Úvod do kvantové mechaniky

Přednáška č. 2

Verze 2024.4

Dosavadní poznatky ve formě "postulátu"/principu

P1 – Stavový vektor: Každému **izolovanému systému** je přiřazen **komplexní vektorový prostor** se skalárním součinem (tzv. Hilbertův prostor) známý jako stavový prostor systému. Systém je kompletně popsán **stavovým vektorem**, což je jednotkový vektor v Hilbertově prostoru.

Doprovodné poznámky a formalismus: Každé dva měřením plně rozlišitelné stavy musí být popsány ortogonálními vektory. Soubor $\{|n\rangle\} = \{|n\rangle, n = 1, \dots, N\}$ všech normalizovaných ortogonálních stavů/stavových vektorů $|n\rangle$ definuje bázi Hilbertova prostoru systému. Existuje I nekonečné ($N \to \infty$) a kontinuální zobecnění.

Operátory, fyzikální veličiny a měření

(předběžný "postulát") P3 – Měření a pravděpodobnost: Je-li systém ve stavu $|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$, pak **pravděpodobnost**, že bude systém naměřen/detekován ve stavu $|n\rangle$ je

$$\boldsymbol{P_n = |c_n|^2 = |\langle n|\psi\rangle|^2}.$$

Stavu $|n\rangle$ přiřazujeme tzv. **filtr** nebo **projektor**: konstrukt typu

$$\hat{F}_n = |n\rangle\langle n|,$$

který vybírá ze stavového vektoru jeho složku $|n\rangle$.

$$\hat{F}_n|\psi\rangle = c_n|n\rangle$$

Sečtením všech filtrů dostaneme operátor, který stavový vektor nijak nemění = **jednotkový operátor**

Relace úplnosti

$$\boxed{\sum_n \hat{F}_n = \sum_n |n\rangle\langle n| = \hat{1}}$$

Střední hodnota fyzikální veličiny

Kvantová mechanika dokáže předpovídat pouze pravděpodobnosti výsledků jednotlivých měření, a tedy podstatné jsou

střední hodnoty opakovaných měření.

Veličina $\boldsymbol{A}$, střední hodnota $\langle A\rangle$, měřitelné stavy $|\boldsymbol{n}\rangle$ a měřitelné hodnoty $\boldsymbol{a_n}$. Stav systému je $|\boldsymbol{\psi}\rangle$

Statistická definice

$$\langle A\rangle = \sum_n a_n P_n; \;\; P_n = |\langle\psi|n\rangle|^2$$

Přepis pomocí filtrů/projektorů

$$\boxed{\langle A\rangle = \langle\psi|(\textstyle\sum_n a_n|n\rangle\langle n|)|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle}$$

Definujeme konstrukt = **operátor**

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

Operátor příslušný fyzikální veličině:

Lze ho doslova chápat jako *přístroj* složený z *filtrů*, označených odpovídajícími naměřenými hodnotami.

(doplnění předběžného postulátu) P3 – Operátory: Každé **měřitelné veličině** náleží v kvantové mechanice **operátor** složený ze všech možných různých měřitelných stavů a s reálnými hodnotami dané veličiny odpovídajícími těmto stavům. Měřitelné veličny jsou reprezentovány samosdruženými (hermitovskými) operátory.

Reprezentace operátorů a stavu

Pro diskrétní báze $\{|i\rangle, i = 1, \dots, N\}$ lze reprezentovat operátory a stavové vektory maticemi (vektor = 1-sloupcová matice)

Operátor $\hat{A}$: **maticové elementy**

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

Operátor je pak reprezentován např. maticí:

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$$

Obecně se každému výrazu tohoto typu, např.

$$\langle\psi|\hat{A}|\phi\rangle$$

říká maticový element.

Stavový vektor: **vektorové koeficienty**, nebo koeficienty rozvoje vektoru do příslušné báze

$$\boldsymbol{c_i = \langle i|\psi\rangle} \longrightarrow |\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \qquad c_i^* = \langle\psi|i\rangle \longrightarrow \langle\psi| = \begin{pmatrix} c_1^* & c_2^* \end{pmatrix}$$

Přechod z jiné báze: Jiná báze $\{|\alpha\rangle, \alpha = 1, \dots, N\}$ na stejném prostoru: $\sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha| = 1$

vložíme **jedničky**

$$\boldsymbol{a_{ij}} = \langle i|\sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha|\,\hat{A}\sum_\beta |\beta\rangle\langle\beta|\,|j\rangle = \sum_{\alpha,\beta}\langle i|\alpha\rangle\underbrace{\langle\alpha|\hat{A}|\beta\rangle}_{a_{\alpha\beta}}\langle\beta|j\rangle$$

Elementy operátoru $\hat{A}$ v bázi $\{|i\rangle\}$ a v bázi $\{|\alpha\rangle\} \longrightarrow a_{\alpha\beta}$

Obdobně pro vektorové koeficienty:

$$\boldsymbol{c_i} = \langle i|\sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha|\,|\psi\rangle = \sum_\alpha\langle i|\alpha\rangle\langle\alpha|\psi\rangle = \sum_\alpha\langle i|\alpha\rangle c_\alpha$$

Operátory složek spinu

Umíme popsat měření spinu ve směrech z a x a tedy můžeme psát operátory

$$\hat{S}_z = \frac{1}{2}(|z+\rangle\langle z+| - |z-\rangle\langle z-|) = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma_z} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_x = \frac{1}{2}(|x+\rangle\langle x+| - |x-\rangle\langle x-|) = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma_x} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

a samozřejmě $\hat{S}_y = \frac{1}{2}(|y+\rangle\langle y+| - |y-\rangle\langle y-|) = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma_y} = ?$

Na volbě souřadnic nezáleží – vztahy $z \leftrightarrow y$ a $z \leftrightarrow x$ musí být stejný stejné. Hledáme: $\langle y+|y-\rangle = 0,$

$$|\langle x+|y+\rangle|^2 = \frac{1}{2}, |\langle z+|y+\rangle|^2 = \frac{1}{2}, \quad \text{a stejně pro } |y-\rangle$$

Řešením jsou vektory níže; kdyby nemohly být komplexní, nemohli bychom další ortogonální sadu již najít

$$|y+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|z+\rangle + i|z-\rangle)$$

$$|y-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|z+\rangle - i|z-\rangle)$$

$$\boxed{\hat{S}_y = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma_y} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}}$$

Operátor vektoru spinu

$$\hat{\boldsymbol{S}} = \hat{S}_x\vec{e}_x + \hat{S}_y\vec{e}_y + \hat{S}_z\vec{e}_z$$

Operátor spinu má tři prostorové složky (spin míří někam prostoru), přesto má vždy jen dva možné stavy a **prostor stavů je** tedy **dvojdimenzionální**.

Zdroje:

Přednáška UKM z roku 2021: https://www.mancal.cz/teaching/introduction-to-quantum-theory-lecture/

- *Sekce videí od* Measuring and Filtering the states: https://youtu.be/9eSbb9nDftY
- *až po* Spin Operators: https://youtu.be/bf_HZmz8HEE

Příště:

De Brogliovy vlny – tudy vstoupí fyzika