Souřadnicová a hybnostní reprezentace (vše pro 1D)

- reprezentaci je možné založit i na sadě funkcí, které samy nepatří do Hilbertova prostoru (nejsou normovatelné), ale lze do nich úspěšně rozvíjet
- nejde o bázi prostoru $\mathcal{F}$ (sada do $\mathcal{F}$ nepatří), lze označit termínem nepravá/zobecněná báze

souřadnicová reprezentace – zcela lokalizované bázové funkce $\varphi_{x'}(x) = \delta(x-x')$

hybnostní reprezentace – bázové fce odpovídající volné částici s hybností p: $\varphi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}px}$

(použití – balíky, pohyb částice v elektrickém poli)

- rozvoj – případ se spojitou bází → integrace místo sčítání přes index

a) $\psi(x) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \psi(x')\,\varphi_{x'}(x)\,dx' = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \psi(x')\,\delta(x-x')\,dx'$

souřadnicová reprezentace odpovídá práci přímo s vlnovou funkcí $\psi(x)$ (ta vlastně představuje koeficienty v rozvoji), formalizovat ji má smysl až v kontextu abstraktního Hilb. prostoru

b) vztahy pro hybnostní reprezentaci odpovídají Fourierově transformaci až na záměnu $k \to \frac{p}{\hbar}$:

$$\psi(x) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p)\,\varphi_p(x)\,dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p)\, e^{\frac{i}{\hbar}px}\,dp \qquad \text{analogie zápisu } \psi(x) = \sum_n c_n \varphi_n(x)$$

$$\tilde{\psi}(p) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \varphi_p^*(x)\,\psi(x)\,dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \psi(x)\, e^{-\frac{i}{\hbar}px}\,dx \qquad \text{analogie zápisu } c_n = (\varphi_n, \psi)$$

význam vlnové funkce $\tilde{\psi}(p)$ v hybnostní reprezentaci: $|\tilde{\psi}(p)|^2$ je hustota pravděpodobnosti pro hybnost

to znamená: P (částice vykáže při měření hybnost $\in [p, p+dp]$) $= |\tilde{\psi}(p)|^2\,dp$

Parsevalův teorém $\int\limits_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int\limits_{-\infty}^{\infty} |\varphi(p)|^2 dp$ → hustota pravděpodobnosti $|\tilde{\psi}(p)|^2$ je rovněž normovaná

- ortogonalita báze $\int\limits_{-\infty}^{\infty} \varphi_p^*(x)\,\varphi_{p'}(x)\,dx = \delta(p-p')$ analogie $(\varphi_m, \varphi_n) = \delta_{mn}$

- operátory a SchR v hybnostní reprezentaci a souřadnicové reprezentaci

poloha: $\hat{x}\psi(x) = x\psi(x)$ – v souřadnicové reprezentaci zřejmé

převedeme do hybnostní

$$\hat{x}\tilde{\psi}(p) = \hat{x}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \psi(x)\, e^{-\frac{i}{\hbar}px}\,dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \overbrace{x\psi(x)\, e^{-\frac{i}{\hbar}px}}^{i\hbar\frac{d}{dp}\psi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}px}}\,dx$$

$$= i\hbar\frac{d}{dp}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \psi(x)\, e^{-\frac{i}{\hbar}px}\,dx = i\hbar\frac{d}{dp}\tilde{\psi}(p)$$

hybnost: $\hat{p}\tilde{\psi}(p) = p\tilde{\psi}(p)$ – stejně zřejmé jako $\hat{x}\psi(x) = x\psi(x)$ v souřadnicové repr.

převedeme do souřadnicové

$$\hat{p}\psi(x) = \hat{p}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p)\, e^{\frac{i}{\hbar}px}\,dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} p\tilde{\psi}(p)\, e^{\frac{i}{\hbar}px}\,dp =$$

$$= \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p)\, e^{\frac{i}{\hbar}px}\,dp = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\psi(x) \to \hat{p} \Leftrightarrow \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$$

souhrn: souřadnicová hybnostní Schrödingerova rovnice

$$\psi(x) \longleftrightarrow \tilde{\psi}(p)$$

$$x\,\psi(x) \longleftrightarrow i\hbar \frac{d}{dp}\tilde{\psi}(p) \quad \rightarrow$$

$$\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\psi(x) \longleftrightarrow p\,\tilde{\psi}(p)$$

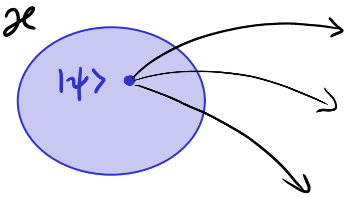
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)$$

$$\left[\frac{p^2}{2m} + V\left(i\hbar\frac{d}{dp}\right)\right]\tilde{\psi}(p,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\psi}(p,t)$$

Pozn.: $V(i\hbar\frac{d}{dp})$ je buď zřejmé, např. pro $V(x) = e\mathcal{E}x \rightarrow \hat{V} = e\mathcal{E}i\hbar\frac{d}{dp}$,

nebo je možné tento výraz uchopit formálně přes Taylorův rozvoj

- Finální ilustrace vztahu prvků abstraktního $\mathcal{H}$ a jejich reprezentací



$|\psi\rangle$ = stav systému

souřadnicová reprezentace $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$

hybnostní reprezentace $\tilde{\psi}(p) = \langle p|\psi\rangle$

reprezentace založená na bázi $\{|n\rangle\}_{n=1}^{\infty}$

vektor koeficientů $c_1, c_2, c_3 \dots \quad c_n = \langle n|\psi\rangle$

bázové funkce

$|x_0\rangle \leftrightarrow \delta(x-x_0)$

$|p\rangle \leftrightarrow \dfrac{e^{\frac{i}{\hbar}px}}{\sqrt{2\pi\hbar}}$

$|n\rangle \leftrightarrow \varphi_n(x)$

Doplněk 1 – „odvození" k hybnostní reprezentaci

a) ověření konzistentnosti vztahů mezi $\psi(x)$ a $\tilde{\psi}(p)$

– dosadíme za $\tilde{\psi}(p)$ ze druhé formule do první a po úpravách by mělo vyjít $\psi(x)$

$$\psi(x) \overset{?}{=} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p)\, e^{\frac{i}{\hbar}px}\, dp = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\left(\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x')\, e^{-\frac{i}{\hbar}px'} dx' \right)}_{\tilde{\psi}(p)} e^{\frac{i}{\hbar}px}\, dp$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \overbrace{\left(\frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar}px}\, e^{-\frac{i}{\hbar}px'} dp \right)}^{F(x-x')} \psi(x')\, dx' = \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{F(x-x')}_{\delta(x-x')} \psi(x')\, dx' = \psi(x)$$

$x \to x-x'$

určení $F(x)$:

$k = p/\hbar$

$K = p_{max}/\hbar$

$$F(x) = \lim_{p_{max}\to\infty} \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-p_{max}}^{+p_{max}} e^{\frac{i}{\hbar}px}\, dp = \lim_{K\to\infty} \underbrace{\frac{1}{2\pi} \int_{-K}^{K} e^{ikx}\, dk}_{\frac{1}{2\pi}\frac{e^{iKx}-e^{-iKx}}{ix} = \frac{1}{\pi}\frac{\sin Kx}{x}} = \lim_{K\to\infty} \frac{1}{\pi}\frac{\sin Kx}{x} = \delta(x)$$

b) obdoba vyjádření úplnosti

$$\sum_n \varphi_n(x)\varphi_n(x') \;\to\; \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_p(x)\, \varphi_p(x')\, dp = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{\frac{i}{\hbar}px}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}px'}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, dp = F(x-x') = \delta(x-x')$$

c) ortogonalita φ_p

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_p^*(x)\, \varphi_{p'}(x)\, dx = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}px}\, e^{\frac{i}{\hbar}p'x}\, dx$$

= totéž jako nahoře se záměnou $x \leftrightarrow p$ $= F(p'-p) = \delta(p-p')$

Doplněk 2 – pokročilá ukázka užitečnosti hybnostní reprezentace

pro $V(x) = e\mathcal{E}x$ se dá ukázat

$$\tilde{\psi}(p,t) = \exp\left\{ -\frac{i}{6\hbar e\mathcal{E}m} \left[(p+e\mathcal{E}t)^3 - p^3 \right] \right\} \tilde{\psi}(p+e\mathcal{E}t), \quad \text{kde } \tilde{\psi}(p) = \tilde{\psi}(p,t=0)$$