QMII-5 Symetrie v QM

OPAKOVÁNÍ ..příkladem symetrií ... prostoročas. transf.

zde užší výklad -- transformace symetrie na $\mathcal{H}$:

unitární operátor $\hat{\mathcal{S}}$ ...

- SYMETRICKÁ VELIČINA: $\hat{\mathcal{S}}^+\hat{A}\hat{\mathcal{S}}=\hat{A} \iff [\hat{\mathcal{S}},\hat{A}]=0$

  v případě spojitých grup $\hat{\mathcal{S}}=e^{-\frac{i}{\hbar}a\hat{G}}$ ... $[\hat{G},\hat{A}]=0$

- pokud $[\hat{G},\hat{H}]=0 \to \hat{G}$ je zachovávající se veličina (integrál pohybu)

- OBECNĚ: grupa symetrie $\mathcal{G}$ → invariantní podprostory, IRR

  $[\hat{A},\hat{\mathcal{S}}]=0\ \forall\, \hat{\mathcal{S}}\in\mathcal{G} \Rightarrow$ společ. vl. podpr = invar. podpr ↔ IRR

  např. sfér. sym H → IRR číslované l → vl. č. též čísl. l a tvoří $(2l+1)$-dim. podpr.

PROSTOROVÁ INVERZE A PARITA:

v reálném prostoru: $x_k \to -x_k$ na $\mathcal{H}$ ... $\hat{\Pi}$

$$\Rightarrow \boxed{\hat{\Pi}^+\hat{x}_k\hat{\Pi}=-\hat{x}_k} \iff \{\hat{x}_k,\hat{\Pi}\}=0$$

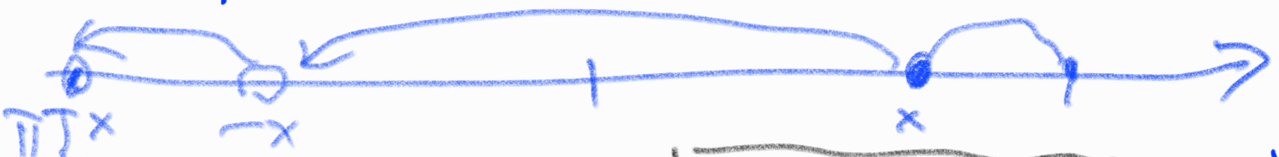
působení na bázi: $\hat{\Pi}|x_k\rangle=|-x_k\rangle \Rightarrow \hat{\Pi}^2=\hat{I}$ +; $\Pi^+=\Pi$

→ vl. č. $\varepsilon=\pm 1$ -- sudá a lichá parita

- $\psi_p(x)$ $\quad e^{\frac{i}{\hbar}px}$ $\quad |p\rangle \to |-p\rangle$

$$\hat{\Pi}\,\hat{\tau}(\Delta x)=\hat{\tau}(-\Delta x)\,\hat{\Pi} \leftarrow \tau=e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta x\,\hat{p}_x}$$

$$\Pi p = -p\Pi \qquad \simeq I-\frac{i}{\hbar}\Delta x\, p$$



rotace

$$\{\hat{\Pi},\hat{p}\}=0 \to \boxed{\hat{\Pi}^+\hat{p}_k\hat{\Pi}=-\hat{p}_k} \to$$

- $\hat{\vec{L}}=\hat{\vec{x}}\times\hat{\vec{p}}$

$$\Pi^+\vec{x}\times\vec{p}\,\Pi=\Pi^+\vec{x}\,\Pi\times\Pi^+\vec{p}\,\Pi=\vec{x}'\times\vec{p}'=L$$

$[\hat\Pi, \hat L_k] = 0 \longleftrightarrow \boxed{\hat\Pi^+ \hat L_k \hat\Pi = \hat L_k} \leftarrow \hat\Pi^+ \hat J_k \hat\Pi = \hat J_k$

• Existují dva typy vektorových veličin:

- polární vektor ... $\{\hat\Pi, \hat V_k\} = 0$ $\quad \hat\Pi^+ \hat V_k \hat\Pi = -\hat V_k$
- axiální vektor ... $[\hat\Pi, \hat A_k] = 0$ $\quad \hat\Pi^+ \hat A_k \hat\Pi = \hat A_k$

→ momenty hybnosti

- skalární: $\vec V \cdot \vec U$

matice

P	P	→ +
A	A	→ +
P	A	−
A	P	−

Def: $\hat O$ je skalární $R^+ \hat O R = \hat O \quad \forall R$

• $\hat\Pi^+ \hat O \hat\Pi = \hat O$

• $\hat\Pi^+ \hat O \hat\Pi = -\hat O$ pseudoskalár

chiralita $\vec S \cdot \vec p = \mathcal{X}$ ... pseudoskal.

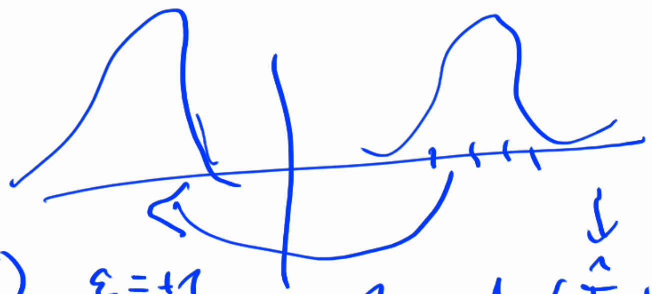
Ax Po

CHIRALITA se někdy používá pro objekty

$\hat\Pi|\psi\rangle \neq R|\psi\rangle \quad \forall R$

• působení Π na vln. fce: $\hat\Pi|x\rangle = |-x\rangle$

$$\hat\Pi\psi(x) = \psi(-x)$$



vl. funkce:

• sudé $\psi(-x) = \Pi\psi(x) = \psi(x)$ $\quad \varepsilon = +1$

• liché $\psi(-x) = \Pi\psi(x) = -\psi(x)$ $\quad \varepsilon = -1$

$$\hat P_\pm = \frac{1}{2}(\hat I \pm \hat\Pi)$$

projektor

$\Pi^+ H \Pi = H$ $\quad V(x) = V(-x)$ $\quad \mathcal{L}\{|x\rangle, |-x\rangle\}$

$\boxed{|x\rangle + |-x\rangle}$ $\quad |x\rangle - |-x\rangle$

$+ \quad \forall x \quad -$

3D $\quad \psi(-\vec x) = \psi(\vec x)$ ... gerade even

$\quad \psi(-\vec x) = -\psi(\vec x)$ ... ungerade odd

$$Y_{lm}(-\vec{x}) = \hat{\Pi}\, Y_{lm}(\vec{x}) = (-1)^l\, Y_{lm}(\vec{x})$$

-- Y_{lm} .. homogenní poly st. l

$\mathcal{Y}(x^{n_1} y^{n_2} z^{n_3})$ $\quad (-1)^l$

$n_1+n_2+n_3 = l$

parita Y_{lm} .. $(-1)^l$

$Y_{lm}(\theta, \varphi)$ .. $x \to -x$

$\theta \to \pi - \theta \qquad \phi \to \phi + \pi$

Důsledky inverzní symetrie: $\qquad V(\vec{x}) = V(-\vec{x})$

Věta: $[\hat{H}, \hat{\Pi}] = 0$ a $|n\rangle$ jsou nedegenerované

vl. vektor $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$

pak $|n\rangle$ musí být vl. č. $\hat{\Pi}|n\rangle = \varepsilon|n\rangle \qquad \varepsilon = \pm 1$

Maticové elementy: $\langle\alpha|\hat{O}|\beta\rangle$

$\varepsilon \quad \hat{I} \quad T \quad \varepsilon_O \quad \varepsilon$

$$\hat{\Pi}^+ \hat{O} \hat{\Pi} = \varepsilon_O \hat{O}$$

$$\hat{\Pi}|\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha|\alpha\rangle$$

$$\hat{\Pi}|\beta\rangle = \varepsilon_\beta|\beta\rangle$$

pak $\langle\alpha|\Pi\, \underbrace{\Pi^+ O \Pi}_{\varepsilon_O O}\, \Pi^+|\beta\rangle = \underbrace{\varepsilon_\alpha \varepsilon_\beta \varepsilon_O}_{-1} \langle\alpha|\hat{O}|\beta\rangle = \langle\alpha|\hat{O}|\beta\rangle$

$\langle\alpha|\varepsilon_\alpha \qquad \Pi^+ \quad \varepsilon_O O \quad \Pi \qquad \varepsilon_\beta \beta$ $\qquad$ identita

$$\boxed{\langle\alpha|\hat{O}|\beta\rangle = 0 \quad \text{pokud } \varepsilon_\alpha \varepsilon_\beta \varepsilon_O = -1}$$

$\Leftarrow \quad -\langle\alpha|\hat{O}|\alpha\rangle = \langle\alpha|\hat{O}|\beta\rangle$

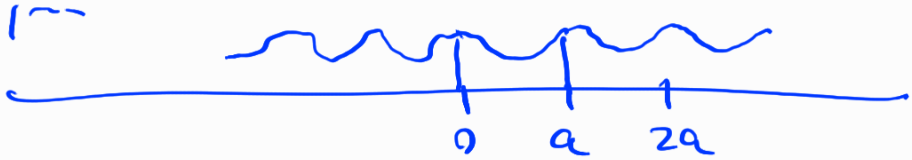
CHIRALITA --

Diskrétní translace

$\boxed{\hat{\tau}(a)}$, $\hat{\tau}(a)^2$, $\hat{\tau}(a)^3$, ...

$\hat{I}$, $\hat{\tau}(-a)$,

$$\hat{\tau}_a^+ V(\hat{x})\, \tau_a = V(\hat{x} + a) = V(\hat{x})$$



$\hat{\tau}_a^+ \hat{x}\, \tau_a = \hat{x} + a\hat{I}$ $\qquad$ invar. operátor .. period. fce x

$\hat{\tau}_a = e^{-\frac{i}{\hbar} a \hat{p}} \Rightarrow [\hat{\tau}_a, \hat{p}] = 0 \Rightarrow \hat{\tau}_a^+ \hat{p}\, \hat{\tau}_a = \hat{p}$

Kinet. energie $\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \Rightarrow [\hat{\tau}_a, T] = 0; \; \hat{\tau}^+ \hat{T} \hat{\tau} = \hat{T}$

důsledky translační symetrie (ve 3D krystalografie)

v 1D $\quad [\hat{H}, \hat{\mathcal{T}}(a)] = 0$ ... $\exists$ spol. vl. v.

$\hat{\mathcal{T}}(a)|\theta\rangle = e^{-i\theta}|\theta\rangle$ ... $\langle x|\theta\rangle = \theta(x)$ vl. fce vl. v.

IRR $\quad k \in \langle -\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\rangle$

$$\underbrace{\langle x|\hat{\tau}}_{\substack{(\tau^+(x))^+ \\ |x-a\rangle}}|\theta\rangle = \langle x-a|\theta\rangle = \theta(x-a)$$

$$= e^{-i\theta}\langle x|\theta\rangle = e^{-i\theta}\theta(x)$$

$$\boxed{\theta(x-a) = e^{-i\theta}\theta(x)}$$

a-periodické

$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$

současně vl. fce $\tau(a)$ ... $\psi(x-a) = e^{-i\theta}\psi(x)$

$\Rightarrow$

$\Leftrightarrow \psi(x) = e^{ikx}u_k(x)$

$$\psi(x-a) = \cancel{e^{-ika}}\,\cancel{e^{ikx}}\,u_k(x-a)$$

$$= \cancel{e^{-i\theta}}\,\cancel{e^{ikx}}\,u_k(x)$$

identifikujeme $\theta = ka \Rightarrow u_k(x)$ je a-periodická

Blochův teorém:

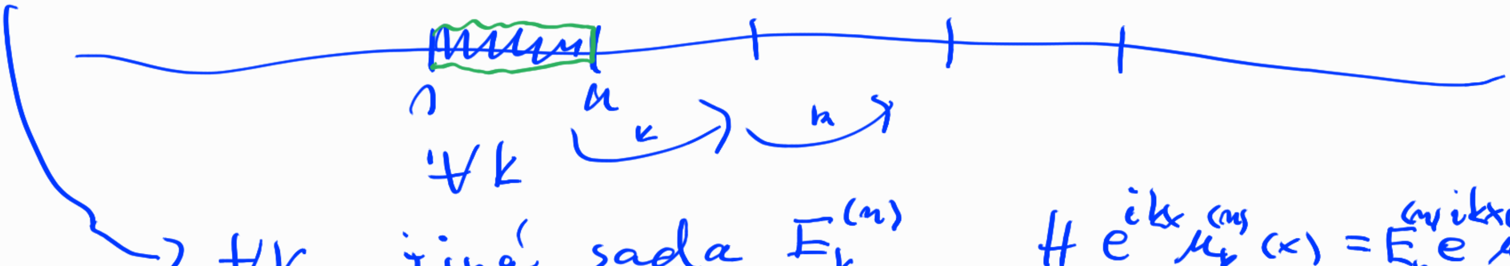
stac. stavy v per. potenciálu lze psát jako   kde $k \in \langle -\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\rangle$ 1. Brillouinova zóna

$$\psi_k(x) = e^{ikx}u_k(x) \quad \text{kde } u_k(x) \text{ je per. fce}$$

k souvisí s vl. č. $\hat{\tau}(a)$ .. $\theta = ka \in \langle -\pi, \pi\rangle$

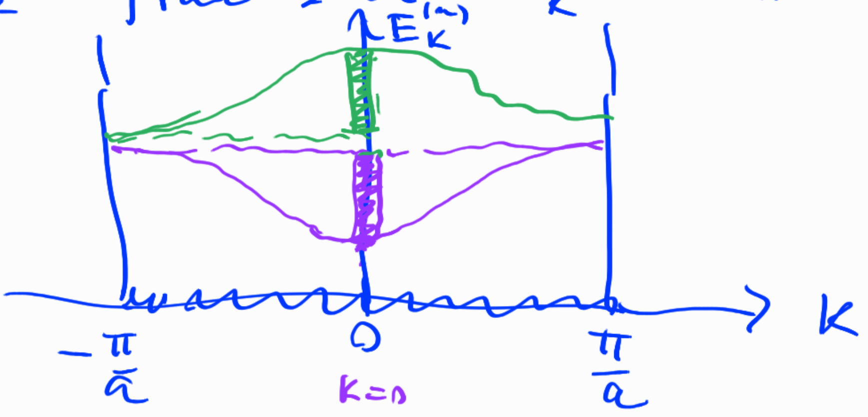
stac. SR řešíme pro $u_k(x)$ na $x \in \langle 0, a)$ s per. okr. podm.

... param. závisí na k .. $\forall k \in \langle -\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\rangle$ Blochův vektor k



→ ∀k jiná sada $E_k^{(n)}$ $\quad H e^{ikx} u_k^{(n)}(x) = E_n e^{ikx} u_k^{(n)}(x)$

pásová struktura



$E_k^{(0)}$ -- $n=0$

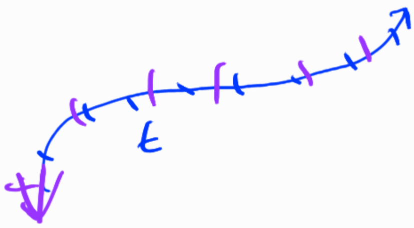
$E_k^{(1)}$ $\quad n=1$

intervaly povolených $E_k^{(n)}$ $\equiv \sigma_H$

- **Časová inverze** (inverze pohybu)

klasická (N2) $m\ddot{x}(t) = -\nabla V(x)$ ⟶ $x(t)$ řeší (N2)

pokud $x(t)$ řeší (N2) ⇒ $x(-t)$ řeší (N2)



systém je invariantní vůči časové inverzi pokud z filmového záznamu nepoznáme že běží pozpátku

PŘ:

pohyb v centrálním poli (ne-Coulombický)