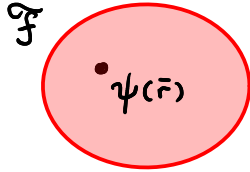
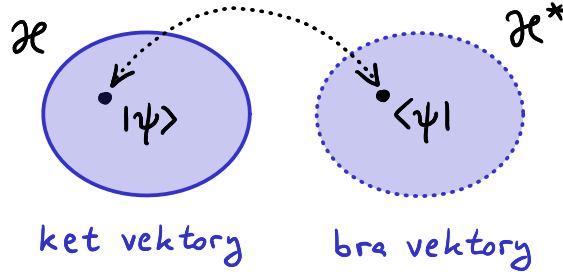


Stavy

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

$$(\psi, \eta) = \int d^3\bar{r} \underbrace{\psi^*(\bar{r})}_{\text{bra}} \underbrace{\eta(\bar{r})}_{\text{ket}}$$

$$\underbrace{\langle \psi |}_{\text{bra}} \underbrace{|\eta \rangle}_{\text{ket}}$$

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

rozklad do ortonormální báze

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

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

(pro ON báze)

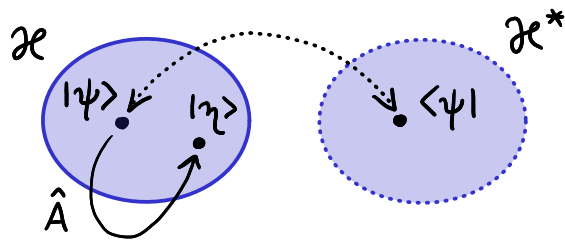
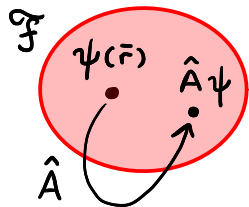
$$\psi(\bar{r}) = \sum_n c_n \varphi_n(\bar{r})$$

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

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

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

Lineární operátory



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

1) prostor **vlnových funkcí**

2) abstraktní Hilbertův prostor

3) reprezentace v bázi:

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

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

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

ket vektory

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

bra vektory

$$\langle\psi| = \langle\hat{A}\psi|$$

$$\begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

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

$$= \langle m | \hat{A} | n \rangle$$

linearita

$$\hat{A} (c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2) = c_1 \hat{A} \psi_1 + c_2 \hat{A} \psi_2$$

střední hodnota

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

Hermiteovské sdružení

$\hat{A}^\dagger$ je hermiteovsky sdružený k $\hat{A}$, když pro všechny dvojice stavů ψ, η platí:

$$(\eta, \hat{A}\psi) = (\hat{A}^\dagger\eta, \psi)$$

Dirac: $\langle \eta | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \hat{A}^\dagger \eta | \psi \rangle$

* $\left(\begin{array}{l} (\eta, \hat{A}\psi)^* = (\hat{A}^\dagger\eta, \psi)^* \\ (\hat{A}\psi, \eta) = (\psi, \hat{A}^\dagger\eta) \end{array} \right.$

$$\langle \eta | \hat{A} | \psi \rangle^* = \langle \hat{A}^\dagger \eta | \psi \rangle^*$$

$$(\hat{A}\psi, \eta) = (\psi, \hat{A}^\dagger\eta)$$

$$\langle \hat{A}\psi | \eta \rangle = \langle \psi | \hat{A}^\dagger | \eta \rangle$$

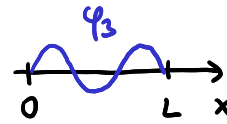
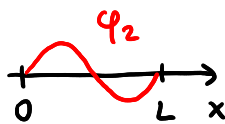
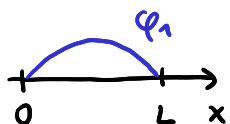
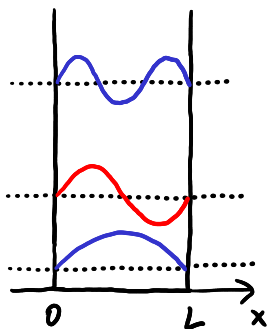
matice

$$\hat{A}: \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

$$\hat{A}^\dagger: \begin{pmatrix} A_{11}^* & A_{21}^* & \cdots \\ A_{12}^* & A_{22}^* & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} = A^{T*}$$

hermiteovsky operátor / samosdružený: $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ matice $A^{T*} = A$

Matice operátorů v ortonormální bázi vlastních stavů



...

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

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

- matice reprezentující $\hat{x} - \frac{L}{2}$ a $\hat{p}$ v bázi $\varphi_n(x)$

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

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

Spektrální teorém

- vlastní problém pro hermiteovské operátory

1) vlastní vektory z Hilbertova prostoru $\mathcal{H}$ $\hat{A} |a_n\rangle = a_n |a_n\rangle$ (diskrétní spektrum)

2) nepravé vlastní vektory mimo $\mathcal{H}$ $\hat{A} |a\rangle = a |a\rangle$ (spojité spektrum)
(nelze normovat)

Př. spektrum vlastních energií konečně hluboké jámy

- tvrzení

a) všechny vlastní hodnoty jsou reálné

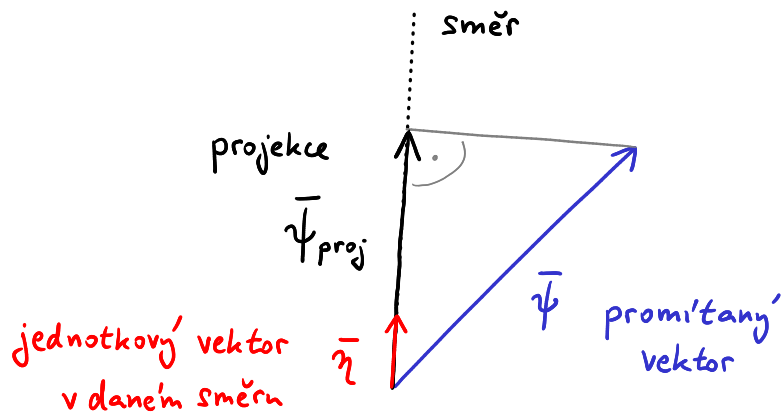
b) vlastní vektory příslušné různým vlastním hodnotám jsou ortogonální

c) vlastní vektory z obou částí spektra dohromady tvoří úplný soubor
- (zobecněnou) bázi Hilbertova prostoru

Projekce

- extrakce složky vektoru v daném směru

$$\bar{\psi}_{\text{proj}} = \underbrace{\bar{\eta}}_{\text{dodá směr}} (\underbrace{\bar{\eta} \cdot \bar{\psi}}_{\text{určí délku průmětu}})$$



- projekce stavových vektorů

$$\hat{P}_{\eta} = |\eta\rangle\langle\eta| \quad \text{působení projektoru}$$

dodá směr určí délku projekce

$$\hat{P}_{\eta} |\psi\rangle = |\eta\rangle\langle\eta|\psi\rangle$$

$$\langle\eta|\eta\rangle = 1 \quad \text{ve vlnových funkcích}$$

$$\hat{P}_{\eta} \psi(x) = \eta(x) \int_{-\infty}^{\infty} dx' \eta^*(x') \psi(x')$$

- relace úplnosti

$$\hat{1} = \sum_n |n\rangle\langle n|$$

$\{|n\rangle\}$ tvoří úplný ortogonální soubor

Postuláty kvantové mechaniky

P1 Stav systému je reprezentován normovaným vektorem z příslušného Hilbertova prostoru $\mathcal{H}$.

P2 Pozorovatelné veličiny odpovídají samosdruženým / hermiteovským operátorům působícím na $\mathcal{H}$.

P3 Možnými výsledky měření veličiny A jsou pouze vlastní hodnoty příslušného operátoru $\hat{A}$ dané řešením vlastního problému $\hat{A}|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle$.

Bezprostředně po měření s výsledkem a_n se systém nachází ve vlastním stavu příslušném a_n (je-li nedegenerovaná) nebo v normované projekci na podprostor příslušný a_n (je-li degenerovaná):

$$|\psi\rangle \rightarrow \text{normovaný } \hat{P}_{a_n}|\psi\rangle = \frac{\hat{P}_{a_n}|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|\hat{P}_{a_n}|\psi\rangle}} \quad (\text{redukce / kolaps stavu při měření})$$

P4 Pravděpodobnosti naměření jednotlivých vlastních hodnot ve stavu $|\psi\rangle$ jsou dány

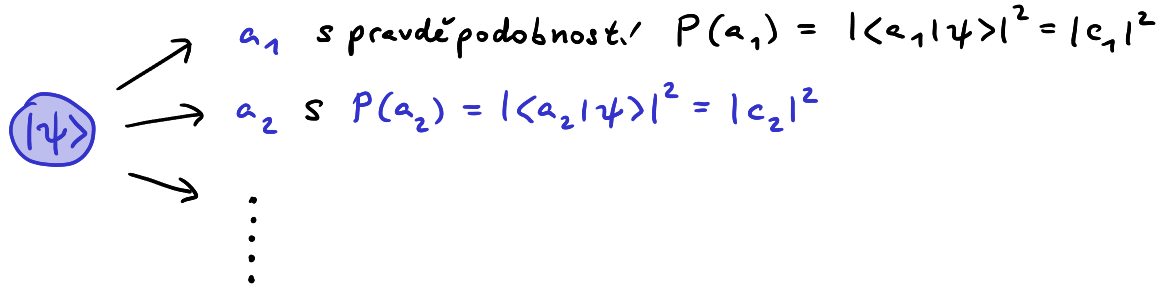
$$P(a_n) = |\langle a_n|\psi\rangle|^2 \quad \text{pravděpodobnosti pro diskrétní spektrum}$$

(v degenerovaném případě sčítáme P přes degenerované vektory)

P5 Časový vývoj systému je popsán Schrödingerovou rovnicí $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$

alternativní Formulace P4: průměrný výsledek měření je střední hodnota $\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$

$$|\psi\rangle = c_1 |a_1\rangle + c_2 |a_2\rangle + \dots \quad \text{kde } c_n = \langle a_n | \psi \rangle$$



průměr z hodnot získaných z velkého počtu měření (vždy na $|\psi\rangle$)

$$\langle A \rangle = \sum_n a_n P(a_n) = \sum_n a_n |\langle a_n | \psi \rangle|^2 =$$

$$= \sum_n \underbrace{\langle \psi | a_n \rangle}_{c_n^*} \underbrace{a_n \langle a_n | \psi \rangle}_{c_n} = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \hat{A} \rangle$$

červene část: spolu vytvářejí $\hat{A}$

kompatibilní veličiny

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



společné vlastní stavy



využít symetrie systému při řešení $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$

X

nekompatibilní veličiny

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



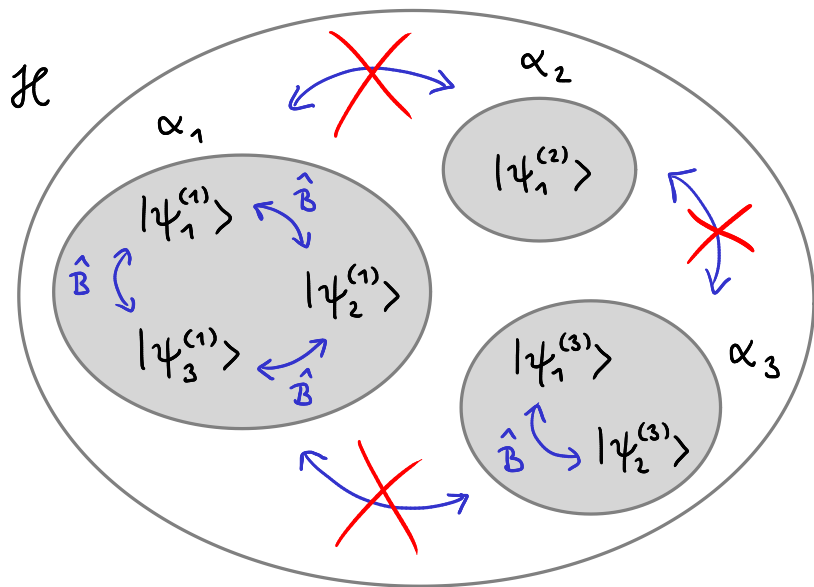
princip neurčitosti

-
- moment hybnosti a rotace
 - vlastní stavy momentu hybnosti - sférické harmonické funkce
& abstraktní algebraický přístup
 - úlohy s válcovou a sférickou symetrií
 - Př: kruhová jáma, atom vodíku, rotace a vibrace dvouatomové molekuly

Úplný soubor společných vlastních stavů

- rozklad Hilbertova prostoru $\mathcal{H}$ na podprostory vlastních stavů $\hat{A}$

každému podprostoru náleží jiná vlastní hodnota: $\hat{A}|\psi_j^{(m)}\rangle = \alpha_m |\psi_j^{(m)}\rangle$



$$\hat{A}|\psi_1^{(3)}\rangle = \alpha_3 |\psi_1^{(3)}\rangle$$

$$\hat{A}|\psi_2^{(3)}\rangle = \alpha_3 |\psi_2^{(3)}\rangle$$

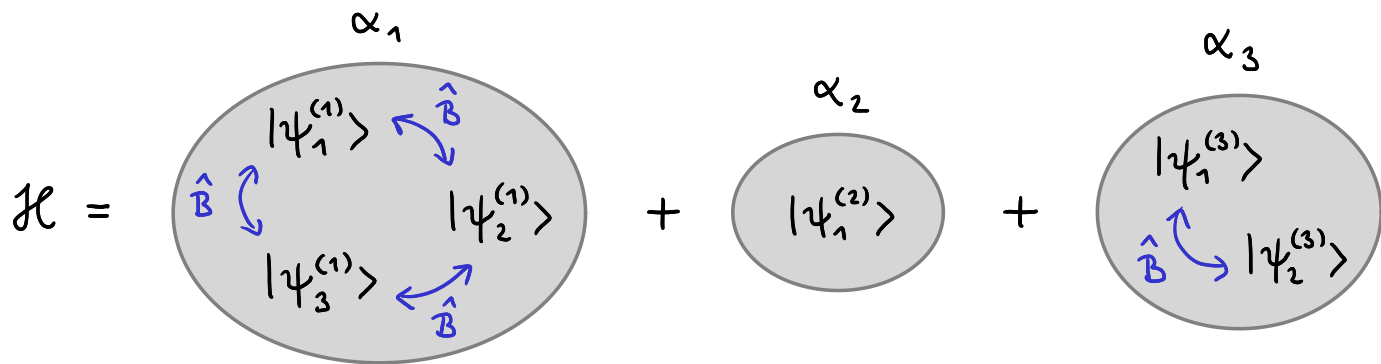
$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0$$



$\hat{B}|\psi_j^{(m)}\rangle$ je vlastní
vektor op. $\hat{A}$ příslušný
vlastní hodnotě α_m



operátor $\hat{B}$ nespojuje
jednotlivé podprostory



v rámci podprostoru s α_3 :

$\hat{B}$ v bázi $|\psi_1^{(3)}\rangle, |\psi_2^{(3)}\rangle$

$$\hat{B}|\psi_1^{(3)}\rangle = B_{11}|\psi_1^{(3)}\rangle + B_{21}|\psi_2^{(3)}\rangle$$

$$\hat{B}|\psi_2^{(3)}\rangle = B_{12}|\psi_1^{(3)}\rangle + B_{22}|\psi_2^{(3)}\rangle$$

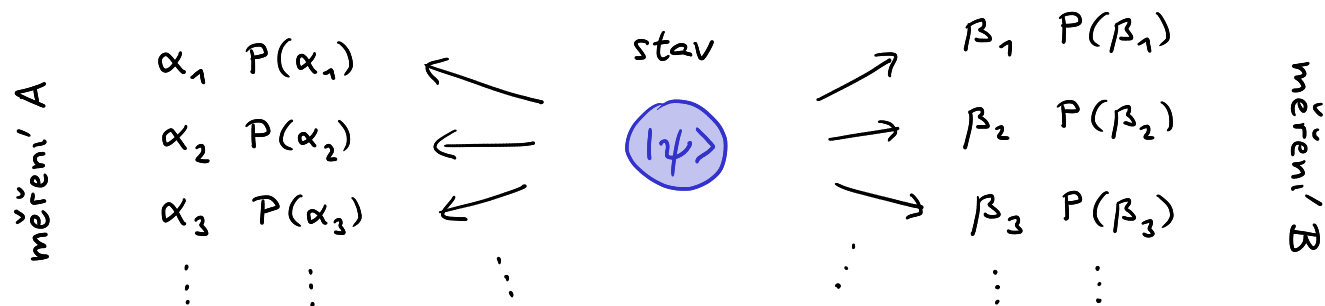
$$\rightarrow \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{pmatrix}$$

diagonalizace matice B poskytne společné vlastní stavy $\hat{A}$ a $\hat{B}$:

$$\hat{B}|\alpha_3 \beta_1^{(3)}\rangle = \beta_1^{(3)}|\alpha_3 \beta_1^{(3)}\rangle$$

$$\hat{B}|\alpha_3 \beta_2^{(3)}\rangle = \beta_2^{(3)}|\alpha_3 \beta_2^{(3)}\rangle$$

Princip neurčitosti



$$\langle A \rangle = \alpha_1 P(\alpha_1) + \alpha_2 P(\alpha_2) + \dots$$

$$\langle B \rangle = \beta_1 P(\beta_1) + \dots$$

$$(\Delta A)^2 = (\alpha_1 - \langle A \rangle)^2 P(\alpha_1) + (\alpha_2 - \langle A \rangle)^2 P(\alpha_2) + \dots$$

$$(\Delta B)^2 = \dots$$

Heisenbergův princip neurčitosti: $\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle|$

důsledky $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$:

1) pro každý stav platí $\Delta x \geq \frac{\hbar}{2} \frac{1}{\Delta p}$ (viz vlnové balíčky)

2) vyloučeno současně $\Delta x = 0$ a $\Delta p = 0$ (současná přesná měřitelnost x i p)