

# Kvantová mechanika bez mávání rukama

Michal Grňo

28. srpna 2020

## 1 Hrátky s operátory

**Lemma 1.1** (Polarizační identita). Necht  $\mathcal{H}$  je komplexní Hilbertův prostor, potom pro všechny  $\psi, \phi \in \mathcal{H}$  platí

$$(\psi, \phi)_{\mathcal{H}} = \frac{1}{4} \left( \|\psi + \phi\|^2 - \|\psi - \phi\|^2 + i \|\psi + i\phi\|^2 - i \|\psi - i\phi\|^2 \right)$$

*Důkaz.* Rozepsáním pomocí vztahu  $\|\phi\|^2 = (\phi, \phi)$  lze snadno ukázat, že

$$\|\psi + \phi\|^2 - \|\psi - \phi\|^2 = 4\Re(\psi, \phi), \quad \|\psi + i\phi\|^2 - \|\psi - i\phi\|^2 = 4\Im(\psi, \phi).$$

□

**Lemma 1.2** (O unitaritě operátoru zachovávajícího normu). Mějme komplexní Hilbertův prostor  $\mathcal{H}$  a na něm lineární operátor  $\hat{T}$  definovaný na  $\mathcal{D}(\hat{T}) \subset \mathcal{H}$ , potom platí

$$\|\hat{T}\phi\| = \|\phi\| \quad \forall \phi \in \mathcal{D}(\hat{T}) \iff \hat{T} \text{ je unitární.}$$

*Důkaz.* Implikaci „ $\Leftarrow$ “ ukážeme snadno:

$$\|\hat{T}\phi\|^2 = (\hat{T}\phi, \hat{T}\phi) = (\hat{T}^+ \hat{T}\phi, \phi) = (\phi, \phi) = \|\phi\|^2$$

Implikace opačným směrem potom plyne z 1.1. Buďte  $\psi, \phi \in \mathcal{H}$ , ukážeme, že  $T$  zachovává skalární součin:

$$\begin{aligned} 4(\hat{T}\psi, \hat{T}\phi) &= \|\hat{T}\psi + \hat{T}\phi\|^2 - \|\hat{T}\psi - \hat{T}\phi\|^2 + i \|\hat{T}\psi - i\hat{T}\phi\|^2 - i \|\hat{T}\psi + i\hat{T}\phi\|^2 \\ &= \|\hat{T}(\psi + \phi)\|^2 - \|\hat{T}(\psi - \phi)\|^2 + i \|\hat{T}(\psi - i\phi)\|^2 - i \|\hat{T}(\psi + i\phi)\|^2 \\ &= \|\psi + \phi\|^2 - \|\psi - \phi\|^2 + i \|\psi - i\phi\|^2 - i \|\psi + i\phi\|^2 = 4(\psi, \phi) \end{aligned}$$

□

## 2 Vektorový formalismus

### Fyzikální motivace

TODO.

### Matematický framework

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 neseperabilní prostory. Kvantové stavy jsou představovány jednotkovými vektory z těchto prostorů.

**Definice 2.1** (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 2.2** (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 2.3.** 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:

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

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

Protože rovnost platí pro každé  $|\psi\rangle, |\phi\rangle$ , můžeme volit  $|\psi\rangle = |\phi\rangle$ :

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

Z 1.2 potom víme, že operátor, který zachovává normu, je nutně 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. (TODO  $\dim = \infty$ ) 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 vzápětí. Obzvlášť v případě  $\hat{A}(t) = \text{konst.}$  má totiž operátor  $\hat{A}$  důležitý fyzikální význam.

**Věta 2.4** (TDSE). *Nechť je dynamika systému nezávislá na čase, potom existuje samoadjugovaný operátor  $\hat{H}(t)$ , pro který platí tzv. časová Schrödingerova rovnice:*

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

pro všechny  $|\psi\rangle \in \mathcal{D}(\hat{H})$ .

*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.

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

□

**Definice 2.5** (Hamiltonián). Operátor  $\hat{H}(t)$  z předchozí věty nazýváme hamiltonián.

**Důsledek 2.6** (Evoluce skleronomního systému). Necht' 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  $\hat{H} = \hat{A}$ .  $\square$

**Definice 2.7** (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 2.8.** 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

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

$\square$

**Věta 2.9** (TISE). Necht' 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 2.6)

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

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 2.6, 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 (FUJ) 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

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

□

## Příklady použití

TODO.

## 3 Feynmanův integrál

TODO.

- Fyzikální motivace
- Wienerův proces
- Wienerova míra a integrál
- Feynmanův integrál