

Ehrenfestov teorem pravi:

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \left\langle \frac{dA}{dt} \right\rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle$$

kjer je  $A$  poljubna količina. Najpomembnejša primera sta  $A = x$  in  $A = p$ .

V primeru  $A = x$ :

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [x, H] \rangle = \frac{1}{i\hbar} i\hbar \frac{\langle p \rangle}{m}$$

Kajti  $[x, H] = [x, p^2/2m + V(x, t)] = [x, p^2]/2m = ([x, p]p + p[x, p])/2m = i\hbar p/m$ .

V primeru  $A = p$ :

$$\frac{d\langle p \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [p, H] \rangle = \frac{1}{i\hbar} \left\langle \left[ p, \frac{p^2}{2m} + V(x, t) \right] \right\rangle$$

Izračunamo  $[p, V]$ :

$$\begin{aligned} [p, V(x, t)]\psi &= (pV - Vp)\psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (V\psi) + i\hbar V \frac{\partial}{\partial x} \psi = \\ &= -i\hbar \frac{\partial V}{\partial x} \psi - i\hbar V \frac{\partial \psi}{\partial x} + i\hbar V \frac{\partial \psi}{\partial x} = \left( -i\hbar \frac{\partial V}{\partial x} \right) \psi \end{aligned}$$

Dobili smo torej

$$\frac{\partial \langle p \rangle}{\partial t} = m \frac{\partial \langle x \rangle^2}{\partial t^2} = -\frac{\partial V}{\partial x}(x, t) = F(x, t)$$

kar je v bistvu samo 2. Newtonov zakon.

**Nedoločnost.** V verjetnosti imamo definiran pojem standardne deviacije:

$$\Delta x^2 = \sigma_x^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \geq 0$$

V kvantni mehaniki pojem razširimo na vse operatorje. Zdaj pa recimo, da imamo operatorja  $A$  in  $B$ . Zanju velja:

$$|\Delta A \Delta B| \geq \frac{1}{2} \langle [A, B] \rangle$$

Dokaz lahko naredimo npr. preko Schwarzove neenakosti:

$$\left| \int \varphi^* \psi \, dx \right| \leq \int |\varphi|^2 \, dx \int |\psi|^2 \, dx$$

Podrobnejši dokaz bomo naredili na vajah, za nas je najbolj relevanten primer  $A = x$ ,  $B = p$ . Tedaj je

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{1}{2} \hbar$$

**Formalizem kvantne mehanike.** Uporabili bomo Diracov formalizem (h kateremu je precej prispeval tudi von Neumann - le-ta je matematično pokazal, da v kvantni mehaniki lahko predpostavimo določene stvari, kot na primer, da valovne funkcije tvorijo vektorski prostor. Upamo, da se ni zmotil, ker se je le redkim dalo njegove dokaze dejansko preveriti):

1. Imamo vektorski prostor, ki je hilbertov oblike  $L^2$ . Obstaja baza, ki jo lahko definiramo na različne načine. Je tudi Banachov prostor, torej lahko element prostora namesto z vsoto baznih vektorjev opišemo kot integral nekih vektorjev.

2. V tem prostoru imamo skalarni produkt, definiran kot:

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \int \varphi^* \psi \, dx$$

Mimogrede: to se razlikuje od skalarne produkta, kakršnega običajno definirajo matematiki: prvič po oznaki, drugič po dejstvu, da bi matematiki konjugirali funkcijo  $\psi$ . To lahko vodi do nekaterih manjših težav z matematičnega stališča, vendar zaupamo, da je Neumannu to uspelo dobro utemeljiti.

Nekaj lastnosti tega skalarne produkta:

- $\langle \varphi | \psi \rangle = \langle \psi | \varphi \rangle^*$

- $\langle \psi | \psi \rangle \geq 0$ , in je enako 0 le v primeru  $\psi = 0$
- $|\langle \varphi | \psi \rangle|^2 \leq \langle \varphi | \varphi \rangle \langle \psi | \psi \rangle$

Mimogrede: tej Diracovi notaciji rečemo "braket" notacija. "Ket" ali  $|\psi\rangle$  označuje opazovano stanje ali vektor. 3. V tem prostoru imamo linearne operatorje: operatorje, za katere velja:

$$A(\lambda|\varphi\rangle + \eta|\psi\rangle) = \lambda A|\varphi\rangle + \eta A|\psi\rangle$$

Imamo tudi antilinearne operatorje, za katere velja:

$$A\lambda|\psi\rangle = \lambda^* A|\psi\rangle$$

Tak operator je na primer  $t \mapsto -t$ . 4. Velja Rieszov izrek: lahko definiramo linearni funkcional  $f|\psi\rangle = z \in \mathbb{C}$ , da je

$$\int f^*(x)\psi(x) dx = f\psi = \langle f | \psi \rangle$$

Dirac je na podlagi tega izreka uvedel bra; funkcional  $\langle \varphi | = f$ , definiran s predpisom

$$\langle \varphi | \dots = \int \varphi^*(x) \dots dx$$

V "braket" zapisu je torej "bra" funkcional, "ket" pa opis stanja.

**Razvoj stanja po bazi.** V preteklosti smo določili koeficiente  $c_n$ , da je

$$\psi(x) = \sum_n c_n \varphi_n(x)$$

Tu so  $\varphi_n$  bazni vektorji, za katere naj velja, da so ortonormirani. Ugotovimo

$$\psi(x) = \sum_n \varphi_n \int \varphi_n^*(x) \psi(x) dx$$

Dirac je uporabljal malo poseben zapis, in sicer je namesto  $|\varphi_n\rangle$  pisal  $|n\rangle$ .

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_n \langle n | \psi \rangle |n\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n | \psi \rangle \\ &= \left( \sum_n |n\rangle \langle n| \right) |\psi\rangle = I\psi \end{aligned}$$

Dobili smo torej, da je operacija  $\left( \sum_n |n\rangle \langle n| \right)$  enaka identiteti.

**Razvoj operatorja.** Zdaj si oglejmo funkcijo  $A\psi$ , kjer je  $A$  poljubni operator.

$$A\psi = IAI|\psi\rangle$$

Dvakrat smo vmes vrnili identiteto, s čimer v principu ni nič narobe, nam bo pa po prejšnjem razmisleku omogočilo, da namesto ene identitete vstavimo  $\left( \sum_m |m\rangle \langle m| \right)$ , namesto druge pa  $\left( \sum_n |n\rangle \langle n| \right)$ .

$$\begin{aligned} &= \sum_m |m\rangle \langle m | A | n \rangle \langle n | \psi \rangle \\ &= |m\rangle \int \varphi_m^* A \varphi_n dx \langle n | \psi \rangle \end{aligned}$$

Definiramo matriko  $\{A_{mn}\}$ , kjer je  $A_{mn} = \langle m|A|n\rangle$ . Dobili smo torej matriko, ki nam v dani bazi opiše operator  $A$ . Matrika je sicer neskončno dimenzionalna, toda govoto so kakšni primeri, ko to ne bo težava. Zapišemo lahko:

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$

$$A|\psi\rangle = \sum_m \left( \sum_n A_{mn} c_n \right) |m\rangle$$

Označimo  $d_m = \sum_n A_{mn} c_n$  in dobili smo nov vektor:  $A|\psi\rangle = |\psi_1\rangle = \sum_m d_m |m\rangle$

**Hermitski simetrični operatorji.** Iščemo operatorje, za katere velja

$$\langle \varphi | A | \psi \rangle = \langle A \varphi | \psi \rangle, \quad \forall \varphi, \psi$$

Nekaj primerov:

$$\langle \psi | A | \psi \rangle = \langle A \psi | \psi \rangle = \langle \psi | A \psi \rangle^* = \langle \psi | A | \psi \rangle^* \in \mathbb{R}$$

$$A|a\rangle = a|a\rangle \Rightarrow \langle a|A|a\rangle = a\langle a|a\rangle \in \mathbb{R} \Rightarrow a \in \mathbb{R}$$

$$A|a\rangle = a|a\rangle \text{ in } A|b\rangle = b|b\rangle \Rightarrow \langle b|A|a\rangle = a\langle b|a\rangle = b\langle b|a\rangle$$

Iz zadnjega sledi, da je  $(b - a)\langle b|a\rangle = 0$ , torej za neki lastni vrednosti in pridružena lastna vektorja operatorja  $A$  velja  $b = a$  ali pa  $\langle b|a\rangle = 0$