Kvantová mechanika

Michal Grňo

19. srpna 2020

<u>Definice:</u> 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 $\hat{U}(0) = \mathrm{Id}$.

<u>Definice:</u> Nechť pro každé dva stavy $|\psi\rangle, |\phi\rangle$ platí

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

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

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

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

<u>Důkaz:</u> Z nezávislosti dynamiky na čase plyne, že pro všechny stavy $|\psi\rangle$, $|\phi\rangle$ platí

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

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

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

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

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

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

tedy pro každé t je evoluční operátor unitární.

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

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

Navíc máme požadavek, aby $\hat{U}(0) = \mathrm{Id}$. 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

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

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

<u>Věta:</u> Nechť je dynamika systému nezávislá na čase, potom platí tzv. *časová Schrödingerova rovnice* (TDSE):

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

Důkaz: Víme, že platí

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

nyní rovnici zderivujeme podle času

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

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

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

Takový stav nazýváme **stacionárním stavem systému**.

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

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

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?),

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

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