Stavy a pozorovatelné

Martin Štefaňák

6. října 2020

Přehled

1. Popis stavů kvantové částice
2. Pozorovatelné veličiny v kvantové mechanice
3. Energie harmonického oscilátoru
4. Moment hybnosti

Přehled

1 Popis stavů kvantové částice

2 Pozorovatelné veličiny v kvantové mechanice

3 Energie harmonického oscilátoru

4 Moment hybnosti

Kvantová částice v $\mathbb{R}^3$

- Okamžitý stav je popsán vlnovou funkcí $\psi(\vec{x})$ — komplexní funkce
- Bornova interpretace — $\psi(\vec{x})$ musí být kvadraticky integrabilní

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\vec{x})|^2 \, d^3x < \infty$$

- $\psi(\vec{x})$ a $c\psi(\vec{x})$, $c \neq 0$ popisují stejný fyzikální stav
- Dodatečná normalizační podmínka

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\vec{x})|^2 \, d^3x = 1 \Longrightarrow w_\psi(\vec{x}) = |\psi(\vec{x})|^2$$

- Princip superpozice — $a\psi_1 + b\psi_2$ je také přípustný stav částice

Kvantová částice v $\mathbb{R}^3$

Je superpozice kvadraticky integrabilní?

Minkowskiho nerovnost

$$\left(\int_{\mathbb{R}^3} |\psi_1 + \psi_2|^2 \, d^3x \right)^{\frac{1}{2}} \leq \left(\int_{\mathbb{R}^3} |\psi_1|^2 \, d^3x \right)^{\frac{1}{2}} + \left(\int_{\mathbb{R}^3} |\psi_2|^2 \, d^3x \right)^{\frac{1}{2}}$$

- Kvadraticky integrabilní funkce — vektorový prostor $\mathscr{L}^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$
- Po jisté úpravě lze zavést skalární součin — Hilbertův prostor

$$\mathscr{H} = L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$$

pre-Hilbertův prostor

Vektorový prostor se striktně pozitivní formou $(\cdot,\cdot)$ (skalární součin)

- Pozitivní forma na $\mathscr{L}^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$

$$(\psi,\phi) = \int_{\mathbb{R}^3} \overline{\psi}(\vec{x})\phi(\vec{x})d^3x$$

- Není striktně pozitivní — $(\psi,\psi) = 0 \Leftrightarrow \psi \sim 0$
- Vektorový prostor tříd funkcí — $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x) = \mathscr{L}^2(\mathbb{R}^3, d^3x)/_\sim$
- Na $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$ je forma striktně pozitivní

$L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$ je pre-Hilbertův prostor

Hilbertův prostor

Skalární součin indukuje

- normu vektoru — $\|\psi\| = \sqrt{(\psi, \psi)}$
- vzdálenost vektorů (metriku) — $\rho(\psi, \phi) = \|\psi - \phi\|$

Hilbertův prostor $\mathscr{H}$

Vektorový prostor se skalárním součinem, který je úplný

- $\mathbb{C}^n$ se standardním skalárním součinem je Hilbertův prostor
- $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$ je Hilbertův prostor

Separabilní Hilbertův prostor

Obsahuje všude hustou nejvýše spočetnou podmnožinu

Prostor stavů kvantové částice

Postulát 1

- Prostor možných stavů kvantové částice je separabilní Hilbertův prostor $\mathscr{H}$
- Stav kvantové částice je popsán nenulovým vektorem $\psi \in \mathscr{H}$
- Bez újmy na obecnosti lze volit $\|\psi\| = 1$
- Skalární součin určuje amplitudu pravděpodobnosti přechodu mezi stavy

$$W_{\psi \to \phi} = |(\phi, \psi)|^2$$

- Globální fáze — ψ a $e^{i\alpha}\psi$ popisují stejný fyzikální stav
- Relativní fáze — $\chi(\alpha) = \psi + e^{i\alpha}\phi$ popisují různé fyzikální stavy

Prostor stavů kvantové částice

Volba Hilbertova prostoru

- Kvantová částice v $\mathbb{R}^3$ — $\mathscr{H} = L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$
- Kvantový LHO — $\mathscr{H} = L^2(\mathbb{R}, dx)$
- Částice na úsečce (∞ potenciálová jáma) — $\mathscr{H} = L^2((a,b), dx)$
- Spin $\frac{1}{2}$ — $\mathscr{H} = \mathbb{C}^2$

Ortonormální báze

Ortonormální báze (ONB)

- Ortonormální množina $B = \{\psi_n\} \subset \mathscr{H}$

$$(\psi_n, \psi_m) = \delta_{n,m}$$

- Ortogonální doplněk $B^\perp$ je nulový vektor

$$(\phi, \psi_n) = 0 \ \forall n \implies \phi = 0$$

$\mathscr{H}$ je separabilní $\implies$ existuje nejvýše spočetná ortonormální báze

Vlastnosti ortonormální báze

Nechť $B = \{\psi_n |\ n \in \mathbb{N}\}$ je ONB v $\mathscr{H}$, $\psi \in \mathscr{H}$

Fourierův rozvoj

$$\psi = \sum_{n=1}^{\infty} (\psi_n, \psi)\ \psi_n$$

Parsevalova rovnost

$$\|\psi\|^2 = \sum_{n=1}^{\infty} |(\psi_n, \psi)|^2$$

Rieszovo lemma

- Pro každý spojitý lineární funkcionál $\Phi \in \mathscr{H}^*$ existuje právě jeden vektor $\phi \in \mathscr{H}$ takový, že

$$\forall \psi \in \mathscr{H}, \ \Phi(\psi) = (\phi, \psi)$$

- $\mathscr{H}$ a $\mathscr{H}^*$ jsou izomorfní

$$\mathscr{H} \simeq \mathscr{H}^*$$

Diracův Bra-ketový formalismus

- $\mathscr{H}$ — abstraktní Hilbertův prostor
- Vektor z $\mathscr{H}$ — ket $|\psi\rangle$
- Skalární součin $|\psi\rangle$, $|\phi\rangle \in \mathscr{H}$ — $\langle\psi|\phi\rangle$
- Lineární funkcionál z $\mathscr{H}^*$ — bra $\langle\psi|$
- Rieszovo lemma — $|\psi\rangle \longleftrightarrow \langle\psi|$ je navzájem jednoznačné

Konečná dimenze N, $\mathscr{H} \simeq \mathbb{C}^N$

Standardní báze $\mathscr{H}$

$$|1\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |2\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \ldots, |N\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$$

Standardní báze $\mathscr{H}^*$

$$\begin{aligned} \langle 1| &\equiv (1, 0, \ldots, 0), \\ \langle 2| &\equiv (0, 1, \ldots, 0), \\ &\vdots \\ \langle N| &\equiv (0, 0, \ldots, 1). \end{aligned}$$

Konečná dimenze N, $\mathscr{H} \simeq \mathbb{C}^N$

Obecný ket

$$|\psi\rangle \equiv \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix} \longleftrightarrow \langle\psi| = (|\psi\rangle)^\dagger \equiv (\overline{a}_1, \overline{a}_2, \ldots, \overline{a}_N)$$

Fourierův rozvoj

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_{j=1}^{N} \langle j|\psi\rangle\ |j\rangle, \quad \langle j|\psi\rangle = a_j \\ \langle\psi| &= \sum_{j=1}^{N} \langle\psi|j\rangle\ \langle j|, \quad \langle\psi|j\rangle = \overline{\langle j|\psi\rangle} = \overline{a}_j \end{aligned}$$

Ortogonální projektory

Skalární součin

$$\langle 1|1\rangle \quad = \quad (1,0,\ldots,0)\begin{pmatrix}1\\0\\\vdots\\0\end{pmatrix} = 1$$

V opačném pořadí - operátor

$$|1\rangle\langle 1| \quad = \quad \begin{pmatrix}1\\0\\\vdots\\0\end{pmatrix}(1,0,\ldots,0) = \begin{pmatrix}1 & 0 & \ldots & 0\\0 & 0 & \ldots & 0\\ & & \vdots & \\0 & 0 & \ldots & 0\end{pmatrix}$$

Ortogonální projektory

- $|j\rangle\langle j|$ je ortogonální projektor na ket $|j\rangle$

$$|j\rangle\langle j|(|\phi\rangle) = \langle j|\phi\rangle\ |j\rangle, \quad (|j\rangle\langle j|)^2 = |j\rangle \underbrace{\langle j|j\rangle}_{1} \langle j| = |j\rangle\langle j|$$

- Obecně $|\psi\rangle\langle\psi|$ je ortogonální projektor na ket $|\psi\rangle$

Ortonormální báze

$\{|j\rangle | j = 1, \ldots N\}$ je ONB $\Longleftrightarrow$

- Relace ortogonality

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$$

- Relace úplnosti

$$\sum_{j=1}^{N} |j\rangle\langle j| = \hat{I}$$

$\mathscr{H}$ má nekonečnou dimenzi

Vždy existuje nejvýše spočetná ortonormální báze

Ortonormální báze

$\{|j\rangle | j \in \mathbb{N}\}$ je ONB $\Longleftrightarrow$

- Relace ortogonality
$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$$
- Relace úplnosti
$$\sum_{j=1}^{\infty} |j\rangle\langle j| = \hat{I}$$

Přehled

1. Popis stavů kvantové částice
2. Pozorovatelné veličiny v kvantové mechanice
3. Energie harmonického oscilátoru
4. Moment hybnosti

Pozorovatelné v klasické a kvantové mechanice

Klasická mechanika

- Stavový prostor — fázový prostor Γ
- Stav — poloha a hybnost $(q, p) \in \Gamma$
- Pozorovatelné — reálné funkce na fázovém prostoru $f(q, p)$
- Možné hodnoty pozorovatelné — obor hodnot funkce f

Kvantová mechanika

- Stavový prostor — Hilbertův prostor $\mathscr{H}$
- Stav — nenulový vektor $\psi \in \mathscr{H}$
- Pozorovatelné — samosdružené operátory $\hat{A}$ na $\mathscr{H}$
- Možné hodnoty pozorovatelné — spektrum operátoru $\sigma(\hat{A})$

Přiřazení operátorů pozorovatelným pro částici v $\mathbb{R}^3$

Poloha a hybnost

$$(\hat{Q}_j\psi)(\vec{x}) = x_j\psi(\vec{x}), \quad (\hat{P}_j\psi)(\vec{x}) = -i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x_j}(\vec{x})$$

Princip korespondence

$$f(q_j, p_j) \quad \longrightarrow \quad f(\hat{Q}_j, \hat{P}_j)$$

Celková energie

$$H(x_j, p_j) = \frac{p^2}{2M} + V(\vec{x}) \quad \longrightarrow \quad \hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2M} + V(\hat{\vec{Q}})$$

$$(\hat{H}\psi)(\vec{x}) \quad = \quad -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta\psi(\vec{x}) + V(\vec{x})\psi(\vec{x})$$

Samosdružené operátory

- Zobecnění pojmu hermitovský operátor pro dim $\mathscr{H} = \infty$
- Pro dim $\mathscr{H} = \infty$ existují operátory, které nejsou omezené
- Neomezené operátory nelze spojitě rozšířit na celý $\mathscr{H}$

Sdružený operátor k neomezenému operátoru $\hat{A}$

$$(\psi, \hat{A}\chi) = (\phi, \chi), \quad \hat{A}^\dagger\psi = \phi, \quad D(\hat{A}^\dagger) = \{\psi|\exists\phi\}$$

Samosdružený operátor

$$\hat{A} = \hat{A}^\dagger \quad (D(\hat{A}) = D(\hat{A}^\dagger))$$

- Operátory polohy $\hat{Q}_j$ a hybnosti $\hat{P}_j$ jsou samosdružené

Spektrum operátoru

Definice spektra pro dim $\mathscr{H} = \infty$

$\lambda \in \sigma(\hat{A}) \subset \mathbb{C} \Longleftrightarrow \hat{A} - \lambda$ není bijekce $D(\hat{A}) \longrightarrow \mathscr{H}$

Bodové spektrum σ_p

- $\hat{A} - \lambda$ není prostý $\Longrightarrow \exists \psi \neq 0, \quad \hat{A}\psi = \lambda\psi$
- λ je vlastní číslo, ψ je vlastní vektor

Spojité spektrum σ_c

- $\hat{A} - \lambda$ není na (surjektivní)
- $\lambda \notin \sigma_p(\hat{A})$, a zároveň $\exists$ posloupnost jednotkových vektorů $\{\psi_n\}$, která nemá konvergentní podposloupnost, taková, že

$$\lim_{n\to\infty} (\hat{A} - \lambda)\psi_n = 0$$

Spojité spektrum

Bodům ze spojitého spektra nelze přiřadit vlastní vektory

Hybnost částice na přímce $\hat{P} = -i\hbar\frac{d}{dx}$

- Formální řešení rovnice na vlastní čísla

$$\hat{P}\psi = p\psi \Longrightarrow -i\hbar\psi' = p\psi \Longrightarrow \psi_p(x) = Ae^{\frac{i}{\hbar}px}$$

- $\psi_p(x)$ není kvadraticky integrabilní — $|\psi_p(x)|^2 = A^2$
- $\hat{P}$ nemá žádná vlastní čísla ani vlastní vektory
- Hybnost má pouze spojité spektrum — $\sigma(\hat{P}) = \sigma_c(\hat{P}) = \mathbb{R}$
- $\psi_p(x)$ lze interpretovat jako zobecněný vlastní vektor

Podobně, poloha má pouze spojité spektrum — $\sigma(\hat{Q}) = \sigma_c(\hat{Q}) = \mathbb{R}$

Pozorovatelné v kvantové mechanice

Postulát 2

- Pozorovatelným veličinám odpovídají lineární samosdružené operátory na stavovém prostoru $\mathscr{H}$

$$\hat{A} = \hat{A}^\dagger$$

- Možné výsledky měření odpovídají spektru operátoru $\sigma(\hat{A})$

Spektrum samosdruženého operátoru je reálné

$$\sigma(\hat{A}) \subseteq \mathbb{R}$$

Abstraktní zápis pomocí braketů

- Operátory lze reprezentovat pomocí matic
- ON báze $\{|j\rangle\}$

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij}, \quad \sum_i |i\rangle\langle i| = \hat{I}$$

- Maticové elementy $\hat{A}$

$$A_{ij} = \langle i|\hat{A}|j\rangle$$

- Abstraktní zápis operátoru

$$\hat{A} = \sum_{i,j} A_{ij}|i\rangle\langle j|$$

Operátor s čistě bodovým spektrem

- Má pouze vlastní čísla

$$\hat{A}|n\rangle = a_n|n\rangle$$

- Vlastní vektory tvoří ON bázi

$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm}, \quad \sum_n |n\rangle\langle n| = \hat{I}$$

- Spektrální rozklad operátoru $\hat{A}$

$$\hat{A} = \sum_n a_n|n\rangle\langle n|$$

- V bázi vlastních vektorů je matice operátoru diagonální

$$A_{nm} = \langle n|\hat{A}|m\rangle = a_n\delta_{nm}$$

Operátor se spojitým spektrem

- Formální řešení rovnice

$$\hat{B}|b\rangle = b|b\rangle, \quad b \in \sigma_c(\hat{B})$$

- Zobecněné vlastní vektory — $|b\rangle \notin \mathscr{H}$
- Spojitá báze

$$\langle b|b'\rangle = \delta(b - b'), \quad \int\limits_{\sigma_c(\hat{B})} db|b\rangle\langle b| = \hat{I}$$

- Spektrální rozklad operátoru $\hat{B}$

$$\hat{B} = \int\limits_{\sigma_c(\hat{B})} dbb|b\rangle\langle b|$$

Přehled

1. Popis stavů kvantové částice
2. Pozorovatelné veličiny v kvantové mechanice
3. Energie harmonického oscilátoru
4. Moment hybnosti

Hamiltonián lineárního harmonického oscilátoru

- Princip korespondence

$$\hat{H} = \frac{1}{2M}\hat{P}^2 + \frac{1}{2}M\omega^2\hat{Q}^2$$

- Rovnice na vlastní čísla a vlastní funkce

$$\hat{H}\psi = E\psi \Longrightarrow -\frac{\hbar^2}{2M}\psi'' + \frac{1}{2}M\omega^2 x^2\psi = E\psi$$

- Přechod k bezrozměrné proměnné

$$\xi = \sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}}, \psi(x) \equiv \phi(\xi) \Longrightarrow \phi'' - \xi^2\phi + \Lambda\phi = 0, \Lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

Vlastní funkce Hamiltoniánu LHO

- Kvadratická integrabilita — $\phi(\xi) \to 0$ pro $|\xi| \to \infty$
- Přibližné řešení pro $|\xi| \to \infty$

$$\phi'' \approx \xi^2 \phi \Longrightarrow \phi(\xi) \approx e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

- Ansatz

$$\phi(\xi) = u(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

- Rovnice pro u

$$u'' = 2\xi u' + (1 - \Lambda) u$$

- Kvadratická integrabilita — $u(\xi)$ roste pomaleji než $e^{\frac{\xi^2}{2}}$

Vlastní funkce Hamiltoniánu LHO

- u ve tvaru mocninné řady

$$u(\xi) = \xi^s \sum_{m=0}^{\infty} a_m \xi^m, \quad a_0 \neq 0, \quad s \geq 0$$

- Podmínky na členy rozvoje

$$\begin{aligned} \xi^{s-2}: &\qquad s = 0 \vee s = 1 \\ \xi^{s-1}: &\qquad a_1 s(s+1) = 0 \\ \xi^{m+s}: &\qquad a_{m+2} = \frac{2(m+s)+1-\Lambda}{(m+2+s)(m+1+s)} a_m \end{aligned}$$

Spektrum Hamiltoniánu LHO

- Pokud je ∞-mnoho $a_m \neq 0 \Longrightarrow u(\xi) \sim e^{\xi^2}$ pro $|\xi| \to \infty$
- Kvadratická integrabilita $\Longrightarrow$ u je polynom

$$\begin{aligned} \exists N \; sud\acute{e}, \; 2(N+s) + 1 - \Lambda = 0 \quad &\Longrightarrow \quad a_{N+2l} = 0 \\ a_1 = 0 \quad &\Longrightarrow \quad a_{2l+1} = 0 \end{aligned}$$

- Vlastní čísla hamiltoniánu LHO

$$\Lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}, \; N + s = n \Longrightarrow E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad n \in \mathbb{Z}_+$$

Vlastní funkce hamiltoniánu LHO

- Vlastní funkce

$$\psi_n(\xi) = \left(\frac{M\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{n!2^n}} H_n(\xi)\, e^{-\frac{\xi^2}{2}}, \quad \hat{H}\psi_n = E_n\psi_n$$

- Hermitovy polynomy

$$H_n(z) = (-1)^n e^{z^2} \frac{d^n}{dz^n} e^{-z^2}$$

- Množina vlastních funkcí tvoří ON bázi v $\mathscr{H} = L^2(\mathbb{R}, dx)$

$$(\psi_n, \psi_m) = \delta_{n,m}$$

- Hamiltonián LHO má čistě bodové prosté spektrum

$$\sigma(\hat{H}) = \sigma_p(\hat{H}) = \left\{E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega | n \in \mathbb{Z}_+\right\}$$

Izotropní oscilátor

- Rozložení hamiltoniánu — tři nezávislé LHO

$$\hat{H}_{3D} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_3, \quad \hat{H}_j = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial x_j^2} + \frac{1}{2}M\omega^2 x_j^2$$

- Vlastní funkce $\hat{H}_{3D}$ pomocí vlastních funkcí $\hat{H}$

$$\begin{aligned} \psi_{n_1,n_2,n_3}(x_1, x_2, x_3) &= \psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2)\psi_{n_3}(x_3) \\ \hat{H}_{3D}\psi_{n_1,n_2,n_3} &= \left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega\psi_{n_1,n_2,n_3} \end{aligned}$$

- Množina vlastních funkcí tvoří ON bázi v $\mathscr{H} = L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$

$$(\psi_{n_1,n_2,n_3}, \psi_{m_1,m_2,m_3}) = \delta_{n_1,m_1}\delta_{n_2,m_2}\delta_{n_3,m_3}$$

Spektrum hamiltoniánu izotropního oscilátoru

- Hamiltonián má čistě bodové spektrum

$$\sigma(\hat{H}_{3D}) = \sigma_p(\hat{H}_{3D}) = \left\{ E_N = \left(N + \frac{3}{2} \right) \hbar\omega | N \in \mathbb{Z}_+ \right\}$$

- Energie závisí na hlavním kvantovém čísle

$$N = n_1 + n_2 + n_3$$

- Vlastní hodnoty nejsou prosté (kromě $E_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega$)

$$D_N = \frac{(N+1)(N+2)}{2}$$

Přehled

1 Popis stavů kvantové částice

2 Pozorovatelné veličiny v kvantové mechanice

3 Energie harmonického oscilátoru

4 Moment hybnosti

Složky momentu hybnosti

- Princip korespondence

$$\hat{L}_i = \varepsilon_{ijk} \hat{Q}_j \hat{P}_k$$

- Rovnice na vlastní čísla a vlastní funkce

$$\hat{L}_j \psi = \mu \psi$$

- Zjednoduší se přechodem do sférických souřadnic

$$\hat{L}_3 = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

Složky momentu hybnosti

- Řešení rovnice

$$\hat{L}_3\psi = -i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} = \mu\psi \Longrightarrow \psi(r,\theta,\varphi) = \chi(r,\theta)e^{\frac{i}{\hbar}\mu\varphi}$$

- Řešení musí být spojitá funkce - 2π-periodická ve φ

$$\mu = m\hbar, \quad m \in \mathbb{Z}$$

- Spektra všech složek momentu hybnosti jsou stejná

$$\sigma(\hat{L}_j) = \sigma_p(\hat{L}_j) = \{m\hbar | m \in \mathbb{Z}\}$$

- Vlastní funkce $\hat{L}_3$

$$\psi(r,\theta,\varphi) = \chi(r,\theta)e^{im\varphi}$$