Symetrie v QM

zatím: translace a rotace ... operace transformující prostor

↳ v QM jsme nazývali operace symetrie

... umět operátor zprostředkující transformaci ... $\hat{\mathcal{S}} = \hat{\mathbb{1}} - \frac{i\varepsilon}{\hbar}\hat{G}$ ← Hermit. generator

↳ infinitesimální

Systém je symetrický tak jak jsme zvyklí používat v běžné řeči

pokud $\hat{\mathcal{S}}^+\hat{H}\hat{\mathcal{S}} = \hat{H}$ tj (infinites. transf), $[\hat{G},\hat{H}]=0$

potom $\hat{G}$ je konstantou pohybu (zachov. veličinou)

.. Heisenberg pohyb. řce: $\frac{d\hat{G}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{G},\hat{H}] = 0$

tj • $\langle G\rangle$ nezávisí na čase

• vl. vektory $\hat{G}|g\rangle = g|g\rangle$ zůstávají vl. v. při časovém vývoji

$|g(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|g\rangle \qquad G|g(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}G|g\rangle = g\,|g(t)\rangle$

Degenerace spektra H:

pokud $[H,\mathcal{S}]=0$ a $H|n\rangle = E_n|n\rangle$ ⇒ $\mathcal{S}|n\rangle$ je vl. v. H příslušný E_n

neboť $H\mathcal{S}|n\rangle = \mathcal{S}H|n\rangle = E_n\mathcal{S}|n\rangle$

příklad ROTACE: $[\mathcal{R}(R),H]=0$ ... tj. $[J_i, H]=0$

tj $[J^2,H] = [J_z,H]=0$

• pokud $|n;jm\rangle$ vl. stavem H, J^2, J_z

– pak $\hat{\mathcal{R}}(R)|n,jm\rangle$ je vl. stavem H se stejnou E $\forall R$, tj $\forall \alpha,\beta,\gamma$ (Euler. úhly)

– víme $\hat{\mathcal{R}}(R)|n,jm\rangle = \sum_{m'}|n,jm'\rangle D^{(j)}_{m'm}(R)$ ... mixuje $2j+1$ vektorů

tj $\forall$ hladina pro rotačně sym H je $(2j+1)$ degener. pro nějaké j

OBECNĚ... hladiny lze značit symboly ireducibilních reprezentací grupy symetrie Hamiltoniánu a degenerace je dimenze IR

... platí i pro diskrétní podgrupy rotací

.. jiný náhled $|n\,jm\rangle$ pro $m=j$ je vl stav H

→ $(J_-)^k|n\,jm\rangle$ jsou vlastní stavy pro $k=0,1,\dots 2j$

Diskrétní symetrie ... prostorová inverze:

jako prostorová operace: $x_i \to -x_i$

v QM ... existuje operátor $|\psi\rangle \to \hat{\pi}|\psi\rangle \quad \forall\, |\psi\rangle \in \mathcal{H}$

• podobně jako u rotací ... požadujeme $\langle\hat{x}_i\rangle \to -\langle x_i\rangle$

tj $\langle\psi|\hat{\pi}^+\hat{x}\,\hat{\pi}|\psi\rangle = -\langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle$ tj $\boxed{\hat{\pi}^+\hat{x}\,\hat{\pi} = -\hat{x}}$ ..def $\hat{\pi}$ (neurčuje fázi)

tj $\hat{x}\hat{\pi} + \hat{\pi}\hat{x} = \{\hat{x},\hat{\pi}\} = 0$

← antikomutátor ... někdy se značí $[A,B]_\pm$

transformace $|x\rangle$:

$$\hat{x}\hat{\pi}|x\rangle = -\hat{\pi}\hat{x}|x\rangle = (-x)\hat{\pi}|x\rangle$$

tj $\hat{\pi}|x\rangle = e^{i\delta}|-x\rangle$ ... konvence $e^{-i\delta}=1$

důsledek $\pi^2|x\rangle = |x\rangle\ \forall x$ tj $\pi^2 = 1$ ... rovněž $\pi^+\pi = 1$ (unitarita)

tj $\pi^+ = \pi$ => pouze vlastní čísla ± 1

vlastní číslo nazýváme PARITOU: $+1$ sudá parita, -1 lichá parita

- ~~souvislost~~ vztah π a p:

analogie prostorových operací $\pi\tau(\Delta x) = \tau(-\Delta x)\pi$ (nakreslit obrázek)

+ infinitesimální verze τ → $\{\hat\pi,\hat p\}=0$ tj $\boxed{\hat\pi^+\hat p\hat\pi = -\hat p}$

- další operátory $\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{x}}\times\hat{\vec{p}}$ => $[\hat\pi,\hat L_i]=0$ tj $\boxed{\hat\pi^+\hat L_i\hat\pi = +\hat L_i}$

podobný výsledek analogicky rotací obecně $[\hat\pi,\hat J_i]=0$ tj také $[\hat\pi,\hat S_i]=0$

názvosloví: polární vektor ... $\{\hat\pi,\hat V_i\}=0$ tj $\hat\pi^+\hat V_i\hat\pi = -\hat V_i$

pseudovektor = axiální vektor: $[\hat\pi,\hat A_i]=0$ tj $\hat\pi^+\hat A_i\hat\pi = +\hat A_i$

důsledek: skalární součin: $\hat O = \hat V_i\hat A_i$ ... $\boxed{\pi^+\hat O\pi = -\hat O}$ pseudoskalár

parita vln. fce:

působení π v x repr:

$$\langle x|\pi|\psi\rangle = \langle -x|\psi\rangle = \psi(-x)$$

tj v x-reprezentaci píšeme $\hat\pi\psi(x) = \psi(-x)$ vl. fce: $\psi(-x)=\psi(x)$ sudá; $\psi(-x)=-\psi(x)$ lichá (odtud názvosloví vl. hodn.)

příklad (důležitý)! $\boxed{Y_{lm}\left(-\frac{\vec x}{r}\right) \equiv \pi Y_{lm}\left(\frac{\vec x}{r}\right) = (-1)^l Y_{lm}\left(\frac{\vec x}{r}\right)}$

DK... dá se vyšetřovat tvar $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ při záměně $\theta\to\pi-\theta$, $\phi\to\phi+\pi$

jednodušší ... $Y_{lm}(\theta,\phi)$ je polynom (homogenní) stupně l $\cdot \frac{1}{r^l}$

tj obsahuje jen členy typu $\frac{x^i y^j z^k}{r^l}$ kde $i+j+k=l$

Věta: $[H,\pi]=0$ a $|n\rangle$ je nedegener. vl. v. pak $|n\rangle$ je rovněž vl. v. $\hat\pi$.

důsl. ... např. vl. fce LHO nebo sym. jámy

Maticové elementy: $\langle\alpha|\hat O|\beta\rangle$ ... předp. $\hat\pi|\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha|\alpha\rangle$, $\hat\pi|\beta\rangle = \varepsilon_\beta|\beta\rangle$, $\hat\pi^+\hat O\hat\pi = \varepsilon_0\hat O$

pak $\langle\alpha|\underset{\pi^+}{\hat\pi^{+-1}}\underset{\pi^+}{\hat\pi}\hat O\underset{\pi}{\hat\pi^{-1}}\hat\pi|\beta\rangle = \underbrace{\varepsilon_\alpha\varepsilon_\beta\varepsilon_0}_{\text{pokud } -1}\langle\alpha|\hat O|\beta\rangle$ pak $\langle\alpha|\hat O|\beta\rangle = 0$

Diskrétní translace (1D)

fyzika: částice v periodickém potenciálu $V(x\pm a)=V(a)$
(fyzika pevných látek)

def: translační operátor $\hat{J}(a)^+ \hat{x}\, \hat{J}(a) = \hat{x}+a$
(vlastně spec. př. dříve def.) $\longrightarrow \hat{J} = e^{-\frac{i}{\hbar} a \hat{p}}$

aplikace na V: $\hat{J}^+(a)\, V(\hat{x})\, \hat{J}(a) = V(\hat{x}+a) = V(\hat{x})$

+ samozřejmě $[\hat{J},\hat{P}]=0$ $\Rightarrow$ $\boxed{[\hat{H},\hat{J}(a)]=0}$

důsledky translační symetrie:

$\exists$ spol. vl. v. $\hat{J}(a)$ a $\hat{H}$

vlastní vektory $\hat{J}(a)$? ... unit. oper. $\to$ vl. čísla $\in$ jedn. k. ... $e^{-i\theta}$

$\to$ $\hat{J}(a)|\theta\rangle = e^{-i\theta}|\theta\rangle$

tj. v x-reprezentaci:

$\hat{J}(a)\theta(x)$? : $\langle x|\hat{J}|\theta\rangle = \langle x-a|\theta\rangle = e^{-i\theta}\langle x|\theta\rangle$

tj $\hat{J}(a)\,\theta(x) \equiv \theta(x-a) = e^{-i\theta}\theta(x)$ (*)

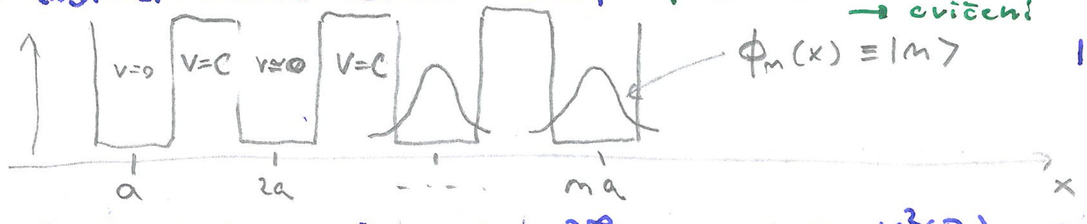
řešení (*): začneme s libovolnou fcí $u(x)$ na intervalu $x\in\langle 0,a)$ + prodloužíme všude jinde pomocí (*)

ekvivalentní zápis: $\theta(x) \equiv \phi_k(x) = e^{ikx} u_k(x)$ ... Blochův teorém

kde $k\equiv\theta/a$ a $u_k(x)$ je periodická funkce, kterou určíme z dalších požadavků. Například pokud ϕ_k má být vl. fce H: řešíme $H\phi=E\phi$:
- stačí na intervalu $x\in(0,a)$ pro $u(x)$ s periodic. okraj. podm.
- $\theta\in\langle-\pi,\pi\rangle$ jinak dostaneme totožnou vln. fci

$\Rightarrow$ stačí brát $k\in\langle-\frac{\pi}{a},\frac{\pi}{a}\rangle$ ... 1. Brillouin zóna

PŘ: model těsné vazby (naznačit zobecnění na přesné řešení) $\to$ cvičení



$\phi_m(x) \equiv |m\rangle$ $\quad |m\rangle = \hat{J}^m|0\rangle$

lineární obal množiny $\{|m\rangle\}_{m=-\infty}^{\infty}$ není $\mathcal{H}=\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, ale pro malé energie je to dobrá aproximace..

Navíc předp.: $\langle m'|H|m\rangle = E_0$ pro $m=m'$

$=-\Delta$ pro $m=m'\pm1$

$=0$ jinak $\leftarrow$ "těsná vazba"

Hledáme vl.v. $H,\hat{J}$: $|\psi\rangle$

Blochův teorém: $|\psi\rangle = \sum_m e^{i\theta m}|m\rangle$ + dosazení do $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$

$\Rightarrow E(\theta) = E_0 - 2\Delta\cos\theta$

Poznámky:
- dlouhovlnná limita
- efektivní hmotnost

} obecné vlastnosti

Diskrétní symetrie – časová inverze (inverze pohybu)

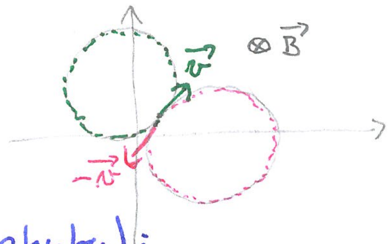
Klasická mechanika: $m\ddot{x}(t) = -\nabla V(x)$

$x(t)$ řeší, potom též $x(-t)$ řeší

~~[illegible]~~ Názorně: systém je čas. invariantní pokud z "filmového záznamu" nepoznám jestli běží pozpátku (záznam todol souřadnic a polí)

PŘ: pohyb částice v MGP není časově invariantní:

– byl by invariantní pokud zahrneme i pohyby generující pole $\vec{B}$



OPERÁTOR ČASOVÉ INVERZE (inverze pohybu):

požaduji
$$\hat{\Theta}\hat{\vec{X}}\hat{\Theta}^{-1} = \hat{\vec{X}}$$
$$\hat{\Theta}\hat{\vec{P}}\hat{\Theta}^{-1} = -\hat{\vec{P}}$$
$\Big\} \longrightarrow \Theta\vec{J}\Theta^{-1} = -\vec{J}$ (pro $\vec{L}$ to plyne, rovněž $\vec{S}$, pro obecné $\vec{J}$ postuluji)

operátory "sudé/liché vůči t-inverzi"

problém: fundamentální komutační relace:

$$\Theta[\hat{X}_i, \hat{P}_j]\Theta^{-1} = \Theta \hat{X}_i \Theta^{-1}\Theta P_j \Theta^{-1} - \Theta P_j \Theta^{-1}\Theta X_j \Theta^{-1} = -[X_i, P_j] = -i\hbar\delta_{ij}$$

řešení ... ↑ je OK pokud $\Theta i \Theta^{-1} = -i$ ... antilineární operátor

matematická odbočka

připomenout: Wignerova věta ... každá operace symetrie odpovídá (anti-)unitárnímu operátoru ($\Leftarrow$ pokud $|\psi'\rangle = U|\psi\rangle$ pak $|\langle\varphi|\psi\rangle| = |\langle\varphi'|\psi'\rangle|$), ale ten může být ~~unitár~~ lineární nebo antilineární.

Antilineární operátor: $A\,(c_1|\phi_1\rangle + c_2|\phi_2\rangle) = c_1^*|\phi_1\rangle + c_2^*|\phi_2\rangle$

A je antiunitární pokud $\exists A^{-1}$ a $\| |n\rangle \| = \| A|n\rangle \|$ $\forall n$

problémy: 1) je obtížné definovat A^+. (definuje se pomocí ~~[illegible]~~ standardně se A^+ korespondence vektorů a lin. funkcionálů)

$\rightarrow$ ve výrazech $\langle\psi|A|\phi\rangle$ vždy předp. že A působí doprava

2) definice závisí na bázi

př. ~~Operátor~~ komplexního sdružení $K_{(n)}|\psi\rangle = \sum_n a_n^*|n\rangle$

pokud přejdeme k jiné bázi ~~[illegible]~~ $|\nu\rangle = e^{i\phi_n}|n\rangle$ např. $K_{(n)}|\nu\rangle = e^{-i\phi_n}|n\rangle = e^{-2i\phi_n}|\nu\rangle$

platí: $\forall$ antilineární operátor lze psát jako $A = L \cdot K$

Zpět k fyzice: $H|\psi(t)\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle$

$\Theta\cdot|$ $\quad \Theta H\Theta^{-1}\Theta|\psi(t)\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Theta|\psi(t)\rangle$

invariance systému k čas inverzi: $\Theta H\Theta^{-1} = H$ ... tj $[\Theta, H] = 0$

potom $\Theta|\psi(-t)\rangle$ splňuje stejnou rovnici jako $|\psi(t)\rangle$

(srovn. s "filmovou definicí" na začátku)

x-reprezentace: $\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 + V(x)\right]\psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)$

komplex. sdružení: $\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 + V^*(x)\right]\psi^*(x,t) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(x,t)$

tj pro reálný potenciál: $V^* = V$: $\psi(x,t)$ řešení $\rightarrow \psi^*(x,-t)$ řešení operátor časové inverze pro bezspinovou částici:

$\Theta \equiv K$ ... komplexní sdružení (x-reprezentace)

odpovídá intuici: $\Theta|\vec{p}\rangle = \Theta e^{+\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}} = e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}} = |-\vec{p}\rangle$

.. odpovídá požadavku $\Theta\hat{P}\Theta^{-1} = -\hat{P}$ tj. $\{\Theta, P\} = 0$

moment hybnosti (orbitální): $\hat{\Theta}|lm\rangle = \hat{\Theta} Y_{lm}(\theta,\varphi) = Y^*_{lm}(\theta,\varphi)$
$= (-1)^m |l, -m\rangle$

působení na vln. fci v p-reprezentaci:

$|\psi\rangle = \int \psi(p)|p\rangle dp$ ... $\Theta|\psi\rangle = \int \psi^*(p)|-p\rangle dp = \int \psi^*(-p)|p\rangle dp$

tj. $\Theta\psi(p) = \psi(-p)^*$

Důsledky t-symetrie (bezspinová částice):

Nechť Hamiltonián je t-invariantní a $H|n\rangle = E_n|n\rangle$ je nedegenerovaná. Pak je vlnová funkce $\langle x|n\rangle$ reálná (až na případný fázový faktor).

DK: $|n\rangle$ je vl. v. $\Rightarrow \Theta|n\rangle$ je vl. v. (neboť $[H,\Theta] = 0$), tj.

$|n\rangle = \Theta|n\rangle$ (díky nedegenerovanosti, až na fáz. faktor)

$\Rightarrow \langle x|n\rangle = \langle x|n\rangle^*$ c.b.d.

Časová inverze pro částici se spinem (v bázi S_z .. $|j,m\rangle$)

$\boxed{\hat{\Theta} = e^{-\frac{i}{\hbar}\pi S_y} K}$ (až na případnou fázi)

DK: vl. stav se spinem ve směru $\vec{n}$ $|\vec{n}:\pm\rangle$

víme, že platí $|\vec{n},+\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha S_z} e^{-\frac{i}{\hbar}\beta S_y}|+\rangle$

$+ \boxed{\hat{\Theta}\hat{S}\hat{\Theta}^{-1} = -\hat{S}} \Rightarrow \Theta|\vec{n}:+\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha S_z} e^{-\frac{i}{\hbar}\beta S_y}\Theta|+\rangle = \eta|\vec{n}:-\rangle$ fáze

$\Leftrightarrow \hat{\Theta}\hat{S} = -\hat{S}\hat{\Theta}$ tj. např. $S_z\Theta|m\rangle = -\Theta S_z|m\rangle = -\hbar m|m\rangle$

na druhé straně $|\vec{n},-\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha S_z} e^{-\frac{i}{\hbar}(\pi+\beta)S_y}|+\rangle$

srovnáním: $e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha S_z} e^{-\frac{i}{\hbar}\beta S_y} U \underbrace{K|+\rangle}_{|+\rangle} = e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha S_z} e^{-\frac{i}{\hbar}(\beta+\pi)S_y}|+\rangle$ $\forall \alpha,\beta$

až na příp. fázi

$\hat{\Theta} = UK$

$\Rightarrow$ c.b.d.

důsledek: $T^2 = e^{-i\pi S_y/\hbar} K_0 e^{-i\pi S_y/\hbar} K_0 = e^{-i\pi S_y/\hbar} e^{+i\pi(-S_y)/\hbar}$

pozn. $KS_x = S_x K$, $KS_z = S_z K$, $KS_y = -S_y K$ pro standard. fáz. konvenci báze $|jm\rangle$

$KS_y = -S_y K$ .. S_y je ryze imag. matice $= \frac{J_+ - J_-}{2i}$

tj. $T^2 = e^{-\frac{2\pi i S_y}{\hbar}} = e^{-\frac{i}{\hbar}2\pi J_y}$ neboť $e^{-\frac{i}{\hbar}2\pi L} = 1$

$\hat{R}(2\pi) = \pm 1$ pro J celé / J poloceločíselné

např. v reprezentaci vl. stavů $\hat{S}_y$ ... $e^{-i2\pi(m_y)} = -1$, $m = \frac{1}{2}$

~~Antiunitární operátor~~

PŘ: částice se spinem $\frac{1}{2}$: $e^{-\frac{i}{\hbar}\pi S_y}|+\rangle = |-\rangle$

$e^{-\frac{i}{\hbar}\pi S_y}|-\rangle = -|+\rangle$

$\Rightarrow \hat{\Theta}(a|+\rangle + b|-\rangle) = a^*|-\rangle - b^*|+\rangle$

$\hat{\Theta}^2(a|+\rangle + b|-\rangle) = -a|+\rangle - b|-\rangle$ ... tj skutečně $\hat{\Theta}^2 = -1$

Kramerova věta

Systémy s poločíselným j mají ∀ hladinu alespoň 2x degenerovanou

DK: $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ $[\hat{\Theta}, \hat{H}] = 0$ $\longrightarrow$ $\hat{\Theta}|\psi\rangle$ také vl.v. k energii E

nechť $\hat{\Theta}|\psi\rangle = a|\psi\rangle$ potom $\hat{\Theta}^2|\psi\rangle = \hat{\Theta}a|\psi\rangle = \underbrace{a^*a}_{>0}|\psi\rangle$,

ale pro j poločíselné je $\hat{\Theta}^2|\psi\rangle = -|\psi\rangle$! SPOR