Formalismus kvantové mechaniky

- hlavní prvky

  stavy – vektory z Hilbertova prostoru (princip superpozice)
  veličiny – hermiteovské lineární operátory na H.p.
  } linearita QM !

  reprezentace ve zvolené bázi H.p.: stavové vektory $\leftrightarrow$ vektory koeficientů
  lineární operátory $\leftrightarrow$ matice

1 Stavy a Hilbertův prostor

def.: Hilbertův prostor = úplný vektorový prostor se skalárním součinem

– zavedení provedeme na dvou úrovních: A) prostory vlnových funkcí B) abstraktní prostory stavů

A. Hilbertův prostor kvadraticky integrovatelných funkcí

- kvadraticky integrovatelná komplexní funkce (pro 3D)

$$\psi: \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C} \quad \text{s podmínkou} \quad \int |\psi(\vec{r})|^2 \, d^3\vec{r} < \infty$$

Př. $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ nevyhovuje
$e^{-\alpha r^2}$ vyhovuje

prostor těchto funkcí $\mathcal{L}_2(\mathbb{R}^3)$ splňuje axiomy vektorového prostoru, např.

distribuční zákony $\quad \alpha(\psi_1+\psi_2) = \alpha\psi_1 + \alpha\psi_2 \quad\quad (\alpha+\beta)\psi = \alpha\psi + \beta\psi$

vynecháme fyzikálně nevhodné funkce (nespojité apod.), vznikne tak prostor $\mathcal{F}$

- na prostoru $\mathcal{F}$ je zaveden skalární součin

$$(\psi_1, \psi_2) \overset{\text{def}}{=} \int \psi_1^*(\vec{r})\, \psi_2(\vec{r})\, d^3\vec{r} \quad \in \mathbb{C}$$

s vlastnostmi a) $(\psi_3, \psi_1+\psi_2) = (\psi_3,\psi_1) + (\psi_3,\psi_2)$ b) $(\psi_1, \alpha\psi_2) = \alpha(\psi_1,\psi_2)$

c) $(\psi_1,\psi_2) = (\psi_2,\psi_1)^*$ d) $(\psi,\psi) \geq 0$ e) $(\psi,\psi) = 0 \iff \psi = 0$

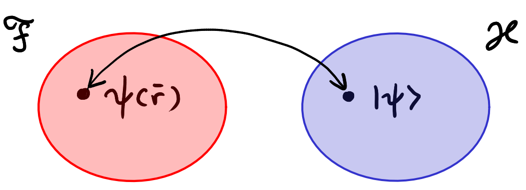
- prostor musí být úplný (viz doplněk 1)

Pozn.: Čas je chápán jako vnější parametr, struktura Hilb. prostoru se týká prostorové závislosti

B. Abstraktní Hilbertův prostor a Diracova symbolika

– s konkrétním systémem je svázaný abstraktní prostor stavů se strukturou Hilbertova prostoru
(motivace: mocnější než popis vlnovými funkcemi, nezbytné pro uchopení spinu, kvant. počítače ...)

– pro částici popsanou vlnovou funkcí zavedeme abstraktní Hilb. prostor isomorfismem:



$\mathcal{F}$ – Hilbertův prostor kvadrat. integ. funkcí (s dodatečnými fyzikálními omezeními)

$\mathcal{H}$ – abstraktní Hilbertův prostor stavů

$|\psi\rangle$ – Diracovo abstraktní označení stavu (reprezentovaný vlnovou funkcí $\psi(\vec{r})$) tzv. ket vektor skalární součin se přenáší mezi prostory:

$$\int \psi^*(\vec r)\,\eta(\vec r)\,d^3\vec r = (|\psi\rangle, |\eta\rangle) \qquad \psi(\vec r), \eta(\vec r) \in \mathcal{F}, \quad |\psi\rangle, |\eta\rangle \in \mathcal{H}$$

- duální prostor $\mathcal{H}^*$ (pomůcka pro elegantní zápis skal. součinů apod.)
  - v $\mathcal{H}^*$ žijí tzv. bra vektory $\langle\psi|$ odvozené od prvků $\mathcal{H}$ tak, že platí $\langle\psi|\eta\rangle = (|\psi\rangle, |\eta\rangle)$
  - matematicky jde o lineární funkcionály
  - prakticky se dá $\langle\psi|$ chápat jako přiložení $\psi^*(\vec r)$ s následnou integrací při setkání s ket vektorem opatřeným správně orientovaným „uzavíracím zobáčkem" – uzavře se bra-ket

    ve vlnových funkcích $\langle\psi|\eta\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(\vec r)\,\eta(\vec r)\,d^3\vec r$ $\qquad$! $|\varphi\rangle\langle\psi|$ má ovšem zcela jiný význam
  - při využívání korespondence mezi bra a kety je třeba zohlednit vlastnosti skalárního součinu

$$c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle \longrightarrow c_1^*\langle\psi_1| + c_2^*\langle\psi_2|$$

- báze Hilbertova prostoru (pozn. zde bude diskrétní báze, později narazíme i na spojité)
  - minimální sada $\{\varphi_n\}_{n=1}^{\infty}$ prvků $\mathcal{F}$, kterou lze vyjádřit libovolný prvek $\mathcal{F}$ jako lineární kombinaci $\psi(\vec r) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n(\vec r)$ (báze je úplná)

    analogicky v $\mathcal{H}$: báze $\{|n\rangle\}_{n=1}^{\infty}$ umožňuje vyjádření libovolného $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ jako $|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n|n\rangle$
  - ortonormální báze splňuje $(\varphi_m, \varphi_n) = \int \varphi_m^*(\vec r)\,\varphi_n(\vec r)\,d^3\vec r = \delta_{mn} = \begin{cases} 1 & m = n \\ 0 & m \neq n \end{cases}$

    v Diracově symbolice pro $\mathcal{H}$: $\langle m|n\rangle = \delta_{mn}$

Př. ortonormální báze Hilb. prostoru nekonečně hluboké jámy (viz prezentace)

! Nebude-li řečeno jinak, budeme pracovat s ortonormálními bázemi (z praktických důvodů)

- reprezentace – zvolíme bázi v Hilbertově prostoru a v ní vyjádříme stavy jako vektory koeficientů (a později operátory jako matice)

$$\psi(\vec r) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n(\vec r) \quad \rightarrow \quad \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

- rozklad stavu do ortonormální báze

  $\psi(x) = \sum_n c_n \varphi_n(x)$ nebo podle Diraca $|\psi\rangle = \sum_n c_n|n\rangle$

  koeficienty rozkladu $c_n = (\varphi_n, \psi) = \int \varphi_n^*(\vec r)\,\psi(\vec r)\,d^3\vec r$ nebo $c_n = \langle n|\psi\rangle$

  ověření: $(\varphi_n, \sum_{n'} c_{n'}\varphi_{n'}) = \sum_{n'} c_{n'} \underbrace{(\varphi_n, \varphi_{n'})}_{\delta_{nn'}} = c_n$

  v Diracově symbolice $\langle m|\psi\rangle = \langle m| \sum_n c_n|n\rangle = \sum_n c_n \overbrace{\langle m|n\rangle}^{\delta_{mn}} = c_m$

- skalární součin

  přibereme $\eta(x) = \sum_n d_n \varphi_n(x)$ nebo $|\eta\rangle = \sum_n d_n|n\rangle$, potom

$$(\psi, \eta) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\,\eta(x)\,dx = \left(\sum_n c_n\varphi_n, \sum_{n'} d_{n'}\varphi_{n'}\right) = \sum_n \sum_{n'} c_n^* d_{n'} \overbrace{(\varphi_n, \varphi_{n'})}^{\delta_{nn'}} = \sum_n c_n^* d_n$$

$$\langle\psi|\eta\rangle = \left(\sum_m c_m^* \langle m|\right)\left(\sum_n d_n |n\rangle\right) = \sum_m\sum_n c_m^* d_n \langle m|n\rangle = \sum_n c_n^* d_n = \langle\eta|\psi\rangle^*$$

vektorový zápis téhož

$$\psi(x) \to \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \\ \vdots \end{pmatrix} \qquad \eta(x) \to \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ d_4 \\ \vdots \end{pmatrix} \qquad (\psi,\eta) = (c_1^* \; c_2^* \; c_3^* \; c_4^* \dots) \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ d_4 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

- normování

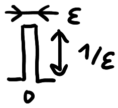
$(\psi,\psi) = \int \psi^*(\vec r)\psi(\vec r)\, d^3\vec r = \int |\psi(\vec r)|^2 d^3\vec r = 1$ nebo diracovsky $\langle\psi|\psi\rangle = 1$

provedení skalárního součinu v bázi $\to \sum_n c_n^* c_n = \sum_n |c_n|^2 = 1$

- Formální vyjádření úplnosti báze – příspěvky do ψ musí složit celé ψ:

$$\psi(\vec r) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n(\vec r) = \sum_{n=1}^{\infty} \int \varphi_n^*(\vec r\,')\psi(\vec r\,')\, d^3\vec r\,' \varphi_n(\vec r) = \int \sum_{n=1}^{\infty} \varphi_n(\vec r)\varphi_n^*(\vec r\,')\psi(\vec r\,')\, d^3\vec r\,'$$

$$\to \sum_{n=1}^{\infty} \varphi_n(\vec r)\varphi_n^*(\vec r\,') = \delta(\vec r - \vec r\,') \qquad \int \delta(\vec r - \vec r\,')\psi(\vec r\,')\, d^3\vec r\,' = \psi(\vec r)$$

Diracova δ-funkce $\delta(x)$: limita 

pro $\varepsilon \to 0$ $\to \int \delta(x)\, dx = 1$

2 Fyzikální veličiny a operátory

- definice nejprve pro prostor vlnových funkcí $\mathfrak{F}$

operátor $\hat A$ – zobrazení $\psi \in \mathfrak{F} \longrightarrow \hat A\psi \in \mathfrak{F}$

(Pozn. některé operátory v kombinaci s určitým ψ nedají kvadraticky integ. fci, pak je třeba rozšířit)

lineární operátor splňuje $\hat A(\alpha\psi_1 + \beta\psi_2) = \alpha\hat A\psi_1 + \beta\hat A\psi_2$

- definice složených operací

součin operátorů $\hat C = \hat A\hat B$: $\hat C\psi = \hat A(\hat B\psi)$ pořadí působení je závazné!

komutátor operátorů $[\hat A,\hat B] = \hat A\hat B - \hat B\hat A$

- významné operátory

a) jednotkový operátor $\hat 1$ (identita): $\hat 1\psi(x) = \psi(x)$

b) operátor polohy $\hat x$: $\hat x\psi(x) = x\psi(x)$

c) operátor kinetické energie $\hat T$: $\hat T\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)$ (z 1D Schrödingerovy rovnice)

$\hat T\psi(\vec r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec r)$ (ve 3D)

d) operátor celkové energie – v analogii s teoretickou mechanikou nazývaný Hamiltonián $\hat H = \hat T + \hat V$

$\hat H\psi(x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\psi(x)$ operátorový zápis stac. Sch.r. $\hat H\Psi = E\Psi$

(analogicky ve 3D) operátorový zápis nestac. Sch.r. $\hat H\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi$

e) operátor hybnosti $\hat{p}$: vyvodíme ze vztahu mezi hybností a kinetickou energií $T = \frac{p^2}{2m}$

$$\hat{p}\,\psi(x) = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\psi(x)$$ ověření $\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right) = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2\frac{d^2}{dx^2} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$

$$\hat{p}\,\psi(\vec{r}) = \frac{\hbar}{i}\nabla\psi(\vec{r}) = \Big(\underbrace{\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}}_{\hat{p}_x}, \underbrace{\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}}_{\hat{p}_y}, \underbrace{\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}}_{\hat{p}_z}\Big)\psi(\vec{r})$$ vektorový operátor se třemi komponentami

f) operátor parity $\hat{\Pi}$: $\hat{\Pi}\,\psi(x) = \psi(-x)$

- střední hodnoty $\langle\hat{A}\rangle \overset{\text{def}}{=} (\psi, \hat{A}\psi) = \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\,\hat{A}\,\psi(x)\,dx$

Př. $\langle\hat{x}\rangle = (\psi, \hat{x}\psi) = \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\,x\,\psi(x)\,dx = \int_{-\infty}^{\infty} x\,|\psi(x)|^2\,dx$ (jako dříve)

$\langle\hat{p}\rangle = (\psi, \hat{p}\psi) = \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\,\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\,\psi(x)\,dx$ (novinka)

střední hodnota energie $\langle\hat{H}\rangle = (\psi, \hat{H}\psi) = \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\psi(x)\,dx$

pro stacionární / vlastní stav $\hat{H}\psi = E\psi \;\rightarrow\; \langle\hat{H}\rangle = E$

- operátory v abstraktním formalismu

  – operují na prvcích z $\mathcal{H}$ a vydávají opět prvek z $\mathcal{H}$: ket $|\psi\rangle$ → ket $\hat{A}|\psi\rangle$

Př. zápis Schrödingerovy rovnice stac.: $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ nestac.: $\hat{H}|\psi\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle$

zápis střední hodnoty $\langle\hat{A}\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$ znamená $(|\psi\rangle, \hat{A}|\psi\rangle) = \int\psi^*(\vec{r})\,\hat{A}\,\psi(\vec{r})\,d^3\vec{r}$

- reprezentace operátoru v bázi

vstupní stav rozložený do báze: $\psi(x) = \sum_n c_n\varphi_n(x)$

výsledek působení operátoru $\hat{A}$ na $\psi(x)$ opět rozložíme do báze:

$$\eta(x) = \hat{A}\psi(x) = \sum_m d_m\varphi_m(x) \quad \text{s koeficienty} \quad d_m = (\varphi_m, \eta) = (\varphi_m, \hat{A}\psi)$$

linearita umožní další úpravy: linearita $\hat{A}$ linearita skal. součinu

$$d_m = \Big(\varphi_m, \hat{A}\sum_n c_n\varphi_n\Big) = \Big(\varphi_m, \sum_n c_n\hat{A}\varphi_n\Big) = \sum_n \underbrace{(\varphi_m, \hat{A}\varphi_n)}_{\text{maticový prvek } A_{mn}} c_n = \sum_n A_{mn}c_n$$

→ působení operátoru $\hat{A}$ reprezentováno maticovým násobením:

koeficienty rozkladu $\hat{A}\psi(x)$: $\eta(x) = \hat{A}\psi(x) = \sum_m d_m\varphi_m(x)$ →

$$\begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & \cdots \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

← koeficienty rozkladu $\psi(x)$: $\psi(x) = \sum_n c_n\varphi_n(x)$

maticové prvky pomocí vlnových funkcí a v Diracově formalismu

$$A_{mn} = (\varphi_m, \hat{A}\varphi_n) = \int_{-\infty}^{\infty}\varphi_m^*(x)\,\hat{A}\,\varphi_n(x)\,dx \qquad A_{mn} = (|m\rangle, \hat{A}|n\rangle) = \langle m|\hat{A}|n\rangle$$

Doplněk 1 – k úplnosti Hilb. prostoru

úplný prostor – každá Cauchyovská posloupnost má limitu v tomto prostoru
(pro $\mathcal{L}_2$ důsledek Rieszova – Fischerova teorému)

Cauchyovská posloupnost – členy posloupnosti se k sobě blíží libovolně blízko ve smyslu skal. souč.

$$\forall \varepsilon > 0 \quad \exists n_0 \in \mathbb{N} \quad \forall m, n \geq n_0 : \quad (\psi_m - \psi_n, \psi_m - \psi_n) < \varepsilon$$

Doplněk 2 – reprezentace operátoru odvozená s využitím Diracova formalismu

výchozí stav vyjádříme v bázi $|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$

působení operátoru na $|\psi\rangle$ rozložíme do báze $\hat{A}|\psi\rangle = \sum_m d_m |m\rangle$ pomocí $d_m = \langle m|\hat{A}|\psi\rangle$

dohromady

$$d_m = \langle m|\hat{A}\left(\sum_n c_n|n\rangle\right) \overset{\text{linearita } \hat{A}}{=} \langle m|\left(\sum_n c_n \hat{A}|n\rangle\right) \overset{\text{linearita skal. součinu}}{=} \sum_n c_n \langle m|\hat{A}|n\rangle$$

stejné maticové násobení jako dříve $d_m = \sum_n A_{mn} c_n$ s maticovými prvky $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$

matice operátoru

$$\hat{A} \rightarrow \begin{pmatrix} \langle 1|A|1\rangle & \langle 1|A|2\rangle & \cdots \\ \langle 2|A|1\rangle & \langle 2|A|2\rangle & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$