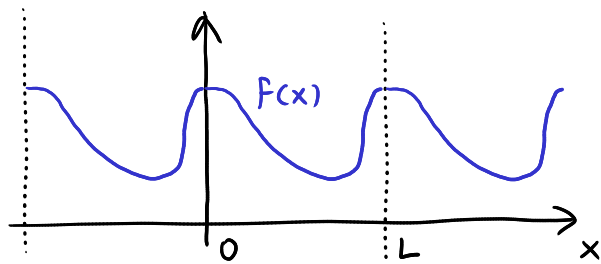


Ohlédnutí za Fourierovými řadami



trigonometrický zápis

$$f(x) = a_0 + a_1 \cos \frac{2\pi x}{L} + b_1 \sin \frac{2\pi x}{L} \\ + a_2 \cos \frac{4\pi x}{L} + b_2 \sin \frac{4\pi x}{L} + \dots$$

$$= a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(a_n \cos \frac{2\pi n x}{L} + b_n \sin \frac{2\pi n x}{L} \right)$$

exponenciální zápis

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{i \frac{2\pi}{L} n x} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \left(\cos \frac{2\pi n x}{L} + i \sin \frac{2\pi n x}{L} \right)$$

korespondence: $f(x) \leftrightarrow (a_0 \ a_1 \ b_1 \ a_2 \ b_2 \ a_3 \ b_3 \ \dots)$

$$f(x) \leftrightarrow (\dots c_{-2} \ c_{-1} \ c_0 \ c_1 \ c_2 \ \dots) = \vec{c}$$

Funkce $\leftrightarrow$ vektor koeficientů v bázi

periodická funkce bez patologií plnohodnotně reprezentována
vektorem Fourierových koeficientů

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{i \frac{2\pi}{L} n x} \quad \longleftrightarrow \quad (\dots c_{-2} c_{-1} c_0 c_1 c_2 \dots) = \bar{c}$$

linearita $\alpha f_1(x) + \beta f_2(x) \quad \longleftrightarrow \quad \alpha \bar{c}_1 + \beta \bar{c}_2$

skalární součin $\frac{1}{L} \int_0^L f_1^*(x) f_2(x) dx = \bar{c}_1^* \cdot \bar{c}_2$

druhá derivace (lineární operace)

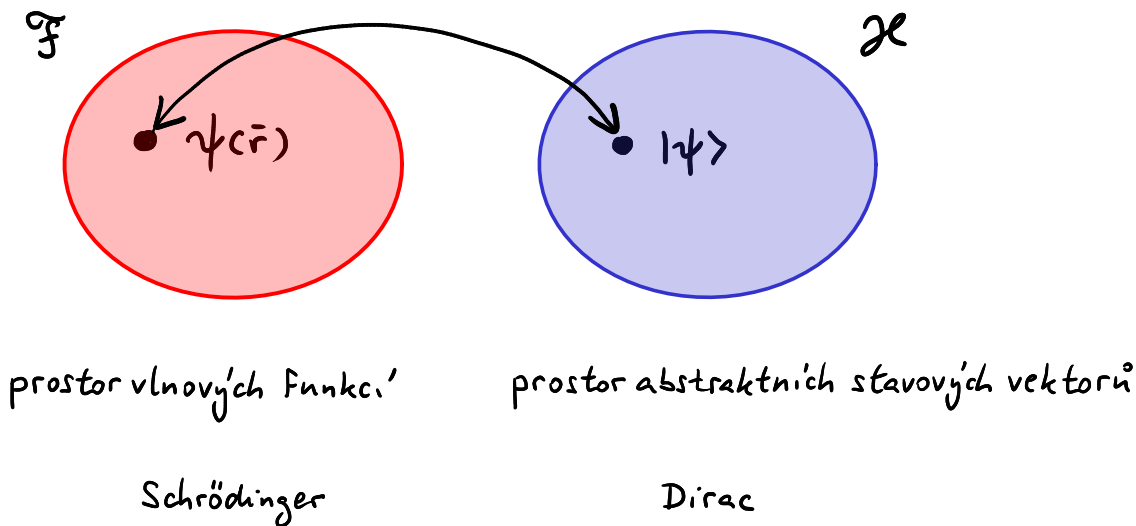
$$\frac{d^2 f}{dx^2} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \underbrace{\left(i \frac{2\pi}{L} n\right)^2}_{A_n} e^{i \frac{2\pi}{L} n x} \quad \longleftrightarrow \quad (\dots A_{-1} c_{-1} \quad A_0 c_0 \quad A_1 c_1 \dots)$$

↑ ↑ ↑
pevně dány

Formalismus kvantové mechaniky - přehled

stavy - vektory z Hilbertova prostoru (princip superpozice) } linearity QM !
veličiny - hermiteovské lineární operátory na H.p.

reprezentace ve zvolené bázi H.p. : Stavové vektory $\leftrightarrow$ vektory koeficientů
lineární operátory $\leftrightarrow$ matice

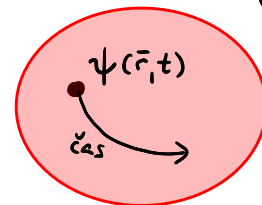


Hilbertův prostor kvadraticky integrovatelných funkcí

 $\mathcal{F}$

- kvadraticky integrovatelná komplexní funkce (pro 3D)

$$\psi: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C} \text{ s podmínkou } \int |\psi(\vec{r})|^2 d^3\vec{r} < \infty$$



prostor těchto funkcí $\mathcal{L}_2(\mathbb{R}^3)$ splňuje axiomy **vektorového prostoru**, např.

$$\text{distribuční zákon} \quad \alpha(\psi_1 + \psi_2) = \alpha\psi_1 + \alpha\psi_2 \quad (\alpha + \beta)\psi = \alpha\psi + \beta\psi$$

vynecháme fyzikálně nevhodné funkce (nespojité a pod.), vznikne tak prostor $\mathcal{F}$

- na prostoru $\mathcal{F}$ je zaveden **skalární součin**

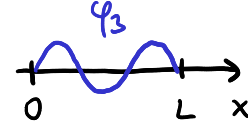
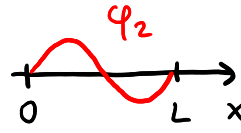
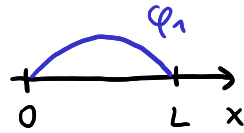
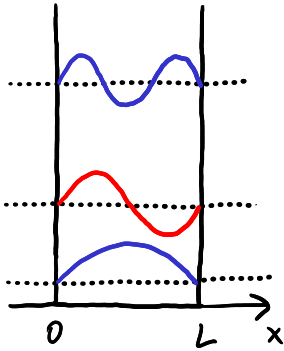
$$(\psi_1, \psi_2) \stackrel{\text{def}}{=} \int \psi_1^*(\vec{r}) \psi_2(\vec{r}) d^3\vec{r} \in \mathbb{C}$$

$$\text{s vlastnostmi: a) } (\psi_3, \psi_1 + \psi_2) = (\psi_3, \psi_1) + (\psi_3, \psi_2) \quad \text{b) } (\psi_1, \alpha\psi_2) = \alpha(\psi_1, \psi_2)$$

$$\text{c) } (\psi_1, \psi_2) = (\psi_2, \psi_1)^* \quad \text{d) } (\psi, \psi) \geq 0 \quad \text{e) } (\psi, \psi) = 0 \Leftrightarrow \psi = 0$$

- prostor musí být **úplný**

Báze Hilbertova prostoru nekonečně hluboké jámy



...

vlnové funkce vlastních stavů $\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}$

- ortonormalita

$$\int \varphi_m^*(x) \varphi_n(x) dx = \delta_{mn} \quad \int_0^L \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{m\pi x}{L} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} dx = \begin{cases} 1 & m=n \\ 0 & m \neq n \end{cases}$$

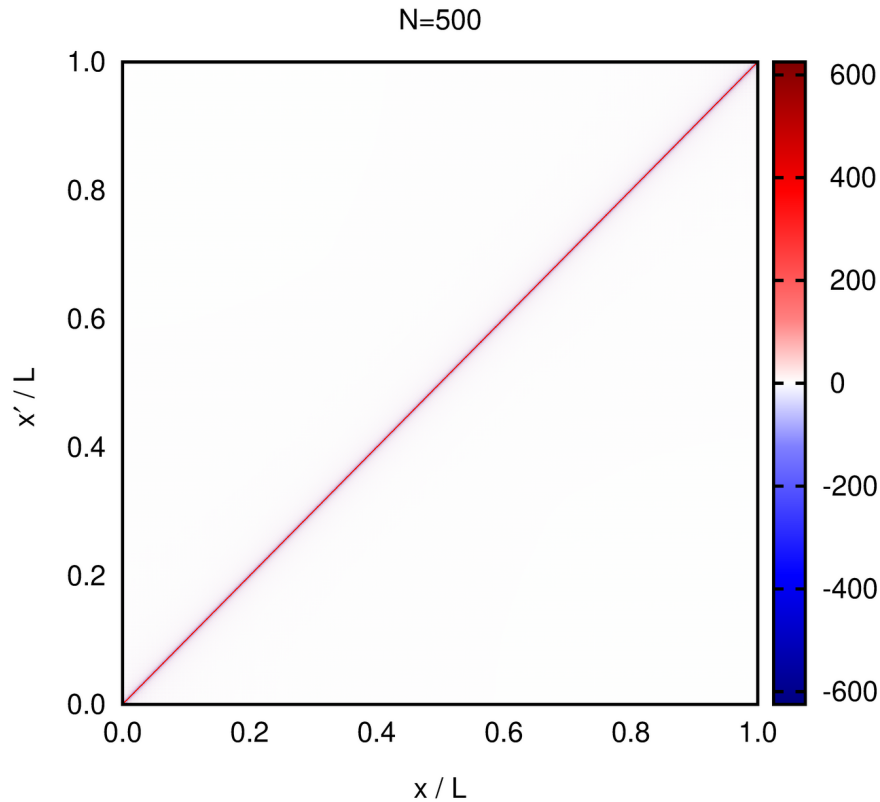
- úplnost - vyjádření pomocí Diracovy δ -funkce

$$\sum_{n=1}^{\infty} \varphi_n(x) \varphi_n^*(x') = \delta(x-x')$$

Diracova δ -funkce $\delta(x)$:

limita $\int_0^{\varepsilon} \frac{1}{\varepsilon} dx$ pro $\varepsilon \rightarrow 0$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \varphi_n(x) \varphi_n^*(x') = \delta(x-x') \quad \rightarrow \quad \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^N \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x'}{L} = \delta(x-x')$$



Alternativní ortonormální báze vystavěná z polynomů

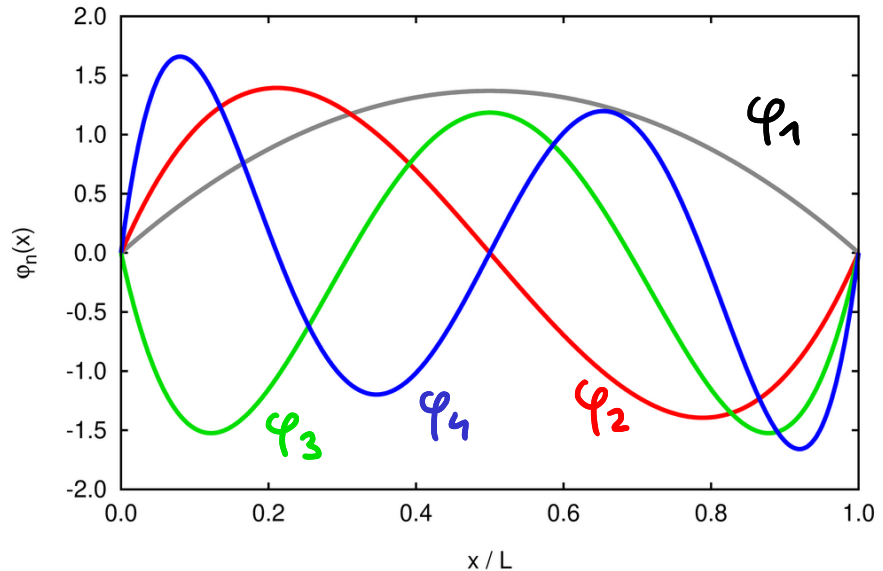
$$\varphi_1(x) = \sqrt{30} \ x (1-x)$$

$$\varphi_2(x) = 2\sqrt{210} \ x (1-x) \left(\frac{1}{2} - x\right)$$

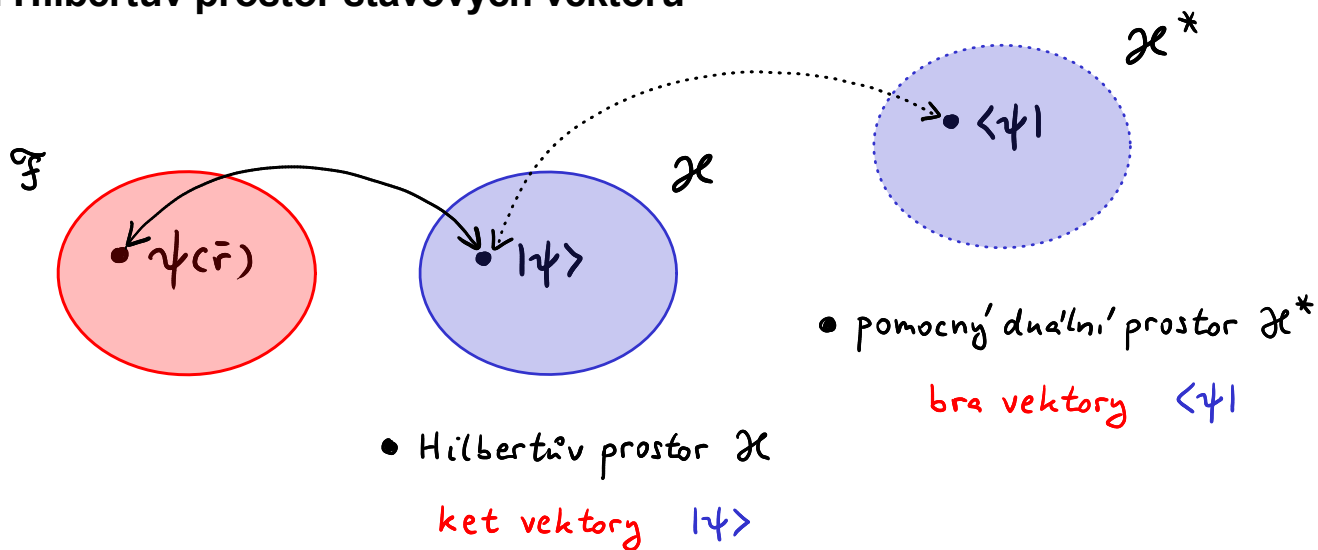
$$\varphi_3(x) = 3\sqrt{\frac{5}{2}} \ x (1-x) \left[1 - 28\left(\frac{1}{2} - x\right)^2\right]$$

$$\varphi_4(x) = \sqrt{2310} \ x (1-x) \left(\frac{1}{2} - x\right) \left[12\left(\frac{1}{2} - x\right)^2 - 1\right]$$

...



Abstraktní Hilbertův prostor stavových vektorů



- skalární součin přenesený z $\mathcal{F}$

$$(|\psi\rangle, |\eta\rangle) = \int \psi^*(\vec{r}) \eta(\vec{r}) d^3\vec{r}$$

$$\psi(\vec{r}), \eta(\vec{r}) \in \mathcal{F}, |\psi\rangle, |\eta\rangle \in \mathcal{X}$$

- vyjádření podle Diraca využívající navíc $\mathcal{X}^*$

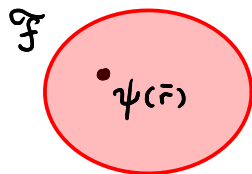
$$\langle\psi|\eta\rangle = (|\psi\rangle, |\eta\rangle)$$

$\uparrow$ $\uparrow$
bra (c) ket

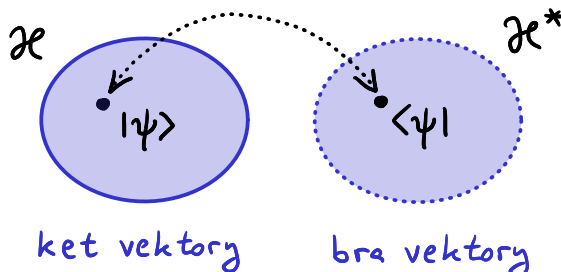
(bra vektory jsou zavedeny tímto způsobem)

Stavy

1) prostor vlnových funkcí



2) abstraktní Hilbertův prostor



3) reprezentace v bázi:

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

• skalární součin

$$(\psi, \eta) = \underbrace{\int d^3\vec{r}} \underbrace{\psi^*(\vec{r}) \eta(\vec{r})}$$

$$\underbrace{\langle \psi | \eta \rangle}$$

$$\underbrace{(c_1^* \ c_2^* \ c_3^* \ \dots)} \underbrace{\begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ \vdots \end{pmatrix}}$$

• rozklad do ortonormální báze

$$\{\varphi_n(\vec{r})\} \quad (\varphi_n, \varphi_{n'}) = \delta_{nn'}$$

$$\{|n\rangle\} \quad \langle n | n' \rangle = \delta_{nn'}$$

$$\psi(\vec{r}) = \sum_n c_n \varphi_n(\vec{r})$$

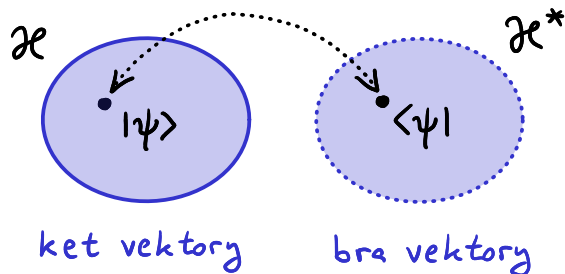
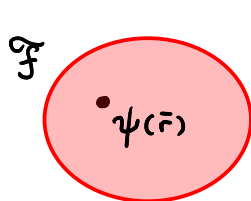
$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$

$$c_n = (\varphi_n, \psi) = \int d^3\vec{r} \varphi_n^*(\vec{r}) \psi(\vec{r})$$

$$c_n = \langle n | \psi \rangle$$

(pro ON báze)

Lineární operátory



$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}$$

1) prostor vlnových funkcí

2) abstraktní Hilbertův prostor

3) reprezentace v bazi:

$$\hat{x} \psi(\vec{r}, t) = x \psi(\vec{r}, t)$$

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

$$\hat{p}_x \psi(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(\vec{r}, t)$$

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

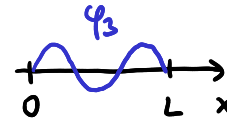
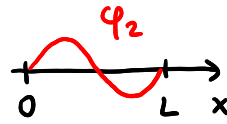
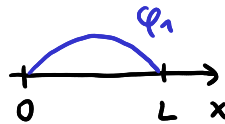
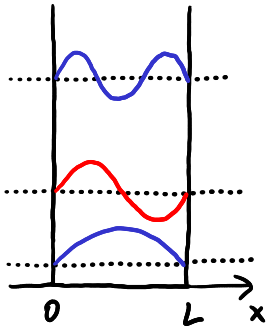
$$\hat{T} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t)$$

$$A_{mn} = \int d^3\vec{r} \varphi_m^*(\vec{r}) \hat{A} \varphi_n(\vec{r}) \\ = \langle m | \hat{A} | n \rangle$$

• **linearita** $\hat{A}(c_1\psi + c_2\eta) = c_1\hat{A}\psi + c_2\hat{A}\eta$

• **střední hodnota** $\langle \hat{A} \rangle = \int d^3\vec{r} \psi^*(\vec{r}) \hat{A} \psi(\vec{r}) = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = (c_1^* c_2^* \dots) \begin{pmatrix} A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$

Matice operátorů v ortonormální bázi vlastních stavů



...

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}$$

$$\int \varphi_m^*(x) \varphi_n(x) dx = \delta_{mn}$$

maticové prvky

$$X_{mn} = (\varphi_m, (\hat{x} - \frac{L}{2}) \varphi_n) = \int_0^L \varphi_m^*(x) (x - \frac{L}{2}) \varphi_n(x) dx = \frac{2}{L} \int_0^L \sin \frac{m\pi x}{L} (x - \frac{L}{2}) \sin \frac{n\pi x}{L} dx$$

$$P_{mn} = (\varphi_m, \hat{p} \varphi_n) = \int_0^L \varphi_m^*(x) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right) \varphi_n(x) dx = \frac{2}{L} \int_0^L \sin \frac{m\pi x}{L} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right) \sin \frac{n\pi x}{L} dx$$

explicitně

$$X_{mn} = \begin{cases} \frac{4L}{\pi^2} \frac{mn [(-1)^{m+n} - 1]}{(m^2 - n^2)^2} \\ 0 \quad \text{pro } m=n \end{cases}$$

$$P_{mn} = \begin{cases} \frac{2i\hbar}{L} \frac{mn [(-1)^{m+n} - 1]}{m^2 - n^2} \\ 0 \quad \text{pro } m=n \end{cases}$$

- matice reprezentující $\hat{x} - \frac{L}{2}$ a $\hat{p}$ v bázi $\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}$ $n=1,2,3\dots$

$$\hat{x} - \frac{L}{2} : -\frac{L}{\pi^2} \begin{pmatrix} 0 & 16/9 & 0 & \dots \\ 16/9 & 0 & 48/25 & \dots \\ 0 & 48/25 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

$$\hat{p} : \frac{2i\hbar}{L} \begin{pmatrix} 0 & +4/3 & 0 & \dots \\ -4/3 & 0 & +12/5 & \dots \\ 0 & -12/5 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

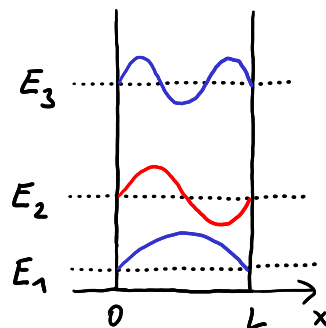
- aplikace - spektrum vlastních energií

- matice H reprezentující $\hat{H}$ v bázi vlastních stavů by měla být rovna $H = \text{diag}(E_1, E_2, E_3, \dots)$

- Hamiltonián nekonečně hluboké jámy s potenciálem

$$V(x) = 0 \text{ na dně je } \hat{H} = \hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$$

(operuje jen v prostoru jámy, jinde je nulové ψ)



- matici reprezentující $\hat{H}$ získáme pomocí druhé mocniny matice P reprezentující operátor $\hat{p}$

$$H = \frac{1}{2m} P \cdot P = \frac{1}{2m} \left[\frac{2i\hbar}{L} \begin{pmatrix} 0 & +4/3 & 0 & \dots \\ -4/3 & 0 & +12/5 & \dots \\ 0 & -12/5 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \right]^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 4 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 9 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

řeším pomocí vlnových funkcí: $E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2 \rightarrow$ na diagonále n^2 s $n = 1, 2, 3, \dots$

$$N = 20$$

[illegible]

$$N = 200$$

[illegible]

$$N = 2000$$

[illegible]

$$N = 20000$$

[illegible]