Skripta: Napredna Kvantna Mehanika

Adrian Udovičić

March 31, 2022

Uvod

Svrha ove skripte je upoznati studente različitih smjerova s kolegijem napredne kvantne mehanike.

Contents

1 Ket i Bra notacija

1.1 Vektori baze i matrična reprezentacija

Kvantno stanje opisujemo sa $|\psi\rangle$ koji razapinju Hilbertov prostor s definiranim skalarnim produktom i svojstvima:

- $|\alpha\rangle + |\beta\rangle = \langle\gamma|$,
- c $\cdot |\alpha\rangle = |c \cdot \alpha\rangle$,
- Postoji operator $\hat{A}$ t.d. $|\beta\rangle$.

Dimenzija prostora određenja je problemom, npr. za 1 elektron imamo dimenzije momenta, angularnong momenta i spina $\rightarrow 3 + 3 + 2 = 8$D. Baza $\{|\alpha\rangle\}$, gdje ket $|\alpha\rangle$ sadrži sve informacije o sistemu, ali do informacije dolazimo skalarni produkt: $\langle\beta|\,|\alpha\rangle$, gdje je $\langle\beta|$ iz dualnog prostora ket prostora. Korespondencija:

$$C_1\,|\alpha\rangle + C_2\,|\beta\rangle \Leftrightarrow C_1^*\,\langle\alpha|\,C_2^*\,\langle\beta| \tag{1.1}$$

Svojstva skalarnog produkta:

- $\langle\beta|\,|\alpha\rangle = \langle\alpha|\,|\beta\rangle^*$,
- Pozitivna definitnost $\Rightarrow \langle\alpha|\,|\alpha\rangle > 0$,
- Ortogonalnost $\Rightarrow \langle\alpha|\,|\beta\rangle = 0 = \langle\beta|\,|\alpha\rangle$,
- Normalizacija $\Rightarrow |\hat{\alpha}\rangle = \frac{|\alpha\rangle}{\sqrt{\langle\alpha||\alpha\rangle}} \Rightarrow \langle\alpha\alpha\rangle = 1$.

Svaki vektor možemo razviti po vektorima baze:

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=1}^{N} c_n\,|\alpha\rangle\,; c_n = \langle\alpha_n|\alpha\rangle \tag{1.2}$$

1.1.1 Operatori

Operatori predstavljaju observable, tj. pomoću operatora pridružujemo fizikalne veličine opažanom sustavu. Npr. Operator položaja $\hat{x}$ koristi se za određivanje položaja sustav, operator momenta $\hat{p}$ za određivanje momenta, itd. Dijelovanje operatora na neko stanje može promijeniti to stanje:

$$\hat{A}\,|\alpha\rangle = |\beta\rangle \tag{1.3}$$

tj.

$$\hat{A}\,|\alpha\rangle = a\,|a\rangle\,, \tag{1.4}$$

gdje je $|a\rangle$ svojstveni vektor (svj. v.) operatora $\hat{A}$, a a svojstvena vrijednost (svj. vrij.).

Svojstva operatora:

- Zbrajanje
  - Komutativnost: $\hat{A} + \hat{B} = \hat{B} + \hat{A}$,
  - Asocijativnost: $\hat{A} + \left(\hat{B} + \hat{C}\right) = \left(\hat{A} + \hat{B}\right)\hat{C}$,
  - Linearnost: $\hat{A}\,(a\,|a\rangle + b\,|b\rangle) = a\hat{A}\,|a\rangle + b\hat{A}\,|b\rangle$,
  - Hermetičnost: $\hat{A}\,|a\rangle = \langle a|\,\hat{A}^*$
- Množenje
  - (Anti-)Komutativnost: $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$,
  - Asocijativnost: $\hat{A}\left(\hat{B}\hat{C}\right) = \left(\hat{A}\hat{B}\right)\hat{C}$,
    tj. $\hat{A}\left(\hat{B}\,|a\rangle\right) = \hat{A}\hat{B}\,|a\rangle$,
  - Hermetičnost: $\left(\hat{A}\hat{B}\right)^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$,
    tj. $\hat{A}\hat{B}\,|a\rangle = \langle a|\,\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$.

1.1.2 Komutatori

$$\left[\hat{A},\hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \tag{1.5}$$

U klasičnoj mehanici to s ubili generatori koordinata i impulsa. Glavna značajka prelaska iz klasične u kvantnu mehaniku je $[p,q] \neq 0 = i\hbar$.

1.1.3 Vanjski produkt

$$|\beta\rangle\langle\alpha| \tag{1.6}$$

je operator sa sljedećim svojstvima:

- $(|\beta\rangle\langle\alpha|)|\gamma\rangle = |\beta\rangle\langle\alpha|\gamma\rangle = c_{\alpha\gamma}|\beta\rangle$,
- $\hat{X} = |\beta\rangle\langle\alpha| \to \hat{X}^\dagger = |\alpha\rangle\langle\beta|$,
- $(\langle\beta|)\hat{X}|\alpha\rangle = \langle\beta|\hat{X}|\alpha\rangle = \left(\langle\alpha|\hat{X}^\dagger|\beta\rangle\right)^\dagger$,
- $\langle\beta|\hat{X}|\alpha\rangle = \langle\alpha|\hat{X}|\beta\rangle^\dagger$.

1.1.4 Hermitski operatori

$\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ je jednadžba hermetičnosti. Ako jednakost vrijedi operator $\hat{A}$ je hermetičan.

Teorem 1.1 *Svojstvene vrijednosti hermitskog operatora su realne, a vektori su međusobno ortogonalni.*

Dokaz 1.1

$$\begin{aligned}
\hat{A}|n\rangle &= a_n|n\rangle \\
\langle n|\hat{A}^\dagger &= \langle n|a_n^* \\
\langle n|\hat{A}|m\rangle &= \langle n|m\rangle a_n^* \\
m\langle n|m\rangle &= a_n^*\langle n|m\rangle \Rightarrow (a_n^* - a_m)\langle n|m\rangle = 0
\end{aligned} \tag{1.7}$$

Imamo 2 slučaja:

- $n = m$
- $n \neq m$

Za $n = m \Rightarrow a_n^* = a_n \Rightarrow \langle n|m\rangle > 0$ (Nisu ortogonalni) t.d.:

- $\forall|m\rangle \neq |n\rangle \Rightarrow a_m \neq n \Rightarrow a_n - a_m \neq 0 \Rightarrow \langle n|m\rangle = 0$
- $\forall|m\rangle \neq |n\rangle \Rightarrow a_m \neq n \to$

različite funkcije s istim stanjima
Koliko različitih svojstvenih funkcija može imati istu svojstvenu vrijednost?
Za $k \neq |m\rangle\, \exists k$ istih svojstvenih vrijednosti za k različitih svojstvenih vektora $\Rightarrow$ k puta degenerirane svojstvene vrijednosti $\Rightarrow$ Kako je $a_n - a_m = 0 \Rightarrow \langle n|m\rangle =?$ U prostoru možemo izabrati vektore koji su međusobno ortogonalni (Gram-Schmidtov postupak ortogonalizacije), te time dobivamo $\langle n|m\rangle = \delta_{n,m}$ što je relacija ortonormiranosti. Vlastite funkcije (time i vektori) hermitskog operatora čine potpun skup, sve druge vektore možemo napisati kao linearnu kombinaciju pa su to vektori baze $\{|n\rangle\}$

$$|\alpha\rangle = \sum_n c_n|n\rangle \Rightarrow \langle m|\alpha\rangle = \sum_n c_n\langle m|n\rangle = c_m \tag{1.8}$$

$$|\alpha\rangle = \sum_n c_n|n\rangle = |n\rangle\langle n|\alpha\rangle \Rightarrow \sum_n |n\rangle\langle n| = 1. \tag{1.9}$$

Zadnji dio jednadžbe 1.9 je relacija potpunosti.
Vjerojatnost:

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = \langle\alpha|\sum_n|n\rangle\langle n|\alpha\rangle \quad =_n \langle n|\alpha\rangle^2 = \sum_n {c_n}^2 = 1 \tag{1.10}$$

Gornji izvod nam govori da ćemo uvjek, npr.naći česticu u nekom stanju. Uvjek ćemo "nešto" izmjeriti $\Rightarrow$ normalizacija (Jer $\sum_n {c_n}^2 = c_1c_1^* + c_2c_2^*...$).