1.

POSTAVENÍ KVANTOVÉ MECHANIKY V KONTEXTU MODERNÍ FYZIKY

	HMOTNÉ ČÁSTICE	ELEKTROMAG. POLE
POPIS	$\{\vec{r}_i ; \vec{p}_i\}$	$\vec{E}(\vec{r};t) ; \vec{B}(\vec{r};t)$
ZÁKL. ROVNICE	$\frac{d\vec{p}_i}{dt} = \vec{F}_i$	$\mathrm{div}\,\vec{E} = \frac{\rho}{\varepsilon_0}$ $\quad \mathrm{div}\,\vec{B} = 0$ $\mathrm{rot}\,\vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$ $\quad \mathrm{rot}\,\vec{B} = \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \mu_0 \vec{j}$

VAZBA

$$\vec{F}_i = q_i \left[\vec{E}(\vec{r}_i;t) + \dot{\vec{r}}_i(t) \times \vec{B}(\vec{r}_i;t) \right] + m_i\, \vec{G}(\vec{r}_i;t)$$

HUSTOTA NÁBOJE ρ A HUSTOTA PROUDU $\vec{j}$ JSOU URČENY ROZLOŽENÍM A POHYBEM ČÁSTIC $\{\vec{r}_i ; \vec{p}_i\}$

KOMENTÁŘ:

- ELEKTROMAGNETICKÉ POLE JE SVÉBYTNÁ VELIČINA, NENÍ S NIČÍM SPOJENO (VLNĚNÍ ÉTERU = BLBOST)
- ČÁSTICE JSOU LOKALIZOVANÉ OBJEKTY ✕ POLE JE KONTINUUM A V MNOHA PŘÍPADECH JDE O VLNY.

KLASICKÁ FYZIKA VYSVĚTLUJE NAPŘÍKLAD POHYB V GRAVITAČNÍM POLI ZEMĚ, POHYB PLANET V SLUNEČNÍ SOUSTAVĚ, POHYB NABITÝCH ČÁSTIC V ELMAG. POLI, ELEKTROMAGNETICKÁ INDUKCE, VZNIK A ŠÍŘENÍ ELMAG. VLN.

PROBLÉMY KLASICKÉ FYZIKY

- HRANICE MEZI VLNOU A ČÁSTICÍ NENÍ OSTRÁ (DIFRAKCE ELEKTRONU NA KRYSTALU).
- KLASICKÁ FYZIKA NEVYSVĚTLÍ, CO SE DĚJE UVNITŘ LÁTEK.
- NEDOKÁŽE VYSVĚTLIT STABILITU ATOMŮ, MOLEKUL, PLANET, HVĚZD.
- KLASICKÁ FYZIKA NEDOKÁŽE VYSVĚTLIT CHOVÁNÍ NABITÝCH ČÁSTIC V LÁTCE.

KVANTOVÁ FYZIKA VŠECHNY TYTO PROBLÉMY VYSVĚTLUJE.

ODLIŠNOST KVANTOVÉ MECHANIKY VE SROVNÁNÍ S KLASICKOU MECH.

- ODRÁŽÍ ROZDÍL MAKRO A MIKRO SVĚTA

1.) DISKRÉTNOST - ODDĚLENÉ HODNOTY FYZ. VELIČIN
2.) VLNOVĚ ČÁSTICOVÝ DUALISMUS, PRAVDĚPODOBNOSTNÍ CHARAKTER
3.) NEURČITOST, KOMPLEMENTARITA, ROLE POZOROVATELE
4.) PRINCIP SUPERPOZICE

1.) "NATURA NON FACIT SALTUM" ARISTOTELES
(PŘÍRODA NEDĚLÁ SKOKY)

DISKRÉTNOST PŘIŠLA DÍKY CHEMII S OBJEVEM PRVKŮ

H ~ He
NIC MEZI

a) DISKRÉTNOST V PŘÍPADĚ KLASICKÝCH ČÁSTIC
b) DISKRÉTNOST V PŘÍPADĚ ELEKTROMAG. ZÁŘENÍ
c) —— " —— TRADIČNÍCH ČÁSTIC

a) OBJEVY PRVKY, V NÁVAZNOSTI NA TO ATOMOVÁ HYPOTÉZA (PRVKY SE SKLÁDAJÍ Z ATOMŮ) — ELEKTRONY (THOMSON)
JÁDRA (RUTHERFORD)

Z TĚCHTO DISKRÉTNÍCH PRVKŮ JE SESTAVEN SVĚT.

b) NEWTON - ČÁSTICE
HUYGHENS - SVĚTLO VLNĚNÍ (AŽ DO POČÁTKU 20. STOLETÍ)
PLANCK - ABSOLUTNĚ ČERNÉ TĚLESO, PLANCKOVA KONSTANTA
INTENZITA ZÁVISÍ NA FREKVENCI KVANTOVÝM VZTAHEM

$$I(\nu,T) = \frac{8\pi h\cdot\nu^3}{c^3}\cdot\frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}}-1}$$

VÝMĚNA ENERGIE PO KVANTECH $\Delta E = h\cdot\nu$

EINSTEIN - FOTOEFEKT (ELMAG. VYRÁŽÍ ELEKTRONY Z KOVU)

$E = h\cdot\nu - W$ W - VÝSTUPNÍ PRÁCE, ELEKTRONY UVĚZNENY V KOVU

ZAVÁDÍ KVANTA ELEKTROMAG. ZÁŘENÍ, JE SLOŽENÉ Z KVANT.

c) DISKRÉTNOST ~~KLASICKÝCH~~ TRADIČNÍCH ČÁSTIC - POLOVINA 19. STOLETÍ ROZKVĚT SPEKTROSKOPIE MĚŘENÍ INTENZITY ZÁŘENÍ V ZÁVISLOSTI NA VLNOVÉ DÉLCE, FREKVENCI.

2.

BUNSEN A KIRCHHOFF - INTENZITA ZÁŘENÍ GENEROVANÉHO LÁTKAMI PŘI VYSOKÉ TEPLOTĚ. ZJISTILI, ŽE ALKALICKÉ PRVKY MAJÍ ČAROVÁ SPEKTRA. PROTOŽE ZÁVISLOST ν NA λ OBSAHUJE DISKRÉTNÍ ČÁRY. ANGSTRÖM POZOROVAL TOTÉŽ PRO VODÍK.

BALMER - ZJISTIL ŽE FREKVENCE ČAR PRO VODÍK JE DÁNA:

$$\nu_{mn} = R \cdot \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right) \quad n > m \quad m = 1; 2 \ldots$$

$R = 3{,}291 \cdot 10^{15}\,Hz$

VEDLO K

BOHRŮV MODEL

- KVANTOVACÍ PODMÍNKA (VÍCE VARIANT) $- l_n = n \cdot \hbar$

Z TĚCHO FORMULEK ZÍSKAL ENERGIE HLADIN ATOMU VODÍKU. $\to E_n = \frac{1}{2} \cdot n \cdot \hbar \cdot \nu_n$

DE BROGLIE - SPEKULACE

$$\left.\begin{aligned} 2\pi r_1 &= \lambda_1 \\ 2\pi r_2 &= 2\lambda_2 \\ 2\pi r_3 &= 3\lambda_3 \end{aligned}\right\} \lambda_n = \frac{?}{p_n}$$

NAOPAK Z:

$$\lambda = \frac{h}{p}$$ DOSTANEME PODOBNOU ÚVAHOU SPEKTRUM H

$$\vec{p}, E \xrightarrow{\text{DEBROGLIE}} e^{i\left(\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar} - \frac{E}{\hbar} \cdot t\right)} \qquad \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

$$\boxed{\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 (-V(\vec{r}))\right\}\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\cdot\psi}$$

SCHRÖDINGEROVA ROVNICE

2.) DVOJŠTĚRBINOVÝ EXPERIMENT - ELEKTRONY DOPADAJÍ JAKO ČÁSTICE JEJICH ROZLOŽENÍ NA STÍNÍTKU JE VŠAK STEJNÉ JAKO U VLN. ŘÍKAME TOMU VLNOVĚ ČÁSTICOVÝ DUALISMUS.

3.) PRAVDĚPODOBNOSTNÍ CHARAKTER VÝSLEDKŮ

- VÝSLEDEK JEDNÉ KAŽDÉ DETEKCE (MĚŘENÍ) JE NÁHODNÝ. NEMŮŽEME PŘEDPOVĚDĚT, JAK TO DOPADNE. ZJIŠŤOVÁNÍM KUDY ELEKTRON ŠEL U DVOJŠTĚRBINOVÉHO EXPERIMENTU, ZTRATÍME INTERFERENCI. ČÍM PŘESNĚJI BUDEME ZJIŠŤOVAT KUDY ELEKTRON PROŠEL, TÍM HORŠÍ BUDE INTERFERENČNÍ OBRAZEC. ČÍM LEPŠÍ INTERFERENČNÍ OBRAZEC, TÍM MÉNĚ LZE ŘÍCI O TOM KUDY PROCHÁZÍ.

PRINCIP NEURČITOSTI PRO DVOU ŠTĚRBINOVÝ EXPERIMENT

↳ BĚŽNÉ PŘÍPADY PRO SOUBORY (INDENTICKÝ PŘÍPAD) ČÁSTIC $x; y; z; p_x; p_y; p_z$

$x_1; x_2 \dots x_{Nx} \to \bar{x}$ $\quad \Delta x = \sqrt{\overline{(x-\bar{x})^2}}$

$p_{x_1}; p_{x_2} \dots p_{x_{Np}} \to \bar{p}$ $\quad \Delta p_x = \sqrt{\overline{(p_x-\bar{p}_x)^2}}$

PODOBNĚ $\bar{y}; \Delta y; \bar{p}_y; \Delta p_y$

$$\left.\begin{aligned} \Delta x \, \Delta p_x &\geq \frac{\hbar}{2} \\ \Delta y \, \Delta p_y &\geq \frac{\hbar}{2} \\ \Delta z \, \Delta p_z &\geq \frac{\hbar}{2} \end{aligned}\right\}$$

HEISENBERGŮV PRINCIP NEURČITOSTI

MĚŘENÍ $\vec{r}$ NEBO $\vec{p}$, BUĎ BUDU ZNÁT $\vec{r}$ NEBO $\vec{p}$. BUĎ BUDU VĚDĚT KUDY ELEKTRON PROŠEL NEBO BUDU MÍT INTERFERENCI.

EXPERIMENT BEZ DETEKCE ŠTĚRBIN - NELZE UVAŽOVAT O TOM ZDA 1 NEBO 2

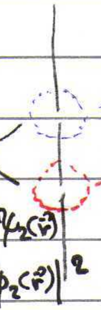
EXPERIMENT S DETEKCÍ ŠTĚRBIN - ELEKTRON JDE BUĎ SKRZ 1 NEB 2

$\boxed{\text{CHOVÁNÍ ELEKTRONU ZÁVISÍ NA PROVÁDĚNÉM POZOROVÁNÍ!}}$

JSME ZVYKLÍ NA TO, ŽE CHOVÁNÍ SYSTÉMU NEZÁVISÍ NA TOM, ZDA SE NA NĚJ DÍVÁME, ČI NE. COŽ V MIKROSVĚTĚ NEPLATÍ!

4.) SUPERPOZICE

- V KLASICKÉ FYZICE, MÁ LIBOVOLNÝ SYSTÉM JEDNU KONFIGURACI.
- V KVANTOVÉ FYZICE JINAK „DVOUŠTĚRBINOVÝ EXP.“



$\psi = \psi_1(\vec{r})$; $P = |\psi_{1}(\vec{r})|^2$

$\psi = \psi_2(\vec{r})$; $P = |\psi_2(\vec{r})|^2$

$\psi(\vec{r})$

$\psi(\vec{r}) = \psi_1(\vec{r}) + \psi_2(\vec{r})$

$P(\vec{r}) = |\psi_1(\vec{r}) + \psi_2(\vec{r})|^2$

TADY MÁME DVĚ VARIANTY KONFIGURACE, KTERÉ SE REALIZUJÍ <u>ZÁROVEŇ</u>, V JISTÉM SMYSLU.

VLNA JE SUPERPOZICÍ ψ_1 A ψ_2. ψ POPISUJE MOŽNÝ STAV SYSTÉMU.

JEDNOČÁSTICOVÁ VLNOVÁ MECHANIKA

- ZATÍM VÍME, ŽE S ČÁSTICÍ JE SPOJENA VLNA ψ

  $|\psi|^2$ ... HUSTOTA PRAVDĚPODOBNOSTI

JAK URČIT ψ?

i) MÁME JEDNU ČÁSTICI

ii) NEBEREME OHLED NA VNITŘNÍ STAV VOLNOSTI

iii) ČÁSTICE JE VYSTAVENA POTENCIÁLOVÉMU POLI, KTERÉ JE NEZÁVISLÉ NA ČASE $(V(\vec{r};t) = V(\vec{r}))$

$\boxed{V=0}$ - PŘÍPAD VOLNÉ ČÁSTICE

DE BROGLIE UHODL TVAR VLNOVÉ FUNKCE:

$$\psi(\vec{r};t) = A e^{i(\vec{p}\cdot\vec{r} - E\cdot t)/\hbar}$$

KONTEXT

	EL. MAG. VLNA	KVANTOVÝ POPIS
O FREKVENCI ω POSTUPUJÍCÍ VE SMĚRU $\vec{n}$	$u(\vec{r};t) = A\cdot e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)}$; $\vec{k} = \frac{\omega}{c}\cdot\vec{n}$	S VLNOU SPOJENA KVANTA: $\vec{p} = \hbar\cdot\vec{k}$; $E = \hbar\cdot\omega$; $E \sim \|\vec{k}\|$
VOLNÁ ČÁSTICE S HYBNOSTÍ $\vec{p}$	$\{\vec{r}(t); \vec{p}(t)\}$ $\vec{p} = \vec{p}_0$; $\vec{r} = \vec{r}_0 + \frac{\vec{p}}{m}\cdot t$	S ČÁSTICÍ SPOJENA VLNA: $\psi = A e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)}$; $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$; $\omega = \frac{E}{\hbar}$; $E = \frac{\vec{p}^2}{2m}$; $E \sim \|\vec{k}\|^2$

DŮLEŽITÝ ROZDÍL

OBECNÝ TVAR VLNOVÉ FCE (ODHADNEME Z PRINCIPU SUPERPOZICE)

$$\psi(\vec{r};t) = \int F(\vec{p})\cdot e^{\frac{i(\vec{p}\cdot\vec{r} - \frac{\vec{p}^2}{2m}t)}{\hbar}}\, d\vec{p}$$

JAKOU ROVNICI MÁME NA VLNY?

SCHRÖDINGEROVU ROVNICI - PRO VOLNOU ČÁSTICI DOSTANEME Z NĚKOLIKA POŽADAVKŮ:

- MUSÍ BÝT LINEÁRNÍ A HOMOGENNÍ (ABY NÁM FUNGOVAL PRINCIP SUPERPOZICE)
- MUSÍ BÝT V PRVNÍM ŘÁDU V ČASE, NEJJEDNODUŠŠÍ VARIANTA (PRVNÍ DERIVACI PODLE ČASU)
- MĚLI BY VYHOVOVAT VŠECHNY FUNKCE TYPU $\int F(\vec{p})\, e^{\frac{i(\vec{p}\cdot\vec{r} - \frac{\vec{p}^2}{2m}t)}{\hbar}}\, d\vec{p}$

TEDY ψ

TATO PRAVIDLA NÁS PŘIVEDOU K SCHRÖDINGEROVĚ ROVNICI

$(V(\vec{r})=0)$ PRO VOLNOU ČÁSTICI:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$$ (ČASOVÁ SCHRÖDINGEROVA ROVNICE PRO VOLNOU ČÁSTICI)

LINEÁRNÍ, DERIVACE ČASU 1. ŘÁDU

$V(\vec{r})\neq 0$ NENULOVÝ POTENCIÁL, PONĚKUD SLOŽITĚJŠÍ SITUACE

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\right\}\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$$ (ČASOVÁ SCHRÖDINGEROVA ROVNICE PRO 1 ČÁSTICI V POTENCIÁLOVÉM POLI $V(\vec{r})$)

JE TADY KVŮLI VLNOVÉMU KLUBÍČKU. STŘED KLUBÍČKA SE TOTIŽ CHOVÁ PODLE KLAS. MECHANIKY V LIMITNÍM PŘÍPADĚ NÁM PAK VYJDOU ROVNICE KLASICKÉ FYZIKY.

NYNÍ BUDEME HLEDAT ŘEŠENÍ SCH. ROVNICE O DANÉ ENERGII E. V PŘÍPADĚ VOLNÉ ČÁSTICE $(V(\vec{r})=0)$ MAJÍ TVAR $\psi(\vec{r};t)=\psi_0(\vec{r})\cdot e^{-i\frac{E\cdot t}{\hbar}}$. PŘEDPOKLÁDÁME, ŽE TOTÉŽ PLATÍ I PRO $V(\vec{r})\neq 0$. DOSADÍME ZA $\psi(\vec{r};t)$ DO SCH. ROVNICE:

LEVÁ STRANA $e^{-i\frac{E\cdot t}{\hbar}}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\right\}\psi_0(\vec{r})$

PRAVÁ STRANA $i\hbar\,\psi_0(\vec{r})\cdot\left(\frac{-iE}{\hbar}\right)\cdot e^{-i\frac{E t}{\hbar}}$

NAJDEME ŘEŠENÍ PRO FUNKCI $\psi_0(\vec{r})$

POROVNÁM OBĚ STRANY A DOSTANU STACIONÁRNÍ SCHRÖDINGEROVU ROVNICI:

$$\underbrace{\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\right\}}_{\text{HAMILTONIÁN } \underline{\underline{H}}}\psi_0(\vec{r}) = E\cdot\psi_0(\vec{r})$$

E – VLASTNÍ HODNOTY HAMILTONIÁNU

ψ_0 – VLASTNÍ FUNKCE HAMILTONIÁNU

$\{E;\psi_0\}$ – VLASTNÍ FUNKCE, KTERÁ PATŘÍ K E.

PŘECHOD $\boxed{\text{3D SCHRÖDINGEROVA ROVNICE} \longrightarrow \text{1D SCHRÖDINGEROVA ROVNICE}}$

– POMOCÍ SEPARACE PROMĚNNÝCH

3D $\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\right\}\psi = E\psi$

$V(\vec{r}) = V(x)$ UVAŽUJEME STACIONÁRNÍ PŘÍPAD

HLEDÁME ŘEŠENÍ SCH. ROVNICE VE TVARU $\psi(\vec{r}) = \underbrace{\psi_x(x) + \psi_{yz}(y;z)}_{\text{DOSADÍM DO SCH. ROVNICE}}$

$\nabla = \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z}$

5.)

LEVÁ STRANA $\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right\}\psi_x\psi_{yz}+$
$+\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\right\}\psi_x\psi_{yz}$

PRAVÁ STRANA $E\cdot\psi_x\cdot\psi_{yz}$

OBĚ STRANY POROVNÁME A PODĚLÍME OBĚ STRANY ROVNICE $\psi_x;\psi_{yz}$

$$\underbrace{\frac{\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right\}\psi_x}{\psi_x}}_{f(x)\text{ ZÁVISÍ JEN NA } x}+\underbrace{\frac{\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\right\}\psi_{yz}}{\psi_{yz}}}_{g(y;z)\text{ ZÁVISÍ JEN NA } y;z}=E$$

OBĚ FUNKCE MUSEJÍ BÝT ROVNY KONSTANTĚ

$f(x)=E_x$; $g(y;z)=E_{yz}$ PŘITOM $E=E_x+E_{yz}$

TOTO ZNAMENÁ, ŽE:

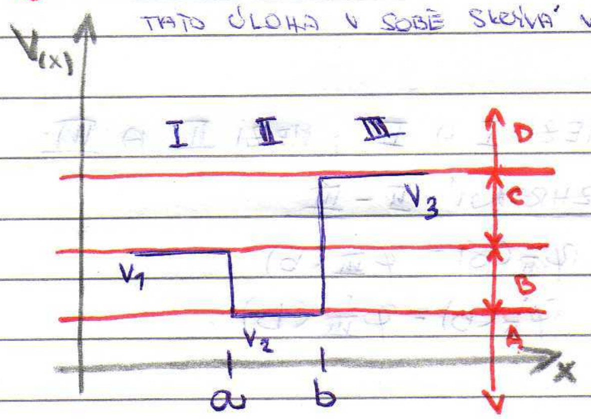
$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right\}\psi_x=E_x\cdot\psi_x$ ← TOTO JE 1D SCHRODINGEROVA ROVNICE, S POTENCIÁLEM $V(x)$

$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\right\}\psi_{yz}=E_{yz}\cdot\psi_{yz}$ ← TOTO JE 2D SCHRODINGEROVA ROVNICE PRO VOLNOU ČÁSTICI ~~POHYB V OSE y A z JE~~

POHYB V OSE x JE ŘÍZEN POTENCIÁLEM $V(x)$ A V OSÁCH y A z JE POHYB VOLNÝ.

! ÚLOHY S ⊓ POTENCIÁLY POMOCÍ 1D SCH. ROVNICE

TATO ÚLOHA V SOBĚ SKRÝVÁ VŠECHNY SPECIÁLNÍ PŘÍPADY



$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right\}\psi_x=E_x\psi_x$

POTŘEBUJEME PŘIDAT PODMÍNKY

- SPOJITOST ψ
- SPOJITOST DERIVACE ψ
- OHRANIČENÁ $\psi<\infty$

STANDARTNÍ POSTUP ŘEŠENÍ

a) ŘEŠENÍ PO OBLASTECH I; II; III

b) „SEŠÍVÁNÍ" NA HRANICÍCH

a) ŘEŠENÍ PRO OBLAST I

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V_1\right\}\psi = E\psi \quad \Big/ \cdot -\frac{2m}{\hbar^2}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{(E-V_1)2m\psi}{\hbar^2} = 0$$

OBECNÉ ŘEŠENÍ $\psi(x) = A_1 e^{ik_1x} + B_1 e^{-ik_1x} = A_1 e^{\varkappa_1 x} + \cancel{B_1 e^{-\varkappa_1 x}}$

$k_1 = \sqrt{\frac{2m(E-V_1)}{\hbar^2}}$ PRO $E > V_1$

x JDE DO $-\infty$; TEDY BY ψ_I JDE DO ∞, NEMŮŽE BÝT

TOTO KDYŽ BUDE ZÁPORNÉ PRO $E<V_1$ ZAVEDEME $\varkappa_1 = \sqrt{\frac{2m(V_1-E)}{\hbar^2}}$
ŘEŠENÍ MÁ PAK TVAR OBYČEJNÉ EXPONENCIELY.

ŘEŠENÍ PRO OBLAST II

$$\psi_{II} = A_2 e^{ik_2x} + B_2 e^{-ik_2x} = A_2 e^{\varkappa_2 x} + B_2 e^{-\varkappa_2 x}$$

ŘEŠENÍ PRO OBLAST III

$$\psi_{III} = A_3 e^{ik_3x} + B_3 e^{-ik_3x} = \cancel{A_3 e^{\varkappa_3 x}} + B_3 e^{-\varkappa_3 x}$$

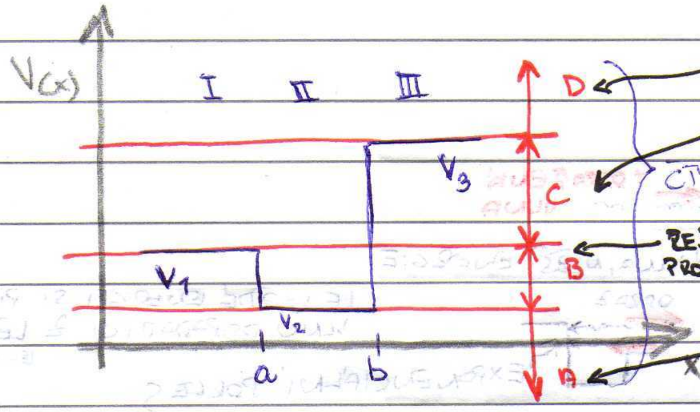
KDYŽ JDE x DO NEKONEČNA PAK JDE A DO NEKONEČNA A S NÍM I ψ. COŽ JE PORUŠENÍ ZADANÝCH PODMÍNEK, TEDY NEMŮŽE BÝT

b) SEŠÍVÁNÍ

MÁME DVĚ ROZHRANÍ, MEZI I A II; MEZI II A III

ROZHRANÍ I – II	ROZHRANÍ II – III
$\psi_I(a) = \psi_{II}(a)$	$\psi_{II}(b) = \psi_{III}(b)$
$\psi'_I(a) = \psi'_{II}(a)$	$\psi'_{II}(b) = \psi'_{III}(b)$

6.



2 ŘEŠENÍ PRO VŠECHNA E

1 ŘEŠENÍ PRO VŠECHNA E

ČTYŘI ENERGIOVÉ OBLASTI

ŘEŠENÍ JEN PRO TAKOVÉ ENERGIE E, PRO KTERÉ PLATÍ $\det\begin{pmatrix} a & b & c & d \\ a' & b' & c' & d' \\ a'' & b'' & c'' & d'' \\ a''' & b''' & c''' & d''' \end{pmatrix}$

ŘEŠENÍ SOUSTAVY NEEXISTUJE

JDE NÁM O POVAHU ŘEŠENÍ PO PÁSMECH A; B; C; D

PÁSMO A; B

A ... $A_1; A_2; B_2; B_3$ – 4 PARAMETRY

B ... $A_1; A_2; B_2; B_3$ – 4 PARAMETRY

C ... $A_1; A_2; B_2; B_3; B_1$ – 5 PARAMETRŮ

D ... $A_1; A_2; B_2; B_3; B_1; A_3$ – 6 PARAMETRŮ

PRO PÁSMO A MÁME ČTYŘI ROVNICE PRO ČTYŘI NEZNÁMÉ

$$a \cdot A_1 + b A_2 + c \cdot B_2 + d \cdot B_3 = 0$$

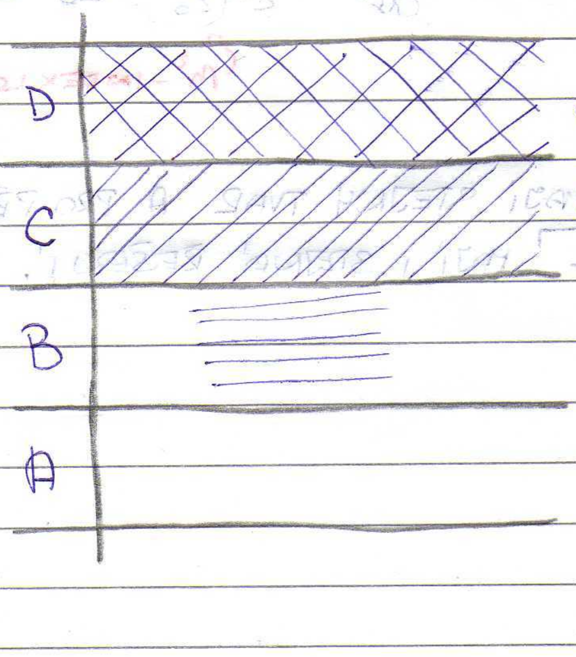
$$a' \cdot A_1 + b' A_2 + c' B_2 + d' B_3 = 0$$

$$a'' A_1 + b'' A_2 + c'' B_2 + d'' \cdot B_3 = 0$$

$$a''' \cdot A_1 + b''' A_2 + c''' \cdot B_2 + d''' \cdot B_3 = 0$$

$a; a'; a''; a'''; b; b'; b''; b'''; c; c'; c''; c'''; d; d'; d''; d''' \Longrightarrow$ ZÁVISÍ NA ENERGII

ENERGIOVÉ SPEKTRUM



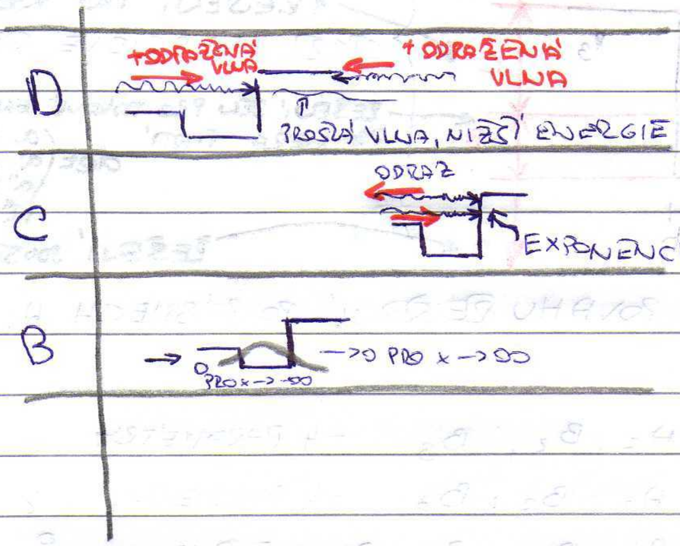
KONTINUUM STAVŮ
2-DEGENEROVANÉ ENERGIOVÉ HLADINY

1 DEGENEROVANÁ KAŽDÁ ENERGIOVÁ HLADINA
KONTINUUM STAVŮ

DISKRÉTNÍ

NEJSOU ENERGIOVÉ STAVY

ENERGIOVÉ STAVY



KE KAŽDÉ ENERGII SI PŘEDSTAVÍM VLNU DOPADAJÍCÍ Z LEVA, KE KAŽDÉ ENERGII 1. ŘEŠ

OPTICKÁ ANALOGIE

- V OPTICE EXISTUJÍ ÚLOHY, KTERÉ VEDOU NA PŘESNĚ TYTÉŽ ROVNICE A PŘESNĚ TAKOVÁTO ŘEŠENÍ

ELEKTROMAGNETICKÁ VLNA POSTUPUJE VE SMĚRU OSY x V PROSTŘEDÍ S DIELEKTRICKOU FUNKCÍ $\varepsilon(\omega)$.

$$\left.\begin{aligned} \vec{E}(x;t) &= \vec{e}_{xy}\cdot E_0(x)\cdot e^{-i\omega t} \\ B(x;y) &= \vec{e}_z\cdot B_0(x)\cdot e^{-i\omega t} \end{aligned}\right\}$$

DOSADÍME DO MAXWELLOVÝCH ROVNIC
DOSTANEME ROVNICI PRO FUNKCI $E_0(x)$

$$\frac{d^2E_0}{dx^2} + \frac{\omega^2}{c^2}\frac{\varepsilon(\omega)}{\varepsilon_0}E_0 = 0$$

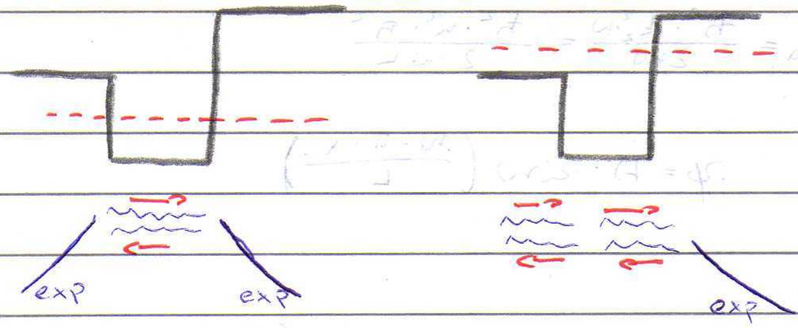
n^2 - INDEX LOMU

SCHRÖDINGEROVA ROVNICE

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m(E-V)}{\hbar^2}\psi = 0$$

JE VIDĚT, ŽE OBĚ ROVNICE MAJÍ STEJNÝ TVAR A PRO PŘÍPAD, KDY $n = \frac{c}{\omega}\sqrt{\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}}$ MAJÍ I STEJNÁ ŘEŠENÍ.

7.)



$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m(E-V)}{\hbar}\psi = 0 \qquad \frac{d^2E_0}{dx^2} + \frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon_{(\omega)}E_0 = 0$$

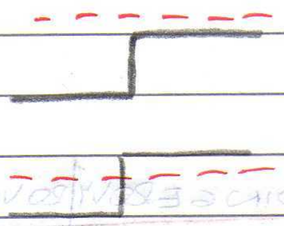
KLADNÉ REÁLNÉ

$\varepsilon_A \mid \varepsilon_B$

$n_A \mid n_B$

INDEX LOMU (KLADNÝ REÁLNÝ)

a)



b) $\varepsilon_A \mid \varepsilon_B$

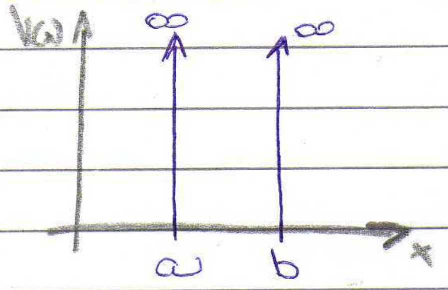
KLADNÉ REÁLNÉ — ZÁPORNÝ REÁLNÝ

$\boxed{(\text{INDEX LOMU})^2 = \varepsilon}$

$n_A \mid n_B$

INDEX LOMU - KLADNÝ REÁLNÝ - RYZE IMAGINÁRNÍ

∞ HLUBOKÁ POTENCIÁLOVÁ JÁMA



$a = 0 \quad b = L$

OKRAJOVÉ PODMÍNKY PRO ŘEŠENÍ SCHRODINGEROVY ROVNICE $\psi(0) = 0 \quad \psi(L) = 0$

PROTOŽE ČÁSTICE SE NEDOSTANE MIMO JÁMU (ANI TUNEL)

ŘEŠENÍ V CENTRÁLNÍ OBLASTI JÁMY

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar}\psi = 0$$

VYŘEŠÍME DIF. ROVNICI $\quad \psi = e^{\lambda x} \Rightarrow \lambda^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} \Rightarrow \lambda = \pm i\underbrace{\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}}_{k_2}$

$$\psi = A \cdot e^{+ik_2x} + Be^{-ik_2x}$$

POUŽIJEME PRVNÍ OKRAJOVOU PODMÍNKU — ZA x DOSADÍM 0 A NAJDEME:

$\psi(0) = 0 \qquad A + B = 0 \qquad B = -A$

$$\psi = A \cdot (e^{ik_2x} - e^{-ik_2x}) = 2iA \cdot \sin(k_2x)$$

DRUHÁ OKRAJOVÁ PODMÍNKA

$\psi(L) = 0$

ABY TOTO BYLO NULOVÉ I PRO x = L TAK MUSÍ PLATIT

$$k_2 \cdot L = n \cdot \pi$$

$$k_{2n} = \frac{n \cdot \pi}{L}$$ ... POVOLENÉ HODNOTY k_2

POVOLENÉ HODNOTY E

$$E = \frac{\hbar^2 \cdot k_2^2}{2m} \; ; \; E_n = \frac{\hbar^2 \cdot k_{2n}^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \cdot n^2 \cdot \pi^2}{2mL}$$

SCHÉMA ŘEŠENÍ $\psi = A \cdot \sin\left(\frac{n \cdot \pi \cdot x}{L}\right)$

VLASTNOSTI ŘEŠENÍ

- REÁLNÉ FUNKCE TO JSOU
- FUNKCE JSOU VŮČI SOBĚ ORTOGONÁLNÍ (ORTOGONÁLNÍ SOUBOR)

$$\int_0^L \left(\sin\frac{m \cdot \pi \cdot x}{L} \cdot \sin\frac{n \cdot \pi \cdot x}{L}\right) dx = \frac{L}{2}\,\delta_{mn}$$

KRONEKEROVO DELTA

- n-TÉ ŘEŠENÍ MÁ $n-1$ UZLŮ
- SUDÉ / LICHÉ

I OBECNÉ VLASTNOSTI ŘEŠENÍ 1D SCHRODINGEROVY ROVNICE

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right\}\psi = E\psi$$

OBECNÝ TVAR 1D STACIONÁRNÍ SCHRODINGEROVY ROVNICE PRO 1 ČÁSTICI

POTENCIÁL $V(x)$ - OBECNÝ, JEN PŘEDPOKLÁDÁME, ŽE EXISTUJE LIMITA S x JDOUCÍ K $-\infty$, ∞

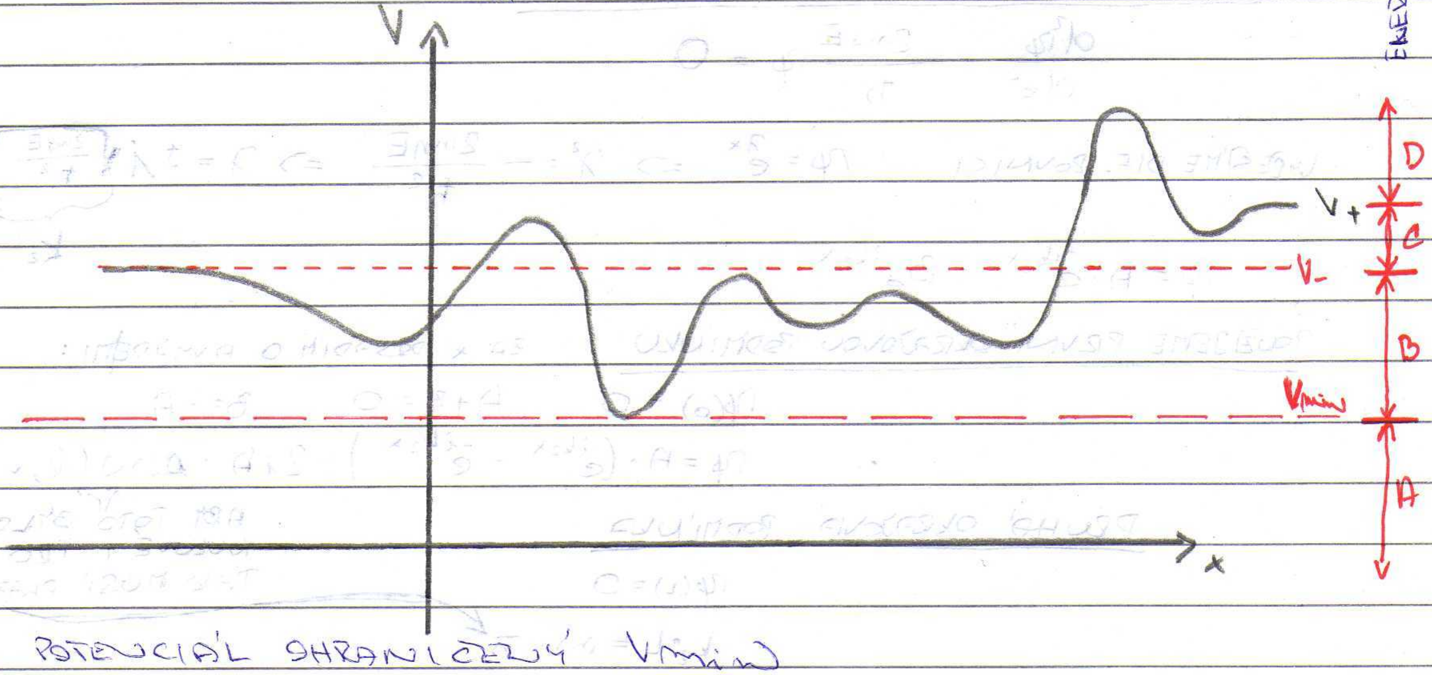
$$\exists \lim_{x \to -\infty}(V(x)) = V_-$$

$$\exists \lim_{x \to \infty}(V(x)) = V_+$$

$$\exists \inf\{V(x)\} = V_{min}$$

$$V_+ > V_-$$

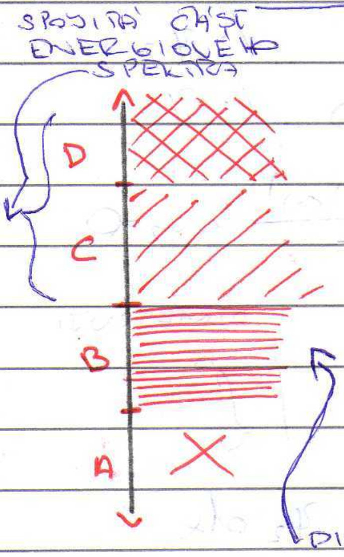
ENERGIOVÁ PÁSMA



POTENCIÁL OHRANIČENÝ V_{min}

8.)

ENERGIOVÁ SPEKTRA (PÁSMA)



A – NEEXISTUJE ŘEŠENÍ

B – ŘEŠENÍ EXISTUJE JEN PRO DISKRÉTNÍ MNOŽINU HODNOT ENERGIE, KE KAŽDÉ ENERGIE Z TÉTO MNOŽINY JEN 1 ŘEŠENÍ

C – JEDNO ŘEŠENÍ PRO KAŽDOU HODNOTU ENERGIE Z PÁSMA C.

D – DVĚ ŘEŠENÍ PRO KAŽDOU HODNOTU ENERGIE Z PÁSMA D.

DISKRÉTNÍ ČÁST ENERGIOVÉHO SPEKTRA

II O REÁLNOSTI ŘEŠENÍ ODPOVÍDAJÍCÍ ENERGII Z DISKRÉTNÍ ČÁSTI SPEKTRA JSOU AŽ NA KONSTANTU REÁLNÉ FUNKCE.

$\psi(x) = |\psi(x)| e^{i\varphi x}$

$\psi(x)$ = REÁLNÁ FUNKCE AŽ NA KONSTANTU, POKUD φ JE REÁLNÉ ČÍSLO.

DŮKAZ: NECHŤ ψ JE ŘEŠENÍ:

$H\psi = E\psi$ / ROVNICI KOMPLEXNĚ SDRUŽÍM

$H^*\psi^* = E^*\psi^*$ — ψ A ψ^* JSOU ŘEŠENÍ, ALE ŘEŠENÍ MÁ BÝT POUZE JEDNO (PÁSMO B).

ψ^* JE TAKÉ ŘEŠENÍ SCHRODINGEROVY ROVNICE

PROTO $\psi^* = \overset{\text{KOMPLEXNÍ KONSTANTA}}{\lambda}\psi$ PRO JISTÉ KOMPLEXNÍ ČÍSLO λ. $|\lambda| = 1$; $\lambda = e^{i\beta}$

$\psi^* = |\psi| e^{-i\varphi(x)}$ $\qquad \psi = |\psi| \cdot e^{i\varphi(x)}$

$$|\psi| e^{-i\varphi(x)} = e^{i\beta} \cdot |\psi| e^{i\varphi(x)}$$

$$e^{-2i\varphi(x)} = e^{i\beta}$$

$\varphi(x) = -\frac{\beta}{2}$ ... REÁLNÉ ČÍSLO

III O ORTOGONALITĚ — NECHŤ ψ_1 ... E_1, ψ_2 ... E_2

$E_1; E_2$ ... NALEŽÍ DISKRÉTNÍ ČÁSTI SPEKTRA (PÁSMO B)

PLATÍ $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1(x)\psi_2(x)\, dx = 0$

DŮKAZ: ZAPÍŠEME SI SCHRÖDINGEROVU ROVNICI

OBĚ ROVNICE OD SEBE ODEČTU

S ψ_1 A E_1: $\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{2m(E_1 - V(x))}{\hbar^2}\psi_1 = 0$ $\quad /\cdot \psi_2$

S ψ_2 A E_2: $\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + \frac{2m(E_2 - V(x))}{\hbar^2}\psi_2 = 0$ $\quad /\cdot \psi_1$

$$\underset{\text{DERIVACE}}{\psi_1''}\cdot\psi_2 + \frac{2m(E_1-V(x))}{\hbar^2}\psi_1\cdot\psi_2 - \underset{\text{DERIVACE}}{\psi_2''}\cdot\psi_1 - \frac{2m(E_2-V(x))}{\hbar^2}\psi_1\psi_2 = 0$$

ZINTEGRUJI

$$\psi_1''\cdot\psi_2 - \psi_2''\cdot\psi_1 = \frac{2m(E_2-E_1)}{\hbar^2}\psi_2\psi_1 \quad \Big/ \int_a^b$$

$$\int_a^b \underbrace{(\psi_1''\cdot\psi_2 - \psi_2''\cdot\psi_1)}_{(\psi_1'\cdot\psi_2 - \psi_2'\cdot\psi_1)'} dx = \frac{2m(E_2-E_1)}{\hbar^2}\int_a^b \psi_1\psi_2\, dx$$

$$[\psi_1'\cdot\psi_2 - \psi_2'\cdot\psi_1]_a^b = \text{——— " ———}$$

$a \to -\infty$ ... $\psi_1 \to 0$; $\psi_2 \to 0$; $\psi_1' \to 0$; $\psi_2' \to 0$

$b \to +\infty$ ... ——— " ———

LEVÁ STRANA JDE K NULE

PRAVÁ STRANA $\to \frac{2m(E_2-E_1)}{\hbar^2}\cdot\int_a^b \psi_1\psi_2\, dx$

MŮŽU PŘEPSAT (POROVNAT): $\int_{-\infty}^{\infty}\psi_1\cdot\psi_2\, dx = 0$

! DŮKAZ THEORÉMU O ORTOGONALITĚ, PRO OBECNÉ DVĚ FUNKCE, KE KTERÝM PATŘÍ DISKRÉTNÍ HODNOTA ENERGIE.

IV O UZLECH

NECHŤ $E_1; E_2$ ATD JSOU VZESTUPNĚ SEŘAZENÉ ENERGIE Z DISKRÉTNÍ ČÁSTI SPEKTRA

$\psi_1; \psi_2$ ATD PŘÍSLUŠNÉ VLNOVÉ FUNKCE KTERÉ K NIM PATŘÍ

PLATÍ: ψ_1 ... 0 UZLŮ

ψ_2 ... 1 UZEL

ψ_n ... $n-1$ UZLŮ

9.)

V. O SUDOSTI / LICHOSTI

NECHŤ $V(x)$ JE SUDÁ FUNKCE $\{V_{(-x)} = V_{(x)}\}$
KAŽDÉ ŘEŠENÍ $\psi(x)$ PATŘÍCÍ K ENERGII
Z DISKRÉTNÍ ČÁSTI SPEKTRA JE SUDÁ/LICHÁ FUNKCE

POZNÁMKA K ČASOVÉMU VÝVOJI

- ZATÍM JSME UVAŽOVALI O STAVECH S DANOU ENERGIÍ

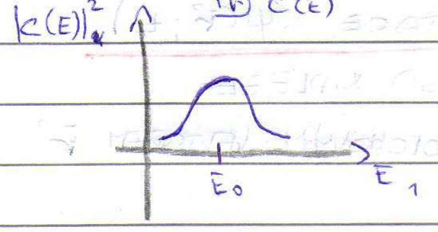
$$\psi_E(x;t) = \psi_0(x)\, e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

LZE VYTVOŘIT KLUBKA

KOEFICIENT

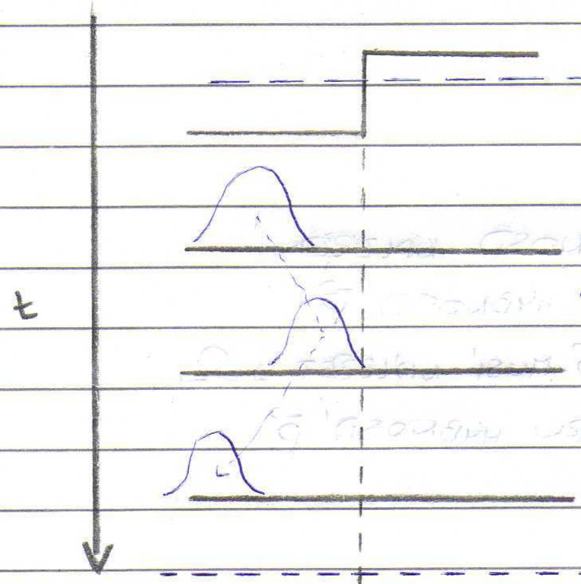
PRO ENERGIE Z PÁSMA C: $\psi(x;t) = \int_C C(E)\cdot\psi_E(x;t)\,dE$

PRO ENERGIE Z PÁSMA D: $\psi(x;t) = \int_D \{c_1(E)\cdot\psi_{1E}(x;t) + c_2(E)\cdot\psi_{2E}(x;t)\}\,dE$



PŘÍKLAD CHOVÁNÍ KLUBÍČKA (RYCHLOST KLUBÍČKA JE ADEKVÁTNÍ JEHO ENERGII)

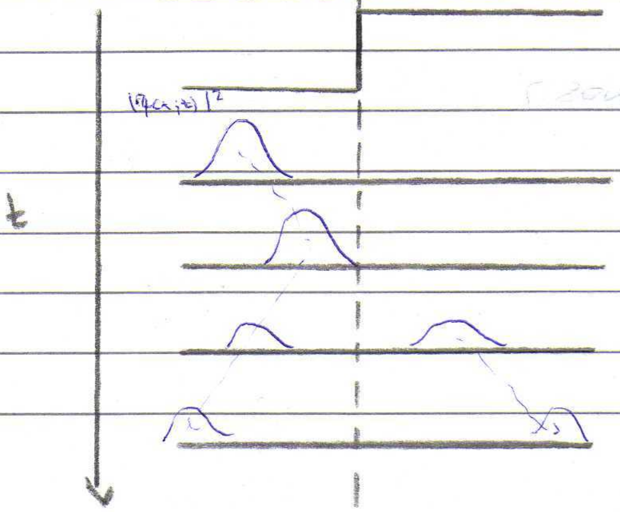
VÝVOJ $|\psi(x;t)|^2$ V ČASE

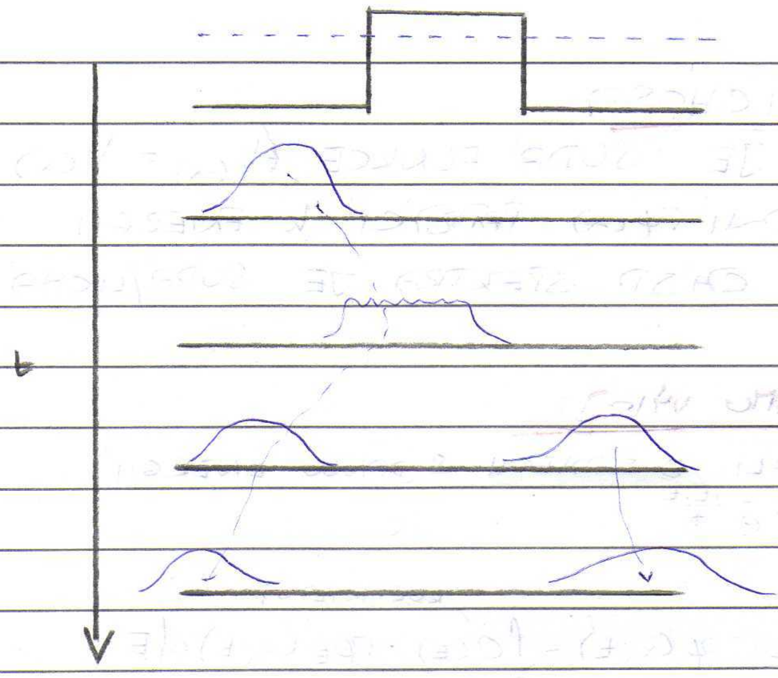


KLUBÍČKO POSTUPUJE DOPRAVA

PŘIBLÍŽÍ SE K ROZHRANÍ

VZDALUJE SE OD ROZHRANÍ





PRAVDĚPODOBNOSTNÍ INTERPRETACE $\psi(\vec{r};t)$

$P(\vec{r})$ ... HUSTOTA PRAVDĚPODOBNOSTI NALEZENÍ ČÁSTICE V MÍSTĚ S POLOHOVÝM VEKTOREM $\vec{r}$

PRAVDĚPODOBNOST NALEZENÍ ČÁSTICE V OBJEMU ΔV $\quad P_{\Delta V} = P(\vec{r})\cdot\Delta V$

VE SPECIFIKOVANÉM OBJEMU V $\quad P_V = \int_V P(\vec{r})\, dV$ $\quad d\vec{r}$

$$P_{KDEKOLIV} = \int P(\vec{r})\, d\vec{r} = 1$$

CELÝ PROSTOR

$\pi(\vec{p})$ ... HUSTOTA PRAVDĚPODOBNOSTI NALEZENÍ ČÁSTICE VE STAVU S HYBNOSTÍ $\vec{p}$

$P_{\Delta\Omega} = \pi(\vec{p}) \cdot \Delta\Omega$ $\quad$ $\vec{p}$ MUSÍ NÁLEŽET $\Delta\Omega$

ELEMENT OBJEMU PROSTORU HYBNOSTÍ $\vec{p}$

$$P_{\Omega} = \int_{\Omega} \pi(\vec{p})\, d\vec{p}$$

$$P_{KDEKOLIV} = \int \pi(\vec{p})\, d\vec{p} = 1$$

NORMOVACÍ PODMÍNKA

CELÝ PROSTOR HYBNOSTÍ

VZTAH PRO $\psi(\vec{r})$

$P(\vec{r}) = |\psi(\vec{r})|^2$ NA TÉTO ÚROVNI POSTULÁT PRO ψ

NORMOVACÍ PODMÍNKA PRO P ~~MŮŽE ZAPSAT JAKO~~ DÁVÁ NORMOVACÍ PODMÍNKU

$$\int_{\text{CELÝ OBJEM}} |\psi(\vec{r})|^2 d\vec{r} = 1$$

JAK TO BUDE ~~PRO~~ $\pi(\vec{p})$ ....?

$$\pi(\vec{p}) = |\varphi(\vec{p})|^2 \quad \text{KDE} \quad \varphi(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \cdot \int \psi(\vec{r}) e^{-\frac{i\vec{p}\vec{r}}{\hbar}} d\vec{r}$$

FOURIEROVA TRANSFORMACE

JEDNODUCHÁ FOURIEROVA TRANSFORMACE

$\psi(x)$; $\varphi(k)$

$$\varphi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \cdot e^{-ikx} dx$$

ZPĚTNÁ FOURIEROVA TRANSFORMACE

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(k) e^{ikx} dk$$

ČÁSTEČNÉ ODŮVODNĚNÍ

INVERZNÍ FOURIEROVA TRANSFORMACE

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

POROVNÁME S OBECNÝM ŘEŠENÍM SCHRODINGEROVY ROVNICE PRO VOLNOU ČÁSTICI.

$$\psi(\vec{r}, t) = \underbrace{\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \varphi(\vec{p}) \underbrace{e^{\frac{i(\vec{p}\cdot\vec{r} - E(\vec{p})\cdot t)}{\hbar}}}_{\text{DE BROGLIEHO VLNA}}}_{\text{OBECNÁ SUPERPOZICE DE BROGLIEHO VLN}}$$

$\varphi(\vec{p})$ ... VYJADŘUJE ZASTOUPENÍ VLNY S HYBNOSTÍ $\vec{p}$; ČÍM VĚTŠÍ $|\varphi(\vec{p})|^2$ TÍM VĚTŠÍ ZASTOUPENÍ

NA ZÁKLADĚ POROVNÁNÍ

$$\pi(\vec{p}) \sim |\varphi(p)|^2$$

MANIPULACÍ S FOURIEROVOU TRANSFORMACÍ, LZE UKÁZAT, ŽE:

$$\int |\varphi(p)|^2 d\vec{p} = 1 \qquad (\text{ZA PŘEDPOKLADU } \int |\psi(\vec{r})|^2 d\vec{r} = 1)$$

CELÝ PROSTOR HYBNOSTÍ ... $\pi(\vec{p}) = |\varphi(\vec{p})|^2$

HUSTOTA PRAVDĚPODOBNOSTI NALEZENÍ ČÁSTICE

$$P(\vec{r}) = |\psi(\vec{r})|^2$$

$$\pi(\vec{p}) = |\varphi(\vec{p})|^2$$

FOURIEROVA TRANSFORMACE

FUNKCE $\varphi(p)$ JE $\Rightarrow$ $\varphi(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \cdot \int \psi(\vec{r}) e^{i\vec{p}\vec{r}/\hbar} d\vec{r}$

$$\boxed{\frac{\partial\rho}{\partial t} + \operatorname{div}\vec{j} = 0}$$

MECHANIKA KONTINUA	HUSTOTA TOKU $\frac{\partial\rho}{\partial t}$	HUSTOTA PROUDU $\operatorname{div}\vec{j}$
ELEKTRODYNAMIKA	HUSTOTA NÁBOJE $\frac{\partial\rho}{\partial t}$	HUSTOTA PROUDU NÁBOJE $\operatorname{div}\vec{j}$
KVANTOVÁ MECHANIKA	HUSTOTA PRAVDĚPODOBNOSTI	HUSTOTA TOKU PRAVDĚPODOBNOSTI

VZTAH PRO ~~[illegible]~~ HUSTOTU TOKU PRAVDĚPODOBNOSTI · FUNGUJE TO PODOBNĚ JAKO V ED.

$$j(\vec{r};t) = \frac{i\hbar}{2m}(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi)$$

DŮKAZ $\frac{\partial\rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\cdot\psi) = \psi^*\frac{\partial}{\partial t}\psi + \psi\cdot\frac{\partial}{\partial t}\psi^* =$

$$= \psi^*\frac{1}{i\hbar}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\right\}\psi + \psi\left(-\frac{1}{i\hbar}\right)\cdot$$

$$\cdot\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\right\}\psi^* = \frac{i\hbar}{2m}\left\{\psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^*\right\} =$$

POZN.

VYUŽÍVÁME VZTAHY $\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\right\}\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$

$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\right\}\psi^* = i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t}$

KOMPLEXNĚ SDRUŽENÝ MĚNÍ SE AKORÁT ZNAMÉNKO U i

$$= \frac{i\hbar}{2m}\left\{\operatorname{div}(\psi^*\nabla\psi) - \operatorname{div}(\psi\nabla\psi^*) - \cancel{\nabla\psi\nabla\psi^*} + \cancel{\nabla\psi\nabla\psi^*}\right\} =$$

$$= \operatorname{div}\underbrace{\left\{\frac{i\hbar}{2m}\cdot(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*)\right\}}_{-\vec{j}(\vec{r};t)}$$

DOKÁZALI JSME TEDY, ŽE $\frac{\partial\rho}{\partial t} = -\operatorname{div}\vec{j}$ $\Rightarrow$ $\boxed{\frac{\partial\rho}{\partial t} + \operatorname{div}\vec{j} = 0}$

11.)

STŘEDNÍ HODNOTY

STŘEDNÍ HODNOTY PRO NÁHODNOU VELIČINU x

a) x MÁ DISKRÉTNÍ SPEKTRUM

$x_1; x_2; \ldots x_r$

$P_1; P_2; \ldots P_m$

STŘEDNÍ HODNOTA TAKOVÉTO VELIČINY JE:

$$\langle x \rangle = P_1 x_1 + P_2 \cdot x_2 + \ldots P_m x_r$$

- SOUČET DISKRÉTNÍ PRAVDĚPODOBNOSTI

STŘEDNÍ HODNOTA FUNKCE NÁHODNÉ VELIČINY

$$\langle f(x) \rangle = P_1 f(x_1) + P_2 f(x_2) \ldots + P_m f(x_r)$$

(FUNKČNÍ HODNOTA)

b) x MÁ SPOJITÉ SPEKTRUM

$$\underbrace{\rho(x; x+\Delta x) = \rho(x)\Delta x}_{\text{HUSTOTA PRAVDĚPODOBNOSTI}} \quad (\Delta x \to 0)$$

$$\langle x \rangle = \int \rho(x) \cdot x \cdot dx$$

- INTEGRÁL PŘES CELÉ SPEKTRUM

STŘEDNÍ HODNOTA PROMĚNNÉ FUNKCE x

$$\langle f(x) \rangle = \int \rho(x) f(x)\, dx$$

STŘEDNÍ HODNOTY VE VLNOVÉ MECHANICE

STŘEDNÍ HODNOTA x

$$\langle x \rangle = \int P(\vec{r})\, x \cdot d\vec{r}$$

INTEGRÁL PŘES CELÝ PROSTOR $\vec{r}$ POLOHOVÉHO VEKTORU

STŘEDNÍ HODNOTA OBECNÉ FUNKCE POLOHOVÉHO VEKTORU

$$\langle F(\vec{r}) \rangle = \int P(\vec{r}) \cdot F(\vec{r})\, d\vec{r}$$

NAPŘ. POTENCIÁL JÁDRA ATOMU VODÍKU

STŘEDNÍ HODNOTA p_x

$$\langle p_x \rangle = \int \Pi(\vec{p}) \cdot p_x\, d\vec{p}$$

INTEGRÁL PŘES CELÝ PROSTOR HYBNOSTÍ

STŘEDNÍ HODNOTA FUNKCE $G(\vec{p})$ VEKTORU HYBNOSTI

$$\langle G(\vec{p}) \rangle = \int \Pi(\vec{p}) \cdot G(\vec{p})\, d\vec{p}$$

Př) ATOM VODÍKU V ZÁKLADNÍM STAVU

CHCEME STŘEDNÍ HODNOTU KINETICKÉ ENERGIE 1s STAVU VODÍKU

$$\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = \int |\varphi(\vec{p})|^2 \cdot \frac{p^2}{2m}\, d\vec{p}$$

KVADRÁT MODULU FOURIEROVY TRANSFORMACE VLNOVÉ FUNKCE 1s STAVU $\psi_{1s}(\vec{r})$

V DRTIVÉ VĚTŠINĚ PŘÍPADŮ (STAVŮ) NENÍ ŘADA VELIČIN OSTŘE DEFINOVANÁ, PRO 1s STAV MŮŽU NALÉZT RŮZNÉ HODNOTY POTENCIÁLNÍ A KINETICKÉ ENERGIE A MÁ SMYSL MLUVIT JEN O STŘEDNÍCH HODNOTÁCH.

RELACE NEURČITOSTI PRO x A p_x

a) ODVOZENÍ

$$\langle (x-\langle x\rangle)^2\rangle \cdot \langle (p_x-\langle p_x\rangle)^2\rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

PŘEDBĚŽNÁ ČÁST – BUDEME POTŘEBOVAT DVA VZTAHY PRO FOURIEROVY TRANSFORMACE

i) $\psi(\vec{r}) \underset{IFFT}{\overset{FT}{\rightleftarrows}} \varphi(\vec{p})$

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} \rightleftarrows \frac{i}{\hbar} p_x\, \varphi(\vec{p})$$

1D PŘÍPAD

$$-\frac{i\hbar}{1}\cdot\frac{\partial\psi}{\partial x} \underset{IFT}{\overset{FT}{\rightleftarrows}} p_x\varphi(\vec{p})$$

ii) $\psi_1(\vec{r}) \underset{IFT}{\overset{FT}{\rightleftarrows}} \varphi_1(\vec{p})$

$\psi_2(\vec{r}) \rightleftarrows \varphi_2(\vec{p})$

$$\boxed{\int \psi_1^*(\vec{r})\,\psi_2(\vec{r})\,d\vec{r} = \int \varphi_1^*(\vec{p})\cdot\varphi_2(\vec{p})\,d\vec{p}}$$

FOURIEROVA TRANSFORMACE ZACHOVÁVÁ SKALÁRNÍ SOUČIN.

VYJÁDŘÍME STŘEDNÍ HODNOTU p_x i x i $\langle (x-\langle x\rangle)^2\rangle \langle (p_x-\langle p_x\rangle)^2\rangle$

$$\boxed{\int \psi_1^*(x)\,\psi_2(x)\,dx = \int \varphi_1^*(p_x)\,\varphi_2(p_x)\,dp_x}$$ OZNAČÍM * BUDU JI DÁLE POUŽÍVAT

VYUŽIJU

$$\langle x\rangle = \int |\psi(\vec{r})|^2\cdot x\, d\vec{r}$$

DÁLE JEN 1D PŘÍPAD, TO JEST $\psi(x)$ A $\varphi(p_x)$

$$\langle x\rangle = \int |\psi(x)|^2\cdot x\cdot dx$$

$$\langle p_x\rangle = \int |\varphi(p_x)|^2\, p_x\, dp_x = \int \varphi^*(p_x)\cdot p_x\cdot\varphi(x)\,dp_x = \int \underbrace{(IFT\,\varphi)^*}_{\psi^*(x)}\cdot(IFT\, p_x\cdot\varphi)\,dx =$$

$$\boxed{\varphi(p_x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int \psi(x)\, e^{\frac{-ip_x x}{\hbar}}\, dx}$$

1 ROZMĚRNÉ

$$= \int \psi^*(x)(-i\hbar)\frac{\partial\psi}{\partial x}\,dx$$

12.)

BUDEME VYJADŘOVAT $\langle (x-\langle x\rangle)^2\rangle$

$$\boxed{\langle (x-\langle x\rangle)^2\rangle} = \langle (x^2 - 2x\langle x\rangle + \langle x\rangle^2)\rangle = \langle x^2\rangle - 2\langle x\rangle\cdot\langle x\rangle + \langle x\rangle^2 = \boxed{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2}$$

$$\boxed{\langle (p_x-\langle p_x\rangle)^2\rangle} = \boxed{+\langle p_x^2\rangle - \langle p_x\rangle^2}$$

$$\boxed{\langle x^2\rangle = \int |\psi(x)|^2\cdot x^2\cdot dx}$$

$$\langle p_x^2\rangle = \int |\varphi(p_x)|^2\cdot p_x^2\, dp_x = \int \varphi^*(p_x)\cdot p_x\cdot(p_x\cdot\varphi(p_x))\,dp_x =$$
$$= \int FT^*(\varphi)\cdot FT(p_x(p_x\varphi(p_x)))\,dx = \text{VYUŽIJU VZTAH } *$$
$$\left(\int \psi_1^*(x)\cdot\psi_2(x)\,dx = \int \varphi_1^*(p_x)\cdot\varphi_2(p_x)\cdot dp_x\right)^*$$
$$= \int \psi^*(x)(-\hbar^2)\cdot\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\,dx$$

$$\boxed{\langle x\rangle = \int |\psi(x)|^2\cdot x\cdot dx} \qquad \boxed{\langle p_x\rangle = \int \psi^*(x)\cdot(-i\hbar)\frac{\partial\psi}{\partial x}\,dx}$$

VLASTNÍ DŮKAZ $\langle (x-\langle x\rangle)^2\rangle\cdot\langle (p_x-\langle p_x\rangle)^2\rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$

$$(\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2)\cdot(\langle p_x^2\rangle - \langle p_x\rangle^2) \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

ZJEDNODUŠÍM $\langle x\rangle = 0$ A $\langle p_x\rangle = 0$ TOTO LZE ZAŘÍDIT VHODNOU VOLBOU SOUŘADNIC.

ZBYDE $\langle x^2\rangle\langle p_x^2\rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$

BUDEME UVAŽOVAT O VÝRAZU

$$I(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} \left| x\,\psi(x) + \lambda\hbar\cdot\frac{\partial\psi}{\partial x}\right|^2 dx$$

Z TOHOTO VYPLÝVÁ RELACE NEURČITOSTI

$I(\lambda) \geq 0$ PRO VŠECHNY HODNOTY λ

$$\langle x^2\rangle\langle p_x^2\rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

POUŽIJEME POMOCNÉ TVRZENÍ: $I(\lambda) = \langle x^2\rangle - \lambda\hbar + \lambda^2\langle p_x^2\rangle$

FINÁLE DŮKAZU

$$I(\lambda) = \langle x^2\rangle - \lambda\hbar + \lambda^2\langle p^2\rangle \geqq 0 \quad \text{PRO VŠECHNY } \lambda$$

TEDY I MINIMUM FUNKCE $I(\lambda)$ JE $\geqq 0$

BUDU TEDY URČOVAT MINIMUM $I(\lambda)$

$$\frac{dI}{d\lambda} = -\hbar + 2\lambda\langle p^2\rangle = 0$$

$$\lambda_{MIN} = \frac{\hbar}{2\langle p^2\rangle}$$

$$\text{MIN } I(\lambda) = I(\lambda_{MIN}) = \langle x^2\rangle - \frac{\hbar^2}{2\langle p^2\rangle} + \frac{\hbar^2\langle p^2\rangle}{4\langle p^2\rangle^2} =$$

$$= \langle x^2\rangle - \frac{\hbar^2}{4\langle p^2\rangle} \geqq 0 \Rightarrow \langle x^2\rangle\langle p_x^2\rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

$$I(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty}\left(x\psi^* + \lambda\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right)\left(x\psi + \lambda\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)dx =$$

$$= \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\cdot\psi\cdot x^2\cdot dx}_{\langle x^2\rangle} + \lambda\hbar\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} + \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right)dx}_{-1} +$$

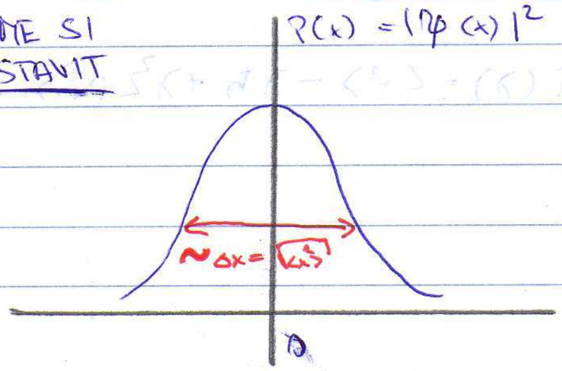
$$+ \lambda^2\cdot\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty}\hbar^2\cdot\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\cdot\frac{\partial\psi}{\partial x}\,dx}_{\langle p_x^2\rangle}$$

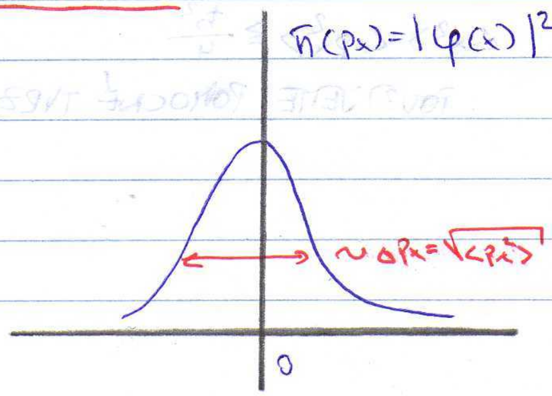
DŮKAZ: $\int_{-\infty}^{\infty}\hbar^2\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\cdot\frac{\partial\psi}{\partial x}\,dx = \underbrace{\left[\hbar^2\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\right]_{-\infty}^{\infty}}_{\text{NULA PRO VÁZANÉ STAVY}} - \underbrace{\int\psi^*\hbar^2\cdot\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}}_{\langle p_x^2\rangle} = \langle p_x^2\rangle$

OBECNĚ PRO STAVY S ψ JDOUCÍ K NULE A PRO x JDOUCÍ K $\pm\infty$.

INTERPRETACE, VÝZNAM A APLIKACE (RELACÍ NEURČITOSTI)

MŮŽEME SI PŘEDSTAVIT

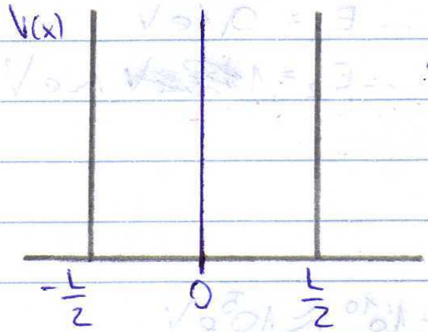




13.)

ČÍM MENŠÍ Δx, TÍM VĚTŠÍ Δp_x A NAOPAK.
VLASTNOST ČÁSTICE V KVANTOVÉ TEORII
JE NEZÁVISLÁ NA FORMĚ MĚŘENÍ.
NEZÁVISÍ TO NA TOM, JAK TO MĚŘÍME!
RELACE NEURČITOSTI NÁM DOVOLUJÍ VIDĚT
TO CO DĚLAJÍ MIKROČÁSTICE, NAPŘÍKLAD
ČÁSTICE V POTENCIÁLOVÉ JÁMĚ O ŠÍŘCE L
POTOM Z RELACÍ NEURČITOSTI MŮŽEME ODHADNOUT
JEJÍ ENERGII.

PŘI APLIKACE RELACÍ NEURČITOSTI NA ŘEŠENÍ ∞ HLUBOKÉ POTENCIÁLOVÉ JÁMY.



PROVEDEME ODHAD ENERGIE ZÁKLADNÍHO STAVU, BEZ ŘEŠENÍ SCHRODINGEROVY ROVNICE.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi = E\psi \qquad / \cdot \psi^* \int dx = 1$$

$$\frac{-1}{2m}\underbrace{\int \psi^*\left(-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\psi\, dx}_{\langle p_x^2\rangle} = E\cdot \underbrace{\int \psi^*\psi\, dx}_{1}$$

$$E = \frac{\langle p_x^2\rangle}{2m} \leftarrow \text{ODHAD}$$

$$\langle p_x^2\rangle \cdot \langle x^2\rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

$$\langle p_x^2\rangle \geq \frac{\hbar^2}{4\langle x^2\rangle} \Rightarrow \frac{\hbar^2}{4\cdot\frac{L^2}{4}} \cong \frac{\hbar^2}{L^2} \;\ldots\; E \geq \frac{\hbar^2}{2mL^2}$$

$$\langle x^2\rangle < \frac{L^2}{4}$$

PŘESNÝ TVAR

$$E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}$$

ODHADY (DALŠÍ) ...

a) PŘI ELEKTRON V POLOVODIČOVÉ POTENCIÁLOVÉ JÁMĚ

$m = m_e \cong \cdot 10^{-30}\,kg$

$L \in 1\,nm \ldots 10\,nm$

b) PŘI α - ČÁSTICE V RADIOAKTIVNÍM JÁDRE

$m = m_\alpha \quad L \sim 10\,fermi$

a) $\frac{\hbar^2}{2 m_e \cdot L^2} \quad E[eV] = \frac{\hbar^2 [J\cdot s]}{2 \cdot m_e[kg] \cdot e[C] \cdot l^2[nm]} \cdot 10^{18}$

PRO ÚČELY ODHADU $\hbar \approx 10^{-34}\,Js$

$m_e \approx 10^{-30}\,kg$

$e \approx 10^{-19}\,C$

$E[eV] = \frac{0,1}{l^2[nm]} \qquad l = 1\,nm \ldots E_1 = 0,1\,eV$

POLOVODIČOVÉ KVANTOVÉ JÁMY $\quad l = 10\,nm \ldots E_2 = 1\,meV$

b) $m_\alpha \approx 10^4 \cdot m_e$

$l \approx 10^{-14}\,m \ldots 10^{-5}\,nm$

$E = 0,1\,eV \cdot \underbrace{10^{-4}}_{\text{POMĚR HMOT.}} \cdot \underbrace{10^{10}}_{\text{POMĚR ROZMĚRŮ}} \approx 10^5\,eV$

DO ROKU 1925 BYLO JASNÉ, ŽE Δx A Δp NEPŮJDE ZÁROVEŇ PŘESNĚ MĚŘIT, VYPLÝVALO TO Z KOMUTAČNÍCH RELACÍ.

W. HEISENBERG - BŘEZEN 1927 - ZEITSCHIFT FÜR PHYSICK

ODVODIL Z MATICOVÉ MECHANIKY!

Δx JE ODVOZENÉ Z $\psi(x)$ A Δp JE ODVOZENO Z $\varphi(p)$. OBĚ VELIČINY CHARAKTERIZUJÍ SYSTÉM, ALE V KONTEXTU NAŠEHO POZOROVÁNÍ.

14.) PŘEDBĚŽNĚ K ČASOVÉMU VÝVOJI

PRACUJEME SE SCHRÖDINGEROVOU ROVNICÍ

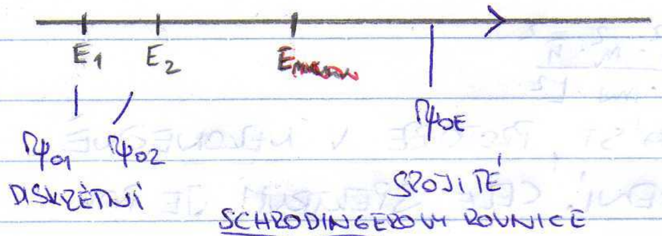
$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec r)\right\}\psi = i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t}$$

VÍME, ŽE MÁ ŘEŠENÍ VE TVARU $\psi(\vec r;t) = \psi_0(\vec r)\cdot e^{-i\frac{E\cdot t}{\hbar}}$

VYHOVUJÍCÍ STACIONÁRNÍ SCHRÖDINGEROVĚ ROVNICI:

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec r)\right\}\psi_0 = E\cdot\psi_0$$

ENERGIOVÉ SPEKTRUM -



OBECNÉ ŘEŠENÍ SCHRÖDINGEROVY ROVNICE DOSTANEME JAKO SUPERPOZICI

$$\psi(\vec r;t) = \underbrace{\sum_n c_n\,\psi_{0n}(\vec r)\cdot e^{i\frac{E\cdot t}{\hbar}}}_{\text{SOUČET PŘES DISKRÉTNÍ ČÁST SPEKTRA}} + \underbrace{\int_{E_{min}}^{\infty} c_E\,\psi_{0E}(\vec r)\cdot e^{-i\frac{E\cdot t}{\hbar}}\,dE}_{\text{SOUČET PŘES SPOJITOU ČÁST SPEKTRA}}$$

ŘEŠENÍ POČÁTEČNÍ ÚLOHY, TO JEST ÚLOHA DÁNO $\psi_0(\vec r;t) = \psi_0(\vec r)$ A MÁME URČIT $\psi(\vec r;t)$.

1.) KROK 1

POROVNÁME $\psi_0(\vec r)$ S $\psi(\vec r;t=0)$ Z ROVNICE

$$\psi_0(\vec r) = \sum_n c_n\,\psi_{0n}(\vec r) + \int_{E_{min}}^{\infty} c_E\cdot\psi_{0E}(\vec r)\,dE$$

TOTO URČÍME S VYUŽITÍM ORTOGONALITY SOUBORU FUNKCÍ $\{\psi_{0n};\psi_{0E}\}$

2.) KROK 2

ZÍSKANÉ HODNOTY c_n A c_E DOSADÍME DO:

$$\psi(\vec{r};t) = \sum_n c_n \psi_{0n}(\vec{r}) \cdot e^{-i\frac{E \cdot t}{\hbar}} + \int_{E_{min}}^{\infty} c_E \cdot \psi_{0E}(\vec{r}) \cdot e^{-i\frac{E \cdot t}{\hbar}} dE$$

A ZÍSKÁME ČASOVÝ VÝVOJ.

PŘÍKLAD: ∞ HLUBOKÁ POTENCIÁLOVÁ JÁMA

$$\psi(\vec{r};t) = \sum_n c_n \psi_{0n}(\vec{r}) \cdot e^{-i\frac{E \cdot t}{\hbar}} + \underbrace{\int_{E_{min}}^{\infty} c_E \cdot \psi_{0E}(\vec{r}) \cdot e^{-i\frac{E \cdot t}{\hbar}} dE}_{\text{V } \infty \text{ HLUBOKÉ JÁMĚ NENÍ}}$$

VLNOVÁ FUNKCE N-TÉHO STAVU ∞ HLUBOKÉ POT. JÁMY

$$\psi(x;t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_{0n}(x) \cdot e^{-i\frac{E_n \cdot t}{\hbar}}$$

$$\psi_{0n}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \sin\left(\frac{n \cdot x \cdot \pi}{L}\right)$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 \cdot n^2 \cdot \pi^2}{2 \cdot m \cdot L^2}$$

NENÍ TAM SPOJITÁ ČÁST, PROTOŽE V NEKONEČNĚ HLUBOKÉ JÁMĚ TO NENÍ. CELÉ SPEKTRUM JE PAK DISKRÉTNÍ.

MÁME DÁNO $\psi_0(x) = \psi(x)$; $t=0$, A CHCEME ČASOVÝ VÝVOJ DOŘEŠIT

1) POROVNÁM

UDĚLÁME OBRAT

$$\psi_0(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_{0n}(x) \quad / \cdot \psi_{0k}(x) \; ; \int_0^L$$

$$\int_0^L \psi_0(x) \cdot \psi_{0k}(x)\, dx = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \cdot \underbrace{\int_0^L \psi_{0n}(x) \psi_{0k}(x)\, dx}_{\delta_{kn}} = c_k$$

$$c_k = \int_0^L \psi_0(x) \cdot \psi_{0k}(x)\, dx$$

2) DOSADÍM DO:

$$\psi(\vec{r};t) = \sum_n c_n \psi_{0n}(\vec{r}) \cdot e^{-i\frac{E \cdot t}{\hbar}} + \int_{E_{min}}^{\infty} c_E \psi_{0E}(\vec{r}) \cdot e^{-i\frac{E \cdot t}{\hbar}} dE$$

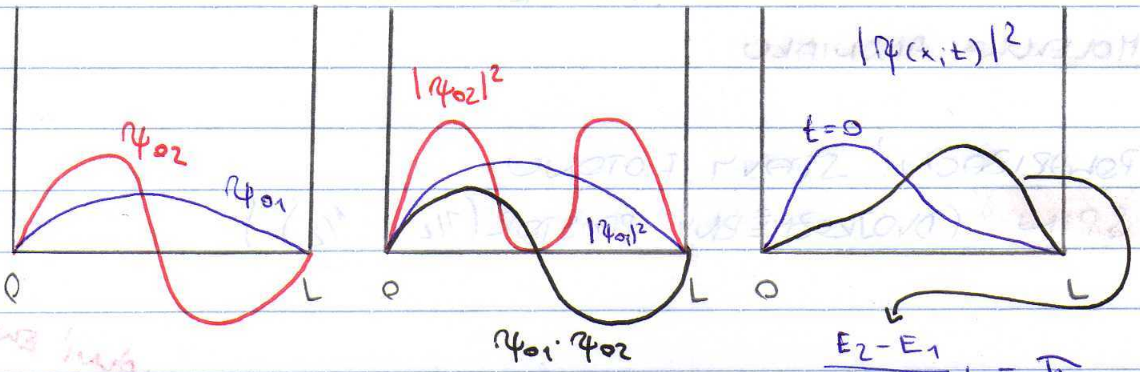
JAK TO VYJDE, SI UKÁŽEME PRO SPECIÁLNÍ ÚLOHU

$$\psi_0(x) = \underset{\uparrow c_1}{\frac{1}{\sqrt{2}}} \psi_{01}(x) + \underset{\uparrow c_2}{\frac{1}{\sqrt{2}}} \psi_{02}(x) \qquad c_3 = c_4 = 0$$

$$\psi(x;t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_{01}(x) \cdot e^{-i\frac{E \cdot t}{\hbar}} + \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_{02}(x) \cdot e^{-i\frac{E \cdot t}{\hbar}}$$

15.

$$|\psi(x;t)|^2 = \frac{1}{2}|\psi_{01}(x)|^2 + \frac{1}{2}\cdot|\psi_{02}(x)|^2 + \psi_{01}(x)\cdot\psi_{02}(x)\cdot\cos\left(\frac{(E_2-E_1)\cdot t}{\hbar}\right)$$



$$\frac{E_2-E_1}{\hbar}t = \pi$$

ODTUD MŮŽEME ZJISTIT FREKVENCI OSCILACÍ

$$\boxed{t = \frac{\pi\cdot\hbar}{E_2-E_1}}$$

BILANCE, VLNOVÁ MECHANIKA

CO JSME ZATÍM PROŠLI?

- STAV SYSTÉMU JE POPSÁN FUNKCÍ $\psi(\vec{r};t)$
- ψ VYHOVUJE SCHRÖDINGEROVĚ ROVNICI
- POVOLENÉ HODNOTY ENERGIE, KTERÉ MOHOU NASTAT, JSOU VLASTNÍMI HODNOTAMI HAMILTONIÁNU
- PLATÍ $P(\vec{r}) = |\psi(\vec{r})|^2$; $\pi(\vec{p}) = |\varphi(\vec{p})|^2$
- ODVODILI JSME SI RELACE NEURČITOSTI
- S JAKOU PRAVDĚPODOBNOSTÍ NALEZNEME PRO STAV $\psi(\vec{r};t)$ DANOU ENERGII E?
- NIC NEVÍME O JINÝCH VELIČINÁCH
- PŘÍLIŠ MNOHO TVRZENÍ, KTERÁ BUĎ NEJSOU PODLOŽENA, NEBO LOGICKY PROPOJENA.

JE POTŘEBA ZAVEDENÍ AXIOMATICKÉHO ZÁKLADU.

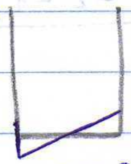
PŘÍKLADY SYSTÉMŮ S KONEČNĚ ROZMĚRNÝM PROSTOREM ŘEŠENÍ

KONEČNĚ ROZMĚRNÝ PROSTOR, DŮSLEDEK APROXIMACE:
- ∞ HLUBOKÁ JÁMA V ELEKTRICKÉM POLI
- MOLEKULA AMONIAKU

PŘÍRODA UŽ JE TAKOVÁ, KONEČNĚ ROZMĚRNÝ PROSTOR:
- POLARIZAČNÍ STAVY FOTONU
- SPIN (DVOJROZMĚRNÝ PROSTOR $(1/2, -1/2)$)

PŘ1 ∞ HLUBOKÁ POTENCIÁLOVÁ JÁMA

V(x)



ZATŘEPEME

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) - \underbrace{e}_{\text{NÁBOJ ELEKTRONU}}\cdot \underbrace{E}_{\text{INTENZITA ELEKTROSTATICKÉHO POLE}}\left(x-\frac{L}{2}\right)\right\}\psi(x) = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

MÍRA POTENCIÁLNÍ ENERGII V POLI E

KONSTANTNÍ POSUV $+V(x-\frac{L}{2})$

CO SE STANE SE STAVY, KDYŽ TO NAKLONÍME, NEBO S TÍM BUDEME TŘEPAT.

ŘEŠENÍ LZE VYJÁDŘIT VE TVARU JAKO KOMBINACI ŘEŠENÍ PRO NEKONEČNĚ HLUBOKOU JÁMU.

$$\psi(x;t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n(t)\cdot\psi_n(x)$$

ŘEŠENÍ PRO ÚLOHU BEZ **E**.

NENÍ SPOJITÉ, ALE DISKRÉTNÍ, PROTOŽE TO JDE DO ∞, KDYBY TO BYLO KONEČNÉ HLOUBKY POTOM BY TO BYLO I SPOJITÉ.

POZN.: ZÁPIS UMOŽNĚN ÚPLNOSTÍ SOUBORU $\{\psi_{0n}(x)\}$

- INTERPRETACE $c_n(t)$; $c_n(t)$ JE AMPLITUDA PRAVDĚPODOBNOSTI, NALÉZT SYSTÉM VE STAVU ψ_{0n} V ČASE **t**.

16.)

POSTUP ŘEŠENÍ:

DOSADÍME $\psi(x;t)=\sum_{n=1}^{\infty} c_n(t)\cdot\varphi_n(x)$ DO

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)-e\cdot E\left(x-\frac{L}{2}\right)\right\}\psi(x)=i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

$\Downarrow$

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)-e\cdot E(x')\right\}\cdot\sum_n c_n\cdot\varphi_n=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\sum_n c_n\cdot\varphi_n$$

$\Downarrow$

$$\sum_n c_n\left(E_n\cdot\varphi_n-e\cdot E\cdot x'\cdot\varphi_n\right)=\sum_n\left(i\hbar\cdot\frac{d}{dt}c_n\right)\cdot\varphi_n \;\Big/\cdot\varphi_m(x)\Big|\int_0^L$$

$\Downarrow$

$$\sum_n c_n\Big(E_n\underbrace{\int_0^L(\varphi_m\cdot\varphi_n)dx}_{\delta_{mn}}-e\cdot E\underbrace{\int_0^L(\varphi_m\cdot x'\varphi_n)dx}_{x'_{mn}}\Big)=\sum_n\left(i\hbar\frac{d}{dt}c_n\right)\underbrace{\int_0^L(\varphi_m\cdot\varphi_n)dx}_{\delta_{mn}}$$

$\Downarrow$ FINTA S ORTOGONALITOU

$$c_m(t)\cdot E_m-\underbrace{e\cdot E\sum_n c_n\cdot x'_{mn}}_{\sum_n c_n(t)(-e\cdot E\cdot x'_{mn})}=i\hbar\frac{d}{dt}c_m$$

PLATÍ PRO $m=1;2\ldots$

ZAPÍŠEME POMOCÍ MATICOVÉ SYMBOLIKY

$$\underbrace{\left[\begin{pmatrix}E_1&0&0&\cdots\\0&E_2&0&\cdots\\0&0&\ddots&\\\vdots&&&\end{pmatrix}-e\cdot E\begin{pmatrix}x'_{11}&x'_{12}&\cdots\\x'_{21}&x'_{22}&\cdots\\\vdots&\vdots&\ddots\end{pmatrix}\right]}_{\text{MATICE HAMILTONIÁNU}}\underbrace{\begin{pmatrix}c_1\\c_2\\\vdots\end{pmatrix}}_{\text{SLOUPCOVÝ VEKTOR POPISUJÍCÍ STAV SYSTÉMU}}=i\hbar\frac{d}{dt}\begin{pmatrix}c_1\\c_2\\\vdots\end{pmatrix}$$

SCHRÖDINGEROVA ROVNICE V MATICOVÉM TVARU (NEKONEČNÉ MATICE)

V MNOHA PŘÍPADECH JE MOŽNÉ UDĚLAT TO, ŽE MATICE ~~ŘÍZNEME~~, Z NEKONEČNÉ MATICE VYŘÍZNEME HORNÍ POČET, KTERÉ STAVY SE ZA DANÉ SITUACE NEJVÍCE UPLATNÍ.

HLEDÁME DÁLE ŘEŠENÍ VE TVARU:

$$\psi(x;t) = c_1(t)\psi_1 + c_2(t)\psi_2 + \underbrace{\qquad}_{\text{UŘÍZNUTO}}$$

TAKOVÁTO APROXIMACE JE ODŮVODNITELNÁ V PŘÍPADĚ, ŽE ELEKTRICKÉ POLE JE SLABÉ A DÍVÁM SE NA NĚ JAK SE MI ZMĚNÍ PRVNÍ STAV, PRVNÍ HLADINA, NEBO DRUHÁ HLADINA. JE TO TAKY ODŮVODNĚNÉ PŘIBLÍŽENÍ, KDYŽ MÁ POLE FREKVENCI, PŘI KTERÉ PŘEHAZUJE STAVY MEZI PRVNÍ A DRUHOU HLADINOU $\omega = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$

DÍKY $\psi(x;t) = c_1(t)\psi_1 + c_2(t)\psi_2$ MÁME DVOU-ROZMĚRNÝ PROSTOR ŘEŠENÍ, DVĚ FÁZOVÉ FUNKCE JAKO DŮSLEDEK ZJEDNODUŠENÍ.

DOSTÁVÁME PRO $c_1(t)$; $c_2(t)$

$$\left[\begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} - e\cdot E\begin{pmatrix} x'_{11} & x'_{12} \\ x'_{21} & x'_{22} \end{pmatrix}\right]\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = i\hbar \underbrace{\frac{d}{dt}}_{E\text{ – PO DOSAZENÍ}} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

BUDEME HLEDAT ŘEŠENÍ VE TVARU

$$\begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{10} \\ c_{20} \end{pmatrix} \cdot e^{-i\frac{E\cdot t}{\hbar}}$$

$$\begin{pmatrix} E_1 - e\cdot E_{el}\cdot x'_{11} & -e\cdot E_{el}\cdot x'_{12} \\ -e\cdot E_{el}\cdot x'_{21} & E_2 - e\cdot E_{el}\cdot x'_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_{10} \\ c_{20} \end{pmatrix} = E\cdot\begin{pmatrix} c_{10} \\ c_{20} \end{pmatrix}$$ ~~ŘEŠ~~ PROBLÉM VLASTNÍCH HODNOT

17.)

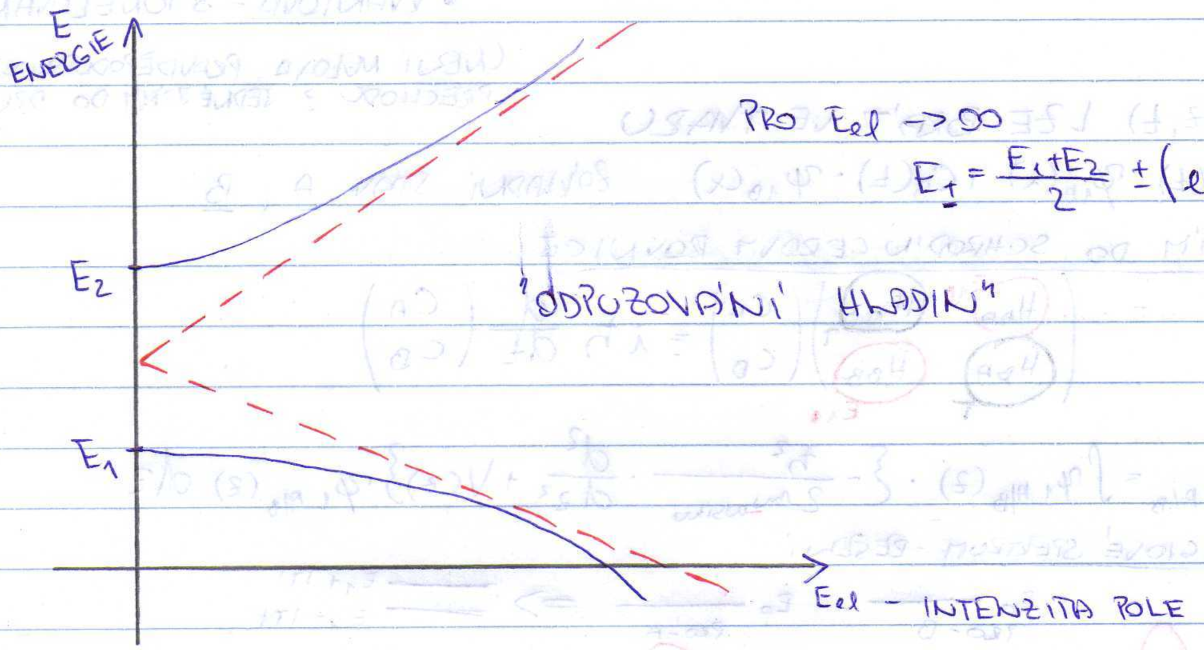
$$x'_{11} = \int \psi_1^2(x) \cdot \left(x - \frac{L}{2}\right) dx = 0$$

$$x'_{22} = \int \psi_2^2(x) \cdot \left(x - \frac{L}{2}\right) dx = 0$$

$$x'_{12} = x'_{21} = \int \psi_1(x) \cdot \psi_2(x) \cdot \left(x - \frac{L}{2}\right) dx$$

$$\begin{pmatrix} E_1 - E_{el} & -e E_{el} x'_{12} \\ -e E_{el} \cdot x'_{12} & E_2 - E_{el} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = 0$$

$$E_\pm = \frac{E_1 + E_2}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{E_2 - E_1}{2}\right)^2 + e^2 \cdot E_{el}^2 \cdot x_{12}^2}$$

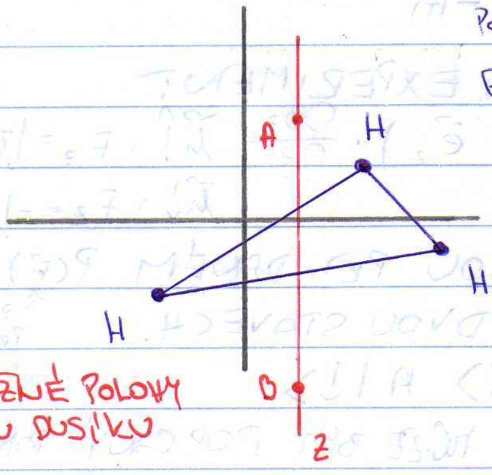


PRO $E_{el} \to \infty$

$$E_\pm = \frac{E_1 + E_2}{2} \pm \left(e \cdot E_{el} \cdot x_{12}\right)$$

„ODPUZOVÁNÍ HLADIN"

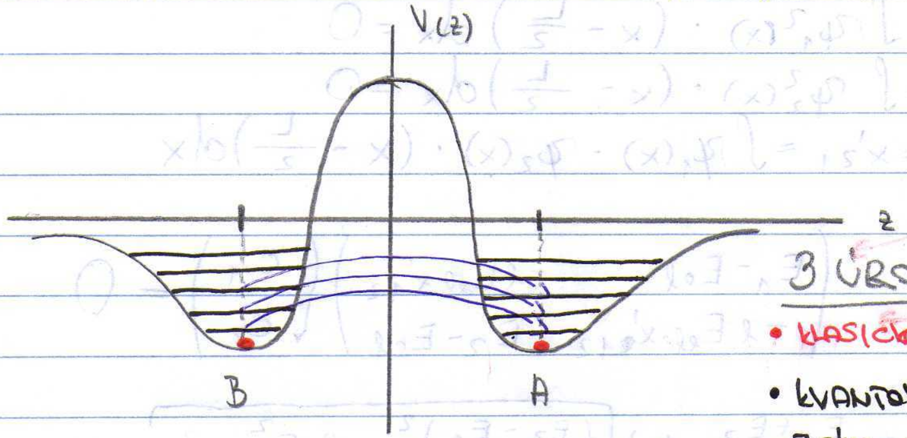
PŘ2. MOLEKULA AMONIAKU



POKUD ŘEKNEME, ŽE VODÍKY (H) JSOU FIXOVANÉ, PAK DUSÍK MŮŽE BÝT BUĎ NA JEDNÉ STRANĚ (A) NEBO NA DRUHÉ (B). NEBO TAKY MŮŽE TUNELOVAT NAHORU DOLŮ A OPAČNĚ.

A, B – DVĚ MOŽNÉ POLOHY ATOMU DUSÍKU

POTENCIÁLNÍ ENERGIE ATOMU DUSÍKU, PRO FIXNÍ GEOM H_3



3 ÚROVNĚ ÚVAH

- KLASICKÁ ÚVAHA
- KVANTOVÁ – POTENCIÁLOVÉ JÁMY UVAŽUJEME ODDĚLENĚ
- KVANTOVÁ – S TUNELOVÁNÍM (NENÍ NULOVÁ PRAVDĚPODOBNOST PŘECHODU Z JEDNÉ JÁMY DO DRUHÉ)

$\Psi(z;t)$ LZE BRÁT VE TVARU

$C_A(t)\,\psi_{1A}(x) + C_B(t)\cdot\psi_{1B}(x)$ ZÁKLADNÍ STAV A ; B

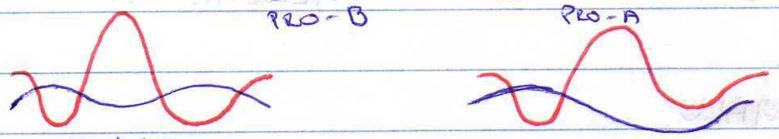
DOSADÍM DO SCHRODINGEROVY ROVNICE

$$\begin{pmatrix} \underbrace{H_{AA}}_{E_1} & \underbrace{H_{AB}}_{T} \\ \underbrace{H_{BA}}_{T} & \underbrace{H_{BB}}_{E_1} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} C_A \\ C_B \end{pmatrix} = i\hbar\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} C_A \\ C_B \end{pmatrix}$$

A/B = A NEBO B $\quad H_{A/B} = \int \psi_{1\,A/B}(z)\cdot\left\{-\frac{\hbar^2}{2m_{dusíku}}\cdot\frac{d^2}{dz^2} + V(z)\right\}\psi_{1\,A/B}(z)\,dz$

ENERGIOVÉ SPEKTRUM – ŘEŠENÍ

E_0 ——— PRO – B $\quad E_0$ ——— PRO – A $\quad \Longrightarrow \quad E_1 + |T|$, $E_1 - |T|$



Př. 4 SPIN – STERN GERLACHŮV EXPERIMENT

$\frac{\partial B_z}{\partial z} > 0 \quad F = (\vec{\mu}\,\vec{e}_z)\cdot\frac{\partial B_z}{\partial z} \quad \vec{\mu}\uparrow,\ F_z = |\vec{\mu}|\frac{\partial B_z}{\partial z}$

$\vec{\mu}\downarrow,\ F_z = -|\vec{\mu}|\frac{\partial B_z}{\partial z}$

PRAVDĚPODOBNOSTNÍ PROSTOR $\vec{p}$ – ATOMY STŘÍBRA SE MOHOU PŘI DANÉM $P(\vec{r})$ A DANÉM $\pi(\vec{p})$ NACHÁZET VE DVOU STAVECH. ← PRAVDĚPODOBNOSTNÍ PROSTOR $\vec{r}$

PRACOVNĚ OZNAČUJEME $|\uparrow\rangle$ A $|\downarrow\rangle$

OBECNÝ STAV ATOMU STŘÍBRA MŮŽE BÝT POPSÁNY POMOCÍ

CHARAKTERIZUJE ORBITÁLNÍ CHOVÁNÍ → $\psi(\vec{r})$ A NEBO KOMBINACÍ SPINOVÝCH STAVŮ

$\underbrace{\mu_\uparrow|\uparrow\rangle + \mu_\downarrow|\downarrow\rangle}$

CHARAKTERIZUJE CHOVÁNÍ SPINU „(VNITŘNÍ SVĚT STŘÍBRA)"

18.) I/ MATEMATICKÁ STRUKTURA MNOŽINY FYZIKÁLNĚ PŘIJATELNÝCH VLNOVÝCH FUNKCÍ

a) ÚVOD HILBERTŮV PROSTOR $\mathcal{H}_{\vec{r}} - \{\psi(\vec{r})\}$; $\int|\psi|^2 d\vec{r} < \infty$

b) VYJÁDŘENÍ VLNOVÉ FUNKCE V BÁZI

1Př1) CO MUSÍ SPLŇOVAT VLNOVÉ FUNKCE?:
(NÁVRAT, NAPOSLEDY K VLNOVÉ MECHANICE)

PRAVDĚPODOBNOST $P(\vec{r})$ NALEZENÍ ČÁSTICE V MÍSTĚ $\vec{r}$: $\int_{\text{CELÝ PROSTOR}} P(\vec{r})\, d\vec{r} = 1$ ČÁSTICI NĚKDE NAJDEME

$$\boxed{P(\vec{r}) = |\psi(\vec{r})|^2}$$

VYHOVUJÍ TYTO VLNOVÉ FUNKCE $\boxed{\int|\psi(\vec{r})|^2 \cdot d\vec{r} = 1} \longrightarrow$

PROBLÉM – ~~...~~ MNOŽINA LINEÁRNÍCH FUNKCÍ NENÍ PROSTOREM KDYŽ ~~SE OMEZ~~ VLNOVÉ FUNKCE OMEZÍME KONEČNOU PODMÍNKOU. PROBLÉM PRINCIPEM SUPERPOZICE SOUČET VLNOVÝCH FUNKCÍ, KTERÉ SPLŇUJÍ PODMÍNKU, TAK JEJICH SOUČET UŽ JI NESPLŇUJE.
MÍSTO TOHO SE SPOKOJÍME S PODMÍNKOU:
$\int|\psi(\vec{r})|^2 d\vec{r} < \infty$ (INTEGRÁL JE TEDY KONEČNÝ)

$\boxed{\mathcal{H}_{\vec{r}}}$ VOLÍME TUTO PODMÍNKU ABY BYL ROZPOR PŘIJATELNÝCH FUNKCÍ LINEÁRNÍ, ABYCHOM MĚLI LINEÁRNÍ PROSTOR FUNKCÍ ψ.

$\rightarrow$ MNOŽINA FUNKCÍ $\psi(\vec{r})$ SPLŇUJE TUTO PODMÍNKU, JE OZNAČOVÁNA SYMBOLEM $\mathcal{H}_{\vec{r}}$. MLUVÍME O HILBERTOVĚ PROSTORU KOMPLEXNÍCH FUNKCÍ JEDNÉ VEKTOROVÉ PROMĚNNÉ.

VEKTOROVÝ PROSTOR → UNITÁRNÍ PROSTOR – HILBERTŮV PROSTOR

- $\mathcal{H}_{\vec{r}}$ JE LINEÁRNÍ VEKTOROVÝ PROSTOR. JE-LI $\psi_1(\vec{r}) \in \mathcal{H}_{\vec{r}}$ A $\psi_2(\vec{r}) \in \mathcal{H}_{\vec{r}}$ PAK TAKÉ $\lambda_1 \in C$; $\lambda_2 \in C$, PAK TAKÉ $\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2 \in \mathcal{H}_{\vec{r}}$.
MÁM DVĚ VLNOVÉ FUNKCE NÁLEŽÍCÍ HILBERTOVU PROSTORU. PAK JAKÁKOLIV JE JICH LINEÁRNÍ KOMBINACE NÁLEŽÍ HILBERTOVU PROSTORU. (NÁSOBENÍ SKALÁREM, SČÍTÁNÍ)

$$\int|\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2|^2 d\vec{r} = \int(\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2)^* \cdot (\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2)\, d\vec{r} =$$
$$= |\lambda_1|^2 \cdot \underbrace{\int|\psi_1|^2 dr}_{<\infty} + |\lambda_2|^2 \cdot \underbrace{\int|\psi_2|^2 d\vec{r}}_{<\infty} + \underbrace{\int(\lambda_1^* \cdot \lambda_2 \cdot \psi_1^*\psi_2 + \lambda_1\lambda_2^* \cdot \psi_1 \cdot \psi_2^*)\, d\vec{r}}_{<\infty}$$

KONEČNÉ INTEGRÁLY

- $\mathcal{H}_{\vec{r}}$ JE NAVÍC UNITÁRNÍM PROSTOREM, DEFINUJEME-LI SKALÁRNÍ SOUČIN ~~PAK~~, JAKO ZOBRAZENÍ, KTERÉ VÁHU $\{\varphi(\vec{r}); \psi(\vec{r})\}$ PŘIŘADÍ KOMPLEXNÍ ČÍSLA $(\varphi;\psi) = \int\varphi^*(\vec{r}) \cdot \psi(\vec{r})\, d\vec{r}$
JDE O ZOBRAZENÍ $(\mathcal{H} \times \mathcal{H} \to C)$

JDE TO DEFINOVAT PŘEDPISEM:

$$(\varphi;\psi) = (\psi;\varphi)^*$$

"LINEARITA" $(\varphi; \lambda_1\cdot\psi_1 + \lambda_2\psi_2) = \lambda_1(\varphi;\psi_1) + \lambda_2(\varphi;\psi_2)$

"ANTILINEARITA" $(\lambda_1\varphi_1 + \lambda_2\varphi_2; \psi) = \lambda_1^*(\varphi_1;\psi) + \lambda_2^*(\varphi_2;\psi)$

SKAL. SOUČIN ψ S ψ $(\psi;\psi) \geq 0$ JE KLADNÉ REÁLNÉ ČÍSLO, JE VĚTŠÍ NEŽ NULA PRO VŠECHNA $\psi \neq 0$ RŮZNÁ OD NULY A JE ROVEN NULE PRO $\psi = 0$.
TOMU SE ŘÍKÁ POZITIVNÍ DEFINITNOST SKALÁRNÍHO SOUČINU.

TOTO JSOU TYPICKÉ VLASTNOSTI SKALÁRNÍHO SOUČINU NA KOMPLEXNĚ SDRUŽENÉM PROSTORU.
HILBERTŮV PROSTOR SE SKALÁRNÍM SOUČINEM JE TAK ZVANÝ UNITÁRNÍ PROSTOR.

TOTO VŠE MUSÍ SPLŇOVAT VLNOVÉ FUNKCE ABY MĚLI PRAVDĚPODOBNOSTNÍ INTERPRETACI.

19.)

• $\mathcal{H}_{\vec{r}}$ JE NAVÍC HILBERTŮV PROSTOR.

NEJPRVE DEFINUJEME NA TOMTO PROSTORU NORMU A METRIKU

NORMA NA $\mathcal{H}_{\vec{r}}$

Z OBRAZENÍ $\mathcal{H}_{(\vec{r})} \xrightarrow{DO} \mathbb{R}$ KTERÉ FUNKCI ψ

PŘIŘADÍ $\sqrt{\psi;\psi} \in \mathbb{R}$

$$\psi \in \mathcal{H}_{\vec{r}} \longrightarrow \sqrt{\psi;\psi} \in \mathbb{R}$$

TAKTO JE DEFINOVANÁ NORMA HILBERTOVA PROSTORU

METRIKA - INDUKOVANÁ SKALÁRNÍM SOUČINEM

$$\mathcal{H}_{\vec{r}} \times \mathcal{H}_{\vec{r}} \longrightarrow \mathbb{R}$$

$$[\underbrace{\varphi(\vec{r});\psi(\vec{r})}_{\text{OBĚ NALEŽÍ } \mathcal{H}_{\vec{r}}}] \xrightarrow{\text{PŘIŘADÍ ČÍSLO}} \sqrt{(\varphi-\psi;\varphi-\psi)} \in \mathbb{R}$$

VYJADŘUJE VZDÁLENOST OBOU FUNKCÍ

O UNITÁRNÍM PROSTORU ŘÍKÁME, ŽE JE HILBERTŮV, POKUD JE ÚPLNÝ V METRICE INDUKOVANÉ SKALÁRNÍM SOUČINEM.

ÚPLNÝ ZNAMENÁ, ŽE KAŽDÁ CAUCHYOVSKÁ POSLOUPNOST FUNKCÍ MÁ V PROSTORU LIMITU. PLATÍ, ŽE PROSTOR $\mathcal{H}_{\vec{r}}$ JE ÚPLNÝ S METRIKOU DANOU SKALÁRNÍM SOUČINEM TEDY HILBERTŮV.

VYJÁDŘENÍ VLNOVÉ FUNKCE V BÁZI

a) SPOČETNÁ BÁZE

b) NESPOČETNÁ BÁZE

a) SPOČETNÁ BÁZE

UVAŽUJME O MNOŽINĚ FUNKCÍ (1D PŘÍPAD)

$\{u_1(x); u_2(x); \ldots\}$ .. ŘEKNEME O NÍ, ŽE JE ORTONORMÁLNÍ JESTLIŽE SKALÁRNÍ SOUČIN $(u_i;u_j)$ JE ROVEN

$$= \int u_i^*(x) \cdot u_j(x)\, dx = \delta_{ij} \begin{cases} 1 & \text{pro } i = j \\ 0 & \text{pro } i \neq j \end{cases}$$

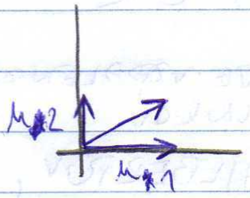
BÁZE, POKUD KAŽDOU FUNKCI $\psi(x) \in \mathcal{H}_x$
LZE VYJÁDŘIT PRÁVĚ JEDNÍM ZPŮSOBEM.
JAKO $\psi(x) = a_1 u_1(x) + a_2 u_2(x) + \ldots \sum a_i u_i(x)$

VYJÁDŘENÍ KOEFICIENTU a_i – PRO ORTONORMÁLNÍ BÁZI

$$\psi(x) = \sum_i a_i u_i(x) \qquad / \cdot u_j^*(x) \; ; \int_{-\infty}^{\infty} dx$$

$$\int u_j^* \psi(x) dx = \sum_i a_i \int u_j^* \cdot u_i(x) dx$$

$$(u_j ; \psi(x)) = \sum_i a_i \underbrace{(u_j ; u_i)}_{\delta_{ij}} \Rightarrow \boxed{(u_j ; \psi) = a_j}$$



$\vec{u} = u_1 \cdot \vec{e}_1 + u_2 \cdot \vec{e}_2$ $\qquad \vec{u} \to \psi$

$u_1 = \vec{e}_1 \cdot \vec{u}$ $\qquad u_2 \to a_j$

$u_2 = \vec{e}_2 \cdot \vec{u}$ $\qquad e_2 \to u_j$

PODMÍNKA ÚPLNOSTI

$\{u_i\}$ – ORTONORMÁLNÍ BÁZE

$a_j = (u_j ; \psi)$ DOSADÍME DO $\psi = \sum_i a_i \cdot u_i$

$$\psi(x_0) = \sum_i (u_i ; \psi) \cdot u_i(x_0) = \sum_i \int (u_i^*(x)\, \psi(x)\, dx) \cdot u_i(x_0) =$$

$$= \int \psi(x) \underbrace{\left(\sum_i u_i^*(x) \cdot u_i(x_0) \right)}_{F(x;x_0)} dx$$

$\psi(x_0) = \int \psi(x) \cdot F(x; x_0)\, dx$ ZA PŘEDPOKLADU ŽE $\{u_i\}$ JE BÁZE

VYJDE TO, KDYŽ $F(x; x_0) = \delta(x - x_0)$

DIRACOVA DELTA FUNKCE

POTOM TO BUDE FUNGOVAT $\int \psi(x)\, \delta(x - x_0)\, dx = \psi(x_0)$

$F(x; x_0) = \boxed{\sum_i u_i^*(x) \cdot u_i(x_0) = \delta(x - x_0)}$ PODMÍNKA ÚPLNOSTI

PODLE TOHO LZE POZNAT ZDA $\{u_i\}$ JE BÁZE.

20.)

ODBOČKA: DIRACOVA δ-FUNKCE

FUNKCE $\delta(x-x_0)$ FUNGUJE TAK, ŽE $\int f(x)\delta(x-x_0)dx = f(x_0)$ PRO VŠECHNY ROZUMNÉ FUNKCE f

FORMÁLNĚ $\delta(x-x_0)=0$ PRO $x \neq x_0$

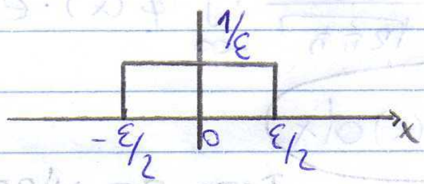
$\delta(x-x_0)=\infty$ PRO $x = x_0$

PRO $f(x)=1$ $\int \delta(x-x_0)dx = 1$

SMYSL MÁ FUNKCE δ V INTEGRÁLU

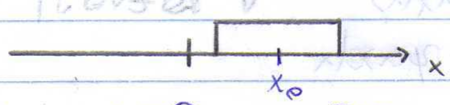
JEDNA KONKRÉTNÍ REPRESENTACE $\delta(x-x_0)$ POMOCÍ POSLOUPNOSTI $\delta_\varepsilon(x-x_0)$

$\delta_\varepsilon(x)$



NABÝVÁ HODNOT $1/\varepsilon$

$\delta_\varepsilon(x-x_0)$



$\lim_{\varepsilon\to 0} \delta_\varepsilon(x-x_0)=0$ PRO $x=x_0$ ČÍM MENŠÍ JE ε, TÍM BLÍŽE x_0 SE DOSTANU

$\lim_{\varepsilon\to 0} \delta_\varepsilon(x-x_0)=\infty$ PRO $x=x_0$

$\int \delta_\varepsilon(x-x_0)dx = 1$

$\delta(x-x_0)$ LZE UVAŽOVAT JAKO $\lim_{\varepsilon\to 0}\delta_\varepsilon(x-x_0)$

PŘESNĚJI: SMYSL VÝRAZU $\int f(x)\delta(x-x_0)dx$ JE $\lim_{\varepsilon\to 0}\int f(x)\delta_\varepsilon(x-x_0)dx$

PRO N JDOUCÍ DO ∞ SE $\sum_{i=1}^{N}$ CHOVÁ V INTEGRÁLU JAKO $\delta(x-x_0)$

b) NESPOČETNÁ BÁZE

MĚLI JSME ZATÍM $\psi(x) = \sum_{i=1}^{\infty} a_i u_i(x)$ KDE $\{u_i(x)\}$ JE SPOČETNÁ BÁZE. VLNOVÉ FUNKCE LZE VYJADŘOVAT I V NESPOČETNÝCH BÁZÍCH.

PŘ $v_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \cdot e^{i\frac{px}{\hbar}}$ $\{v_p(x);\ p \in (-\infty;\infty)\}$

SPOJITÝ INDEX P, NESPOČETNÁ BÁZE.

$$\psi(x) \overset{IFT}{=} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(p) \cdot e^{i\frac{px}{\hbar}} dp = \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \varphi(p)\, v_p(x)\, dp}_{\text{ROVINA } \psi(x) \text{ V BÁZI } v_p(x)}$$

KDE $\varphi(p) \overset{FT}{=} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \cdot e^{-i\frac{px}{\hbar}} dx =$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} v_p^*(x)\, \psi(x)\, dx$$

TOTO JE VÝRAZ PRO KOEFICIENT V ROZVOJI

$\psi(x) = \sum_i a_i \cdot u_i(x)$

$a_i = \int u_i^*(x) \cdot \psi(x) dx$

RELACE ÚPLNOSTI - DIRACOVA δ-FUNKCE
- NORMOVÁNÍ FUNKCÍ $v_p(x)$

$$\psi(x_0) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(p)\, v_p(x_0)\, dp = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\int_{-\infty}^{\infty} v_p^*(x) \psi(x)\, dx \right) \cdot v_p(x_0)\, dp =$$

$$\left(\varphi(p) = \int_{-\infty}^{\infty} v_p^*(x) \cdot \psi(x) dx \right)$$

PROHODÍM POŘADÍ INTEGRACE

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \cdot \underbrace{\left\{ \int_{-\infty}^{\infty} v_p^*(x) \cdot v_p(x_0)\, dp \right\}}_{F(x;x_0)} dx =$$

KDYŽ SROVNÁME S $\psi(x_0) = \int \psi(x)\, \delta(x - x_0) dx$

POTOM $F(x;x_0) = \delta(x - x_0)$

KRITÉRIUM ÚPLNOSTI PLATÍ PRO BÁZI

21.)

UVÁŽEME, ŽE PRO $v_p(x)$ RELACE ÚPLNOSTI PLATÍ

$$\psi(x)=\int_{-\infty}^{\infty}\left(\int_{-\infty}^{\infty} v_p^*(x)\,\psi(x)\,dx\right)v_p(x_0)\,dp=$$

NE VŽDY JDE PROHODIT POŘADÍ INTEGRACE, JDE JEN, KDYŽ JSOU INTEGRÁLY DOBŘE DEFINOVANÉ.

$$=\lim_{P\to\infty}\int_{-P}^{P}\left(\int_{-\infty}^{\infty}v_p^*(x)\cdot\psi(x)\,dx\right)v_p(x_0)\,dp=$$

$$=\lim_{P\to\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)\cdot\underbrace{\left(\int_{-P}^{P}v_p^*(x)\,v_p(x_0)\,dp\right)}_{F_P(x;x_0)}dx=$$

$$=\lim_{P\to\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)\cdot F_P(x;x_0)\,dp$$

$F_P(x;x_0)$

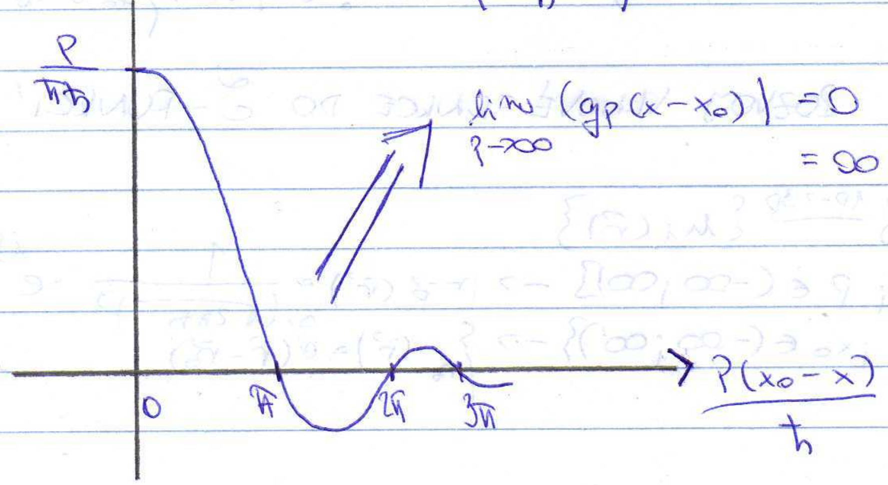
POKUD $F_P(x;x_0)\longrightarrow\delta(x-x_0)$, MŮŽEME PAK $F(x;x_0)$ ZTOTOŽNIT S $\delta(x-x_0)$

$$F_P(x;x_0)=\int_{-P}^{P}v_p^*(x)\,v_p(x_0)\,dp=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-P}^{P}e^{-i\frac{px}{\hbar}}\cdot e^{i\frac{px_0}{\hbar}}\cdot dp=$$

$$=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-P}^{P}e^{\frac{-ip(x-x_0)}{\hbar}}\,dp=\frac{1}{2\pi\hbar}\left[\frac{e^{\frac{ip(x_0-x)}{\hbar}}}{\frac{i}{\hbar}(x_0-x)}\right]_{-P}^{P}=$$

$$=\frac{1}{\pi(x_0-x)}\cdot\underbrace{\left(\frac{e^{\frac{iP(x_0-x)}{\hbar}}-e^{\frac{-iP(x_0-x)}{\hbar}}}{2i}\right)}_{\sin\left(\frac{P\cdot(x_0-x)}{\hbar}\right)}=\underbrace{\frac{1}{\pi}\cdot\frac{P}{\hbar}}_{g(x-x_0)}\cdot\frac{\sin\left(\frac{P(x_0-x)}{\hbar}\right)}{\frac{P\cdot(x_0-x)}{\hbar}}$$

JEN JINÝ SYMBOL PRO F



$\lim_{P\to\infty}(g_P(x-x_0))=0$ PRO $x\neq x_0$

$=\infty$ PRO $x=x_0$

NAVÍC PLATÍ $\int\limits_{-\infty}^{\infty} g_P(x-x_0)\,dx = 1$
PRO VŠECHNY HODNOTY P

ZÁVĚR $g_P(x-x_0)$ SE CHOVÁ PRO $P \to \infty$ JAKO $\delta(x-x_0)$ A TEDY MŮŽEME PSÁT $F(x;x_0) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \ldots = \delta(x-x_0)$. $\{\nu_p(x)\}$ ÚPLNÉ
INTEGRÁL SE CHOVÁ JAKO δ-FCE KDYŽ JDE DO NEKONEČNA.
$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \nu_p^*(x)\cdot \nu_p(x_0)\,dp = \delta(x-x_0)$ ... UKÁZALI JSME ÚVAHOU O $\lim\limits_{P\to\infty}$ INTEGRÁLU.

PODOBNĚ DOSTANEME $\int\limits_{-\infty}^{\infty} \nu_{p'}^*(x)\,\nu_p(x)\,dx = \delta(p-p')$
TOMU SE ŘÍKÁ RELACE ORTOGONALITY PRO FUNKCE $\nu_p(x)$
NORMALIZACE FÁZOVÝCH FUNKCÍ V DIRACOVĚ SMYSLU.

JEŠTĚ JEDNA NESPOČETNÁ BÁZE - δ-FUNKCÍ

$\xi_{x_0}(x) =_{def} \delta(x-x_0)$ $\{\xi_{x_0}(x);\, x_0 \in (-\infty;\infty)\}$
x_0 - SPOJITÝ INDEX, NESPOČETNÉ BÁZE

MŮŽEME PSÁT
KOEFICIENT VYJÁDŘENÝ V $\delta(x-x_0)$
$$\psi(x_0) = \int \psi(x)\cdot\delta(x-x_0)\,dx = \int \psi(x)\,\xi_{x_0}^*(x)\,dx$$
$\psi(x) = \sum a_i u_i(x)$
$$\psi(x) = \int \psi(x_0)\,\delta(x-x_0)\,dx_0 = \int \psi(x_0)\,\xi_{x_0}\,dx_0$$

ROZVOJ VLNOVÉ FUNKCE DO δ-FUNKCÍ

SHRNUTÍ BÁZE
$\{u_i(x)\} \xrightarrow{1D\to3D} \{u_i(\vec r)\}$
$\{\nu_p(x);\, p\in(-\infty;\infty)\} \to \nu_{\vec p}(\vec r) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^3}\cdot e^{\frac{i\vec p\vec r}{\hbar}}$
$\{\xi_{x_0}(x);\, x_0\in(-\infty;\infty)\} \to \xi_{\vec r_0}(\vec r) = \delta(\vec r-\vec r_0)$

3 RŮZNÉ TYPY BÁZÍ PRO ROZVOJ ψ

22.)

ABSTRAKTNÍ HILBERTŮV PROSTOR

$\{\psi(\vec{r})\}$ — VEKTOROVÝ PROSTOR NAD TĚLESY KOMPLEXNÍCH ČÍSEL

- JE UNITÁRNÍ, PROSTOR ÚPLNÉ K METRICE INDUKOVANÉ SKALÁRNÍM SOUČINEM

$\{\varphi;\psi\} \to (\varphi;\psi) \to \int \varphi^*(\vec{r}) \cdot \psi(\vec{r})\, d\vec{r}$

VYJÁDŘENÍ ψ V BÁZI

$\{u_i(x)\}$ - SPOČETNÁ BÁZE PATŘÍ DO $\mathcal{H}_x$

UVAŽOVALI JSME O 1D PROSTORU $\psi(x) = \sum_i c_i u_i(x)$
S JAKOUKOLIV FYZIKÁLNĚ PŘIJATELNOU FUNKCÍ $\psi(x)$

KOMBINACE SUPERPOZIC DE-BROGLIEHO VLN

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(p)\, v_p(x)\, dp \quad \text{KDE} \quad v_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \cdot e^{\frac{ipx}{\hbar}}$$

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x_0) \cdot \xi(x)\, dx_0 \quad \text{KDE} \quad \xi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0)$$

$\{v_p(x)\}$ A $\{\xi_{x_0}(x)\}$ JSOU NESPOČETNÉ BÁZE A NEPATŘÍ DO $\mathcal{H}_x$

$\mathcal{H}_x = \{\psi(x)\}$ — $\int |\psi(x)|^2 dx < \infty$

$\{c_i\}$ - HILBERTŮV PROSTOR KOMPLEXNÍCH ČÍSEL

EXISTUJE KONEČNÝ INTEGRÁL $\varphi(p)$ - HILBERTŮV PROSTOR KVADRATICKY INTEGROVATELNÝCH FCÍ p

POZN

$$\left.\begin{aligned} \int v_p^*(x)\, v_p(x)\, dx &= \delta(p - p') \\ \int \xi_{x_0}^*(x) \cdot \xi_{x_0}(x)\, dx &= \delta(x_0 - x_0') \end{aligned}\right\} \text{ORTOGONALITA V DIRACOVĚ SMYSLU}$$

PRO ∞ HLUBOKOU POTENCIÁLOVOU JÁMU PLATÍ:

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

$$\int_{-\infty}^{\infty} u_n(x)\, u_m(x)\, dx = \delta_{mn}$$

3D PŘÍPAD – JE VŠE ANALOGICKÉ

MŮŽU $\psi(\vec r)$ VYJÁDŘIT V ORTOGONÁLNÍ BÁZI

$$\psi(\vec r) = \sum_i c_i \cdot u_i(\vec r)$$

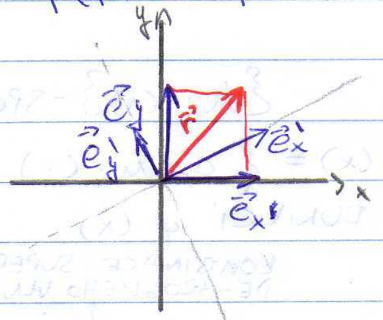
$$\psi(\vec r) = \int \varphi(\vec p)\, v_{\vec p}(\vec r)\, d\vec p \qquad v_{\vec p}(\vec r) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \cdot e^{i\frac{\vec p \vec r}{\hbar}}$$

$$\psi(\vec r) = \int \psi(\vec r_0) \cdot \xi_{\vec r_0}(\vec r)\, d\vec r_0 \qquad \xi_{\vec r_0}(\vec r) = \delta(\vec r - \vec r_0)$$

$\psi(\vec r)$ A $\psi(r_0) \in H_{\vec r}$

$c_i \in H_{\vec u}$ – HILBERTŮV PROSTOR POSLOUPNOSTÍ

$\varphi(\vec p) \in H_{\vec p}$



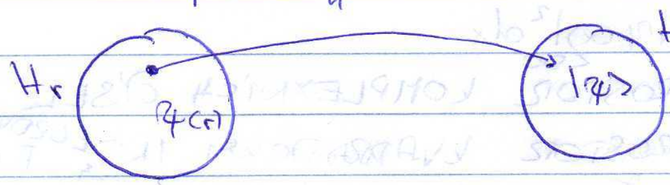
$$\vec r = x \cdot \vec e_x + y \cdot \vec e_y = x' \cdot \vec e_x' + y' \cdot \vec e_y'$$

POLOHOVÝ VEKTOR JE VELIČINA ZAVEDENÁ NEZÁVISLE NA SOUŘADNICOVÉ SOUSTAVĚ. VZTAH, KTERÝ NEZÁVISÍ NA SOUSTAVĚ SOUŘADNIC $\vec F = m \cdot \frac{d^2 \vec r}{dt^2}$

JAZYK POUŽÍVANÝ V HILBERTOVĚ PROSTORU

KET VEKTORY

$|\psi\rangle$ „KET VEKTOR"



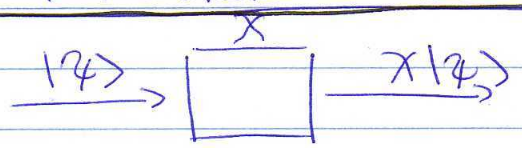
NA H JE DEFINOVÁN SKALÁRNÍ SOUČIN

$$(|\varphi\rangle, |\psi\rangle) = \int \varphi^*(\vec r) \cdot \psi(r)\, d\vec r$$

$|\varphi\rangle\ |\psi\rangle$

A JSOU SPLNĚNY ZNÁMÉ PODMÍNKY

DUÁLNÍ PROSTOR A BRA VEKTORY



23.)

ZOBRAZENÍ X Z H DO $\mathbb{C}$ ŘEKNEME, ŽE JE LINEÁRNÍ ~~ZOBRAZENÍ~~ FUNKCIONÁL, JESTLIŽE JE SPLNĚNA LINEARITA:

$$X(\lambda_1|\psi_1\rangle+\lambda_2|\psi_2\rangle)=\lambda_1 X(|\psi_1\rangle)+\lambda_2 X(|\psi_2\rangle)$$

KE KAŽDÉMU KET-VEKTORU PŘIŘADÍ KOMPLEXNÍ ČÍSLO $(\lambda_1;\lambda_2)$

MNOŽINA TĚCHTO LINEÁRNÍCH FUNKCIONÁLŮ JE VEKTOROVÝ PROSTOR, DUÁLNÍ K H ∈ KET-VEKTORY, ZNAČÍME HO H^*, O VEKTORECH Z H^* MLUVÍME JAKO O BRA-VEKTORECH

$\langle X|$ - BRA-VEKTOR

SOUVISLOST MEZI BRA A KET

$|\varphi\rangle$ H — $\langle\varphi|$ H^*

BRA-VEKTOR $\langle X_\varphi|$ ZNAČÍME SYMBOLEM $\langle\varphi|$ JE TO TEDY BRA-VEKTOR SDRUŽENÝ S VEKTOREM $|\varphi\rangle$ ... $\underbrace{(|\varphi\rangle,|\psi\rangle)=\langle\varphi|\psi\rangle}_{\text{SKALÁRNÍ SOUČIN}}$

VLASTNOSTI:

$$\langle\varphi|\psi\rangle=\langle\psi|\varphi\rangle^*$$
$$\langle\varphi|\lambda_1\psi_1+\lambda_2\psi_2\rangle=\lambda_1\langle\varphi|\psi_1\rangle+\lambda_2\langle\varphi|\psi_2\rangle$$
$$\langle\lambda_1\varphi_1+\lambda_2\varphi_2|\psi\rangle=\lambda_1^*\langle\varphi_1|\psi\rangle+\lambda_2^*\langle\varphi_2|\psi\rangle$$

$\langle\psi|\psi\rangle$ JE REÁLNÉ A KLADNÉ

LINEÁRNÍ OPERÁTORY, KOMUTÁTOR, MATICOVÝ PRVEK

LINEÁRNÍ FUNKCIONÁL JE ZOBRAZENÍ Z HILBERTOVA PROSTORU DO MNOŽINY KOMPLEXNÍCH ČÍSEL.
LINEÁRNÍ OPERÁTORY JSOU ZOBRAZENÍ Z HILBERTOVA PROSTORU DO SEBE.

$$|\psi\rangle \longrightarrow \boxed{A} \longrightarrow A|\psi\rangle = |\psi'\rangle$$

MUSÍ BÝT OPĚT SPLNĚNA LINEARITA:

$$A(\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle) = \lambda_1 A(|\psi_1\rangle) + \lambda_2 A(|\psi_2\rangle)$$

LINEÁRNÍ KOMBINACE VEKTORŮ = LIN. KOMBINACE OBRAZŮ

SOUČIN OPERÁTORŮ A A B:

$$AB|\psi\rangle = A(B|\psi\rangle)$$

$$BA \neq AB$$

KOMUTÁTOR $[A;B] = AB - BA$

MATICOVÝ PRVEK OPERÁTORU A MEZI $|\varphi\rangle$ A $|\psi\rangle$

$$\langle\varphi|(A|\psi\rangle)$$

Př) KOMUTÁTOR...

V PROSTORU H_x MÁME OPERÁTOR x A $D_x = \frac{d}{dx}$

BUDE ZKOUŠET PŮSOBIT OPERÁTORY x A D_x NA ψ

$$x \cdot D_x(\psi) = x \cdot \frac{d\psi}{dx}$$

$$D_x \cdot x \cdot (\psi) = \frac{d}{dx}(x \cdot \psi) = \psi + x \cdot \frac{d\psi}{dx}$$

$$(x D_x - D_x \cdot x) = -\psi$$

PRO LIBOVOLNÉ ψ $[x;D_x] = -1$

DEFINICE PŮSOBENÍ OPERÁTORU A NA BRA VEKTORY

LINEÁRNÍ ZOBRAZENÍ DEFINUJEME JAKO ZOBRAZENÍ Z PROSTORU KET VEKTORŮ DO PROSTORU KET VEKTORŮ

$$|\psi\rangle \longrightarrow \boxed{A} \longrightarrow |\psi'\rangle = A|\psi\rangle$$

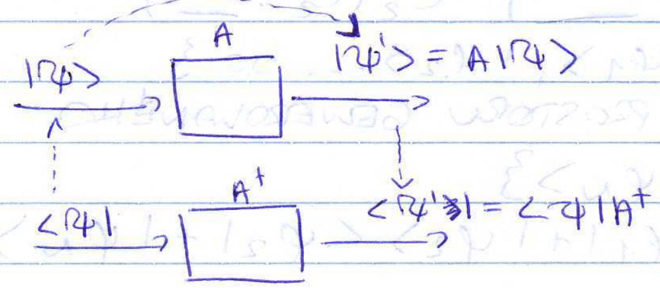
$$\langle\varphi| \longrightarrow \boxed{A} \longrightarrow \langle\varphi'| = \langle\varphi|A$$

$\langle\varphi'|\psi\rangle = (\langle\varphi|A|\psi\rangle)$ PRO KAŽDÉ $|\psi\rangle$

$$(\langle\varphi|A)|\psi\rangle = \langle\varphi|A|\psi\rangle$$

"MATICOVÝ PRVEK OPERÁTORU A"

24.) OPERÁTOR A^+ HERMITOVSKÝ SDRUŽENÝ S OPERÁTOREM A



A ... OPERÁTOR

A^+ ... HERMITOVSKÝ SDRUŽENÝ OPERÁTOR

$|\psi'\rangle = A|\psi\rangle \iff \langle\psi'| = \langle\psi|A^+$

VLASTNOSTI HERMITOVSKÉHO SDRUŽENÍ:

$$\langle\psi|A^+|\varphi\rangle = \langle\varphi|A|\psi\rangle^*$$
$$(A^+)^+ = A$$
$$(\lambda A)^+ = \lambda^* A^+$$
$$(A+B)^+ = A^+ + B^+$$
$$(AB)^+ = A^+ B^+$$

DŮKAZ TOHO, ŽE $\langle\psi|A^+|\varphi\rangle = \langle\varphi|A|\psi\rangle^*$

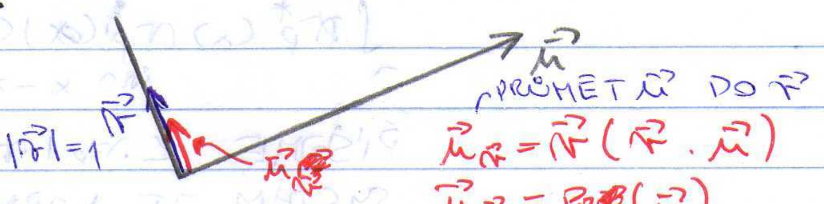
$$\langle\psi'|\varphi\rangle = \langle\varphi|\psi'\rangle^* = \langle\varphi|A|\psi\rangle^*$$

HERMITEOVSKÉ OPERÁTORY

O OPERÁTORU A ŘEKNEME, ŽE JE HERMITEOVSKÝ JESTLIŽE $A^+ = A$

$$\langle\psi|A|\varphi\rangle = \langle\varphi|A|\psi\rangle^*$$

PROJEKTORY – OBYČEJNÝ DVOUROZMĚRNÝ VEKTOROVÝ PROSTOR



$\vec{u}_{\vec{r}} = \vec{r}\,(\vec{r}\cdot\vec{u})$

$\vec{u}_{\vec{r}} = \vec{r}\,(\vec{r}\cdot)(\vec{u})$

PROJEKTOR DO VEKTORU $P_{\vec{r}} = \vec{r}\,(\vec{r}\cdot)$

PROJEKTOR P_φ DO VEKTORU $|\varphi\rangle$ JE DÁN TOUTO DEFINICÍ

$$P_\varphi = |\varphi\rangle\langle\varphi|$$
$$\langle\varphi|\varphi\rangle = 1$$

PLATÍ $P_\varphi^2 = P_\varphi$

PROJEKTOR DO PROSTORU GENEROVANÉHO VEKTORY $\vec{e_1}$ A $\vec{e_2}$ VE 3D PROSTORU

$P_{\vec{e}_1;\vec{e}_2} = \vec{e}_1 \cdot (\vec{e}_1 \cdot \_\_\_) + \vec{e}_2 (\vec{e}_2 \cdot \_\_)$

Př) MÁM BÁZI $\{|\varphi_1\rangle; |\varphi_2\rangle \ldots \infty\}$

PROJEKTOR DO PROSTORU GENEROVANÉHO $\{|\varphi_1\rangle; \ldots |\varphi_N\rangle\}$

JE $|\varphi_1\rangle\langle\varphi_1| + |\varphi_2\rangle\langle\varphi_2| + |\varphi_N\rangle\langle\varphi_N|$

DISKRÉTNÍ (SPOČETNÉ) A SPOJITÉ ORTONORMÁLNÍ SYSTÉMY

DISKRÉTNÍ PŘÍPAD

MÁME SOUBOR KET VEKTORŮ $\{|u_i\rangle\}$ A PATŘÍ DO H A JSOU ORTONORMÁLNÍ $\langle u_i|u_j\rangle = \delta_{ij}$

SPOJITÝ PŘÍPAD

MÁME SOUBOR VEKTORŮ $\{|w_\alpha\rangle\}$ SE SPOJITÝM INDEXEM α. SEM MOHOU PATŘIT NAPŘÍKLAD FUNKCE

$v_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \cdot e^{\frac{ipx}{\hbar}} \quad p \in (-\infty; \infty)$

PLATÍ $\langle w_\alpha | w_{\alpha'}\rangle = \delta(\alpha - \alpha')$

ORTONORMALITA V DIRACOVĚ SMYSLU

$\int_{-\infty}^{\infty} v_p^*(x)\, v_p(x)\, dx$ NEEXISTUJE, FUNKCE NEPATŘÍ DO HILBERTOVA PROSTORU

PLATÍ ALE

$\int_{-x}^{x} v_p^*(x)\, v_{p'}(x)\, dx \to \delta(p - p')$

PRO $x \to \infty$

PÍŠEME $\langle v_p | v_{p'}\rangle = \delta(p - p')$

SYSTÉM JE NORMOVANÝ DELTA FUNKCÍ

25.) BÁZE A RELACE ÚPLNOSTI

MÁME FUNKCI ψ

$$|\psi\rangle = \sum c_i |u_i\rangle$$

JAKOU PODMÍNKU MUSÍ ~~BÁZE~~ SOUBOR SPLŇOVAT, ABY BYLA BÁZE:

ORTONORMALITA $c_i = \langle u_i|\psi\rangle$

$$|\psi\rangle = \underbrace{\left(\sum_i |u_i\rangle\langle u_i|\right)}_{P_{\{u_i\}}} |\psi\rangle$$

PROJEKTOR

$$P_{\{u_i\}} = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i| = 1$$

SOUČET PŘES BÁZI PROJEKTORŮ JE 1, POKUD TO PLATÍ, SOUBOR JE BÁZE.

REPREZENTACE KET VEKTORU

$|\psi\rangle$ ... $\{c_i\}/\{c_\alpha\}$ JE REPRES. NEBO SPOJ. PŘÍPAD A $\{|u_i\rangle\}/\{|w_\alpha\rangle\}$ JE BÁZE

$$\begin{pmatrix} \langle u_1|\psi\rangle \\ \langle u_2|\psi\rangle \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix} \uparrow \\ \alpha \to \langle w_\alpha|\psi\rangle \\ \downarrow \end{pmatrix}$$

REPREZENTACE BRA VEKTORU

OPĚT $\{|u_i\rangle\}/\{|w_\alpha\rangle\}$ JE BÁZE BRA VEKTORU $\langle\psi|$

$(\langle\psi|u_1\rangle; \langle\psi|u_2\rangle \ldots)$ $\quad \langle\psi| = \langle\psi|\cdot 1 = \langle\psi|\sum_i |u_i\rangle\langle u_i| = \sum_i \langle\psi|u_i\rangle\langle u_i|$

PŘÍPADNĚ

$$\langle\psi| = \langle\psi|\cdot 1 = \langle\psi|\int |w_\alpha\rangle\langle w_\alpha| d\alpha =$$

$$= \int \langle\psi|w_\alpha\rangle\langle w_\alpha| d\alpha$$

$$\left(\longleftarrow \langle\psi|w_\alpha\rangle \longrightarrow \right)$$

$$\uparrow$$

$$\alpha$$

REPRESENTACE SKALÁRNÍHO SOUČINU

MÁME BÁZE $\{|u_i\rangle\}$ / $\{|w_\alpha\rangle\}$
A KET VEKTORY $|\varphi\rangle$ A $|\psi\rangle$
SKALÁRNÍ SOUČIN VEKTORŮ JE DÁN NÁSLEDOVNĚ

$$(|\varphi\rangle, |\psi\rangle) = \langle\varphi|\psi\rangle = \sum_i \langle\varphi|u_i\rangle\langle u_i| \sum_j \langle u_j|\psi\rangle u_j\rangle =$$
$$= \sum_{ij} \langle\varphi|u_i\rangle\langle u_i|u_j\rangle\langle u_j|\psi\rangle =$$
$$= \sum_{ij} \langle\varphi|u_i\rangle \delta_{ij} \langle u_j|\psi\rangle = \sum_i \langle\varphi|u_i\rangle\langle u_i|\psi\rangle$$

PŘÍPADNĚ $\langle\varphi|\psi\rangle = \int \langle\varphi|w_\alpha\rangle\langle w_\alpha|\psi\rangle d\alpha$

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \underbrace{(\langle\varphi|u_1\rangle, \langle\varphi|u_2\rangle, \dots)}_{\text{ŘÁDKOVÝ VEKTOR}} \underbrace{\begin{pmatrix} \langle u_1|\psi\rangle \\ \langle u_2|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix}}_{\text{SLOUPCOVÝ VEKTOR}}$$

REPREZENTACE OPERÁTORU

BÁZE $\{|u_i\rangle\}$ / $\{|w_\alpha\rangle\}$

FINTA S OPERÁTOROVOU JEDNIČKOU

$$A = 1 \cdot A \cdot 1 = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i| A \sum_j |u_j\rangle\langle u_j| =$$
$$= \sum_{ij} \langle u_i|A|u_j\rangle |u_i\rangle\langle u_j|$$

POPŘ. PŘÍPADĚ $A = \int \langle w_\alpha|A|w_{\alpha'}\rangle |w_\alpha\rangle\langle w_{\alpha'}| d\alpha\, d\alpha'$

$$\begin{pmatrix} \langle u_1|A|u_1\rangle & \langle u_1|A|u_2\rangle & \dots \\ \vdots & \vdots & \\ \vdots & \vdots & \end{pmatrix}$$

26.)

REPREZENTACE $|\psi'\rangle = A|\psi\rangle$

$$\underbrace{\begin{pmatrix}\langle u_1|\psi'\rangle\\ \langle u_2|\psi'\rangle\\ \vdots\end{pmatrix}}_{\text{SLOŽKY } |\psi'\rangle} = \underbrace{\begin{pmatrix} \langle u_1|A|u_1\rangle & \langle u_1|A|u_2\rangle & \dots \\ \langle u_2|A|u_1\rangle & & \\ \vdots & & \vdots \end{pmatrix}}_{\text{MATICE OPERÁTORU } A} \underbrace{\begin{pmatrix}\langle u_1|\psi\rangle\\ \langle u_2|\psi\rangle\\ \vdots\end{pmatrix}}_{\text{SLOŽKY } |\psi\rangle}$$

PROBLÉM VLASTNÍCH HODNOT

$A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$

VLASTNÍ HODNOTA

HERMITOVSKÝ OPERÁTOR

CHCEME DOKÁZAT ŽE $\lambda \in \mathbb{R}$

$\langle\psi|A|\psi\rangle = \lambda\langle\psi|\psi\rangle \qquad \lambda = \dfrac{\langle\psi|A|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$

PRO A PLATÍ

i) VLASTNÍ HODNOTY A JSOU REÁLNÉ

ii) NECHŤ $|\varphi\rangle$ A $|\psi\rangle$ JSOU VLASTNÍ VEKTORY A PATŘÍCÍ K RŮZNÝM VLASTNÍM HODNOTÁM PAK $\langle\varphi|\psi\rangle = 0$

STAČÍ DOKÁZAT ŽE $\langle\psi|\psi\rangle \in \mathbb{R}$ A $\langle\psi|A|\psi\rangle \in \mathbb{R}$

$\langle\psi|\psi\rangle \in \mathbb{R}$ – VLASTNOST SKALÁRNÍHO SOUČINU

$\langle\psi|A|\psi\rangle$ A JE HERMITOVSKÝ OPERÁTOR

PROTO $\langle\varphi|A|\psi\rangle = \langle\psi|A|\varphi\rangle^*$

PRO VŠECHNA $\{|\varphi\rangle; |\psi\rangle\}$ TEDY PRO $\{|\psi\rangle; |\psi\rangle\}$

MÁME $\langle\psi|A|\psi\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle^* \Rightarrow \langle\psi|A|\psi\rangle \in \mathbb{R}$

JE-LI DIMENZE HILBERTOVA PROSTORU KONEČNÁ, LZE Z VLASTNÍCH VEKTORŮ LIBOVOLNÉHO HERMITEOVSKÉHO OPERÁTORU SESTAVIT BÁZI. JE-LI NEKONEČNÁ, EXISTUJÍ HERMITEOVSKÉ OPERÁTORY, ZE KTERÝCH BÁZI SESTAVIT NELZE.

27.) POSTULÁTY KVANTOVÉ TEORIE

1.) POSTULÁT

- O STAVU SYSTÉMU: STAV FYZIKÁLNÍHO SYSTÉMU JE POPSÁN VEKTOREM (TAK ZVANÝM STAVOVÝM VEKTOREM) Z HILBERTOVA PROSTORU.

TYP HILBERTOVA PROSTORU NEZÁVISÍ NA SYSTÉMU.

Př.) HILBERTŮV PROSTOR PRO 1-2 ČÁSTICE, PRO N ČÁSTIC, POLARIZACE FOTONU, SPINOVÝ HILBERTŮV PROSTOR.

2.) POSTULÁT

- O FYZIKÁLNÍCH VELIČINÁCH: MĚŘITELNÁ FYZIKÁLNÍ VELIČINA JE POPSÁNA HERMITEOVSKÝM OPERÁTOREM PŮSOBÍCÍM NA HILBERTOVĚ PROSTORU, KTERÝ PATŘÍ MEZI POZOROVATELNÉ.

HERMITEOVSKÉ OPERÁTORY - MAJÍ JENOM REÁLNÉ VLASTNÍ HODNOTY

$$\langle a|A|b\rangle = \langle b|A|a\rangle^*$$

POZOROVATELNÉ JSOU TAKOVÉ OPERÁTORY, ŽE Z JEJICH VLASTNÍCH VEKTORŮ MOHU SESTAVIT BÁZI

POZN. ZNAČENÍ - OPERÁTOR ODPOVÍDAJÍCÍ FYZIKÁLNÍ VELIČINĚ f ZNÁME Z KLASICKÉ FYZIKY $\hat{f}$

$$x \to \hat{x}\ ;\ p_x \to \hat{p}_x\ ;\ \vec{l} = \vec{r} \times \vec{p} \to \hat{\vec{l}} = (\hat{l}_x\ ;\ \hat{l}_y\ ;\ \hat{l}_z)$$

OPERÁTOR JE JEDNOZNAČNĚ URČEN REPREZENTACÍ V JEDNÉ KONKRÉTNÍ BÁZI.

DEFINICE $\hat{x}$ A $\hat{p}_x$ – OMEZÍME SE NA 1 ČÁSTICI V 1D

a) ZNAČENÍ: $\{\psi(x) \mid \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2\, dx < \infty\}$ ... H_x

PROSTOR FUNKCÍ

TOMU PATŘÍ PROSTOR FOURIEROVÝCH TRANSFORMACÍ

$\{\varphi(p) \mid \int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(p)|^2\, dp < \infty\}$ ... H_p

NAD H_x A H_p STOJÍ ABSTRAKTNÍ HILBERTŮV PROSTOR $H_{\text{1 ČÁSTICE (1D)}}$

SOUŘADNICOVÁ/HYBNOSTNÍ REPREZENTACE

SOUŘADNICOVÁ: $\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x_0) \cdot \xi_{x_0}(x)\, dx_0$ $\quad \xi_{x_0}(x) = \delta(x-x_0)$

$\Downarrow$

$|\psi\rangle \quad \psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x_0)\, \delta(x-x_0)\, dx_0$

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x_0)\, |x_0\rangle\, dx_0$$

HYBNOSTNÍ: $\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(p)\, \psi_p(x)\, dp$ $\quad \psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \cdot e^{ipx}$

VYJADŘUJEME ψ JAKO SUPERPOZICI DEBROGLIEHO VLN.

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(p)\, |p\rangle\, dp$$

b) DEFINICE $\hat{x}$

$$\boxed{\begin{array}{l} |\psi\rangle \longrightarrow \psi(x) \\ \hat{x}|\psi\rangle \longrightarrow x\,\psi(x) \end{array}}$$

$\hat{x}$ V SOUŘADNICOVÉ REPREZENTACI

$\hat{x}|_{H_x}: \psi(x) \to x\,\psi(x)$

$\hat{x}|_{H_x}: \delta(x-x_0) = x \cdot \delta(x-x_0) = x_0\, \delta(x-x_0)$

ABSTRAKTNÍ ZÁPIS $\hat{x}|x_0\rangle = x_0|x_0\rangle$

$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$

OPERÁTOR, STAVOVÝ VEKTOR, ČÍSLO

$\delta(x-x_0)$ JE VLASTNÍ FUNKCE $\hat{x}|_{H_x}$

$|x_0\rangle$ JE VLASTNÍ VEKTOR $\hat{x}$

28.)

c) DEFINICE $\hat{p}$ (OPERÁTOR HYBNOSTI)

$$\boxed{\begin{aligned} |\psi\rangle &\longrightarrow \varphi(p) \\ \hat{p}|\psi\rangle &\longrightarrow p\cdot\varphi(p)\end{aligned}}$$ $\hat{p}$ V HYBNOSTNÍ REPREZENTACI

$\hat{p}|_{H_p}: \varphi(p) = p\cdot\varphi(p)$

$\hat{p}|_{H_p}: \delta_{(p-p_0)} = p_0\,\delta_{(p-p_0)} \ldots \delta_{(p-p_0)}$

$$\hat{p}\,|p_0\rangle = p_0\,|p\rangle$$

$\delta_{(p-p_0)}$ JE VLASTNÍ FUNKCE $\hat{p}|_{H_p}$ ($\hat{p}$ NA H_p)

$|p_0\rangle$ JE VLASTNÍ VEKTOR $\hat{p}$

d) $\hat{p}$ V SOUŘADNICOVÉ REPREZENTACI

$$\boxed{\begin{array}{lcl} H & & H_x \\ |\psi\rangle & --- & \psi(x) \\ \hat{p}|\psi\rangle & ---- & \psi'(x) \end{array}}$$

VÍME ŽE $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int \varphi(p)\cdot e^{\frac{ipx}{\hbar}}\,dp$

$$\psi'(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int p\cdot\varphi(p)\cdot e^{\frac{ipx}{\hbar}}\,dp = -i\hbar\frac{d}{dx}\psi(x) =$$

$$= -i\hbar\frac{d}{dx}\left\{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\cdot\int\varphi(p)\cdot e^{\frac{ipx}{\hbar}}\,dp\right\} =$$

$$= \cancel{-i\hbar}\cdot\left\{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int\varphi(p)\cdot\frac{i\cdot p}{\cancel{\hbar}}\cdot e^{\frac{ipx}{\hbar}}\,dp\right\}$$

$\hat{p}|_{H_x}: \psi(x) \xrightarrow{\text{PŘEVEDE}} -i\hbar\frac{d}{dx}\psi(x)$

OPERÁTOR $\hat{p}$ FUNGUJE TAK, ŽE PŘEVEDE $\psi(x)$ NA $-i\hbar\frac{d}{dx}\psi(x)$

$$\boxed{\hat{p}|_{H_x} = -i\hbar\frac{d}{dx}}$$

e) $\hat{x}$ V HYBNOSTNÍ REPREZENTACI

$$\boxed{\hat{x}|_{H_P} = i\hbar \frac{d}{dp}} \qquad \hat{x}: \varphi(p) \longrightarrow i\hbar \frac{d}{dp}\varphi$$

f) $\hat{x}|_{H_x}$; $\hat{p}|_{H_x}$

$$[\hat{x};\hat{p}]\psi(x) = \hat{x}\hat{p}\psi(x) - \hat{p}\hat{x}\psi(x)$$

$$x\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)\psi(x) - \left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)x\cdot\psi = \underline{i\hbar\psi}$$

PRO VŠECHNA ψ: $[\hat{x}|_{H_x};\hat{p}|_{H_x}] = i\hbar$
ABSTRAKTNÍ PROSTOR $[\hat{x};\hat{p}] = i\hbar$
} KOMUTAČNÍ RELACE

g) JAK VYPADÁ OPERÁTOR $\hat{H}$

V KLASICKÉ FYZICE $H = \left(\frac{p^2}{2m} + V(x)\right) \underset{\text{PRAVIDLO}}{=} \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$

$$\hat{H}|_{H_x} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

3.) POSTULÁT

- O MOŽNÝCH VÝSLEDCÍCH MĚŘENÍ: PŘI MĚŘENÍ VELIČINY f VŽDY DOSTANEME NĚKTEROU Z VLASTNÍCH HODNOT $\hat{f}$
$\hat{f}$ - OPERÁTOR PATŘÍCÍ f PODLE 2.) POSTULÁTU

Př.) $\hat{x}$ --- VÝSLEDKY V INTERVALU $(-\infty;\infty)$
$[\hat{x}; x_0\rangle = x_0|x_0\rangle$
$\hat{p}_x$ --- VÝSLEDKY V INTERVALU $(-\infty;\infty)$
$[\hat{p}; p_0\rangle = p_0|p_0\rangle]$

29.

KDYŽ MÁME ENERGII E, TA JE V KLASICKÉ FYZICE POPSÁNA HAMILTONIÁNEM.

$E(H)$ ... VLASTNÍ HODNOTY $\hat{H}$ ~~V PŘÍPADĚ 1 ČÁSTICE~~
PŘI MĚŘENÍ DOSTANEME VLASTNÍ HODNOTU OPERÁTORU $\hat{H}$

V PŘÍPADĚ 1 ČÁSTICE DOSTÁVÁME VLASTNÍ HODNOTY $\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(\hat{\vec{r}})$. V SOUŘADNICOVÉ REPREZENTACI PAK $\hat{H}|_{\vec{r}} = -\frac{\hbar^2}{2m} D^2 + V(\vec{r})$

$\boxed{\text{4.) POSTULÁT}}$

– O PRAVDĚPODOBNOSTI VÝSLEDKŮ MĚŘENÍ: NECHŤ $\hat{f}$ JE FYZIKÁLNÍ VELIČINA, $|\psi\rangle$ JE NORMOVANÝ STAVOVÝ VEKTOR ($\langle\psi|\psi\rangle = 1$).

DVA PŘÍPADY a) SPEKTRUM $\hat{f}$ JE DISKRÉTNÍ A NEDEGENEROVANÉ, VLASTNÍ HODNOTY $f_1, f_2, \dots$; VLASTNÍ VEKTORY $|\psi_1\rangle$; $|\psi_2\rangle$
PRAVDĚPODOBNOST, ŽE NAMĚŘÍME HODNOTU f_m JE $|\langle\psi_m|\psi\rangle|^2$

b) SPEKTRUM VLASTNÍCH HODNOT $\hat{f}$ JE SPOJITÉ A NEDEGEROVANÉ VLASTNÍ HODNOTY ... f; $f \in (f_1, f_2)$.
VLASTNÍ VEKTORY ... $|w_f\rangle$

$\hat{f}|w_{f_0}\rangle = f_0 |w_{f_0}\rangle$

PRAVDĚPODOBNOST $p(f \in \underbrace{(F, F+\Delta F)}_{\text{INTERVAL}}) = |\langle w_f|\psi\rangle|^2 \cdot \underbrace{\Delta F}_{\text{MALÉ}}$

HUSTOTA PRAVDĚPODOBNOSTI, ŽE NAJDU HODNOTU f:
$\rho(f) = |\langle w_f|\psi\rangle|^2$

c) DISKRÉTNÍ A DEGENEROVANÉ
d) SPOJITÉ A DEGENEROVANÉ
e) Z ČÁSTI SPOJITÉ A Z ČÁSTI DISKRÉTNÍ

Př) ad a) ∞ HLUBOKÁ POTENCIÁLOVÁ JÁMA 1D

HAMILTONIÁN V SOUŘADNICOVÉ REPRE

$$H|_{Hx} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad \begin{cases} 0 & \text{PRO } x \in (0; l) \\ \infty & \text{JINAK} \end{cases}$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 \cdot \pi^2 \cdot n^2}{2 \cdot m \cdot l^2} \quad ; \quad \psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \sin\frac{n \cdot \pi \cdot x}{L}$$

MĚJME $|\psi\rangle$ ... $\psi(x)$ ... φ JAKO PRAVDĚPODOBNOSTI NAMĚŘÍME E_n

$$P(E_n) = |\langle\psi_n|\psi\rangle|^2 = \left|\int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\frac{n \cdot \pi \cdot x}{L} \cdot \psi(x) dx\right|^2$$

Př) ad b) 1D MĚŘENÍ x

$\rho(x) = |\psi(x)|^2$ ... TOHLE VÍM (HUSTOTA PRAVD.)

$$\rho(x) = |\langle x|\psi\rangle|^2 = \left|\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-x') \cdot \psi(x')\, dx'\right|^2 = |\psi(x)|^2$$

PŘECHÁZÍME K SOUŘADNICOVÉ REPREZENTACI

1D MĚŘENÍ p (HYBNOST)

$$\rho(p) = |\langle p|\psi\rangle|^2 = \left|\int_{-\infty}^{\infty} \delta(p-p')\, \varphi(p')\, dp'\right|^2 = |\varphi(p)|^2$$

V HYBNOSTNÍ REPREZENTACI

$\boxed{\text{5.) POSTULÁT}}$ (O REDUKCI VLNOVÉHO KLUBKA)

- O STAVU FYZIKÁLNÍHO SYSTÉMU BEZPROSTŘEDNĚ PO MĚŘENÍ: NECHŤ f JE FYZIKÁLNÍ VELIČINA, TAKOVÁ ŽE SPEKTRUM $\hat{f}$ JE DISKRÉTNÍ A NEDEGENEROVANÉ.

VLASTNÍ HODNOTY ... $f_1; f_2$ ...

VLASTNÍ VEKTORY: $|\psi_1\rangle; |\psi_2\rangle$ ...

POKUD JE NAMĚŘENÁ HODNOTA f_n, JE STAV SYSTÉMU BEZPROSTŘEDNĚ PO MĚŘENÍ POPSÁN VEKTOREM $|\psi_n\rangle$ PODOBNĚ PRO DEGENEROVANÉ A / NEBO SPOJITÉ SPEKTRUM.

30.)

PŘ) 1D ∞ HLUBOKÁ JÁMA

PŘED MĚŘENÍM

$|\psi\rangle = c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle + \dots$

$\psi(x) = c_1\psi_1(x) + c_2\psi_2(x) \dots$

NAMĚŘÍME HODNOTU E_n, ~~STAV VEKTOR~~

STAVOVÝ VEKTOR POSKOČÍ (PŘEJDE NA:

$|\psi\rangle \longrightarrow |\psi_n\rangle$

$\psi(x) \longrightarrow \psi_n(x)$

$c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle + \dots$ POSKOČÍ

$c_n|\psi_n\rangle + \dots\dots$

STAVOVÝ VEKTOR SE SKOKEM ZMĚNÍ

$\boxed{\text{6.) POSTULÁT}}$

– O ČASOVÉM VÝVOJI STAVOVÉHO VEKTORU

$$i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = \hat{H}|\psi\rangle$$ ⟸ SCHRÖDINGEROVA ROVNICE

$\hat{H}$ HAMILTONŮV OPERÁTOR PRO ZKOUMANÝ SYSTÉM

PŘ) 1 ČÁSTICE V 3D $|\psi\rangle|_{H\vec{r}} \dots \psi(\vec{r})$

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

$$i\hbar \cdot \frac{d\psi}{dt} = \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\right\}\psi$$

PRAVIDLO (O KONSTRUKCI OPERÁTORŮ)

NECHŤ $f = f(x; y; z; p_x; p_y; p_z)$

PAK $\hat{f} = f(\hat{x}; \hat{y}; \hat{z}; \hat{p}_x; \hat{p}_y; \hat{p}_z)$

DEFINICE FUNKCE OPERÁTORU: NECHŤ f JE FUNKCE KOMPLEXNÍ PROMĚNNÉ z A OPERÁTORU.

PŘEDPOKLÁDEJME, ŽE f LZE PSÁT JAKO $f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n z^n$

FUNKCE OPERÁTORU $\hat{A}$ JE DEFINOVÁNA

$f(\hat{A}) = \sum_{n=0} f_n (\hat{A})^n$

PŘ) $e^{\hat{A}} = 1 + \hat{A} + \frac{1}{2}\hat{A}^2 + \dots$

VĚTA (O VZTAHU MEZI VLASTNÍMI VEKTORY $\hat{A}$ A HODNOTAMI $\hat{A}$ VLASTNÍMI VEKTORY A HODNOTAMI $f(A)$)

NECHŤ $\hat{A}$ MÁ VLASTNÍ HODNOTY a_n A VLASTNÍ VEKTORY $|\psi_n\rangle$ — $A|\psi_n\rangle = a_n|\psi_n\rangle$

PAK $f(A)$ MÁ STEJNÉ VLASTNÍ VEKTORY A PLATÍ

$f(A)|\psi_n\rangle = f(a_n)|\psi_n\rangle$.

DŮKAZ $f(A)|\psi_n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} f_n \underbrace{(A)^n|\psi_n\rangle}_{a_n^n|\psi_n\rangle} = \sum_{n=0}^{\infty} f_n a_n =$

$= \underbrace{\sum_{n=0}^{\infty} f_n (a_n)^n}_{f(a_n)}|\psi_n\rangle$

PŘ) 1 ČÁSTICE V 1D, OPERÁTOR $V(\hat{x})$ ← OPERÁTOR SOUŘADNIC

↑ POTENCIÁLNÍ ENERGIE

$\hat{x}|x_0\rangle = x_0|x_0\rangle$

$V(\hat{x})|x_0\rangle = V(x_0)|x_0\rangle$

$V(\hat{x})|\int \psi(x_0)|x_0\rangle dx_0 = \int \psi(x_0) V(x_0)|x_0\rangle dx$

$\psi(x) \to V(x)\psi(x)$

$V(\hat{x})|_{H_x}: \psi(x) \to V(x)\psi(x)$

NEPŘÍJEMNÝ PROBLÉM S PRAVIDLEM

KOMUTUJE: $f(x, p_x) = x \cdot p_x = p_x \cdot x$

NEKOMUTUJE: $f: \hat{x}\hat{p}_x$ NEBO $\hat{p}_x\hat{x}$ NEBO $\alpha\hat{x}\hat{p}_x + \beta\hat{p}_x\hat{x}$ $(\alpha+\beta=1)$

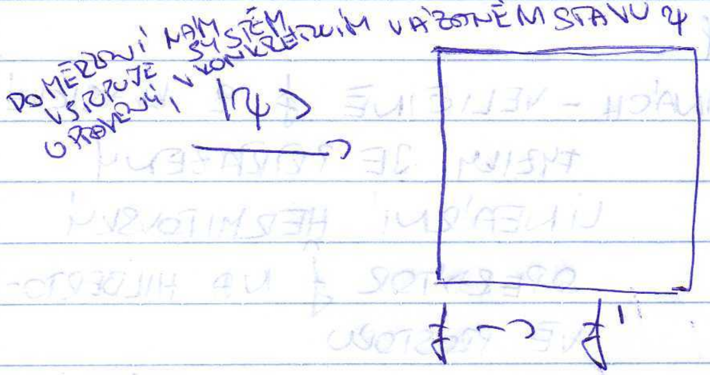
OBVYKLÉ ŘEŠENÍ $f = \frac{\hat{x}\hat{p}_x + \hat{p}_x \cdot \hat{x}}{2}$

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

31.)

POSTULÁTY V OBRÁZKU

UVAŽUJEME MĚŘENÍ FYZIKÁLNÍ VELIČINY f



MOŽNÉ VÝSLEDKY

f_n — $|\langle\psi_n|\psi\rangle|^2$

f_2 — $|\langle\psi_2|\psi\rangle|^2$

f_1 — $|\langle\psi_1|\psi\rangle|^2$

PRAVDĚPODOBNOST VÝSLEDKU

PROBLÉM VLASTNÍCH HODNOT A VLASTNÍCH VEKTORŮ $\hat{f}|\psi_n\rangle = f_n|\psi_n\rangle$

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

ROZVOJ $|\psi\rangle$ V BÁZI

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

PRAVDĚPODOBNOST VÝSLEDKŮ

STAV BEZPROSTŘEDNĚ PO MĚŘENÍ

f_1 — $|\psi_1\rangle$

f_2 — $|\psi_2\rangle$

f_n — $|\psi_n\rangle$

SYSTÉM ZAPOMENE, ČÍM BYL KDYSI PŘED MĚŘENÍM, „ZTRÁTA PAMĚTI"

KDYŽ SLEDUJI ČASOVÝ VÝVOJ MIMO MĚŘENÍ, TEN JE POPSÁN SCHRÖDINGEROVOU ROVNICÍ $i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = \hat{H}|\psi\rangle$

SHRNUTÍ:

I.) O STAVU SYSTÉMU – POSTULÁT POPSÁN VEKTOREM NÁLEŽÍCÍM HILBERTOVĚ PROSTORU
$|\psi\rangle \in \mathcal{H}$

II.) O FYZIKÁLNÍCH VELIČINÁCH – VELIČINĚ f Z KLASICKÉ FYZIKY JE PŘIŘAZENÝ LINEÁRNÍ HERMITOVSKÝ OPERÁTOR $\hat{f}$ NA HILBERTOVĚ PROSTORU

$f \to \hat{f}$ $\quad H \to \hat{H}$

$\hat{f}|\psi_n\rangle = f_n|\psi_n\rangle$

III.) O MOŽNÝCH VÝSLEDCÍCH MĚŘENÍ VELIČINY f – ŘÍKÁ, ŽE MŮŽEME NAMĚŘIT POUZE HODNOTY f_n

IV.) O PRAVDĚPODOBNOSTI JEDNOTLIVÝCH VÝSLEDKŮ MĚŘENÍ – f VE STAVU ~~P(f_n)~~ ψ; PRAVDĚPODOBNOST NAMĚŘENÍ HODNOTY f_n JE ROVNA $|\langle\psi_n|\psi\rangle|^2$

$P(f_n) = |\langle\psi_n|\psi\rangle|^2$

V.) O STAVU SYSTÉMU BEZPROSTŘEDNĚ PO MĚŘENÍ – KDYŽ ZMĚŘÍME f_n TAK SYSTÉM PŘECHÁZÍ DO ψ_n

f_n — $|\psi\rangle \to |\psi_n\rangle$

VI.) SCHRODINGEROVA ROVNICE $i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = \hat{H}|\psi\rangle$
ŘÍKÁ, ŽE FYZIKÁLNÍ VELIČINĚ $f(x; y; z; p_x; p_y; p_z)$ JE PŘIŘAZENÝ OPERÁTOR $\hat{f} = f(\hat{x}; \hat{y}; \hat{z}; \hat{p}_x; \hat{p}_y; \hat{p}_z)$

32.) STŘEDNÍ HODNOTA FYZIKÁLNÍ VELIČINY

- MĚŘÍME FYZIKÁLNÍ VELIČINU f, KTERÉ ODPOVÍDÁ OPERÁTOR $\hat{f}$.

$f \ldots \hat{f}, \; \hat{f}|\psi_n\rangle = f_n|\psi_n\rangle$

VLASTNÍ VEKTOR, VLASTNÍ HODNOTY

VYCHÁZÍME ZE IV. POSTULÁTU, MĚŘÍM, DOSTÁVÁM RŮZNÉ HODNOTY S RŮZNOU PRAVDĚPODOBNOSTÍ, OTÁZKA JE, JAKÁ BUDE JEJICH STŘEDNÍ HODNOTA

STŘEDNÍ HODNOTU VELIČINY f VE STAVU ψ BUDEME ZNAČIT $\langle f\rangle|_{|\psi\rangle} = P(f_1)\cdot f_1 + P_2(f_2) f_2 + \ldots = \sum_n f_n P(f_n) =$

NEBO $\bar{f}_\psi$

$= \sum_n f_n |\langle\psi_n|\psi\rangle|^2 = \sum_n f_n \cdot \langle\psi_n|\psi\rangle\langle\psi_n|\psi\rangle^* =$

$\langle\psi_n|\psi\rangle^* = \langle\psi|\psi_n\rangle$

$= \sum_n \langle\psi|\psi_n\rangle f_n \langle\psi_n|\psi\rangle = \langle\psi|\underbrace{\sum_n |\psi_n\rangle f_n \langle\psi_n|}_{\text{OPERÁTOR } \hat{f} \text{ V REPREZENTAC VLASTNÍHO VEKTORU.}}|\psi\rangle =$

VYSTRČÍM MIMO SUMU

$= \langle\psi|\hat{f}|\psi\rangle$

PRO PŘIPOMÍNKU

OPERÁTOR $\hat{A}$ JE V BÁZI $\{|u_i\rangle\}$ REPREZENTOVANÝ VÝRAZEM $\sum_{ij} |u_i\rangle\langle u_i|A|u_j\rangle\langle u_j|$

DÁME MÍSTO $\hat{A} \ldots \hat{f}$ A MÍSTO BÁZE $u_i \ldots \{|\psi_n\rangle\}$ MÁM TEDY:

$\sum_{mn} |\psi_n\rangle \underbrace{\langle\psi_n|\underbrace{\hat{f}|\psi_m\rangle}_{f_m|\psi_m\rangle}}_{f_m\underbrace{\langle\psi_n|\psi_m\rangle}_{\delta_{mn}}} \langle\psi_m| = \sum_n |\psi_n\rangle f_n \langle\psi_n|$

$\langle f\rangle|_{|\psi\rangle} = \bar{f}_{|\psi\rangle} = \langle\psi|\hat{f}|\psi\rangle$

DŮLEŽITÉ PRO KVANTOVOU MECHANIKU, SPOUSTA ÚLOH JE O VYJÁDŘENÍ STŘEDNÍ HODNOTY.

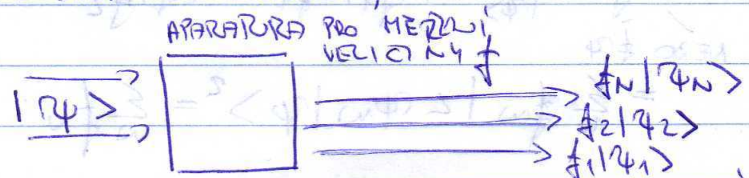
Př) DIPÓLOVÝ MOMENT MOLEKULY ... $\langle \psi_{MOL} |$ OPERÁTOR DIPÓLOVÉHO MOMENTU $| \psi_{MOL} \rangle$

HUSTOTA PROUDU V POLOVODIČI ... $\langle \psi_{\text{POLOVODIČE V POLI}} |$ OPERÁTOR PROUDOVÉ HUSTOTY $| \psi_{\text{POLOVODIČE V POLI}} \rangle$

MAGNETICKÝ MOMENT FEROMAGNETICKÉ ČÁSTICE ... $\langle \psi_{\text{MAGNETICKÝ MOMENT ČÁSTICE}} |$ OPERÁTOR MAGNETICKÉHO MOMENTU $| \psi_{\text{MAG. MOM. Č}} \rangle$

O MĚŘENÍ FYZIKÁLNÍ VELIČINY f VE STAVU $|\psi\rangle$

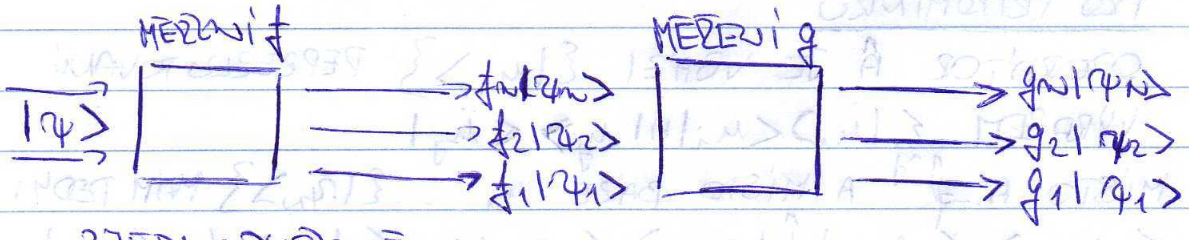
- MÁME SYSTÉM O STAVU ψ



MŮŽEME KE KAŽDÉ VLASTNÍ HODNOTĚ NAJÍT TAKOVÝ VEKTOR ψ ABYCHOM PRÁVĚ TU VLASTNÍ HODNOTU DOSTALI?

ANO ... MUSÍME MÍT NA POČÁTKU STAV ψ_N

MĚŘENÍ FYZIKÁLNÍCH VELIČIN f A g PO SOBĚ



ZJEDNODUŠENĚ

PRO $[\hat{f}, \hat{g}] = 0$ ANO
$\{f, g\}$ JSOU KOMPATIBILNÍ VELIČINY

DŮKAZ: $f \ldots \hat{f}$ MÁ VLASTNÍ HODNOTY A VLASTNÍ VEKTORY

$$\left.\begin{array}{l} \longrightarrow f_N |\psi_{N1}\rangle \ldots |\psi_N b_N\rangle \\ \longrightarrow f_2 |\psi_{21}\rangle \ldots |\psi_2 b_2\rangle \\ \longrightarrow f_1 |\psi_{11}\rangle \ldots |\psi_1 b_1\rangle \end{array}\right\} \text{BÁZE HILBERTOVA PROSTORU}$$

33.)

$g \dots \hat{g}$; NEJPRVE SI UKÁŽEME, ŽE $\hat{g}$ PŮSOBÍCÍ $|\psi_{n i}\rangle$ JE VLASTNÍ VEKTOR $\hat{f}$ S VLASTNÍ HODNOTOU f_n

$$\hat{f}\hat{g}|\psi_{n i}\rangle = \hat{g}\hat{f}|\psi_{n i}\rangle = \hat{g} \cdot f_n |\psi_{n i}\rangle = f_n \{\hat{g}|\psi_{n i}\rangle\}$$

$$[\hat{f}, \hat{g}] = 0$$
$$\hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f} = 0$$

PROSTOR DANÝ VEKTORY $[|\psi_{n 1}\rangle \dots |\psi_{n b_n}\rangle]$ JE INVARIANTNÍ VŮČI PŮSOBENÍ OPERÁTORU $\hat{g}$.

VEZMU $\hat{g}$ NA JEDEN VEKTOR Z TOHOTO PROSTORU DOSTANU $\hat{g}$ NA JINÝ VEKTOR Z TOHOTO PROSTORU. LZE NA TOMTO PROSTORU NALÉST BÁZI VLASTNÍCH VEKTORŮ $\hat{g}$, OZNAČME JE SYMBOLEM $|f_n\, g_m\, i\rangle$ DALŠÍ PARAMETR

VLASTNÍ HODNOTA

VLASTNÍ HODNOTA g

f KE KTERÉ PATŘÍ VŠECHNY VEKTORY Z TOHOTO PROSTORU

SOUBOR $\{|f_n g_m i\rangle\}$ JE SPOLEČNÝ ÚPLNÝ SOUBOR VLASTNÍCH VEKTORŮ OPERÁTORU $\hat{f}$ A $\hat{g}$. EXISTENCE TAKOVÉHO SOUBORU JE DŮSLEDEK $[\hat{f}, \hat{g}] = 0$

$|f_n\, g_m\, i\rangle$ $\boxed{} \dots \boxed{}$ DOSTANU S JISTOTOU f_n A g_m

DOKÁZALI JSME SI, ŽE KDYŽ OPERÁTORY KOMUTUJÍ, MŮŽU KE KAŽDÉMU PÁRU VLASTNÍCH HODNOT NAJÍT VEKTOR, KTERÝ JE PŘIMĚŘENÝ NA TYTO VLASTNÍ HODNOTY POVEDOU. ŘÍKÁME, ŽE JSOU TY VELIČINY KOMPATIBILNÍ

PRO $[\hat{f};\hat{g}] \neq 0$ NE
$\{f;g\}$ NEJSOU KOMPATIBILNÍ VELIČINY

DŮKAZ: NEJPRVE OBRAT VEDOUCÍ K OBECNÉMU TVARU RELACÍ NEURČITOSTI.

$f \cdots \hat{f} \;;\; g \cdots \hat{g}$

$|\varphi\rangle \stackrel{def}{=} (\hat{f} + i\lambda \cdot \hat{g})|\psi\rangle$

$\langle\varphi|\varphi\rangle \geqq 0$

$\langle\varphi|\varphi\rangle = \langle\psi|\underbrace{\hat{f} + i\lambda\hat{g}}_{\langle\varphi|}\,\underbrace{|\hat{f} + i\lambda\hat{g}|\psi\rangle}_{|\varphi\rangle} =$

$= \langle\psi|(\hat{f} - i\lambda\hat{g})(\hat{f} + i\lambda\hat{g})|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{f}^2 - \lambda\hat{g}^2 + i\lambda \cdot$
$\cdot [\hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f}]|\psi\rangle = \langle\psi|\underbrace{\hat{f}^2}_{\text{STŘEDNÍ HODNOTA } \hat{f}^2}|\psi\rangle + \lambda^2\langle\psi|\underbrace{\hat{g}^2}_{\text{STŘEDNÍ HODNOTA } \hat{g}^2}|\psi\rangle +$
$+ i\lambda\langle\psi|\underbrace{[\hat{f};\hat{g}]}_{\text{STŘEDNÍ HODNOTA } [\hat{f};\hat{g}] \,=\, \boxed{ik}}|\psi\rangle$

VÝRAZ $i\lambda\langle\psi|[\hat{f};\hat{g}]|\psi\rangle$ MÁ BÝT REÁLNÝ A KLADNÝ

CO Z TOHO VYPLÝVÁ: a) k REÁLNÉ PRO $\forall\,|\psi\rangle$

b) $\langle\psi|\hat{f}^2|\psi\rangle + \lambda^2\langle\psi|\hat{g}^2|\psi\rangle - \lambda k \geqq 0$ PRO $\forall\,|\psi\rangle$

TOTO JE POLYNOM DRUHÉHO ŘÁDU V λ, A TEN JE PRO $\forall$ ~~...~~ λ ~~...~~ VĚTŠÍ NEŽ NULA (TEN VÝRAZ) POKUD JE DISKRIMINANT ZÁPORNÝ.

$k^2 - 4\langle\psi|\hat{f}^2|\psi\rangle\langle\psi|\hat{g}^2|\psi\rangle \leqq 0$

$\langle\psi|\hat{f}^2|\psi\rangle\langle\psi|\hat{g}^2|\psi\rangle \geqq \frac{k^2}{4}$

$\hat{f}' = \hat{f} - \bar{f} \quad ; \quad \hat{g}' = \hat{g} - \bar{g}$

($\hat{f}$ … OPERÁTOR; $\bar{f}$ … STŘEDNÍ HODNOTA)

PRO $\hat{f}'$ A $\hat{g}'$ MŮŽEME PROVÉST TOTÉŽ

34.

A DOSTANEME

$\langle\psi|\hat{f}'^2|\psi\rangle \langle\psi|\hat{g}'^2|\psi\rangle \geq \frac{k^2}{2}$ BEZE ZMĚN

JINÝ ZÁPIS

$\langle(\hat{f}-\bar{f})^2\rangle \langle(\hat{g}-\bar{g})^2\rangle \geq \frac{k^2}{4}$

$(\Delta f)^2 \cdot (\Delta g)^2 \geq \frac{k^2}{4}$

Př) $f = x \quad \hat{f} = \hat{x}$

$g = p_x \quad \hat{g} = \hat{p}_x$

$\langle(\hat{x}-\bar{x})^2\rangle \langle(\hat{p}_x-\bar{p}_x)^2\rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$

$[\hat{x}; p_x] = i\hbar \quad ; k = \hbar$

DOSTALI JSME RELACE NEURČITOSTI PRO LIBOVOLNÉ VELIČINY, KTERÉ MAJÍ NENULOVÝ KOMUTÁTOR.
NEKOMPATIBILITA, $[\hat{f};\hat{g}] \neq 0$ NENULOVÝ KOMUTÁTOR
PŘEDPOKLAD $\langle\psi|[\hat{f};\hat{g}]|\psi\rangle \neq 0$ NENULOVÁ HODNOTA PRO VŠECHNA $|\psi\rangle$ (PLATÍ PRO VŠECHNA $\hat{x}$ A $\hat{p}_x$)
$(\Delta f)^2 (\Delta g)^2 > 0 \quad \forall |\psi\rangle$. NEEXISTUJE $|\psi\rangle$, PRO KTERÝ f i g JSOU URČENY OSTŘE. VELIČINY f A g NEKOMPATIBILNÍ. EXISTUJE PŘÍPAD KDY $[\hat{f};\hat{g}] \neq 0$, ALE PRO NĚKTERÉ STAVOVÉ VEKTORY PLATÍ $\langle\psi|[\hat{f};\hat{g}]|\psi\rangle = 0$ NAPŘÍKLAD PRO MOMENT HYBNOSTI. JE-LI KOMUTÁTOR NULOVÝ MŮŽEME NAJÍT SOUBOR VLASTNÍCH VEKTORŮ (VELIČIN).

ČASOVÝ VÝVOJ A EHRENFESTOVY VĚTY

- UVAŽUJME SI NORMA $\langle\psi|\psi\rangle$ NEZÁVISÍ NA ČASE, PODÍVÁME SE JAK SE VYVÍJEJÍ STŘEDNÍ HODNOTY V ČASE $\langle\psi|\hat{f}|\psi\rangle$.

NORMA:

PRAVIDLO PRO DERIVOVÁNÍ SOUČINU

$$\frac{d\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle}{dt} = \frac{d\langle\psi(t)|}{dt}|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle =$$

$*$

* $\frac{1}{i\hbar}\hat{H}|\psi(t)\rangle$

$\hat{H}|\psi\rangle = i\hbar\frac{d|\psi\rangle}{dt}$ PRO BRA-VEKTOR $\langle\psi|\hat{H} = -i\hbar\frac{d\langle\psi|}{dt}$

$$= -\frac{1}{i\hbar}\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle = \underline{0}$$

VÝVOJ: $\underbrace{\langle\psi|\hat{f}|\psi\rangle}_{\bar{f}}$ $\qquad \bar{x} \dots x$, $\quad \bar{p}_x \dots p_x$

$$\frac{d\bar{f}}{dt} = \overbrace{\frac{d}{dt}\{\langle\psi(t)|\hat{f}(t)|\psi(t)\rangle}^{\text{ČASOVÁ DERIVACE STŘEDNÍ HODNOTY}} = \overbrace{\frac{d\langle\psi|}{dt}}^{-\frac{1}{i\hbar}\langle\psi|\hat{H}} \cdot \hat{f}|\psi(t)\rangle +$$

$$+ \langle\psi|\frac{\partial\hat{f}}{\partial t}|\psi\rangle + \langle\psi|\hat{f}|\underbrace{\frac{d}{dt}|\psi\rangle}_{\frac{1}{i\hbar}\hat{H}|\psi\rangle} =$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\langle\psi|\hat{f}\hat{H} - \hat{H}\hat{f}|\psi\rangle + \langle\psi|\frac{\partial\hat{f}}{\partial t}|\psi\rangle =$$

$$= \underbrace{\langle\psi|\frac{[\hat{f},\hat{H}]}{i\hbar} + \frac{\partial\hat{f}}{\partial t}|\psi\rangle}_{\text{ZNAČÍME } \frac{d\hat{f}}{dt}}$$

OPERÁTOR ČASOVÉ DERIVACE

DŮVOD JE TEN, ŽE DERIVACE STŘEDNÍ HODNOTY PODLE ČASU JE STŘEDNÍ HODNOTA OPERÁTORU $\frac{d\hat{f}}{dt}$.

$\frac{d\bar{f}}{dt} = \langle\psi|\frac{d\hat{f}}{dt}|\psi\rangle$ PŘEDPIS PRO ČASOVÝ VÝVOJ STŘEDNÍ HODNOTY.

35.)

Př.) 1 ČÁSTICE V 3D $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r})$

CHCEME URČIT $\frac{d\bar{x}}{dt}$; $\frac{d\bar{p}_x}{dt}$

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = \langle\psi|\frac{1}{i\hbar}[\hat{x};\hat{H}] + \frac{\partial\hat{x}}{\partial t}|\psi\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle\psi|[\hat{x};\hat{H}]|\psi\rangle$$

$$[\hat{x};\hat{H}] = [\hat{x};\frac{\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2+\hat{p}_z^2}{2m} + V(\hat{x};\hat{y};\hat{z})] =$$
$$= [\hat{x};\frac{\hat{p}_x^2}{2m}] = \frac{1}{2m}(\hat{x}\hat{p}_x^2 - \hat{p}_x^2\hat{x}) =$$
$$= \frac{1}{2m}((\hat{p}_x\cdot\hat{x} + i\hbar)\cdot\hat{p}_x - \hat{p}_x^2\cdot\hat{x}) = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x\cdot\hat{x}\cdot\hat{p}_x + i\hbar\hat{p}_x - \hat{p}_x^2\cdot\hat{x}) =$$
$$= \frac{1}{2m}(\hat{p}_x\cdot\hat{x}\cdot\hat{p}_x + i\hbar\hat{p}_x - \hat{p}_x^2\cdot\hat{x}) = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x(\hat{p}_x\hat{x} + i\hbar) + i\hbar\hat{p}_x - \hat{p}_x^2\cdot\hat{x}) = \frac{1}{2m}(\cancel{\hat{p}_x^2\hat{x}} + 2i\hbar\hat{p}_x - \cancel{\hat{p}_x^2\hat{x}}) =$$
$$= \frac{i\hbar}{m}\cdot\hat{p}_x$$

$$\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x} = i\hbar$$

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\langle\psi|[\hat{x};\hat{H}]|\psi\rangle = \frac{\langle\psi|\hat{p}_x|\psi\rangle}{m}$$

$$\frac{d\bar{p}_x}{dt} = -\langle\psi|\frac{\partial}{\partial x}V(\vec{r})|\psi\rangle$$

PŘIPOMÍNÁ HAMILTONIÁN

KLASICKÉ HAMILTONOVY ROVNICE

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = \frac{\partial}{\partial p_x}H = \frac{\langle p_x\rangle}{m}$$

$$\frac{d\bar{p}_x}{dt} = \frac{\partial}{\partial x}H = \langle -\frac{\partial}{\partial x}V(\vec{r})\rangle$$

UPRAVÍM A DOSTANU ROVNICE PRO $\bar{x}$ A $\bar{p}_x$

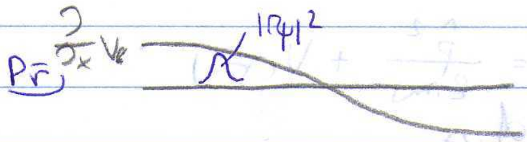
$$m\cdot\frac{d\bar{x}^2}{dt^2} = \cancel{m}\cdot\frac{d}{dt}\frac{\bar{p}_x}{\cancel{m}} = \langle\psi|-\frac{\partial}{\partial x}V(\vec{r})|\psi\rangle$$

x-OVÁ SLOŽKA SÍLY

$$m\cdot\frac{\partial\bar{x}^2}{\partial t^2} = \text{STŘEDNÍ HODNOTA SÍLY}$$

JE TO DRUHÝ NEWTONŮV POHYBOVÝ ZÁKON PRO $\bar{x}$?

NE, ALE SKORO $m\frac{d\bar{x}^2}{dt^2} = \frac{\partial}{\partial x}V(x-\bar{x})$



POTOM $-\frac{\partial}{\partial x}V \approx -\frac{\partial}{\partial x}V(\bar{r})$

$$\int \psi^*\left(-\frac{\partial}{\partial x}V\right)\psi\, d\bar{x} \quad -\frac{\partial}{\partial x}V\Big(\underbrace{\int \psi^*(\vec{r})\,\psi\, d\vec{r}}_{\bar{r}}\Big)$$

LZE NAHRADIT KONSTANTOU $-\frac{\partial}{\partial x}V(\vec{r}_0)$

$$= \frac{\partial}{\partial x}V(\vec{r}_0)\int \psi^*\psi\, d\vec{r} = -\frac{\partial}{\partial x}V(\vec{r}_0)$$

PAKLIŽ JSOU ROZMĚRY VLNOVÉHO KLUBKA MALÉ $\ll \lambda_V$. PAK TO VYCHÁZÍ STEJNĚ.
PAK PRO $\bar{x}$ A $\bar{p}_x$ PLATÍ ROVNICE KLASICKÉ FYZIKY
λ_V ... CHARAKTERIZUJE DÉLKU ZMĚNY POTENCIÁLU V.

O PROBLÉMECH ŘEŠENÍ SCHRODINGEROVY ROVNICE

ČASOVÁ SCHRODINGEROVA ROVNICE

$$i\hbar\frac{d|\psi\rangle}{dt} = \hat{H}|\psi\rangle$$

$\hat{H}$ - EXPLICITNĚ NEZÁVISÍ NA ČASE

POTOM MŮŽEME NALÉZT VLASTNÍ VEKTORY $|\psi_n\rangle$; VLASTNÍ HODNOTY E_n, POTOM NÁM PLATÍ $\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$.
SOUBOR VLASTNÍCH VEKTORŮ $\{|\psi\rangle\}$ JE ÚPLNÝ.
Z TOHO VYPLÝVÁ, ŽE LIBOVOLNOU FUNKCI $|\psi\rangle$
A TAKÉ LIBOVOLNÉ ŘEŠENÍ ROVNICE $i\hbar\frac{d|\psi\rangle}{dt} = \hat{H}|\psi\rangle$
LZE VYJÁDŘIT JAKO LINEÁRNÍ KOMBINACI VEKTORŮ ψ_n
LZE TEDY ZAPSAT $\sum_n c_n(t)|\psi_n\rangle$

$$i\hbar\frac{d|\psi\rangle}{dt} = \hat{H}|\psi\rangle$$

$$i\hbar\frac{d}{dt}\sum_n c_n(t)|\psi_n\rangle = \hat{H}\sum_n c_n(t)|\psi_n\rangle$$

PROHODÍM (ZAMÍCHÁM)

36.

$$\langle\varphi_n| \cdot i\hbar \sum_m |\varphi_m\rangle \cdot \frac{d}{dt} c_m = \sum_m c_m \langle t|\underbrace{\hat{H}|\varphi_m\rangle}_{E_m|\varphi_m\rangle}$$

VYNÁSOBÍM VLEVO — LIBOVOLNÉ

$$i\hbar \sum_m \underbrace{\langle\varphi_n|\varphi_m\rangle}_{\delta_{mn}} \cdot \frac{d}{dt} c_m = \sum_m c_m E_m \underbrace{\langle\varphi_n|\varphi_m\rangle}_{\delta_{mn}}$$

$$i\hbar \frac{d c_n}{dt} = c_n E_n$$

$$c_n(t) = c_n^0 \cdot e^{-i\frac{E_n \cdot t}{\hbar}}$$

PRO $|\psi(t)\rangle$ VYHOVUJÍCÍ SCHRODINGEROVĚ ROVNICI MÁME:

$|\psi(t)\rangle = \sum_m c_m^0 \cdot e^{-i\frac{E_m \cdot t}{\hbar}} |\varphi_m\rangle$ ... OBECNÉ ŘEŠENÍ

KAŽDÉ ŘEŠENÍ ČASOVÉ SCHRODINGEROVY ROVNICE JDE ZAPSAT V TOMTO TVARU, JE TO OBECNÉ ŘEŠENÍ.

POČÁTEČNÍ ÚLOHA

MÁME ZADANOU VLNOVOU FUNKCI A CHCEME URČIT, JAK SE BUDE VYVÍJET.

- ZNÁME $|\psi(0)\rangle$ A CHCEME $|\psi(t)\rangle$

POSTUP: 1.) NALÉZT VLASTNÍ HODNOTY A VEKTORY HAMILTONIÁNU

$|\varphi_m\rangle$ A E_m

$\hat{H}|\varphi_m\rangle = E_m|\varphi_m\rangle$

2.) ZAPÍŠEME SI $|\psi(t_0)\rangle$ POMOCÍ ROVNICE PRO OBECNÉ ŘEŠENÍ.

$$|\psi(t_0)\rangle = \sum_m c_m^0 \cdot e^{-i\frac{E_m \cdot t_0}{\hbar}} |\varphi_m\rangle$$

POROVNÁNÍM LEVÉ A PRAVÉ STRANY DOSTANU c_m^0

3.) DOSADÍM c_m^0 DO ROVNICE PRO OBECNÉ ŘEŠENÍ A HOTOVO.

POJEM STACIONÁRNÍ STAV

-ŘEŠENÍ SCHRODINGEROVY ROVNICE O DANÉ ENERGII (E_n), MÁ TVAR,

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\frac{E_n \cdot t}{\hbar}} |\psi_n\rangle$$

O TĚCHTO ŘEŠENÍCH, HOVOŘÍME JAKO O STACIONÁRNÍCH STAVECH.
PRO LIBOVOLNOU FYZIKÁLNÍ VELIČINU NEZÁVISLOU NA ČASE A PRO LIBOVOLNÝ STACIONÁRNÍ STAV JEST $\bar{f} = \langle\psi(t)|\hat{f}|\psi(t)\rangle$ NEZÁVISLÁ NA ČASE.

$$\bar{f} = \langle\psi_n| e^{+i\frac{E_n \cdot t}{\hbar}} |\hat{f}| e^{-i\frac{E_n \cdot t}{\hbar}} |\psi_k\rangle =$$

PROČ + ? BRA VEKTORY KOMPLEXNĚ SPRUŽENÉ

$$= \langle\psi_n|\hat{f}|\psi_n\rangle$$

I KDYŽ ZE STAVŮ VYROBÍM JEJICH SUPERPOZICI TAK JEJICH STŘEDNÍ HODNOTA BUDE NEZÁVISLÁ NA ČASE. ČASOVÝ EXPONENT JE PRO VŠECHNY STAVY STEJNÝ (VYBIJE SE).

37.1 HARMONICKÝ OSCILÁTOR

a) HAMILTONIÁN A ZNAČENÍ

- HAMILTONIÁN PRO HARMONICKÝ OSCILÁTOR JE

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \; ; \; V(x) = \frac{1}{2} k x^2 = \frac{1}{2} m \cdot \omega^2 \cdot \hat{x}^2$$

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

CÍLEM JE URČIT VLASTNÍ HODNOTY ENERGIE $E_n |n\rangle$; $\hat{H}|n\rangle = E_n |n\rangle \quad n \in (0; 1; \dots)$

JIŽ VÍME, ŽE SPEKTRUM BUDE DISKRÉTNÍ A NEDEGENEROVANÉ.

ZAVEDEME OZNAČENÍ: $\hat{X} \overset{def}{=} \sqrt{\frac{m \cdot \omega}{\hbar}} \cdot \hat{x}$

$$\hat{P} \overset{def}{=} \frac{1}{\sqrt{m \cdot \hbar \cdot \omega}} \cdot \hat{p}$$

$\hat{X}$ a $\hat{P}$ BEZROZMĚRNÉ VELIČINY

DEFINUJEME VHODNÉ KOMBINACE PRO $\hat{X}$ a $\hat{P}$

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{X} + i \hat{P}) \quad \text{„SNIŽOVACÍ OPERÁTOR"}$$

HERMITOVSKY SDRUŽENÝ OPERÁTOR

$$\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{X} - i \hat{P}) \quad \text{„ZVYŠOVACÍ OPERÁTOR"}$$

UŽITEČNÉ KOMUTAČNÍ RELACE

$$[\hat{x}; \hat{p}] = i\hbar$$

$$[\hat{X}; \hat{P}] = i$$

$$[a; a^+] = a a^+ - a^+ a = 1$$

VYJÁDŘENÍ $\hat{H}$ (HAMILTONIÁNU) POMOCÍ $\hat{x}; \hat{p}; a; a^+$.

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \frac{\hat{p}^2}{m} + \frac{1}{2} m \cdot \omega^2 \cdot \hat{x}^2 = \frac{1}{2m} \left(\hat{P} \cdot \sqrt{m \hbar \omega}\right)^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \left(\hat{X} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\right)^2 =$$

$$= \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{P}^2 + \hat{X}^2) = \frac{\hbar\omega}{2} \left[\left(\frac{1}{\sqrt{2}} (a^+ - a)\right)^2 + \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (a + a^+)\right)^2 \right] =$$

$$= \frac{\hbar\omega}{2} \left(+ \frac{1}{2} a^+ a + \frac{1}{2} a a^+ + \frac{1}{2} a a^+ + \frac{1}{2} a^+ a\right) = \frac{\hbar\omega}{2} (a^+ a + a a^+) =$$

$$= \frac{\hbar\omega}{2} (2 a^+ a + 1) = \hbar\omega \left(a^+ a + \frac{1}{2}\right)$$

b) UKÁŽEME, ŽE $E_n \geq \frac{\hbar\omega}{2}$ $\forall n \in N_0$

VŠECHNY HODNOTY E_n JSOU VĚTŠÍ NEŽ $\frac{\hbar\omega}{2}$

NECHŤ $n \in N_0$

$|n\rangle = a|n\rangle$ SNIŽUJÍCÍ OPERÁTOR $\hat{a}$

$\langle n| = \langle n|a^+$

VLASTNÍ VEKTOR

$\langle n|n\rangle \geq 0$ (ROVEN NULE PRO $|n\rangle = 0$ Z HILBERTOVA PROSTORU, JINAK JE TO VŽDY KLADNÉ)

$$\langle n|n\rangle = \langle n|\underbrace{a^+ \cdot a}_{\text{VYJÁDŘÍME Z VÝSLEDKU BODU a)}}|n\rangle = n|\left(\frac{\hat{H}}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}\right)|n\rangle =$$

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(a^+a + \frac{1}{2}\right)$$

$$= \langle n|\frac{\hat{H}}{\hbar\omega}|n\rangle - \langle n|\frac{1}{2}|n\rangle = \frac{E_n}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}$$

$$\frac{E_n}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \geq 0 \quad E_n \geq \frac{\hbar\omega}{2}$$

b') DŮSLEDEK, PRO $n=0$ NASTÁVÁ JEDNA Z VARIANT

- $E_0 > \frac{\hbar\omega}{2}$; $a|0\rangle \neq 0$ V HILBEROVĚ PROSTORU
  ZÁKL. STAV
- $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$; $a|0\rangle = 0$

$n \geq 1$ PLATÍ $E_n \geq \frac{\hbar\omega}{2}$; $a|n\rangle \neq 0$

c) NECHŤ $n \in N_0$ NASTÁVÁ JEDNA Z VARIANT

- $a|n\rangle$ JE VLASTNÍ VEKTOR $\hat{H}$ S VLASTNÍ HODNOTOU ENERGIE $E_n - \hbar\omega$
- $a|n\rangle = 0$ V HILBERTOVĚ PROSTORU

POKUD TO NESKONČÍ NA NULE DOSTÁVÁME VLASTNÍ VEKTOR HAMILTONIÁNU

DŮKAZ $\hat{H}\, a|n\rangle = \hbar\omega\left(a^+a + \frac{1}{2}\right)a|n\rangle = \hbar\omega\left(a a^+ - 1 + \frac{1}{2}\right)a|n\rangle =$

BUDOUCÍ

PROHODÍME a^+ PODLE KOMUTAČNÍ RELACE

$$= a\{\overbrace{\hbar\omega\left(a^+a + \frac{1}{2}\right)}^{\hat{H}} - \hbar\omega\}|n\rangle = a(E_n - \hbar\omega)|n\rangle =$$

$$= (E_n - \hbar\omega)\, a|n\rangle$$

ÁČKO JSME VYTKLI DOPŘEDU

3f.)

c') DŮSLEDEK c)

ZAPŮSOBÍM OPERÁTOREM $\hat{a}^m$ ← SNIŽOVACÍ OPERÁTOR

$E_m|m\rangle$

$\downarrow \hat{a}$

$E=E_m-\hbar\omega$

$\downarrow \hat{a}$

$E=E_m-2\hbar\omega$

⋮

? KDE SE TO ZASTAVÍ ??

c'') DŮSLEDEK c') A b) $E_m \geq \frac{\hbar\omega}{2}$

⇒ SKOKY MUSÍ NĚKDE SKONČIT, NA NĚJAKÉM STAVU, MUSÍ EXISTOVAT TAKOVÉ ČÍSLO m, ŽE $a(a^m|m\rangle)=0$ ← V HILBERTOVĚ PROSTORU

c''') DŮSLEDEK b') A c'')

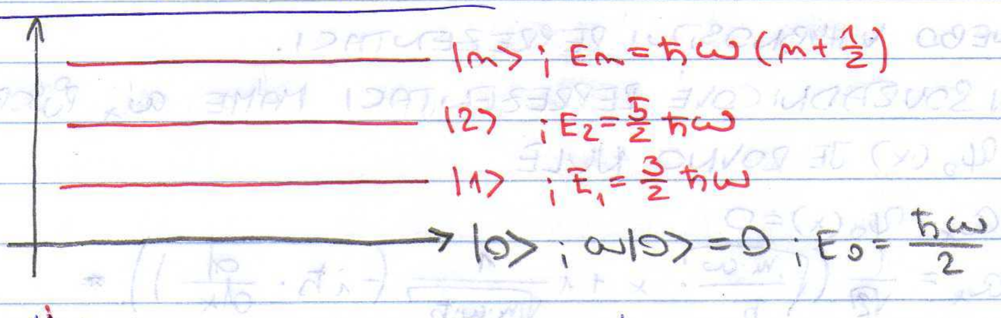
b) NÁM ŘÍKÁ $a|m\rangle \neq 0$ PRO $m \geq 1$

MŮŽE BÝT ROVNO 0 PRO $m=0$

SKÁKÁNÍ SKONČÍ NA $|0\rangle$ PLATÍ $a|0\rangle=0$

↑ NULTÝ STAV (ZÁKLADNÍ STAV)

ENERGIOVÉ SPEKTRUM – VYPLÝVAJÍCÍ Z PŘEDCHOZÍHO



d) JAK SE DOSTAT Z NULTÉ HLADINY NAHORU

$a^\dagger|m\rangle$ JE VLASTNÍ VEKTOR $\hat{H}$ S VLASTNÍ HODNOTOU $E_m+\hbar\omega$. $a^\dagger|m\rangle$ JE ÚMĚRNÉ $|m+1\rangle$

$a^\dagger|m\rangle \sim |m+1\rangle$

DŮKAZ $\underbrace{\hat{H}}_{\text{PŮSOBÍ}} a^\dagger|m\rangle = \hbar\omega(a^\dagger a+\frac{1}{2})a^\dagger|m\rangle = a^\dagger\hbar\omega(a a^\dagger+\frac{1}{2})|m\rangle =$

$= a^\dagger\hbar\omega(\underbrace{a^\dagger a}_{\text{OPĚT PROHOZENÍ PODLE KOMUTAČNÍ RELACE}}+\frac{1}{2}+1)|m\rangle = a^\dagger(\hat{H}+\hbar\omega)|m\rangle = a^\dagger(E_m+\hbar\omega)|m\rangle =$

$a a^\dagger - a^\dagger a = 1$

$= (E_n + \hbar\omega) a^+ |n\rangle$

VSKUTKU $a^+|n\rangle$ JE VLASTNÍ VEKTOR, A VLASTNÍ HODNOTA JE $E_n + \hbar\omega$

$$\boxed{a^+|n\rangle \sim |n+1\rangle}$$

d') VYJÁDŘENÍ $|n\rangle$ POMOCÍ $|0\rangle$

DŮSLEDEK:

$$\left.\begin{aligned} |1\rangle &\sim a^+|0\rangle \\ |2\rangle &\sim a^+|1\rangle \\ &\vdots \\ |n\rangle &\sim a^+|n-1\rangle \end{aligned}\right\} \quad |n\rangle \sim (a^+)^n |0\rangle$$

PŘI SPRÁVNÉM NORMOVÁNÍ

$$|n\rangle = \frac{(a^+)^n |0\rangle}{\sqrt{n!}}$$

VZTAHY PRO NORMOVANÉ VEKTORY $a|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle$

$a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$

e) URČENÍ $|0\rangle$ (ZÁKLADNÍ STAV) V SOUŘADNICOVÉ REPREZENTACI

V OBECNÉM ZÁPISU: $a|0\rangle = 0$

SNIŽUJÍCÍ OPERÁTOR $\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} + i\hat{P}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,\hat{x} + i\overbrace{\frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}\cdot\hat{p}}^{\text{MALÉ}}\right)$

U OSCILÁTORU MŮŽEME NASADIT BUĎ V SOUŘADNICOVÉ NEBO V HYBNOSTNÍ REPREZENTACI.

V SOUŘADNICOVÉ REPREZENTACI MÁME a_x PŮSOBÍCÍ NA $\psi_0(x)$ JE ROVNO NULE

$$a_x\,\psi_0(x) = 0$$

ZÁPIS $a_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\cdot\omega}{\hbar}}\cdot x + i\frac{1}{\sqrt{m\cdot\omega\cdot\hbar}}\left(-i\hbar\cdot\frac{d}{dx}\right)\right)$ *

KDYŽ PŮSOBÍME NA $\psi_0(x)$ MŮŽEME VYNECHAT $\frac{1}{\sqrt{2}}$

$$* \left(\sqrt{\frac{m\cdot\omega}{\hbar}}\cdot x + \sqrt{\frac{\hbar}{m\cdot\omega}}\,\frac{d}{dx}\right)\psi_0 = 0 \quad \Big/ \cdot\frac{1}{\psi_0};\ \cdot dx$$

$$\frac{\sqrt{m\omega}}{\sqrt{\hbar}}\,x\,dx = -\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\cdot\frac{d\psi_0}{\psi_0}$$

$$\frac{m\omega}{\hbar}\,x\,dx = -\frac{d\psi_0}{\psi_0} \quad \Big/\ \text{ZINTEGRUJI}$$

39.

$$\frac{m\cdot\omega}{\hbar}\cdot\frac{x^2}{2} + c = -\ln\psi_0$$

$$\psi_0(x) = D\cdot e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}\cdot x^2}$$

KONSTANTA, KTEROU ZVOLÍME TAK, ABY $\int|\psi|^2 dx = 1$

URČENÍ D

$$\int_{-\infty}^{\infty} D^2\cdot e^{-\frac{m\cdot\omega}{\hbar}x^2}\cdot dx = 1$$

$$\frac{1}{D^2} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2}dx = \left| \begin{array}{l} \sqrt{\frac{m\cdot\omega}{\hbar}}\cdot x = u \\ dx = du\sqrt{\frac{\hbar}{m\cdot\omega}} \end{array} \right| =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2}du\sqrt{\frac{\hbar}{m\cdot\omega}} = \sqrt{\frac{\pi\cdot\hbar}{m\cdot\omega}} \quad D^2 = \sqrt[2]{\frac{m\cdot\omega}{\pi\cdot\hbar}} \ldots \boxed{D = \sqrt[4]{\frac{m\cdot\omega}{\pi\cdot\hbar}}}$$

$$\psi_0(x) = \sqrt[4]{\frac{m\cdot\omega}{\pi\cdot\hbar}}\cdot e^{-\frac{m\cdot\omega}{2\hbar}\cdot x^2}$$

f) URČENÍ EXCITOVANÝCH STAVŮ

V OBECNÉM ZÁPISU $|n\rangle = \frac{(a^+)^n|0\rangle}{\sqrt{n!}}$

V SOUŘADNICOVÉ REPREZENTACI $\psi_n(x) = \frac{(a^+|x)^n}{\sqrt{n!}}\psi_0(x)$

$$\psi_n(x) = P_n(x)\cdot e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}\cdot x^2}$$

HERMITŮV POLYNOM

PŘ) APLIKACE

DYNAMIKA JADER V MOLEKULÁCH A KONDENZOVANÝCH LÁTKÁCH

HAMILTONIÁN $H(\text{SOUBOR JADER}) = \sum_n \frac{\vec{p}_n^2}{2m_n} + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots \vec{r}_N) \xrightarrow{\text{PO ÚPRAVÁCH}}$

POTENCIÁLNÍ ENERGIE ZÁVISLÁ NA SOUŘADNICÍCH VŠECH JADER

$$\longrightarrow \sum_m \frac{\hbar\omega}{2}\cdot(P_m^2 + Q_m^2)$$

SČÍTÁNÍ PŘES KMIT. MÓDY

ZOOBECNĚNÁ HYBNOST A SOUŘADNICE MÓDU.

PRO KAŽDÝ MÓD 1 HARMONICKÝ OSCILÁTOR (MOLEKULY)

ELEKTROMAGNETICKÉ POLE VE VAKUU

TOTO POLE JE POPSÁNO VEKTOROVÝM POTENCIÁLEM

$$\vec{A}(\vec{r};t) = \sum_k \vec{A}_{\vec{k}} \cdot e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega\cdot t)}$$

$$\sum_{\vec{k}} \underbrace{(\vec{e}(\vec{k};1) \cdot c(\vec{k};1) \cdot e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)}}_{\text{PRVNÍ POLARIZAČNÍ VEKTOR}} + \underbrace{\vec{e}(\vec{k};2) \cdot c(\vec{k};2) \cdot e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)})}_{\text{DRUHÝ POLARIZAČNÍ VEKTOR}}$$

$$= \sum_{k\mu} c(\vec{k};\mu) \cdot \vec{e}(\vec{k};\mu) \cdot e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)}$$

STAV ELEKTROMAGNETICKÉHO POLE VAKUU

HAMILTONIÁN $H_{EL\,MAG} = \sum_{k\mu} \frac{\hbar \cdot \omega(\vec{k})}{2} \left(P_{\vec{k}\mu}^2 + Q_{\vec{k}\mu} \right)$

ZOBECNĚNÁ SOUŘADNICE

ZOOBECNĚNÁ HYBNOST, POPISUJE JAK SE CHOVÁ POLE, PRO MÓD $\vec{k};\mu$

$P_{\vec{k}\mu} \to \hat{P}_{\vec{k}\mu} \qquad Q_{\vec{k}\mu} \to \hat{Q}_{\vec{k}\mu}$

PRO KAŽDOU POLARIZACI 1 HARMONICKÝ OSCILÁTOR

MOMENT HYBNOSTI

- MOMENT HYBNOSTI V KLASICKÉ MECHANICE

1 ČÁSTICE $\quad \vec{l} = \vec{r} \times \vec{p}$

$$\frac{d\vec{l}}{dt} = \vec{r} \times \vec{F} = 0 \quad \text{PRO } \vec{F} = 0$$

NEBO PRO CENTRÁLNÍ POLE

SOUSTAVA $\quad \vec{L} = \sum_i \vec{l}_i$

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \sum_i r_i \times F_i = 0 \quad \text{PRO IZOLOVANOU SOUSTAVU}$$

- DEFINICE ORBITÁLNÍHO MOMENTU HYBNOSTI V KVANTOVÉ MECHANICE

$\hat{\vec{l}} \overset{def}{=} \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}$ V SOUŘADNICOVÉ REPREZENTACI $\hat{\vec{r}}\ (x;y;z)$

40.

$\hat{\vec{p}}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial x};-i\hbar\frac{\partial}{\partial y};-i\hbar\frac{\partial}{\partial z}\right)$

$l_x=(\hat{\vec{\mu}}\times\hat{\vec{p}})_x=\hat{y}\cdot\hat{p}_z-\hat{z}\hat{p}_y=-i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right)$

$l_y=(\hat{\vec{\mu}}\times\hat{\vec{p}})_y=\hat{z}\hat{p}_x-\hat{x}\hat{p}_z=-i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z}\right)$

$l_z=(\hat{\vec{\mu}}\times\hat{\vec{p}})_z=\hat{x}\hat{p}_y-\hat{y}\hat{p}_x=-i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)$

VZTAH ORBITÁLNÍHO MOMENTU HYBNOSTI A ROTACE VE 3D

- ROTACE V 3D VP
- OPERACE ROTACE OKOLO VEKTORU $\vec{\mu}$ O ÚHEL α: $R_{\vec{\mu}\alpha}: V\to V$

$\vec{\mu}\to\vec{\mu}'=R_{\vec{\mu}\alpha}(\vec{\mu})$

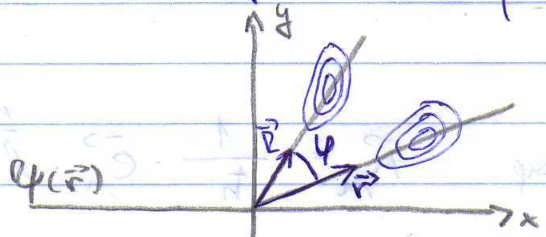
- MATICE $\begin{pmatrix}x'\\y'\\z'\end{pmatrix}=M_{(R_{\vec{\mu}\alpha})}\begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix}$

PŘ.) ROTACE OKOLO $\vec{e}_r=(0;0;1)$ O ÚHEL φ

$$M_{(R_{\vec{e}_r\varphi})}=\begin{pmatrix}\cos\varphi & -\sin\varphi & 0\\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

PŮSOBENÍ ROTACE NA VLNOVÉ FUNKCE

PŘ.) ROTACE OKOLO $\vec{e}_r$ O ÚHEL φ V ROVINĚ $x;y$



$\psi'(\vec{r}')=\psi(\vec{r})$

$\vec{r}=R^{-1}_{\vec{e}_z\varphi}\vec{r}'$

$\psi'(\vec{r})=\psi(R^{-1}_{\vec{e}_z\varphi}\cdot\vec{\mu})$

OBECNÁ ROTACE $R_{\vec{\mu}\alpha}$

$\psi(\vec{r})\to\psi'(\vec{\mu})=\psi(R_{\vec{\mu}\alpha}\cdot\vec{r})$

$\boxed{\hat{R}_{\vec{\mu}\alpha}\psi(\vec{r})=\psi(R^{-1}_{\vec{\mu}\alpha}\cdot\vec{\mu})}$

OPERÁTOR PŘIŘAZEN K OPERACI $R_{\vec{\mu}\alpha}$, ZNAČÍ SE $\hat{R}_{\vec{\mu}\alpha}$

VZTAH MEZI $\hat{\vec{l}}$ A OPERÁTORY ROTACÍ (OPERÁTORY EL. ROTACÍ OKOLO OSY)

NEJPRVE $R_{\vec{e}_z\varphi}$; $\hat{R}_{\vec{e}_z\varphi}$

$$R_{\vec{e}_z\Delta\varphi} : (x;y;z)^T \to (x';y';z')^T = \begin{pmatrix} \cos\Delta\varphi & -\sin\Delta\varphi & 0 \\ \sin\Delta\varphi & \cos\Delta\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} =$$

$$\underset{\text{MALÉ } \Delta\varphi}{=} \begin{pmatrix} 1 & -\Delta\varphi & 0 \\ \Delta\varphi & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

$$\underset{\psi \to \psi'}{\hat{R}_{\vec{e}_z\Delta\varphi}} \psi = \psi'(x;y;z) = \psi\left(\hat{R}^{-1}_{\vec{e}_z\Delta\varphi}\vec{r}\right) = \psi\left(M^{-1}(R_{\vec{e}_z\Delta\varphi})\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}\right) =$$

$$= \psi\left(\begin{pmatrix} 1 & \Delta\varphi & 0 \\ -\Delta\varphi & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}\right) = \psi(x+\Delta\varphi y; y-\Delta\varphi x; z) =$$

$$= \psi(x;y;z) + \Delta\varphi y\frac{\partial\psi}{\partial x} - \Delta\varphi x\frac{\partial\psi}{\partial y} + \dots = \psi(x;y;z) - \Delta\varphi \cdot$$

$$\cdot\left(x\frac{\partial\psi}{\partial y} - y\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) = \psi(x;y;z) - \frac{i}{\hbar}\Delta\varphi\underbrace{\left(-i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)\right)}_{\hat{l}_z}\psi =$$

$$= \psi'(x;y;z) = \psi(x;y;z) - \frac{i}{\hbar}\Delta\varphi\hat{l}_z\psi$$

$\psi \to \psi'$ UDĚLÁ OPERÁTOR $\hat{R}_{\vec{e}_z\Delta\varphi} = 1 - \frac{i}{\hbar}\Delta\varphi\hat{l}_z = 1 + \hat{\mu}_z \cdot \Delta\varphi$

μ_z -- GENERÁTOR ROTACE

$\parallel -\frac{i}{\hbar}\hat{l}_z$ $\quad \hat{R}_{z/x/y} = -\frac{i}{\hbar}\hat{l}_{z/x/y}$

$$\hat{R}_{\vec{e}_{z/x/y}\Delta\varphi} = 1 + \hat{R}_{\mu}\Delta\varphi$$

ANALOGICKY

$$R_{\vec{\mu}\Delta\varphi} = 1 + \hat{R}_{\mu}\Delta\varphi \qquad \vec{\mu}_{\mu} = -\frac{1}{\hbar}\cdot\vec{e}_{\mu}\cdot\hat{\vec{l}}$$

OPERÁTOR ELEMENTÁRNÍCH ROTACÍ JSOU URČENY OPERÁTOREM $\vec{l}$. NAOPAK $\hat{l}$ LZE DEFINOVAT POMOCÍ GENERÁTORU ROTACE

$$\hat{l}_{x/y/z} = i\hbar\hat{R}_{x/y/z}$$

41.)

OBECNÁ DEFINICE MOMENTU HYBNOSTI

- NENÍ-LI PRO NĚJAKÝ SYSTÉM MOMENT HYBNOSTI DEFINOVÁN, LZE POČÍTAT PRO DEF. VZTAH S GENERÁTORY.

$\hat{J}_{x/y/z} \stackrel{def}{=} i\hbar\, \hat{r}_{x/y/z}$ ← GENERÁTORY ROTACÍ PRO DANÝ SYSTÉM

ZÁKON ZACHOVÁNÍ ORBITÁLNÍHO MOMENTU HYBNOSTI V KVANTOVÉ FYZICE

- VOLNÁ ČÁSTICE NEBO ČÁSTICE V CENTRÁLNÍM POLI
- PROSTOR JE IZOTROPNÍ TZN. SYMETRICKÝ VŮČI ROTACÍM

DŮSLEDKY V:

KLASICKÁ FYZIKA	KVANTOVÁ FYZIKA
JE-LI $\vec{r}(t)$ ŘEŠENÍM E.O.M PAK $\vec{r}'(t) = R_{\vec{\mu}\alpha} \cdot \vec{r}(t)$ JE TAKÉ ŘEŠENÍ ⇓ ZZMH V KLASICKÉ FYZICE	JE-LI $\|\psi(t)\rangle$ MOŽNÝ ČASOVĚ ZÁVISLÝ STAVOVÝ VEKTOR, PAK $\hat{R}_{\vec{\mu}\alpha}\|\psi(t)\rangle$ JE TAKÉ MOŽNÝ STAVOVÝ VEKTOR $\|\psi'(t)\rangle = \hat{R}_{\vec{\mu}\alpha}\|\psi(t)\rangle$ ZZMH V KVANTOVÉ FYZICE

$R_{\vec{\mu}\alpha};\ \hat{R}_{\vec{\mu}\alpha};\ |\psi(t)\rangle;\ |\psi'(t)\rangle$

$$i\hbar\frac{d|\psi\rangle}{dt} = \hat{H}|\psi\rangle \qquad i\hbar\frac{d|\psi'\rangle}{dt} = \hat{H}|\psi'\rangle, \quad |\psi'\rangle = \hat{R}_{\vec{\mu}\alpha}|\psi\rangle$$

$$i\hbar\,\hat{R}_{\vec{\mu}\alpha}\frac{d|\psi\rangle}{dt} = \hat{R}_{\vec{\mu}\alpha}\hat{H}|\psi\rangle \quad \text{(KOMUTUJE)}$$

$$\underbrace{i\hbar\frac{d}{dt}\hat{R}_{\vec{\mu}\alpha}|\psi\rangle = \hat{R}_{\vec{\mu}\alpha}\hat{H}|\psi\rangle \qquad i\hbar\frac{d\,\hat{R}_{\vec{\mu}\alpha}|\psi\rangle}{dt} = \hat{H}\cdot\hat{R}_{\vec{\mu}\alpha}|\psi\rangle}$$

$0 = (\hat{R}_{\vec{\mu}\alpha}\hat{H} - \hat{H}\hat{R}_{\vec{\mu}\alpha})|\psi\rangle$ – PRO $t=0$ SI MOHU LIBOVOLNĚ ZVOLIT

PROTO $(\hat{R}_{\vec{\mu}\alpha}H - \hat{H}\hat{R}_{\vec{\mu}\alpha}) = [\hat{R}_{\vec{\mu}\alpha};\hat{H}] = 0$

$$\hat{R}_{\vec{\mu}\alpha} \longmapsto \hat{R}_{\vec{e}_z\Delta\varphi} = \left(1 - \frac{i}{\hbar}\Delta\varphi\cdot\hat{l}_z\right)$$

$$\left[1 - \frac{i}{\hbar}\Delta\varphi\,\hat{l}_z,\ \hat{H}\right] =$$

$[\hat{l}_{z/x/y}; H] = 0 \Rightarrow \frac{d\bar{l}_{x/y/z}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle \psi | [\hat{l}_{x/y/z}; \hat{H}] | \psi \rangle + \langle \psi | \frac{\partial \hat{l}_{x/y/z}}{dt} | \psi \rangle$

<STŘEDNÍ HODNOTA

= NEZÁVISÍ EXPLICITNĚ NA ČASE

$$\frac{d\bar{l}_{x/y/z}}{dt} = 0$$

ZZ MHYBNOSTI V KVANTOVÉ FYZICE

KOMUTAČNÍ RELACE PRO SLOŽKY HYBNOSTI

$[\hat{l}_x; \hat{l}_y] = i\hbar \hat{l}_z$; $[\hat{l}_y; \hat{l}_z] = i\hbar \hat{l}_x$; $[\hat{l}_z; \hat{l}_x] = i\hbar \hat{l}_y$

$\hat{\vec{l}}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2$ $\quad [\hat{\vec{l}}^2; \hat{l}_{x/y/z}] = 0 \Rightarrow$ LZE NAJÍT ÚPLNÝ SYSTÉM (SPOLEČNÝ) VLASTNÍCH VEKTORŮ $\hat{l}_1$ A NAPŘÍKLAD l_z

OBECNÝ TVAR RELACÍ NEURČITOSTI

$$(\Delta l_x)^2_{/|\psi\rangle} \cdot (\Delta l_y)^2_{/|\psi\rangle} \geq \frac{1}{4} (\langle \psi | -i [\hat{l}_x; \hat{l}_y] | \psi \rangle)^2$$

POTOM PRO $\Delta l_y \; \Delta l_z \quad \frac{\hbar^2}{4} (\langle \psi | \hat{l}_z | \psi \rangle)^2$

DŮSLEDEK: JE-LI $\langle \psi | l_z | \psi \rangle \neq 0$ NEMŮŽE BÝT $\Delta l_x = 0$ ANI $\Delta l_y = 0$

VLASTNÍ VEKTORY $\hat{\vec{l}}^2$ A $\hat{l}_z$ - SPECIÁLNÍ PŘÍPAD

-OBECNĚJŠÍ PROBLÉM: $\vec{J} = (\hat{J}_x; \hat{J}_y; \hat{J}_z)$

PLATÍ $[\hat{J}_x; \hat{J}_y] = i\hbar \hat{J}_z$

$\Downarrow$

NEKOMUTUJÍ, NEJDE NAJÍT ÚPLNÝ SPOLEČNÝ SYSTÉM VLASTNÍCH VEKTORŮ

- PŘEDBĚŽNĚ

- VLASTNÍ HODNOTY $\hat{\vec{J}}^2 \ldots \hbar^2 j(j+1)$ KDE $j \geq 0$

- VLASTNÍ HODNOTY $\hat{\vec{J}}^{2}_{z}$ … $\hbar m$ m - LIBOVOLNÉ

$[\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_z] = 0 \Rightarrow$ MŮŽEME NAJÍT ÚPLNÝ SPOLEČNÝ SYSTÉM VLASTNÍCH VEKTORŮ

VLASTNÍM VEKTOREM: $|jm\alpha\rangle$ DALŠÍ INDEX

$$\hat{\vec{J}}^2 |jm\alpha\rangle = \hbar^2 j(j+1)(jm\alpha)$$

$$\hat{J}_z|jm\alpha\rangle = \hbar m|jm\alpha\rangle$$

CHCEME URČIT j, m VZTAHY

- UKÁŽEME, ŽE $-j \le m \le j$

DEF $\hat{j}_+, \hat{j}_-$: $\hat{J}_+ = \hat{J}_x + i\hat{J}_y$

$\hat{J}_- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y$

NECHŤ $|jm\alpha\rangle$ JE SPOLEČNÝ VLASTNÍ VEKTOR $\vec{j}^2$ A $\hat{J}_z$

DEF $|u\rangle = \hat{J}_+|jm\alpha\rangle$ $|v\rangle = \hat{J}_-|jm\alpha\rangle$

PLATÍ $\langle u|u\rangle \ge 0$ $\langle v|v\rangle \ge 0$

$$\langle u|u\rangle = \langle jm\alpha|(\hat{J}_+)^+\hat{J}_+|jm\alpha\rangle$$

$$\hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + i(\hat{J}_x\hat{J}_y - \hat{J}_y\hat{J}_x) = \hat{\vec{J}}^2 - \hat{J}_z^2 + i[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = \hat{\vec{J}}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar\hat{J}_z$$

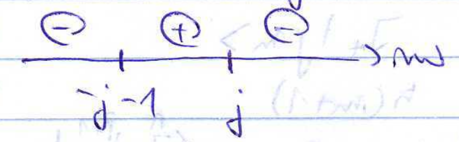
- BEZ ^ A α

$$\langle jm|\hat{J}_x - iJ_y|(\hat{J}_x + iJ_y)|jm\rangle =$$

$$= \langle jm|\hat{\vec{J}}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar\hat{J}_z|jm\rangle = \langle jm|\hbar^2 j(j+1) - \hbar^2 m^2 -$$

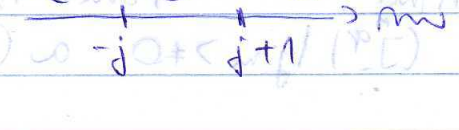
$$- \hbar^2 m|jm\rangle = \hbar^2[j(j+1) - m(m+1)] \ge 0$$

$$j(j+1) - m(m-1) = j^2 - m^2 + j - m = (j-m)(j-m+1)$$



PODOBNĚ PRO $\langle v|v\rangle \ge 0$

$$\hbar^2[j(j+1) - m(m-1)] \ge 0$$



PRŮNIK JE $[-j, j]$ $m = j \Rightarrow |u\rangle = 0$

$m = -j \Rightarrow |v\rangle = 0$

$J_+|jm\rangle$ JE PRO $m=j$ VLASTNÍ VEKTOR $\hat{\vec{J}}^2$ S VLASTNÍ HODNOTOU $\hbar^2 j(j+1)$ A VLASTNÍ VEKTOR $\hat{J}_z$ S VLASTNÍ HODNOTOU $\hbar(m+1)$.

DK: $\hat{\vec{J}}^2 J_+|jm\rangle = \hat{J}_+\hat{\vec{J}}^2|jm\rangle = J_+\hbar^2 j(j+1)|jm\rangle =$
$= \hbar^2 j(j+1)\hat{J}_+|jm\rangle$

$[\hat{\vec{J}}^2; \hat{J}_+] = 0$

$\hat{J}_+|jm\rangle$ SKUTEČNĚ VLASTNÍ VEKTOR $\hat{\vec{J}}^2$

$\hat{J}_z J_+|jm\rangle (\hat{J}_+\hat{J}_z + \hbar\hat{J}_+|jm\rangle = \hat{J}_+(\hbar m+\hbar)|jm\rangle =$

$[\hat{J}_z; J_+] = \hbar\hat{J}_+$ $\quad = \hbar(m+1)J_+|jm\rangle$

VLASTNÍ HODNOTA

$\hat{J}_-|jm\rangle$ JE PRO $-j\neq m$ VLASTNÍ VEKTOR $\hat{\vec{J}}^2_+$ VLASTNÍ HODNOTA $\hbar^2 j(j+1)$ A VLASTNÍ VEKTOR $\hat{J}_z$ S VLASTNÍ HODNOTOU $\hbar(m-1)$.

$$\hat{\vec{J}}^2\hat{J}_-|jm\rangle = \hbar^2 j(j+1)\hat{J}_-|jm\rangle$$
$$\hat{J}_z\hat{J}_-|jm\rangle = \hbar(m-1)\hat{J}_-|jm\rangle$$

KONCE ŽEBŘÍČKU A VZTAHY PRO MOŽNÉ VLASTNÍ HODNOTY

NECHŤ $|jm\rangle$ JE SPOLEČNÝ VLASTNÍ VEKTOR $\hat{\vec{J}}^2$ A $\hat{J}_z$

	$\|jm\rangle$	$J_+\|jm\rangle$	$(J_+)^2\|jm\rangle$
J_z	$\hbar\cdot m$	$\hbar(m+1)$	$\hbar(m+2)$

MUSÍ SKONČIT

$\exists\, p\in N_0: (\hat{J}_+^p)|jm\rangle\neq 0$ a $(\hat{J}_+)^{p+1}|jm\rangle = 0 \Rightarrow \underline{p+m=j}$

	$\|jm\rangle$	$J_-\|jm\rangle$	$(J_-)^2\|jm\rangle$
J_z	$\hbar m$	$\hbar(m-1)$	$\hbar(m-2)$

$\exists\, q\in N_0: (\hat{J}_-^q)|jm\rangle\neq 0$ a $(\hat{J}^{q+1})|jm\rangle = 0$ V HILBERTOVĚ PROSTORU

$m-q=j$

43.)

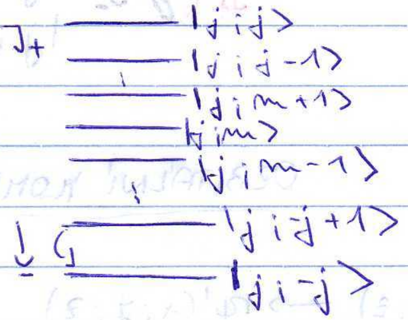
$p+m=j \Rightarrow 2j = p+q \Rightarrow j \in \{0; 1/2; 1; 3/2; \dots\}$

$m-q=-j \quad p; q \in N_0 \quad m \in \{0; \pm 1/2; \pm 1; \pm 3/2; \dots\}$

PRO DANÉ J PLATÍ $m \in \{-j; -j+1; \dots; j\}$

$J_+ = J_x + i J_y$

$J_- = J_x - i J_y$



VLASTNÍ HODNOTY $\hat{\vec{l}}^2$ A $\hat{l}_z$ A VZTAHY MEZI VLASTNÍMI VEKTORY

- PROBLÉM VLASTNÍCH HODNOT A VLASTNÍCH VEKTORŮ OPERÁTORU

$\hat{\vec{J}}^2$ A $\hat{J}_z$ KDE $\hat{\vec{J}} = (\hat{J}_x; \hat{J}_y; \hat{J}_z)$ JE VEKTOROVÝ OPERÁTOR JEHOŽ SLOŽKY SPLŇUJÍ KOMUTAČNÍ RELACE $[\hat{J}_x; \hat{J}_y] = i\hbar \cdot \hat{J}_z$; $[\hat{J}_y; \hat{J}_z] = i\hbar \cdot \hat{J}_x$; $[\hat{J}_z; \hat{J}_x] = i\hbar \hat{J}_y$. NELZE NAJÍT ÚPLNÝ SPOLEČNÝ SYSTÉM VLASTNÍCH VEKTORŮ.

$[\hat{J}^2; J_{z/x/y}] = 0$ – LZE NALÉZT ÚPLNÝ SPOLEČNÝ SYSTÉM VLASTNÍCH VEKTORŮ

$\{\vec{l}^2; l_z\}$ JE SPECIÁLNÍ PŘÍPAD.

ZNAČENÍ: VLASTNÍ HODNOTY $\hat{\vec{J}}^2$ ... $\hbar^2 \cdot j \cdot (j+1)$

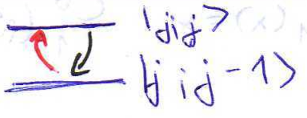
VLASTNÍ HODNOTY J_z ... $m \cdot \hbar$

SPOLEČNÉ VLASTNÍ VEKTORY ---- $|j m (\alpha)\rangle$

VÝSLEDKY: (i) $j \in \{0; 1/2; 1; \dots\}$

(ii) m PRO DANÉ $j \in \{-j; -j+1; \dots j\}$

(iii) VZTAHY MEZI VLASTNÍMI VEKTORY



$J_+ = J_x + i J_y$

$J_- = J_x - i J_y$

$|j;m+1\rangle$

$|j;m\rangle$

$|j;m-1\rangle$

$|j;-j+1\rangle$

$J_+ \quad J_-$

$|j;-j\rangle$

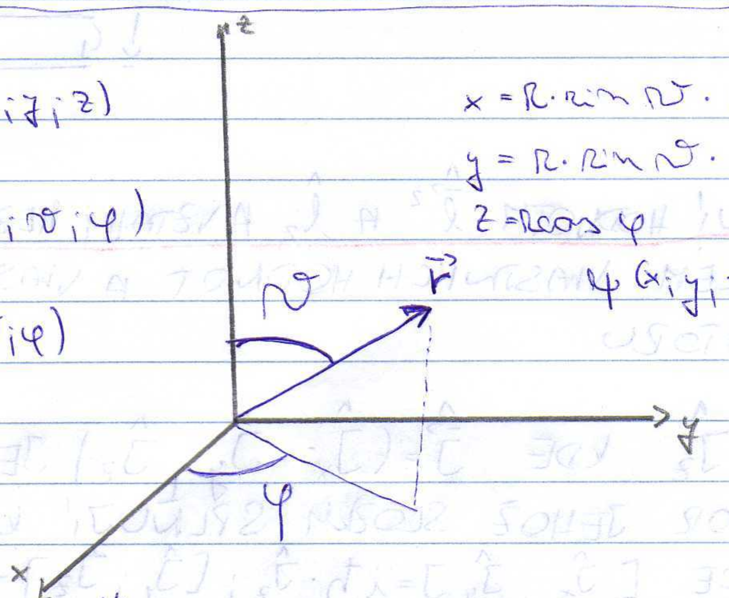
$-j$ JE ZARÁŽKA, OHRANIČENÉ ZDOLA (SPEKTRUM)

ORBITÁLNÍ MOMENT HYBNOSTI VE SFÉRICKÝCH SOUŘADNICÍCH

$\psi(x;y;z) \longrightarrow \psi'(x;y;z)$

$\vec{\psi}(r;\vartheta;\varphi) \to \vec{\psi}'(r;\vartheta;\varphi)$

$l_z(r;\vartheta;\varphi)$



$x = r \cdot \sin\vartheta \cdot \cos\varphi$

$y = r \cdot \sin\vartheta \cdot \sin\varphi$

$z = r\cos\varphi$

$\psi(x;y;z) \Rightarrow \vec{\psi}(r;\vartheta;\varphi)$

$P_l^k(x) = (1-x^2)^{k/2} \frac{d^k}{dx^k} P_l(x)$ PŘIDRUŽENÝ LEGENDRŮV POLYNOM

$P_l(x)$ J „OBYČEJNÝ" LEGENDRŮV POLYNOM.

$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l}\left[(x^2-1)^l\right]$ $\quad l=0;\ m=0;\ P_0(x)=1$

$P^0(x) = 1$

$Y_{lm}(\vartheta;\varphi) \sim P_l^{|m|}(\cos\vartheta)\, e^{im\varphi}$

KULOVÁ FUNKCE

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} |Y_{lm}(\vartheta;\varphi)|^2 \sin\vartheta \, d\vartheta \, d\varphi = 1$$

SOUBOR FUNKCÍ $l = 0;1;2\ldots;\ m \in \{-l;-l+1;\ \ldots\ l\}$ JE

TEDY POTOM ORTONORMÁLNÍ

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} Y^*_{l'm'}(\vartheta;\varphi)\cdot Y_{lm}(\vartheta;\varphi)\sin\vartheta \cdot d\vartheta\, d\varphi = \delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

$l=1;\ m=0$

$P_1(x) = x \quad P_1^0(x) = x \quad Y_1^0(\vartheta;\varphi) \sim P_1^0(\cos\vartheta)\, l^{i0\varphi}$

$\sim \cos\vartheta$

44.) $l = 1 \; ; m = 1$

$$P_1(x) = x$$
$$P_1^1(x) = \sqrt{1-x^2}$$
$$Y_{11}(\vartheta;\varphi) \sim P_1^1(\cos\vartheta)\, e^{i \cdot 1 \cdot \varphi}$$
$$\sim \sqrt{1-\cos^2\vartheta}\, e^{i\varphi}$$
$$\sim \sin\vartheta \cdot e^{i\varphi}$$

ATOM VODÍKU $\boxed{H}$

PRO VODÍK MÁME – DVOU ČÁSTICOVÁ SOUSTAVA

HAMILTONIÁN $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{P^2}{2M} - \frac{e'^2}{|r-R|}$ → PRO $M \to \infty$ ⇒ (JÁDRO)

$e'^2 = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}$

$$\Rightarrow \frac{p^2}{2m} - \frac{e'^2}{|r-R|}$$

V SOUŘADNICOVÉ REPREZENTACI

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_r^2 - \frac{\hbar^2}{2M}\nabla_R^2 - \frac{e'^2}{|r-R|} \to \text{PRO } M \to \infty \Rightarrow$$

$e'^2 = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_r^2 - \frac{e'^2}{|r-R|}$$

VE SFÉRICKÝCH SOUŘADNICÍCH

$$H = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)}_{\text{VÝRAZ PRO KINETICKOU ENERGII RADIÁLNÍHO POHYBU}} + \underbrace{\frac{\hat{l}^2}{2mr^2}}_{\text{ANGULÁRNÍ POHYB}} + V(r)$$

VÝRAZ PRO KINETICKOU ENERGII RADIÁLNÍHO POHYBU
VZDALOVÁNÍ – PŘIBLIŽOVÁNÍ K JÁDRU

VÝRAZ PRO OPERÁTOR KINETICKÉ ENERGIE

$$p^2 = p_r^2 + \frac{l^2}{r^2}$$
$$p_r \to \hat{p}_r = -i\hbar\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} r$$

CO VÍME O ŘEŠENÍ

$\underbrace{[H;\hat{l}]}_{\text{KOMUTUJE}} = 0 \; ; \; \underbrace{[H;\hat{l}^2]}_{\text{—II—}} = 0 \; ; \; \underbrace{[H;\hat{l}_z]}_{\text{—II—}} = 0$

PROTOŽE KOMUTUJÍ

MÁME TEDY SPOLEČNÝ SYSTÉM VLASTNÍCH FUNKCÍ OPERÁTORŮ $H; \hat{l}^2; \hat{l}_z$

KAŽDÁ FUNKCE MÁ POTOM TVAR:

$$\psi(r) = R(r)\, Y_{lm}(\vartheta; \varphi)$$

KDYŽ DOSADÍM DO RADIÁLNÍ SCHRÖDINGEROVY ROVNICE Y_{lm} VYPADNE:

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2} + V(r)\right\} R(r) = E\, R(r)$$

SUBSTITUCE $R(r) = \frac{u(r)}{r}$ TOTO VEDE NA:

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2} + V(r)\right\} u(r) = E\, u(r)$$

VÝHODNÉ KVŮLI TOMU, ŽE NÁM TAM ZŮSTANE JE $\frac{d^2}{dr^2}$

$r \to \rho = \frac{r}{a_0}$; $a_0 = \frac{\hbar^2}{m \cdot e^2}$; $E \to \varepsilon = \frac{E}{R_y}$; $R_y = \frac{m e^4}{2\hbar^2}$

BEZ ROZM. VZDÁLENOST OD JÁDRA

ENERGIE VZTAŽENÁ K RYDBERGOVĚ KONSTANTĚ

$w(\rho) = u(\rho a_0)$

$$\boxed{\frac{d^2 w}{d\rho^2} + \left[\varepsilon + \frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right] w(\rho) = 0}$$

ASYMPTOTICKÉ PŘÍPADY

a) $\rho \to 0$ $\quad \frac{d^2 w}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} w = 0 \to w(\rho) \sim \rho^{l+1}$

b) $\rho \to \infty$ $\quad \frac{d^2 w}{d\rho^2} + \varepsilon w = 0 \to w(\rho) \sim e^{\alpha\rho}$ $\quad \alpha = \sqrt{-\varepsilon}$

BUDEME UVAŽOVAT JEN O VÁZANÝCH STAVECH SYSTÉMU $\varepsilon < 0$:

$$w(\rho) = \rho^{l+1} \cdot e^{-\alpha\rho} \cdot f(\rho)$$

DOSADÍME A DOSTANEME

$$\rho \frac{d^2 f}{d\rho^2} + [2(l+1) - 2\alpha\rho]\frac{df}{d\rho} - 2[\alpha(l+1) - 1] f = 0$$

45.)

HLEDÁME ŘEŠENÍ MOCNINÉ ŘADY

$$f(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k$$

FYZIKÁLNĚ PŘÍPUSTNÉ ŘEŠENÍ MUSÍ ODPOVÍDAT KONEČNÉ ŘADĚ. PO DOSAZENÍ DO ROVNICE DOSTÁVÁME REKURENTNÍ VZTAH.

$$a_{k+1} = \frac{2[\alpha(k+l+1)-1]}{(k+l+2)(k+l+1)-l(l+1)} a_k$$

PRO JISTÉ k MUSÍ PLATIT $a_k \neq 0$ A $a_{k+1} = 0$
POTOM DOSTANEME:

$$\alpha = \frac{1}{k+l+1} \; ; \; \varepsilon = -\frac{1}{(k+l+1)^2} \; ; \; E = -\frac{R_y}{(k+l+1)^2}$$

RYDBERGOVA KONST.

k - JE POŘADOVÉ ČÍSLO ENERGIOVÉ HLADINY PRO DANÉ l, TZV. RADIÁLNÍ KVANTOVÉ ČÍSLO. ENERGIE ZÁVISÍ POUZE NA $n = k+l+1$

HLAVNÍ KVANTOVÉ ČÍSLO

PRO KAŽDÉ k DOSTANEME PŘÍSLUŠNOU FUNKCI $w_{lk}(\rho)$

$$R_{nl}(r) = \frac{w_{nl}\left(\frac{r}{a_0}\right)}{r} = \frac{N}{r}\left(\frac{r}{a_0}\right)^{l+1} \cdot e^{-r/na_0} f_{nl}\left(\frac{r}{a_0}\right) = \frac{1}{\sqrt{a_0^3}} R'_{nl}(r/a_0)$$

N ... NORMOVACÍ KONSTANTA

$$\int_0^{\infty} R_{nl}^2(r) r^2 dr = 1$$

PRO FUNKCI R'_{nl} BEZROZMĚRNÉ PROMĚNNÉ ρ PLATÍ

$$\int_0^{\infty} R'^2_{nl}(\rho)\rho^2 d\rho = 1$$

$R_{nl}(r)$
KVANTOVÉ ČÍSLO l^2.
$n = k+l+1$
POŘADOVÉ ČÍSLO HLADINY PRO DANÉ ENERGIE

$R'_{nl}(\rho) = R_{nl}(\rho a_0)\sqrt{a_0^3}$

$\rho = \frac{r}{a_0}$

$R'_{nl}(\rho) \sim \rho^{l} \cdot e^{-\rho/n} \cdot F(\rho)$

$R'_{nl}(\rho)$ PRO $\rho \to \infty \sim \rho^{n-1} \cdot e^{-\rho/n}$

RADIÁLNÍ DISTRIBUČNÍ FUNKCE (ORBITALY ATOMU VODÍKU)

$$\psi_{nlm}(r;\vartheta;\varphi) = \underbrace{R_{nl}(r)}_{\text{RADIÁLNÍ ČÁST}} \cdot \underbrace{Y_{lm}(\vartheta;\varphi)}_{\text{KULOVÁ FUNKCE}}$$

$D(r) \overset{df}{=}$ HUSTOTA PRAVDĚPODOBNOSTI NALÉZT ELEKTRON VE VZDÁLENOSTI r OD JÁDRA, JE-LI POPSÁN ψ_{nlm}

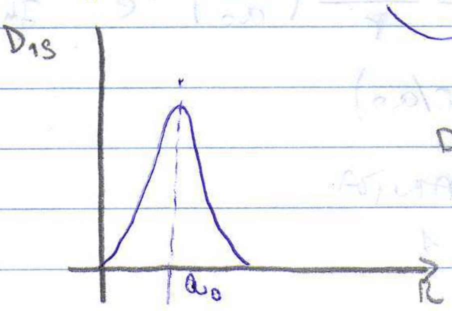
VYJÁDŘEME PRAVDĚPODOBNOST, ŽE SE ELEKTRON NACHÁZÍ V INTERVALU VZDÁLENOSTÍ r A $r+\Delta r$. (KULOVÁ PLOCHA O POLOMĚRU r)

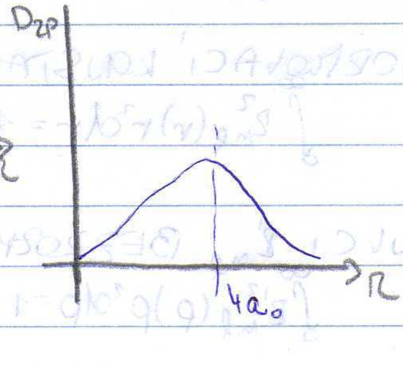
$$P_{nl}(r; r+\Delta r) = \int_{\text{DANÝ OBJEM}} |\psi(\vec{r})|^2 d\vec{r} = \int_r^{r+\Delta r}\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} |R_{nl}|^2 \cdot |Y_{lm}|^2 \cdot r^2 \sin\vartheta \, d\vartheta \, d\varphi \, dr$$

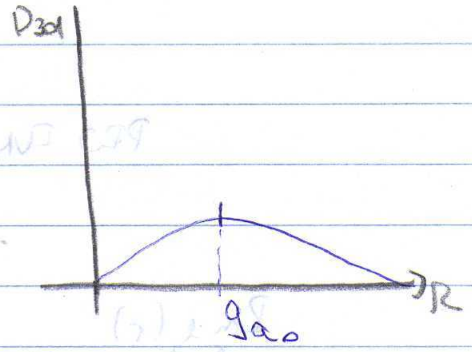
$$= \int_r^{r+\Delta r} |R_{nl}|^2 \cdot r^2 \, dr \underbrace{\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} |Y_{lm}|^2 \cdot \sin\vartheta \, d\vartheta \, d\varphi}_{} \approx |R_{nl}|^2 r^2 \cdot \Delta r$$

PRO $\Delta r \ll r$

(NORMOVÁNÍ KULOVÝCH FUNKCÍ)

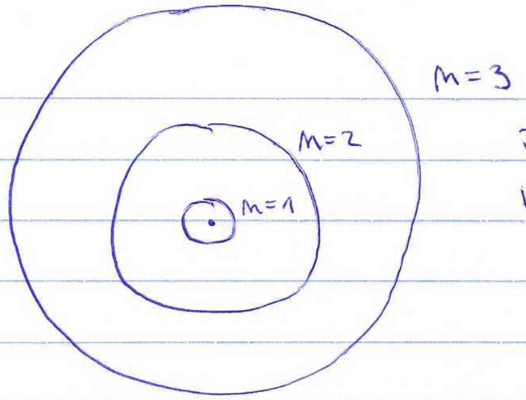






46.

BOHROVY DRÁHY:



POLOMĚRY ODPOVÍDAJÍ MAXIMU HUSTOTĚ PRAVDĚPODOBNOSTI

SPIN

- KVANTOVÉ ČÍSLO LIBOVOLNÉHO MOMENTU HYBNOSTI NABÝVÁ HODNOT Z MNOŽINY $j \in \{0; 1/2; 1; 3/2; 2\}$. VYPLÝVÁ TO Z ALGEBRAICKÝCH ÚVAH.
- CELOČÍSELNÉ HODNOTY $(0; 1; 2; ...)$ Z TÉTO MNOŽINY SE REALIZUJÍ PRO PŘÍPAD ORBITÁLNÍHO MOMENTU HYBNOSTI.
- PRO DANÉ j, $m \in \{-j; -j+1; ... j\}$
- Z EXPERIMENTU JE ZNÁMO, ŽE S ELEKTRONEM JE SPOJENÝ VNITŘNÍ MOMENT HYBNOSTI, JEHOŽ PRŮMĚT DO ZVOLENÉ OSY NABÝVÁ DVOU HODNOT -> PRO TENTO MOMENT HYBNOSTI JE $J = 1/2$ A $m \in \{-1/2; 1/2\}$

ZNAČENÍ $\vec{j} \to \vec{S}$

$j \to s$ "SPIN ELEKTRONU"

$m \to s_z$ Z NĚMČINY (DĚLAT SI Z NĚKOHO BLÁZNY)

- BÁZOVÉ VEKTORY $|1/2; -1/2\rangle$; $|1/2; 1/2\rangle$ LZE ZVOLIT TAK,

KVANTOVÉ ČÍSLO VELIKOSTI PRŮMĚTU

KVANTOVÉ ČÍSLO VELIKOSTI MOMENTU HYBNOSTI

ŽE MÁM OPERÁTORY S_z; S_+; S_- JSOU REPREZENTOVÁNY MATICEMI

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Pr) MÁME VEKTORY

$|1/2; -1/2\rangle \dots \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$

$|1/2; 1/2\rangle \dots \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$

$\underbrace{\hat{S}_z}_{\text{PŮSOBÍCÍ}}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$

$\hat{S}_z\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$ $\qquad \hat{S}_x = \frac{\hat{S}_+ + \hat{S}_-}{2} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix}$

$\hat{S}_+\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = 0$

$\hat{S}_+\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \hbar\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ $\qquad \hat{J}_{+/-} = \hat{J}_x + i\hat{J}_y$

$\hat{S}_-\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = 0$

$\hat{S}_-\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \hbar\cdot\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$ $\qquad \hat{S}_y = -\frac{i}{2}\left(\hat{S}_+ - \hat{S}_-\right) = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\\i & 0\end{pmatrix}$

$\hat{\vec{S}}$ JE REPREZENTOVÁN VEKTOREM MATIC

$$\frac{\hbar}{2}\left(\begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix}; \begin{pmatrix}0 & -i\\i & 0\end{pmatrix}; \begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}\right)$$

PŘIBLIŽNÉ POSTUPY

- V KVANTOVCE TOHO MNOHO NEMŮŽEME ŘEŠIT EXAKTNĚ, JE JEN PÁR VĚCÍ CO DOKÁŽEME VYŘEŠIT.

I.) a) FORMULACE PROBLÉMU

MÁME HAMILTONIÁN

$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}$ $\qquad \hat{H}_0$ I $\hat{W}$ NEZÁVISÍ NA t

$\hat{H}_0$ ... „NEPORUŠENÝ HAMILTONIÁN“ TO JE TAKOVÝ HAMILTONIÁN, JEHOŽ VLASTNÍ HODNOTY A VEKTORY ZNÁME

$\hat{H}_0|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$

W _ „MALÁ PORUCHA“ OPERÁTOR, KTERÝ JE TAM NAVÍC A KOMPLIKUJE PROBLÉM. PŘEDPOKLÁDÁME, ŽE MATICOVÉ PRVKY JSOU MALÉ.

47.)

"MALÉ" – PRO PŘÍPAD DISKRÉTNÍHO A NEDEGENEROVANÉHO SPEKTRA $\hat{H}_0$ TO ZNAMENÁ, ŽE MATICOVÝ PRVEK $|\langle \varphi_m | W | \varphi_n \rangle| \ll |E_m - E_n|$

CÍLEM JE NALÉZT PŘIBLIŽNÉ VÝRAZY PRO VLASTNÍ VEKTORY $\hat{H}$ A VLASTNÍ HODNOTY $\hat{H}$.
JEDNODUCHÝ PŘÍKLAD HARMONICKÝ OSCILÁTOR V ELEKTRICKÉM POLI.

b) OSNOVA POSTUPU

UVAŽUJME O PROBLÉMU S HAMILTONIÁNEM

$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \cdot \hat{W}$

↑ REÁLNÝ PARAMETR

VLASTNÍ HODNOTY $\hat{H}$ – $F_m(\lambda)$

VLASTNÍ VEKTORY $\hat{H}$ – $\varphi_m(\lambda)$

LZE ROZVINOUT V MOCNINNÉ ŘADY:

$$\left.\begin{aligned} F_m(\lambda) &= F_m^0 + \lambda F_m^1 + \lambda^2 \cdot F_m^2 + \dots \\ |\varphi_m(\lambda)\rangle &= |\varphi_m^0\rangle + \lambda |\varphi_m^1\rangle + \lambda^2 |\varphi_m^2\rangle + \dots \end{aligned}\right\} \text{POSADÍME DO SCHRÖDINGEROVY ROVNICE}$$

$\hat{H}(\lambda) |\varphi_m(\lambda)\rangle F_m(\lambda) |\varphi_m(\lambda)\rangle$

POROVNÁNÍM KOEFICIENTŮ U STEJNÝCH MOCNIN LAMBDA λ NA LEVO I NA PRAVO DOSTANEME VÝRAZY PRO F_m^0; F_m^1; F_m^2 ... ; $|\varphi_m\rangle$; $|\varphi_m^1\rangle$; $|\varphi_m^2\rangle$
TYTO VÝRAZY POTÉ DOSADÍME DO ROZVOJŮ (VÝŠE), POLOŽÍME $\lambda = 1$ A MÁME VÝSLEDEK. TOTO POROVNÁNÍ ~~UMÍME~~ UMÍME ROZUMĚ UDĚLAT JEN PRO NĚKOLIK PRVNÍCH ČLENŮ.

c) VYJÁDŘENÍ ČLENŮ F_m^0 $|\varphi_m^0\rangle$; F_m^1, $|\varphi_m^1\rangle$,
OPĚT PRO DISKRÉTNÍ A NEDEGENEROVANÉ SPEKTRUM $\hat{H}_0$

$$\hat{H}(\lambda)|\varphi_n(\lambda)\rangle = F_n(\lambda)|\varphi_n(\lambda)\rangle$$

$$\Downarrow$$

$$(\hat{H}_0 + \lambda\hat{W})(|\varphi_n^0\rangle + \lambda|\varphi_n^1\rangle + \lambda^2|\varphi_n^2\rangle + \dots) =$$
$$= (F_n^0 + \lambda F_n^1 + \lambda^2 F_n^2 + \dots)(|\varphi_n^0\rangle + \lambda|\varphi_n^1\rangle + \lambda^2|\varphi_n^2\rangle + \dots)$$

POROVNÁNÍ ČLENŮ S λ^0:

$$\hat{H}_0|\varphi_n^0\rangle = F_n^0|\varphi_n^0\rangle$$

$$|\varphi_n^0\rangle = |\psi_n\rangle \quad ; \quad F_n^0 = E_n$$

POTOM DOSTANEME SCHRODINGEROVU ROVNICI PRO NEPORUŠENÝ PROBLÉM.

POROVNÁNÍ ČLENŮ S λ^2

$$\hat{H}_0|\varphi_n^1\rangle + \hat{W}|\varphi_n^0\rangle = F_n^0|\varphi_n^1\rangle + F_n^1|\varphi_n^0\rangle$$

$$|\varphi_n^0\rangle = |\psi_n\rangle \qquad F_n^0 = E_n$$

$$\hat{H}_0|\varphi_n^1\rangle + \hat{W}|\psi_n\rangle = E_n|\varphi_n^1\rangle + F_n^1|\psi_n\rangle$$

ROVNICI VYNÁSOBÍME Z LEVA $\langle\psi_n|$ TO NÁS DOVEDE K VÝRAZU $|\varphi_n^1\rangle$.

$$\cancel{\langle\psi_n|\hat{H}_0|\varphi_n^1\rangle} + \langle\psi_n|\hat{W}|\psi_n\rangle = \cancel{E_n\langle\psi_n|\varphi_n^1\rangle} + F_n^1\langle\psi_n|\psi_n\rangle$$

$$F_n^1 = \langle\psi_n|\hat{W}|\psi_n\rangle$$

$$E_n \Rightarrow F_n \approx E_n + \langle\psi_n|\hat{W}|\psi_n\rangle$$

PŘÍSPĚVEK DO F_n (OPRAVA PRVNÍHO ŘÁDU)

NYNÍ ROVNICI VYNÁSOBÍM $\langle\psi_m|$, KDE $m \neq n$ (TO PŮVODNÍ)

$$\langle\psi_m|\hat{H}_0|\varphi_n^1\rangle + \langle\psi_m|\hat{W}|\psi_n\rangle = E_n\langle\psi_m|\varphi_n^1\rangle +$$
$$+ F_n^1\underbrace{\langle\psi_m|\psi_n\rangle}_{0}$$

STANE SE Z NEJ E_m

$$\langle\psi_m|\hat{W}|\psi_n\rangle = E_n\langle\psi_m|\varphi_n^1\rangle - E_m\langle\psi_m|\varphi_n^1\rangle$$

48.)

$$\langle \psi_m | \varphi_n^1 \rangle = \frac{\langle \psi_m | \hat{W} | \psi_n \rangle}{E_n - E_m}$$

UKÁŽEME SI NYNÍ ROZVOJ $|\varphi_n^1\rangle$ V BÁZI $\{|\psi_m\rangle\}$

$$|\varphi_n^1\rangle = \sum_m c_{m}|\psi_m\rangle$$

$$c_m = \langle \psi_m | \varphi_n^1 \rangle^2$$

$$|\varphi_n^1\rangle = c_n^1 |\psi_n\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m | \hat{W} | \psi_n \rangle}{E_n - E_m} |\psi_m\rangle$$

$|\varphi_n\rangle = |\varphi_n^0\rangle + \lambda |\varphi_n^1\rangle + \dots$ JE NORMOVANÉ PRO VŠECHNA λ JEN POKUD $\underline{\underline{c_n^1 = 0}}$

$$|\varphi_n\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m | \hat{W} | \psi_n \rangle}{E_n - E_m} |\psi_m\rangle$$

NYNÍ DOSADÍME DO ROZVOJE A POLOŽÍME $\lambda = 1$

$$F_n \cong E_n + \underbrace{\langle \psi_n | \hat{W} | \psi_n \rangle}_{\text{POSUN ENERGIE DANÝ PORUCHOU}}$$

$$|\varphi_n\rangle \approx |\psi_n\rangle + \underbrace{\sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m | \hat{W} | \psi_n \rangle}{E_n - E_m} |\psi_m\rangle}_{\text{ZMĚNA VLNOVÉ FUNKCE DANÁ PORUCHOU}}$$

II.) ČASOVÁ

a) FORMULACE

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}$$

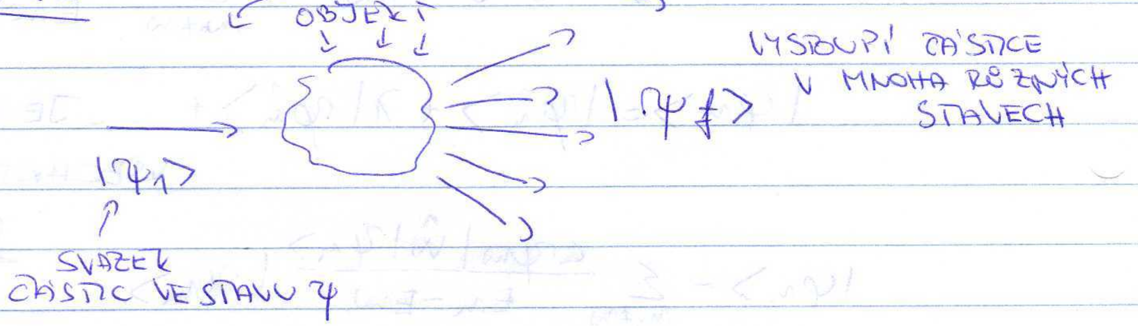
$\hat{H}_0$ ... NEDOŘEŠENÝ HAMILTONIÁN, NEZÁVISÍ NA ČASE

$\hat{W}$ ... PORUCHA, OBECNĚ ZÁVISLÁ NA ČASE

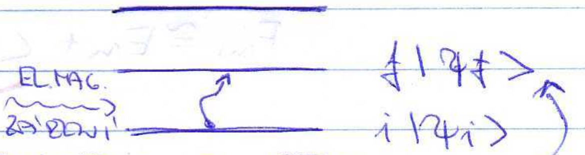
CÍL JE JINÝ NEŽ U PŘEDCHOZÍHO POSTUPU. TYPICKÝ CÍL JE DÁN STAV SYSTÉMU V ČASE t_1: $|\psi_1\rangle$ A MÁME URČIT PRAVDĚPODOBNOST VÝSKYTU SYSTÉMU VE STAVU $|\psi_f\rangle$ V ČASE $t_2 > t_1$.

PŘÍKLADY PROBLÉMŮ – CÍLEM ÚLOH JE URČIT S JAKOU PRAVDĚPODOBNOSTÍ TO PŘIJDE ODSUD SEM

ROZPTYL



INTERAKCE S ELEKTROMAGNETICKÝM ZÁŘENÍM



S JAKOU PRAVDĚPODOBNOSTÍ PŘEVEDE EL. MAG. ZÁŘENÍ ČÁSTICI DO STAVU

b) OBECNÁ ČÁST POSTUPU

$$i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = (\hat{H}_0 + \hat{W})|\psi\rangle$$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)\,|\psi_n(t)\rangle \quad \text{KDE } |\psi_n(t)\rangle = |\psi_n\rangle \cdot e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}$$

AMPLITUDA PRAVDĚPODOBNOSTI NALÉZT SYSTÉM VE STAVU $|\psi_n\rangle$ VE STAVU t.

$$i\hbar \underbrace{\frac{d}{dt}}_{\text{VLEZU DOVNITŘ}} \left(\sum_n c_n(t)|\psi_n(t)\rangle\right) = \underbrace{(\hat{H}_0 + \hat{W})}_{\text{TÉŽ VLEZU DOVNITŘ}} \cdot \sum_n c_n(t)|\psi_n(t)\rangle$$

49.)

$$\sum_n \left[\left(i\hbar \frac{dc_n}{dt}\right) \cdot |\psi_n\rangle + \cancel{i\hbar \frac{d\psi_n}{dt}} \right] =$$

$$= \sum_n \left[\cancel{c_n |\hat{H}_0|\psi_n\rangle} + c_n \cdot \hat{W} |\psi_n\rangle \right]$$

MŮŽU VYKRÁTIT DÍKY SCHRÖDINGEROVĚ ROVNICI

$$\langle \psi_m(t)| \cdot / \quad i\hbar \sum_n \frac{dc_n}{dt} \overset{|\psi_n\rangle}{\vee} = \sum_n c_n \hat{W} |\psi_n(t)\rangle$$

$$i\hbar \sum_n \underbrace{\langle \psi_m(t)|\psi_n(t)\rangle}_{\delta_{mn}} \frac{dc_m}{dt} = \sum_n c_n \langle \psi_m(t)|\hat{W}|\psi_n(t)\rangle$$

$$\left(\langle \psi_m(t)| \approx \langle \psi_m| \cdot e^{i\frac{E_m}{\hbar} \cdot t}\right)$$

$$\langle \psi_m| e^{i\frac{E_m \cdot t}{\hbar}} \qquad |\psi_n\rangle \cdot e^{-i\frac{E_n \cdot t}{\hbar}}$$

$$\underbrace{\langle \psi_m|W|\psi_n\rangle}_{W_{mn}} \cdot e^{i\overbrace{\frac{E_m - E_n}{\hbar}}^{\omega_{mn}} t}$$

$$\boxed{i\hbar \frac{dc_m}{dt} = \sum_n c_n W_{mn} \cdot e^{i\omega_{mn} \cdot t}}$$

C) VÝPOČET PRAVDĚPODOBNOSTI PŘECHODU $i \to f$ POMOCÍ ROVNICE:

$$i\hbar \frac{dc_m}{dt} = \sum_n c_n W_{mn} \cdot e^{i\omega_{mn} \cdot t}$$

ŘEKNĚME, ŽE V ČASE $t = t_1$ MÁME $c_i = 1$; $c_k = 0$ PRO $k \neq i$ TO JE SYSTÉM VE STAVU $|\psi_i\rangle$

CHCEME URČIT PŘIBLIŽNĚ JAKÉ JE $c_f(t_2)$ $t_2 > t_1$

$$i\hbar \frac{dc_f}{dt} = \sum_n c_n(t)\, W_{fn} \cdot e^{i\omega_{fn} \cdot t}$$

BEZ PORUCHY BY BYLO $c_n(t) = \delta_{ni}$ SYSTÉM BY SETRVAL VE STAVU $|\psi_i\rangle$.

PRO SLABOU PORUCHU A KRÁTKÝ ČASOVÝ INTERVAL $t_2 - t_1$ BUDE PŘIBLIŽNĚ $c_n(t) \approx \delta_{ni}$

TENTO VZTAH NYNÍ DOSADÍME DO PŘEDCHOZÍ ROVNICE

$$i\hbar \frac{dc_f}{dt} = W_{fi} \cdot e^{i\omega_{fi} \cdot t}$$

$$c_f(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} W_{fi}\, e^{i\omega_{fi} t}\, dt + c_f(t_1)$$

$c_f(t_1)$: $= 1$ PRO $f = i$, $= 0$ PRO $f \neq i$

$$c_{fi}(t_2) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} W_{fi} \cdot e^{i \cdot \omega_{fi} \cdot t}\, dt \quad \text{PRO } f \neq i$$

POČÁTEČNÍ STAV

$$c_{ii}(t_2) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} W_{ii}\, dt$$

TOTO JE AMPLITUDA PRAVDĚPODOBNOSTI NALÉZT SYSTÉM VE STAVU f ZA PŘEDPOKLADU, ŽE BYL V ČASE t_1 VE STAVU i.

$$P_{fi}(t_2) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{t_1}^{t_2} W_{fi} \cdot e^{i\omega_{fi} \cdot t}\, dt \right|^2$$

PRO W NEZÁVISLÉ NA ČASE JE:

$$P_{fi}(t) = |W_{fi}|^2 \cdot \frac{4 \cdot \sin^2\left(\frac{\omega_{fi} \cdot t}{2}\right)^2}{\hbar^2 \cdot \omega_{fi}^2} =$$

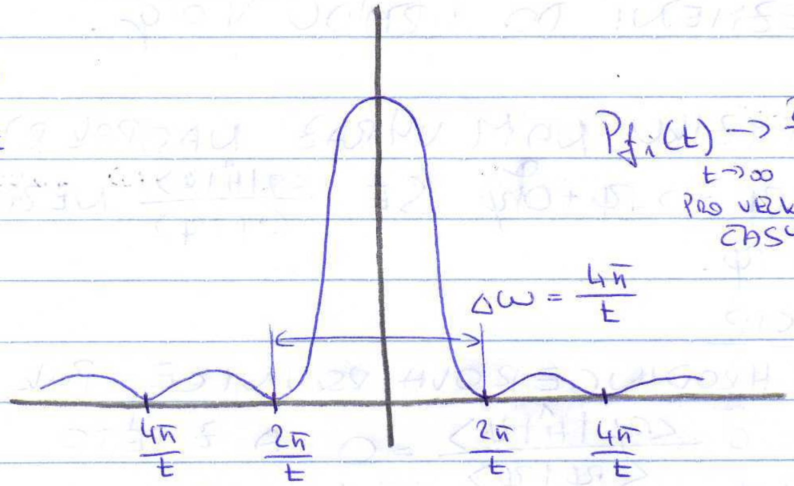
$$= |W_{fi}|^2 \cdot \frac{4}{\hbar^2} \cdot \frac{t^2}{4} \cdot \frac{\sin^2\left(\frac{\omega_{fi} \cdot t}{2}\right)^2}{\left(\frac{\omega_{fi} \cdot t}{2}\right)^2}$$

50.

PRŮBĚH FUNKCE $P_{fi}(t)$

$t_1 = 0$

$t_2 = t$



$$P_{fi}(t) \xrightarrow[t\to\infty]{} \frac{2\pi}{\hbar} \cdot t \, |W_{fi}|^2 \cdot \delta(E_f - E_i)$$

PRO VELKÉ ČASY

$$\frac{dP_{fi}(t)}{dt} \xrightarrow[t\to\infty]{} \frac{2\pi}{\hbar} |W_{fi}|^2 \cdot \delta(E_f - E_i)$$

ZMĚNA PRAVDĚPODOBNOSTI OBSAZENOSTI STAVU f ZA JEDNOTKU ČASU.

„FERMIHO ZLATÉ PRAVIDLO"

VARIAČNÍ PRINCIP A VARIAČNÍ METODA

V KLASICKÉ FYZICE, VARIACE FUNKCIONÁLU FUNKCE

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L(q; \dot{q}; t) = 0$$

DÁVÁ LAGRANGEOVY ROVNICE

V KVANTOVÉ FYZICE, VARIACE FUNKCIONÁLU FUNKCE

$$\delta \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = 0$$

DÁVÁ SCHRÖDINGEROVU ROVNICI PRO STACIONÁRNÍ STAV

PRO KLASICKOU FYZIKU NÁM VÝŠE UVEDENÝ

VÝRAZ ŘÍKÁ, ŽE PŘI ZMĚNĚ $q(t) \to q(t) + \delta q(t)$ SE INTEGRÁL NEZMĚNÍ DO 1. ŘÁDU V δq.

PRO KVANTOVOU FYZIKU NÁM VÝRAZ NAOPAK ŘÍKÁ, ŽE PŘI ZMĚNĚ $|\psi\rangle \to |\psi\rangle + \delta|\psi\rangle$ SE $\frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$ NEZMĚNÍ DO 1. ŘÁDU V $\delta\psi$.

a) VARIAČNÍ PRINCIP

KDYŽ PLATÍ SCHRÖDINGEROVA ROVNICE PAK PLATÍ I TOTO $\delta \frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = 0$ A Z TÉTO PODMÍNKY VYPLÝVÁ I STACIONÁRNÍ SCHRÖDINGEROVA ROVNICE b) VARIAČNÍ PRINCIP

c) VARIAČNÍ PRINCIP

NECHŤ $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ LIBOVOLNÝ, $|\psi_0\rangle$ – JE VEKTOR POPISUJÍCÍ ZÁKLADNÍ STAV, E_0 ENERGIE ZÁKLADNÍHO STAVU.

PAK $E[|\psi\rangle] = \frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \geq E_0$ ~~PLATÍ~~ ROVNÁ SE PLATÍ PRO PŘÍPAD KDY $|\psi\rangle = |\psi_0\rangle$

DŮKAZ:

$$E[|\psi\rangle] - E_0 = \frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} - \frac{\langle\psi|E_0|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{\langle\psi|H - E_0|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} =$$

PŘEDPOKLAD $\hat{H} = \sum_m |\psi_m\rangle\langle\psi_m|$

$$= \frac{\langle\psi|\sum_m E_m|\psi_m\rangle\langle\psi_m| - \underbrace{\sum|\psi_m\rangle\langle\psi_m|}_{1} E_0|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} =$$

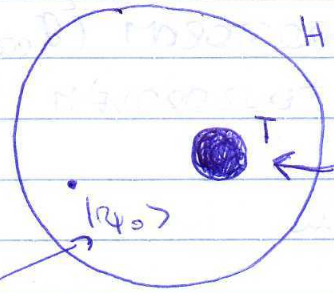
$$= \frac{\langle\psi|\sum_m|\psi_m\rangle\langle\psi_m|(E_m - E_0)|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} =$$

$$= \frac{\sum_m |\langle\psi|\psi_m\rangle|^2 \cdot (E_m - E_0)}{\langle\psi|\psi\rangle} \geq \text{ PONEVADŽ}$$

$-E_m \geq E_0$

51.

VARIAČNÍ METODY



H - HILBERTŮV PROSTOR

MNOŽINA STAVOVÝCH VEKTORŮ POD HILBERTOVÝM PROSTOREM

ZÁKLADNÍ STAV

CÍLEM VARIAČNÍ METODY JE NALÉZT NA MNOŽINĚ T NEJLEPŠÍ APROXIMACI VEKTORU $|\psi_0\rangle$.

POKUD JDE O ENERGII JE ψ_0 NEJBLÍŽE TEN VEKTOR Z MNOŽINY T, PRO KTERÝ NASTÁVÁ MINIMUM $E = \frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$

KVANTOVÁ MECHANIKA SOUSTAV IDENTICKÝCH ČÁSTIC

a) POPIS SOUSTAVY ODLIŠNÝCH ČÁSTIC

b) POJEM IDENTICKÉ ČÁSTICE

c) POSTULÁT O SYMETRII A ANTISYMETRII STAVOVÝCH VEKTORŮ, SOUBORŮ IDENTICKÝCH ČÁSTIC

d) KONSTRUKCE STAVOVÝCH VEKTORŮ, PAULIHO PRINCIP

a) ZNAČENÍ

1 ČÁSTICE ... $\mathcal{H}_1$

2 ČÁSTICE ... $\mathcal{H}_2$

n-TÁ ČÁSTICE ... $\mathcal{H}_n$

SOUBOR ČÁSTIC $\{1;2;\dots n\}$ ... $\mathcal{H}_{celkový}$

NECHŤ $|1;\psi_1\rangle \in \mathcal{H}_1$; $|2;\psi_2\rangle \in \mathcal{H}_2$ ... $|n;\psi_n\rangle \in \mathcal{H}_n$

PAK VEKTOR $|1;\psi_1\rangle \otimes |2;\psi_2\rangle \otimes \dots |n;\psi_n\rangle$

TAKOVÝ VEKTOR, ŽE PRVNÍ ČÁSTICE JE POPSÁNA

$|1;\psi_1\rangle$

$\vdots$

$|n;\psi_n\rangle$

JE-LI $\{|1;\psi_{1i_1}\rangle\}$ BÁZE NA $\mathcal{H}_1$ AŽ $\{|n;\psi_{ni_n}\rangle\}$ BÁZE NA $\mathcal{H}_n$, PAK $\{|1;\psi_{1i_1}\rangle \otimes |2;\psi_{2i_2}\rangle \otimes$ AŽ $|n;\psi_{ni_n}\rangle\}$ JE BÁZE NAD CELKOVÝM $\mathcal{H}$ PROSTOREM ($\mathcal{H}_{\text{celkový}}$).

O $\mathcal{H}_{\text{celkový}}$ MLUVÍME JAKO O TENZOROVÉM SOUČINU PROSTORŮ $\mathcal{H}_1 \dots \mathcal{H}_n$

$$\mathcal{H}_{\text{celkový}} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots \mathcal{H}_n$$

VEKTORY Z $\mathcal{H}_{\text{celkový}}$ V SOUŘADNICOVÉ REPREZENTACI

BÁZE $\{\underbrace{|1;r_1\rangle}_{\text{první částice v místě } r_1} \otimes \underbrace{|2;r_2\rangle}_{\text{druhá částice v místě } r_2} \otimes \dots |n;r_n\rangle\}$

V LIBOVOLNÉM $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_{\text{celkový}}$ LZE ZAPSAT

JAKO $|\psi\rangle = \int \psi(\vec{r}_1;\vec{r}_2;\dots\vec{r}_n)(\vec{r}_1;\vec{r}_2;\dots\vec{r}_n)\,d\vec{r}_1\,d\vec{r}_2\dots$

TOTO JE SOUŘADNICOVÁ REPREZENTACE .. VLNOVÁ FUNKCE MNOHA ARGUMENTŮ.

Př) ATOM VODÍKU, HMOTNOST JÁDRA M

ATOM JE POPSÁN FUNKCÍ $\psi(\vec{r}_{el};\vec{R}_{\text{jádra}})$

$\psi(\vec{r};\vec{R})$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2_{\vec{r}} \frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2_{\vec{R}} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0|\vec{r}-\vec{R}|}$$

$$\hat{H}\psi(\vec{r};\vec{R}) = E\psi(\vec{r};\vec{R})$$

$|\psi(\vec{r};\vec{R})|^2$ .. HUSTOTA PRAVDĚPODOBNOSTI NALÉZT ELEKTRON V $\vec{r}$ A JÁDRO V $\vec{R}$

b) IDENTICKÉ ČÁSTICE

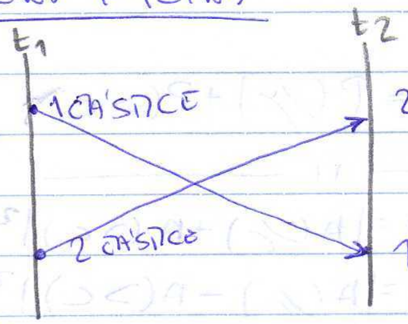
O ČÁSTICÍCH ŘEKNEME, ŽE JSOU TOTOŽNÉ, JESTLIŽE MAJÍ STEJNÉ HODNOTY VŠECH VNITŘNÍCH PARAMETRŮ (M; q; S)

52.)

PŘ) VŠECHNY ELEKTRONY VE VESMÍRU JSOU TOTOŽNÉ.

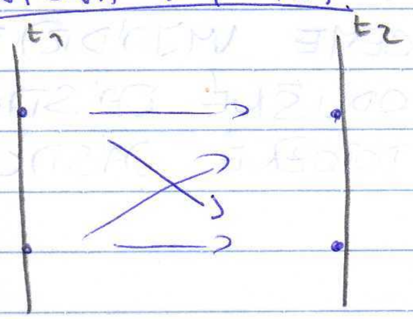
ROZDÍL MEZI KLASICKÝM A KVANTOVÝM PRO SOUSTAVU DVOU TOTOŽNÝCH ČÁSTIC.

KLASICKÁ FYZIKA



BEZE ZTRÁTY IDENTITY
MOHU SLEDOVAT JEJICH POHYB

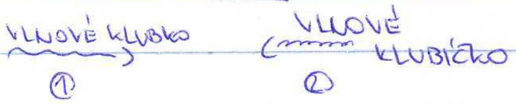
KVANTOVÁ FYZIKA



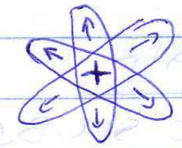
NEDOVEDU ROZLIŠIT
KUDY TO ŠLO

PŘ) ROZPTYL DVOU TOTOŽNÝCH ČÁSTIC

ČAS t_1

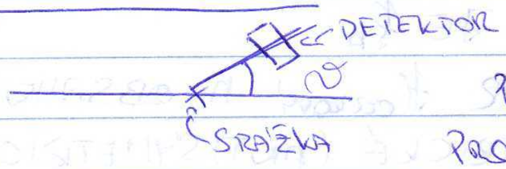


ČAS t_2 - PO SRÁŽCE



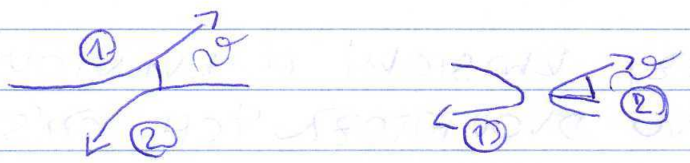
KVANTOVÁ SUPERPOZICE
JEDNA ČÁSTICE NAHORU
DRUHÁ DOLŮ, DALŠÍ DO BOKU ...
NEMOHU ČÁSTICE OČÍSLOVAT

JAK TO STUDOVAT? (TU SRÁŽKU)



PRO KAŽDOU POLOHU DETEKTORU PROVÁDÍME OPAKOVANÉ MĚŘENÍ, POČÍTÁME ČÁSTICE, KTERÉ DOPADNOU DO DETEKTORU V ZÁVISLOSTI NA ÚHLU ϑ A OPAKUJI EXPOZICI.
DETEKTOR NEROZLIŠUJE ČÁSTICE 1 A 2.

Z HLEDISKA ODLIŠNÝCH ČÁSTIC, MÁM DVĚ VARIANTY.



JAKÁ PAK BUDE PRAVDEPODOBNOST?

CHCEME VYJÁDŘIT $P(\vartheta)$

PRO ODLIŠNÉ ČÁSTICE: $P(\vartheta) = P(//) + P(><)$

PRO TOTOŽNÉ ČÁSTICE: ~~XXX~~ —— " ——

~~XXX~~ $P(\vartheta) = |A(//) + A(><)|^2$

$P(\vartheta) = |\underbrace{A}_{\text{AMPLITUDA}}(//) - A(><)|^2$

<u>EXPERIMENT</u>

$P(\vartheta) = |A(//) + A(><)|^2$ – PRO BOSONY

$P(\vartheta) = |A(//) - A(><)|^2$ – PRO FERMIONY

<u>POSTULÁT:</u>

PRO SOUBOR N TOTOŽNÝCH ČÁSTIC NASTÁVÁ JEDNA Z VARIANT

a) HILBERTŮV PROSTOR JE $\mathcal{H}_S$

b) HILBERTŮV PROSTOR JE $\mathcal{H}_A$

$\mathcal{H}_S$ A $\mathcal{H}_A$ JE PODPROSTOR $\mathcal{H}_{\text{CELKOVÝ}}$ A OBSAHUJE STAVOVÉ VEKTORY SYMETRICKÉ (ANTISYMETRICKÉ) VŮČI ~~HLADINE~~ ZÁMĚNĚ LIBOVOLNÝCH DVOU ČÁSTIC.

ČÁSTICE PRO KTERÉ SYMETRICKÉ ... BOZONY (S)

ČÁSTICE PRO KTERÉ ANTISYMETRICKÉ ... FERMIONY

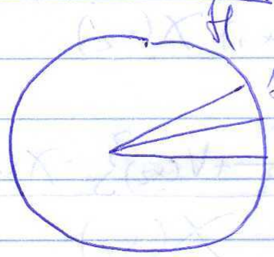
53.)

DEFINICE (SYMETRIE A ANTISYMETRIE)
NA ÚROVNI VLNOVÝCH FUNKCÍ

ŘEKNEME, ŽE ψ JE SYMETRICKÁ (NEBO ANTISYMETRICKÁ) VŮČI ZÁMĚNĚ i-TÉ A j-TÉ ČÁSTICE, POKUD $\psi(\vec{r}_1; \vec{r}_2; \vec{r}_{i-1}; \vec{r}_j; \vec{r}_{i+1}; \ldots \vec{r}_{j-1}; \vec{r}_i; \vec{r}_{j+1} \ldots) = \underset{(-)}{+} \psi(\vec{r}_1; \vec{r}_2; \ldots \vec{r}_n)$

POKUD PROHODÍME i A j U SYMETRICKÉ, NIC SE NESTANE, POKUD TO UDĚLÁME U ANTISYMETRICKÉ ZMĚNÍ SE ZNAMÉNKO.

POSTULÁT SCHEMATICKY



$\mathcal{H}$

$\mathcal{H}_S$ - SYMETRICKÝ - PODPROSTOR PRO STAVOVÉ VEKTORY BOZONŮ

$\mathcal{H}_A$ - ANTISYMETRICKÝ - PODPROSTOR STAVOVÝCH VEKTORŮ ~~PRO~~ FERMIONY

PRAVIDLO - CELOČÍSELNÝ SPIN - BOZONY
POLOČÍSELNÝ SPIN - FERMIONY

^3He - FERMION, ^4He - BOZON

NIKDY SE NEPOTKAJÍ V HILBERTOVĚ PROSTORU

SOUSTAVY NE~~IDENTICKÝCH~~ INTERAGUJÍCÍCH ČÁSTIC

PRO ZAČÁTEK DVĚ ČÁSTICE:

$$\hat{H} = \underbrace{\hat{h}(1)}_{\text{PŮSOBÍCÍ NA PRVNÍ ČÁSTICI}} + \underbrace{\hat{h}(2)}_{\text{PŮSOBÍCÍ NA DRUHOU ČÁSTICI}}$$

PRO KONKRÉTNOST V 1D:

$$\hat{h} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$$

NEKONEČNĚ HLUBOKÁ POTENCIÁLOVÁ JÁMA, MÁME VLNOVÉ FUNKCE $\psi_n(x)$ A ENERGIE E_n

$$\hat{H}|_x = -\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + V(x_1) - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + V(x_2)$$

ŘEŠENÍ PRO ODLIŠNÉ ČÁSTICE, ALE SE STEJNOU HYBNOSTÍ

$$\hat{H}\psi(x_1;x_2)=E\psi(x_1;x_2)$$

ŘEŠENÍ BUDEME HLEDAT VE TVARU $\varphi(x_1)\,,\,\chi(x_2)$

DOSADÍME DO PŘEDCHOZÍ ROVNICE

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}+V(x_1)\right\}\varphi(x_1)\cdot\chi(x_2)+$$

$$+\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}+V(x_2)\right\}\cdot\varphi(x_1)\cdot\chi(x_2)=$$

$$=E\varphi(x_1)\chi(x_2) \qquad / \text{PODĚLÍME } \varphi(x_1)\chi(x_2)$$

$$\frac{\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}+V(x_1)\right\}\varphi(x_1)}{\varphi(x_1)}+\frac{\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}+V(x_2)\right\}\cdot\chi(x_2)}{\chi(x_2)}=E$$

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2}{dx_1^2}+V(x_1)\right\}\varphi=E_1\varphi$$

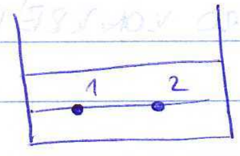
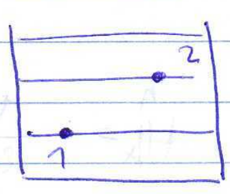
$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2}{dx_2^2}+V(x_2)\right\}\chi=E_2\chi$$

ŘEŠENÍ SCHRÖDINGEROVY ROVNICE PRO ψ TEDY JSOU

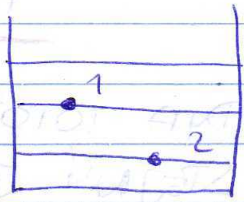
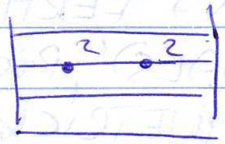
$$\psi_{m_1 m_2}(x_1;x_2)=\psi_{m_1}(x_1)\,\psi_{m_2}(x_2)$$

$$E_{m_1 m_2}=E_{m_1}+E_{m_2}$$

ŘEŠENÍ JE MOŽNÉ ZAPSAT TABULKOU

KVANTOVÁ ČÍSLA m_1 m_2	ENERGIE	VLNOVÉ FUNKCE	SCHEMATICKY
1 1	$2E_1$	$\psi_1(x_1)\psi_1(x_2)$	
1 2	E_1+E_2	$\psi_1(x_1)\psi_2(x_2)$	

54.)

2	1	E_1+E_2	$\psi_2(x_1)\psi_1(x_2)$	
2	2	$2E_2$	$\psi_2(x_1)\psi_2(x_2)$	

PRO BOZONY	PRO FERMIONY
- HLADINA NENÍ DEGENEROVANÁ (NAROZDÍL OD JINÝCH ČÁSTIC)	VLNOVÉ FUNKCE JSOU SYMETRICKÉ
$2E_1$ $\psi_1(x_1)\psi_1(x_2)$	
E_1+E_2 $\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1(x_1)\psi_2(x_2)+\psi_2(x_1)\psi_1(x_2))$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1(x_1)\psi_2(x_2)-\psi_2(x_1)\cdot\psi_1(x_2))$
$2E_1$ $\psi_2(x_1)\psi_2(x_2)$	VLNOVÉ FUNKCE JSOU SYMETRICKÉ

PROVEDU PŘEHOZENÍ $x_2;x_1$

$$\psi(x_2;x_1)=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi(x_2)\psi_2(x_1)+\psi_2(x_2)\psi_1(x_1))=\psi(x_1;x_2)$$

$$\psi(x_2;x_1)=-\psi(x_1;x_2)$$

ZOBECNĚNÍ: PRO SYSTÉM N TOTOŽNÝCH BOZONŮ JE JE DEGENERACE EXCITOVANÝCH STAVŮ DRASTICKY SNÍŽENA VE SROVNÁNÍ S PŘÍPADEM ODLIŠNÝCH ČÁSTIC. VE STATISTICKÝCH ÚVAHÁCH, MÁ ZÁKLADNÍ STAV VÝRAZNĚ VYŠŠÍ VÁHU.

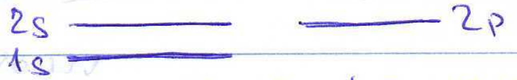
PAULIHO PRINCIP

DVA TOTOŽNÉ FERMIONY, NEMOHOU ZAUJÍMAT STEJNÝ JEDNOČÁSTICOVÝ STAV. NEMŮŽU MÍT DVA FERMIONY NA 1. PŘÍČCE ANI NA ŽÁDNÉ DALŠÍ, PROTOŽE BY VLNOVÁ FUNKCE BYLA SYMETRICKÁ!

VÝSTAVBOVÝ PRINCIP

- HLADINY PRO VODÍK

$l=0$ $\quad$ $l=1$



ATOM S VÍCE ELEKTRONY NA ÚROVNI, TZV. JEDNO-ELEKTRONOVÉ APROXIMACI.

	1s	2s	2p
VODÍK	↑		
HELIUM	↑ ↓		
LITHIUM	↑ ↓	↑	
BERILIUM	↑ ↓	↑ ↓	
BOR	↑ ↓	↑ ↓	↑