

Kvantová mechanika bez mávání rukama

Michal Grňo

20. srpna 2020

1 Vektorový formalismus

Je zvykem popisovat kvantové systémy pomocí abstraktních vektorů z nějakého Hilbertova prostoru, jehož dimenze závisí na modelovaném problému. V praxi pracujeme s všemožnými prostory od \mathbb{C}^2 pro popis nejjednodušších dvouhladinových systémů přes $W^{1,2}(\mathbb{R})$ pro popis volné částice až po neseparabilní prostory. Kvantové stavy jsou představovány jednotkovými vektory z těchto prostorů.

Definice 1.1 (Evoluční operátor). 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 evolučním operátorem. Triviálně platí $\hat{U}(0) = \hat{I}$.

Definice 1.2 (Dynamika nezávislá na čase). Nechť pro každé dva stavy $|\psi\rangle, |\phi\rangle$ platí

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

potom říkáme, že dynamika systému je nezávislá na čase.

Lemma 1.3. Tyto tři výroky jsou ekvivalentní:

1. Dynamika systému je nezávislá na čase
2. Evoluční operátor \hat{U} je v každém čase unitární
3. Existuje samoadjugovaný operátor $\hat{A}(t)$ takový, že $\hat{U}(t) = e^{-i\hat{A}(t)t}$.

Důkaz. Rozepíšeme si definici prvního výroku:

$$|\langle\psi|\phi\rangle|^2 = \left| \langle\psi(t)|\phi(t)\rangle \right|^2 = \left| \langle\psi| \hat{U}^+(t) \hat{U}(t) |\phi\rangle \right|^2 .$$

Implikace $1 \Leftarrow 2$ je hned zřejmá, nyní dokážeme implikaci $1 \Rightarrow 2$.

V rovnici máme druhé mocniny kladných čísel, můžeme tedy BÚNO odmocnit.

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

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

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

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 v čase spojitý, zbývá nám pouze $+1$. Pro evoluční operátor z toho plyne

$$\begin{aligned} \langle\psi|\phi\rangle &= \langle\psi| \hat{U}^+(t) \hat{U}(t) |\phi\rangle , \\ \hat{U}^+(t) \hat{U}(t) &= \hat{I}, \end{aligned}$$

tedy pro každé t je evoluční operátor unitární.

Nakonec dokážeme ekvivalenci $2 \Leftrightarrow 3$. Z lineární algebry víme, že pro každý unitární operátor \hat{U} existuje samoadjugovaný operátor \hat{B} takový, že $\hat{U} = e^{i\hat{B}}$, a naopak, že pro každý samoadjugovaný operátor \hat{B} je výraz $e^{i\hat{B}}$ unitární. Pro evoluční operátor tedy máme

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

Protože navíc po evolučním operátoru požadujeme, aby $\hat{U}(0) = \hat{I}$, musí platit $\hat{B}(0) = 0$. BÚNO můžeme zavést operátor $\hat{A}(t) = -\hat{B}(t)/t$ pro $t \neq 0$ a libovolný pro $t = 0$. Dosazením tohoto operátoru do předchozí rovnice dostáváme požadované

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

□

Poznámka. Proč nás tolik zajímá zrovna tvar $e^{-i\hat{A}(t)t}$ zjistíme v zápětí. Obzvlášť v případě $\hat{A}(t) = \text{konst.}$ má totiž operátor \hat{A} důležitý fyzikální význam.

Věta 1.4 (TDSE). *Nechť je dynamika systému nezávislá na čase, potom existuje samoadjugovaný operátor $\hat{H}(t)$, pro který platí tzv. časová Schrödingerova rovnice:*

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

Důkaz. Z nezávislosti dynamiky systému na čase víme, že platí

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

Když rovnici zderivujeme podle času, dostaneme

$$\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = -i \left(\hat{A}(t) + t \dot{\hat{A}}(t) \right) \underbrace{e^{-i\hat{A}(t)t} |\psi\rangle}_{|\psi(t)\rangle}$$

Zavedeme operátor $\hat{H}(t)$ předpisem

$$\hat{H}(t) = \hat{A}(t) + t \dot{\hat{A}}(t)$$

a ukážeme, že je samoadjugovaný.

$$\hat{H}^+(t) = \left(\hat{A}(t) + t \dot{\hat{A}}(t) \right)^+ = \hat{A}^+(t) + t \left(\dot{\hat{A}}(t) \right)^+ = \hat{A}^+(t) + t \left(\hat{A}^+(t) \right)^{\cdot} = \hat{A}(t) + t \dot{\hat{A}}(t) = \hat{H}(t)$$

□

Definice 1.5 (Hamiltonián). Operátor $\hat{H}(t)$ z předchozí věty nazýváme hamiltonián.

Důsledek 1.6 (Evoluce skleronomního systému). Nechť je dynamika systému nezávislá na čase a hamiltonián $\hat{H}(t)$ je konstantní, potom

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

Důkaz. Z definice hamiltoniánu máme

$$\hat{H} = \hat{A}(t) + t \dot{\hat{A}}(t) = \text{konst.}$$

Rozmyslete si, že zvolíme-li nějakou bázi a pomocí ní rovnici vyjádříme maticově, každý element bude nějaká funkce času, pro kterou platí

$$f(t) + t f'(t) = \text{konst.} \iff t f''(t) + 2f'(t) = 0 \iff f(t) = \frac{C_1}{t} + C_0.$$

I samotný operátor $\hat{A}(t)$ tedy musí být ve tvaru

$$\hat{A}(t) = \frac{1}{t} \hat{A}_1 + \hat{A}_0$$

Protože ale požadujeme, aby byl časový vývoj systému spojitý a $\hat{A}(t)t$ bylo v čase $t = 0$ nulové, musí nutně platit $\hat{A}_1 = 0$. Platí tedy $\hat{A}(t) = \hat{A}_0 = \text{konst.}$ a konečně $\hat{H} = \hat{A}$. □

Definice 1.7 (Stacionární stav). Mějme stav $|\psi(t)\rangle$, pro který v každém čase t platí

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

Takový stav nazýváme stacionárním stavem systému.

Lemma 1.8. Mějme stacionární stav $|\psi(t)\rangle$, potom existuje taková funkce $E(t) \in \mathbb{R}$, že

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iE(t)t} |\psi\rangle.$$

Důkaz. Z definice stacionárního stavu máme

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

Opět z rovnosti absolutních hodnot vyplývá, že existuje funkce $s(t) \in \mathbb{R}$ taková, že

$$\begin{aligned} \langle \psi | \psi \rangle &= \langle \psi | \hat{U}(t) | \psi \rangle e^{is(t)}, \\ \langle \psi | e^{-is(t)} | \psi \rangle &= \langle \psi | \hat{U}(t) | \psi \rangle. \end{aligned}$$

Porovnáním stran dostaneme

$$\hat{U}(t) = e^{-is(t)} \hat{I}.$$

Protože navíc musí platit, že $\hat{U}(0) = \hat{I}$, můžeme si již tradičně zavést funkci $E(t) = s(t)/t$. Po dosazení získáme

$$\hat{U}(t) = e^{-iE(t)t} \hat{I}.$$

□

Věta 1.9 (TISE). *Nechť jsou dynamika systému a hamiltonián \hat{H} nezávislé na čase. Potom jsou následující výroky ekvivalentní:*

1. Stav $|\psi(t)\rangle$ je stacionární
2. Platí tzv. bezčasová Schrödingerova rovnice

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

Důkaz. Nejprve ukážeme $1 \Rightarrow 2$. Ze stacionarity stavu $|\psi(t)\rangle$ vyplývá

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iE(t)t} |\psi\rangle.$$

Naopak z $\hat{H}(t) = \text{konst.}$ plyne (viz 1.6)

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

Porovnáním zjistíme, že $E(t)$ musí být konstantní. Dosazením do časové Schrödingerovy rovnice potom dostaneme

$$\begin{aligned} i \frac{d}{dt} e^{-iEt} |\psi\rangle &= \hat{H} e^{-iEt} |\psi\rangle \\ i (-i) E e^{-iEt} |\psi\rangle &= e^{-iEt} \hat{H} |\psi\rangle \\ E |\psi\rangle &= \hat{H} |\psi\rangle \end{aligned}$$

Nyní dokážeme implikaci opačným směrem. Opět použijeme výsledek z 1.6, tedy pokud dynamika systému a hamiltonián nezávisí na čase, potom platí:

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

Rozepíšeme exponenciálu operátoru z definice a použijeme platnost bezčasové Schrödingerovy rovnice

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t} |\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-i\hat{H}t)^n |\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-it)^n \hat{H}^n |\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-it)^n E^n |\psi\rangle = e^{-iEt} |\psi\rangle$$

Vidíme, že skutečně

$$\left| \langle \psi | \psi(t) \rangle \right|^2 = \left| \langle \psi | e^{-iEt} |\psi\rangle \right|^2 = |\langle \psi | \psi \rangle|^2 = 1$$

□