Popis stavů kvantové částice

Martin Štefaňák

26. února 2021

Přehled

Přehled

1. Vlnová funkce
2. Prostor stavů kvantové částice
3. Vlastnosti Hilbertových prostorů

Schrödingerova rovnice

- Okamžitý stav částice je popsaný vlnovou funkcí $\psi(\vec{x})$
- Časový vývoj vlnové funkce je dán Schrödingerovou rovnicí

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

- Řešení Schrödingerovy rovnice jsou komplexní funkce
- Schrödingerova rovnice je lineární — LK řešení je opět řešení

Princip superpozice

- ψ_1 a ψ_2 jsou možné stavy částice $\Longrightarrow$ jejich superpozice je opět možný stav

$$\psi = a\psi_1 + b\psi_2, \quad a, b \in \mathbb{C}$$

- Prostor možných stavů kvantové částice je vektorový prostor nad $\mathbb{C}$

Bornova interpretace vlnové funkce

- Vlnová funkce představuje popis stavu kvantové částice
- $\psi(\vec{x}) \sim$ amplituda pravděpodobnosti nalezení částice v bodě $\vec{x}$

$$|\psi(\vec{x})|^2 \sim w_\psi(\vec{x})$$

- Předpovědi kvantové mechaniky mají pravděpodobností charakter

$$W(\vec{x} \in V) = \int_V w_\psi(\vec{x}) d^3x \sim \int_V |\psi(\vec{x})|^2 d^3x$$

- Vlnové funkce musí být kvadraticky integrabilní

$$\begin{aligned} W(\vec{x} \in \mathbb{R}^3) &= \int_{\mathbb{R}^3} w_\psi(\vec{x}) d^3x = 1 \\ \int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\vec{x})|^2 d^3x &= K < \infty \longrightarrow w_\psi(\vec{x}) = \frac{|\psi(\vec{x})|^2}{K} \end{aligned}$$

Princip superpozice a Bornova interpretace

- Uvažujme dvě kvadraticky integrabilní vlnové funkce ψ_1 a ψ_2

Je superpozice kvadraticky integrabilní?

Minkowskiho nerovnost

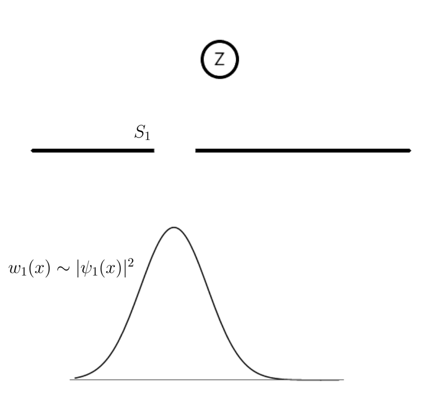
$$\left(\int_{\mathbb{R}^3} |\psi_1 + \psi_2|^2\, d^3x\right)^{\frac{1}{2}} \leq \left(\int_{\mathbb{R}^3} |\psi_1|^2\, d^3x\right)^{\frac{1}{2}} + \left(\int_{\mathbb{R}^3} |\psi_2|^2\, d^3x\right)^{\frac{1}{2}}$$

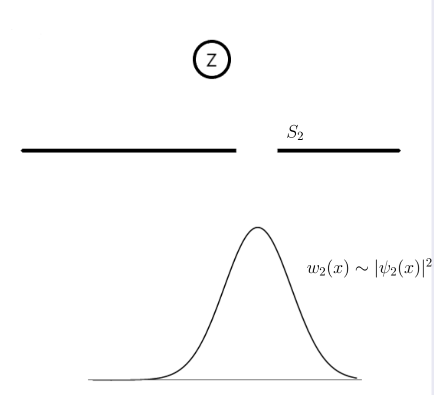
Kvadraticky integrabilní funkce tvoří vektorový prostor — $\mathscr{L}^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$

- Pomocí principu superpozice a Bornovy interpretace můžeme snadno popsat interferenční jevy — např. interferenci na dvou štěrbinách

Dvouštěrbinový experiment

- Otevřená jen jedna štěrbina S_j — stav částice popsaný $\psi_j(x)$





Pravděpodobnost dopadu do bodu x

$$w_j(x) \sim |\psi_j(x)|^2$$

Dvouštěrbinový experiment

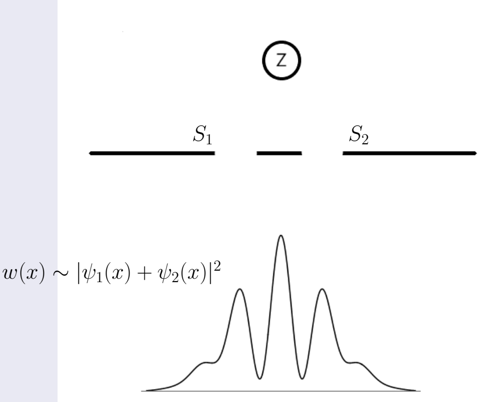
Otevřené obě štěrbiny, není možné rozlišit, kterou částice prošla

- Stav částice — superpozice

$$\psi(x) = \psi_1(x) + \psi_2(x)$$

- Sčítají se amplitudy
- Pravděpodobnost dopadu do bodu x

$$\begin{aligned} w(x) &\sim |\psi_1(x) + \psi_2(x)|^2 \\ &\sim |\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2 + \\ &\quad +\overline{\psi}_1(x)\psi_2(x) + \psi_1(x)\overline{\psi}_2(x) \end{aligned}$$



- Nelze rozlišit trajektorie — kvantové částice se chovají jako vlny
- Dochází k interferenci

Přehled

Prostor stavů kvantové částice v $\mathbb{R}^3$

- Stav částice je popsán kvadraticky integrabilní vlnovou funkcí $\psi(\vec{x})$
- Množina kvadraticky integrabilních funkcí tvoří vektorový prostor $\mathscr{L}^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$
- Po jisté úpravě lze na $\mathscr{L}^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$ zavést skalární součin, který má pro kvantovou mechaniku zásadní význam

Skalární součin

- Forma — $(\cdot,\cdot) : V \times V \longrightarrow \mathbb{C}$
- Sesquilineární — lineární v pravém argumentu, antilineární v levém

$$(\psi, \phi_1 + a\phi_2) = (\psi, \phi_1) + a(\psi, \phi_2), \quad (\psi_1 + a\psi_2, \phi) = (\psi_1, \phi) + \bar{a}(\psi_2, \phi)$$

- Striktně pozitivní — diagonála je nezáporná, nulová jen pro nulový vektor

$$(\psi, \psi) \geq 0 \quad \forall \psi \in V, \quad (\psi, \psi) = 0 \Longleftrightarrow \psi = 0$$

Skalární součin na prostoru kvadraticky integrabilních funkcí

- Na $\mathscr{L}^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$ lze zavést sesquilineární pozitivní formu

$$(\psi,\phi) = \int_{\mathbb{R}^3} \overline{\psi}(\vec{x})\phi(\vec{x})d^3x, \quad (\psi,\psi) = \int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\vec{x})|^2 d^3x \geq 0$$

- Není striktně pozitivní — $(\psi,\psi) = 0 \iff \psi \sim 0$
- $f \sim g \iff f$ a g se rovnají "skoro všude"$\iff$ liší se na množině nulové míry

$$f \sim g \implies \int_{\mathbb{R}^3} f(\vec{x})d^3x = \int_{\mathbb{R}^3} g(\vec{x})d^3x$$

- 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 — je to skalární součin

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

- V praxi není mezi L^2 a $\mathscr{L}^2$ rozdíl — každá třída je jednoznačně určená libovolnou funkcí, která do ní patří

Hilbertův prostor

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

Hilbertův prostor $\mathscr{H}$

- Vektorový prostor se skalárním součinem
- Je úplný v metrice indukované skalárním součinem $\Longleftrightarrow$ každá cauchyovská posloupnost má limitu

Prostor kvadraticky integrabilních funkcí $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$ je Hilbertův prostor

Prostor stavů kvantové částice

Postulát

- Prostor možných stavů kvantové částice je Hilbertův prostor $\mathscr{H}$
- Stav kvantové částice je popsán nenulovým vektorem $\psi \in \mathscr{H}$
- Skalární součin (ϕ, ψ) určuje amplitudu pravděpodobnosti přechodu mezi stavy ψ a ϕ
- Pravděpodobnost přechodu mezi stavy ψ a ϕ je úměrná absolutní hodnotě na druhou jejich skalárního součinu

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

Volba Hilbertova prostoru

- Omezíme na příklady, kde vystačíme s Hilbertovými prostory konečné dimenze

$\mathscr{H} = \mathbb{C}^n$ se standardním skalárním součinem

- Hilbertův prostor určíme zvolením ortonormální báze
- Bazické vektory — stavy, které lze od sebe jednoznačně odlišit nějakým měřením

Spin-$\frac{1}{2}$

- Dva jednoznačně odlišitelné stavy — kladná/záporná projekce spinu do osy z
- Tyto stavy zvolíme jako standardní ortonormální bázi Hilbertova prostoru

$$\psi_{z,+} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_{z,-} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathscr{H} = [\psi_{z,+}, \psi_{z,-}]_\lambda = \mathbb{C}^2$$

- Pokud má spin kladnou projekci do osy z, nemohu naměřit zápornou

$$W_{\psi_{z,+}\rightarrow\psi_{z,-}} \sim |\,(\psi_{z,-}, \psi_{z,+})\,|^2 = 0$$

Přehled

1. Vlnová funkce

2. Prostor stavů kvantové částice

3. Vlastnosti Hilbertových prostorů

Ortonormální báze

V Hilbertových prostorech lze zavést ortonormální bázi (ONB)

- Množina ortonormálních vektorů $B = \{\psi_j\} \subset \mathscr{H}$

$$(\psi_j, \psi_k) = \delta_{j,k}$$

- $\dim \mathscr{H} = N < \infty$ — bazických vektorů je N
- ONB lze definovat i pro $\dim \mathscr{H} = \infty$ — ortogonální doplněk $B^\perp$ je nulový vektor

$$(\phi, \psi_j) = 0 \ \forall j \implies \phi = 0$$

Vlastnosti ortonormální báze

Nechť $B = \{\psi_j |\ j = 1, \ldots, N\}$ je ONB v $\mathscr{H}$, $\psi \in \mathscr{H}$

- Koeficienty rozvoje do ONB jsou dány skalárním součinem — (ψ_j, ψ)
- Fourierův rozvoj, Parsevalova rovnost

$$\psi = \sum_{j=1}^{N} (\psi_j, \psi)\ \psi_j, \quad \|\psi\|^2 = (\psi, \psi) = \sum_{j=1}^{N} |(\psi_j, \psi)|^2$$

Fourierův koeficient (ψ_j, ψ) určuje amplitudu pravděpodobnosti přechodu $\psi \longrightarrow \psi_j$

Pravděpodobnosti přechodu, normalizace vektoru

- Pravděpodobnost přechodu je úměrná $|(\psi_j, \psi)|^2$
- Součet všech pravděpodobností musí být 1

$$W_{\psi\to\psi_j} = K|(\psi_j, \psi)|^2, \quad \sum_{j=1}^{N} W_{\psi\to\psi_j} = K\sum_{j=1}^{N} |(\psi_j, \psi)|^2 = K\|\psi\|^2 = 1 \Longrightarrow K = \frac{1}{\|\psi\|^2}$$

- Vektory ψ a $\psi' = c\psi$ ($c \neq 0$) vedou na stejné pravděpodobnosti přechodu

$$W_{\psi\to\psi_j} = \frac{|(\psi_j, \psi)|^2}{\|\psi\|^2}, \quad W_{\psi'\to\psi_j} = \frac{|(\psi_j, \psi')|^2}{\|\psi'\|^2} = \frac{|c|^2|(\psi_j, \psi)|^2}{|c|^2\|\psi\|^2} = W_{\psi\to\psi_j}$$

- Vektory ψ a $c\psi$ ($c \neq 0$) popisují stejný fyzikální stav
- BÚNO lze volit vektory normované k jedné — $\|\psi\|^2 = 1$, pak $W_{\psi\to\psi_j} = |(\psi_j, \psi)|^2$

Duální prostor, Rieszovo lemma

- Duální prostor $\mathscr{H}^*$ — prostor lineárních funkcionálů

$$\Phi : \mathscr{H} \longrightarrow \mathbb{C}, \quad \Phi(\psi + a\,\rho) = \Phi(\psi) + a\,\Phi(\rho)$$

Rieszovo lemma

Pro každý 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

Rieszovo lemma je základem Diracova bra-ketového zápisu

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

$$\langle\phi|(|\psi\rangle) = \langle\phi|\psi\rangle$$

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

- Standardní báze Hilbertova prostoru $\mathscr{H}$ — $\{|j\rangle | j = 1, \ldots N\}$

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

- Standardní báze duálního prostoru $\mathscr{H}^*$ — $\{\langle j| | j = 1, \ldots N\}$

$$\langle 1| \equiv (1, 0, \ldots, 0), \quad \langle 2| \equiv (0, 1, \ldots, 0), \quad \ldots, \langle N| \equiv (0, 0, \ldots, 1)$$

- Skalární součin bazických vektorů

$$\langle i|j\rangle = (0, \ldots, 1_i, \ldots 0) \begin{pmatrix} 0 \\ . \\ 1_j \\ . \\ 0 \end{pmatrix} = \delta_{ij}$$

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

- Obecný ket $|\psi\rangle$ a bra $\langle\psi|$ — superpozice bazických ketů, resp. bra

$$|\psi\rangle = \sum_{j=1}^{N} a_j |j\rangle \equiv \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix} \qquad \longleftrightarrow \qquad \langle\psi| = (|\psi\rangle)^\dagger = \sum_{j=1}^{N} \overline{a_j} \langle j| \equiv (\overline{a}_1, \overline{a}_2, \ldots, \overline{a}_N)$$

- Fourierův rozvoj, Parsevalova rovnost

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

$$\|\psi\|^2 = \langle\psi|\psi\rangle = \sum_{j=1}^{N} |\langle j|\psi\rangle|^2$$