V. Částice v 1D

a. ÚSKO = $\hat{x}$ ... $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$ $\qquad H = \frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$

více o hybnosti: $\qquad$ De Broglie $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{h}{p}$ ← x ~~[illegible]~~ v němž fáze = 2π

vl. vektory ... $\psi(x) = N e^{\frac{i}{\hbar}px}$ ... pro $p \in \mathbb{R}$ (jinak není z ~~[illegible]~~ $\mathcal{H}$)

$\equiv \langle x|p\rangle$

normalizace:

$$\langle p|p'\rangle = |N|^2 \int e^{\frac{i}{\hbar}(p'-p)x}dx = 2\pi\hbar\, |N|^2 \delta(p-p') \quad \dots \quad N = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

obé substituci z $\delta(x) = \int e^{2\pi i k x}dk$

relace úplnosti: $I = \int |p\rangle\langle p|\, dp$

→ v x repre.: $\delta(x-x') = \frac{1}{2\pi\hbar}\int dp\, e^{ip(x-x')/\hbar}$

hybnostní reprezentace:

$$\langle p|\psi\rangle = \psi(p) = \int dx\, \langle p|x\rangle\langle x|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dx\, e^{-\frac{i}{\hbar}px}\psi(x)$$

Fourierova transf.

operátor hybnosti $\hat{P}|\psi\rangle = p\,\psi(p)$ ... věta o derivaci F.T.

operátor souřadnice:

$$\langle p|\hat{x}|\psi\rangle = \int dx\, \langle p|x\rangle\, x\, \langle x|\psi\rangle = \int dx\, [i\hbar \tfrac{\partial}{\partial p}\langle p|x\rangle\langle x|\psi\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\psi(p)$$

→ někdy se hodí pro řešení příkladů (částice v konst. poli)

PŘ: částice v homogenním poli:

$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + V(x) \qquad$ kde $V(x) = -Fx$

– stacionární stavy: $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ .. jednodušší v p-repre.

$$H\psi(p) = \frac{p^2}{2m}\psi(p) - i\hbar F\psi'(p) = E\psi(p) \;\to\; \frac{\psi'}{\psi} = \frac{-E}{i\hbar F} + \frac{p^2}{2m}\cdot\frac{1}{i\hbar F}$$

$$\to \psi(p) = A\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{E}{F}p - \frac{p^3}{6mF}\right)\right\}$$

– řešení v x-repre. pomocí F.T.: $\qquad$ jen Re část; Im - lichá $\int = 0$

$$\psi(x) \equiv \langle x|\psi\rangle = \int dp\, \langle x|p\rangle\langle p|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty} dp\, \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left(px + p\frac{E}{F} - \frac{p^3}{6mF}\right)\right\}$$

dá se vyjádřit pomocí spec. fce $Ai(x) \equiv \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \cos\left(\frac{t^3}{3} + xt\right)dt$

po → $\psi(x) = C\cdot Ai\left[\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}}\left(x + \frac{E}{F}\right)\right]$

energetická reprezentace

$H_0 = \frac{p^2}{2m}$ ... $|p\rangle$ jsou vl. fce $\qquad H_0|p\rangle = \frac{p^2}{2m}|p\rangle$

-- pro dané E dvě vl. fce $p = \pm\sqrt{2mE}$ ... $P_E = |p\rangle\langle p| + |-p\rangle\langle -p|$

H_0 není ÚSKO ... dá se přidat parita $\mathcal{P}\psi(x) \equiv \psi(-x)$

snadno ověříte .. $\mathcal{P}^+ = \mathcal{P}$, $\mathcal{P}^2 = I$ → vl. č. $\mathcal{P}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \quad \lambda^2 = 1$

tj $\lambda = \pm 1$ .. parita sudá/lichá

Platí $[U, H_0]=0$ ... společná báze $|E\lambda\rangle = \frac{N}{\sqrt{2}}\left(|p\rangle \pm |-p\rangle\right)$

normalizace: $\langle E\lambda|E'\lambda'\rangle = \delta_{\lambda\lambda'}\frac{N^2}{2}\left(\langle p| \pm \langle -p|\right)\left(|p'\rangle \pm |-p'\rangle\right)$ $\quad p, p' > 0$

$$= \delta_{\lambda\lambda'} N^2 \delta(p-p') = \delta_{\lambda\lambda'} N^2 \frac{p}{m}\delta(E-E')$$

$\delta(p+p')$ nepřispívá

důležitá pozn: substituce v δ-funkci $\boxed{\delta(f(x)) = \sum_{x_0} \frac{\delta(x-x_0)}{|f'(x_0)|}}$

tj $\delta\left(\sqrt{2mE} - \sqrt{2mE'}\right) = \sqrt{\frac{2E}{m}}\,\delta(E-E') = \frac{p}{m}\delta(p-p')$

tj: $N = \sqrt{\frac{m}{p}}$ a tedy $|E+\rangle = \sqrt{\frac{m}{\pi\hbar p}}\cos(px)$

$$|E-\rangle = i\sqrt{\frac{m}{\pi\hbar p}}\sin(px)$$

spektrální rozklad: $I = \sum_{\lambda=\pm1}\int_0^\infty dE\, |E\lambda\rangle\langle E\lambda|$

$$H_0 = \sum_{\lambda=\pm1}\int_0^\infty dE\, E\, |E\lambda\rangle\langle E\lambda|$$

Gaussovské vlnové balíky:

$$\psi(p) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi(\Delta p)^2}}\, e^{-\frac{(p-p_0)^2}{4\Delta p^2}} \xleftrightarrow{\text{F.T.}} \psi(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi(\Delta x)^2}}\, e^{-\left(\frac{x}{2\Delta x}\right)^2} e^{\frac{i}{\hbar}p_0 x}$$

kde $\Delta p\, \Delta x = \frac{\hbar}{2}$ $\quad$ ... $\langle p\rangle_\psi = p_0$; $\langle x\rangle_\psi = x_0$; $\langle (p-p_0)^2\rangle = \Delta p^2$, $\langle (x-x_0)^2\rangle = \Delta x^2$

DK: • Normalizace: G-integrál: $\int e^{-x^2}dx = \sqrt{\pi}$

$$\langle\psi|\psi\rangle = |N|^2 \int e^{-2\left(\frac{p-p_0}{2\Delta p}\right)^2}dp = |N|^2 \int e^{-\left(\frac{p-p_0}{\sqrt{2}\Delta p}\right)^2}\frac{d(p-p_0)}{\sqrt{2}\Delta p}\sqrt{2}\Delta p = |N|^2 \cdot \sqrt{\pi \cdot 2}\Delta p = 1 \checkmark$$

• střední hodnota: $\langle p\rangle_\psi = N^2 \int p\, e^{-\frac{(p-p_0)^2}{2\Delta p^2}}dp = N^2 \underbrace{\int (p-p_0)\, e^{-\frac{(p-p_0)^2}{2\Delta p^2}}dp}_{0} + p_0 \underbrace{\langle\psi|\psi\rangle}_{1} \checkmark$

• variance: $\langle (p-p_0)^2\rangle_\psi = N^2 \int (p-p_0)^2 e^{-\left(\frac{p-p_0}{\sqrt{2}\Delta p}\right)^2}dp = N^2 \cdot \left(\sqrt{2\Delta p^2}\right)^3 \int \underbrace{\left(\frac{p-p_0}{\Delta p\sqrt{2}}\right)^2}_{\xi^2} e^{-\xi^2}d\xi$

přitom $\int \xi^2 e^{-\xi^2}d\xi = -\left.\frac{dI}{d\alpha}\right|_{\alpha=1} = +\frac{1}{2}\sqrt{\pi}$ $\quad$ kde $I(\alpha) = \int e^{-\alpha\xi^2}d\xi = \sqrt{\pi/\alpha}$

tj $\langle (p-p_0)^2\rangle_\psi = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta p^2}} \cdot \left(\sqrt{2\Delta p^2}\right)^3 \cdot \frac{1}{2}\sqrt{\pi} = (\Delta p)^2 \checkmark$

• ověření $\psi(x) = \int \langle x|p\rangle \psi(p)\, dp = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi}}\frac{1}{\sqrt{\Delta p}}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int e^{\frac{i}{\hbar}px} e^{-\frac{(p-p_0)^2}{4\Delta p^2}}dp$

$$= \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi}} \cdot \frac{1}{\sqrt{\Delta p \cdot 2\pi\hbar}}\, e^{\frac{i}{\hbar}p_0 x} \int \exp\Big[-\underbrace{\Big(\Big(\frac{p-p_0}{2\Delta p}\Big)^2 - \frac{i}{\hbar}(p-p_0)x\Big)}_{\left(\frac{p-p_0}{2\Delta p} - \frac{i}{\hbar}x\Delta p\right)^2 + \frac{x^2}{\hbar^2}(\Delta p)^2}\Big]dx$$

$$= \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi}} \cdot \frac{1}{\sqrt{\Delta p \cdot 2\pi\hbar}} \cdot 2\Delta p\sqrt{\pi} \cdot e^{-\frac{x^2}{\hbar^2}\Delta p^2} e^{\frac{i}{\hbar}p_0 x}$$

$$= \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi}} \cdot \sqrt{\frac{2\Delta p}{\hbar}} \cdot e^{\frac{i}{\hbar}p_0 x}\, e^{-\left(\frac{x}{2}\frac{2\Delta p}{\hbar}\right)^2}$$

$= \frac{1}{\Delta x}$ $\checkmark$

částice v potenciálovém poli $H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$

• Lineární harmonický oscilátor

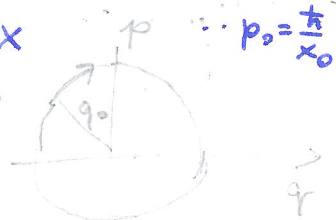
Klasická mechanika $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 = \boxed{\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2}$ $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$; $T = \frac{2\pi}{\omega}$

Hamilton: $\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -kx$, $\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}$ $\Big\} \rightarrow$ $x = x_0 \cos[\omega(t-\tau)]$, $p = -m\omega x_0 \sin[\omega(t-\tau)]$

ještě hezčí ... bezrozměrné veličiny:

(problém: v klasické mech neexistuje typ. délková škála)
(pro LHO → půjčíme si $\hbar$ z QM ... $\boxed{x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}}$; $p_0 = \frac{\hbar}{x_0}$ ωm

$p = \sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}}\,P$ $\quad q = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x = x/x_0$ ... $p_0 = \frac{\hbar}{x_0}$



mapování do $\mathbb{C}$:
$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(q + ip) = a_0 e^{-i\omega t}$

$\rightarrow q = q_0 \cos[\omega(t-\tau)]$
$p = -q_0 \sin[\omega(t-\tau)]$

• kvantová mechanika

$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 \quad \left(\overset{x\text{-repr.}}{=} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 \;\middle|\; \overset{p\text{-repr.}}{=} \frac{1}{2m}p^2 - \frac{\hbar^2 m\omega^2}{2}\frac{d^2}{dx^2} \right)$

opět přejdeme k bezrozm: (OVĚŘTE: $p = -i\frac{\partial}{\partial q}$ $\quad q = i\frac{\partial}{\partial p}$)

$\boxed{H = \frac{\hbar\omega}{2}(p^2 + q^2)}$ $\left[\overset{q\text{-rep.}}{=} \frac{\hbar\omega}{2}\left(-\frac{\partial^2}{\partial q^2} + q^2\right) \;\middle|\; \overset{p\text{-rep.}}{=} \frac{\hbar\omega}{2}\left(p^2 - \frac{\partial^2}{\partial p^2}\right) \right]$

Podobně jako v klasickém případě zavedeme:

$\boxed{\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{q} + i\hat{p})}$ $\longleftrightarrow$ $\hat{q} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a} + \hat{a}^+)$ $\quad$ navíc: $[\hat{q}, \hat{p}] = \frac{1}{\hbar}[\hat{Q}, \hat{P}] = i$

$\rightarrow \hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{q} - i\hat{p})$ $\quad \hat{p} = \frac{1}{i\sqrt{2}}(\hat{a} - \hat{a}^+)$

~~pozn~~: VLASTNÍ VEKTORY H

pozn: připomenout → stacionární stavy; význam pro měření E

Lze řešit přímo $\cancel{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2\right]\psi(x) = E\psi(x) \;\ldots\; q = \frac{x}{x_0}}$

$\rightarrow \cancel{\left[\frac{d^2}{dq^2} + (\lambda - q^2)\right]\psi(q) = 0}$ $\quad \frac{\hbar\omega}{2}\left(-\frac{\partial^2}{\partial q^2} + q^2\right)\psi(q) = E\psi(q)$

+ asymptotika $q \to \infty$ .. $\psi \sim e^{\pm q^2/2}$ + hledání řeš. ve tvaru $p(q)e^{-q^2/2}$
$(q \gg \frac{2E}{\hbar\omega})$

→ UDĚLÁME JINAK

pozn: stejná rovnice vyjde v p-reprezentaci (srovn. klasické řešení) nalezení spektra:

$[a,a^+] = \frac{1}{2}\left(-i[\hat q,\hat p] + i[\hat p,\hat q]\right) = 1$

def: $\hat N = \hat a^+ \hat a$ ... samosdružený operátor, fyz. význam?

$\hat N = \frac{1}{2}\left(\hat q^2 + \hat p^2 + i[\hat q,\hat p]\right) = \frac{\hat H}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}$ tj $\hat H = \hbar\omega\left(\hat N + \frac{1}{2}\right)$

tj $[\hat H,\hat N] = 0$ ... spol. baze .. def $\hat N|n\rangle = n|n\rangle$

potom $\hat H|n\rangle = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)|n\rangle$

spektrum $\hat N$?

důležité komut. relace $[\hat N,\hat a] = \hat a^+[a,a] + [a^+,a]a = -a$

$[N,a^+] = -\left([N,a]\right)^+ = a^+$.

$[N,a] = -a$
$[N,a^+] = a^+$

důsledek: $Na^+|n\rangle = \{a^+N + [N,a^+]\}|n\rangle = (n+1)a^+|n\rangle$

$Na|n\rangle = \{aN + [N,a]\}|n\rangle = (n-1)a|n\rangle$

.. interpretace: a^+, a .. kreační, anihilační operátor

normalizace: $\langle n|a^+a|n\rangle = n \rightarrow \boxed{a|n\rangle = c|n-1\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle}$

pozor → obsahuje fázovou konvenci, smíme volit jen fázi $|0\rangle$
ostatní fixované

podob: $\langle n|aa^+|n\rangle = \langle n|a^+a + [a,a^+]|n\rangle = (n+1)$

$\rightarrow \boxed{a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle}$

s každou vl. hodnotou n spektrum obsahuje $n\pm1, n\pm2, \ldots$

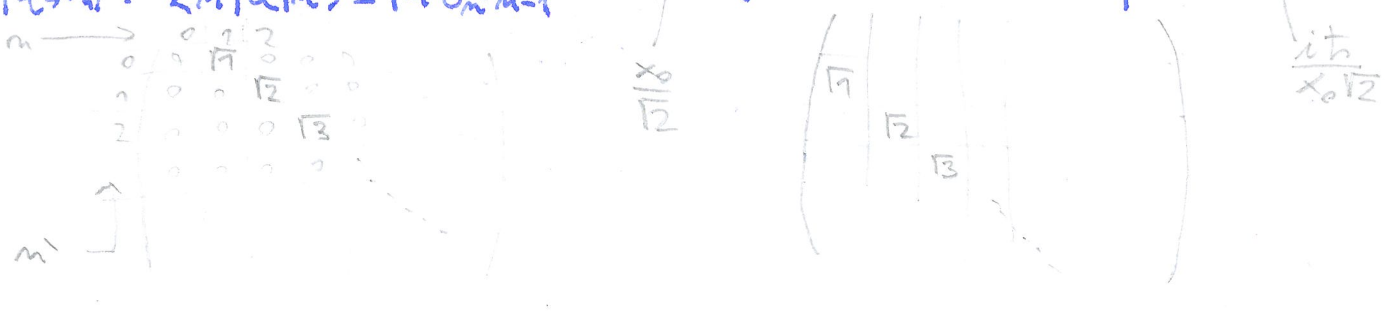
+ N je pozitivně definitní: $\langle\psi|a^+a|\psi\rangle = \|a\psi\|^2 \geq 0$ .. nelze sestupovat nekonečně dolů

→ nejnižší vl. č.: $n=0$: $a|0\rangle = 0$ .. tj $\sigma = \{n=0,1,2,\ldots\}$

- vlastní čísla ↗
- formálně i vlastní vektory: $|n\rangle = \frac{(a^+)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle$

Vlastní vektory v x repr. (nebo p) neznáme, ale umíme počítat maticové elementy operátorů: $\hat x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a+a^+)$ $\hat P = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(a^+-a)$

přitom: $\langle n'|a|n\rangle = \sqrt{n}\,\delta_{n',n-1}$ $\langle n'|a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1}$



$\rightarrow \langle n'|x|n\rangle = \frac{x_0}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & & \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & \\ & \sqrt{2} & \ddots & \ddots \\ & & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \qquad \langle n'|p|n\rangle = \frac{i\hbar}{x_0\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & & \\ -\sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & \\ & -\sqrt{2} & \ddots & \ddots \\ & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$

$\rightarrow$ každý operátor $f(p,q)$ lze vyjádřit pomocí a, a^+

<u>vlnová funkce v x-reprezentaci:</u>

$a|0\rangle = 0 \quad \dots \quad \psi(x) = \langle x|0\rangle \quad \dots \quad \psi(x) = \phi(q = \frac{x}{x_0})$

$\quad \hookrightarrow (q + ip)\phi(q) = (q + \frac{d}{dq})\phi(q) = 0 \quad \rightarrow$ <u>řešení</u> $\phi_0(q) = N e^{-\frac{1}{2}q^2}$

normování

tj. $\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi x_0^2}} e^{-\frac{1}{2}(x/x_0)^2} \quad \leftarrow \quad \int e^{-(x/x_0)^2} dx = x_0\sqrt{\pi} = \langle\phi_0|\phi_0\rangle$

<u>excitované stavy:</u> $\quad a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(q - ip) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{x_0} - \frac{i x_0}{\hbar}(-i\hbar)\frac{d}{dx}\right) = \frac{1}{x_0\sqrt{2}}\left(x - x_0^2\frac{d}{dx}\right)$

$\rightarrow \psi_n(x) \equiv \langle x|n\rangle = \frac{\langle x|(a^+)^n|0\rangle}{\sqrt{n!}} = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\frac{1}{x_0^{n+\frac{1}{2}}}\left[x - x_0^2\frac{d}{dx}\right]^n e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2}$

nebo $\quad \psi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi}\, x_0\, n!\, 2^n}}\; H_n(x/x_0)\, e^{-\frac{1}{2}(x/x_0)^2} \qquad (*)$

kde $\quad H_n(q) \equiv e^{q^2/2}\left[q - \frac{d}{dq}\right]^n e^{-q^2/2} \quad ..$ <u>Hermitův polynom</u>

<u>pozn:</u> • Hermitovy polynomy jako og-poly s vahou $w(x) = e^{-x^2}$

$\rightarrow \int H_n(q) H_{n'}(q)\, w(q)\, dq = 0 \quad \dots$ obecná teorie OG-poly

$\rightarrow$ Gaussova kvadratura

Gram-Schmidt ortogonalizace, nebo:

• ortogonální polynomy obecně splňují rekurentní relace, které získáme násobením $\hat{x}$:

$\rightarrow$ v energetické reprezentaci:

$\langle x|\hat{x}|n\rangle = x\psi_n(x) = \frac{x_0}{\sqrt{2}}\left(\langle x|a|n\rangle + \langle x|a^+|n\rangle\right) = \frac{x_0}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{n}\,\psi_{n-1}(x) + \sqrt{n+1}\,\psi_{n+1}(x)\right)$

$\cdot\sqrt{2n} \qquad / \sqrt{2(n+1)}$

+ dosazení $(*)$: $\qquad \frac{x}{x_0} H_n\left(\frac{x}{x_0}\right) = n H_{n-1}\left(\frac{x}{x_0}\right) + \frac{1}{2} H_{n+1}\left(\frac{x}{x_0}\right)$

– faktor $\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}$

• pozn: velmi obecný systém -- model stavů poblíž minima

$\leftrightarrow$ izomorfní s mnoha částicemi v 1hladinovém systému

-- spektrum $= N\epsilon_0 \quad \dots$ bosony (později)

• pozn: vytvářející funkce: $e^{\xi^2 - (\xi - \eta)^2} \quad \dots \quad H_n(\xi) = \frac{d^n}{d\eta^n} e^{\xi^2 - (\xi-\eta)^2}\Big|_{\eta=0}$

$\longrightarrow \; = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!}\eta^n$

Obecné vlastnosti stacionárních stavů částice v 1D skalárním potenciálu

$$H\psi = E\psi \xrightarrow[x\text{-repr.}]{} \boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + V(x)\psi(x) = E\psi(x)} \quad (*)$$

OBECNĚ: • OBYČEJNÁ LINEÁRNÍ DIF. ROVNICE 2. ř.

→ existují dvě lin. nezávislá řešení $\psi(x) = \phi_1(x), \phi_2(x)$

→ Lineární nezávislost ... def $W(x) = \begin{pmatrix}\phi_1(x) & \phi_2(x)\\ \phi_1'(x) & \phi_2'(x)\end{pmatrix}$

⇔ $\det W \neq 0$ přitom $\frac{d}{dx}|W| = \phi_1\phi_2'' - \phi_2\phi_1'' = 0$ dosazení za ϕ''

→ obecné řešení (*): $\begin{pmatrix}\psi(x)\\ \psi'(x)\end{pmatrix} = W(x)\cdot A$; $A = \begin{pmatrix}A_1\\ A_2\end{pmatrix}$ ... vektor koeficientů

• Nespojitosti potenciálu – napojování řešení:

→ vlnová funkce musí být spojitá – jinak generuje členy $\delta'(x)$ v potenciálu

→ derivace $\psi'(x)$ musí být spojitá – jinak členy $\delta(x)$ v potenciálu

pozn: někdy se toto využívá a konstruují se modelové systémy s δ-funkčním potenciálem $V(x) = \underbrace{v(x)}_{\text{regulární člen}} + \lambda\delta(x-x_0)$

potom: $\psi'(x_0+\varepsilon) - \psi'(x_0-\varepsilon) \equiv \Delta\psi' = \int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon}\psi''\,dx \overset{(*)}{=} \frac{2m}{\hbar^2}\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon}[-E + v(x) + \lambda\delta(x-x_0)]\psi(x)\,dx$

tj $\boxed{\Delta\psi' = \frac{2m}{\hbar}\lambda\psi(x_0)}$

→ v bodech kde je nanejvýš nespojitost typu skoku, tj ψ, ψ' spojité můžeme podmínky napojování psát: $\begin{pmatrix}\psi(x_0)\\ \psi'(x_0)\end{pmatrix} = W_-\cdot A_- = W_+ A_+$

kde $W_\pm$ jsou matice Wronskiánu pod a nad bodem x_0

a $A_\pm = \begin{pmatrix}A_1^\pm\\ A_2^\pm\end{pmatrix}$ jsou koeficienty rozvoje řešení ... pokud známe A_+ můžeme dopočíst A_- a naopak .. 2 rovnice dvě neznámé (regulární .. $\det W \neq 0$)

→ lze redukovat na jednu rovnici ... spojitost $\psi'/\psi = \frac{d}{dx}\ln\psi$

.. Logaritmická derivace ... důležitý jen poměr A_1/A_2 zbytek = normování – nakonec

• z poznámek výše: možno zkonstruovat dvě globální LNZ řešení ... zbytek .. okraj. podmínky

• okrajové podmínky

napišme (*) jako: $\frac{\psi''}{\psi} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E-V(x)) = \left(-\frac{p(x)^2}{\hbar^2}\right)$ ... znaménko

→ terminologie z klas. fyziky: body obratu, klasicky povolená/zakázaná oblast

→ obvyklý případ: $V(|x|\to\infty) \to$ konst ... běžně $=0$ (fázová konvence/volba počátku E)

pro $E<0$: dvě lnz. řešení: $\psi = Ae^{\varkappa x} + Be^{-\varkappa x}$ $\quad \underline{x\to\infty}$ $\quad \varkappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)}$
(konst. pot $V=0$) ... vyhovuje jen $A=0$ $\quad B=0$ pro $-x\to\infty$

pozn: dá se DK silnější tvrzení (Formánkova učebnice):
pokud $\frac{2m}{\hbar^2}(V-E) \geq \varkappa^2$ pro $x \geq a$ pak ∃ řešení $\psi_1 \geq Ae^{\varkappa x}$
a $\psi_2 \leq Be^{-\varkappa x}$
stručně princip důkazu ...

pro $E>0$: dvě lnz. řešení: $\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ $\quad x\to\pm\infty$ $\quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E-V) = p^2/\hbar^2$
→ srovn. s volnou částicí ... částice (→) částice (←)

pozn: opět se dá DK silnější (Formánek):
pokud $\frac{2m}{\hbar^2}(E-V(x)) = k^2 + \Delta(x) \xrightarrow[x\to\infty]{} k^2$ kde $\lim_{x\to\infty} x^d \Delta(x) = 0$
pro nějaké $d>1$
pak ∃ dvě lnz řešení $\sin(kx+\delta)$ a $\cos(kx+\delta)$
→ princip ... fázová rovnice ... konverguje ke konst.

→ shrnutí ... kvantová jáma (potenciálová) (angl. studna = well)

(celé $V>0$ neobvyklý případ nebo $E<0$)

klasická částice → povolené energie $E > V_0 = \min V(x)$
→ pro $E<0$ ... vázané stavy
→ pro $E>0$ .. rozptylové (nebo za bariérou chycené)

kvantová částice:
$\boxed{E<0}$ → vázané stavy ... $\psi \in L^2$ ale obě okrajové podmínky: ($A=0$ pro ∞, $B=0$ v $-\infty$)
lze splnit jen pro diskrétní $E = E_B$
navíc $E_B = \langle H \rangle = \underbrace{\langle T \rangle}_{\geq 0} + \underbrace{\langle V \rangle}_{\geq V_0} \geq V_0$ .. tj. $E_B \in \langle V_0, 0)$

OSCILAČNÍ VĚTA: dk. rozborem chování $\frac{\psi''}{\psi} = -\frac{p^2(x)}{\hbar^2}$ (nesnadné)

$E_0 < E_1 < E_2$ ... energie váz. stavů .. $|\psi_\nu\rangle$; $\nu = 0,1,2,..$ přísl. stavy
potom $\psi_\nu(x)$ má právě ν nulových bodů $\psi_\nu(x_0)=0$
a navíc mezi ∀ dvěma nul. body ψ_ν leží nulový bod $\psi_{\nu+1}$

pozn: ... semiklasický pohled $\hbar$ ... plocha v px-prostoru
pozn: pokud $V(x)<0$ $\forall x$ ... dá se dk že ∃ alesp. jeden váz. stav (var. princip)

$\boxed{E>0}$

→ jen zobecněné vl. stavy $\psi(x)$ omezená fce

pro $\forall$ energii E existují dva stavy ... klasifikujeme později
→ teorie rozptylu

okraj. podm: $e^{ikx}+Re^{-ikx}$ ↩ Te^{ikx} → částice nalétá zleva | Te^{-ikx} ← $e^{-ikx}+Re^{ikx}$ ↪ částice nalétá zprava

lze DK, že jsou ortogonální →

→ v případě symetrického potenciálu $V(x)=V(-x)$

tj $[P,V]=0$ P... parita, lze volit řešení s paritou $\lambda=\pm1$

... $\psi(|x|\to\infty) \to \cos(k|x|+\delta), \pm\sin(k|x|+\delta)$

pozn: ↳ pro váz. stavy platí $\psi_\nu(-x)=(-1)^\nu\psi(x)$
(srovn. oscilační věta)

→ to že $V(x)\in\mathbb{R}$ implikuje, že pokud ψ řeší (*) pak ψ^* řeší

tj. také $\frac{1}{2}(\psi+\psi^*)=\mathrm{Re}\,\psi$ a $\frac{1}{2i}(\psi+\psi^*)=\mathrm{Im}\,\psi$ řeší (*)

... lze vždy vybrat reál. řešení (zmínit se o $\mathrm{Im}\,V\neq0$)
– otevřené systémy

$\boxed{V_{+\infty}\neq V_{-\infty}}$ ... hodí se jako model:

$E<\min(V_+,V_-)$ ... váz. stavy

$\min(V_\pm)<E<\max(V_+,V_-)$ ... $\forall E$ existuje jeden stav .. kontinuum

$E>\max(V_+,V_-)$ ... dvě kontinua

pozn: v klas. fyzice .. stavy v kontinuu (trapping)
v kvant. fyzice .. není díky tunelování, ale později ... rezonance

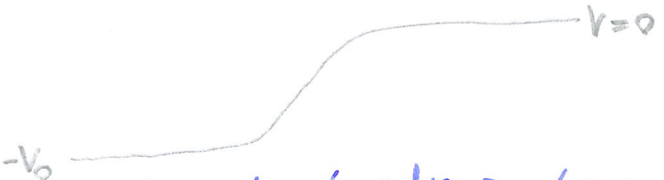
$\boxed{V=\infty}$ ... někdy je užitečný model

.. dá se chápat jako $\lim V\to\infty$

vyjde ... $\psi=0$ v oblasti kde $V=\infty$
ψ' nemusí být spojitá na hranici oblasti
+ pozn ▲ .. na druhé str

PŘESNĚ ŘEŠITELNÉ MODELY:

- napojování a δ-potenciály (včetně $V=\infty$)
- konst. potenciál, lineární pot. a LHO (obecné řeš. definují spec. fci)
- Woods-Saxon $V(x)=-\dfrac{V_0}{1+e^{\alpha x}}$ ψ.. Hypergeometrická funkce



pro $E>0$:

$$|R(E)|^2=\frac{\sinh^2(\pi(k-k')/\alpha)}{\sinh^2(\pi(k+k')/\alpha)}$$

kvantový odraz (nemá klas. obdobu)

- pot. jáma a bariéra $V(x) = \pm V_0 \cosh(\alpha x)$ ... spec. fce.
- <u>Morseho potenciál</u>: $V(x) = D\left(e^{-2a(x-x_0)} - 2e^{-a(x-x_0)}\right)$

váz. stavy: $E_\nu = -\left(\lambda - n - \frac{1}{2}\right)^2 \cdot \frac{a^2\hbar^2}{2m}$

$$\lambda = \frac{1}{a\hbar}\sqrt{2mD}$$

ψ_n ... dá se vyjádřit pomocí Laguerre poly.

<u>pozn A</u>: (Ballentine)

v odlišných potenciálech mohou existovat váz. st. v kont.

př: $V(r) \xrightarrow[r\to\infty]{} \frac{\sin(2kr)}{r}$ a $\psi(r) = f(r)\frac{\sin kr}{kr}$ $E = \frac{1}{2}k^2$

... $\psi \in L^2$ a přitom $E > 0$ ... důvod odraz od bariér.
jejichž výška jde pomalu k 0 pro $x \to \infty$

<u>pozn</u>: v 1D se dá Dk že pro $V(x) < 0 = V_\infty$ $\exists$ alesp. jeden. váz. stav.
↳ později z variač. principu