

# 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

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

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:

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

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

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

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

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.** Nechť je dynamika systému nezávislá na čase a hamiltonián  $\hat{H}$  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

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

□

**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

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

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

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

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. TODO

□