QM I - 4 Bodová částice 1D, LHO

$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}) \cong \ell^2$ ...

	$\vert\psi\rangle$	$\hat{x}$	$\hat{p}$
ÚSKO: $\boxed{\hat{x}}$ – x-reprezentace	$\psi(x)$	$x\psi(x)$	$-i\hbar \frac{d}{dx}\psi(x)$
$\boxed{\hat{p}}$ – p-reprez.	$\psi(p)$	$i\hbar\frac{d}{dp}\psi(p)$	$p\psi(p)$
$\boxed{H_0, \hat{P}}$			
LHO – $\boxed{H} = \frac{\hbar\omega}{2}(\hat{q}^2 + \hat{p}^2)$ $2N+1$	ψ_n	$\frac{x_0}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & & \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & \\ & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} \\ & & & \ddots \end{pmatrix}$	$\frac{i\hbar}{\sqrt{2}x_0}\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & & \\ -\sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & \\ & -\sqrt{2} & 0 & \ddots \end{pmatrix}$

∞, $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$

$\boxed{a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{q} + i\hat{p})}$

$N = a^\dagger a$ ... $\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$ $n = 0, 1, 2, \ldots$

$\boxed{[a, a^\dagger] = 1}$ $a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$ $a|n\rangle = \sqrt{n}|n\rangle$ $\to$ $a|0\rangle = 0$

$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} a^{\dagger n}|0\rangle$

$\Rightarrow$ x-reprezentace $\phi_n(x) = \langle x|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}\, x_0 2^n n!}} H_n\left(\frac{x}{x_0}\right) \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2\right)$

---

pozn: řešení $\boxed{H|\psi\rangle = E|\psi\rangle}$ (SR) .. stacionární Schrödingerova rce pro LHO v x-reprezentaci

ŘEŠENÍ OSCILÁTORU / DIFERENCIÁLNÍ ROVNICÍ – NÁZNAK

$x = x_0 q$

$\to H\psi(x) = \frac{\hbar\omega}{2}\left(-\frac{d^2}{dq^2} + q^2\right)\psi(q) = E\psi(q)$

Schematicky: • vyšetři lim $q \to \infty$ $\longrightarrow e^{-\frac{1}{2}q^2}$

• subst. $\psi(q) = f(q)e^{-\frac{1}{2}q^2}$ dosadit do (SR)

$\longrightarrow$ ODR II. ř. pro $f(q)$ ...

• hledáme řeš. ve tv. řady $f(q) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n q^n$

$\longrightarrow$ rekur. relace pro f_n

• chování $f(q)$ $q \to \infty$ -- f diverguje exp.

konečný počet členů řady ... $f_n = 0$

$\to$ podmínka na E

OBECNÉ CHOVÁNÍ STAC. STAVŮ V 1D

$\frac{p^2}{2m}$ $\quad \hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ ... (tSR)

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x)}$$

(SR) stacionární Schrödingerova rce

① O asymptotickém chování $V(x)$

V_0 | $-Fx$ | $\frac{1}{2}kx^2$

$V(x) \xrightarrow{x\to\infty} \pm\infty$

$V(x) \xrightarrow{\pm x \to \infty} V_\pm$

častý $V_+ = V_-$

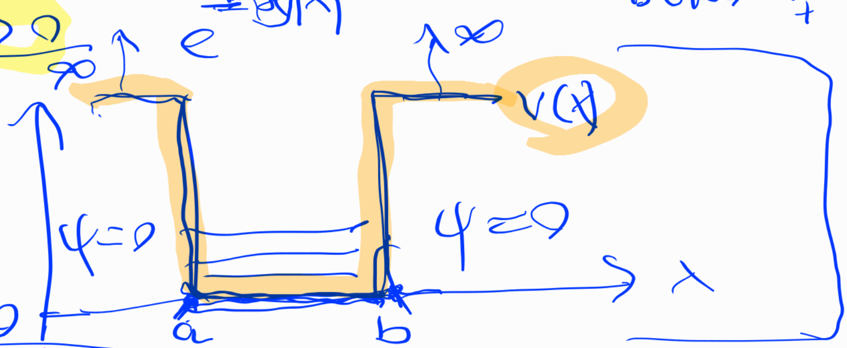
BÚNO $V_+ = 0$

pozn.: $V \to \infty \Rightarrow \psi \to 0$ $\quad e^{\pm\infty|x|}$

PŘ: ∞ hluboká jáma

je limitou konečné pro $V_+ = V_- \to \infty$

... při tam $\psi \to 0$ v asympt. obl.



② O LIN. NEZÁV. ŘEŠENÍCH A MATICI WRONSKIÁNU

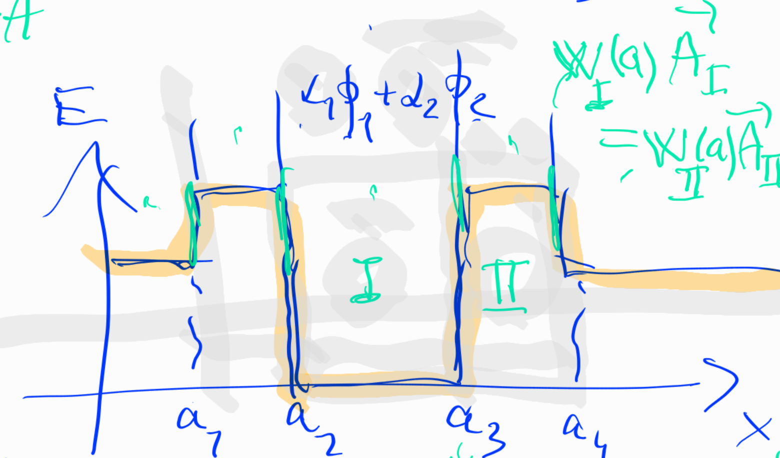
(SR) ODR II. ř. ... dvě lnz řeš. $\psi(x) = \alpha_1\phi_1(x) + \alpha_2\phi_2(x)$

wronskián $W(x) = \begin{pmatrix}\phi_1(x) & \phi_2(x)\\ \phi_1'(x) & \phi_2'(x)\end{pmatrix} = \phi_1\phi_2' - \phi_1'\phi_2$

$\det W(x) \neq 0$

$$\Rightarrow \frac{dw}{dx} = 0 = \phi_1\phi_2'' - \phi_1''\phi_2 = \frac{2m(V-E)}{\hbar^2}\underbrace{(\phi_1\phi_2 - \phi_1\phi_2)}_{0}$$

$$\begin{pmatrix}\psi(x)\\ \psi'(x)\end{pmatrix} = W(x)\cdot\underbrace{\begin{pmatrix}\alpha_1\\ \alpha_2\end{pmatrix}}_{\vec{A}}$$



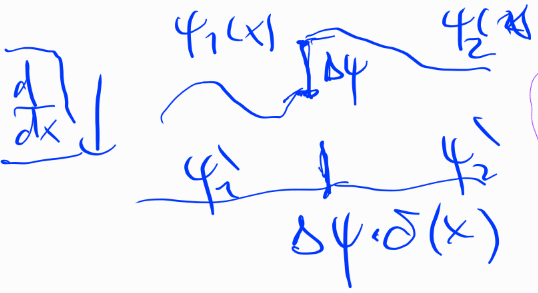
$W_I(a)\vec{A}_I = W(a)\vec{A}_{II}$

• napojování řešení:

• $\boxed{\psi(x), \psi'(x)}$ spojité funkce (s výjimkou δ-potenciálu $\theta' = \delta(x)$)

derivace nespojitosti ... $\theta(x)$

nespojitosti by generovaly δ-člen Heaviside v (SR)



$$\varphi_I(a) = \alpha_1^I \phi_1^{II}(a) + \alpha_2^I \phi_2^I(a) = \alpha_1^{II}\phi_1^{II}(a) + \alpha_2^{II}\phi_2^{II}(a) = \varphi_{II}(a)$$

$$\varphi_I'(a) = \alpha_1^I \phi_1^{I\prime}(a) + \alpha_2^I \phi_2^{I\prime}(a) = \alpha_1^{II}\phi_1^{II\prime}(a) + \alpha_2^{II}\phi_2^{II\prime}(a) = \varphi_{II}'(a)$$

NAPOJOVÁNÍ ŘEŠENÍ POMOCÍ MATICE W

$$\boxed{W_I(a)\vec{A}_I = W_{II}(a)\vec{A}_{II}}$$

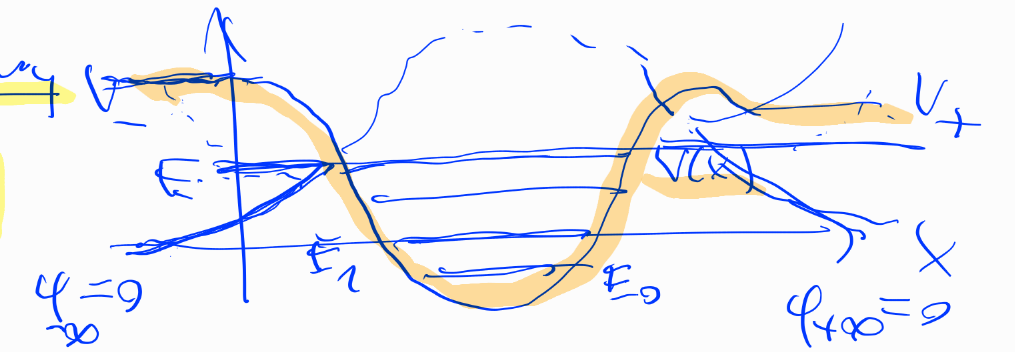
dvě LNZ: globální řešení z kont. ??

↳ – Normalizace

– okrajové podmínky

① Vázané stavy

$$\boxed{E < \min(V_-, V_+)}$$



pokud pak $\frac{2m}{\hbar^2}(V-E) \geq \varkappa^2 > 0$ .. ∃ 2 řeš. $\phi_1 \geq Ae^{\varkappa x}$, $\phi_2 \leq Be^{-\varkappa x}$

(Formánek)

2 podmínky $\varphi_{\pm\infty} = 0$ 3. podm. $\|\varphi\|^2 = 1$

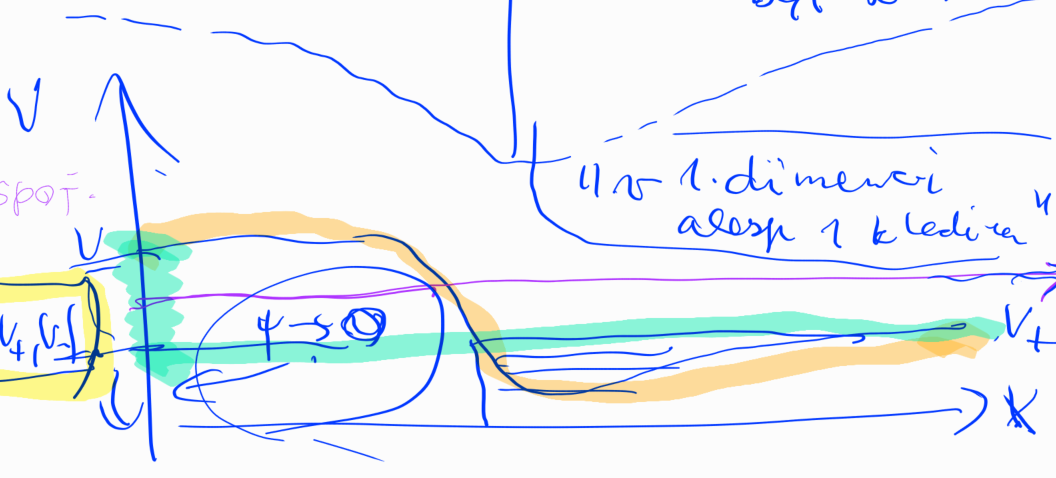
⇒ fixují podm. α_1, α_2 + podmínka na E

→ diskrétní spektrum .. $\sigma_B = \{E_0, E_1, \dots E_N\}$

může být $N = \infty$

② nedegenerované spoj. spektrum

$$\boxed{E \in (\min(V_-, V_+), \max(V_+, V_-))}$$



dvě řešení (SR) $\phi_1(x)$, $\phi_2(x)$ … α_1, α_2

1D kraj. podm. $x \to \infty$ řešení $\boxed{\begin{array}{l} \phi_1 \sim e^{i k_+ x} \\ \phi_2 \sim e^{-i k_+ x} \end{array}}$ $x \to \infty$

$$\psi'' = \underbrace{\frac{2m(E - V_+)}{\hbar^2}}_{k_+^2} \psi$$

podm. $\psi = 0$ $x \to -\infty$, $\frac{\alpha_1}{\alpha_2}$ fix

$$\underline{\psi_E(x)} = N \left[\alpha_1 \phi_1(x) + \alpha_2 \phi_2(x) \right] \quad E \text{ libovolná}$$

tyto hodnoty $E \in \sigma_c(H)$

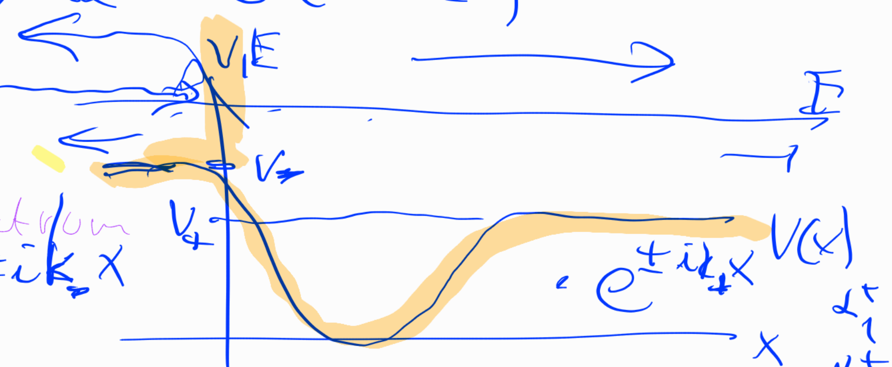
normování $\underline{N(E)}$ … $\langle \psi_E | \psi_{E'} \rangle = \delta(E - E')$

x-repr.
$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_E^*(x) \, \psi_{E'}(x) \, dx = \delta(E - E')$$

(3) $\boxed{E > \max\{V_+, V_-\}}$

2x degenerované spojité spektrum

e^{ikx} α_1^-, α_2^- $\cdot e^{\pm i k_- x}$



$\cdot e^{\pm i k_+ x}$ α_1^+, α_2^+

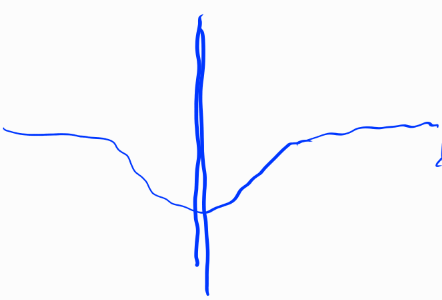
4 ~~parametry~~ … $\underline{2 \text{ řešení}}$ $\underline{2 \text{ parametr}}$

závislost mezi $\begin{pmatrix} \alpha_1^- \\ \alpha_2^- \end{pmatrix} \longleftrightarrow \begin{pmatrix} \alpha_1^+ \\ \alpha_2^+ \end{pmatrix}$

později — Teorie rozptylu

S operator

… $E \in \sigma_c(\hat{H})$ … $\left. \begin{array}{l} |E, 1\rangle \\ |E, 2\rangle \end{array} \right\}$ $|E, n\rangle$, $|E, \lambda\rangle$ ($\lambda = \pm 1$)



lze vzít paritu

$$\langle E, n | E', n' \rangle = \delta_{nn'} \, \delta(E - E')$$

• OBECNÉ VLASTNOSTI ŘEŠENÍ (SR) a analyt. řešit. $V(x)$

$\boxed{\text{Věta}}$ (OSCILAČNÍ VĚTA): nechť (SR) $\frac{\psi''}{\psi} = -\frac{p^2(x)}{\hbar^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)$

$\nu = 0, 1, \dots$

a nechť $E_0 < E_1 < \dots < E_N$ jsou $\in \sigma_B(\hat{H})$

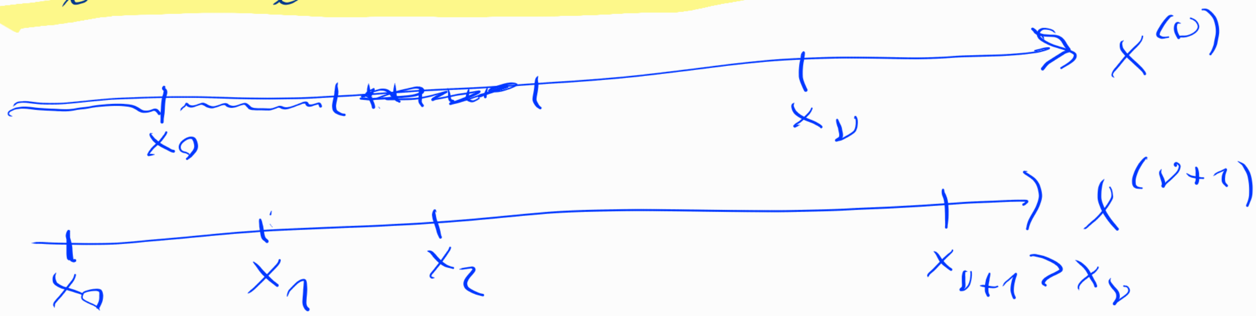
vlastní energie

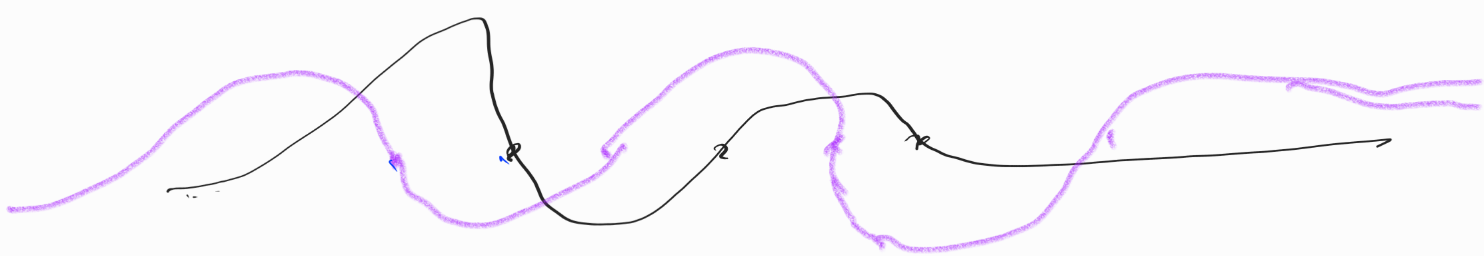
vl. vektory $\psi_0(x), \psi_1(x), \dots \psi_n(x)$

PAK: 1) $\psi_\nu(x)$ má právě ν kořenů

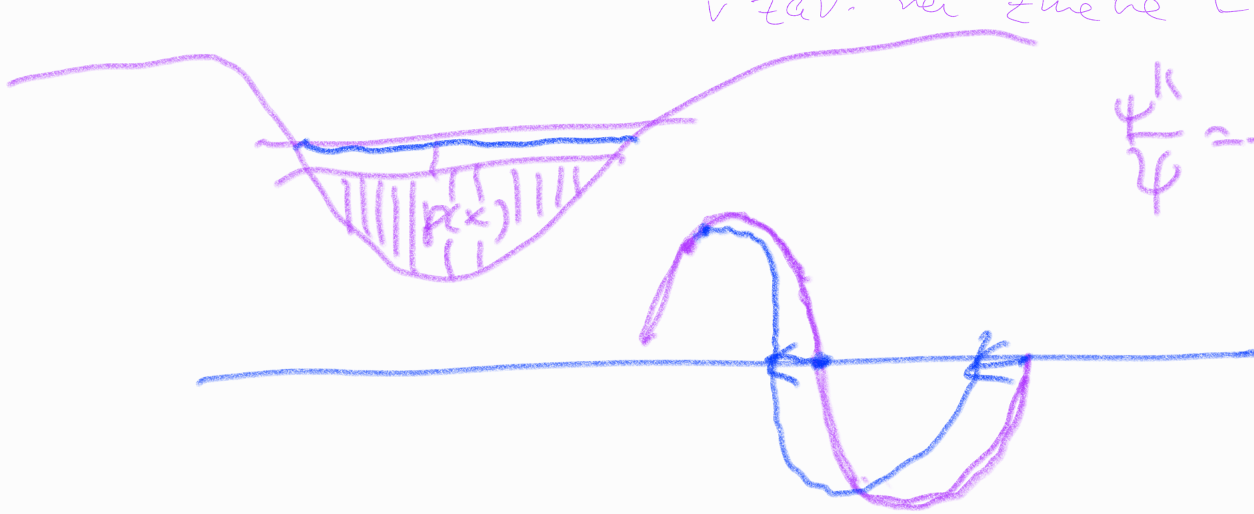
$$\psi_\nu(x_i^{(\nu)}) = 0 \qquad i = 1, 2, \dots \nu$$

2) $x_i^{(\nu)}$ a $x_i^{(\nu+1)}$ se navzájem oddělují





náznak důkazu - z náhledu chování $\psi(x)$ v záv. na změně E



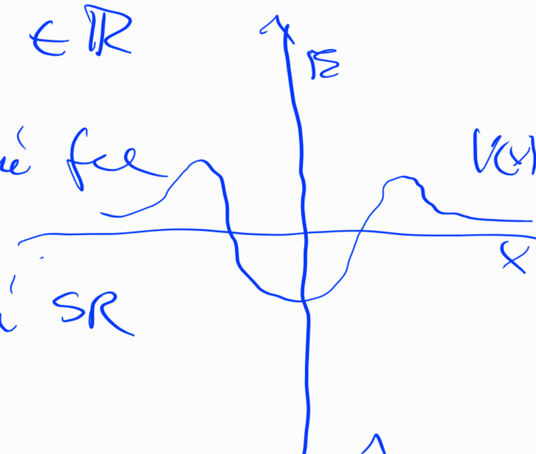
$$\frac{\psi''}{\psi} = -\frac{p^2}{\hbar^2}$$

VĚTA symetrie řešení: , váz. stavy

- $\boxed{V^*(x) = V(x)}$ $\longrightarrow$ $\psi_n(x)$ lze volit reálné

pokud $\psi(x)$ řeší (SR) pak $\psi^*(x)$ řeší (SR)

$\Rightarrow$ $\dfrac{\psi+\psi^*}{2} \in \mathbb{R}$ $\quad \dfrac{\psi-\psi^*}{2i} \in \mathbb{R}$



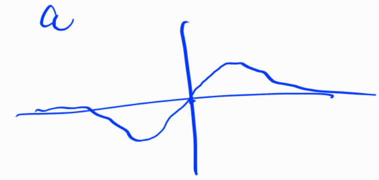
- parita $\boxed{V(x)=V(-x)}$ sudé fce

pak $\psi(x)$ řeš. SR $\longrightarrow$ $\psi(-x)$ řeší SR

$P\psi$

$\Rightarrow$ $\dfrac{\psi(x)+\psi(-x)}{2}$ $\quad \dfrac{\psi(x)-\psi(-x)}{2}$ … vl. fce $\hat{P}$ řeší (SR)

speciálně váz. stavy $\psi_\nu(x)$ .. nedegen. a



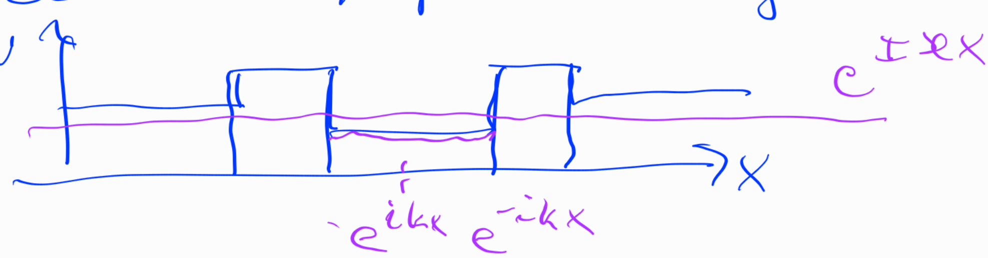
$\Rightarrow$ parita $\psi_\nu(x)$ je $(-1)^\nu$

tj. např. $\psi_0(x)$ je sudá $\quad \psi_1(x)$ je lichá a $x_1^{(1)}=0$

REŠITELNÉ MODELY:

1. konst., lin, LHO potenciály
2. počástech konst. potenciály

$Ai(cx)$
$Bi(dx)$



3 δ-potenciál

(součky)

$\psi(x)$ spojitá

$\psi'(x)$ má v a skok úměrný λ

podrobněji na cvičení příští týden

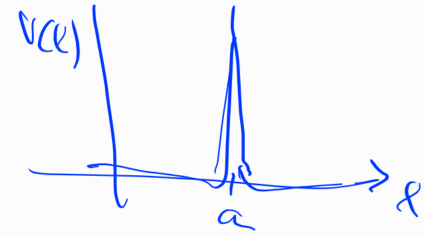
sin kx cos kx

δ-jáma

$-\lambda\delta(x-a)$

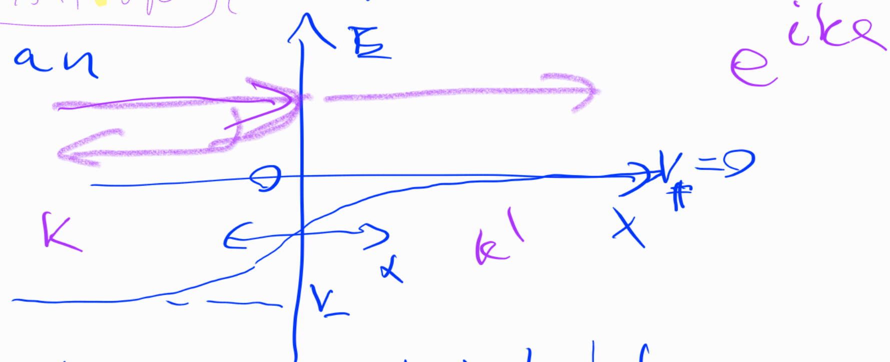
δ-bariéra

$+\lambda\delta(x-a)$



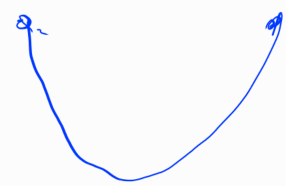
4 Woods-Saxon

$$V(x) = -\frac{V_0}{1+e^{\alpha x}}$$



řešení pomocí Hypergeometrická fce

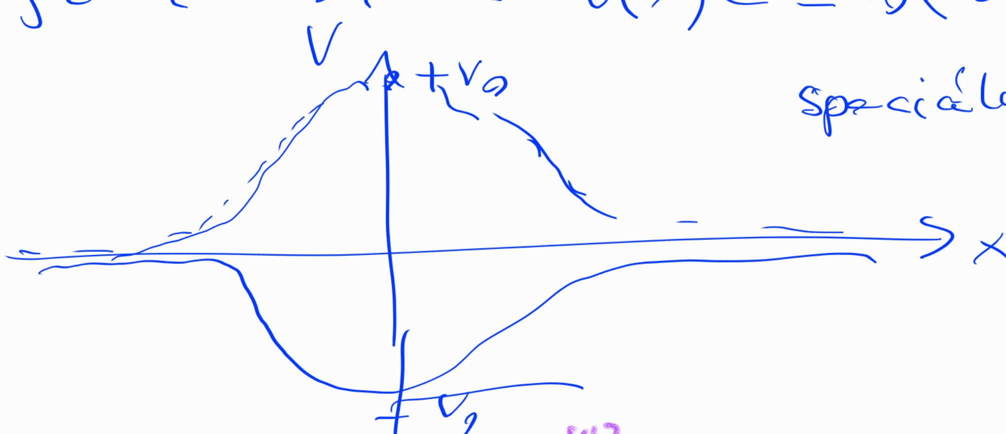
původ odrazu $|R(E)|^2 = \dfrac{\sinh\left(\pi(k-k')/\alpha\right)^2}{\sinh\left(\pi(k+k')/\alpha\right)^2}$



5 pot. jáma cosh

-- $V(x) = \pm V_0\left[\cosh(\alpha x)\right]^{-1}$

speciální fce

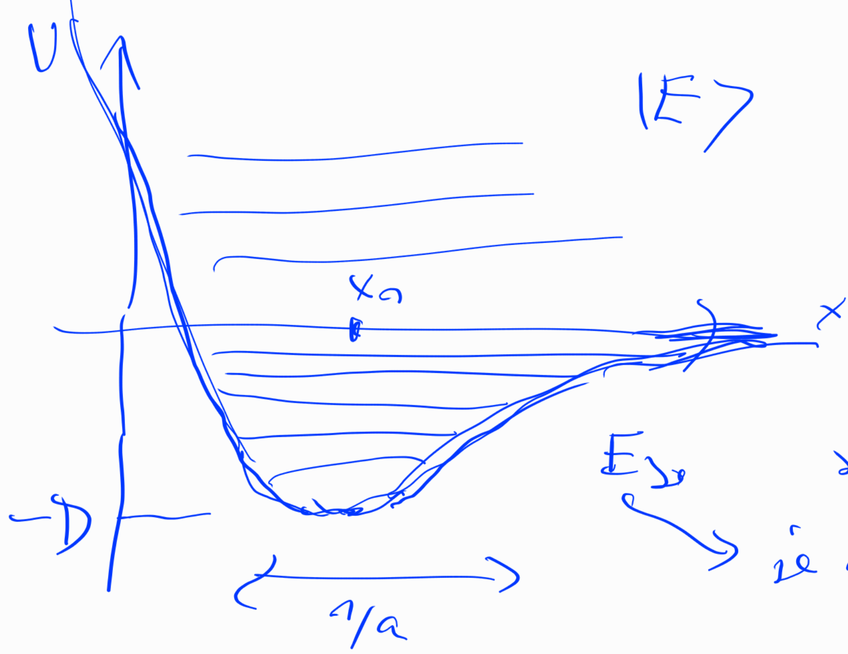


6 Morseho potenciál

(viz wiki) .. molekula

$$V(x) = D\left(e^{-2a(x-x_0)} - 2e^{-a(x-x_0)}\right)$$

$$= D\left[e^{-a(x-x_0)} - 1\right]^2 - D$$



$|E\rangle$

$U_- = \infty$

$U_+ = 0$

$E_\nu \quad \nu = 0, 1, \ldots N$

je daný vzore