1. Matematika kvantové mechaniky

Musíme si uvědomit, že zatímco chování nejmenších částic nelze jednoznačně popsat obvyklým jazykem, řeč matematiky je i nadále postačující... *(Werner Karl Heisenberg)*

1.1 Komplexní čísla

Zopakujte si teorii:

- různé způsoby zápisu (algebraický, goniometrický, exponenciální) a přechody mezi nimi, výpočet velikosti a argumentu
- operace (sčítání, odčítání, násobení, dělení, mocnina, odmocnina) s komplexními čísly v různých tvarech, Moivrova věta
- grafické znázornění čísla a provádění operací graficky
- komplexní sdružení (**značíme hvězdičkou**!), sdružení součtu a součinu, součet, rozdíl a součin sdružených čísel
- komplexní funkce (rozdíl mezi komplexní funkcí reálné proměnné a funkcí komplexní proměnné)

1.1.) Převeďte do všech tvarů (v základním tvaru), určete velikost a argument, číslo komplexně sdružené a zakreslete vše do Gaussovy roviny
a) $z = -2 + 2\sqrt{3}\mathrm{i}$
b) $z = 2\sqrt{3} - 2\mathrm{i}$
c) $z = 2\sqrt{3}\,\left(\cos(\frac{7}{6}\pi) + \mathrm{i}\sin(\frac{7}{6}\pi)\right)$
d) $z = 4\,\left(\cos(\frac{57}{4}\pi) - \mathrm{i}\sin(\frac{57}{4}\pi)\right)$
e) $z = 2\,\mathrm{e}^{\frac{\pi}{2}\mathrm{i}}$

1.2.) Určete hodnotu: i^{23}, $(-\mathrm{i})^{31}$, $(-\mathrm{i})^{-17}$, $\mathrm{e}^{\pi\mathrm{i}}$, $\mathrm{e}^{-\pi\mathrm{i}}$, $\mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}}$, $\mathrm{e}^{\frac{\pi}{2}\mathrm{i}}$, $\mathrm{e}^{\frac{3\pi}{4}\mathrm{i}}$

1.3.) Spočtěte, zjednodušte
a) $\frac{1+\mathrm{i}}{2+\mathrm{i}}$
b) $z_1 \cdot z_2$, $\frac{z_1}{z_2}$, kde $z_1 = 2\mathrm{e}^{\frac{\pi}{6}\mathrm{i}}$, $z_2 = 3\mathrm{e}^{\frac{\pi}{2}\mathrm{i}}$,

1.4.) Mají nějaký speciální tvar či hodnotu následující výrazy?
a) $z + z^*$, b) $z - z^*$, c) zz^*

1.5.) Napište co nejvíce způsobů, jak vyjádřit velikost, reálnou a imaginární složku komplexního čísla z.

1.2 Vztahy pro Kroneckerův a Levi-Civitův symbol

Definice: $\delta_{ij} = 1 \Leftrightarrow i = j$, jinak $\delta_{ij} = 0$

Platí: $\delta_{ij} = \delta_{ji}$, $\qquad \delta_{ii} = 3$, $\qquad \delta_{ij}\delta_{jk} = \delta_{ik}$

Definice: $\epsilon_{123} = \epsilon_{231} = \epsilon_{312} = 1$, $\quad \epsilon_{132} = \epsilon_{321} = \epsilon_{213} = -1$,

v ostatních případech $\epsilon_{ijk} = 0$

Platí: $\epsilon_{ijk} = -\epsilon_{jik}, \epsilon_{iik} = 0$, $\qquad \epsilon_{ijk}\epsilon_{ijk} = 6$, $\qquad \epsilon_{ijk}\epsilon_{ijl} = 2\delta_{kl}$,

$\epsilon_{ijk}\epsilon_{ilm} = \delta_{jl}\delta_{km} - \delta_{jm}\delta_{kl}$

1.3 Operátory, komutátor, hermitovské sdružení

Teorie: definice operátoru, rovnost operátorů (včetně definičních oborů), skládání operátorů, asociativita a komutativita operátorů, definice lineárního operátoru, komutátor, definice hermitovsky sdruženého operátoru a hermitovského operátoru

1.6.) Které z následujících operátorů jsou lineární:
a)$\widehat{A}f = cf$, kde $c \in \mathbb{C}$ $\quad$ b) $\widehat{B}f = f^2$ $\quad$ c) $\widehat{C}f = f^*$ (komplexní sdružení) $\quad$ d) $\widehat{D}f = \frac{df}{dx}$ $\quad$ e) $\widehat{E}f = \frac{d^2f}{dx^2}$ $\quad$ f) $\widehat{F}f = \frac{1}{f}$

1.7.) Vynásobte ($\widehat{A}, \widehat{B}$ jsou lineární): $(\widehat{A} - \widehat{B})(\widehat{A} + \widehat{B})$

1.8.) „Odvoďte vzorečky“ (z definice komutátoru):
$[\widehat{A}, \widehat{A}] =$ $\qquad$ $[\widehat{B}, \widehat{A}] =$ $\qquad$ $[\widehat{A} + \widehat{B}, \widehat{C}] =$
$[\widehat{A}\widehat{B}, \widehat{C}] =$

1.9.) Pomocí vztahů odvozených v předchozí úloze zjednodušte (tak, aby v komutátorech nebyly složené operátory):
$[\widehat{A}, \widehat{A}^2] =$ $\qquad$ $[\widehat{A}, \widehat{A}^n] =$
$[\widehat{A}, \widehat{B}\widehat{C}] =$ $\qquad$ $[\widehat{A}\widehat{B}\widehat{C}, \widehat{D}] =$ $\qquad$ $[\widehat{A}\widehat{B}, \widehat{C}\widehat{D}] =$
$[\widehat{A}, \widehat{B}^2] =$ $\qquad$ $[\widehat{A}, \widehat{B}^n] =$

1.10.) Z definice komutátoru spočtěte:
$[x, \frac{d}{dx}] =$
$[\widehat{x}, \widehat{p}] =$ $\qquad$, kde $\widehat{x} = x, \widehat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}$ (tzv. kanonická komutační relace)

1.11.) Spočtěte: $[\widehat{x}, \widehat{p}^n]$, $[\widehat{x}^n, \widehat{p}]$, $[\widehat{y}, \widehat{p}_x]$.

1.12.) $\widehat{K} = (x\frac{d}{dx})^2$, $\widehat{L} = (\frac{d}{dx}x)^2$. Platí $\widehat{K} = \widehat{L}$?

1.13.) Najděte hermitovsky sdružené operátory k operátorům $\widehat{x}$, $\widehat{A} = \frac{d}{dx}$, $\widehat{p}$.

1.14.) a) Dokažte $(\widehat{A} + \widehat{B})^\dagger = \widehat{A}^\dagger + \widehat{B}^\dagger$ a $(\widehat{A}\widehat{B})^\dagger = \widehat{B}^\dagger \widehat{A}^\dagger$.
b) Spočtěte: $(\widehat{A}\widehat{B}\widehat{C})^\dagger =$

1.4 Vlastní čísla a vlastní vektory matic

Teorie: matice, vektor, determinant, rovnice pro hledání vlastních vektorů, charakteristická rovnice, vlastní číslo, vlastní vektor, násobné vlastní číslo, degenerace, podprostor vlastních vektorů

1.15.) Najděte vlastní čísla a vlastní vektory následujících matic:

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 4 & 1 \end{pmatrix} \qquad B = \begin{pmatrix} 3 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \qquad C = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & 3 & 1 \\ 0 & 5 & -1 \end{pmatrix} \qquad N = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

1.16.) O matici G řádu 2 víme, že má vlastní číslo $g_1 = 3$, kterému přísluší vlastní vektor $\begin{pmatrix} 4 \\ 3 \end{pmatrix}$, a vlastní číslo $g_2 = 2$, kterému přísluší vlastní vektor $\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$. Zkuste najít danou matici (nebo alespoň postup nalezení).

1.17.) Rozhodněte o správnosti či nesprávnosti následujících výroků, všechny se týkají matice M řádu n, vektoru $\vec{v}$ a čísla λ, některé chybné výroky jdou malou úpravou upravit:

a) Vlastní číslo matice je číslo, které se vyskytuje v matici nejčastěji.
b) Vlastní čísla jsou čísla na diagonále příslušné matice.
c) Pro vlastní číslo λ matice M platí $M = \lambda\vec{v}$.
d) Pro vlastní číslo λ matice M platí $M\vec{v} = \lambda\vec{v}$.
e) Pro vlastní číslo λ matice M platí $det(M) = \lambda\vec{v}$.
f) Vlastní čísla hledáme pomocí rovnice $M\vec{v} = \lambda\vec{v}$.
g) Vlastní čísla hledáme pomocí rovnice $det(M) = \lambda$.
h) Každý násobek vlastního čísla je zase vlastním číslem.

Do následujících výroků je vždy třeba něco doplnit, aby byly správné:

i) Každý násobek vlastního vektoru je zase vlastním vektorem.
j) Nedegenerované vlastní číslo má pouze jeden vlastní vektor.
k) Vícenásobné vlastní číslo má více vlastních vektorů.
l) Pokud uvažujeme dva vlastní vektory téže matice, potom součet dvou vlastních vektorů je opět vlastním vektorem.

1.5 Skalární součin

Teorie: definice skalárního součinu, resp. vlastnosti skalárního součinu obecně, definice a vlastnosti skalárního součinu dvou vektorů a jeho výpočet v kartézských souřadnicích, rozdíl mezi skalárním součinem nad reálnými a komplexními čísly

Pozn.: Skalární součin dvou prvků x a y budeme značit $\langle x \mid y \rangle$

1.18.) Rozvažte, zda zobrazení, které dvěma komplexním funkcím $f(x)$ a $g(x)$ reálné proměnné x přiřadí číslo předpisem:

$$\langle f(x) \mid g(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) g(x) \mathrm{d}x$$

je skalární součin, tj. jedná se o definitně pozitivní bilineární formu.

1.19.) Uvažujme skalární součin na prostoru spojitých funkcí jedné reálné proměnné na uzavřeném intervalu $[A, B]$ (uvažujte prostor nad tělesem komplexních čísel) dané předpisem

$$\langle f(x) \mid g(x) \rangle = \int_{A}^{B} f^*(x) g(x) w(x) \mathrm{d}x,$$

kde $w(x)$ je funkce spojitá na intervalu $[A, B]$ (tzv. váhová funkce). Pozn.: A, B mohou být i nekonečna.
a) Rozvažte, zda uvedený předpis vyhovuje definici skalárního součinu. Rozmyslete si, co se změní, pokud by se jednalo o reálné funkce a uvažovali jsme prostor nad reálnými čísly.
b) Uvažujme $w(x) = 1$ a $[A, B] = [-1, 1]$. Spočtěte $\langle 1 \mid x \rangle$, $\langle x \mid x^2 \rangle$, $\langle x \mid \exp x \rangle$. Pokuste se najít trojici navzájem kolmých funkcí.
c) Rozmyslete, zda systém funkcí $1, x, x^2, x^3, x^4, ...$ je ortogonální. Pokud ne, proveďte jeho ortogonalizaci (tzv. Gramm-Schmidtův ortogonalizační proces).
d) Řešte úkoly b) a c) pro $w(x) = \exp(-x^2)$ a $[A, B] = [-\infty, \infty]$.

Poznámka: Pojmenované systémy ortogonálních polynomů, které vzniknou ortogonalizací $1, x, x^2, x^3, x^4, \ldots$. Zvýrazněné jsou ty, které během přednášky potkáme.

polynomy	interval $[a, b]$	$w(x)$
Čebyševovy polynomy 1. druhu	$[-1, 1]$	$(1-x^2)^{-\frac{1}{2}}$
Čebyševovy polynomy 2. druhu	$[-1, 1]$	$\sqrt{1-x^2}$
Gegenbauerovy polynomy	$[-1, 1]$	$(1-x^2)^{\alpha-\frac{1}{2}}$
Legendrovy polynomy	$[-1, 1]$	1
Jacobiho polynomy	$(-1, 1)$	$(1-x)^{\alpha}(1+x)^{\beta}$
Laguerrovy polynomy	$[0, \infty)$	$x^{\alpha}e^{-x}$, $\alpha < -1$
Hermitovy polynomy	$(-\infty, \infty)$	e^{-x^2}