Formalismus kvantové mechaniky - přehled

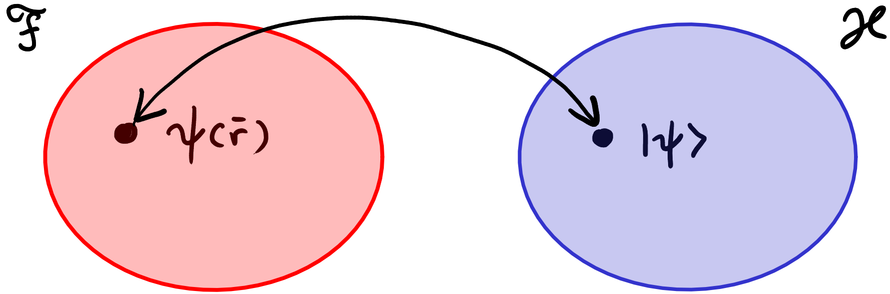
stavy - vektory z Hilbertova prostoru (princip superpozice)

veličiny - hermiteovské lineární operátory na H.p.

} linearita QM !

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

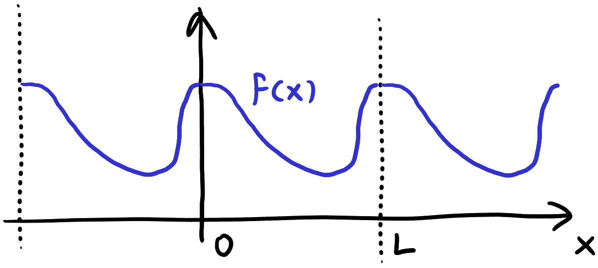
lineární operátory $\leftrightarrow$ matice



prostor vlnových funkcí — prostor abstraktních stavových vektorů

Schrödinger — Dirac

Ohlédnutí za Fourierovými řadami



$$f(x) = a_0 + a_1 \cos\frac{2\pi x}{L} + b_1 \sin\frac{2\pi x}{L} + a_2 \cos\frac{4\pi x}{L} + b_2 \sin\frac{4\pi x}{L} + \dots$$

$$= a_0 + \sum_{n=1}^{\infty}\left(a_n \cos\frac{2\pi n x}{L} + b_n \sin\frac{2\pi n x}{L}\right)$$

korespondence $\quad f(x) \equiv (a_0\ a_1\ b_1\ a_2\ b_2\ a_3\ b_3\ \dots) = \bar{c}$

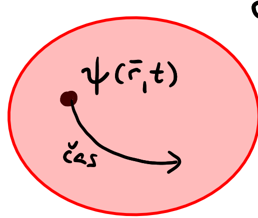
periodická funkce (bez patologií) plnohodnotně reprezentována vektorem Fourierových koeficientů

linearita $\quad \alpha f_1(x) + \beta f_2(x) \equiv \alpha \bar{c}_1 + \beta \bar{c}_2$

skalární součin $\quad (f_1, f_2) = \int f_1^*(x)\, f_2(x)\, dx \equiv$ výraz typu $\bar{c}_1 \cdot \bar{c}_2$ s dodat. faktory

Hilbertův prostor kvadraticky integrovatelných funkcí

$\mathfrak{F}$



- kvadraticky integrovatelná komplexní funkce (pro 3D)

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

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 $\mathfrak{F}$

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

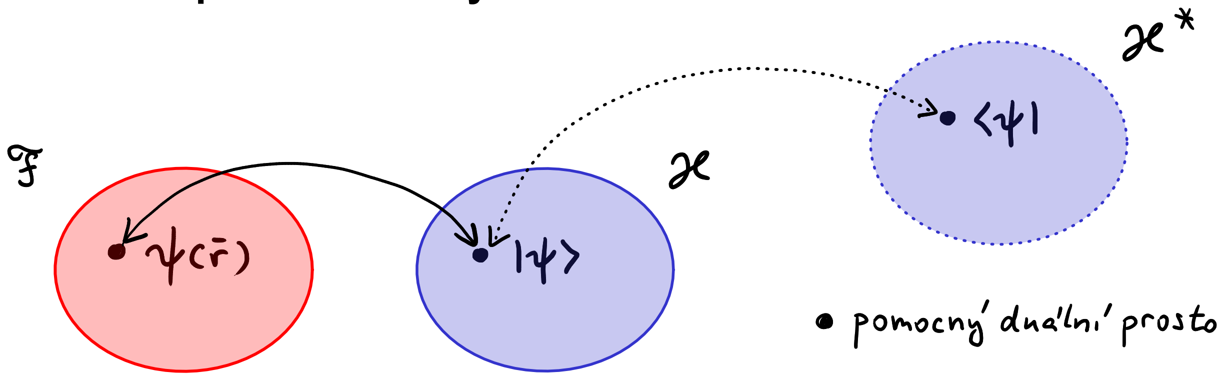
$$(\psi_1, \psi_2) \overset{\text{def}}{=} \int \psi_1^*(\bar{r})\, \psi_2(\bar{r})\, d^3\bar{r} \quad \in \mathbb{C}$$

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

Abstraktní Hilbertův prostor stavových vektorů



- pomocný duální prostor $\mathcal{H}^*$

  bra vektory $\langle\psi|$

- Hilbertův prostor $\mathcal{H}$

  ket vektory $|\psi\rangle$

- skalární součin přenesený z $\mathcal{F}$

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

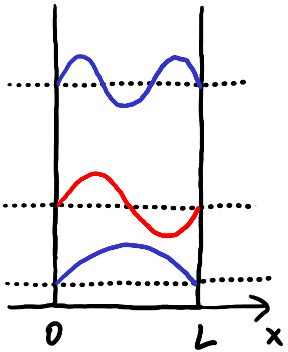
- vyjádření podle Diraca využívající navíc $\mathcal{H}^*$

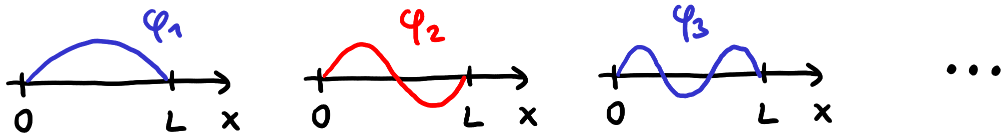
$$\langle\psi|\eta\rangle = (|\psi\rangle, |\eta\rangle)$$

(bra vektory jsou zavedeny tímto způsobem)

bra (c) ket

Báze Hilbertova prostoru nekonečně hluboké jámy





vlnové funkce vlastních stavů: $\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}$

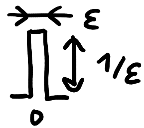
- ortonormalita

$$\int \varphi_m^*(x)\,\varphi_n(x) = \delta_{mn} \qquad \int_0^L \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\frac{m\pi x}{L} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\frac{n\pi x}{L} = \begin{cases} 1 & m=n \\ 0 & m\neq n \end{cases}$$

- úplnost – vyjádření pomocí Diracovy δ-funkce

$$\sum_{n=1}^{\infty} \varphi_n(x)\,\varphi_n^*(x') = \delta(x-x')$$

Diracova δ-funkce $\delta(x)$:

limita  pro $\varepsilon \to 0$

Alternativní ortonormální báze

$$\varphi_1(x) = \sqrt{30}\; x(1-x)$$

$$\varphi_2(x) = 2\sqrt{210}\; x(1-x)\left(\tfrac{1}{2}-x\right)$$

$$\varphi_3(x) = 3\sqrt{\tfrac{5}{2}}\; x(1-x)\left[1-28\left(\tfrac{1}{2}-x\right)^2\right]$$

$$\varphi_4(x) = \sqrt{2310}\; x(1-x)\left(\tfrac{1}{2}-x\right)\left[12\left(\tfrac{1}{2}-x\right)^2-1\right]$$

...