Úvod do kvantové mechaniky

Přednáška č. 3

Verze 2024.3

Dosavadní poznatky ve zkratce

Operátory mají velmi úzký vztah k měřicím přístrojům: operátor veličiny A = sada filtrů/projektorů $|n\rangle\langle n|$ označených měřenou hodnotou a_n.

Operátor → $\hat{A} = \sum_n a_n \underbrace{|n\rangle\langle n|}_{\text{Filtr na stav } |n\rangle}$

Měřitelné hodnoty (a_n); Rozlišitelné měřitelné stavy ($|n\rangle\langle n|$)

Operátory, fyzikální veličiny a měření

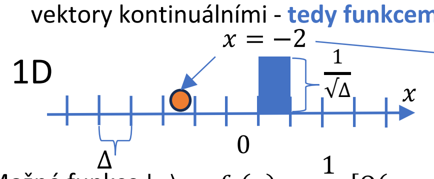
- Stavy $|n\rangle$ jsou **vlastními vektory/stavy** operátoru $\hat{A}$.
- Měřitelné hodnoty a_n jsou **vlastními čísly** operátoru $\hat{A}$.
- Měřitelné veličiny jsou reprezentovány **hermitovskými/samosdruženými** operátory/maticemi

$$\langle i|\hat{A}|j\rangle = \sum_n a_n \langle i|n\rangle\langle n|j\rangle = \left(\sum_n a_n \langle j|n\rangle\langle n|i\rangle\right)^* = \langle j|\hat{A}|i\rangle^*$$

Kontinuální analogie diskrétní báze

Proveďme konstrukci **operátoru souřadnice** (v 1D)

- Souřadnice je kontinuální veličina, nahraďme diskrétní vektory kontinuálními - **tedy funkcemi**



$$|-2\rangle = \begin{pmatrix} \vdots \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad \text{Pozice 0} \quad \text{Pozice -2}$$

Možné funkce $|n\rangle \rightarrow f_n(x) = \frac{1}{\sqrt{\Delta}}[\Theta(x - n\Delta + \Delta) - \Theta(x - n\Delta)]$

Skalární součin

$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm} = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, f_n^*(x) f_m(x)$$

Stavový vektor

$$|\psi\rangle = \sum_n \phi_n\, f_n(x)$$

Pro kontinuální popis musí funkce $\psi(x)$ být hustotou

$$|\phi_n|^2 = \int_{n\Delta}^{n\Delta+\Delta} |\psi(x)|^2 dx \approx \Delta|\psi(n\Delta)|^2 \quad \text{hustota pravděpodobnosti}$$

v limitě $\Delta \rightarrow 0$, $x' \approx n\Delta$

$$|\psi\rangle = \sum_n \psi(n\Delta) \frac{f_n(x)}{\sqrt{\Delta}} \Delta \approx \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x') f_{x'}(x) dx'$$

$$|x\rangle \equiv \lim_{\Delta\rightarrow 0} f_{x'}(x) = \delta(x' - x) \Rightarrow \boxed{\langle x|\psi\rangle = \psi(x)}$$

Vlnová funkce = stavový vektor v souřadnicové reprezentaci

$$\hat{x} = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, x|x\rangle\langle x| \Rightarrow \boxed{\langle x|\hat{x}|\psi\rangle = x\psi(x)}$$

Diracova delta-funkce: $\delta(x - x_0)$ integrována s jinou funkcí $g(x)$, vrací hodnotu funkce v bodě x_0

$$\lim_{\Delta\rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, g(x) \frac{\Theta(x - x_0 + \Delta) - \Theta(x - x_0)}{\Delta} = g(x_0)$$

$$\frac{\Theta(x - x_0 + \Delta) - \Theta(x - x_0)}{\Delta} = \delta(x - x_0)$$

Některé výrazy v souřadnicové neboli x-reprezentaci:

Skalární součin: $\langle\phi|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \phi^*(x)\psi(x)$ **v x-reprezentaci**

Maticový element: $\langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \phi^*(x)\hat{A}\psi(x)$

Princip superpozice

Naprosto zásadní princip kvantové mechaniky, stojící za jevy interference, kvantového provázání a nepřímo za dalšími.

P4 – Princip superpozice: Může-li se systém nacházet ve stavech $|\psi_1\rangle$ a $|\psi_2\rangle$, pak se může nacházet také ve stavu

$$|\psi\rangle = c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle,$$

kde c_n jsou obecně komplexní koeficienty.

$$\langle x_1|\langle x_2|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\left(e^{-\frac{i}{\hbar}p_1x_1}e^{-\frac{i}{\hbar}p_2x_2} + e^{-\frac{i}{\hbar}p_2x_1}e^{-\frac{i}{\hbar}p_1x_2}\right)$$

Dvě rozlišitelné provázané částice – dvě různé hybnosti

De Brogliovy vlny (de Brogliova hypotéza)

Analogie mezi světlem a částicemi – částice také vlny

Fotony: Plancků vztah $E = \hbar\omega$

Einstenův vztah $\vec{p} = \hbar\vec{k}$

Rovinná vlna $\boxed{\psi_p(x,t) \sim e^{-i\omega t + i\vec{k}\cdot\vec{r}} = e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p}\cdot\vec{r})}}$ popisuje stav světla s hybností $\vec{p}$.

Nějak takto by měl vypadat obecný stav $|\vec{p}\rangle$ s danou hybností; pro jinou hybnost $\vec{p}'$ musí platit

$$\langle\vec{p}'|\vec{p}\rangle = \delta_{\vec{p}'\vec{p}}$$

Více stupňů volnosti — **Direktní součin**

$$|\vec{p}\rangle = |p_x, p_y, p_z\rangle = |p_x\rangle|p_y\rangle|p_z\rangle = |p_x\rangle \otimes |p_y\rangle \otimes |p_z\rangle$$

Operátor $\hat{p}_x = \hat{p}_x \otimes \mathbb{I}_y \otimes \mathbb{I}_z$ jednotkové operátory

Odpovídá to funkci

$$\psi_p(x,t) \sim e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p}\cdot\vec{r})} \sim e^{\frac{i}{\hbar}p_x x} e^{\frac{i}{\hbar}p_y y} e^{\frac{i}{\hbar}p_z z}$$

Potvrzuje to i pravidlo o násobení pravděpodobností.

Vlastní stavy hybnosti v souřadnicové reprezentaci

De Brogliova vlna popisuje fyziku částice s hybností p, např. její difrakci.

Operátor hybnosti (1D): $\hat{p} = \int dp\, p|p\rangle\langle p|$

Vlastní problém $\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle = \int dp' p' |p'\rangle\underbrace{\langle p'|p\rangle}_{\delta(p-p')}$

Dvě de Brogliovy vlny jsou ortogonální vůči $\int_{-\infty}^{\infty} dx$

Za funkci reprezentující foton nebo jinou částici v 1D prostoru vezmeme de Brogliovu vlnu – normalizovanou na δ –funkci.

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar}px}$$

Skalární součin

$$\boxed{\langle q|p\rangle = \psi_p(q)} = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \delta(x - q) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar}px} = \boxed{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar}pq}}$$

Operátor $\hat{p}$ v **x-reprezentaci**: $\boxed{\hat{p}\psi(x) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)}$

Operátory $\hat{p}$ a $\hat{q}$:

- **Nesdílejí stejnou bázi vlastních vektorů** - nemohou být současně diagonální …
- … proto **spolu nemohou komutovat**: $\hat{p}\hat{q} \neq \hat{q}\hat{p}$
- Jako veličiny popsané nekomutujícími operátory je nelze **současně smysluplně** měřit.

Zdroje:

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

- *Sekce videí od* de Brogliovy vlny: https://youtu.be/9eSbb9nDftY
- *až po* Princip superpozice: https://youtu.be/bf_HZmz8HEE

Příště:

Schrödingerova rovnice – částice v potenciálu