

Kvantová mechanika

Michal Grňo

19. srpna 2020

Definice: Mějme stav $|\psi(t)\rangle$, který se vyvíjí v čase t a označme $|\psi\rangle \equiv |\psi(0)\rangle$. Potom existuje operátor $\hat{U}(t)$, pro který platí

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\psi\rangle .$$

Operátor $\hat{U}(t)$ je lineární (PROČ?) a nazýváme ho **evoluční operátor stavu** $|\psi\rangle$. Triviálně platí $\hat{U}(0) = \text{Id}$.

Definice: Necht pro každé dva stavy $|\psi\rangle, |\phi\rangle$ platí

$$|\langle\psi|\phi\rangle|^2 = |\langle\psi(t)|\phi(t)\rangle|^2 \quad \forall t,$$

potom říkáme, že **dynamika systému je nezávislá na čase**.

Důsledek: Je-li dynamika systému nezávislá na čase, potom je evoluční operátor každého stavu **unitární** a existuje samoadjugovaný operátor \hat{H} , že

$$\hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}(t)t}.$$

Důkaz: Z nezávislosti dynamiky na čase plyne, že pro každý stav $|\psi\rangle$ platí

$$|\langle\psi|\psi\rangle|^2 = |\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle|^2 = |\langle\psi| \hat{U}^+(t) \hat{U}(t) |\psi\rangle|^2,$$

z rovnosti absolutních hodnot vyplývá, že se vnitřky rovnají až na nějaké jednotkové komplexní číslo, tedy existuje takové $s(t) \in \mathbb{R}$, že

$$\langle\psi|\psi\rangle = \langle\psi| \hat{U}^+(t) \hat{U}(t) |\psi\rangle e^{is(t)}.$$

Vidíme ale, že obecně $e^{is(t)}$ nejde rozdělit mezi \hat{U} a \hat{U}^+ : každé komplexní číslo, kterým vynásobíme \hat{U} se nám v \hat{U}^+ vrátí jako komplexně sdružené. Musí tedy platit $e^{is(t)} = \pm 1$. Protože navíc požadujeme, aby rovnost platila v čase $t = 0$ a vývoj systému byl spojitý, zbývá nám pouze $+1$. Pro evoluční operátor z toho plyne

$$\langle\psi|\psi\rangle = \langle\psi| \hat{U}^+(t) \hat{U}(t) |\psi\rangle,$$

$$\hat{U}^+(t) \hat{U}(t) = \text{Id},$$

tedy pro každé t je evoluční operátor unitární.

Z lineární algebry víme, že každý unitární operátor lze vyjádřit jako komplexní exponenciálu samoadjugovaného operátoru (I PRO NEKONEČNOU DIM?), tedy existuje takový samoadjugovaný operátor $\hat{A}(t)$, že

$$\hat{U}(t) = e^{-i\hat{A}(t)}.$$

Navíc máme požadavek, aby $\hat{U}(0) = \text{Id}$. Tento požadavek bychom mohli naplnit tak, že budeme požadovat, aby $\hat{A}(t) = 0$, ukazuje se však, že přirozenější je zavést samoadjugovaný operátor $\hat{H}(t)$, že $\hat{A}(t) = t\hat{H}(t)$, tedy

$$\hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}(t)t}.$$

Poznámka: Z matematického hlediska jsme místo $e^{-i\hat{H}(t)t}$ mohli stejně dobře psát $e^{+i\hat{H}(t)t}$. Proč jsme zvolili mínus bude zřejmé, až objevíme fyzikální význam operátoru \hat{H} .

Věta: Necht je dynamika systému nezávislá na čase, potom platí tzv. *časová Schrödingerova rovnice* (TDSE):

$$i \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle$$

Důkaz: Víme, že platí

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\psi\rangle = e^{-i \hat{H}(t) t} |\psi\rangle,$$

nyní rovnici zderivujeme podle času

$$\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = -i \hat{H}(t) e^{-i \hat{H}(t) t} |\psi\rangle = -i \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle.$$

Definice: Mějme stav $|\psi\rangle$, pro který platí

$$\left| \langle \psi | \psi(t) \rangle \right|^2 = 1 \quad \forall t.$$

Takový stav nazýváme **stacionárním stavem systému**.

Důsledek: Pro každý stacionární stav existuje $E(t) \in \mathbb{R}$, že

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i E(t) t} |\psi\rangle,$$

totiž

$$|\langle \psi | \psi \rangle|^2 = 1 = \left| \langle \psi | \psi(t) \rangle \right|^2 = \left| \langle \psi | \hat{U}(t) |\psi\rangle \right|^2,$$

$$\langle \psi | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{U}(t) |\psi\rangle e^{is(t)},$$

kde $s(t)$ je nějaká reálná funkce. Porovnáním stran dostaneme

$$\hat{U}(t) |\psi\rangle = e^{-is(t)} |\psi\rangle.$$

Z toho mj. plyne, že $s(0) = 0$, můžeme tedy zavést $E(t) = s(t) t$, tedy

$$\hat{U}(t) = e^{-i E(t) t}.$$

Věta: Necht' je dynamika systému nezávislá na čase, $\hat{H}(t) = \text{konst.}$ a $|\psi\rangle$ je stacionární stav, potom platí tzv. *bezčasová Schrödingerova rovnice* (TISE):

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle.$$

Důkaz: Do časové Schrödingerovy rovnice dosadíme časový vývoj stacionárního stavu:

$$i \frac{d}{dt} e^{-i E(t) t} |\psi\rangle = \hat{H} e^{-i E(t) t} |\psi\rangle,$$

a protože $E(t) = \text{konst.}$ (PROČ?),

$$e^{-i E t} E |\psi\rangle = e^{-i E t} \hat{H} |\psi\rangle,$$

$$E |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle.$$