Schrödingerjeva enačba

Kaj so vedeli na začetku?

i) $E = \hbar\omega = h\nu$ (Bohr, Einstein)

ii) $p = \hbar k;\ \ k = \frac{2\pi}{\lambda}$ (de Broglie)

iii) $E = p^2/2m$

iv) Vse skupaj je nekakšno valovanje

Kakšne enačbe pa so poznali v tistem času?

a) **Valovna enačba**

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 u}{\partial^2 t}$$

Vzamemo nastavek $u = u_0 \cos(kx - \omega t)$ in vstavimo.

$$-k^2 = -\frac{\omega^2}{c^2} \quad \Rightarrow \omega = \pm c|k|$$

Energija je sorazmerna z ω, gibalna količina pa z k. Skupaj tu dobimo napačno sorazmernost $E \propto p$. Torej valovna enačba nam ne pomaga.

b) **Difuzijska enačba**

$$D\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{\partial T}{\partial t}$$

Vzemimo nastavek za stoječi val $T = T_0 \cos kx \cos \omega t$ in vstavimo.

$$-k^2 DT(x,t) = -\omega T_0 \sin \omega t \cos kx$$

Dobljeno ni sorazmerno z $T(x,t)$ torej ne moremo funkcije pokrajšati na obeh straneh. Vzemimo raje nastavek $T = T_0 e^{i(kx-\omega t)}$ in ga vstavimo.

$$D = \frac{i\omega}{k^2} = \frac{i\hbar^2 k^2}{\hbar 2mk^2} = i\frac{\hbar}{2m} \quad \Rightarrow E = \frac{p^2}{2m}$$

Tokrat pa dobimo pravilen izraz za energijo. Takšna enačba velja za prosti delec. Dodamo še potencial če delec ni prost in dobimo **Schrödingerjevo enačbo**

$$i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x,t)\psi; \quad \psi(x,t)$$

Kaj je ψ?

Vzemimo nastavek z realno in imaginarno komponento

$$\psi = \alpha + i\beta; \quad \alpha, \beta \in \mathbb{R}$$

To vstavimo v Schrödingerjevo enačbo

$$i\hbar\left(\dot{\alpha} + i\dot{\beta}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}(\alpha'' + i\beta'') + V(\alpha + i\beta)$$

Iz tega dobimo sistem dveh realnih sklopljenih diferencialnih enačb (kjer smo po tiho privzeli, da je **potencial V realen**).

$$-\hbar\dot{\beta} = -\frac{\hbar^2}{2m}\alpha'' + V\alpha$$

$$\hbar\dot{\alpha} = -\frac{\hbar^2}{2m}\beta'' + V\beta$$

Max Born je to interpretiral tako, da je ψ^2 verjetnostna gostota za detekcijo delca v volumnu dV. **ψ je verjetnostna amplituda**.

$$|\psi(\vec{r},t)|^2 = \alpha^2(\vec{r},t) + \beta^2(\vec{r},t) = \rho(\vec{r},t)$$

$$dP(\vec{r},t) = \rho dV$$

Kaj pa je $\vec{r}$?

To <u>**ni**</u> koordinata delca. Mi vemo lahko le verjetnost, da pri $\vec{r}$ detektiramo delec [Poglej sliko]. Ta enačba nič nima z delcem, ampak samo z verjetnostjo izida eksperimenta. **Kvantna mehanika ne opisuje delcev direktno**.

Kontinuitetna enačba za verjetnost

To da delec <u>**je**</u> nekje pravzaprav skrijemo v normalizacijo, ko integriramo po celem prostoru.

$$P = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(\vec{r},t) = 1\,; \quad \forall t$$

Splošno kontinuitetno enačbo poznamo

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = q$$

Preverimo to kontinuitetno enačbo za našo gostoto

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 = \frac{\partial \psi^*}{\partial t}\psi + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

Odvoda izrazimo iz Schrödingerjeve enačbe in iz konjugirane Schrödingerjeve enačbe

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 = -\frac{\hbar^2}{2m(-i\hbar)}\left(\frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2}\right)\psi + \frac{V^*}{-i\hbar}\psi^*\psi + \text{complex conjugate}$$

Poračunajmo

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi^*\right)\psi = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x}\psi\right) - \frac{\partial \psi^*}{\partial x}\frac{\partial \psi}{\partial x}$$

Teko je

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 = -\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\hbar}{2im}\left(\psi^*\frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi\frac{\partial \psi^*}{\partial x}\right)\right) - \frac{2}{\hbar}\mathrm{Im}(V)\,|\psi|^2$$

Prepoznamo člene kot člene kontinuitetne enačbe (divergenca v 1D je le odvod po x). Tako je

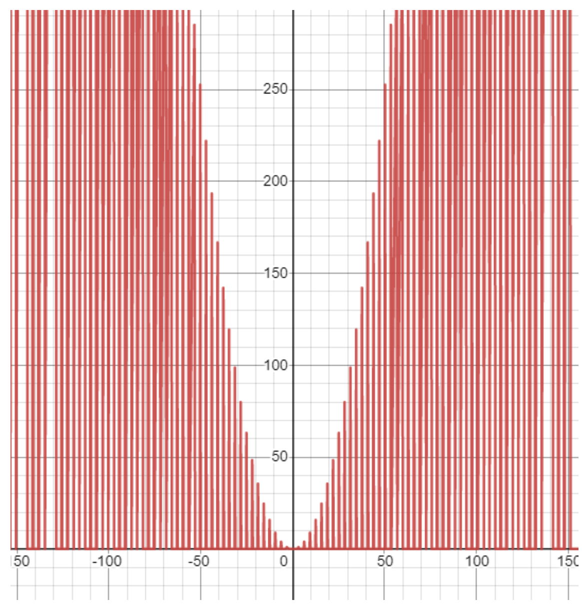
$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2im}\left(\psi^*\frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi\frac{\partial \psi^*}{\partial x}\right)$$

$$q = -\frac{2}{\hbar}\mathrm{Im}(V)\,|\psi|^2$$

V našem primeru, kjer prevzemamo, da je potencial realen potem vedno velja $q = 0$. Če pa bi imeli recimo opravka z optičnim potencialom, bi bil pa ta člen neničelen. Npr. Neidealno steklo, ki absorbira svetlobo in se mu spreminja lomni količnik opišemo z kompleksnim lomnim količnikom.

Lastnosti valovne funkcije

Normalizacija



Vemo, da vedno velja

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = 1; \quad \forall \psi \in \mathbb{C}$$

Ampak kaj pa če funkcija narašča v neskončnosti namesto da pada? Poglejmo primer $\psi = Cx^2 e^{-x^2 \sin^2 x}$. Sinus ima ničle pri $x_n = \pi n$. To dejansko uspemo normirati za $C < \infty$, tudi če funkcija ne gre proti 0 v $\pm\infty$. Sicer pa tipično pa velja

$$\psi(x,t) \to_{|x|\to\infty} 0$$

ker narava tako deluje. Po navadi delujemo v **Schwartzovem prostoru (hitro padajočih funkcij)**. Te padajo hitreje kot vsak polinom.

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^n |\psi|^2 dx \; = C < \infty; \; \forall n$$

Pričakovana vrednost, povprečna vrednost in hitrost težišča porazdelitve

Pričakovano vrednost x izračunamo kot

$$\langle x \rangle = \int x\rho dx = \int \psi^*(x,t) x \psi(x,t)\, dx$$

Poglejmo si sedaj hitrost težišča porazdelitve

$$v_T = \frac{d}{dt}\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}x\psi + \psi^*\frac{\partial x}{\partial t}\psi + \psi^* x\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)dx =$$

Odvode po ψ spet izrazimo iz Schrödingerjeve enačbe. Odvod $\partial x/\partial t$ pa je 0.

$$= \frac{\hbar^2}{2mi\hbar}\int\left(\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}x\psi - \text{complex conjugate}\right)dx = (*)$$

Naredimo vmesni korak in spravimo odvod na prvi odvod

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2} &= \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial x}x\psi\right) - \frac{\partial\psi^*}{\partial x}\psi - \frac{\partial\psi^*}{\partial x}x\frac{\partial\psi}{\partial x}\\ &= \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial x}x\psi\right) - \frac{\partial}{\partial x}(\psi^*\psi) + \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}\left(\psi^* x\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) + \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} + \psi^* x\frac{\partial^*\psi}{\partial x^2}\end{aligned}$$

To lahko potem uporabimo da zapišemo

$$= \frac{\hbar^2}{2i\hbar m}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial x}x\psi - |\psi|^2 - \psi^* x\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)dx + \frac{1}{m}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi\right)dx$$

Zeleno obarvani člen (prvi integral) gre proti 0 v $\pm\infty$. Tako dobimo

$$m\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \int\psi^*\hat{p}\psi\,dx$$

kjer smo uvedli **operator gibalne količine** (to ni od delca ampak kolokvialno tako rečemo)

$$\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \quad \text{oz.}\ \hat{\vec{\psi}} = -i\hbar\nabla$$

To lahko prepišemo z pričakovano vrednostjo operatorja gibalne količine, da dobimo

$$\langle\hat{p}\rangle = m\frac{\partial\langle\hat{x}\rangle}{dt}$$

Operatorji

V kvantni mehaniki vsaki merljivi vrednosti, opazljivki, pripada ustrezen operator. Naj bo $f(z) = \sum_n c_n z^n$ neka analitična funkcija. Definiramo funkcijo **operatorja** kot

$$f(\hat{A}) = \sum_n c_n\hat{A}^n$$

Še posebej preprosto je, ko delujemo na nek lastni vektor $\hat{A}\psi = a\psi$

$$f(\hat{A})\psi = \sum_n c_n\hat{A}^n\psi = \sum_n c_n a^n\psi = f(a)\psi$$

Primer: [Eksponent operatorja]

$$e^{\hat{A}} = 1 + \hat{A} + \frac{1}{2!}\hat{A}^2 + \cdots + \frac{1}{n!}\hat{A}^n + \cdots$$

Primeri nekaj operatorjev

$$\hat{x} = x$$

$$\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

$$\hat{p}^2 = \hat{p}\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right) = (-i\hbar)^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

$$\hat{p}^n = (-i\hbar)^n\frac{\partial^n}{\partial x^n}$$

$$\hat{V} = V(x,t)$$

Definirajmo tu še **Hamiltonov operator**

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}$$

Komutatorji

Imejmo operatorje $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$. **Komutator med $\hat{A}$ in $\hat{B}$** definiramo kot

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

Lastnosti

i) $\left[\lambda\hat{A},\ \hat{B}\right] = \lambda\left[\hat{A}, \hat{B}\right];\quad \lambda \in \mathbb{C}$

ii) $\left[\hat{A},\ \hat{B}\right] = -\left[\hat{B},\ \hat{A}\right]$

iii) $\left[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}\right] = \hat{A}\left[\hat{B}, \hat{C}\right] + \left[\hat{A}, \hat{C}\right]\hat{B}$ (nujno zadaj!)

iv) $\left[\hat{A}, \left[\hat{B}, \hat{C}\right]\right] + \left[\hat{B}, \left[\hat{C}, \hat{A}\right]\right] + \left[\hat{C}, \left[\hat{A}, \hat{B}\right]\right] = 0$

v) **Baker-Hausdorffova lema**

$$e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} = \hat{B} + \left[\hat{A}, \hat{B}\right] + \frac{1}{2!}\left[\hat{A}, \left[\hat{A}, \hat{B}\right]\right] + \cdots + \frac{1}{n!}[\hat{A}, [\hat{A}, [\dots, \hat{B}] \dots] + \cdots$$

Primer: Komutator med $\hat{x}$ in $\hat{p}$

Naj bo $\hat{A} = \hat{x}$ in $\hat{B} = \hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$. Vzamemo splošno funkcijo $f(x)$ in pogledamo, kaj naredi operator.

$$[\hat{x}, \hat{p}]f(x) = x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)f - \left(i\hbar\frac{\partial}{dx}\right)(xf) =$$

$$= -i\hbar\frac{\partial f}{\partial x} + i\hbar f + i\hbar x\frac{\partial f}{\partial x} = i\hbar f$$

Torej smo tako izračunali da velja

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \qquad \text{in} \qquad [\hat{p}, \hat{x}] = -i\hbar$$

V 3D pa velja

$$[\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\alpha] = i\hbar\, \delta_{\alpha\beta}$$

Lastnosti $\hat{p}$ in $\hat{H}$

Naj bosta φ in ψ poljubni funkciji.

Operator $\hat{A} = \frac{\partial}{\partial x}$ je anti-simetričen/anti-hermitski

Za dokaz uporabimo integracijo per partes.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi \left(\frac{\partial}{\partial x}\right) \psi ds = \varphi\psi \,\Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \psi \left(\frac{\partial}{\partial x}\right) \varphi = 0 - \int_{-\infty}^{\infty} \psi \left(\frac{\partial}{\partial x}\right) \varphi$$

To velja, ker za valovne funkcije smo rekli, da grejo proti 0 v $\pm\infty$.

Operator $\hat{A}^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ je simetričen/hermitski

Uporabimo dvakrat isti trik kot prej.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \psi \, dx = 0 - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial x} dx = 0 - \left(- \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} \psi dx \right) = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \varphi\psi \, dx$$

Operator $\hat{p}$ simetričen/hermitski

Uporabimo enkrat isti trik kot prej, kjer tukaj v upoštev pride še kompleksna konjugacija.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi dx = 0 - \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial \varphi^*}{\partial x}\right) (-i\hbar\psi) dx = \int_{\infty}^{\infty} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \varphi\right)^* \psi \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{p}\varphi)^* \psi \, dx$$

Intermezzo: Lastnosti ψ (ne vem zakaj smo to ravno tu še enkrat naredili)

i) **Normalizacija**

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = 1$$

ii) **Zveznosti ψ**

iii) **Zveznost ψ'**

Integrirajmo SE:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \int_a^b \psi dx = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_a^b \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \, dx + \int_a^b V\psi dx$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} (b - a) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \,\Big|_b - \frac{\partial \psi}{\partial x} \,\Big|_a \right) + \psi \int_a^b V dx$$

Sedaj pošljemo $b \to a$

$$0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \big(\psi'(b) - \psi'(a)\big) + \psi \int_a^b V \, dx$$

Vidimo torej, da če je **potencial V zvezen** je **zvezen tudi ψ'.** ψ' ima skok če je $V \propto \delta$ recimo $V(x) \sim \lambda\delta(x)$.

iv) **Zveznost ψ''**

Če ima V **skok** v točki x, **ga ima** tudi ψ''.

Časovni odvod pričakovane vrednosti in Erhenfestov teorem (1927)

Hočemo »kot 2.NZ« za kvantno mehaniko (**<u>Pazi:</u>** obstaja razlika, ampak je velikokrat zanemarljiva).
Imamo $\hat{A}, \psi$ in računamo $\langle \hat{A} \rangle$. Zanima nas odvod.

$$\langle \hat{A} \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi dx$$

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{A} \rangle = \int \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \hat{A} \psi + \psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \psi + \psi^* \hat{A} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) dx$$

Časovne odvode lahko zopet izrazimo iz SE:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi$$

$$\frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi^*$$

Izrazimo odvode in imamo

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{A} \rangle = \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int \left(\left(-\hat{H}\psi \right)^* \hat{A} \psi + \psi^* \hat{A} \hat{H} \psi \right) dx =$$

$\hat{H}$ je **hermitski** operator, torej lahko deluje na levo ali na desno (to spet velja samo za funkcije, ki grejo v neskončnosti proti nič, kar VF so). Tako lahko obrnemo vrstni red v pri zeleno označenem.

$$= \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int \left(\psi^* \hat{A} \hat{H} \psi - \psi^* \hat{H} \hat{A} \psi \right) dx$$

Tu pa prepoznamo pričakovano vrednost komutatorja $[\hat{A}, \hat{H}]$. Tako dobimo torej

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{A} \rangle = \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle$$

$\hat{A} = \hat{x} = x$

Torej imamo

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = 0 + \frac{1}{i\hbar} \left\langle \left[x, \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x,t) \right] \right\rangle$$

Potrebujemo torej komutatorje

$$[x, \hat{p}^2] = \hat{p}[x, \hat{p}] + [x, \hat{p}]\hat{p} = 2i\hbar\hat{p}$$

$$[x, V] = 0$$

Dobimo torej:

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \frac{1}{2m} 2i\hbar \langle \hat{p} \rangle = \frac{1}{m} \langle \hat{p} \rangle$$

$A = \hat{p}$

Zopet

$$\frac{d\langle\hat{p}\rangle}{dt} = m\frac{d^2\langle x\rangle}{dt^2} = 0 + \frac{1}{ih}\left\langle\left[\hat{p}, \frac{\hat{p}^2}{2m} + V\right]\right\rangle$$

Potrebujemo torej komutatorje

$$\left[\hat{p}, \frac{\hat{p}^2}{2m}\right] = 0$$

Za potencial pa vzamemo splošno funkcijo f in preverimo

$$[\hat{p}, \hat{V}]f = (pV - pV)f = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(Vf) - \left(-i\hbar V\frac{\partial}{\partial x}\right)f = -i\hbar\left(\frac{\partial V}{\partial x}\right)f - i\hbar\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)V + i\hbar V\frac{\partial f}{\partial x} =$$

$$= i\hbar\frac{\partial V}{\partial x}f \quad ; \quad \forall f$$

Tako imamo torej

$$\frac{d\langle\hat{p}\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}(-i\hbar)\left\langle\frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle = -\left\langle\frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle$$

Oz. v 3D dobimo **Erhenfestov teorem** kot

$$m\frac{d^2\langle\vec{r}\rangle}{dt^2} = \langle\vec{F}(\vec{r}, t)\rangle; \quad \vec{F}(\vec{r}, t) = -\nabla V(\vec{r}, t)$$

Tu se tudi pozna ključna razlika zakaj to ni nujno 2.NZ. Da bilo to enako kot klasično, bi rabil zadnji člen biti $V(\langle x\rangle)$ in ne $\langle V(x)\rangle$. Sicer sta pa lahko ta, dva zelo podobna in takrat približno velja.

Nedoločenost (širina porazdelitve)

Na podlagi veliko diskretnih meritev lahko dobimo porazdelitev. Širino te verjetnostne porazdelitve zapišemo kot

$$\sigma^2 = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2 = \langle(x - \langle x\rangle)^2\rangle = (\Delta x)^2$$

To ne pomeni, da delec okoli te širine zmedeno frči. Spet nam to nič ne pove o »delcu«. To lahko izračunamo tudi za operator $(\Delta\hat{A})^2 = \langle\hat{A}^2\rangle - \langle\hat{A}\rangle^2$recimo Heisenberg je to naredil za operator gibalne količine. Velja

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2}\left|\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle\right|$$

Tako dobimo **Heisenbergov princip nedoločenosti**

$$\Delta x\, \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

To pomeni, da če bi merili $p, \langle p\rangle, \Delta p$ in potem za drugi delec v isti VF $x, \langle x\rangle, \Delta x$ bi za produkt to veljalo. To nič nima s tem, da »delec« nima definirane lege in hitrosti. Govori o širinah porazdelitev.

Formalizem kvantne mehanike

1. Vektorski prostor; Hilbertov prostor L^2

Za vsak $\psi(\vec{r},t) \in L^2$ obstaja števna baza $\{\varphi_n\}; n \in \mathbb{N}_0$. Možno je sicer tudi $\{\varphi_k\}; k \in \mathbb{R}$ ampak to je potem Banachov in ne Hilbertov prostor.

2. Skalarni produkt

Skalarni produkt med dvema valovnima funkcijama definiramo kot

$$(\varphi,\psi) = (\varphi|\psi) = \langle\varphi,\psi\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^*\psi\, dx$$

kjer $*$ označuje kompleksno konjugacijo (tisti kar bi matematiki tipično s črto označili).

Lastnosti

i) $\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle^*$
ii) $\langle\psi|\psi\rangle \geq 0$
iii) $\langle\psi|\psi\rangle = 0 \Leftrightarrow \psi = 0$
iv) $|\langle\varphi|\psi\rangle|^2 \leq \langle\varphi|\varphi\rangle\langle\psi|\psi\rangle$

3. ket

Za $\psi(x,t) \in L^2$ lahko rečemo, da stanje opišemo z vektorjem v Hilbertovem prostoru L^2. (Ne govorimo, da je to enako kot ψ).

$$|\psi\rangle \in L^2$$

4. Linearni operatorji

Za linearne operatorje mora veljati

$$\hat{A}(\lambda\psi + \mu\varphi) = \lambda\hat{A}\psi + \mu\hat{A}\varphi;\ \ \lambda,\mu \in \mathbb{C}$$

5. bra

Spomnimo se linearnega funkcionala, ki funkcijo oz. vektor preslika v število. Operator, ki iz funkcije naredi število je funkcional. $\psi(x) \in L^2 \quad \hat{f}\psi = z;\ z \in \mathbb{C}$ Rieszov representacijski izrek pravi

$$\forall \hat{f}\psi = z \Rightarrow \exists f_z \in L^2$$

$$z = \int f_z^*(x)\psi(x)dx = \langle f_z|\psi\rangle$$

Linearne funkcionale pišemo z bra.

$$\hat{f}\,\_ = \int f_z^*(x)\,\_\,dx$$

$$\langle f|\ldots|\psi\rangle \to \langle f||\psi\rangle = \langle f|k\rangle \in \mathbb{C}$$

6. Razvoj stanja po dani bazi

Naj bo $\{\varphi_n\}$ (neskončno) števna ortonormirana baza. Zanjo torej velja

$$\int \varphi_n^* \varphi_m dx = \delta_{n,m}$$

Razvoj po bazi naredimo kot

$$\psi(x) = \sum_n c_n \varphi_n(x)$$

Koeficiente lahko dobimo preko ortonormiranosti

$$\int \varphi_m^* \psi \, dx = \sum_n c_n \int \varphi_m^* \varphi_n dx = \sum_n c_n \delta_{n,m} = c_m$$

identiteto lahko zapišemo kot

$$\psi(x) = \sum_n \left(\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^* \dots dx' \right) \varphi_n \psi(x)$$

$$\Rightarrow I = \sum_n \varphi_n \int \varphi_n^*(x') \dots dx'$$

Ponovimo to še »po Diracu«

Bazo zapišemo kot

$$\{|\varphi_n\rangle\} = \{|n\rangle\} \rightarrow |\varphi_n\rangle = |n\rangle$$

Tako je **razvoj po bazi**

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

Za dobiti koeficient množimo z leve z $\langle m|$

$$\langle m|\psi\rangle = \sum_n c_n \langle m|n\rangle = \sum_n c_n \delta_{n,m} = c_m$$

Velja

$$|\psi\rangle = \sum_n \langle n|\psi\rangle |n\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle = \left(\sum_n |n\rangle\langle n| \right) |\psi\rangle$$

Tako je **identiteta** »po Diracu«

$$I = \sum_n |n\rangle\langle n| \, ; \quad I\psi = \psi$$

7. Zapis operatorja v dani bazi

Imejmo operator $\hat{A}|\psi\rangle = |\psi_1\rangle$ in bazo $\{|n\rangle\}$. Vrinemo kompletni sistem v delovanje operatorja

$$\hat{A}|\psi\rangle = I\hat{A}I|\psi\rangle = \sum_m |m\rangle\langle m|\,\hat{A}\sum_n |n\rangle\langle n|\,|\psi\rangle = \sum_{m,n} |m\rangle A_{mn}\langle n|\psi\rangle$$

kjer smo uvedli **matrični element**

$$A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$$

Tako je **zapis operatorja v dani bazi**

$$\hat{A} = \sum_{m,n} |m\rangle A_{mn}\langle n|$$

Konkretno lahko to računamo kot

$$\hat{A}|\psi\rangle = \sum_{m,n} |m\rangle A_{mn}\langle n|\sum_k c_k|k\rangle = \sum_{m,n}|m\rangle A_{mn}c_n = \sum_m d_m|m\rangle = |\psi_1\rangle$$

Matrično pa to pomeni

$$\hat{A}|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \to \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_m \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 \\ \vdots \\ d_m \\ \vdots \end{pmatrix}$$

8. Hermitski ali simetrični operatorji

Simetričnost ali hermitskost pomeni

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

Lastnosti simetričnih operatorjev

i) **Lastne vrednosti so realne**

$$A|\psi\rangle = a|\psi\rangle$$

Pomnožimo to z ψ iz leve

$$\langle\psi|A|\psi\rangle = a\langle\psi|\psi\rangle$$
$$\langle A\psi|\psi\rangle = \langle\psi|A\psi\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle = a\langle\psi|\psi\rangle \in \mathbb{R}$$
$$\Rightarrow a \in \mathbb{R}$$

ii) **Lastni vektorji so med seboj ortogonalni**

Imejmo

$$A|\psi\rangle = a|\psi\rangle$$
$$A|\varphi\rangle = b|\varphi\rangle$$

Križno pomnožimo enačbi iz leve in potem drugo enačbo konjugiramo. Dobimo

$$\langle\varphi|A|\psi\rangle = a\langle\varphi|\psi\rangle \quad (1)$$
$$\langle\psi|A|\varphi\rangle^* = b\langle\varphi|\psi\rangle$$

Člen druge enačbe lahko zapišemo tudi kot (**in take trike se stalno uporablja!**). Pri zelenem enačaju uporabimo lastnost simetričnosti.

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

Torej je druga enačba pravzaprav

$$\langle\varphi|A|\psi\rangle = b\langle\varphi|\psi\rangle \ \ (2)$$

Sedaj pa odštejemo drugo enačbo od prve in dobimo

$$0 = (a - b)\langle\varphi|\psi\rangle$$

Iz tega sledi če $a \neq b$, da je

$$\langle\varphi|\psi\rangle = 0$$

Če so vse lastne vrednosti nekega operatorja realne, ta ni nujno hermitski.

9. Hermitsko adjungirani operator

Imejmo $A, B, |\psi\rangle, |\varphi\rangle$. Za hermitsko adjungirane operatorje velja

$$\langle\varphi|A\psi\rangle = \langle B\varphi|\psi\rangle$$

Po domače povedano je hermitsko adjungirani operator »enak kot A samo na levi v bra«. To označimo z bodalom/dagger (to je tisto kar bi matematiki tipično označili z $*$).

$$B = A^\dagger$$

Lastnosti

Naj bosta A, B operatorja

i) Moženje operatorja s skalarjem

$$A = zB$$

$$\langle A^\dagger\varphi|\psi\rangle = \langle\varphi|A|\psi\rangle = \langle\varphi|zB|\psi\rangle = z\langle\varphi|B|\psi\rangle = z\langle B^\dagger\varphi|\psi\rangle = \langle\psi|B^\dagger|\varphi\rangle^* = \langle z^* B^\dagger\varphi|\psi\rangle$$

$$\Rightarrow \ \ A = zB \quad A^\dagger = z^* B^\dagger$$

ii) $A = |m\rangle\langle n|$

$$\langle\varphi|A|\psi\rangle = \langle\varphi|m\rangle\langle n|\psi\rangle = (\langle\psi|n\rangle\langle m|\varphi\rangle)^* = \langle A^\dagger\varphi|\psi\rangle$$

$$\Rightarrow A^\dagger = |n\rangle\langle m|$$

iii) $(\mu A + \lambda B)^\dagger = \mu^* A^\dagger + \lambda^* B^\dagger$

iv) Produkt operatorjev $(\boldsymbol{AB})^\dagger$

$$\langle\varphi|AB|\psi\rangle = \langle A^\dagger\varphi|B\psi\rangle = \langle B^\dagger A^\dagger\varphi|\psi\rangle$$

$$\Rightarrow (AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$$

v) Projektor (sam sebi adjungiran operator)

$$P_n = |n\rangle\langle n| = P_n^\dagger$$

So idempotentni operatorji

$$P_n^2 = P_n P_n = |n\rangle\langle n|n\rangle\langle n| = P_n; \quad I = \sum_n P_n$$

10. Kako najdemo $A^\dagger$, če poznamo A?

Imejmo operator razvit po bazi

$$A = \sum_{m,n} |m\rangle A_{mn}\langle n|$$

$$A^\dagger = \sum_{m,n} |n\rangle A_{mn}^*\langle m| = \sum_{m,n} |m\rangle A_{nm}^*\langle n|$$

Torej moramo **transponirati in konjugirati** $A_{mn}^\dagger = A_{nm}^*$

11. Sebi adjungirani operatorji

Naj velja

a) $\langle\varphi|A|\psi\rangle = \langle A\varphi|\psi\rangle$ (hermitski simetričen)
b) $A = A^\dagger$
   Mora veljati a) in da sta **domeni enaki** $\mathcal{D}(A) = \mathcal{D}(A^\dagger)$. Tedaj obstaja baza $\{|n\rangle\}$; $A|n\rangle = a_n|n\rangle$

Dva zanimiva primera v zvezku

12. Unitarni operatorji

Za **unitarni operator** velja

$$U^{-1} = U^\dagger$$

$$U^{-1}U = UU^{-1} = I = U^\dagger U = UU^\dagger$$

Lastnosti

i) **Unitarni operatorji ohranjajo skalarni produkt**
   Imejmo
   $$U|\varphi\rangle = |\tilde{\varphi}\rangle; \quad |\varphi\rangle = U^{-1}|\tilde{\varphi}\rangle = U^\dagger|\tilde{\varphi}\rangle$$
   $$U|\psi\rangle = |\tilde{\psi}\rangle; \quad |\psi\rangle = U^{-1}|\tilde{\psi}\rangle = U^\dagger|\tilde{\psi}\rangle$$
   Izračunajmo skalarni produkt
   $$\langle\varphi|\psi\rangle = \langle U^\dagger\tilde{\varphi}|U^\dagger\tilde{\psi}\rangle = \langle\tilde{\varphi}|UU^\dagger|\tilde{\psi}\rangle = \langle\tilde{\varphi}|\tilde{\psi}\rangle$$
ii) **Transformacija oz. zamenjava baze**
   $$\langle\varphi|A|\psi\rangle = \langle U^\dagger\tilde{\varphi}|A|U^\dagger\tilde{\varphi}\rangle = \langle\tilde{\varphi}|UAU^\dagger|\tilde{\psi}\rangle = \langle\tilde{\varphi}|\tilde{A}|\tilde{\psi}\rangle$$
   kjer smo transformirali bazo operatorja kot
   $$\tilde{A} = UAU^\dagger$$
iii) $A = \mu B + \lambda CD$
   Pretransformiramo tako da pomnožimo y U iz leve in $U^\dagger$ iz desne. Dobimo
   $$\tilde{A} = \mu\tilde{B} + \lambda\tilde{C}\tilde{D}$$
iv) Če velja $K = K^\dagger \Rightarrow U = e^{iK}$ je **unitaren**.
   a. $UU^\dagger = e^{iK}e^{-iK} = I$
   b. Imejmo enoparametrični unitarni operator $U(s)$ takrat
   $$\exists K = K^\dagger : U(s) = e^{isK}$$

13. Časovni razvoj kvantnega stanja

Stacionarna stanja

Imejmo stacionarno stanje $H \neq H(t)$. Torej imamo

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) \qquad i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = H\Psi; \quad \Psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r})f(t)$$

$$\Rightarrow i\hbar\psi(\vec{r})\frac{\partial f}{\partial t} = H\psi f$$

To delimo z ψf in dobimo

$$i\hbar\left(\frac{df}{dt}\right)\frac{1}{f} = \frac{1}{\psi}H\psi = konst. = E$$

Leva stran je odvisna samo od t, desna pa samo od x, torej sta strani konstantni.

$$\Rightarrow \Psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r})e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

Velja $|\Psi|^2 = |\psi|^2$ in $H\psi_n(\vec{r}) = E_n\psi_n(\vec{r})$ tvorijo bazo.

Splošno

Imejmo bazo $\{|\varphi_n\rangle\}$. Velja torej $H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle$. Časovni razvoj nekega stanja ψ lahko naredim kot

$$|\psi(t)\rangle\big|_0 = \sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\psi(0)\rangle = \sum_n c_n|\varphi_n\rangle$$

Stanje $|\varphi_n\rangle$ se pa spreminja tako kot smo pokazali pri prejšnji točki. Torej je **časovni razvoj**

$$\Psi(\vec{r},t) = \sum_n c_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}\varphi_n(\vec{r})$$

Unitarni operator časovnega razvoja pa zapišemo kot

$$U(t) = e^{-i\frac{H}{\hbar}t}$$

kjer velja $e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} = e^{-i\frac{H}{\hbar}t}$ ker je to $\exp(H) = \exp(E_n)$ funkcija na operatorju. Torej lahko funkcijo v času razvijemo kot

$$\Psi(\vec{r},t) = e^{-i\frac{H}{\hbar}t}\psi(\vec{r},0)$$

Translacija v času (in posrečeno izpeljava SE)

Translacijo v času naredimo kot

$$U(t_2,t_1) = e^{-i\frac{H}{\hbar}(t_2-t_1)}$$

$$\Psi(\vec{r},t_2) = U(t_2,t_1)\psi(\vec{r},t_1)$$

Poglejmo

$$\delta\Psi(\vec{r},t) = \Psi(\vec{r},t+dt) - \Psi(\vec{r},t) = U(t+dt,t)\Psi(\vec{r},t) =$$

$$= \left(1 - i\frac{H}{\hbar}dt + \mathcal{O}(H^2)\right)\Psi(\vec{r},t) - \Psi(\vec{r},t)$$

$$\Rightarrow \frac{d\Psi(\vec{r},t)}{dt} = -i\frac{H}{\hbar}\Psi(\vec{r},t) \quad \rightarrow i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = H\Psi$$

Torej lahko stacionarno SE izpeljemo samo iz tega, da je časovni razvoj unitaren.

14. Reprezentacija p in x

Spomnimo se Fouriereve transformacije

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(k) e^{ikx} dk$$

$$\tilde{f}(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(x') e^{-ikx'} dx'$$

Vstavimo eno v drugo:

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(x') e^{-ikx' + ikx} dx' dk = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x') f(x') dx'$$

Kjer je **Diracova delta funkcija** (ki ni funkcija, ker sama po sebi ne obstaja)

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \, dk$$

Lastna stanja p

Prosti delec $V(x) = 0$, torej imamo enačbo

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = \frac{\hat{p}^2}{2m} |\psi\rangle$$

Imejmo še lastna stanja operatorja gibalne količine $|\varphi_p\rangle = |p\rangle$

$$\hat{p}|\varphi_p\rangle = p|\varphi_p\rangle; \quad p \in \mathbb{R}$$

Poglejmo osnovno lastno stanje

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \varphi_{p_0}(x) = p_0 \varphi_{p_0}(x) \;\Rightarrow \varphi_{p_0} = C e^{i\frac{p_0}{\hbar}x}$$

Tega stanja ne moremo normirati, da bi določili konstantno. Dirac je predlagal nov način normalizacije takih funkcij, kjer uporabimo integralski zapis funkcije δ in upoštevamo $\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x)$

$$\int_{\infty}^{\infty} \varphi_{p_0}^* \varphi_p dx = \delta(p - p_0) \;\Rightarrow C = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

Torej je osnovno lastno stanje

$$\varphi_{p_0} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{p_0}{\hbar}x}$$

in $\langle p_0|p\rangle = \delta(p - p_0) = \delta(p_0 - p)$. To je primer števne baze.

$$\psi(x) = \int \tilde{\psi}(p) \varphi_p(x) dp$$

$$\tilde{\psi}(p) = \int \psi(x) \varphi_p^*(x) dx$$

Kar to pomeni je, da je FT unitarna operacija. Kljub temu , da so bazni vektorji nenormirani je možno valovno funkcijo normirati saj velja **Parsevalova enačba**

$$\int |\psi|^2 dx = \int |\tilde{\psi}|^2 dp$$

Operatorja x in p se pri FT ravno obrneta (in predznak)

Razvijmo stanje po lastnih stanjih, ki niso več stacionarna za $V(x) \neq 0$, a vseeno tvorijo bazo ($\tilde{\psi}$ je amplituda razvoja)

$$\hat{p}\psi(x) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi(x) = \int \tilde{\psi}(p)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\varphi_p(x)\right)dp = \int \left(p\tilde{\psi}(p)\right)\varphi_p(x)dp$$

Torej to pomeni

$$\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^n \psi(x) = \hat{p}^n\psi(x) = p^n\tilde{\psi}(p)$$

Poglejmo še

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x) = \int \tilde{\psi}(p)x\varphi_p(x)dp =$$

Prepoznamo, da je xe^{xp} isto kot odvod tega po p in tako dobimo

$$= \int \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\tilde{\psi}\right)\varphi_p(x)dp$$

To torej pomeni

$$x^n\psi(x) = \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)^n \tilde{\psi}(p)$$

Torej se pri FT operatorja ravno »obrneta« in še spremeni se predznak.

Lastne funkcije x

$$\hat{x}\psi_0(x) = x\psi_0(x) = x_0\psi_0(x)$$

Razvijemo stanje po lastnih funkcijah in uporabimo prej izpeljano za FT operatorja x

$$x\int \tilde{\psi}(p)\varphi_p(x)dp = \int \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\tilde{\psi}_0(p)\right)\varphi_p(x)dp$$

Torej mora veljati

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\,\tilde{\psi}(p) = x_0\tilde{\psi}(p)$$

Tako je torej FT lastne funkcije koordinate

$$\tilde{\psi}_0(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-i\frac{p}{\hbar}x} = \varphi_p^*(x)$$

Opazimo, da je ravno konjugirano kot osnovno lastno stanje operatorja p. To lahko transformiramo nazaj

$$\psi_0(x) = \int \varphi_p(x_0)\varphi_p(x)dp = \delta(x - x_0)$$

Torej je lastna funkcija koordinate

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

15. Verjetnostni amplitudi $\langle p|\psi\rangle$ in $\langle x|\psi\rangle$

Za operator p

Imejmo $|\psi\rangle \in L^2$. Lahko ga razvijemo po lastnih stanjih operatorja p (ravni vali)

$$|\psi\rangle = \int \tilde{\psi}(p)|p\rangle dp$$

To pomnožimo z $\langle p_1|$

$$\langle p_1|\psi\rangle = \int \tilde{\psi}(p)\langle p_1|p\rangle dp = \int \tilde{\psi}(p)\delta(d - p_1)dp = \tilde{\psi}(p_1)$$

Torej je **verjetnostna amplituda**

$$\tilde{\psi}(p) = \langle p|\psi\rangle \in \mathbb{C}$$

Za operator x

Naredimo analogno in razvijemo po lastnih stanjih p

$$|\psi\rangle = \int \tilde{\psi}(p)|p\rangle dp$$

$$\langle x_0|\psi\rangle = \int \tilde{\psi}(p)\langle x_0|p\rangle dp = \int \tilde{\psi}(p)\varphi_p(x_0)dp = \psi(x_0)$$

Torej je **verjetnostna amplituda**

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle \in \mathbb{C}$$

Alternativen zapis za identiteto

Tako kot smo lahko v števni bazi zapisali identiteto kot $I = \sum_n |n\rangle\langle n|$ lahko to storimo tudi tu z integralom.

$$I = \int |p\rangle\langle p|dp = \int |x\rangle\langle x|dx$$

Torej

$$|\psi\rangle = \int |p\rangle\langle p|\psi\rangle dp = \int \tilde{\psi}(p)|p\rangle dp$$

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

Tu je v zvezku nek primer

16. Kompleten sistem med sabo komutirajočih operatorjev

Imamo A, B in komutirata, to pomeni, da obstaja takšna baza, da je lastna obema hkrati.

$$[A, B] = 0 \Leftrightarrow \exists\{|n\rangle\}: \begin{cases} A|n\rangle = a_n|n\rangle \\ B|n\rangle = b_n|n\rangle \end{cases}$$

To velja tudi v drugo smer. Če najdemo bazo, ki je večim operatorjem lastna potem ti operatorji med sabo komutirajo. To vse velja za tudi več kot 2 operatroja. Vsi skupaj sestavljajo **kompleten sistem operatorjev.**

17. Postulati kvantne mehanike (Kopenhagenska interpretacija)

1. **Kvantni sistem je opisan z vektorjem $|\boldsymbol{\psi}\rangle$ v Hilbertovem prostoru**
2. **Vsaka opazljivka (merljiva količina) je hermitski operator**; $A = A^\dagger$
3. **Pričakovane vrednosti so $\langle \boldsymbol{\psi}|\boldsymbol{A}|\boldsymbol{\psi}\rangle$**
4. **Dinamika (časovni razvoj)**
$$i\hbar\frac{d}{dt} = H|\psi\rangle; |\psi(t)\rangle = U(t,0)|\psi(0)\rangle$$
5. **O meritvi: Pri posamezni meritvi $\boldsymbol{A}$ je rezultat ena od lastnih vrednosti. Verjetnost, da izmerimo natanko neko lastno vrednost je**
$$P_a = |c_a|^2; \;\; c_a = \langle a|\psi\rangle$$
Oz.
$$|\psi\rangle = \sum_n c_n|n\rangle; \quad P_n = |c_n|^2$$
Kolaps valovne funkcije: Po izvedeni meritvi je kvantni sistem v stanju $|\boldsymbol{a}\rangle$ (pripadajoč tisti lastni vrednosti ki smo jo izmerili)

Še en dodatek

$$\int \delta(x - x_0)\delta(x - x_1)dx = \delta(x_1 - x_0)$$

Primer prostega pada

Imejmo potencial, ki ustreza gravitacijskemu $V(x) = mgx$. Rešujemo

$$\frac{\hat{p}^2}{2m}\psi + mgx\psi = E\psi$$

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int \tilde{\psi}(p)e^{i\frac{p}{\hbar}x}dp$$

Transformiranka SE je

$$\frac{p^2}{2m}\tilde{\psi} + mgi\hbar\frac{\partial\tilde{\psi}}{\partial p} = E\,\tilde{\psi}$$

$$\Rightarrow \tilde{\psi}(p) = C\exp\left(\left(\frac{p^3}{6} + mE_p\right)(\hbar g m^2)\right)$$

$$\Rightarrow \psi(x) = Ai(x)$$

Harmonski oscilator

Rešujemo

$$E = H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2$$

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega x^2 =$$

Vzamemo za novo spremenljivko $\xi^2 = \hbar/\omega m$

$$= \frac{1}{2}\hbar\omega\left(\frac{x^2}{\xi^2} - \xi^2\frac{d^2}{dx^2}\right) =$$

Naredimo razliko kvadratov $a^2 - b^2 = (a-b)(a+b)$ ampak pazimo $ab \neq ba$

$$= \frac{1}{4}\hbar\omega\left(\left(\frac{x}{\xi} + \xi\frac{d}{dx}\right)\left(\frac{x}{\xi} - \xi\frac{d}{dx}\right) + \left(\frac{x}{\xi} - \xi\frac{d}{dx}\right)\left(\frac{x}{\xi} + \xi\frac{d}{dx}\right)\right) = (*)$$

Vpeljemo **anhilacijski in kreacijski operator**

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{\xi} + \xi\frac{d}{dx}\right) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x + \frac{i}{m\omega}p\right)$$

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{\xi} - \xi\frac{d}{dx}\right)$$

Z njima lahko izrazimo x in p (oz. odvod po x)

$$x = \frac{\xi}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^\dagger)$$

$$\frac{d}{dx} = \frac{1}{\xi\sqrt{2}}(a - a^\dagger) = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(a^\dagger - a)$$

Tako dobimo

$$(*) = \frac{1}{2}\hbar\omega(aa^\dagger + a^\dagger a)$$

Komutator med a in $a^\dagger$

$$[a, a^\dagger] = aa^\dagger - a^\dagger a = \frac{1}{2}\left(\frac{x}{\xi} + \xi\frac{d}{dx}\right)\left(\frac{x}{\xi} - \xi\frac{d}{dx}\right) - \frac{1}{2}\left(\frac{x}{\xi} - \xi\frac{d}{dx}\right)\left(\frac{x}{\xi} + \xi\frac{d}{dx}\right) =$$

$$= \frac{1}{2}\left(\frac{d}{dx}x - x\frac{d}{dx} + \frac{d}{dx}x - x\frac{d}{dx}\right) = \left[\frac{d}{dx}, x\right] = -\left[x, -\frac{1}{i\hbar}\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)\right] = \frac{1}{i\hbar}[x, p] = 1$$

Torej lahko izrazimo $aa^\dagger = 1 + a^\dagger a$ v **normalnem vrstnem redu.**

Tako je torej **hamiltionian**

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

Operator štetja

$$\hat{n} = a^\dagger a;\ \hat{n}^\dagger = a^\dagger a$$

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

Poiščimo lastne vrednosti

$$\hat{n}|\varphi_\lambda\rangle = \lambda|\varphi_\lambda\rangle \quad \Big| \cdot \langle\varphi_\lambda|$$

$$\langle\varphi_\lambda|\hat{n}|\varphi_\lambda\rangle = \langle\varphi_\lambda|a^\dagger a|\varphi_\lambda\rangle = \langle a\varphi_\lambda|a\varphi_\lambda\rangle = \lambda\langle\varphi_\lambda|\varphi_\lambda\rangle \geq 0$$

Je **pozitivno semidefiniten**. Torej je $\lambda \geq 0$. Ali je $\lambda = 0$ rešitev?

$$a^\dagger a|\varphi_0\rangle = 0$$

$$a|\varphi_0\rangle = 0;\ \ \langle x|\varphi_0\rangle = \varphi_0(x)$$

$$\Rightarrow \left(\frac{x}{\xi} + \xi\frac{d}{dx}\right)\varphi_0(x) = 0$$

$$\Rightarrow\ \varphi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}\xi}} e^{-\frac{1x^2}{2\xi^2}}$$

Torej je rešitev.

Komutatorji z operatorjem štetja

$$[\hat{n}, a^\dagger] = a^\dagger[a, a^\dagger] + [a^\dagger, a^\dagger]a = a^\dagger$$

$$[\hat{n}, a] = a^\dagger[a, a] + [a^\dagger, a]a = -a$$

Kaj dela kreacijski operator?

Viša stanje. Naj bo $\hat{n}|\varphi_\lambda\rangle = \lambda|\varphi_\lambda\rangle$ rešitev.

$$\hat{n}a^\dagger|\varphi_\lambda\rangle = (a^\dagger\hat{n} + a^\dagger)|\varphi_\lambda\rangle = (\lambda+1)a^\dagger|\varphi_\lambda\rangle = (\lambda+1)c_\lambda|\varphi_{\lambda+1}\rangle$$

Vsa cela nenegativna števila so rešitve $\lambda = 0,1,2, \dots, n$. Če je $|\varphi_n\rangle$ normirana rešitev potem je

$$|\varphi_{n+1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n+1}} a^\dagger|\varphi_n\rangle$$

$$|\varphi_n\rangle = \frac{a^\dagger}{\sqrt{n+1-1}}|\varphi_{n-1}\rangle$$

$$\Rightarrow |\varphi_n\rangle \frac{1}{\sqrt{n!}} {a^\dagger}^n |\varphi_0\rangle$$

Kaj dela anhilacijski operator?

Niža stanje.

$$\hat{n}a|\varphi_n\rangle = (a\hat{n} - a)|\varphi_n\rangle = (n-1)a|\varphi_n\rangle = (n-1)c_n|\varphi_{n-1}\rangle$$

$$\frac{a^n}{\sqrt{(n+1)!}}|\varphi_n\rangle = |\varphi_0\rangle$$

Kaj pa necele lastne vrednosti?

Preverimo še ali obstaja za dani n razen $|\varphi_n\rangle$ še kakšno stanje $|\tilde{\varphi}_n\rangle$. Vsekakor mora tudi ta to stanje veljati enačba anihilacijskega operatorja $a^n|\tilde{\varphi}_n\rangle \propto |\tilde{\varphi}_0\rangle$, zato je nedegenerirana energija za vsak $n \in \mathbb{N}$. Pokažimo še, da so lastne vrednosti le cele. Vzemimo $\lambda = n + \nu, 0 < \nu < 1$ in delujemo $(n+1)$-krat na stanje $|\varphi_n\rangle$. V zadnjem koraku lastna vrednost postane negativna, kar smo pa prej pokazali da ne gre.

$$\hat{n}a^{n+1}|\varphi_\lambda\rangle = (\nu - 1)a^{n+1}|\varphi_\lambda\rangle$$

Koordinatna reprezentacija

V koordinatni reprezentaciji so lastne funkcije Hermitovi polinomi pomnoženi z Gaussovo funkcij in jih lahko zgradimo po enačbi

$$\langle x|\varphi_0\rangle = \varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left(\frac{x}{\xi} - \xi\frac{d}{dx}\right)^n \varphi_0(x)$$

Splošen harmonski oscilator

Imejmo $\alpha = 1,2,3$

$$H = \sum_{\alpha=1}^{N}\left(\frac{p_\alpha^2}{2m} + \frac{1}{2}k_\alpha x_\alpha^2\right)$$

$$H = \sum_\alpha \hbar\omega_\alpha\left(\hat{n}_\alpha + \frac{1}{2}\right); \quad \left[a_\alpha, a_\beta^\dagger\right] = \delta_{\alpha\beta}$$

Koherentno stanje

Je stanje LHO, ki najbolj oponaša obnašanje klasičnega harmonskega oscilatorja. Koherentno stanje je lastno stanje anihilacijskega operatorja

$$a|\varphi_\alpha\rangle = \alpha|\varphi_\alpha\rangle; \quad \alpha = e^{i\delta}|\alpha| \in \mathbb{C}$$

Valovni paket

Valovni paket definiramo kot

$$\psi(x,t) = \int \tilde{\psi}(p)e^{\left(i\frac{k}{\hbar}x - i\frac{p^2}{2m\hbar}t\right)}dp$$

Hitrost paketa je skrita v valovni dolžini oz. frekvenci oscilacije znotraj ovojnice. Ko se paket približa neki oviri, se pojavi interferenca. Interferenčne črte dobimo, ker se del valovanja že odbija in interferira z še prihajajočim.

Simetrije (in simetrijske operacije)

Translacija (premik)

$$U(s)\psi(x) = \tilde{\psi}(x) = \psi(x-s) = \psi(x) - s\frac{d}{dx}\psi + \frac{s^2}{2!}\frac{d^2\psi}{dx^2} = \left(1 - s\frac{d}{dx} + \cdots\right)\psi(x)$$

Tako **unitarni operator premika** definiramo kot

$$U(s) = e^{-i\frac{s}{\hbar}p}$$

oz. v splošnem

$$U(\vec{s}) = e^{-i\frac{\vec{s}\cdot\vec{p}}{\hbar}} = e^{iK}$$

kjer je $\vec{p}$ **generator transformacije**.

Kako se spremeni pričakovana vrednost $\langle x \rangle$?

$$\tilde{x} = U^{\dagger}xU = e^{i\frac{sp}{\hbar}}xe^{-i\frac{sp}{\hbar}} =$$

uporabimo Baker-Hausdorfovo lemo

$$= x + \left[\frac{isp}{\hbar}, x\right] + \frac{1}{2}\left[\frac{isp}{\hbar}, \left[\frac{isp}{\hbar}, x\right]\right] + \cdots = x + s$$

$$\langle x \rangle = \langle \tilde{\psi}|x|\tilde{\psi}\rangle = \langle \psi(x-s)|x|\psi(x-s)\rangle = \langle U\psi|x|U\psi\rangle = \langle \psi|U^{\dagger}xU|\psi\rangle = \langle x \rangle\big|_{s=0} + s$$

Rotacija (vrtenje)

Hočemo

$$\tilde{\psi}(\vec{r}) = \psi(\vec{r} - d\vec{r}) =$$

$\vec{\varphi} = \varphi\vec{n}$ in $d\vec{r} = d\varphi\, \hat{n} \times \vec{r}$

$$= \left(I - i\, d\varphi \frac{(\hat{n}\times\vec{r})\cdot\vec{p}}{\hbar} + \mathcal{O}(d\varphi^2)\right)\psi(\vec{r})$$

Torej je

$$U(\varphi) = \lim_{N\to\infty}\left(I - i\frac{\varphi}{N}\frac{(\hat{n}\times\vec{r})\cdot\vec{p}}{\hbar}\right)$$

Velja pa $(\hat{n}\times\vec{r})\cdot\vec{p} = \hat{n}\cdot(\vec{r}\times\vec{p}) = \hat{n}\cdot\vec{L}$ kjer smo definirali **vrtilno količino** $\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p}$. Znana pa je tudi limita $\lim\limits_{N\to\infty}\left(1+\frac{x}{N}\right)^N = e^x$. Tako je torej **unitarni operator rotacije**

$$U(\varphi) = e^{-i\varphi\frac{\varphi\cdot\vec{L}}{\hbar}}$$

Inverzija prostora (parnost)

$$\mathcal{P}f(\vec{r}) \to f(-\vec{r})$$

Torej $\vec{r} \to -\vec{r}, \nabla \to -\nabla, \nabla^2 \to \nabla^2$. Kaj pa $V(\vec{r}) \to V(-\vec{r})$?

Naj velja $V(x) = V(-x)$. V stacionarnem stanju imamo

$$H\psi(x) = E\psi(x)$$

$$\mathcal{P}H\psi = H\mathcal{P}\psi = \mathcal{P}E\psi = E\mathcal{P}\psi$$

Očitno vidimo, da če je ψ rešitev je tudi $\mathcal{P}\psi$. Definiramo lahko

$$\psi_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(\psi(\vec{r}) \pm \psi(-\vec{r})\big)$$

$$\mathcal{P}\psi_\pm = \pm\psi_\pm$$

Če E ni degeneriran (sod potencial?) je ψ soda ***ali*** liha. Vezana stanja imajo energijo, ki ni degenerirana.

Obrat časa

Klasično lahko obrnemo čas čisto preprosto $\frac{d^2\vec{r}(-t)}{d(-t)^2} = \frac{d^2\vec{r}(t)}{dt^2}$. Sicer pa v resnici zaradi entropijskega zakona stvari niso simetrične na čas- Bistvo entropijskega zakona je, da ne moremo obrniti časa.

Poglejmo problem kvantno. Predpostavimo $V(\vec{r})$ in ne $V(\vec{r}, t)$. Rešujemo torej

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r}, t) = H\psi(\vec{r}, t)$$

Sedaj naredimo $t \to -t$ in konjugiramo, kjer predpostavimo $H^* = H$.

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{r}, -t)}{\partial(-t)} = H\psi(\vec{r}, -t) \;\Big|^*$$

$$+i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(\vec{r}, -t) = H\psi^*(\vec{r}, -t)$$

Torej če je $\psi(\vec{r}, t)$ rešitev je tudi $\psi^*(\vec{r}, -t)$. Naj bo torej **operator obrata časa** (oz. operator spremembe smeri gibanja)

$$\tau\psi = \psi^*; \;\; \tau = K$$

$$Kz = z^*K \;\; ; \;\; z \in \mathbb{C}$$

Torej je samo konjugacija. $-t$ **moramo vstaviti ročno!**

$$\psi(\vec{r}, t) \to \tau\psi(\vec{r}, -t)$$

V klasični mehaniki pa ta operator nič ne naredi.

Transformacija ravnega vala

$$\psi_p = e^{\frac{ipx}{\hbar}-\frac{iEt}{\hbar}}$$

$$\tilde{\psi}(x,t) = \tau\psi(x,-t) = e^{-\frac{ipx}{\hbar}-\frac{iEt}{\hbar}}$$

Transformacija stacionarnega stanja $\psi(\vec{r})$

$$H\psi = E\psi \quad \Big| \cdot \tau$$

$$H\tau\psi = \tau H\psi = E\tau\psi$$

Torej če je ψ rešitev je tudi ψ^* spet rešitev. Sestavimo ju lahko skupaj

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi + \psi^*)$$

Če energija ni degenerirana (in je H invarianten na obrat časa (torej ni magnetnih polj)) so rešitve realne in velja

$$\psi = e^{i\delta}\tilde{\psi}; \quad \tilde{\psi} \in \mathbb{R}$$