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

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

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

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

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

Důkaz. Rozepíšeme si definici prvního výroku:

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

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

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

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

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

$$\langle\psi|\phi\rangle = \langle\psi|\ \hat{U}^+(t)\ \hat{U}(t)\ |\phi\rangle\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\,s(t)}.$$

Vidíme ale, že obecně $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,s(t)}$ 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 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,s(t)} = \pm 1$. 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

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

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

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 $\hat{U} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{B}}$, a naopak, že pro každý samoadjugovaný operátor $\hat{B}$ je výraz $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{B}}$ unitární. Pro evoluční operátor tedy máme

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

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

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

□

Poznámka. Proč nás tolik zajímá zrovna tvar $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\hat{A}(t)\,t}$ 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:*

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

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

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

Když rovnici zderivujeme podle času, dostaneme

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

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

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

a ukážeme, že je samoadjugovaný.

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

□

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

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

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

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 $\big|\psi(t)\big\rangle$, pro který v každém čase t platí

$$\Big|\big\langle\psi\big|\psi(t)\big\rangle\Big|^2 = 1.$$

Takový stav nazýváme stacionárním stavem systému.

NÁSLEDUJE FUJ FUJ

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

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

totiž

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

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

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

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

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

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

Věta: Nechť 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:

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

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

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

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