

Souřadnicová a hybnostní reprezentace (vše pro 1D)

- reprezentaci je možné založit i na sadě funkcí, které samy nepatří do Hilbertova prostoru (nejdou normovatelné), ale lze do nich úspěšně rozvíjet
- nejde o bázi prostoru $\mathcal{F}$ (sada do $\mathcal{F}$ nepatří), lze označit termínem neprava/zobecněná báze

souřadnicová reprezentace - zcela lokalizované bázeové funkce $\varphi_{x'}(x) = \delta(x-x')$

hybnostní reprezentace - bázeové fce odpovídající volné částici s hybností p : $\varphi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} p x}$
(použití - balíky, pohyb částic v elektrické poli)

- rozvoj - případ se spojitou bází $\rightarrow$ integrace místo sčítání přes index

$$a) \psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x') \varphi_{x'}(x) dx' = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x') \delta(x-x') dx'$$

souřadnicová reprezentace odpovídá práci přímo s vlnovou funkcí $\psi(x)$ (ta vlastně představuje koeficienty v rozvoji), formalizovat ji má smysl až v kontextu abstraktního Hilb. prostoru

- b) vztahy pro **hybnostní reprezentaci** odpovídají Fourierově transformaci až na záměnu $k \rightarrow \frac{p}{\hbar}$:

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p) \varphi_p(x) dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p) e^{\frac{i}{\hbar} p x} dp \quad \text{analogue zápisu } \psi(x) = \sum_n c_n \varphi_n(x)$$

$$\tilde{\psi}(p) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_p^*(x) \psi(x) dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} p x} dx \quad \text{analogue zápisu } c_n = (\varphi_n, \psi)$$

význam vlnové funkce $\tilde{\psi}(p)$ v hybnostní reprezentaci: $|\tilde{\psi}(p)|^2$ je hustota pravděpodobnosti pro hybnost
to znamená: $P(\text{částice vykáže při měření hybnost } \in [p, p+dp]) = |\tilde{\psi}(p)|^2 dp$

Parsevalův teorem $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(p)|^2 dp \rightarrow$ hustota pravděpodobnosti
 $|\tilde{\psi}(p)|^2$ je rovněž normována

- ortogonalita báze $\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_p^*(x) \varphi_{p'}(x) dx = \delta(p-p')$ analogue $(\varphi_m, \varphi_n) = \delta_{mn}$

- operátory a SchR v hybnostní reprezentaci a souřadnicové reprezentaci

poloha: $\hat{x} \psi(x) = x \psi(x)$ - v souřadnicové reprezentaci zřejmé

$$\begin{aligned} \text{převědeme do hybnostní} \quad \hat{x} \tilde{\psi}(p) &= \hat{x} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} p x} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} x \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} p x} dx \\ &= i\hbar \frac{d}{dp} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} p x} dx = i\hbar \frac{d}{dp} \tilde{\psi}(p) \end{aligned}$$

hybnost: $\hat{p} \tilde{\psi}(p) = p \tilde{\psi}(p)$ - stejně zřejmé jako $\hat{x} \psi(x) = x \psi(x)$ v souřadnicové repr.

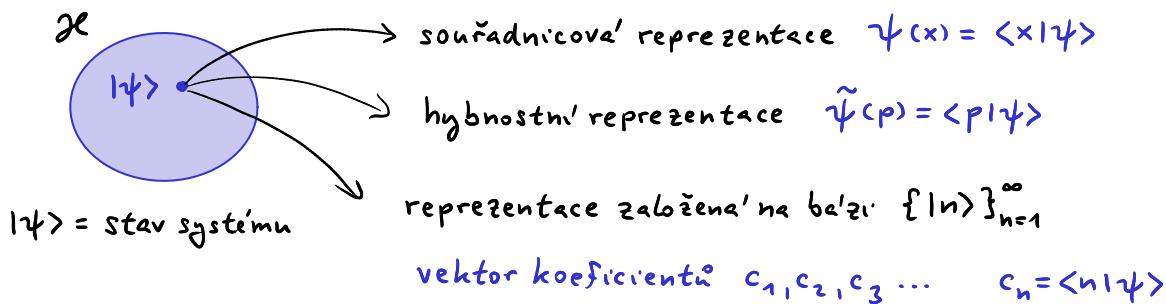
$$\begin{aligned} \text{převědeme do souřadnicové} \quad \hat{p} \psi(x) &= \hat{p} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p) e^{\frac{i}{\hbar} p x} dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} p \tilde{\psi}(p) e^{\frac{i}{\hbar} p x} dp = \\ &= \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p) e^{\frac{i}{\hbar} p x} dp = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi(x) \rightarrow \hat{p} \leftrightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \end{aligned}$$

Souhrn: souřadnicová' hybnostní' Schrödingerova rovnice

$$\begin{array}{lll}
 \psi(x) & \longleftrightarrow & \tilde{\psi}(p) \\
 x \psi(x) & \longleftrightarrow & i\hbar \frac{d}{dp} \tilde{\psi}(p) \\
 \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi(x) & \longleftrightarrow & p \tilde{\psi}(p)
 \end{array} \quad \rightarrow \quad
 \begin{array}{l}
 \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) \\
 \left[\frac{p^2}{2m} + V\left(i\hbar \frac{d}{dp}\right) \right] \tilde{\psi}(p,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi}(p,t)
 \end{array}$$

Pozn.: $V(i\hbar \frac{d}{dp})$ je buď zřejmé, např. pro $V(x) = eEx \rightarrow \hat{V} = eE i\hbar \frac{d}{dp}$,
nebo je možné tento výraz uchopit formálně přes Taylorův rozvoj

- Finální ilustrace vztahů prvku abstraktního $\mathcal{H}$ a jejich reprezentací



bázevé funkce

$$|x_0\rangle \leftrightarrow \delta(x - x_0)$$

$$|p\rangle \leftrightarrow \frac{e^{\frac{i}{\hbar} p x}}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

$$|n\rangle \leftrightarrow \varphi_n(x)$$

Doplňek 1 - „odvození“ k hybnostní reprezentaci

a) ověření konzistentnosti vztahů mezi $\psi(x)$ a $\tilde{\psi}(p)$

- dosadíme za $\tilde{\psi}(p)$ ze druhé formule do první a po úpravách by mělo vyjít $\psi(x)$

$$\begin{aligned}\psi(x) &\stackrel{?}{=} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p) e^{\frac{i}{\hbar} p x} dp = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\left(\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x') e^{-\frac{i}{\hbar} p x'} dx' \right)}_{\tilde{\psi}(p)} e^{\frac{i}{\hbar} p x} dp \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\left(\frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar} p x} e^{-\frac{i}{\hbar} p x'} dp \right)}_{F(x-x')} \psi(x') dx' = \int_{-\infty}^{\infty} F(x-x') \psi(x') dx' = \psi(x)\end{aligned}$$

určení $F(x)$:

$$\begin{aligned}F(x) &= \lim_{p_{\max} \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-p_{\max}}^{+p_{\max}} e^{\frac{i}{\hbar} p x} dp = \lim_{K \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi} \int_{-K}^K e^{i k x} dk = \lim_{K \rightarrow \infty} \frac{1}{\pi} \frac{\sin Kx}{x} = \delta(x) \\ &\quad \text{ } k = p/\hbar \quad K = p_{\max}/\hbar \\ &\quad \text{ } \frac{1}{2\pi} \frac{e^{iKx} - e^{-iKx}}{ix} = \frac{1}{\pi} \frac{\sin Kx}{x}\end{aligned}$$

$\delta(x-x')$ $x \rightarrow x-x'$

b) obdoba vyjádření úplnosti

$$\sum_n \varphi_n(x) \varphi_n(x') \rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_p(x) \varphi_p(x') dp = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{\frac{i}{\hbar} p x}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{e^{-\frac{i}{\hbar} p x'}}{\sqrt{2\pi\hbar}} dp = F(x-x') = \delta(x-x')$$

c) ortogonalita φ_p

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_p^*(x) \varphi_{p'}(x) dx &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} p x} e^{\frac{i}{\hbar} p' x} dx \\ &= \text{totež jako nahoře se zaměnou } x \leftrightarrow p = F(p'-p) = \delta(p-p')\end{aligned}$$

Doplňek 2 - pokročilá ukáзка užitečnosti hybnostní reprezentace

pro $V(x) = eEx$ se dá ukázat

$$\tilde{\psi}(p, t) = \exp \left\{ -\frac{i}{6\hbar e \mathcal{E} m} [(p + e\mathcal{E}t)^3 - p^3] \right\} \tilde{\Psi}(p + e\mathcal{E}t), \quad \text{kde } \tilde{\Psi}(p) = \tilde{\psi}(p, t=0)$$

(ověření dosazením $\tilde{\psi}(p, t)$ do Sch. rovnice v hybnostní reprezentaci)