

Postuláty kvantové mechaniky

Formální příprava ①, ②, ③ postuláty ④

① Lineární operátory s dodatečnými vlastnostmi

- samosdružené (hermiteovské) operátory - budou odpovídat fyz. veličinám

definice: operátor $\hat{A}^+$ (hermitovský) sdružený k operátoru $\hat{A}$ splňuje

$$(\eta, \hat{A}\psi) = (\hat{A}^+\eta, \psi) \text{ pro všechny dvojice } \psi, \eta$$

převod do Diracovy notace $\langle \eta | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \hat{A}^+ \eta | \psi \rangle$

důsledek vlastnosti skalárního součinu $\langle \chi | \eta \rangle^* = \langle \eta | \chi \rangle$

$$\langle \eta | \hat{A} | \psi \rangle^* = \langle \hat{A}^+ \eta | \psi \rangle^* \rightarrow \langle \hat{A} \psi | \eta \rangle = \langle \psi | \hat{A}^+ \eta \rangle \text{ tj. bra vektor k } \hat{A} | \psi \rangle \text{ je } \langle \psi | \hat{A}^+ \text{ (umožňuje operátorem působit „nalevo“)}$$

další vlastnosti: $(\hat{A}^+)^+ = \hat{A}$ $(\lambda \hat{A})^+ = \lambda^* \hat{A}^+$ $(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+ \hat{A}^+$ apod. pro více

samosdružený (hermiteovský) operátor $\hat{A}^+ = \hat{A}$

z definice $\hat{x}^+$

Př. operátor polohy je hermiteovský $(\eta, \hat{x}\psi) = \int_{-\infty}^{\infty} \eta^*(x) x \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} [x \eta(x)]^* \psi(x) dx = (\hat{x}\eta, \psi)$

Př. operátor hybnosti je hermiteovský $(\eta, \hat{p}\psi) = \int_{-\infty}^{\infty} \eta^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi(x) dx$ per partes integrace
 $= [\dots]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \eta^*(x) \right] \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \eta(x) \right]^* \psi(x) dx = (\hat{p}\eta, \psi) \rightarrow \hat{p}^+ = \hat{p}$

Př. Hamiltonián částice v potenciálu je hermiteovský $\hat{H}^+ = \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \right]^+ = \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \right] = \hat{H}$
s využitím $(\hat{p}\hat{p})^+ = \hat{p}^+ \hat{p}^+ = \hat{p}^2$

- unitární operátory

definice: unitární operátor $\hat{U}$ splňuje $\hat{U}^+ \hat{U} = \hat{U} \hat{U}^+ = \hat{1} \rightarrow \hat{U}^{-1} = \hat{U}^+$

- zachovává skalární součin: $|\psi'\rangle = \hat{U}|\psi\rangle$, $|\eta'\rangle = \hat{U}|\eta\rangle$

$$\langle \psi' | \eta' \rangle = \langle \hat{U}\psi | \hat{U}\eta \rangle = \langle \psi | \hat{U}^+ \hat{U} | \eta \rangle = \langle \psi | \eta \rangle$$

- typicky operace symetrie (otočení, posunutí) a časový vývoj

- vlastnosti odpovídajících matic

- hermiteovské operátory reprezentovány hermiteovskými maticemi

ověření: maticový prvek $A_{mn} = \langle m | \hat{A} | n \rangle$ ← rovnost díky $\hat{A}^+ = \hat{A}$
odpovídající prvek hermiteovsky sdružené matice
 $(A^+)_{mn} = (A^T)^*_{mn} = A^*_{nm} = \langle n | \hat{A} | m \rangle^* = \langle \hat{A} m | n \rangle = \langle m | \hat{A}^+ | n \rangle$

- unitární operátory reprezentovány unitárními maticemi

2) Spektrální věta

$\hat{A}$ je hermiteovský operátor, jeho vlastní vektory mohou být dvojího druhu (i současně)

1) vlastní vektory z Hilbertova prostoru $\mathcal{H}$ $\hat{A}|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle$ (diskrétní spektrum)

2) nepravé vlastní vektory mimo $\mathcal{H}$ $\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$ (spojité spektrum)
(nelze normovat)

(ne)degenerovaná vlastní hodnota - (ne)přísluší jí více nezávislých vlastních vektorů

Pr. konečně hluboká jáma, hledáme vlastní stavy $\hat{H} : \hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ stacionární SchR



1) několik vázaných stavů s energiemi $E_n < V_0$ (nedegenerované)

2) nekonečně mnoho rozptylových stavů s $E > V_0$ (2x degenerované)

tvrzení:

- všechny vlastní hodnoty jsou reálné tj. $a_n, a \in \mathbb{R}$
- vlastní vektory příslušné různým vlastním hodnotám jsou ortogonální
- vlastní vektory z obou částí spektra tvoří úplný soubor
- (zobecněnou) bázi Hilbertova prostoru

bodů a) a b) snadno ověříme (s notací vycházející ze stac. SchR):

Ad a) na $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ aplikujeme $\langle\psi| \rightarrow \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle = E\langle\psi|\psi\rangle$

cehou rovnici komplexně sdružíme $\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle^* = E^*\langle\psi|\psi\rangle^* \rightarrow \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle = E^*\langle\psi|\psi\rangle$

rozdíl $0 = (E - E^*)\langle\psi|\psi\rangle \rightarrow E$ je reálné

Ad b) dva vlastní vektory $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ splňující $\hat{H}|\psi_1\rangle = E_1|\psi_1\rangle$ a $\hat{H}|\psi_2\rangle = E_2|\psi_2\rangle$

na druhou rovnici aplikujeme $\langle\psi_1| \rightarrow \langle\psi_1|\hat{H}|\psi_2\rangle = E_2\langle\psi_1|\psi_2\rangle \rightarrow E_1\langle\psi_1|\psi_2\rangle = E_2\langle\psi_1|\psi_2\rangle$

$$\langle\hat{H}^\dagger\psi_1| = \langle\hat{H}\psi_1| = E_1\langle\psi_1|$$

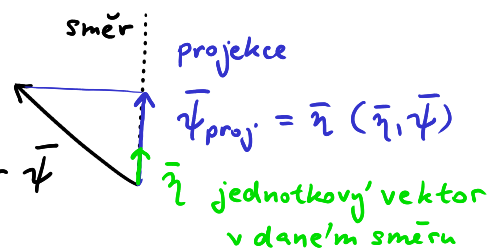
$\rightarrow$ pokud se E_1 a E_2 liší, musí být $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0$

3) Projektoř

- operátory extrahující komponentu stavového vektoru v určitém „směru“

$\hat{P}_\eta = |\eta\rangle\langle\eta|$... projektor na $|\eta\rangle$
(vyžaduje normovanost $\langle\eta|\eta\rangle = 1$)

2D analogie:



působení na stavový vektor $\hat{P}_\eta|\psi\rangle = |\eta\rangle\langle\eta|\psi\rangle$ odpovídá $\eta(x) \int_{-\infty}^{\infty} dx' \eta^*(x') \psi(x')$
dodá směr určí délku projekce

- sčítáním projektorů lze vytvořit projektory na rozsáhlejší podprostory Hilb. prostoru
- sečtením projektorů na úplnou sadu nezávislých vektorů (bázi) získáme jednotkový oper.

→ relace úplnosti: $\sum_n |n\rangle\langle n| = \hat{1}$ zachovává libovolné $|\psi\rangle$, tudíž $\hat{1}$

$$\text{ověření } |\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle = \sum_n \langle n|\psi\rangle |n\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n|\psi\rangle = \left(\sum_n |n\rangle\langle n|\right) |\psi\rangle$$

- vyjádření úplnosti v případě s diskrétním + spojitým spektrem (neřešíme degeneraci)

$$\text{rozklad } |\psi\rangle : |\psi\rangle = \sum_n |a_n\rangle \langle a_n|\psi\rangle + \int |a\rangle \langle a|\psi\rangle da \rightarrow \hat{1} = \sum_n |a_n\rangle \langle a_n| + \int |a\rangle \langle a| da$$

- analogicky lze konstruovat

$$\text{spektrální reprezentaci operátoru } \hat{A} = \sum_n a_n |a_n\rangle \langle a_n| + \int a |a\rangle \langle a| da$$

4 Formulace postulatů

I. **Stav systému** je reprezentován normovaným vektorem z příslušného Hilbertova prostoru $\mathcal{H}$.

II. **Pozorovatelné veličiny** odpovídají samosdruženým / hermiteovským operátorům působícím na $\mathcal{H}$.

III. **Možnými výsledky měření** veličiny A jsou pouze vlastní hodnoty příslušného operátoru $\hat{A}$ dané řešením vlastního problému $\hat{A}|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle$.

Bezprostředně po měření s výsledkem a_n se systém nachází ve vlastním stavu příslušném a_n

(je-li nedegenerovaná) nebo v normované projekci na podprostor příslušný a_n (je-li degenerovaná):

$$|\psi\rangle \rightarrow \text{normovaný } \hat{P}_{a_n}|\psi\rangle = \frac{\hat{P}_{a_n}|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|\hat{P}_{a_n}|\psi\rangle}} \quad (\text{redukce / kolaps stavu při měření})$$

IV. **Pravděpodobnosti naměření** jednotlivých vlastních hodnot ve stavu $|\psi\rangle$ jsou dány

$$P(a_n) = |\langle a_n|\psi\rangle|^2 \quad \text{pravděpodobnosti pro diskrétní spektrum}$$

(v degenerovaném případě sčítáme P přes degenerované vektory)

V. **Časový vývoj** systému je popsán Schrödingerovou rovnicí $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$

Poznámky:

- později bude doplněno postulováním spinu a vlastností nerozlišitelných částic

Ad I.) přiřazení stavů prvkům Hilbertova prostoru přináší princip superpozice

Ad II.) konstrukce operátorů - nahrazení souřadnic a hybností v klasickém výrazu operátory

$$\text{Př. Hamiltonián 1D harmonického oscilátoru } \hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2$$

$$\text{z-složka momentu hybnosti: } \hat{L}_z = \hat{x} \hat{p}_y - \hat{y} \hat{p}_x$$

velmi zřídka je ještě třeba zajistit hermiteovskost podle vzoru $\hat{A} \rightarrow \frac{1}{2}(\hat{A} + \hat{A}^\dagger)$

Př. Runge-Lenz-Pauli vektor při řešení atomu vodíku

klasicky: $\vec{A} = \frac{1}{m} \vec{p} \times \vec{L} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\vec{r}}{r}$ v QM: $\hat{A} = \frac{1}{2m} (\hat{\vec{p}} \times \hat{\vec{L}} - \hat{\vec{L}} \times \hat{\vec{p}}) - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{\hat{\vec{r}}}{r} \right)$

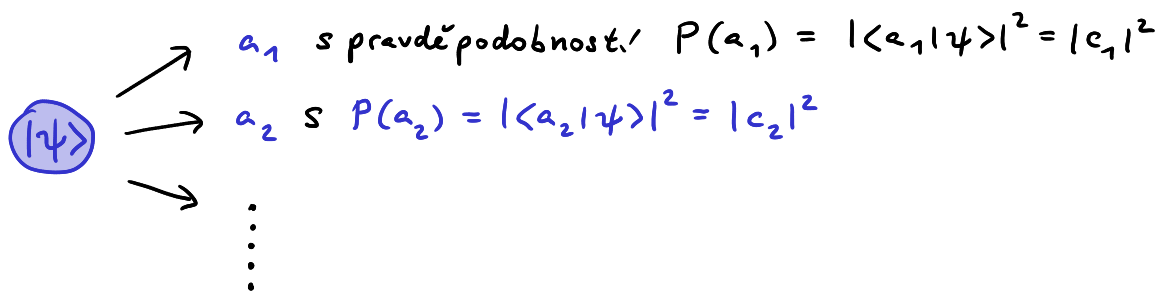
Ad IV.) - pro spojité spektrum by se zaváděla hustota pravděpodobnosti, pro kombinované by bylo třeba zapojit obě varianty

- alternativní formulace: průměrný výsledek měření je střední hodnota $\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$ (z této formulace vyplývají výroky o pravděpodobnostech ve všech variantách)

- souvislost $\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$ s postulovaným $P(a_n) = |\langle a_n | \psi \rangle|^2$:

vl. stavy $\hat{A}$ tvoří ortonorm. bázi $\rightarrow |\psi\rangle = c_1 |a_1\rangle + c_2 |a_2\rangle + \dots$,
kde $c_n = \langle a_n | \psi \rangle$

možné výsledky měření $\hat{A}$ na systému ve stavu $|\psi\rangle$



průměr z hodnot získaných z velkého počtu měření (vždy na $|\psi\rangle$)

$$\langle A \rangle = \sum_n a_n P(a_n) = \sum_n a_n |\langle a_n | \psi \rangle|^2 =$$

$$= \sum_n \underbrace{\langle \psi | a_n \rangle}_{c_n^*} a_n \langle a_n | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \hat{A} \rangle$$

červené části spolu vytvářejí $\hat{A}$