Formalismus kvantové mechaniky

- hlavní prvky

  stavy – **vektory z Hilbertova prostoru** (princip superpozice)
  veličiny – **hermiteovské lineární operátory** na H.p.

  $\Big\}$ 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 $\quad \alpha(\psi_1+\psi_2) = \alpha\psi_1 + \alpha\psi_2 \qquad (\alpha+\beta)\psi = \alpha\psi + \beta\psi$
vynecháme fyzikálně nevhodné funkce (nespojité apod.), vznikne tak prostor $\mathcal{F}$

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

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

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) $(\psi,\psi) = 0 \iff \psi = 0$

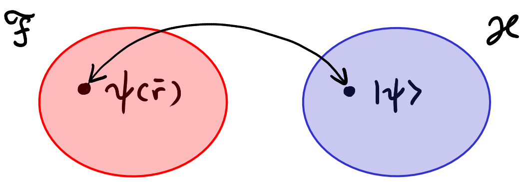
- prostor musí být **úplný** (viz doplněk 1)

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 $\langle\psi|\eta\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(\vec{r})\, \eta(\vec{r})\, d^3\vec{r}$! $|\varphi\rangle\langle\psi|$ 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)

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

- 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

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

- normování

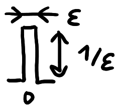
$$(\psi,\psi) = \int \psi^*(\vec r)\,\psi(\vec r)\,d^3\vec r = \int |\psi(\vec r)|^2 d^3\vec r = 1$$ nebo diracovsky $\langle\psi|\psi\rangle = 1$

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

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

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

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

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

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

② Fyzikální veličiny a operátory

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

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

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

Př. $\langle\hat x\rangle = (\psi,\hat x\psi) = \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\,x\,\psi(x)\,dx = \int_{-\infty}^{\infty} x\,|\psi(x)|^2dx$ (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 $|\psi\rangle \rightarrow$ 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 $(|\psi\rangle, \hat A|\psi\rangle) = \int\psi^*(\vec r)\,\hat A\,\psi(\vec r)\,d^3\vec r$

- samosdružené (hermiteovské *) operátory

– budou odpovídat fyz. veličinám

* ve fyzice rozšířené nepřesné pojmenování

definice: operátor $\hat A^+$ (hermitovsky) sdružený k operátoru $\hat A$ splňuje

$(\eta,\hat A\psi) = (\hat A^+\eta,\psi)$ pro všechny dvojice ψ,η

převedení do Diracovy notace $\langle\eta|\hat A|\psi\rangle = \langle\hat A^+\eta|\psi\rangle$

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

$\rightarrow \langle\eta|\hat A|\psi\rangle^* = \langle\psi|\hat A^+|\eta\rangle \;\rightarrow\; \langle\hat A\psi|\eta\rangle = \langle\psi|\hat A^+|\eta\rangle$ tj. bravektor k $\hat A|\psi\rangle$ je $\langle\psi|\hat A^+$ (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 $(\eta,\hat x\psi) = \int_{-\infty}^{\infty}\eta^*(x)\,x\,\psi(x)\,dx = \int_{-\infty}^{\infty}[x\,\eta(x)]^*\psi(x)\,dx = (\hat x\eta,\psi)$

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

$$= [\dots]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\eta^*(x)\right]\psi(x)\,dx = \int_{-\infty}^{\infty}\left[\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\eta(x)\right]^*\psi(x)\,dx = (\hat{p}\eta, \psi) \quad \rightarrow \quad \hat{p}^+ = \hat{p}$$

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 $\hat{u}^+\hat{u} = \hat{u}\hat{u}^+ = \hat{1} \quad \rightarrow \quad \hat{u}^{-1} = \hat{u}^+$

- 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

- 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:

$$d_m = (\varphi_m, \hat{A}\sum_n c_n\varphi_n) \overset{\text{linearita } \hat{A}}{=} (\varphi_m, \sum_n c_n \hat{A}\varphi_n) \overset{\text{linearita skal. součinu}}{=} \sum_n \underbrace{(\varphi_m, \hat{A}\varphi_n)}_{\text{maticový prvek } A_{mn}} c_n = \sum_n A_{mn} c_n$$

→ 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

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

Pozn.: hermiteovské operátory jsou reprezentovány hermiteovskými maticemi:

$A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$, podle výše uvedeného $A_{mn}^* = \langle m|\hat{A}|n\rangle^* = \langle n|\hat{A}^+|m\rangle = (A^+)_{nm} = A_{nm}$

maticově $A^* = A^T \rightarrow A^+ = A^{T*} = A$ (hermiteovské sdružení matice = transpozice & $*$)

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.

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

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

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

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

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