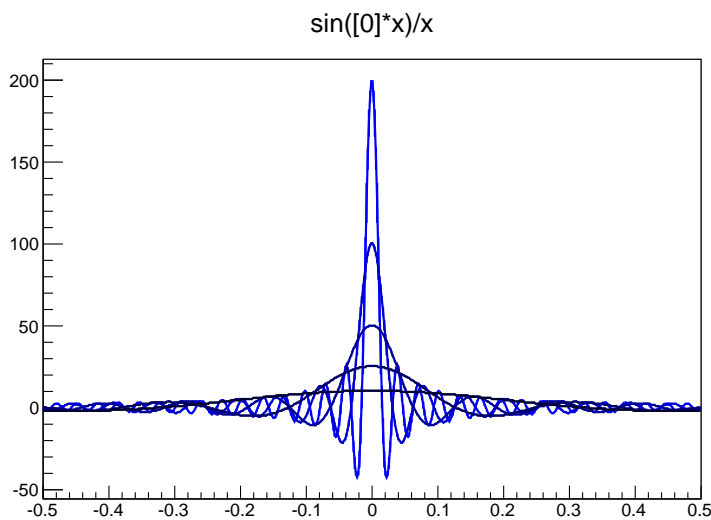
$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} \exp[ikx] dk$$

aneb delta funkce jako Fourierova transformace jednotky.

Reprezentace jako limita posloupnosti funkcí:

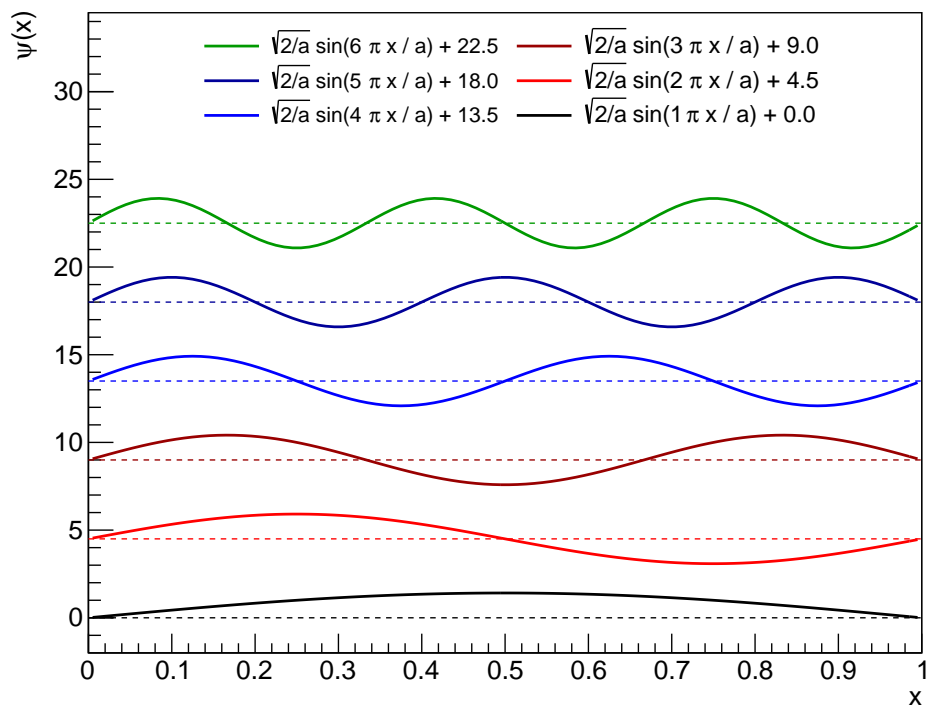
$$\delta(x) = \frac{1}{\pi} \lim_{A \rightarrow \infty} \frac{\sin(Ax)}{x}$$

Více viz wikipedia či <http://mathworld.wolfram.com/DeltaFunction.html>.

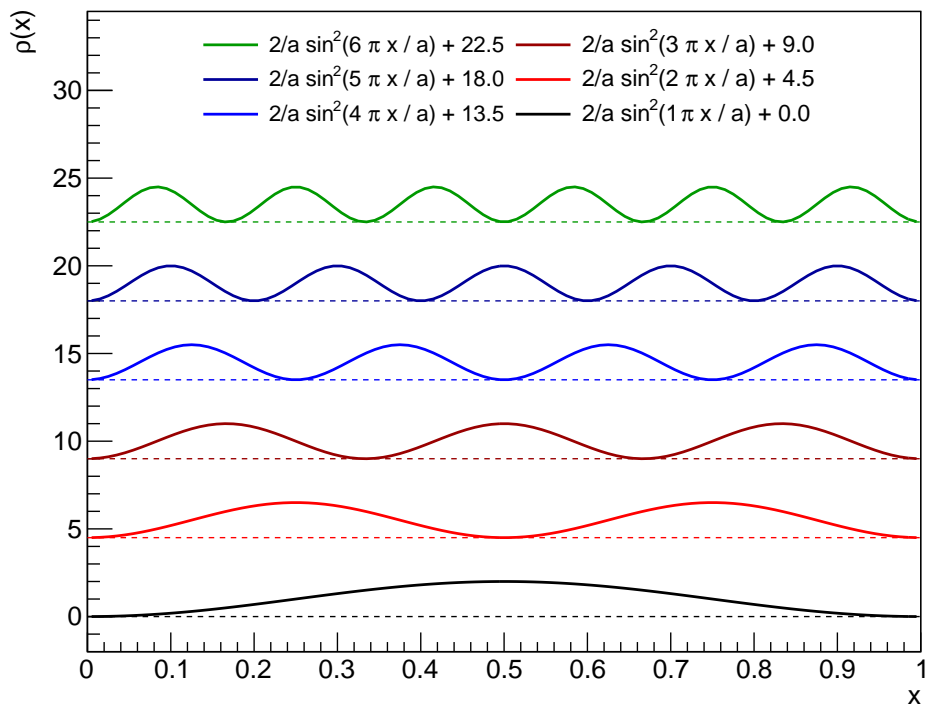


Obrázek 4.1: Ilustrace posloupnosti funkcí $\sin Ax/x$ vedoucí limitně na delta funkci.

4.3 Vlnové funkce a hustoty pravděpodobnosti pro částici v 1D nekonečně hluboké potenciálové jámě

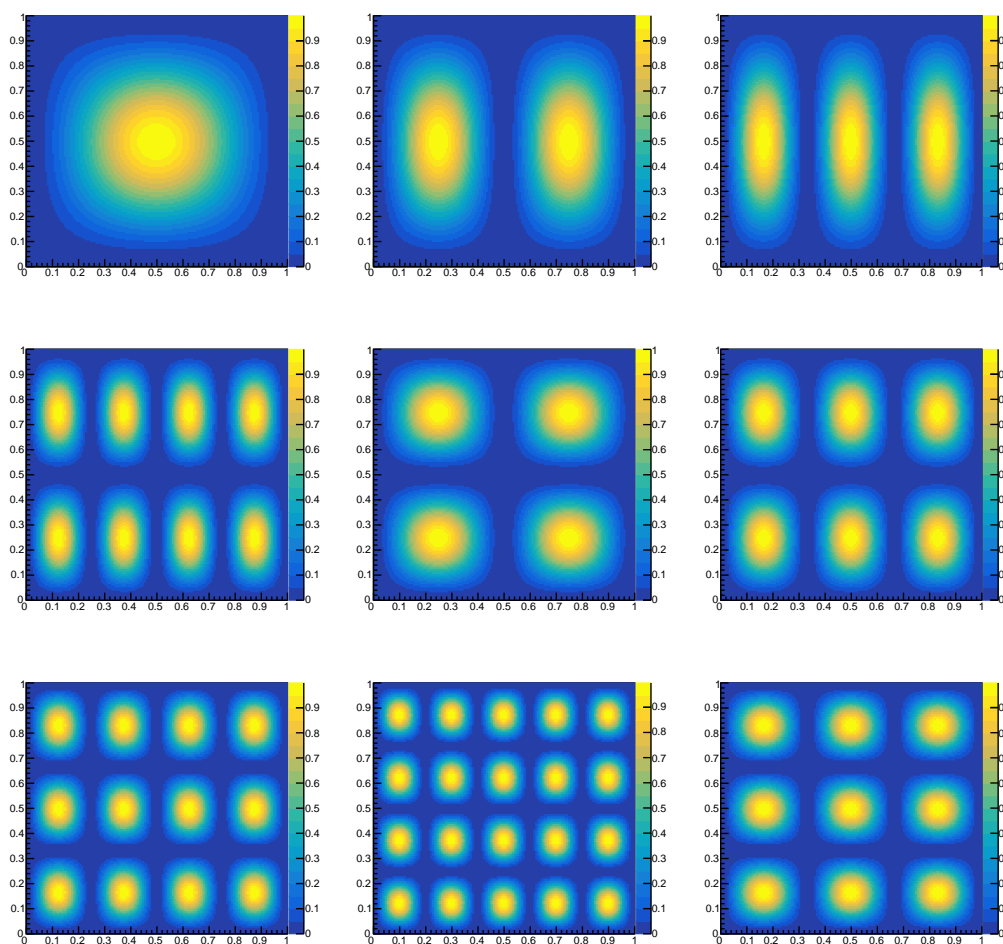


Obrázek 4.2: Vlnové funkce několika prvních stacionárních stavů částice v nekonečně hluboké potenciálové jámě (+konstanta).

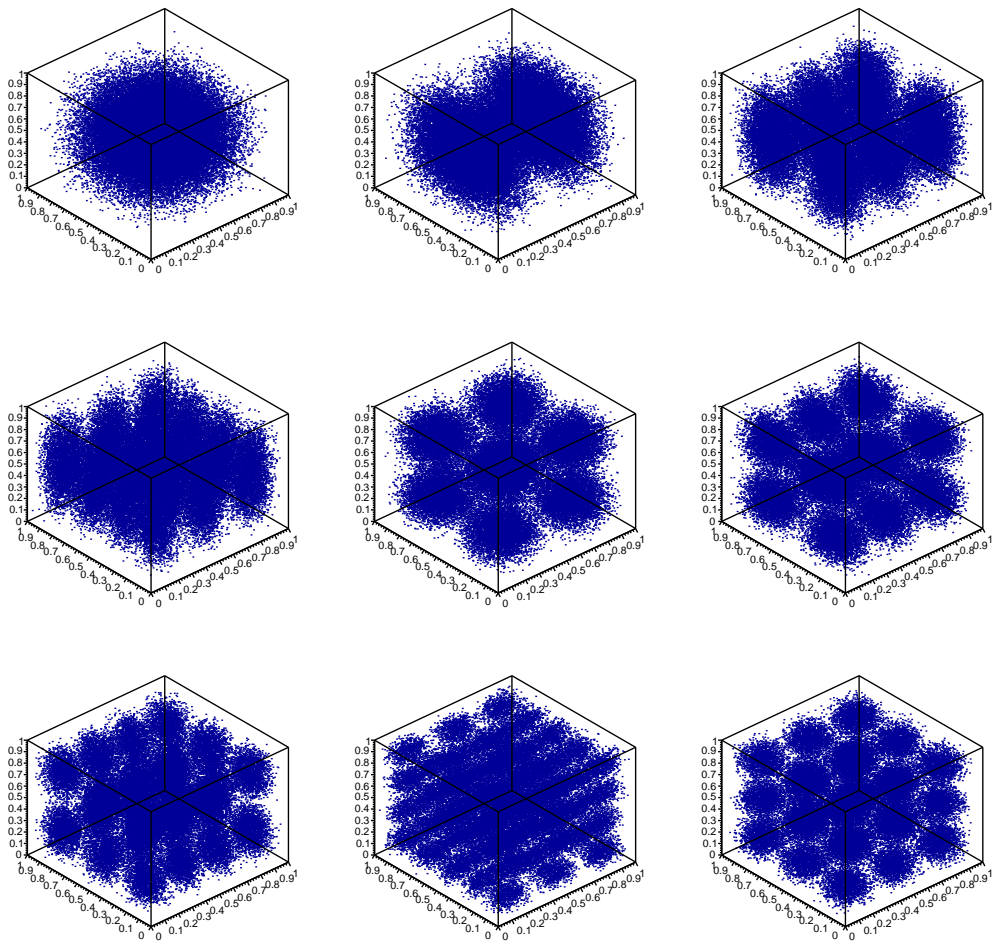


Obrázek 4.3: Hustoty pravděpodobnosti několika prvních stacionárních stavů částice v nekonečně hluboké potenciálové jámě (+konstanta).

4.4 Stacionární stavy 2 a 3 rozměrné nekonečně hluboké potenciálové jámy

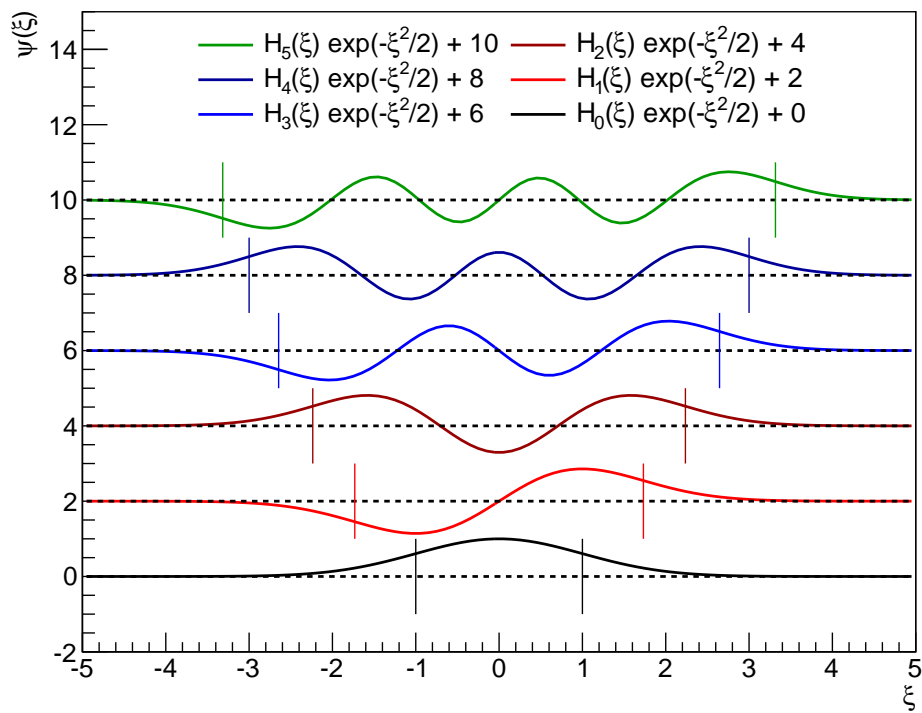


Obrázek 4.4: Hustoty pravděpodobnosti vybraných stacionárních stavů 2D nekonečně hluboké potenciálové jámy.

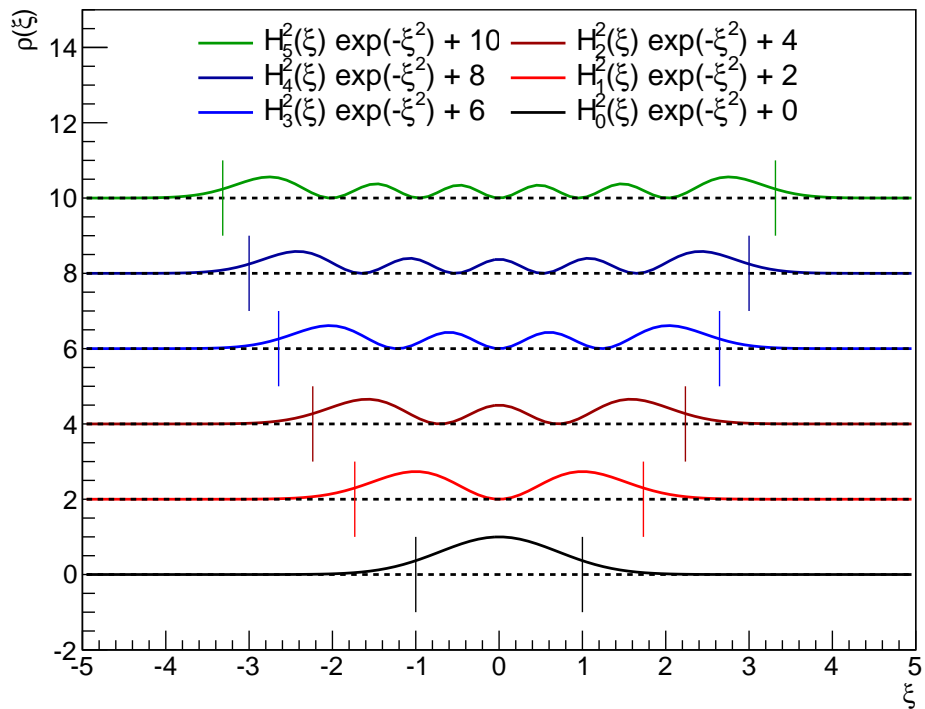


Obrázek 4.5: Hustoty pravděpodobnosti stacionárních stavů 3D nekonečně hluboké potenciálové jámy.

4.5 Vlnové funkce harmonického oscilátoru



Obrázek 4.6: Vlnové funkce několika prvních stacionárná stavů harmonického oscilátoru (+konstanta). Svislými čarami jsou označeny klasické body obratu (bod, kdy je energie objektu hmoty m v kvadratickém potenciálu rovna potenciální energii, a kinetická je tedy nulová), které oddělují klasicky dostupnou (centrální) a nedostupnou (vnější) oblast.



Obrázek 4.7: Hustoty pravděpodobnosti několika prvních stacionárních stavů harmonického oscilátoru (+konstanta). Svislými čarami jsou označeny klasické body obratu (bod, kdy je energie objektu hmoty m v kvadratickém potenciálu rovna potenciální energii, a kinetická je tedy nulová), které oddělují klasicky dostupnou (centrální) a nedostupnou (vnější) oblast.

4.6 Částice v pravoúhlé (konečně hluboké) potenciálové jámě

Ze spojitosti vlnové funkce a její první derivace na okrajích jámy $x = \pm a$ dostáváme pro dovolené hodnoty energií částice v konečně hluboké pravoúhlé jámě hloubky V_0 a šířky $2a$ jsou dány řešeními transcendentních rovnic (každá pro sudá resp. lichá řešení)

$$\tan z = \sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1}$$

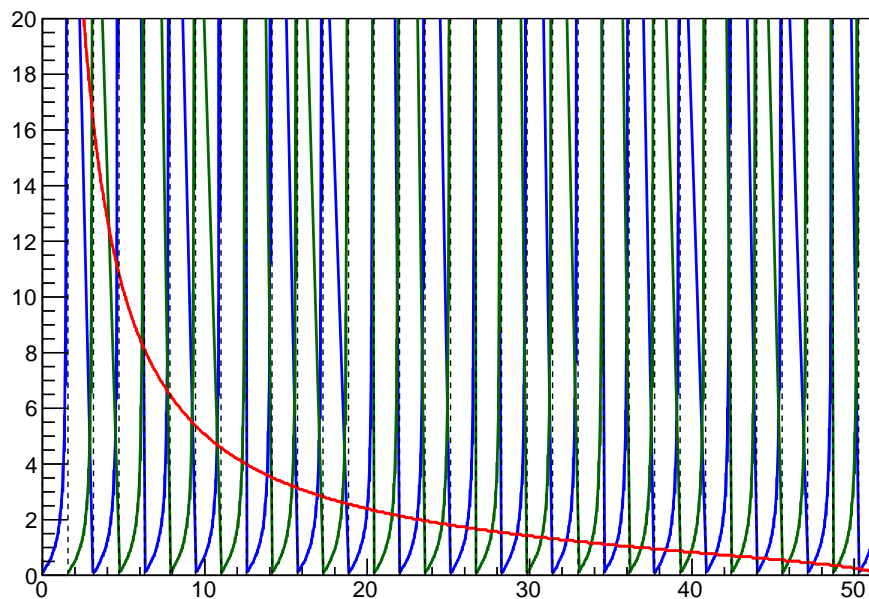
resp.

$$-\cot z = \sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1}$$

kde

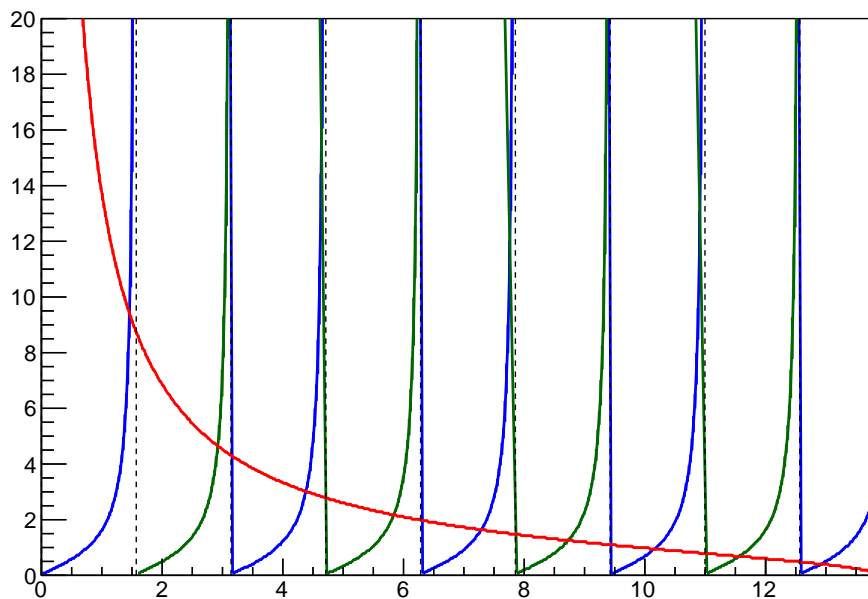
$$z = ka, \quad k = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}}, \quad z_0^2 = \frac{2ma^2}{\hbar^2} V_0.$$

Finite square well energy solutions

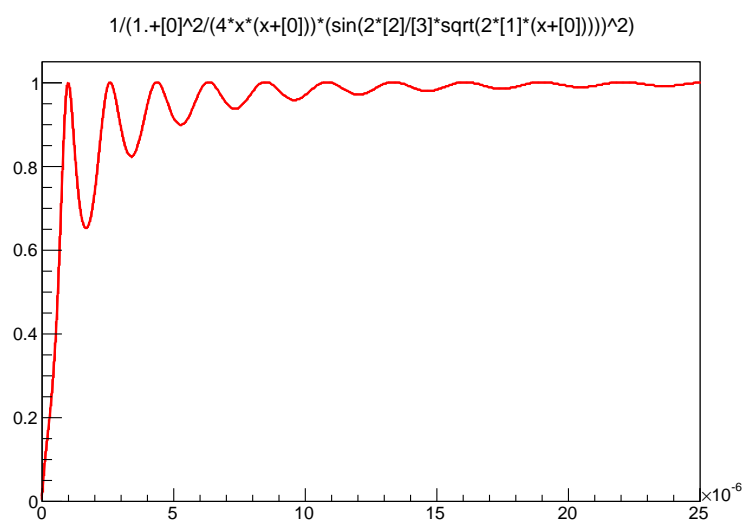


Obrázek 4.8: Dovolené energie jako průsečíky funkcí $\tan z$ a $-\cot z$ s funkcí $\sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1}$ pro elektron v pravoúhlé jámě hloubky 100 eV a šířky 2 nm.

Finite square well energy solutions

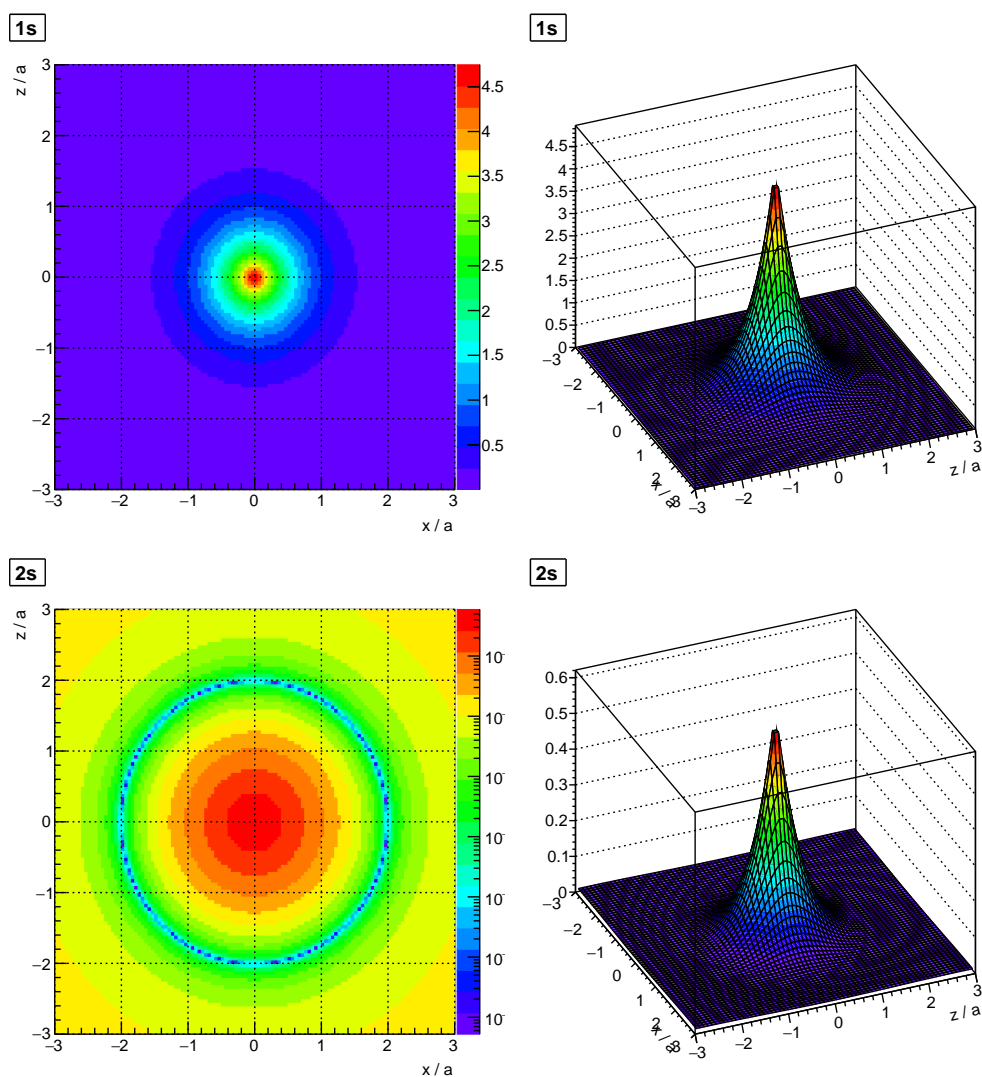


Obrázek 4.9: Dovolené energie jako průsečíky funkcí $\tan z$ a $-\cot z$ s funkcí $\sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1}$ pro alfa částici v pravoúhlé jámě hloubky 1 GeV a šířky 1 fm.

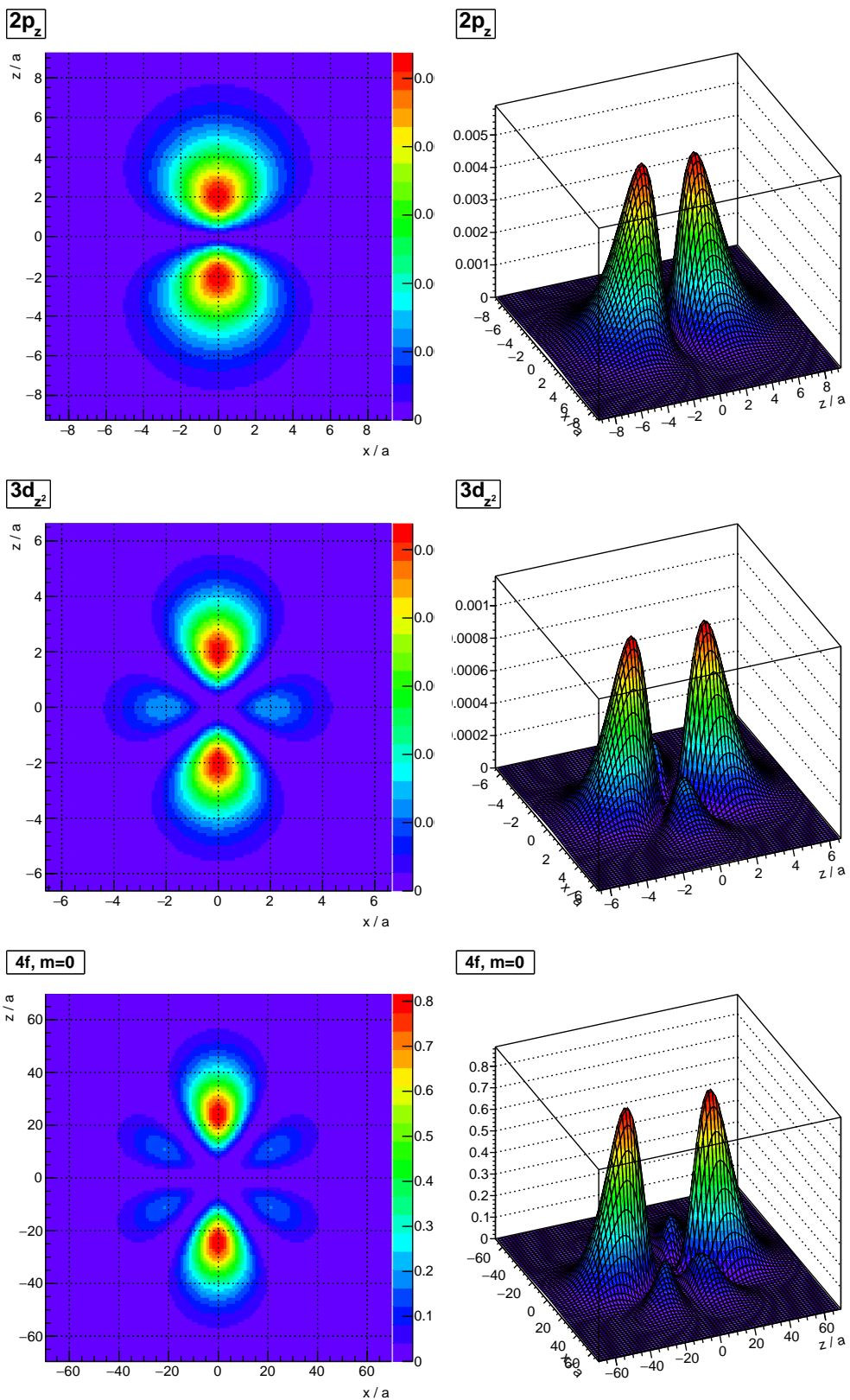


Obrázek 4.10: Koeficient průchodu elektronu jako funkce energie elektronu (v MeV) přes provoúhlou jámu šířky 2 pm a hloubky 5 eV.

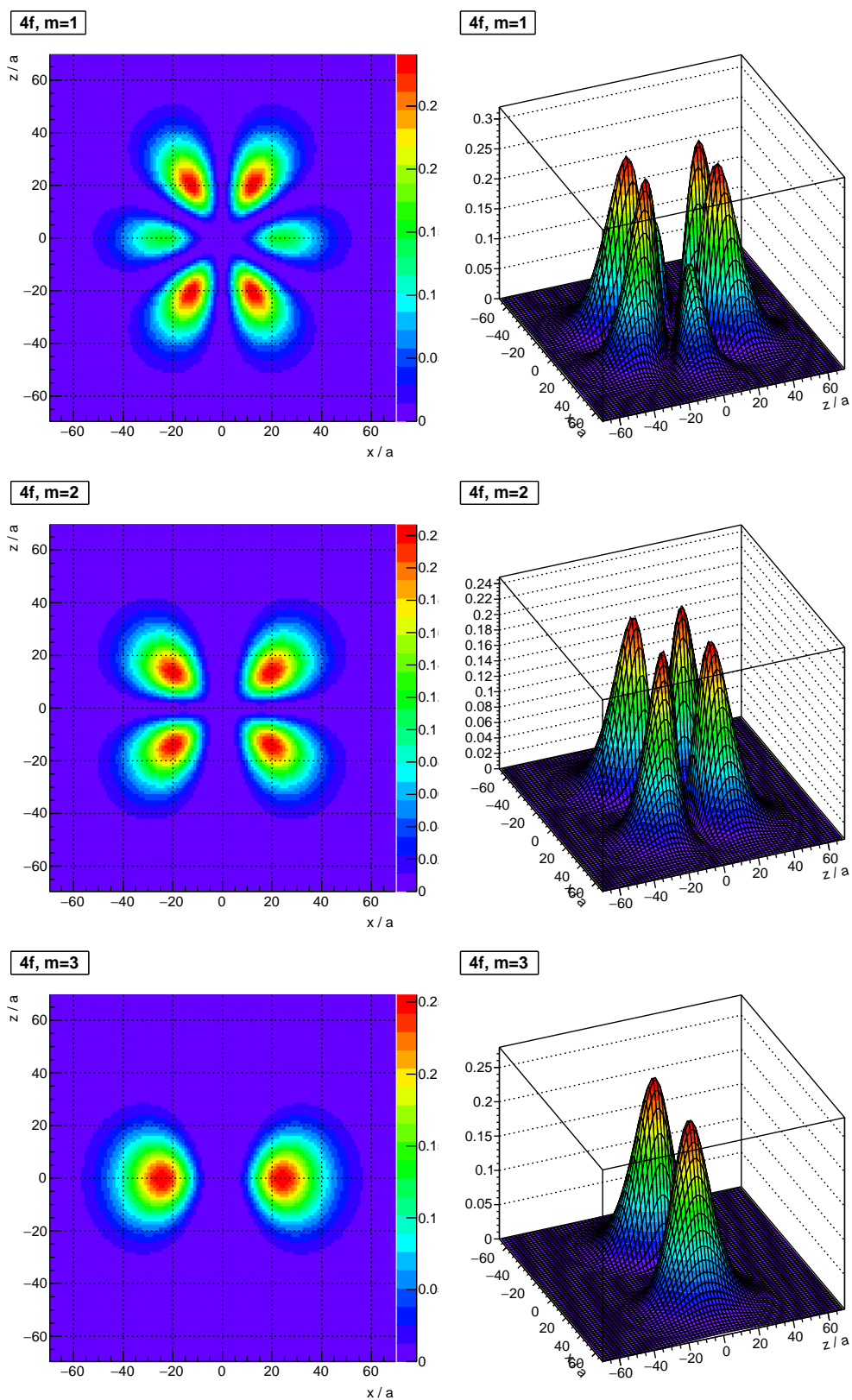
4.7 Průřezy orbitalů atomu vodíku



Obrázek 4.11: Průřezy orbitalů atomu vodíku v prvních dvou s -stavech ($\ell = 0$). Všimněte si uzlu radiální funkce stavu $2s$ na dvojnásobku Bohrova poloměru (na průřezu zvýrazněno logaritmickým měřítkem barevné škály).



Obrázek 4.12: Průřezy orbitalů atomu vodíku, orbitaly $2p_z$ ($\ell = 1$), $3d_{z^2}$ ($\ell = 2$) a f ($\ell = 3$) pro kvantové číslo $m = 0$.



Obrázek 4.13: Průřezy orbitalů atomu vodíku, orbitály f ($\ell = 3$) na 4. energetické hladině pro různé hodnoty čísla $m = 1, 2, 3$