Postuláty kvantové mechaniky

① Formální příprava na postuláty

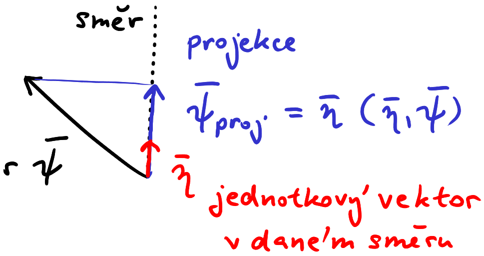
• **projektory**

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

- 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 $\hat{1}$

ověření $|\psi\rangle = \sum_n c_n|n\rangle = \sum_n \langle n|\psi\rangle\,|n\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle = \left(\sum_n |n\rangle\langle n|\right)|\psi\rangle$

• **spektrální věta**

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

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

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

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

Př. 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:

a) všechny vlastní hodnoty jsou reálné tj. $a_n, a \in \mathbb{R}$

b) vlastní vektory příslušné různým vlastním hodnotám jsou ortogonální

c) vlastní vektory z obou částí spektra tvoří úplný soubor
  - (zobecněnou) bázi Hilbertova prostoru

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

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

celou 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 $\langle\psi_1|$ $\rightarrow$ $\underbrace{\langle\psi_1|\hat{H}|\psi_2\rangle}_{\langle\hat{H}^+\psi_1| = \langle\hat{H}\psi_1| = E_1\langle\psi_1|} = E_2\langle\psi_1|\psi_2\rangle$ $\rightarrow$ $E_1\langle\psi_1|\psi_2\rangle = E_2\langle\psi_1|\psi_2\rangle$

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

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

rozklad $|\psi\rangle$: $|\psi\rangle = \sum_n |a_n\rangle\langle a_n|\psi\rangle + \int |a\rangle\langle a|\psi\rangle\, da$

$$\rightarrow \hat{1} = \sum_n |a_n\rangle\langle a_n| + \int |a\rangle\langle a|\, da$$

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

2 Formulace postulátů

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):

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

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

$P(a_n) = |\langle a_n|\psi\rangle|^2$ pravděpodobnosti pro diskrétní spektrum
(v degenerovaném případě sčítáme P přes degenerované vektory)

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

doplňující 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

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

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 $\hat{A} \to \frac{1}{2}(\hat{A} + \hat{A}^+)$

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

klasicky: $\bar{A} = \frac{1}{m}\bar{p}\times\bar{L} - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\bar{r}}{r}$ v QM: $\hat{\bar{A}} = \frac{1}{2m}(\hat{\bar{p}}\times\hat{\bar{L}} - \hat{\bar{L}}\times\hat{\bar{p}}) - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\widehat{\left(\frac{\bar{r}}{r}\right)}$

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 vyplynou výroky o pravděpodobnostech ve všech variantách)

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

vl. stavy $\hat{A}$ tvoří ortonorm. bázi $\to$ $|\psi\rangle = c_1|a_1\rangle + c_2|a_2\rangle + \dots$,

kde $c_n = \langle a_n|\psi\rangle$

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

$|\psi\rangle \to$

a_1 s pravděpodobností $P(a_1) = |\langle a_1|\psi\rangle|^2 = |c_1|^2$

a_2 s $P(a_2) = |\langle a_2|\psi\rangle|^2 = |c_2|^2$

$\vdots$

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 vytváří $\hat{A}$