Obsah přednášky

1. Počátky kvantové mechaniky, vlny vs. částice
2. Operátory a matematický aparát, reprezentace a vzájemné transformace
3. Postuláty kvantové mechaniky
4. Schrödingerova rovnice a její 1D řešení
5. Moment hybnosti a atom vodíku
6. Identické částice
7. Elementarizace pro střední školy

[redacted]

Opakování

Shrňme důležité poznatky:

- experimenty na konci 19. a začátku 20. století jasně ukázali, že klasická fyzika nedokáže přesvědčivě vysvětlit mikroskopickou povahu světa
- stará kvantová teorie (1900-1925) ukázala směr, ovšem byla nekonzistentní a nevycházela z prvotních principů
- dvouštěrbinový experiment odhalil stochastickou/pravděpodobnostní a tedy nedeterministickou povahu mikrosvěta a skrze interferenci elektronů navedl k popisu mikrosvěta pomocí vlnových funkcí
- princip superpozice se tak stal klíčovým pro popis mikrosvěta
- Heisenberg ukázal, že nemůžeme zároveň přesně určit polohu a hybnost/rychlost částice a tyto neurčitosti se řídí tzv. Heisenbergovým principem neurčitosti: $$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}, \qquad \Delta y \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}, \qquad \Delta z \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}.$$
- řešením popisu částic mikrosvěta byly částicové vlny popsané vlnovou funkcí ve tvaru vlnových klubek
- vlnové funkce a jejich velikosti na druhou popisují kvantitativně pravděpodobnostní charakter mikrosvěta: $P(k)\,dk = |\phi(k)|^2 dk$
- vlnové funkce pro popis pozice a hybnosti jsou vzájemně provázané skrze Fourierovu transformační relace:

$$\begin{aligned}
\psi(x,t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\phi}(p) e^{i(px-Et)/\hbar} dp, \\
\psi_0(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\phi}(p) e^{ipx/\hbar} dp, \\
\tilde{\phi}(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0(x) e^{-ipx/\hbar} dx,
\end{aligned}$$

A pro vlnová klubka:

- zajišťují přesnou kvantifikaci Heisenbergova principu neurčitosti
- ztělesňují a propojují jak částicový tak i vlnový charakter mikroobjektů, tehdy tzv. de Broglieových částicových/hmotnostních vln
- zajišťují propojení mezi intenzitami vln (třeba ve dvouštěrbinovém experimentu) a pravděpodobností detekce částice
- a, velmi důležité, zároveň propojují klasickou fyziku z fyzikou kvantovou!

[redacted]

Pro podrobnější popis kvantových jevů budeme potřebovat nový matematický aparát:

Je třeba zdůraznit, že se zaměříme na spíše **povrchní úvod do potřebné matematiky**, prakticky použitelné pro základní porozumění fyzikálnímu popisu kvantových jevů. Určitě tedy nejde o čistou matematiku, jak by ji rádi slyšeli sami matematici.

Schrödingerova rovnice je základní kámen kvantové mechaniky (ještě se na ni blíže podíváme později) a matematicky řečeno se jedná o rovnici lineární, přesněji **lineární parciálně diferenciální rovnici**, jde tedy o lineární polynom neznámé funkce a jejich derivací. Nevyskytují se v ní tedy násobky hledané funkce (v našem případě vlnové funkce) se sebou samou či se svými derivacemi:

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\mathbf{r},t) + V(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r},t)}$$

Formalismus kvantové mechaniky je dán tzv. lineárními operátory a vlnovými funkcemi, které náleží do matematického Hilbertova prostoru.

Matematické vlastnosti a struktura Hilbertova prostoru jsou zásadní pro pochopení formalismu kvantové mechaniky.
Osvojíme si pak také nové značení, tzv. Dirakovu symboliku <bra|ket> vektorů.

I když byla kvantová mechanika rozvíjena zároveň formou diskrétní (Heisenbergovým popisem maticemi) i formou spojitou (Schrödingerovou rovnicí a vlnovými funkcemi) – pro bázové systémy diskrétní a spojité, náš úvod se bude částečně týkat obou, ovšem nakonec zůstaneme u názornějšího popisu spojitého.

Hilbertův prostor – lineární vektorový prostor

(malá poznámka na začátek – všimněte si jak se nám tu často objevuje slovo **lineární a vzpomeňte si na princip superpozice**, vlastnost všech lineárních systémů)

Lineární vektorový prostor popisujeme dvěma následujícími vlastnostmi:
- je sestaven ze dvou sad: vektorů ψ, ϕ, χ , ... a skalárů $a, b, c, \ldots$
- a dvou operací: vektorového součtu a skalárního součinu

Sčítací operace má následující vlastnosti:
- pokud jsou vektor ψ a ϕ součástí daného prostoru, pak i jejich součet $\psi + \phi$ je prvkem toho stejného prostoru
- komutativita $\psi + \phi = \phi + \psi$
- asociativita $(\psi + \phi) + \chi = \psi + (\phi + \chi)$
- existence nulového vektoru $O + \psi = \psi + O = \psi$
- existence symetrického/ inverzního vektoru $\psi + (-\psi) = (-\psi) + \psi = O$

Operace násobení má následující vlastnosti:
- pro dva vektory ψ a ϕ a dva skaláry *a* a *b*, platí, že i jejich lineární kombinace $a\psi + b\phi$ je vektorem ze stejného prostoru jako samotné vektory
- distributivita ve vztahu ke sčítání $a(\psi + \phi) = a\psi + a\phi$, $(a + b)\psi = a\psi + b\psi$,
- asociativita ve vztahu k násobení skalárem $a(b\psi) = (ab)\psi$
- pro každý vektor existuje jednotkový a nulový skalár takový, že platí $I\psi = \psi I = \psi$ a $o\psi = \psi o = o$

Hilbertův prostor $\mathcal{H}$

- Je lineárním prostorem, vlastnosti lineárních prostorů jsme právě probrali na předchozí straně
- Má definovaný pozitivní skalární součin (ψ, ϕ) jež se obecně rovná komplexnímu číslu
- Neplatí obecně, že (ψ, ϕ) je rovno (ϕ, ψ), platí ale následující: $(\psi, \phi) = \psi^* \phi$ a také $(\phi, \psi) = \phi^* \psi$
- Skalární součin má následující vlastnosti:

$$(\psi, \phi) = (\phi, \psi)^*$$

$$(\phi, a\psi_1 + b\psi_2) = a(\phi, \psi_1) + b(\phi, \psi_2)$$

$$(a\phi_1 + b\phi_2, \psi) = a^*(\phi_1, \psi) + b^*(\phi_2, \psi)$$

linearita vzhledem k druhému a antilinearita vzhl. k prvnímu členu

$$(\psi, \psi) = \| \psi \|^2 \geq 0,$$

výsledkem součinu vektoru se sebou samým je reálné číslo, nulový výsledek je pouze pro $\psi = O$

- Prostor je separabilní a kompletní, tedy pro $\psi_n \in \mathcal{H}$ $(n = 1, 2, \ldots)$ a pro $\varepsilon > 0$

$\| \psi - \psi_n \| < \varepsilon$ má spočetně hustou podmnožinu

$\lim_{n,m \to \infty} \| \psi_n - \psi_m \| = 0$ nemá tzv. chybějící místa uvnitř

… a pro kompletnost výkladu, platí Schwarzova nerovnost:

$$|\langle \psi \mid \phi \rangle|^2 \leq \langle \psi \mid \psi \rangle \langle \phi \mid \phi \rangle.$$

- Stojí za to zopakovat: $(\phi, \psi) \neq (\psi, \phi)$ záleží na pořadí, protože ψ je z $\mathcal{H}$ a ϕ je z duálního prostoru $\mathcal{H}_d$ a víme, že se tyto prostory mohou propojovat/být asociovány

Dimenze a báze vektorového prostoru:

- Sada nenulových vektorů $\phi_1, \phi_2, \ldots, \phi_N$ je lineárně nezávislá, jen pokud řešení $\sum_{i=1}^{N} a_i \phi_i = 0$ je $a_1 = a_2 = \cdots = a_N = 0$
- Lineárně závislý je pak vektor: $\phi_n = \sum_{i=1}^{n-1} a_i \phi_i + \sum_{i=n+1}^{N} a_i \phi_i$, tj. je lineární kombinací jiných vektorů

- Dimenze vektorového prostoru je dána maximálním číslem lineárně nezávislých vektorů, které prostor může mít. Např. pokud maximální počet vektorů v prostoru je *N* ($\phi_1, \phi_2, \ldots, \phi_N$), pak říkáme, že je prostor *N* dimenzionální a jakýkoliv vektor v tomto prostoru se dá vyjádřit jako: $\psi = \sum_{i=1}^{N} a_i \phi_i$

- Báze vektorového prostoru se sestává z maximálního počtu lineárně nezávislých vektorů prostoru $\phi_1, \phi_2, \ldots, \phi_N$, stručně $\{\phi_i\}$, a jednotlivé vektory jsou bázové vektory
- I když mohou být libovolné, je vhodné zvolit ty ortonormální, tedy $(\phi_i, \phi_j) = \delta_{ij}$, kde δ_{ij} je Kroneckerovo delta. $\delta_{nm} = \begin{cases} 1, & n = m, \\ 0, & n \neq m. \end{cases}$ **Báze je ortonormální, pokud je složena z ortonormálních vektorů. Báze je kompletní, pokud pokrývá celý prostor a není třeba přidat další bázový vektor. Koeficienty a_i se nazývají komponenty vektoru/složky a každá komponenta je dána** $a_j = (\phi_j, \psi)$

[redacted]

Hilbertův prostor $\mathcal{H}$

Pár příkladů pro pochopení:

1.
Lineární závislost funkcí $f(x) = 4, g(x) = x^2, h(x) = e^{2x}$ pro reálná x?
Platí: $a_1 f(x) + a_2 g(x) + a_3 h(x) = 4a_1 + a_2 x^2 + a_3 e^{2x} = 0$ → platí pouze pro $a_1 = a_2 = a_3 = 0$ ... lineárně nezávislé

2.
Lineární závislost funkcí $f(x) = x, g(x) = x^2, h(x) = x^3$ pro reálná x?
Platí: $a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 = 0$ → platí pouze pro $a_1 = a_2 = a_3 = 0$
Pro sadu $x = -1, 1, 3$ dostaneme rovnice: $-a_1 + a_2 - a_3 = 0,\quad a_1 + a_2 + a_3 = 0,\quad 3a_1 + 9a_2 + 27a_3 = 0$
Které jsou řešitelné jen pro: $a_1 = a_2 = a_3 = 0.$ ... lineárně nezávislé

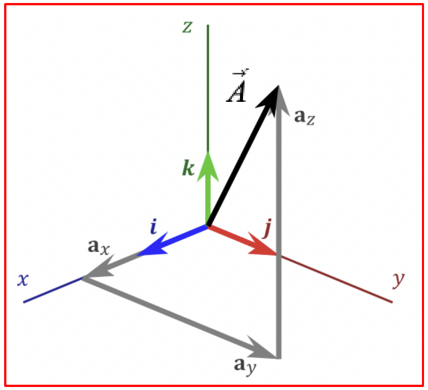
3.
Lineární závislost funkcí $f(x) = x, g(x) = 5x, h(x) = x^2$ pro reálná x?
Jsou zjevně lineárně závislé, protože platí: $g(x) = 5f(x) + 0 \times h(x)$

[redacted]

Příklady lineárních vektorových prostorů

1. S konečnou, diskrétní, bází – typicky trojrozměrný Eukleidovský prostor:

- Báze je dána $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ a tedy jakýkoliv vektor v tomto prostoru může být zapsán jako $\vec{A} = a_1\vec{i} + a_2\vec{j} + a_3\vec{k}$ a platí, že $a_1 = \vec{i} \cdot \vec{A}, a_2 = \vec{j} \cdot \vec{A}$, a $a_3 = \vec{k} \cdot \vec{A}$
- Je dobré si uvědomit, že skalární součin v Eukleidovském prostoru je reálné číslo.
- Normou v tomto prostoru je délka vektoru: $\| \vec{A} \| = A$
- A pro zopakování: kdykoliv platí $a_1\vec{i} + a_2\vec{j} + a_3\vec{k} = 0$ tak platí také $a_1 = a_2 = a_3 = 0$ a že žádný z jednotkových vektorů $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ nelze vyjádřit jako lineární kombinaci druhých dvou



2. **Druhým příkladem je prostor komplexních funkcí** $\psi(x)$ který má nekonečnou dimenzi a má tak i nekonečný počet lineárně nezávislých bázových vektorů - **a právě těmi se budeme zabývat, i když se znázorňují špatně. ;-)**

[redacted]

Kvadraticky integrabilní funkce

V prostoru komplexních funkcí, je vektorová složka/komponenta dána komplexní funkcí a skalární součin je dán integrálem, tedy skalární součin $\psi(x)$ a $\phi(x)$ je dán:

$$\boxed{(\psi, \phi) = \int \psi^*(x)\phi(x)\, dx}$$

Pokud tento integrál diverguje (tedy jeho výsledná hodnota jde do nekonečna) pak skalární součin neexistuje.
Pokud chceme operovat s funkcemi, pro které skalární součiny existují, pak výsledek skalárního součinu (ψ, ϕ) musí být konečný.

Funkce se nazývá kvadraticky integrabilní, pokud je její skalární součin se sebou samou $(\psi, \psi) = \int |\psi(x)|^2\, dx$ konečný.
Kvadraticky integrabilní funkce splňují vlastnosti pro vytvoření Hilbertova prostoru,
i když je tento nekonečný.

A proč o tom mluvíme? Dobrým příkladem kvadraticky integrabilní funkce je vlnová funkce: $\psi(\vec{r}, t)$, z Bornovy interpretace víme, že celková pravděpodobnost musí být rovna jedné:

$$\boxed{\int |\, \psi(\vec{r}, t)\, |^2\, d^3r = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dy \int_{-\infty}^{+\infty} |\, \psi(\vec{r}, t)\, |^2\, dz = 1}$$

Tyto vlnové funkce jsou tzv. normalizovatelné, čili kvadraticky integrabilní. Vlnové funkce, které nejsou kvadraticky integrabilní nemají fyzikální smysl v kvantové mechanice! (Později si ale také ukážeme jak normovat na delta funkci.)

[redacted]

$$\boxed{(\psi,\phi) = \int \psi^*(x)\phi(x)\,dx}$$ IMPORTANT

$$\boxed{\int |\psi(\vec{r},t)|^2\, d^3r = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dy \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(\vec{r},t)|^2\, dz = 1}$$ IMPORTANT

Příklad ke kvadraticky integrabilním funkcím

Zjistěme, zda následující funkce je kvadraticky integrabilní: $\varphi = C \cdot e^{\frac{i}{\hbar} p_x \cdot x}$

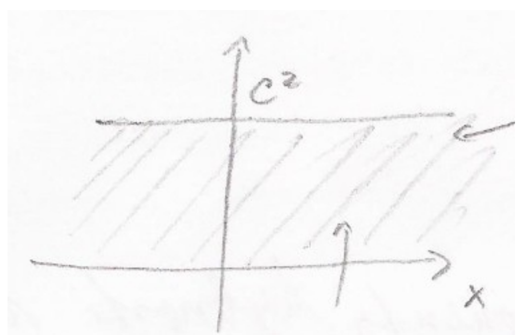
Čili je třeba spočítat následující skalární součin: $\langle \varphi_{p_x}(x) | \varphi_{p_x}(x) \rangle$

A tedy:

$$\langle \varphi_{p_x}(x) | \varphi_{p_x}(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |\varphi_{p_x}(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} C^* \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar} p_x \cdot x} \cdot C \cdot e^{\frac{i}{\hbar} p_x \cdot x}}_{e^0 = 1} =$$

Což je rovno:

$$= \int_{-\infty}^{\infty} |C|^2 dx$$



není konečný "objem" ⇒ diverguje?

$\boxed{\Rightarrow \text{není kvadraticky integrabilní}}$

Diracovo značení

Fyzikální stav systému v kvantové mechanice je reprezentován prvky Hilbertova prostoru, tyto prvky se nazývají stavové vektory. Stavové vektory jsou reprezentovány v různých bázích rozvojem do funkcí.
Podobně jako v Eukleidovském 3D prostoru, vektor můžeme reprezentovat v různých bázích, aniž bychom narušili jeho smysl, čili: smysl tohoto vektoru je nezávislý od zvolené soustavy souřadnic k reprezentaci jeho komponent/složek. **Podobně, stav mikrosystému má smysl nezávislý na zvolené bázi do které je rozložen.**

Aby se zápis stavových vektorů osvobodil od zavádějící představy o důležitosti souřadnicového systému, tak Dirac zavedl následující zápis:

Stavový vektor ψ je značen vektorem $\mid \psi\rangle$ - ket vektor, který patří do $\mathcal{H}$. A v duálním prostoru $\mathcal{H}_d$ pak $\langle\psi \mid$.
Skalární součin (ϕ, ψ) je pak definován jako $\langle\phi \mid \psi\rangle$:

$$\boxed{(\phi, \psi) \longrightarrow \langle\phi \mid \psi\rangle}$$

A platí pro něj i stejná pravidla při násobení skalárem.

Ve vlnové mechanice se zabýváme vlnovými funkcemi $\psi(\vec{r}, t)$ ovšem v obecnějším popisu kvantového světa se používá ket vektorů $\mid \psi\rangle$.
Pokud známe ket, je známa vlnová funkce, a zápis je nezávislý od reprezentace – hybnostní, souřadnicové…

Skalární součin pro souřadnicovou reprezentaci pak je:

$$\boxed{\langle\phi \mid \psi\rangle = \int \phi^*(\vec{r}, t)\psi(\vec{r}, t)\, d^3r}$$

Pro bra-kets platí stejná pravidla, jako dříve pro funkce ve skalárním součinu (*a, b* jsou komplexní čísla, ϕ, ψ komplexní funkce):

$$\mid a\psi\rangle = a \mid \psi\rangle \qquad \langle\phi \mid \psi\rangle^* = \langle\psi \mid \phi\rangle$$

$$\langle\phi \mid \psi\rangle^* = \left(\int \phi^*(\vec{r}, t)\psi(\vec{r}, t)\, d^3r\right)^* = \int \psi^*(\vec{r}, t)\phi(\vec{r}, t)\, d^3r = \langle\psi \mid \phi\rangle$$

$$\langle a\psi \mid = a^*\langle\psi \mid \qquad \langle\psi \mid \psi\rangle = 1$$

$$\begin{aligned}
\langle\psi \mid a_1\psi_1 + a_2\psi_2\rangle &= a_1\langle\psi \mid \psi_1\rangle + a_2\langle\psi \mid \psi_2\rangle, \\
\langle a_1\phi_1 + a_2\phi_2 \mid \psi\rangle &= a_1^*\langle\phi_1 \mid \psi\rangle + a_2^*\langle\phi_2 \mid \psi\rangle, \\
\langle a_1\phi_1 + a_2\phi_2 \mid b_1\psi_1 + b_2\psi_2\rangle &= a_1^*b_1\langle\phi_1 \mid \psi_1\rangle + a_1^*b_2\langle\phi_1 \mid \psi_2\rangle \\
&\quad + a_2^*b_1\langle\phi_2 \mid \psi_1\rangle + a_2^*b_2\langle\phi_2 \mid \psi_2\rangle
\end{aligned}$$

$\langle\psi \mid \phi\rangle = 0$ ortogonální stavy

$\langle\psi \mid \phi\rangle = 0, \quad \langle\psi \mid \psi\rangle = 1, \quad \langle\phi \mid \phi\rangle = 1$ ortonormální stavy

$\mid \psi\rangle \mid \phi\rangle$ a $\langle\psi \mid \langle\phi \mid$ jsou zakázány, patří do stejného prostoru

Fyzikální význam skalárního součinu

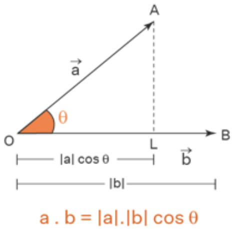
Dvě indicie jsou k dispozici:

Analogicky s Eukleidovským skalárním součinem, $\vec{A} \cdot \vec{B}$ reprezentuje projekci $\vec{B}$ na $\vec{A}$. $\langle \phi \mid \psi \rangle$ je také projekce $\mid \psi \rangle$ na $\mid \phi \rangle$.

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \sum_{i=1}^{n} a_i b_i = a_1 b_1 + a_2 b_2 + \cdots + a_n b_n$$

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = |\vec{a}||\vec{b}| \cos\theta = |\vec{b}|\, \mathrm{OL}$$

$$= |\vec{b}| \text{ (projection of } \vec{a} \text{ on } \vec{b}\text{)}$$



V případě normalizovaných stavů a dle Bornovy pravděpodobnostní interpretace pak $\langle \phi \mid \psi \rangle$ reprezentuje amplitudu pravděpodobnosti, že systému ve stavu $\mid \psi \rangle$ bude po měření nalezen ve stavu $\mid \phi \rangle$.

[redacted]

Operátory

Operátor je matematický objekt, který když aplikujeme, nebo jím působíme, na ket vektor $|\psi\rangle$ tak jej transformujeme na jiný ket $|\psi'\rangle$ v tom stejném prostoru a když působí na vektor bra $\langle\phi|$ tak jej transformuje na jiný bra $\langle\phi'|$: $\hat{A}|\psi\rangle = |\psi'\rangle, \qquad \langle\phi|\hat{A} = \langle\phi'|$

Podobná definice platí pro vlnové funkce: $\hat{A}\psi(\vec{r}) = \psi'(\vec{r}), \qquad \phi(\vec{r})\hat{A} = \phi'(\vec{r}).$

Příklady operátorů:

- Operátor gradientu: $\vec{\nabla}\psi(\vec{r}) = (\partial\psi(\vec{r})/\partial x)\vec{i} + (\partial\psi(\vec{r})/\partial y)\vec{j} + (\partial\psi(\vec{r})/\partial z)\vec{k}$
- Operátor hybnosti: $\vec{P}\psi(\vec{r}) = -i\hbar\vec{\nabla}\psi(\vec{r})$
- Laplacův operátor: $\nabla^2\psi(\vec{r}) = \partial^2\psi(\vec{r})/\partial x^2 + \partial^2\psi(\vec{r})/\partial y^2 + \partial^2\psi(\vec{r})/\partial z^2$

Součin/násobení operátorů:

- Obecně není komutativní: $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$
- Je asociativní: $\hat{A}\hat{B}\hat{C} = \hat{A}(\hat{B}\hat{C}) = (\hat{A}\hat{B})\hat{C}$
- Na vektory působí postupně, jeden po druhém: $\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle = \hat{A}(\hat{B}|\psi\rangle)$, podobně pokud by šlo o působení operátoru $\hat{A}\hat{B}\hat{C}\hat{D}$, pak prvně bude působit $\hat{D}$, pak $\hat{C}$ atd.
- Pokud je operátor mezi bra a ket, pak: $\langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle =$ komplexní číslo, výsledek může být i čistě reálné či čistě komplexní číslo
- Při řešení $\langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle$ je jedno, zda prvně aplikujeme na bra či ket: $\langle\phi|\hat{A})|\psi\rangle = \langle\phi|(\hat{A}|\psi\rangle)$

Lineární operátory:

Operátor je lineární, pokud se řídí distributivitou a komutuje (je komutativní) s konstantou, čili platí: $\hat{A}(a_1|\psi_1\rangle + a_2|\psi_2\rangle) = a_1\hat{A}|\psi_1\rangle + a_2\hat{A}|\psi_2\rangle,$

A také: $(\langle\psi_1|a_1 + \langle\psi_2|a_2)\hat{A} = a_1\langle\psi_1|\hat{A} + a_2\langle\psi_2|\hat{A}.$

Střední hodnota (anglicky mean value, ale i expectation value) $\langle\hat{A}\rangle$ operátoru $\hat{A}$ ve vztahu ke stavu $|\psi\rangle$ je definována jako: $\langle\hat{A}\rangle = \dfrac{\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$

Hodnota: $|\phi\rangle\langle\psi|$, čili násobení ket krát bra, je lineární operátor v Diracově zápisu, můžeme psát $|\phi\rangle\langle\psi|\psi'\rangle = \langle\psi|\psi'\rangle|\phi\rangle$, protože $\langle\psi|\psi'\rangle$ je komplexní číslo.

Násobení typu $|\psi\rangle\hat{A}$ a $\hat{A}\langle\psi|$ jsou zakázané. Nemají ani fyzikální ani matematický smysl.

[redacted]

Hermiteovská sdruženost

Hermiteovsky sdružené komplexní číslo $\alpha^\dagger$ čísla α je toto číslo komplexně sdružené: $\alpha^\dagger = \alpha^*$.

Hermiteovsky sdružený operátor je pak definován: $\boxed{\langle\psi \mid \hat{A}^\dagger \mid \phi\rangle = \langle\phi \mid \hat{A} \mid \psi\rangle^*.}$

Vlastnosti hermiteovské sdruženosti:

$$
\begin{aligned}
(\hat{A}^\dagger)^\dagger &= \hat{A}, \\
(a\hat{A})^\dagger &= a^*\hat{A}^\dagger, \\
(\hat{A}^n)^\dagger &= (\hat{A}^\dagger)^n, \\
(\hat{A}+\hat{B}+\hat{C}+\hat{D})^\dagger &= \hat{A}^\dagger+\hat{B}^\dagger+\hat{C}^\dagger+\hat{D}^\dagger, \\
(\hat{A}\hat{B}\hat{C}\hat{D})^\dagger &= \hat{D}^\dagger\hat{C}^\dagger\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger, \\
(\hat{A}\hat{B}\hat{C}\hat{D} \mid \psi\rangle)^\dagger &= \langle\psi \mid D^\dagger C^\dagger B^\dagger A^\dagger.
\end{aligned}
$$

$$(\mid \psi\rangle\langle\phi \mid)^\dagger = \mid \phi\rangle\langle\psi \mid .$$

$$\mid \alpha\hat{A}\psi\rangle = \alpha\hat{A} \mid \psi\rangle, \qquad \langle\alpha\hat{A}\psi \mid = \alpha^*\langle\psi \mid \hat{A}^\dagger.$$

$$\langle\alpha\hat{A}^\dagger\psi \mid = \alpha^*\langle\psi \mid (\hat{A}^\dagger)^\dagger = \alpha^*\langle\psi \mid \hat{A}$$

$$\boxed{\langle\psi \mid \hat{A} \mid \phi\rangle = \langle\hat{A}^\dagger\psi \mid \phi\rangle = \langle\psi \mid \hat{A}\phi\rangle.}$$

Hermiteovské operátory:

Operátor označujeme jako hermiteovský, pokud je sám roven svému hermiteovsky sdruženému: $\boxed{\hat{A} = \hat{A}^\dagger \quad \text{nebo} \quad \langle\psi \mid \hat{A} \mid \phi\rangle = \langle\phi \mid \hat{A} \mid \psi\rangle^*}$
Střední hodnota hermiteovského operátoru je reálné číslo!

Pro anti-hermiteovský operátor pak: $\hat{B}^\dagger = -\hat{B} \quad \text{or} \quad \langle\psi \mid \hat{B} \mid \phi\rangle = -\langle\phi \mid \hat{B} \mid \psi\rangle^*.$
Střední hodnota anti-hermiteovského operátoru je čistě imaginární číslo!

[redacted]

Příklady operátorového počtu:

1.
Diskutujte hermicitu operátoru: $(\hat{A} + \hat{A}^{\dagger})$, označme $\hat{B} = \hat{A} + \hat{A}^{\dagger}$. Pak zjevně: $\hat{B}^{\dagger} = (\hat{A} + \hat{A}^{\dagger})^{\dagger} = \hat{A}^{\dagger} + \hat{A} = \hat{B}$.
Je tedy hermiteovský.

2.
Diskutujte hermicitu operátoru: $i(\hat{A} + \hat{A}^{\dagger})$. Je anti-hermiteovský, protože: $[i(\hat{A} + \hat{A}^{\dagger})]^{\dagger} = -i(\hat{A} + \hat{A}^{\dagger})$

3.
Najděte operátor hermiteovsky sdružený k operátoru $f(\hat{A}) = (1 + i\hat{A} + 3\hat{A}^2)(1 - 2i\hat{A} - 9\hat{A}^2)/(5 + 7\hat{A})$
Platí: $f^{\dagger}(\hat{A}) = f^{*}(\hat{A}^{\dagger})$, pak můžeme psát:

$$\left(\frac{(1 + i\hat{A} + 3\hat{A}^2)(1 - 2i\hat{A} - 9\hat{A}^2)}{5 + 7\hat{A}}\right)^{\dagger} = \frac{(1 + 2i\hat{A}^{\dagger} - 9\hat{A}^{\dagger 2})(1 - i\hat{A}^{\dagger} + 3\hat{A}^{\dagger 2})}{5 + 7\hat{A}^{\dagger}}.$$

Pozor, pořadí v čitateli dle

$$(\hat{A}\hat{B}\hat{C}\hat{D})^{\dagger} = \hat{D}^{\dagger}\hat{C}^{\dagger}\hat{B}^{\dagger}\hat{A}^{\dagger},$$

[redacted]

Příklady operátorového počtu:

Najděte výsledek působení operátoru $\hat{A} = \left[\frac{d}{dx}x^2\right]^2$ na funkci cos *x* …

Operátor na druhou se rozepíše jako součin

Funkci, na kterou operátor působí napíšeme napravo

Výsledek působení

$$\left[\frac{d}{dx}x^2\right]\left[\frac{d}{dx}x^2\right]\cos x = \left[\frac{d}{dx}x^2\right]\left(\frac{d(x^2\cos x)}{dx}\right) =$$

$$= \left[\frac{d}{dx}x^2\right]\cdot\left(2x\cos x - x^2\sin x\right) = \frac{d(2x^3\cos x - x^4\sin x)}{dx} =$$

$$= 6x^2\cos x - 2x^3\sin x - 4x^3\sin x - x^4\cos x =$$

$$= \boxed{6x^2\cos x - 6x^3\sin x - x^4\cos x}$$

Důležité:

- Operátory působí po jednom zleva!
- Působení operátoru znamená přenásobení komponentou operátoru, případně aplikace operace, kterou operátor obsahuje (derivace na příklad)
- A pozor, na pořadí vždy záleží, vždy se začne tím prvním elementem operátoru, který je od funkce, na kterou působí, nejblíže vlevo!

Příklady operátorového počtu:

Najděte operátor hermiteovsky sdružený s operátorem „násobení komplexní konstantou“:

Nejdříve si uvědomíme, jak je hermiteovská sdruženost definována: $\langle \psi \mid \hat{A}^{\dagger} \mid \phi \rangle = \langle \phi \mid \hat{A} \mid \psi \rangle^{*}$.

Poté zapíšeme pro náš případ: $(\chi \mid C \cdot \varphi) = (\hat{F}^{+} \chi \mid \varphi)$ $\quad C$ … komplexní

A přepíšeme do integrálního tvaru, přitom si uvědomím definici skalárního součinu: $\langle \phi \mid \psi \rangle = \int \phi^{*}(\vec{r}, t)\, \psi(\vec{r}, t)\, d^{3}r$

A tedy:

$$\int \chi^{*} C \varphi \, dx = \int (\hat{F}^{+} \chi)^{*} \varphi \, dx$$

$$\int C \chi^{*} \varphi \, dx = \int \hat{F}^{+*} \chi^{*} \cdot \varphi \, dx$$

konst. → před fci může

$$\Rightarrow C = \hat{F}^{+*} \quad \Rightarrow \quad \underline{\underline{\hat{F}^{+} = C^{*}}}$$

Důležité:
- Opět dodržovat pořadí psaných proměnných, funkcí, operátorů
- Dát pozor na značení hermiteovské sdruženosti
- Dát pozor na značení komplexní sdruženosti

[redacted]

Komutátorová algebra

Komutátor dvou operátorů $\hat{A}$ a $\hat{B}$ je operátor označený jako $[\hat{A},\ \hat{B}]$ a definovaný vztahem: $\boxed{[\hat{A},\ \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}}$

A anti-komutátor je dán: $\{\hat{A},\ \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$.

Operátory se označují jako komutující, pokud platí, že jejich komutátor je roven nule, tedy: $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$.

Jakýkoliv operátor komutuje sám se sebou: $[\hat{A},\ \hat{A}] = 0$.

Pokud jsou dva operátory hermiteovské a jejich součin také pak tyto komutují: $(\hat{A}\hat{B})^{\dagger} = \hat{B}^{\dagger}\hat{A}^{\dagger} = \hat{B}\hat{A}$, víme, že $(\hat{A}\hat{B}\hat{C}\hat{D})^{\dagger} = \hat{D}^{\dagger}\hat{C}^{\dagger}\hat{B}^{\dagger}\hat{A}^{\dagger}$
A protože platí $(\hat{A}\hat{B})^{\dagger} = \hat{A}\hat{B}$, pak také platí $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$.

Vlastnosti komutátorů:

- Antisymetrie $[\hat{A},\ \hat{B}] = -[\hat{B},\ \hat{A}]$
- Linearita $[\hat{A},\ \hat{B} + \hat{C} + \hat{D} + \cdots] = [\hat{A},\ \hat{B}] + [\hat{A},\ \hat{C}] + [\hat{A},\ \hat{D}] + \cdots$
- Hermiteovská sdruženost $[\hat{A},\ \hat{B}]^{\dagger} = [\hat{B}^{\dagger},\ \hat{A}^{\dagger}]$
- Distributivita $[\hat{A},\ \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A},\ \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A},\ \hat{C}]$, $[\hat{A}\hat{B},\ \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B},\ \hat{C}] + [\hat{A},\ \hat{C}]\hat{B}$
- Jacobiho identita $[\hat{A},[\hat{B},\ \hat{C}]] + [\hat{B},\ [\hat{C},\ \hat{A}]] + [\hat{C},\ [\hat{A},\ \hat{B}]] = 0$
- Operátory komutují se skalárem $[\hat{A},\ b] = 0$

Relace neurčitosti mezi dvěma operátory

Aplikací komutátorové algebry je například odvození Heisenbergovy relace neurčitosti, z obecných principů a pro jakékoliv operátory – ty v kvantové mechanice reprezentují proměnné a veličiny, viz později.

Mějme operátory $\hat{A}$ a $\hat{B}$, s definovanými středními hodnotami: $\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi \mid \hat{A} \mid \psi \rangle$ a $\langle \hat{B} \rangle = \langle \psi \mid \hat{B} \mid \psi \rangle$ kde $\mid \psi \rangle$ je normalizovaný stavový vektor.

Zaveďme následující operátory: $\Delta \hat{A} = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle, \qquad \Delta \hat{B} = \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle,$ a víme, že

$$(\Delta \hat{A})^2 = \hat{A}^2 - 2\hat{A}\langle \hat{A} \rangle + \langle \hat{A} \rangle^2$$
$$(\Delta \hat{B})^2 = \hat{B}^2 - 2\hat{B}\langle \hat{B} \rangle + \langle \hat{B} \rangle^2$$

Pak platí: $\langle \psi \mid (\Delta \hat{A})^2 \mid \psi \rangle = \langle (\Delta \hat{A})^2 \rangle = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2, \qquad \langle (\Delta \hat{B})^2 \rangle = \langle \hat{B}^2 \rangle - \langle \hat{B} \rangle^2,$ kde $\langle \hat{A}^2 \rangle = \langle \psi \mid \hat{A}^2 \mid \psi \rangle$ a $\langle \hat{B}^2 \rangle = \langle \psi \mid \hat{B}^2 \mid \psi \rangle.$

Nejistoty, nebo-li standardní odchylky, jsou dány: $\boxed{\Delta A = \sqrt{\langle (\Delta \hat{A})^2 \rangle} = \sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2}, \qquad \Delta B = \sqrt{\langle (\Delta \hat{B})^2 \rangle} = \sqrt{\langle \hat{B}^2 \rangle - \langle \hat{B} \rangle^2}.}$

Působme operátory $\Delta \hat{A}$ a $\Delta \hat{B}$ na libovolný stavový vektor $\mid \psi \rangle$, tedy:

$$\mid \chi \rangle = \Delta \hat{A} \mid \psi \rangle = \left(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle \right) \mid \psi \rangle,$$
$$\mid \phi \rangle = \Delta \hat{B} \mid \psi \rangle = \left(\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle \right) \mid \psi \rangle.$$

A alespoň na chvíli si vzpomeňme na Schwarzovu nerovnost (než na ni zase navždy zapomeneme)… $\langle \chi \mid \chi \rangle \langle \phi \mid \phi \rangle \geq |\langle \chi \mid \phi \rangle|^2$

Protože jsou oba operátory $\hat{A}$ a $\hat{B}$ hermiteovské, tak $\Delta \hat{A}$ a $\Delta \hat{B}$ musí být také hermiteovské:

$$\Delta \hat{A}^\dagger = \hat{A}^\dagger - \langle \hat{A} \rangle = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle = \Delta \hat{A}$$
$$\Delta \hat{B}^\dagger = \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle = \Delta \hat{B}$$

Můžeme tedy psát: $\langle \chi \mid \chi \rangle = \langle \psi \mid (\Delta \hat{A})^2 \mid \psi \rangle, \quad \langle \phi \mid \phi \rangle = \langle \psi \mid (\Delta \hat{B})^2 \mid \psi \rangle, \quad \langle \chi \mid \phi \rangle = \langle \psi \mid \Delta \hat{A} \Delta \hat{B} \mid \psi \rangle.$

Protože platí: $\Delta \hat{A}^\dagger = \Delta \hat{A}$, můžeme psát: $\langle \chi \mid \chi \rangle = \langle \psi \mid \Delta \hat{A}^\dagger \Delta \hat{A} \mid \psi \rangle = \langle \psi \mid (\Delta \hat{A})^2 \mid \psi \rangle = \langle (\Delta \hat{A})^2 \rangle$ a tedy skrze Schwarzovu nerovnost:

$$\langle (\Delta \hat{A})^2 \rangle \langle (\Delta \hat{B})^2 \rangle \geq \left| \langle \Delta \hat{A} \Delta \hat{B} \rangle \right|^2$$

Pravou stranu předchozí nerovnosti můžeme napsat jako:

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

Protože platí: $[\Delta \hat{A},\ \Delta \hat{B}] = [\hat{A},\ \hat{B}].$

[redacted]

Relace neurčitosti mezi dvěma operátory… pokračování

Protože platí: $\Delta\hat{A}^{\dagger} = \Delta\hat{A}$, můžeme psát: $\langle\chi \mid \chi\rangle = \langle\psi \mid \Delta\hat{A}^{\dagger}\Delta\hat{A} \mid \psi\rangle = \langle\psi \mid (\Delta\hat{A})^2 \mid \psi\rangle = \langle(\Delta\hat{A})^2\rangle$ a tedy skrze Schwarzovu nerovnost:

$$\langle(\Delta\hat{A})^2\rangle\langle(\Delta\hat{B})^2\rangle \geq \left|\langle\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}\rangle\right|^2$$

Pravou stranu předchozí nerovnosti můžeme napsat jako:

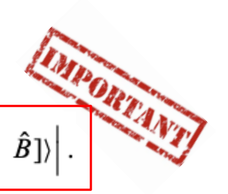
$$\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} = \frac{1}{2}[\Delta\hat{A},\ \Delta\hat{B}] + \frac{1}{2}\{\Delta\hat{A},\ \Delta\hat{B}\} = \frac{1}{2}[\hat{A},\ \hat{B}] + \frac{1}{2}\{\Delta\hat{A},\ \Delta\hat{B}\},$$

Protože platí: $[\Delta\hat{A},\ \Delta\hat{B}] = [\hat{A},\ \hat{B}]$.

pozitivní reálné číslo, protože je to střední hodnota hermiteovského operátoru

A dál pro pravou stranu: $\left|\langle\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}\rangle\right|^2 = \frac{1}{4}\left|\langle[\hat{A},\ \hat{B}]\rangle\right|^2 + \frac{1}{4}\left|\langle\{\Delta\hat{A},\ \Delta\hat{B}\}\rangle\right|^2$

Protože poslední člen je pozitivní reálné číslo, můžeme psát: $\left|\langle\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}\rangle\right|^2 \geq \frac{1}{4}\left|\langle[\hat{A},\ \hat{B}]\rangle\right|^2.$



Srovnáme-li s předchozím, pak: $\langle(\Delta\hat{A})^2\rangle\langle(\Delta\hat{B})^2\rangle \geq \frac{1}{4}\left|\langle[\hat{A},\ \hat{B}]\rangle\right|^2$, a dále můžeme psát: $\boxed{\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2}\left|\langle[\hat{A},\ \hat{B}]\rangle\right|.}$

Jde o obecně definovaný princip neurčitosti, pokud dosadíme operátory souřadnice a hybnosti, tak dostaneme Heisenbergovu relaci neurčitosti tak, jak jsme si ji odvodili pro vlnové klubko.

Platí totiž: $[\hat{X},\ \hat{P}_x] = i\hbar$ a tedy $\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$

Vlastní hodnoty a vlastní vektory/funkce operátoru

Stavový vektor $|\psi\rangle$ je nazván vlastním vektorem (vlastním ketem či vlastním stavem, také daný vlastní vlnovou funkcí, vlastní funkcí) operátoru $\hat{A}$, pokud působením operátoru na vektor dostaneme $\boxed{\hat{A}\,|\,\psi\rangle = a\,|\,\psi\rangle,}$

Kde *a* je obecně komplexní číslo, které se nazývá vlastní hodnota operátoru $\hat{A}$.

Vlastní hodnoty hermiteovského operátoru jsou reálná čísla a vlastní vektory náležící různým vlastním hodnotám jsou ortogonální!

Tedy pro $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ platí $\hat{A}\,|\,\phi_n\rangle = a_n\,|\,\phi_n\rangle \Longrightarrow$ $a_n =$ reálné číslo a $\langle\phi_m\,|\,\phi_n\rangle = \delta_{mn}$

Pak platí:

$$\hat{A}\,|\,\phi_n\rangle = a_n\,|\,\phi_n\rangle \quad\Longrightarrow\quad \langle\phi_m\,|\,\hat{A}\,|\,\phi_n\rangle = a_n\langle\phi_m\,|\,\phi_n\rangle,$$

$$\langle\phi_m\,|\,\hat{A}^\dagger = a_m^*\langle\phi_m\,| \quad\Longrightarrow\quad \langle\phi_m\,|\,\hat{A}^\dagger\,|\,\phi_n\rangle = a_m^*\langle\phi_m\,|\,\phi_n\rangle.$$

Pokud výše uvedené rovnice od sebe odečteme, a uvážíme, že $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$, tak dostáváme: $(a_n - a_m^*)\langle\phi_m\,|\,\phi_n\rangle = 0.$

A tedy jsou dvě možnosti, kdy tato rovnice platí:

- Pro $m = n$, protože obecně $\langle\phi_n\,|\,\phi_n\rangle > 0$ při $\delta_{ij} = \begin{cases} 0 & i \neq j, \\ 1 & i = j. \end{cases}$, musíme mít $a_n = a_n^*$ a tedy vlastní hodnoty musí být reálné
- Pro $m \neq n$, protože obecně $a_n \neq a_m^*$, pak musí platit $\langle\phi_m\,|\,\phi_n\rangle = 0$, tedy, že vlastní vektory jsou ortogonální

Vlastní stavy hermiteovského operátoru definují kompletní sadu vzájemně ortogonálních vektorů, které tvoří bázi.

Pokud má několik vlastních vektorů stejnou vlastní hodnotu, pak se jí říká degenerovaná. Stupeň degenerace je udáván počtem lineárně nezávislých vlastních vektorů, které mají tu stejnou vlastní hodnotu.

Pro dva komutující hermiteovské operátory, které nemají degenerované vlastní hodnoty, pak vlastní vektory jednoho operátoru jsou také vl. vektory druhého operátoru.

Lze to ukázat následovně: mějme nedegenerovaný $\hat{A}\,|\,\phi_n\rangle = a_n\,|\,\phi_n\rangle$ a protože herm. operátory komutují, můžeme psát:

$\hat{B}\hat{A}\,|\,\phi_n\rangle = \hat{A}\hat{B}\,|\,\phi_n\rangle$ a také $\hat{A}(\hat{B}\,|\,\phi_n\rangle) = a_n(\hat{B}\,|\,\phi_n\rangle);$ ovšem můžeme psát i: $\hat{B}\,|\,\phi_n\rangle = b_n\,|\,\phi_n\rangle.$

[redacted]

Vlastní hodnoty a vlastní vektory/funkce operátoru – standardní podmínky na vlnovou funkci

Při konkrétním matematickém výpočtu je třeba vzít v úvahu tzv. standardní podmínky, které jsou kladené na vlnovou funkci $\psi(x)$ a její derivaci $d\psi(x)/dx$ aby měla vlnová funkce fyzikální význam, jsou to:

- **Konečnost/omezenost funkcí** – tj. nemůže jít např. exponenciálně do nekonečna – nezapomeňme, počítáme z ní hustotu pravděpodobnosti!

- **Funkce musí být spojité** – podmínka pro možnost je derivovat a tedy počítat Schrödingerovu rovnici!

- **Jednoznačnost** – jedné pozici nemohou náležet různé pravděpodobnosti stavu.

- Pro vázané stavy musí být **kvadraticky integrovatelné** – jak již diskutováno dříve. Volná částice nemůže mít ostře definovanou hybnost či energii.

Příklad pro výpočet vlastních funkcí a vlastních hodnot hermiteovského operátoru

Spočítejme pro následující operátor: $\hat{F} = \left[x + \frac{d}{dx}\right]$

Zapíšeme rovnici pro vlastní hodnoty hermiteovského operátoru:

$$\hat{F}\varphi_F = F\varphi_F$$

← vl. fce

↑ vl. hodnota

Dosadíme a řešíme:

dif. rce I. řádu

$$\left(x + \frac{d}{dx}\right)\varphi_F = F \cdot \varphi_F$$

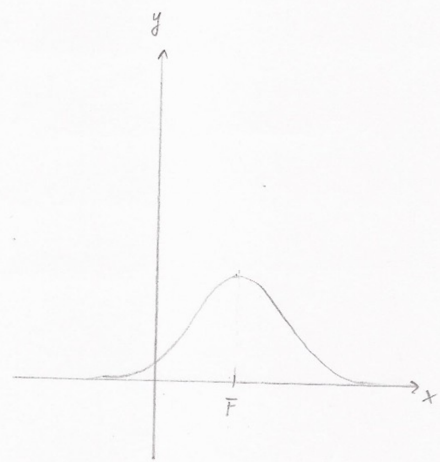
$$\frac{d}{dx}\varphi_F = (F - x)\varphi_F$$

$$\frac{1}{\varphi_F} \cdot d\varphi_F = (F - x)\,dx \quad / \int$$

$$\ln \varphi_F = Fx - \frac{x^2}{2} + \text{"}c\text{"} \;/\; e^{\dots}$$

$$\underline{\varphi_F = C \cdot e^{\left(Fx - \frac{x^2}{2}\right)}}$$

graf:



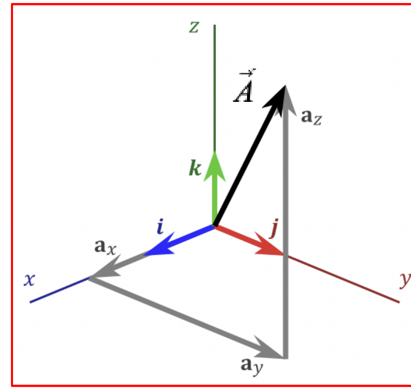
A ze standardních podmínek plyne:

vlastní hodnoty F → může být libovolné reálné číslo, pro všechny hodnoty platí, že funkce φ_F je:

- spojitá
- jednoznačná
- ohraničená (dole osa x, maximum záleží na F)

[redacted]

Diskrétní a spojité báze



a jsme zpět u vektorových prostorů a jejich bází:

Budeme se zabývat reprezentací stavových vektorů, bra vektorů a operátorů v diskrétních, ale hlavně spojitých bázích.

Proč to děláme, je nyní již celkem zřetelné… stavy mikroobjektů/částic se popisují stavovým vektorem/vlnovou funkcí a ty mohou být superpozicí elementárních stavů/funkcí, dostaneme se k nim výpočtem vlastních hodnot (reálná čísla) a vlastních funkcí operátorů, výsledek měření nám zprostředkuje určení střední hodnoty operátoru, střední hodnoty z vážených příspěvků mnoha možných vlastních stavů.

$\{|\phi_n\rangle\}$ $\mathcal{H}$

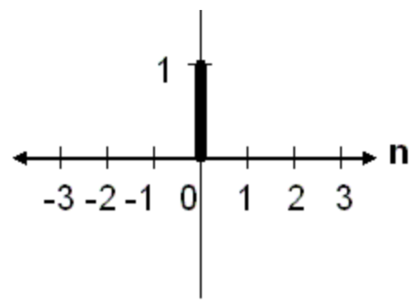
Uvažujme **diskrétní, kompletní a ortonormální bázi**, které je tvořena nekonečnou sadu ket vektorů: $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, |\phi_3\rangle, \ldots, |\phi_n\rangle$ $n \to \infty$.
Tato sekvence vektorů je nekonečná, ale spočitatelná. Platí: $\langle \phi_n \mid \phi_m \rangle = \delta_{nm}$, kde **Kroneckerovo delta** je:

$$\delta_{nm} = \begin{cases} 1, & n = m, \\ 0, & n \neq m. \end{cases}$$

Některé vlastnosti:

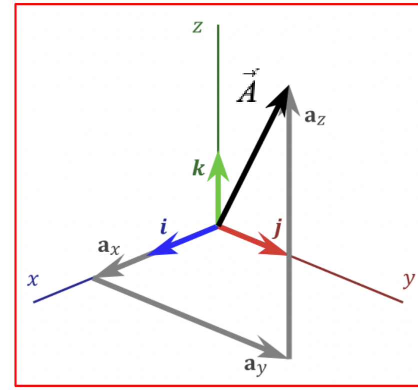
$$\sum_j \delta_{ij} a_j = a_i,$$
$$\sum_i a_i \delta_{ij} = a_j,$$
$$\sum_k \delta_{ik} \delta_{kj} = \delta_{ij}.$$

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \sum_{i,j=1}^{n} a_i \delta_{ij} b_j = \sum_{i=1}^{n} a_i b_i$$



[redacted]

Diskrétní a spojité báze



a jsme zpět u vektorových prostorů a jejich bází:

Budeme se zabývat reprezentací stavových vektorů, bra vektorů a operátorů v diskrétních, ale hlavně spojitých bázích.

Proč to děláme, je nyní již celkem zřetelné… stavy mikroobjektů/částic se popisují stavovým vektorem/vlnovou funkcí a ty mohou být superpozicí elementárních stavů/funkcí, dostaneme se k nim výpočtem vlastních hodnot (reálná čísla) a vlastních funkcí operátorů, výsledek měření nám zprostředkuje určení střední hodnoty operátoru, střední hodnoty z vážených příspěvků mnoha možných vlastních stavů.

V případě kontinuální/**spojité, kompletní a ortonormální báze** máme nespočitatelné množství ket vektorů a místo Kroneckerova delta se používá tzv. **Diracova delta funkce**: $\langle \chi_k \mid \chi_{k'} \rangle = \delta(k' - k)$, ta je definována:

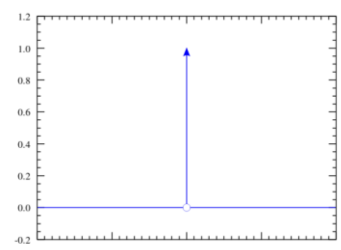
$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dk.$$

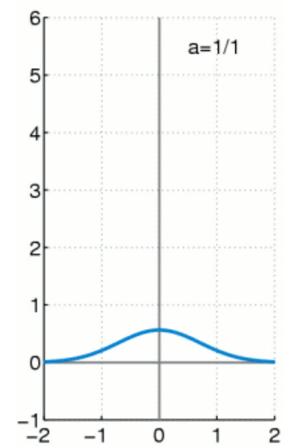
A platí pro ni následující vlastnosti: $\delta(x) = 0, \text{ pro } \quad x \neq 0,$

$$\int_a^b f(x)\delta(x - x_0)\, dx = \begin{cases} f(x_0) & \text{pro} \quad a < x_0 < b, \\ 0 & \text{jinde} \end{cases}$$

$$\delta(\vec{r} - \vec{r}\,') = \delta(x - x')\delta(y - y')\delta(z - z')$$

$$\delta(\vec{r} - \vec{r}\,') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k\, e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r} - \vec{r}\,')}$$





$$\delta_a(x) = \frac{1}{|a|\sqrt{\pi}} e^{-(x/a)^2}$$

$$a \to 0$$

[redacted]

Reprezentace stavových vektorů, bra vektorů a operátorů

Uvažujme operátor hybnosti

Rozložme vlnovou funkci do vlastních funkcí hermiteovského operátoru:

$\hat{p}\,\varphi_p = p\,\varphi_p$; φ_p ... báze, vlastní fce   1.

Pak po přenásobení zleva:

$$\varphi^*_{p'}(x) / \qquad \psi(x) = \sum\!\!\!\!\!\!\int C(p)\,\varphi_p(x)\,(dp) \qquad (\text{lin. kombinace})$$

2.

p' !

Obecně jakákoliv hybnost (stejná či jiná než *p*)

příslušnost operátoru

(příspěvky/komponenty φ_p vlnové funkce $\psi(x)$, které jsou „vážené" koeficienty $C(p)$)

Integrace obou stran:

$$\int_{d.o.} dx \,/ \qquad \varphi^*_{p'}(x)\,\psi(x) = \sum\!\!\!\!\!\!\int C(p)\,\underbrace{\varphi^*_{p'}(x)\,\varphi_p(x)}_{\text{funkce } x}\,(dp)$$

$$\int_{d.o.} \varphi^*_{p'}(x)\,\psi(x)\,dx = \sum\!\!\!\!\!\!\int c(p) \int_{d.o.} \varphi^*_{p'}(x)\,\varphi_p(x)\,dx\,(dp)$$

Výsledek pro různá spektra:

$$(\varphi_{p'}|\psi) = \sum\!\!\!\!\!\!\int c(p)\,(\varphi_{p'}|\varphi_p)\,(dp)$$

$$(\varphi_{p'}|\psi) = \begin{cases} \sum_p c(p)\,\delta_{pp'} = C_D(p') & \text{diskrétní spektrum} \\ \int_p c(p)\,\delta(p-p')\,dp = C_S(p') & \text{spojité} \end{cases}$$

[redacted]

Reprezentace stavových vektorů, bra vektorů a operátorů

A tedy:

nalezli jsme tedy vyjádření koeficientů rozkladu funkce $\psi(x)$, a totiž $C(p') = (\varphi_{p'}|\psi)$!

Pro koeficient *C(p')*:

$C(p')$ je vlnová funkce pro ten stejný stav, který popisuje vlnová funkce $\psi(x)$, jen je v hybnostní reprezentaci !

platí, že: $(\varphi_{p'}|\psi)^* = (\psi|\varphi_{p'}) = C(p')^*$

Platí, že:

$$(\varphi_{p'}|\psi)^* = (\psi|\varphi_{p'}) = C(p')^*$$

Můžeme dále psát:

Bázová funkce

$$\underline{C(p)} = (\varphi_p|\psi) = \int_{d.o.} \varphi_p^*(x)\psi(x)\,dx = \underline{\int_{d.o.} \psi(x)\,\varphi_p^*(x)\,dx}$$

3.

Dle rovnice č.2:

$$\underline{\psi(x)} = \underline{\int_{d.o.} C(p)\,\varphi_p(x)\,dp}$$

Podobně jako rovnice 1.

A pro *C(p')* stejně jako v rovnici 2. lze psát:

p-reprezentace

$$\underbrace{C(p)}_{\text{vlnová fce}} = \oint \underbrace{\psi(x)}_{\substack{\text{koeficienty rozkladu}\\ \text{(vlnová fce v x-reprezentaci)}}} \underbrace{\varphi_x(p)}_{\text{bázové funkce}}\,dx \quad ; \quad \underbrace{\hat{x}\,\varphi_x = x\,\varphi_x}_{\text{odpovídající vztah pro vlastní hodnoty}}$$

4.

[redacted]

Reprezentace stavových vektorů, bra vektorů a operátorů

Porovnáme-li vztahy 3. a 4., tedy: $c(p) = \int_{d.o.} \psi(x)\, \varphi_p^*(x)\, dx$ a $c(p) = \int_{d.o.} \psi(x)\, \varphi_x(p)\, dx$

Pak je zjevné, že platí pro bázové funkce:

$$\boxed{\begin{aligned} \varphi_p^*(x) &= \varphi_x(p) \\ \varphi_p(x) &= \varphi_x^*(p) \end{aligned}}$$

IMPORTANT

a srovnáme-li s:

$$\begin{aligned}
\psi(x,t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\phi}(p) e^{i(px-Et)/\hbar} dp, \\
\psi_0(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\phi}(p) e^{ipx/\hbar} dp, \\
\tilde{\phi}(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0(x) e^{-ipx/\hbar} dx,
\end{aligned}$$

Nyní vidíme, co jsou tyto funkce zač i ve vztahu k našim původním popisům pomocí vlnového klubka.

Je zjevné, že obě reprezentace vlnové funkce musí být normalizovatelné:

Pokud je vlnová funkce v souřadnicové reprezentaci normalizována (pozor, trochu jiný zápis): $\psi(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p\, e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \Psi(\vec{p})$

Pak bude i vlnová funkce v hybnostní reprezentaci: $\Psi(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3r\, e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \psi(\vec{r})$

A platí tzv. Parsevalův teorém – matematický pojem, zde ovšem jasného fyzikálního významu pro pravděpodobnostní interpretaci:

$$\begin{aligned}
\int d^3p\, \Psi^*(\vec{p})\Psi(\vec{p}) &= \int d^3p\, \Psi^*(\vec{p}) \left[\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3r\, e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \psi(\vec{r}) \right] \\
&= \int d^3r\, \psi(\vec{r}) \left[\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p\, \Psi^*(\vec{p}) e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \right] \\
&= \int d^3r\, \psi(\vec{r})\psi^*(\vec{r}) \\
&= 1.
\end{aligned}$$

Při převodu operátorů mezi reprezentacemi je možno využít střední hodnotu, cokoliv měřitelného by nemělo být závislé na matematickém zápisu, reprezentaci:

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{\langle \psi \mid \hat{A} \mid \psi \rangle}{\langle \psi \mid \psi \rangle}$$

tedy prakticky pro normalizované funkce:

$$\langle \hat{x} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\, x\, \psi(x)\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(p)\, \hat{x}_{(p)}\, \psi(p)\, dp$$

IMPORTANT

[redacted]

Určení operátoru souřadnice v hybnostní/momentové reprezentaci:

Vyjdeme z rovnosti pro střední hodnotu v různých reprezentacích: $\langle \hat{x} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\, x\, \psi(x)\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(p)\, \hat{x}_{(p)}\, \psi(p)\, dp$

První integrál rozepíšeme pomocí známých vztahů: $\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(p)\, \varphi_p(x)\, dp$ a $\varphi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} p x}$

Víme, že funkce $\psi(x)$ a $\psi(p)$ reprezentují tentýž kvantový stav, jen v různých reprezentacích.

$\varphi_p(x)$ jsou vlastní funkce operátoru $\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)$ tedy $\hat{p}_x$ v souřadnicové reprezentaci, které tvoří bázi.

Můžeme tedy počítat:

pak $\langle \hat{x} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Big(\underbrace{\cancel{\int_{-\infty}^{\infty} \psi(p)\varphi_p(x)\, dp}}_{\psi(x) \text{ ještě nerozepsat!}}\Big)^* \cdot x \cdot \left(\int_{-\infty}^{\infty} \psi(p)\, \varphi_p(x)\, dp\right) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\, x \int_{-\infty}^{\infty} \psi(p) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}px}\, dp\, dx =$

$= \left| \begin{array}{ll} \text{per partes: } \left(\frac{d}{dp}\right)! & u = \psi(p) \quad u' = \frac{d\psi(p)}{dp} \\ v' = e^{\frac{i}{\hbar}px} & v = \frac{\hbar}{ix} e^{\frac{i}{\hbar}px} \end{array} \right| = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\, x \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \Big[\underbrace{\Big(\psi(p) \frac{\hbar}{ix}\, e^{\frac{i}{\hbar}px}\Big)_{-\infty}^{\infty}}_{\emptyset} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hbar}{ix} e^{\frac{i}{\hbar}px} \cdot \frac{d\psi(p)}{dp}\, dp \Big] dx =$

hraniční integr.

$= \iint_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\, x \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \cdot \frac{-\hbar}{ix} e^{\frac{i}{\hbar}px} \cdot \frac{d\psi(p)}{dp}\, dp\, dx = \iint_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}px}}_{\varphi_p(x)} \cdot i\hbar \frac{d\psi(p)}{dp}\, dp\, dx =$

$= \left| \begin{array}{l} \text{víme, že: } \psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(p)\, \varphi_p(x)\, dp \quad = \text{viz př. Ver. 3} \\ \psi(p) = (\varphi_p | \psi(x)) \quad /^* \\ \psi^*(p) = (\psi(x) | \varphi_p) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}px}\, dx \end{array} \right| = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(p) \cdot i\hbar \frac{d}{dp} \psi(p)\, dp =$

4,5,6,7

$= (\psi(p) | \hat{x}_p \psi(p)) \implies \boxed{\hat{x}_{(p)} = i\hbar \frac{d}{dp}}$

[redacted]

Souřadnicová a momentová reprezentace a jejich operátory:

Báze je tvořena nekonečným počtem ket vektorů $\{|\,\vec{r}\rangle\}$, vlastních vektorů operátoru pozice/souřadnice $\hat{\vec{R}}$: $\quad \hat{\vec{R}}\,|\,\vec{r}\rangle = \vec{r}\,|\,\vec{r}\rangle$

Platí ortonormalita: $\langle\vec{r}\,|\,\vec{r}\,'\rangle = \delta(\vec{r}-\vec{r}\,') \;=\; \delta(x-x')\delta(y-y')\delta(z-z')$

A pro stavový vektor ket pak: $|\,\psi\rangle = \int d^3r\,\psi(\vec{r})\,|\,\vec{r}\rangle,$

Kde $\psi(\vec{r})$ značí komponenty stavového vektoru v bázi $\{|\,\vec{r}\rangle\}$ a tedy: $\langle\vec{r}\,|\,\psi\rangle = \psi(\vec{r}).$

Toto je tedy naše vlnová funkce a její místo v Diracově symbolice: $\psi(\vec{r})$ a pro kterou platí Bornova interpretace $|\,\langle\vec{r}\,|\,\psi\rangle\,|^2\,d^3r$ jako pravděpodobnosti polohy mikroobjektu v objemu d^3r.

Skalární součin dvou stavových vektorů lze pak také psát, s pomocí jednotkového operátoru, jako:

$$\langle\phi\,|\,\psi\rangle = \langle\phi\,|\left(\int d^3r\;|\,\vec{r}\rangle\langle\vec{r}\,|\right)|\,\psi\rangle = \int d^3r\,\phi^*(\vec{r})\psi(\vec{r}).$$

Podobně pro momentovou reprezentaci.

Operátor hybnosti v souřadnicové reprezentaci: $\boxed{\hat{P}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \qquad \hat{P}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}, \qquad \hat{P}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}.}$ $\quad \boxed{\hat{\vec{P}} = -i\hbar\vec{\nabla}.}$

IMPORTANT

Lze odvodit aplikací operátoru gradientu na vlnovou funkci rovinné vlny $\psi(\vec{r},t) = Ae^{i(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et)/\hbar}$:

$$-i\hbar\vec{\nabla}\psi(\vec{r},t) = \vec{p}\,\psi(\vec{r},t) = \hat{\vec{P}}\psi(\vec{r},t).$$

Pak můžeme přepsat Hamiltonův operátor $\hat{H} = \hat{\vec{P}}^{\,2}/(2m) + \hat{V}$ jako:

$$\boxed{\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{V}(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + \hat{V}(\vec{r}),}$$

IMPORTANT

Operátor polohy v hybnostní reprezentaci: $\hat{R}_j = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_j} \qquad (j = x, y, z)$ $\boxed{\hat{X} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_x}, \qquad \hat{Y} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_y}, \qquad \hat{Z} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_z}.}$

A některé důležité komutační relace: $[\hat{X}, \hat{P}_x] = i\hbar.$

$$\boxed{[\hat{X}, \hat{P}_x] = i\hbar, \qquad [\hat{Y}, \hat{P}_Y] = i\hbar, \qquad [\hat{Z}, \hat{P}_Z] = i\hbar.}$$

$$\boxed{[\hat{R}_j, \hat{P}_k] = i\hbar\delta_{jk}, \qquad [\hat{R}_j, \hat{R}_k] = 0, \qquad [\hat{P}_j, \hat{P}_k] = 0 \qquad (j,\ k = x, y, z).}$$

[redacted]

Pokud se budeme tedy držet „spojitého“ Schrödingerova formalismu kvantové mechaniky (a ne Heisenbergova maticového – „diskrétního“), pak zápis pro řešení vlastních hodnot Hamiltonova operátoru v souřadnicové reprezentaci bude vypadat následovně:

$$\langle \vec{r} \mid \hat{H} \mid \psi \rangle = E \langle \vec{r} \mid \psi \rangle$$

bázové vektory v souřadnicové reprezentaci

Hamiltonův operátor

stavový vektor

vlastní hodnoty energie

Již víme, že platí:

$$\langle \vec{r} \mid \psi \rangle = \psi(\vec{r}).$$

Tedy, že vlnová funkce v souřadnicové reprezentaci je průmět (koeficient) stavového vektoru do bázových vektorů $\{\mid \vec{r} \rangle\}$, které jsou vlastními vektory operátoru souřadnice $\hat{\vec{R}}$, dle vztahu $\hat{\vec{R}} \mid \vec{r} \rangle = \vec{r} \mid \vec{r} \rangle$.

Již víme, že take platí:

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

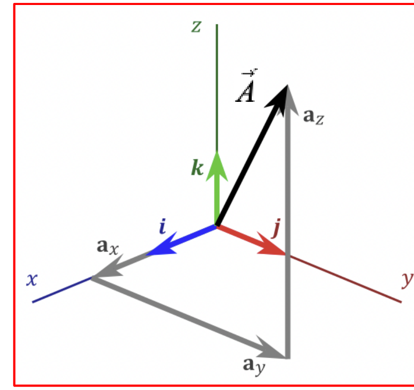
Což je výraz pro Hamiltonián v souřadnicové reprezentaci, samozřejmě.

$$\longrightarrow \quad \boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) + \hat{V}(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}),}$$

což je stacionární Schrödingerova rovnice.
(o stacionárnosti si povíme později)

… což je základ tzv. vlnové mechaniky

[redacted]



Shrnutí přednášky o operátorech a matematickém aparátu, reprezentacích a vzájemných transformacích:

Vlastnosti a operace na Hilbertově prostoru, lineárním vektorovém prostoru.

Definovali jsme skalární součin: $\boxed{(\psi, \phi) = (\phi, \psi)^*}$ kde platí $\boxed{(\psi, \phi) = \int \psi^*(x)\phi(x)\,dx}$

Vlnová funkce jako lineární kombinace bázových vektorů: $\psi = \sum_{i=1}^{N} a_i\phi_i$ a $(\phi_i,\ \phi_j) = \delta_{ij}$ a $a_j = (\phi_j, \psi)$

Pro srovnání, k čemu jsme dospěli v závěru této části: $\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(p)\,\varphi_p(x)\,dp$ a $\delta_{pp'} = (\varphi_{p'} | \varphi_p)$ a $C(p) = (\varphi_p | \psi) = \int_{d.o.} \varphi_p^*(x)\psi(x)dx = \int_{d.o.} \psi(x)\varphi_p^*(x)\,dx$

Operátory a jejich působení: $\hat{A}\psi(\vec{r}) = \psi'(\vec{r}), \quad \phi(\vec{r})\hat{A} = \phi'(\vec{r}).$ $\hat{A} \mid \psi\rangle = \mid \psi'\rangle, \quad \langle\phi \mid \hat{A} = \langle\phi' \mid$, operátor změní vektor/funkci v jinou ze stejného prostoru:

$\vec{\nabla}\psi(\vec{r}) = (\partial\psi(\vec{r})/\partial x)\vec{i} + (\partial\psi(\vec{r})/\partial y)\vec{j} + (\partial\psi(\vec{r})/\partial z)\vec{k}$ gradient

$\vec{P}\psi(\vec{r}) = -i\hbar\vec{\nabla}\psi(\vec{r})$ hybnost v souřadnicové reprezentaci

Lineární hermiteovské/
hermiteovsky sdružené operátory: $\langle\psi \mid \hat{A} \mid \phi\rangle = \langle\hat{A}^\dagger\psi \mid \phi\rangle = \langle\psi \mid \hat{A}\phi\rangle.$ $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ nebo $\langle\psi \mid \hat{A} \mid \phi\rangle = \langle\phi \mid \hat{A} \mid \psi\rangle^*$

Komutátor: $[\hat{A},\ \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ a jeho důležitost při kvantifikaci neurčitosti: $\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2}\left|\langle[\hat{A},\ \hat{B}]\rangle\right|$. Střední hodnota: $\langle\hat{A}\rangle = \langle\psi \mid \hat{A} \mid \psi\rangle$

Vlastní hodnoty a funkce lineárního hermiteovského operátoru: $\hat{A} \mid \psi\rangle = a \mid \psi\rangle,$
Tedy pro $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ platí $\hat{A} \mid \phi_n\rangle = a_n \mid \phi_n\rangle \implies a_n =$ reálné číslo a $\langle\phi_m \mid \phi_n\rangle = \delta_{mn}$ a standardní podmínky pro vlnovou funkci!

Rozklad vlnové funkce do vlastních funkcí lineárního hermiteovského operátoru, platí:

Souřadnicová reprezentace: $\psi(x) = \oint C(p)\,\varphi_p(x)\,dp$, hybnostní: $C(p) = (\varphi_p | \psi) = \int_{d.o.} \varphi_p^*(x)\psi(x)dx = \int_{d.o.} \psi(x)\varphi_p^*(x)\,dx$ vztah bázových funkcí: $\varphi_p^*(x) = \varphi_x(p)$, $\varphi_p(x) = \varphi_x^*(p)$

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p\, e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}\Psi(\vec{p}) \qquad \Psi(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3r\, e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}\psi(\vec{r})$$

viz. Fourierova transformace

A stacionární Schrödingerova rovnice je:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) + \hat{V}(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}),$$