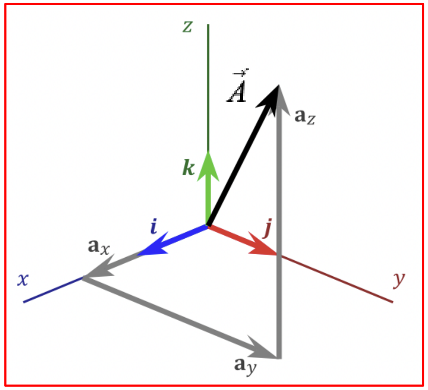
Obsah přednášky

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]



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: $\psi(x) = \sum\!\!\!\!\!\!\int C(p)\varphi_p(x)(dp)$, 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:

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

[redacted]

Povaha postulátů pro kvantový svět

Formalismus kvantové mechaniky je založen na postulátech této teorie.

Postuláty nebyly odvozeny, zakládají se na výsledcích experimentů (tak jak jsme je mimo jiné prošli v první kapitole) a jsou zapsány pomocí matematického aparátu, který jsme si připravili v druhé kapitole.

Důležitým důsledkem použití těchto postulátů je právě možnost kvantitativního popsání kvantového světa skrze teorii a experiment, a jejich shoda.

Postuláty reprezentují minimální počet předpokladů, které jsou potřeba k vytvoření teorie kvantové mechaniky.

Problém je, že tyto postuláty nelze přímo ověřit. Lze pouze usuzovat s vyvíjejících se měření a teorie, zda případně nepřímo neukazují na nějakou nesrovnalost – to se zatím za posledních 100 let nestalo. Člověk se tedy vztahuje k výsledkům teorie, která je postavena na těchto postulátech: pokud teorie funguje, postuláty jsou správné, pokud ne, pak je třeba změna - ostatně jako v jakékoli jiné fyzikální teorii!

Kvantová teorie ovšem funguje, a to velice dobře, dává přesné předpovědi o vývoji kvantových fyzikálních systémů a je opakovaně v souladu s experimenty!

A tedy:
přesnost předpovědí kvantové teorie nám dává nepochybnou evidenci o platnosti postulátů, na kterých je tato teorie postavena!

Základní postuláty kvantové mechaniky

Klasická teoretická mechanika nám říká, že stav jakékoliv částice v jakémkoliv čase *t* je dán dvěma fundamentálními proměnnými: pozicí $\vec{r}(t)$ a hybností $\vec{p}(t)$ této částice. Jakékoliv další fyzikální veličiny relevantní pro studovaný systém jsou odvoditelné z těchto dvou. Navíc, pakliže známe tyto proměnné pro daný čas *t*, tak například pomocí Newtonova druhého zákona či Hamiltonových rovnic můžeme předpovědět, jak se systém bude vyvíjet v čase v budoucnu, jaký bude jeho stav např. v čase *t'*.

Kvantově-mechanické protějšky k těmto fundamentálním úvahám, či postulátům, jsou postuláty kvantové mechaniky, které nám umožňují pochopit:

- Jak je kvantový stav popsán matematicky pro daný čas *t*
- Jak spočítat různé fyzikální veličiny dané tímto kvantovým vztahem, a
- Pokud tak známe stav systému v čase *t,* jak najít stav systému v jakémkoliv pozdějším čase *t',* a tedy jak popsat časový vývoj systému

Základní postuláty kvantové mechaniky

1. **Stav systému**
Stav jakéhokoliv fyzikálního systému je specifikován v každém čase *t* pomocí stavového vektoru ket $|\psi(t)\rangle$ (tedy vlnové funkce, pokud promítneme stavový vektor na nějakou bázi), stavový vektor obsahuje (a slouží i jako prvek k dalšímu odvození) všechny potřebné informace o systému. Jakákoliv superpozice stavových vektorů je také stavový vektor.

2. **Pozorovatelné a operátory**
Každá fyzikální měřitelná veličina *A*, zvaná v kv. mechanice pozorovatelná, či dynamická proměnná, je reprezentována lineárním hermiteovským operátorem $\hat{A}$ jehož vlastní vektory jsou kompletní bází.

3. **Měření a vlastní hodnoty operátorů**
Měření pozorovatelné *A* může být formálně reprezentováno působením operátoru $\hat{A}$ na stavový vektor $|\psi(t)\rangle$. Jediným možným výsledkem takového působení je získání jedné z vlastních hodnot a_n (tyto jsou reálné) daného operátoru $\hat{A}$. Pokud je výsledkem měření pozorovatelné *A* na stavu $|\psi(t)\rangle$ vlastní hodnota a_n, pak se stav systému po měření okamžitě změní na $|\psi_n\rangle$:
$$\hat{A}|\psi(t)\rangle = a_n|\psi_n\rangle,$$
kde $\boxed{a_n = \langle\psi_n|\psi(t)\rangle}$. Poznámka: a_n je složka vektoru $|\psi(t)\rangle$ při jeho projekci na vlastní vektor $|\psi_n\rangle$.
Vzpomeňme: $\boxed{a_j = (\phi_j, \psi)}$

Vzpomeňme: $\boxed{\hat{\vec{R}} \mid \vec{r}\rangle = \vec{r} \mid \vec{r}\rangle \quad \langle\vec{r} \mid \psi\rangle = \psi(\vec{r}).}$

4. **Pravděpodobnostní povaha měření**
Pro diskrétní spektrum: pokud měříme *A* ve stavu $|\psi(t)\rangle$, pak pravděpodobnost získání nedegenerované vlastní hodnoty a_n je:
$$\boxed{P_n(a_n) = \frac{|\langle\psi_n|\psi\rangle|^2}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{|a_n|^2}{\langle\psi|\psi\rangle},}$$
pokud je systém před měřením již ve stavu $|\psi_n\rangle$ pak měření *A* dává stoprocentně a_n : $\hat{A}|\psi_n\rangle = a_n|\psi_n\rangle$.
Pro spojité spektrum: předchozí výraz pro pravděpodobnost lze převést na hustotu pravděpodobnosti měření *A*, dá hodnotu mezi *a, a*+d*a* systému původně ve stavu $|\psi(t)\rangle$: $\frac{dP(a)}{da} = \frac{|\psi(a)|^2}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{|\psi(a)|^2}{\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(a')|^2 da'}$;
např. hustota pravděpodobnosti nalezení částice v intervalu *x, x*+d*x* je dána výrazem: $dP(x)/dx = |\psi(x)|^2/\langle\psi|\psi\rangle$.

5. **Časový vývoj systému**
Časový vývoj stavového vektoru (stavu, tedy vlnové funkce) je popsán časově závislou Schrödingerovou rovnicí: $\boxed{i\hbar\frac{\partial|\psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H}|\psi(t)\rangle,}$
kde $\hat{H}$ je Hamiltonův operátor reprezentující celkovou energii systému: $E = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}, t)$

Základní postuláty kvantové mechaniky

IMPORTANT

Stav systému v čase t

1. **Stav systému**
   Stav jakéhokoliv fyzikálního systému je specifikován v každém čase *t* pomocí stavového vektoru ket $|\psi(t)\rangle$ (tedy vlnové funkce, pokud promítneme stavový vektor na nějakou bázi), stavový vektor obsahuje (a slouží i jako prvek k dalšímu odvození) všechny potřebné informace o systému. Jakákoliv superpozice stavových vektorů je také stavový vektor.

2. **Pozorovatelné a operátory**
   Každá fyzikální měřitelná veličina *A*, zvaná v kv. mechanice pozorovatelná, či dynamická proměnná, je reprezentována lineárním hermiteovským operátorem $\hat{A}$ jehož vlastní vektory jsou kompletní bází.

3. **Měření a vlastní hodnoty operátorů**
   Měření pozorovatelné *A* může být formálně reprezentováno působením operátoru $\hat{A}$ na stavový vektor $|\psi(t)\rangle$. Jediným možným výsledkem takovéhoto působení je získání jedné z vlastních hodnot a_n (tyto jsou reálné) daného operátoru $\hat{A}$. Pokud je výsledkem měření pozorovatelné *A* na stavu $|\psi(t)\rangle$ vlastní hodnota a_n, pak se stav systému po měření okamžitě změní na $|\psi_n\rangle$:
   $$\hat{A}|\psi(t)\rangle = a_n|\psi_n\rangle,$$
   kde $\boxed{a_n = \langle\psi_n|\psi(t)\rangle}$. Poznámka: a_n je složka vektoru $|\psi(t)\rangle$ při jeho projekci na vlastní vektor $|\psi_n\rangle$.

   Vzpomeňme: $\boxed{a_j = (\phi_j, \psi)}$

   Vzpomeňme: $\boxed{\hat{\vec{R}}\,|\,\vec{r}\rangle = \vec{r}\,|\,\vec{r}\rangle \quad \langle\vec{r}\,|\,\psi\rangle = \psi(\vec{r}).}$

4. **Pravděpodobnostní povaha měření**
   Pro diskrétní spektrum: pokud měříme *A* ve stavu $|\psi(t)\rangle$, pak pravděpodobnost získání nedegenerované vlastní hodnoty a_n je:
   $$\boxed{P_n(a_n) = \frac{|\langle\psi_n|\psi\rangle|^2}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{|a_n|^2}{\langle\psi|\psi\rangle},}$$
   pokud je systém před měřením již ve stavu $|\psi_n\rangle$ pak měření *A* dává stoprocentně a_n : $\hat{A}|\psi_n\rangle = a_n|\psi_n\rangle$.
   Pro spojité spektrum: předchozí výraz pro pravděpodobnost lze převést na hustotu pravděpodobnosti měření *A*, dá hodnotu mezi *a, a+da* systému původně ve stavu $|\psi(t)\rangle$: $\dfrac{dP(a)}{da} = \dfrac{|\psi(a)|^2}{\langle\psi|\psi\rangle} = \dfrac{|\psi(a)|^2}{\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(a')|^2 da'};$
   např. hustota pravděpodobnosti nalezení částice v intervalu *x, x+*d*x* je dána výrazem: $dP(x)/dx = |\psi(x)|^2/\langle\psi|\psi\rangle.$

5. **Časový vývoj systému**
   Časový vývoj stavového vektoru (stavu, tedy vlnové funkce) je popsán časově závislou Schrödingerovou rovnicí: $\boxed{i\hbar\frac{\partial|\psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H}|\psi(t)\rangle,}$
   kde $\hat{H}$ je Hamiltonův operátor reprezentující celkovou energii systému: $E = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}, t)$

Vývoj systému v čase

[redacted]

1. Stav systému

K matematickému popsání kvantového systému používáme tedy komplexní funkci, která patří do Hilbertova prostoru, tzv. ket vektor $|\psi(t)\rangle$, který obsahuje veškeré informace o studovaném systému a ze kterého můžeme spočítat veškeré fyzikální veličiny, které nás zajímají. Jak jsme již ukázali, tento vektor můžeme reprezentovat dvěma způsoby:

- Jako vlnovou funkci v souřadnicové reprezentaci: $\psi(\vec{r},t) = \langle \vec{r}|\psi(t)\rangle.$
- Jako vlnovou funkci v hybnostní/momentové reprezentaci: $\Psi(\vec{p},t) = \langle \vec{p}|\psi(t)\rangle$

Vzpomeňme:

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

Čili abychom například popsali v kvantové mechanice 1D částici, použijeme vlnovou funkci $\psi(x,t)$ namísto dvou reálných čísel (souřadnice *x* a hybnost *p*) jako to děláme v klasické mechanice.

Takováto matematická funkce (stavový vektor) ovšem musí reprezentovat fyzikální systém, musí mít fyzikální smysl. Jaké jsou tedy matematické nároky na to, abychom z obecné vlnové funkce získali takovou, která popisuje fyzikální realitu?

Už jsme si to říkali, jedná se o tzv. standardní podmínky, pro vlnovou funkci i její první derivaci podle souřadnice:

- **Konečnost/omezenost funkcí** – tj. nemůže jít např. exponenciálně do nekonečna – nezapomeňme, počítáme z ní hustotu pravděpodobnosti!
- **Funkce musí být spojité (včetně prvních derivací)** – 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 > vlnová klubka.

[redacted]

1. Stav systému

Hustota pravděpodobnosti:

O smyslu vlnové funkce jsme také hovořili ve spojitosti s Bornem, pouze druhá mocnina její amplitudy $|\psi(\vec{r},t)|^2$ má fyzikální význam a to jako hustota pravděpodobnosti. Pak $|\psi(\vec{r},t)|^2 d^3r$ vyjadřuje pravděpodobnost nalezení částice v čase *t* v objemu d^3r lokalizovaném v intervalu $\vec{r}$ a $\vec{r}+d\vec{r}$.

Pro zopakování: celková pravděpodobnost nalezení částice kdekoliv v prostoru je rovna jedné…

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

Vlnová funkce, která splňuje výšeuvedenou relaci se nazývá normalizovanou. Jednotkově pak platí pro $\psi(\vec{r})$, že má rozměr $1/\sqrt{L^3}$, kde *L* je délka. Dále: $[|\psi(\vec{r})|^2] = 1/L^3$. Je dobré si uvědomit, že $\psi(\vec{r},t)$ a $e^{i\alpha}\psi(\vec{r},t)$, kde α je reálné číslo, reprezentují stejný stav. Proč? … Význam pro hustotu pravděpodobnosti?

Pro pochopení, která z následujících funkcí reprezentuje fyzikálně akceptovatelnou vlnovou funkci? Proč?

$$f(x) = 3\sin \pi x,\ g(x) = 4 - |x|,\ h^2(x) = 5x,\ e(x) = x^2.$$

[redacted]

1. Stav systému

Hustota pravděpodobnosti:

O smyslu vlnové funkce jsme také hovořili ve spojitosti s Bornem, pouze druhá mocnina její amplitudy $|\psi(\vec{r},t)|^2$ má fyzikální význam a to jako hustota pravděpodobnosti. Pak $|\psi(\vec{r},t)|^2 d^3r$ vyjadřuje pravděpodobnost nalezení částice v čase t v objemu d^3r lokalizovaném v intervalu $\vec{r}$ a $\vec{r}+d\vec{r}$.

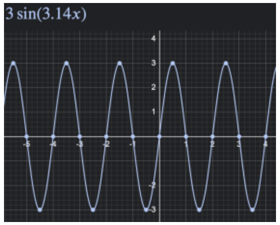
Pro zopakování: celková pravděpodobnost nalezení částice kdekoliv v prostoru je rovna jedné…

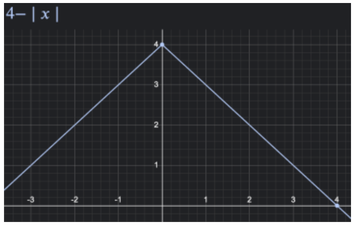
$$\int |\psi(\vec{r},t)|^2 d^3r = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dy \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(\vec{r},t)|^2 dz = 1.$$

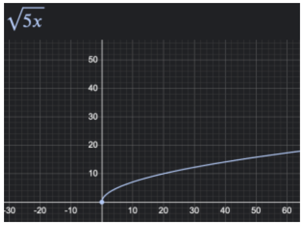
Vlnová funkce, která splňuje výšeuvedenou relaci se nazývá normalizovanou. Jednotkově pak platí pro $\psi(\vec{r})$, že má rozměr $1/\sqrt{L^3}$, kde L je délka. Dále: $[|\psi(\vec{r})|^2] = 1/L^3$. Je dobré si uvědomit, že $\psi(\vec{r},t)$ a $e^{i\alpha}\psi(\vec{r},t)$, kde α je reálné číslo, reprezentují stejný stav. Proč? … Význam pro hustotu pravděpodobnosti?

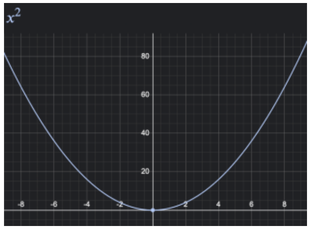
Pro pochopení, která z následujících funkcí reprezentuje fyzikálně akceptovatelnou vlnovou funkci? Proč?

$$f(x) = 3\sin \pi x,\ g(x) = 4 - |x|,\ h^2(x) = 5x,\ e(x) = x^2.$$









[redacted]

1. Stav systému

Princip superpozice:

Stav kvantového fyzikálního systému nemusí být reprezentován jen jednou vlnovou funkcí, může být reprezentován superpozicí dvou a více vlnových funkcí. Pokud vlnové funkce $\psi_1(\vec{r},t)$ a $\psi_2(\vec{r},t)$ odděleně vyhovují/jsou řešením Schrödingerovy rovnice, pak vlnová funkce $\psi(\vec{r},t) = \alpha_1\psi_1(\vec{r},t) + \alpha_2\psi_2(\vec{r},t)$ Schrödingerově rovnici vyhovuje také, kdy alfy jsou komplexní čísla.

Schrödingerova rovnice je lineární rovnice, čili z principu superpozice plyne, že lineární superpozice mnoha vlnových funkcí (které popisují různé povolené fyzikální stavy systému) dává novou vlnovou funkci, která reprezentuje možný stav systému také: $|\psi\rangle = \sum_i \alpha_i |\psi_i\rangle$, kde alfy jsou opět komplexní čísla a veličina $P = \left|\sum_i \alpha_i |\psi_i\rangle\right|^2$ je pravděpodobnost pro tento superponovaný stav.

Pokud budou jednotlivé složky $|\psi_i\rangle$ vzájemně ortonormální, pak bude tato pravděpodobnost rovna součtu dílčích pravděpodobností pro jednotlivé složky (stavy):

$$P = \left|\sum_i \alpha_i |\psi_i\rangle\right|^2 = \sum_i |\alpha_i|^2 = P_1 + P_2 + P_3 + \cdots$$

kde $P_i = |\alpha_i|^2$ je pravděpodobnost nalezení systému ve stavu $|\psi_i\rangle$.

Příklad pro vlnovou funkci: $|\psi\rangle = \frac{\sqrt{3}}{3}|\phi_1\rangle + \frac{2}{3}|\phi_2\rangle + \frac{\sqrt{2}}{3}|\phi_3\rangle$

Je normalizovaná? $\langle\psi|\psi\rangle = \frac{1}{3}\langle\phi_1|\phi_1\rangle + \frac{4}{9}\langle\phi_2|\phi_2\rangle + \frac{2}{9}\langle\phi_3|\phi_3\rangle = \frac{1}{3} + \frac{4}{9} + \frac{2}{9} = 1$

Jaká je pravděpodobnost nalezení systému ve stavu $|\phi_1\rangle$? $P_1 = |\langle\phi_1|\psi\rangle|^2 = \left|\frac{\sqrt{3}}{3}\langle\phi_1|\phi_1\rangle + \frac{2}{3}\langle\phi_1|\phi_2\rangle + \frac{\sqrt{2}}{3}\langle\phi_1|\phi_3\rangle\right|^2 = \frac{1}{3}$

Pro další stavy? $P_2 = |\langle\phi_2|\psi\rangle|^2 = \left|\frac{2}{3}\langle\phi_2|\phi_2\rangle\right|^2 = \frac{4}{9}$

$$P_3 = |\langle\phi_3|\psi\rangle|^2 = \left|\frac{\sqrt{2}}{3}\langle\phi_3|\phi_3\rangle\right|^2 = \frac{2}{9}$$

celkem tedy: $P = P_1 + P_2 + P_3 = \frac{1}{3} + \frac{4}{9} + \frac{2}{9} = 1$

[redacted]

2. Pozorovatelné a operátory:

<u>Pozorovatelnou nazýváme dynamickou proměnnou, kterou můžeme měřit</u>. My se setkáme s těmito proměnnými jako **souřadnice, hybnost, moment hybnosti a energie**. Jak reprezentujeme tyto proměnné v kvantové mechanice?

Dle druhého postulátu je každá měřitelná fyzikální veličina, tedy pozorovatelná (měřitelná), reprezentována hermiteovským operátorem. Jako například hybnost je v 1D souřadnicové reprezentaci reprezentována operátorem: $\hat{P} = -i\hbar\partial/\partial x$

Obecně, jakákoliv funkce $f(\vec{r}, \vec{p})$, která závisí na veličinách souřadnice/polohy a hybnosti, může být vyjádřena v kvantově mechanickém zápisu jako funkce operátorů polohy a hybnosti:

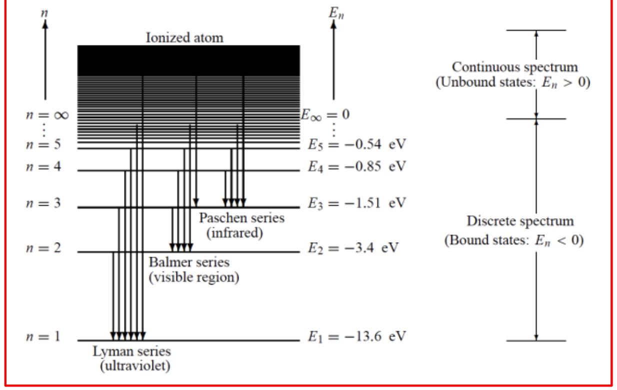
$$\boxed{\begin{aligned} &f(\vec{r}, \vec{p}) \quad \longrightarrow \quad F(\hat{\vec{R}}, \hat{\vec{P}}) = f(\hat{\vec{R}}, -i\hbar\vec{\nabla}), \\ &f(x, p) \rightarrow F(\hat{X},\ -i\hbar\partial/\partial x) \end{aligned}}$$

Například operátor pro Hamiltonián (proměnná, která je součtem kinetické a potenciální energie): $H = \frac{1}{2m}\vec{p}^{\,2} + V(\vec{r}, t)$

můžeme psát: $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\hat{\vec{R}}, t)$, kde ∇^2 je Laplaceův operátor daný: $\nabla^2 = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$.

A protože je operátor hybnosti $\hat{\vec{P}}$ hermiteovský a potenciální energie $V(\hat{\vec{R}}, t)$ je reálná funkce, pak i operátor Hamiltoniánu je hermiteovský. Víme, že vlastní hodnoty hermiteovského operátoru jsou reálné a tedy spektrum hermiteovského operátoru, které je tvořeno sadů vlastních hodnot, je také reálné.

Spektrum vlastních hodnot může být spojité i diskrétní (i směs obou):
- V případě vázaných stavů má Hamiltonián diskrétní spektrum
- V případě volných stavů má Hamiltonián spojité spektrum
- V případě periodických vázaných stavů má Hamiltonián pásové spektrum



Obecně, Hamiltonián bude mít vázané či spojité spektrum, ve stejném smyslu jako klasické proměnné budou mít vázané či volné hodnoty.

Operátory $\hat{\vec{P}}$ a $\hat{\vec{R}}$ mají spojitá spektra, protože *p* a *r* mohou nabývat kontinuálních hodnot. Energie je složitější, její spektrum může být smíšené.

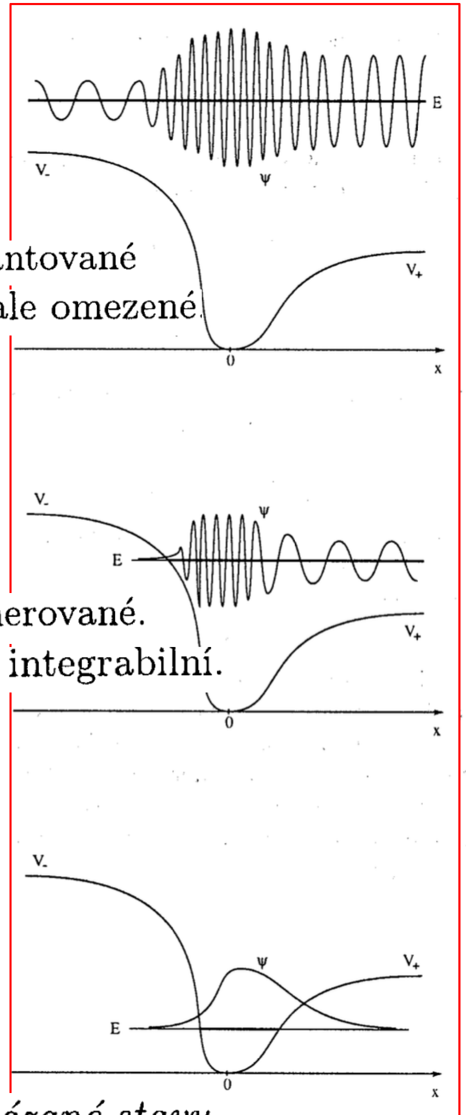
2. Pozorovatelné a operátory:

$$E > V_- \geq V_+ .$$

spojité energetické spektrum, které není kvantované

nejsou kvadraticky integrabilní, zůstávají ale omezené

energie je dvakrát degenerovaná



$$V_+ < E < V_-$$

Energetické spektrum je spojité a nedegenerované.

oscilují pro $x \to \infty$ a nejsou kvadraticky integrabilní.

tlumené pro $x \to -\infty$

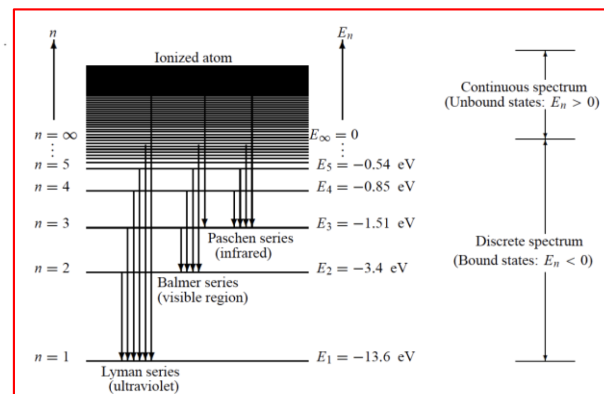
$$E < V_+ \leq V_- .$$

diskrétní energetické spektrum,

nedegenerované

kvadraticky integrabilní a nazývají se *vázané stavy*

Pokud funkce není kvadraticky integrovatelná?
>>>
volná částice (~ de Broglieova vlna, ~ bázový vektor)
s ostře definovanou hybnost či energii – což není fyzikální



[redacted]

Některé pozorovatelné a jejich operátory (zde v souřadnicové reprezentaci):

$\vec{r}$	$\hat{\vec{R}}$
$\vec{p}$	$\hat{\vec{P}} = -i\hbar\vec{\nabla}$
$T = \frac{p^2}{2m}$	$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$
$E = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}, t)$	$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{V}(\hat{\vec{R}}, t)$
$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$	$\hat{\vec{L}} = -i\hbar\hat{\vec{R}} \times \vec{\nabla}$

2. Pozorovatelné a operátory

Podle pátého postulátu, kde je uvedena Schrödingerova časově závislá rovnice: $i\hbar\frac{\partial|\psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H}|\psi(t)\rangle,$ můžeme říci, že celková energie systému je dána skrze operátor: $\hat{H} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}.$

Lze to ukázat ještě následovně: volná částice s hybností $\vec{p}$ a energií E je dána vlnovou funkcí $\psi(\vec{r}, t) = Ae^{i(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et)/\hbar}$, pokud ji derivujeme podle času, tak dostáváme $i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = E\psi(\vec{r}, t).$

Podobně, podívejme se na vlastní funkce a hodnoty operátoru hybnosti: $-i\hbar\vec{\nabla}\psi(\vec{r}) = \vec{p}\psi(\vec{r})$,
řešením této rovnice je funkce: $\psi(\vec{r}) = Ae^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}$

A protože $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ je vlastní hodnota operátoru $\hat{\vec{P}}$ tak vlastní funkce je redukována na: $\psi(\vec{r}) = Ae^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$

A rovnice pro vlastní hodnoty a vlastní funkce operátoru hybnosti bude vypadat: $\hat{\vec{P}}\psi(\vec{r}) = \hbar\vec{k}\psi(\vec{r}).$

Z výše uvedeného je tedy zřejmé, že operátory reprezentují jedna ku jedné měřitelné veličiny, pozorovatelné.

[redacted]

Některé pozorovatelné a jejich operátory (zde v souřadnicové reprezentaci):

$\vec{r}$	$\hat{\vec{R}}$
$\vec{p}$	$\hat{\vec{P}} = -i\hbar\vec{\nabla}$
$T = \frac{p^2}{2m}$	$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$
$E = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}, t)$	$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{V}(\hat{\vec{R}}, t)$
$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$	$\hat{\vec{L}} = -i\hbar\hat{\vec{R}} \times \vec{\nabla}$

2. Pozorovatelné a operátory

Jako příklad najdeme operátor pro moment hybnosti (v souřadnicové reprezentaci)…

Klasicky zapíšeme moment hybnosti ve třech dimenzích následovně: $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = l_x\vec{i} + l_y\vec{j} + l_z\vec{k}$, kde $l_x = yp_z - zp_y$, $l_y = zp_x - xp_z, l_z = xp_y - yp_x.$

Abychom našli operátor momentu hybnosti, potřebujeme nahradit $\vec{r}$ a $\vec{p}$ jim odpovídajícími operátory $\hat{\vec{R}}$ a $\hat{\vec{P}} = -i\hbar\vec{\nabla}$:
A tedy: $\hat{\vec{L}} = -i\hbar\hat{\vec{R}} \times \vec{\nabla}.$

Což vede na následující vztahy:
$$
\begin{aligned}
\hat{L}_x &= \hat{Y}\hat{P}_z - \hat{Z}\hat{P}_y = -i\hbar\left(\hat{Y}\frac{\partial}{\partial z} - \hat{Z}\frac{\partial}{\partial y}\right),\\
\hat{L}_y &= \hat{Z}\hat{P}_x - \hat{X}\hat{P}_z = -i\hbar\left(\hat{Z}\frac{\partial}{\partial x} - \hat{X}\frac{\partial}{\partial Z}\right),\\
\hat{L}_z &= \hat{X}\hat{P}_y - \hat{Y}\hat{P}_x = -i\hbar\left(\hat{X}\frac{\partial}{\partial y} - \hat{Y}\frac{\partial}{\partial x}\right).
\end{aligned}
$$

<u>Je třeba si také uvědomit, že operátory souřadnice a hybnosti nekomutují, záleží tedy na pořadí!</u>

[redacted]

3. Měření a vlastní hodnoty operátorů

Kvantová teorie popisuje výsledky měření, bez spekulací o neměřitelném.

V klasické fyzice měřením zkoumaný systém ovlivníme jen málo (např. měření vzdálenosti laserem) a můžeme tento vliv zanedbat, v mikrosvětě měření ovlivní studovaný systém zásadním způsobem (např. laserem indukovaná fluorescence atomů plynu při měření hustoty metastabilních částic) a vliv měření zanedbat nemůžeme.

Uvažujme následující příklad: měříme pozici elektronů v atomu vodíku pomocí rozptylu světla/fotonů přímo na těch elektronech.

- Abychom určili pozici co nejpřesněji, použijeme co nejkratší vlnové délky světelného záření, fotonů
- Rozměry elektronových drah jsou v řádu 10^{-10} m a tedy potřebujeme záření o menší vlnové délce a tedy energii:

$$h\nu = h\frac{c}{\lambda} = h\frac{3\times 10^{8}}{10^{-10}} \sim 10^{4}\,\mathrm{eV}$$

- Pokud takový foton bude interagovat s elektronem v elektronovém obalu vodíku, který má ionizační energii 13.6 eV, tak samozřejmě tento elektron nejen ovlivní, ale kompletně jej vyhodí z orbity – vodík tedy bude ionizovaný

Měření změní stav kvantového systému: měření tedy v teorii reprezentujeme působením operátoru, kdy po jeho provedení, po jeho působení, bude systém v jednom z vlastních stavů tohoto operátoru (v jedné z vlastních hodnot – reálných hodnot veličiny reprezentované operátorem). Pokud máme systém ve stavu $|\psi\rangle$, může být reprezentován superpozicí stavů:

$$|\psi\rangle = \sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|\psi\rangle = \sum_n a_n|\psi_n\rangle.$$

Akt měření *A* tedy změní stav systému z $|\psi\rangle$ na jeden z jeho vlastních stavů $|\psi_n\rangle$ operátoru $\hat{A}$ a výsledkem měření je vlastní hodnota a_n.

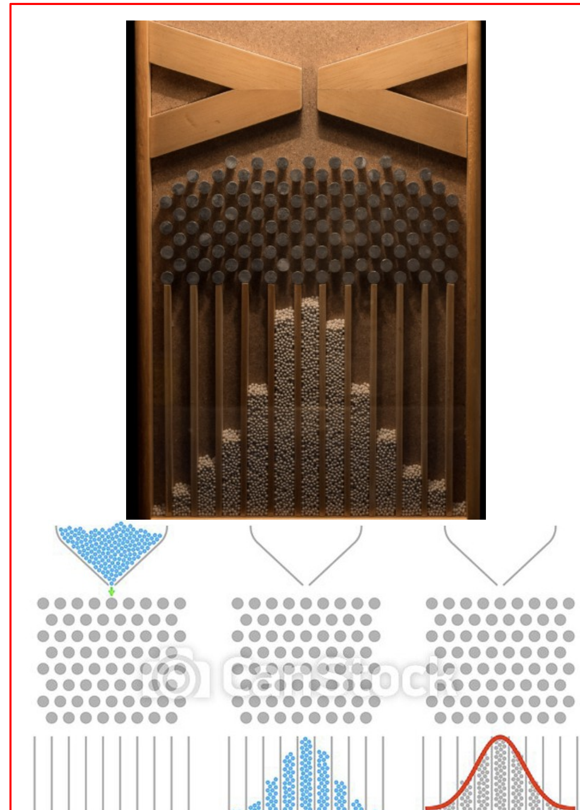
Jedinou vyjímkou je, když se systém již v jednom z vlastních stavů měřené veličiny nachází, když tedy bude před měřením v $|\psi_n\rangle$ pak výsledkem měření bude se stoprocentní pravděpodobností hodnota a_n. Bez toho aby se změnil stav, systém zůstane tedy v $|\psi_n\rangle$.

3. Měření a vlastní hodnoty operátorů a 4. Pravděpodobnostní povaha měření

Před každým měřením v kvantové fyzice, my samozřejmě nevíme, ve kterém z jeho vlastních stavů systém po měření skončí, známe pouze pravděpodobnosti. Jak jsme si již řekli, tyto jsou dány jako $P_i = |\alpha_i|^2$, pravděpodobnost nalezení ve stavu $|\psi_i\rangle$.

Postulát číslo 4 nám říká, že pravděpodobnost nalezení systému v jednom z jeho vlastních stavů $|\psi_n\rangle$ je dána: $P_n = \dfrac{|\langle\psi_n|\psi\rangle|^2}{\langle\psi|\psi\rangle}$.

Nezapomeňme, že vlnová funkce nepředpovídá výsledek jednotlivých měření, místo toho, určuje pravděpodobnostní rozdělovací funkci $P = |\psi|^2$ přes mnohá měření identických stavů najednou.



Střední hodnota:

Vzpomeňme: $\boxed{\hat{A}|\psi(t)\rangle = a_n|\psi_n\rangle,}$

Střední hodnota $\langle\hat{A}\rangle$ pozorovatelné $\hat{A}$ na stavu $|\psi\rangle$ je definována: $\langle\hat{A}\rangle = \dfrac{\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$.
Je to reálné číslo a tedy pro energii: $E = \langle\hat{H}\rangle = \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle/\langle\psi|\psi\rangle$.

Střední hodnota reprezentuje průměrný výsledek měření $\hat{A}$ na stavu $|\psi\rangle$. Pro lepší porozumění můžeme psát:

$$\langle\hat{A}\rangle = \frac{1}{\langle\psi|\psi\rangle}\sum_{nm}\langle\psi|\psi_m\rangle\langle\psi_m|\hat{A}|\psi_n\rangle\langle\psi_n|\psi\rangle = \sum_n a_n \frac{|\langle\psi_n|\psi\rangle|^2}{\langle\psi|\psi\rangle},$$

Kde jsme použili $\langle\psi_m|\hat{A}|\psi_n\rangle = a_n\delta_{nm}$.

A protože $|\langle\psi_n|\psi\rangle|^2/\langle\psi|\psi\rangle$ dává pravděpodobnost nalezení P_n vlastní hodnoty a_n, pak můžeme střední hodnotu opravdu označit za průměr několika měření:

$$\boxed{\langle\hat{A}\rangle = \sum_n a_n \frac{|\langle\psi_n|\psi\rangle|^2}{\langle\psi|\psi\rangle} = \sum_n a_n P_n}$$

IMPORTANT

Pro kontinuální rozdělení pravděpodobností (spojitá spektra), můžeme psát:

$$\boxed{\langle\hat{A}\rangle = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} a\,|\psi(a)|^2 da}{\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(a)|^2 da} = \int_{-\infty}^{+\infty} a\,dP(a).}$$

IMPORTANT

Střední hodnota pozorovatelné se získá experimentem následovně: připraví se velké množství identických systémů ve stejném stavu, výsledky měření jsou $a_1, a_2, \ldots, a_n, \ldots$; odpovídající pravděpodobnosti jsou $P_1, P_2, \ldots, P_n, \ldots$. A průměrná hodnota ze všech těchto měření je pak ta střední hodnota $\langle\hat{A}\rangle$

3. Měření a vlastní hodnoty operátorů a 4. Pravděpodobnostní povaha měření

Příklad: uvažujme systém v následujícím stavu:
$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{19}}|\phi_1\rangle + \frac{2}{\sqrt{19}}|\phi_2\rangle + \sqrt{\frac{2}{19}}|\phi_3\rangle + \sqrt{\frac{3}{19}}|\phi_4\rangle + \sqrt{\frac{5}{19}}|\phi_5\rangle,$$

Kde $|\phi_n\rangle$ jsou vlastní stavy Hamiltoniánu studovaného systému $\hat{H}|\phi_n\rangle = n\varepsilon_0|\phi_n\rangle$ kde $n = 1, 2, 3, 4, 5$, a ε_0 má rozměr energie.

Pokud provedeme mnoho měření na uvedeném systému, jaké budou výsledky měření a s jakou pravděpodobností?

Nejdříve si můžeme ověřit, zda je $|\psi\rangle$ normalizovaný: $\langle\psi|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{5} a_n^2\langle\phi_n|\phi_n\rangle = \sum_{n=1}^{5} a_n^2 = \frac{1}{19} + \frac{4}{19} + \frac{2}{19} + \frac{3}{19} + \frac{5}{19} = \frac{15}{19},$
Přitom $\langle\phi_j|\phi_k\rangle = \delta_{jk}$ a $j, k = 1, 2, 3, 4, 5.$

Protože platí: $E_n = \langle\phi_n|\hat{H}|\phi_n\rangle$ (čili rovnice pro vlastní hodnoty a funkce operátoru), pak $E_n = \langle\phi_n|\hat{H}|\phi_n\rangle = n\varepsilon_0 \; (n = 1, 2, 3, 4, 5)$
A tedy vlastní hodnoty budou mít následující velikosti: $E_1 = \varepsilon_0,\ E_2 = 2\varepsilon_0,\ E_3 = 3\varepsilon_0,\ E_4 = 4\varepsilon_0,\ E_5 = 5\varepsilon_0$

S pravděpodobnostmi danými:

$$P_1(E_1) = \frac{|\langle\phi_1|\psi\rangle|^2}{\langle\psi|\psi\rangle} = \left|\frac{1}{\sqrt{19}}\langle\phi_1|\phi_1\rangle\right|^2 \times \frac{19}{15} = \frac{1}{15}, \qquad P_2(E_2) = \frac{|\langle\phi_2|\psi\rangle|^2}{\langle\psi|\psi\rangle} = \left|\frac{2}{\sqrt{19}}\langle\phi_2|\phi_2\rangle\right|^2 \times \frac{19}{15} = \frac{4}{15},$$

$$P_3(E_3) = \frac{|\langle\phi_3|\psi\rangle|^2}{\langle\psi|\psi\rangle} = \left|\sqrt{\frac{2}{19}}\langle\phi_3|\phi_3\rangle\right|^2 \times \frac{19}{15} = \frac{2}{15}, \qquad P_4(E_4) = \frac{|\langle\phi_4|\psi\rangle|^2}{\langle\psi|\psi\rangle} = \left|\sqrt{\frac{3}{19}}\langle\phi_4|\phi_4\rangle\right|^2 \times \frac{19}{15} = \frac{3}{15},$$

$$P_5(E_5) = \frac{|\langle\phi_5|\psi\rangle|^2}{\langle\psi|\psi\rangle} = \left|\sqrt{\frac{5}{19}}\langle\phi_5|\phi_5\rangle\right|^2 \times \frac{19}{15} = \frac{5}{15},$$

Střední hodnota energie systému bude: $E = \sum_{j=1}^{5} P_j E_j = \frac{1}{15}\varepsilon_0 + \frac{8}{15}\varepsilon_0 + \frac{6}{15}\varepsilon_0 + \frac{12}{15}\varepsilon_0 + \frac{25}{15}\varepsilon_0 = \frac{52}{15}\varepsilon_0.$

Což můžeme získat i ze střední hodnoty Hamiltoniánu:
$$E = \frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{19}{15}\sum_{n=1}^{5} a_n^2\langle\phi_n|\hat{H}|\phi_n\rangle = \frac{19}{15}\left(\frac{1}{19} + \frac{8}{19} + \frac{6}{19} + \frac{12}{19} + \frac{25}{19}\right)\varepsilon_0 = \frac{52}{15}\varepsilon_0$$

[redacted]

3./4. Měření v kvantové mechanice – současná měřitelnost

O dvou pozorovatelných A a B řekneme, že jsou kompatibilní, když jejich operátory komutují: $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$

Víme, že měření v kvantové mechanice ovlivní měřený fyzikální systém. Pokud nejdříve budeme měřit A, tak změníme stav systému, ne kterém bychom pak měřili B. Pokud bychom měřili nejdříve B, pak systém pro měření A bude také v jiném stavu. Podle toho, kterou pozorovatelnou budeme měřit nejdříve, skončí systém v rozdílných stavech.

Pokud operátory pro A a B nekomutují a systém bude ve vlastním stavu $|\psi_n^{(a)}\rangle$, pak budeme-li znovu měřit A, pak: $\hat{A}|\psi_n^{(a)}\rangle = a_n|\psi_n^{(a)}\rangle$ A to se stoprocentní pravděpodobností. Pokud poté budeme měřit B, tak systém přejde do vlastního stavu operátoru B. A pokud znovu změříme A, pak získáme jiný stav než a_n. O tom, jaká bude nová hodnota A nemůžeme s jistotou nic říci, jen vyčíslit pravděpodobnost. Pokud chceme tedy meŕit A, pak rozložíme vlastní stavy B do vlastních stavů A - a tedy získáme jejich pravděpodobnost.

>>> Pokud tedy operátory A a B nekomutují, jejich pozorovatelné nemohou být měřeny zároveň, záleží na pořadí, kterým měřením začneme!

Pokud operátory A a B komutují, pak na pořadí měření nezáleží! Protože, pokud operátory komutují, pak mají společné (sdílené) vlastní vektory. (Platí jak pro degenerované tak nedegenerované stavy.) Pro nedegenerované:

Protože komutují, tak platí: $\langle\psi_m|[\hat{A}, \hat{B}]|\psi_n\rangle = (a_m - a_n)\langle\psi_m|\hat{B}|\psi_n\rangle = 0$ … výpočet zkuste na cvičení

Proto také $\langle\psi_m|\hat{B}|\psi_n\rangle$ musí být nulové, pokud zrovna neplatí: $a_n = a_m$ a tedy: $\langle\psi_m|\hat{B}|\psi_n\rangle = \langle\psi_n|\hat{B}|\psi_n\rangle \propto \delta_{nm}$.

To znamená, že $|\psi_n\rangle$ jsou sdílené (simultánní) vlastní vektory operátorů A a B.

Pokud pro kompatibilní operátory budeme měřit střídavě A a B, tak budeme získávat vždy stejné vlastní hodnoty a_n a b_n s jistotou. Říkáme, že kompatibilní pozorovatelné jsou současně měřitelné s libovolnou přesností, nekompatibilní nejsou.

[redacted]

3./4. Měření a relace neurčitosti

Dříve jsme si řekli, že relace neurčitosti, která se vztahuje ke dvěma pozorovatelným A a B je dána: $\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2}|\langle[\hat{A},\ \hat{B}]\rangle|,$

Kde $\Delta A = \sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2}.$

Ukažme si konkrétně, jak se to týká pozorovatelných polohy a hybnosti. Složitým výpočtem přes vlnová klubka jste to již spočítali na prvním cvičení.

Protože tyto pozorovatelné nejsou kompatibilní, pak je nemůžeme změřit zároveň s nekonečnou přesností. Protože platí $[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar$
Tak neexistuje žádný stav, který je vlastním stavem jak $\hat{X}$ tak i pro $\hat{P}$.

Relace neurčitosti je: $\Delta x \, \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}.$

A tedy měření polohy a hybnosti interferují, nejsou současně měřitelné.

[redacted]

Časový vývoj systému

V souřadnicové reprezentaci lze časově závislou Schrödingerovu rovnici zapsat pro částici o hmotnosti *m* a časově závislý potenciál *V(r,t)* následovně:

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

Uvažujme pro zjednodušení, že *V = V(r)* a je tedy časově nezávislý. To nám umožní separovat proměnné pro řešení rovnice na časovou a prostorovou složku: $\Psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r})f(t).$

Dosadíme-li toto předpokládané řešení zpět do SR pak po vydělení tímto řešením dostaneme: $i\hbar\frac{1}{f(t)}\frac{df(t)}{dt} = \frac{1}{\psi(\vec{r})}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) + \hat{V}(\vec{r})\psi(\vec{r})\right].$

Aby tato rovnost byla splněna, pak jediná možnost je, že se obě strany budou rovnat číslu, konstantě, kterou si označíme E.

Rozdělíme rovnici na pouze časově závislou: $i\hbar\frac{df(t)}{dt} = Ef(t),$

A prostorově závislou: $\boxed{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{V}(\vec{r})\right]\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}).}$

Vzpomeňme:

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

Kterou označujeme jako stacionární Schrödingerovu rovnici – SSR – pro částici s hmotností m a v časově neproměnném potenciálu V.

Řešením časové rovnice je: $f(t) = e^{-iEt/\hbar}$ a tedy stavová vlnová funkce bude: $\Psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r})e^{-iEt/\hbar}.$

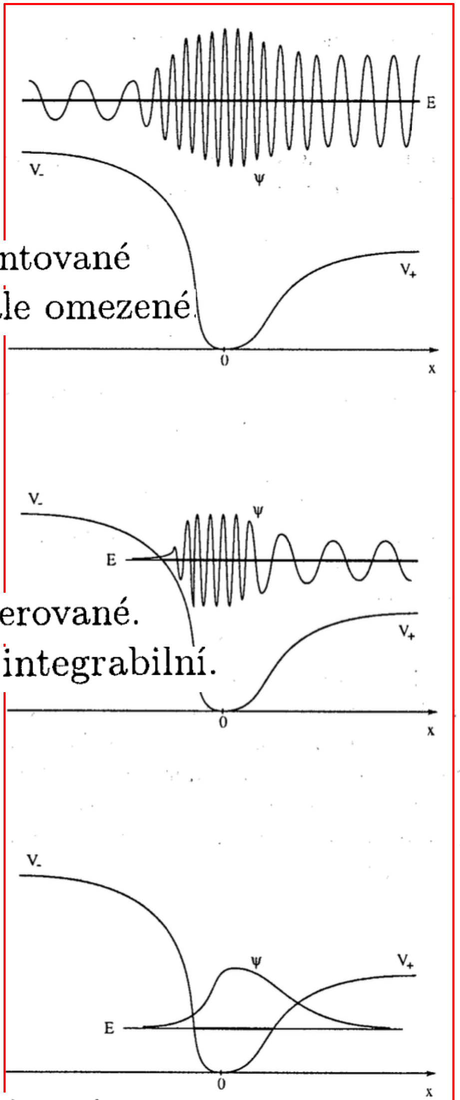
Toto řešení Schrödingerovy rovnice pro časově nezávislý potenciál se nazývá stacionární řešení. Protože hustota pravděpodobnosti nezávisí na čase: $|\Psi(\vec{r},t)|^2 = |\psi(\vec{r})e^{-iEt/\hbar}|^2 = |\psi(\vec{r})|^2.$

Je třeba si také uvědomit, že takový stav má přesně danou hodnotu energie: $E = \hbar\omega.$

Sada hodnot energie, která je řešením této rovnice se nazývá energiové spektrum systému. Stavy odpovídající diskrétním a kontinuálním spektrům se nazývají vázané a volné.

[redacted]

2. Pozorovatelné a operátory:



$$E > V_- \geq V_+ .$$

spojité energetické spektrum, které není kvantované

nejsou kvadraticky integrabilní, zůstávají ale omezené

energie je dvakrát degenerovaná

$$V_+ < E < V_-$$

Energetické spektrum je spojité a nedegenerované.

oscilují pro $x \to \infty$ a nejsou kvadraticky integrabilní.

tlumené pro $x \to -\infty$

$$E < V_+ \leq V_- .$$

diskrétní energetické spektrum,

nedegenerované

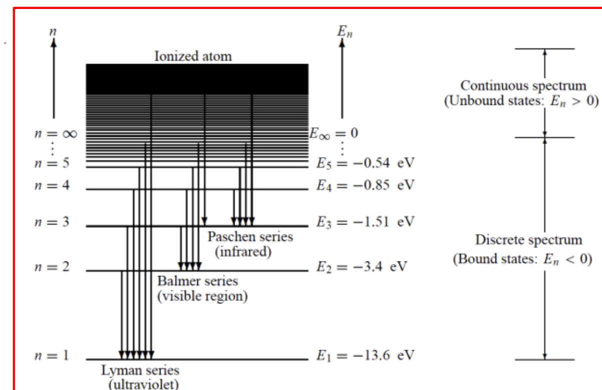
kvadraticky integrabilní a nazývají se *vázané stavy*

Pokud funkce není kvadraticky integrovatelná?

>>>

volná částice (~ de Broglieova vlna, ~ bázový vektor)

- fyzikálně nemůže mít ostře definovanou hybnost či energii



Časový vývoj systému - pokračování

Obecné řešením časově <u>závislé</u> SR lze zapsat jako rozvoj do stacionárních stavů $\psi_n(\vec{r})\exp(-iE_n t/\hbar)$.

Tedy: $\Psi(\vec{r},t)=\sum_n c_n\psi_n(\vec{r})\exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right),$ kde $c_n=\langle\psi_n|\Psi(t=0)\rangle=\int\psi_n^*(\vec{r})\psi(\vec{r})\,d^3r.$

Toto řešení samotné není nutně stacionárním stavem, protože lineární kombinace stacionárních stavů není nutně stacionární stav.

V jednorozměrném vyjádření jsou časově závislá SR a SSR dány:

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

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\hat{V}(x)\psi(x)=E\psi(x).}$$

[redacted]

Schrödingerova rovnice a vlnové klubko

Je možné odvodit Schrödingerovu rovnici z fundamentálních principů? Bohužel ne, můžeme ji pouze postulovat a neustále ověřovat její platnost. Můžeme se ale také pokusit o tzv. rozumný odhad kroků pro její sepsání, založený na naší předchozí zkušenosti s vlnovými klubky.

Dříve jsme si popsali vlnové klubko částice o energii E a hybnosti p pohybující se v potenciálu V jako:

$$\begin{aligned}\Psi(x,t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\tilde{\phi}(p)\exp\left[\frac{i}{\hbar}(px-Et)\right]dp\\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\tilde{\phi}(p)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(px-\left(\frac{p^2}{2m}+V\right)t\right)\right]dp\end{aligned}$$

Nezapomeňme, že platí: $k = p/\hbar, \hbar\omega = E = p^2/(2m) + V.$

Parciální derivace dle času dá: $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\tilde{\phi}(p)\left(\frac{p^2}{2m}+V\right)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(px-\left(\frac{p^2}{2m}+V\right)t\right)\right]dp.$

Protože platí: $p^2/(2m) = -(\hbar^2/2m)\partial^2/\partial x^2$ a pokud V je konstantní, pak $-(\hbar^2/2m)\partial^2/\partial x^2 + V$ můžeme vytknout před integrál a psát:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V\right)\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\tilde{\phi}(p)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(px-\left(\frac{p^2}{2m}+V\right)t\right)\right]dp$$

Čili pro prostorově závislý potenciál máme Schrödingerovu rovnici:

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

[redacted]

Zachování pravděpodobnosti

časově závislá SR

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

Ukažme, že norma $\langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle = \int|\Psi(\vec{r},t)|^2\,d^3r,$ je nezávislá na čase. Tedy, pokud je $|\Psi(t)\rangle$ normalizovaný, pak takovým zůstane i pro další časové okamžiky. To je přímým důsledkem hermicity Hamiltonova operátoru.

Abychom ukázali, že norma zůstává konstantní v čase, stačí potvrdit, že derivace dle času bude nulová, tedy:

$$\frac{d}{dt}\langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle = \left(\frac{d}{dt}\langle\Psi(t)|\right)|\Psi(t)\rangle + \langle\Psi(t)|\left(\frac{d|\Psi(t)\rangle}{dt}\right),$$

Kde $\frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}|\Psi(t)\rangle,\quad \frac{d}{dt}\langle\Psi(t)| = \frac{i}{\hbar}\langle\Psi(t)|\hat{H}^\dagger = \frac{i}{\hbar}\langle\Psi(t)|\hat{H}.$ (časová SR) Po doplnění do výše uvedené rovnice pak dostaneme: $\frac{d}{dt}\langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle = \left(\frac{i}{\hbar}-\frac{i}{\hbar}\right)\langle\Psi(t)|\hat{H}|\Psi(t)\rangle = 0.$

Spočítejme hustotu pravděpodobnosti v souřadnicové reprezentaci. Začneme časově závislou SR a komplexně sdruženou č.z.SR:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\vec{r},t)+\hat{V}(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t) \qquad -i\hbar\frac{\partial\Psi^*(\vec{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi^*(\vec{r},t)+\hat{V}(\vec{r},t)\Psi^*(\vec{r},t).$$

Po vynásobení první rovnice $\Psi^*(\vec{r},t)$ a druhé $\Psi(\vec{r},t)$ a vzájemném odečtení získáme:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left[\Psi^*(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t)\right] = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\Psi^*(\vec{r},t)\nabla^2\Psi(\vec{r},t)-\Psi\nabla^2\Psi^*\right].$$

Kterou můžeme přepsat jako: $\boxed{\frac{\partial\rho(\vec{r},t)}{\partial t}+\vec{\nabla}\cdot\vec{J}=0,}$

Kde: $\boxed{\rho(\vec{r},t)=\Psi^*(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t), \qquad \vec{J}(\vec{r},t)=\frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi\vec{\nabla}\Psi^*-\Psi^*\vec{\nabla}\Psi\right);}$

Hustota pravděpodobnosti je značena $\rho(\vec{r},t)$ a proudová hustota pravděpodobnosti (hustota toku pravděpodobnosti) $\vec{J}(\vec{r},t)$.
Výše uvedené rovnice nám tedy popisují zachování pravděpodobnosti, je to rovnice kontinuity.

[redacted]

časově závislá SR

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

Časový vývoj středních hodnot

Pokud je vlnový vektor normalizovaný pak můžeme psát pro jeho střední hodnotu: $\langle \hat{A} \rangle = \langle \Psi(t)|\hat{A}|\Psi(t)\rangle.$

Použitím časové SR pak lze psát derivaci střední hodnoty jako: $\frac{d}{dt}\langle \hat{A}\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle \Psi(t)|\hat{A}\hat{H} - \hat{H}\hat{A}|\Psi(t)\rangle + \langle \Psi(t)|\frac{\partial A}{\partial t}|\Psi(t)\rangle$

Nebo také: $\boxed{\frac{d}{dt}\langle \hat{A}\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle [\hat{A}, \hat{H}]\rangle + \langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\rangle.}$

Z tohoto výrazu plynou dva důsledky:
- pokud pozorovatelná A nezávisí explicitně na čase pak její parciální časová derivace bude nulová a její změna dána prvním členem.
- pokud bude navíc operátor pozorovatelné A komutovat s Hamiltoniánem, pak se střední hodnota nebude měnit s časem, derivace dle času bude nulová

Pokud obojí zmíněné nastává pak je pozorovatelná neměnící se s časem:

$$\boxed{\text{If} \quad [\hat{H}, \hat{A}] = 0 \quad \text{and} \quad \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 0 \Longrightarrow \frac{d\langle \hat{A}\rangle}{dt} = 0 \Longrightarrow \langle \hat{A}\rangle = \text{constant.}}$$

Příkladem může být energie, hybnost či moment hybnosti v izolovaném systému – platí pro ně zákon zachování:

$$d\langle \hat{H}\rangle/dt = 0, \; d\langle \hat{\vec{P}}\rangle/dt = 0, \; d\langle \hat{\vec{L}}\rangle/dt = 0.$$

Z klasické mechaniky víte, že zákony zachování energie, hybnosti a momentu hybnosti jsou dány homogenitou času, homogenitou prostoru a isotropií prostoru.

Příklad pro hybnost viz např. kniha Zettili.

[redacted]

Propojení kvantové a klasické mechaniky

Pokud má být kvantová teorie obecnější teorií než klasická mechanika, pak ji musí obsahovat jako limitní případ. Pro ilustraci vezměme časový vývoj středních hodnot operátorů polohy a hybnosti pro částici pohybující se v potenciálu V(r) a srovnejme je s výsledky klasické fyziky.

V rámci vlnové mechaniky nezávisí operátory hybnosti a polohy explicitně na čase: $\langle \partial \hat{\vec{R}} / \partial t \rangle$ a $\langle \partial \hat{\vec{P}} / \partial t \rangle$ jsou tedy nulové.

Vložíme-li $\hat{H} = \hat{\vec{P}}^{\,2}/(2m) + \hat{V}(\hat{\vec{R}}, t)$ do $\frac{d}{dt}\langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle + \langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \rangle$ a využijeme-li faktu, že operátor polohy komutuje s operátorem potenciálu V, pak:

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{\vec{R}} \rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle [\hat{\vec{R}}, \hat{H}] \rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle [\hat{\vec{R}}, \frac{\hat{\vec{P}}^{\,2}}{2m} + \hat{V}(\hat{\vec{R}}, t)] \rangle = \frac{1}{2im\hbar}\langle [\hat{\vec{R}}, \hat{\vec{P}}^{\,2}] \rangle.$$

A protože platí: $[\hat{\vec{R}}, \hat{\vec{P}}^{\,2}] = 2i\hbar \hat{\vec{P}}$, tak dostaneme:

$$\boxed{\frac{d}{dt}\langle \hat{\vec{R}} \rangle = \frac{1}{m}\langle \hat{\vec{P}} \rangle.}$$

Dále použijeme-li: $[\hat{\vec{P}}, \hat{V}(\hat{\vec{R}}, t)] = -i\hbar \vec{\nabla} \hat{V}(\vec{R}, t)$, můžeme psát:

$$\boxed{\frac{d}{dt}\langle \hat{\vec{P}} \rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle [\hat{\vec{P}}, \hat{V}(\hat{\vec{R}}, t)] \rangle = -\langle \vec{\nabla} \hat{V}(\hat{\vec{R}}, t) \rangle.}$$

Výše uvedené rovnice pro časový vývoj středních hodnot polohy a hybnosti jsou tzv. Ehrenfestovy rovnice, Ehrenfestův theorém.

Tyto se redukují v klasické mechanice skrze Hamilton-Jacobiho rovnice na Newtonův druhý pohybový zákon:

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = m\frac{d^2\vec{r}}{dt^2} = -\vec{\nabla} V(\vec{r}).$$

Centrum vlnového klubka tedy můžeme opravdu vnímat jako polohu částice pohybující se v potenciálu V(r).

Kvantová a klasická mechanika

Bohrův princip korespondence:
Kvantová mechanika má v limitním případě přejít do klasické.

Pokud se vlnová délka De Broglieovy vlny blíží k nule pak přecházíme od kvantové ke klasické mechanice.

[redacted]

IMPORTANT

SHRNUTÍ - Základní postuláty kvantové mechaniky

Stav systému v čase *t*

1. **Stav systému**
   Stav jakéhokoliv fyzikálního systému je specifikován v každém čase *t* pomocí stavového vektoru ket $|\psi(t)\rangle$ (tedy vlnové funkce, pokud promítneme stavový vektor na nějakou bázi), stavový vektor obsahuje (a slouží i jako prvek k dalšímu odvození) všechny potřebné informace o systému. Jakákoliv superpozice stavových vektorů je také stavový vektor.

2. **Pozorovatelné a operátory**
   Každá fyzikální měřitelná veličina *A*, zvaná v kv. mechanice pozorovatelná, či dynamická proměnná, je reprezentována lineárním hermiteovským operátorem $\hat{A}$ jehož vlastní vektory jsou kompletní bází.

3. **Měření a vlastní hodnoty operátorů**
   Měření pozorovatelné *A* může být formálně reprezentováno působením operátoru $\hat{A}$ na stavový vektor $|\psi(t)\rangle$. Jediným možným výsledkem takovéhoto působení je získání jedné z vlastních hodnot a_n (tyto jsou reálné) daného operátoru $\hat{A}$. Pokud je výsledkem měření pozorovatelné *A* na stavu $|\psi(t)\rangle$ vlastní hodnota a_n, pak se stav systému po měření okamžitě změní na $|\psi_n\rangle$:
   $$\hat{A}|\psi(t)\rangle = a_n|\psi_n\rangle,$$
   kde $\boxed{a_n = \langle\psi_n|\psi(t)\rangle}$. Poznámka: a_n je složka vektoru $|\psi(t)\rangle$ při jeho projekci na vlastní vektor $|\psi_n\rangle$.

   Vzpomeňme: $\boxed{a_j = (\phi_j, \psi)}$

   Vzpomeňme: $\hat{\vec{R}}\,|\,\vec{r}\rangle = \vec{r}\,|\,\vec{r}\rangle \quad \langle\vec{r}\,|\,\psi\rangle = \psi(\vec{r}).$

4. **Pravděpodobnostní povaha měření**
   Pro diskrétní spektrum: pokud měříme *A* ve stavu $|\psi(t)\rangle$, pak pravděpodobnost získání nedegenerované vlastní hodnoty a_n je:
   $$\boxed{P_n(a_n) = \frac{|\langle\psi_n|\psi\rangle|^2}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{|a_n|^2}{\langle\psi|\psi\rangle},}$$
   pokud je systém před měřením již ve stavu $|\psi_n\rangle$ pak měření *A* dává stoprocentně a_n : $\hat{A}|\psi_n\rangle = a_n|\psi_n\rangle$.
   Pro spojité spektrum: předchozí výraz pro pravděpodobnost lze převést na hustotu pravděpodobnosti měření *A*, dá hodnotu mezi *a*, *a*+d*a* systému původně ve stavu $|\psi(t)\rangle$: $\frac{dP(a)}{da} = \frac{|\psi(a)|^2}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{|\psi(a)|^2}{\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(a')|^2 da'};$
   např. hustota nalezení částice v intervalu *x*, *x*+d*x* je dána výrazem: $dP(x)/dx = |\psi(x)|^2/\langle\psi|\psi\rangle.$

5. **Časový vývoj systému**
   Časový vývoj stavového vektoru (stavu, tedy vlnové funkce) je popsán časově závislou Schrödingerov… …ící: $\boxed{i\hbar\frac{\partial|\psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H}|\psi(t)\rangle,}$
   kde $\hat{H}$ je Hamiltonův operátor reprezentující celkovou energii systému: $E = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}, t)$

Vývoj systému v čase