Úvod do kvantové mechaniky

Přednáška č. 4

Verze 2024.2

Dosavadní poznatky ve zkratce

Ještě poznámky k operátorům

Zatím jsme operátory konstruovali z vlastních stavů. Můžeme ale znát operátor, nikoliv vlastní stavy. Potom:

- díky hermitovskosti operátorů jsou jejich **vlastní čísla vždy reálná**
- **vlastní vektory** hermitovských operátorů jsou **vždy ortogonální** (normalizaci je třeba dodatečně zaručit)
- sada všech takových vlastních vektorů **tvoří bázi na stavovém (Hilbertově) prostoru** a splňuje **relaci úplnosti**.

Popis stavů a operátorů v kontinuální reprezentaci

Typickou kontinuální reprezentací je tzv. **souřadnicová** nebo také **x-reprezentace**. Často nazýváme reprezentaci podle operátoru, jehož vlastní stavy k ní používáme, nebo podle písmene, které se pro něj typicky používá (máme i p-reprezentaci).

Operátory v x-reprezentaci

$$\boxed{\begin{aligned}\hat{x} &= x\\ \hat{p} &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\end{aligned}} \quad \begin{aligned}&\rightarrow \hat{x}^2 = x^2\\ &\rightarrow \hat{p}^2 = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\end{aligned}$$

Operátory v p-reprezentaci

$$\boxed{\begin{aligned}\hat{x} &= i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\\ \hat{p} &= p\end{aligned}}$$

Základní (tradiční) problém KM

Problém **existence stabilních stavů** v atomu a pozorovaných **diskrétních absorpčních a emisních čar**: Existují **preferované**, speciální **energie** vázaných systémů . Základní rovnicí pro tento problém je rovnice pro vlastní stavy operátoru energie – **Stacionární (bezčasová) Schrödingerova rovnice**

$$\boxed{\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle} \Rightarrow \hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$$

Nekonečně mnoho řešení

Vlastní vektory Hamiltoniánu = vlastní stavy

Operátor energie - Hamiltonián

Vlastní energie systému

Stacionární Schrödingerova rovnice v x-reprezentaci

Řada fyzikálních problémů se formuluje v nám známém prostoru, zejména tzv. *ab initio* problémy: struktura atomů a molekul. Proto chceme konstruovat Schrödingerovu rovnici v x-reprezentaci.

Mělo by stačit zkonstruovat operátory $\hat{T}$ kinetické a $\hat{V}$ potenciální energie. Jejich součet Hamiltinuán: $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$

Klasicky / kvantově

$$T = \frac{|\vec{p}|^2}{2m} \qquad \hat{T} = \frac{\vec{p}\cdot\vec{p}}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\overbrace{\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)}^{\text{Laplaceův operátor } \nabla^2}$$

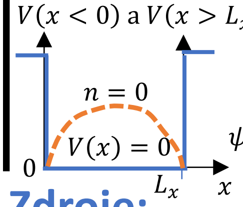
$$V = V(\vec{x}) \qquad \hat{V} = V(\vec{x}) \leftarrow$$ Triviální zobecnění

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{x}) + V(\vec{x})\psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x})}$$

Není na první pohled zřejmé, že tato diferenciální rovnice má diskrétní sadu řešení, ale je to tak. Systémy, kde je částice vázána (omezena) v prostoru vykazují diskrétní vlastní energie a stavy.

Příklad: Někonečně hluboká potenciálová jáma (1D)

$V(x < 0)$ a $V(x > L_x) \to \infty$ Okrajové podmíky – spojitost $\psi(x)$



$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L_x}}\sin\left(n\frac{\pi}{L_x}x\right)$$

Energie

$$\boxed{E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL_x^2}n^2}$$

Časový vývoj v KM

U de Brogliových vln pro fotony se vyvíjí v čase fáze, díky které dochází k interferenci světla – analogicky rozšíříme na všechny částice. Každý vlastní stav se vyvíjí s fází $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ odpovídající energii stavu E

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi_p(\vec{x},t) = -\frac{i}{\hbar}E\psi_p(\vec{x},t) = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\psi_p(\vec{x},t)$$

Podle principu superpozice a z linearity operátorů by pro každou superpozici

$$\psi(\vec{x},t) = \int d\vec{x}\, a(\vec{x})\psi_p(\vec{x},t)$$

mělo platit $\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x},t) = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\psi(\vec{x},t)$

Zobecněním na libovolný stavový vektor dostaneme **Časová Schrödingerova rovnice**

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x},t) = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\psi(\vec{x},t)}$$

Stacionární a nestacionární stavy

Vlastní stavy Hamiltoniánu – pouze fáze, která vypadne ze všech očekávaných středních hodnot = **stacionární stavy**

Je-li $\phi_n(\vec{x}, t = 0) = \psi_m(\vec{x})$ a $\hat{H}\psi_n(\vec{x}) = E_n\psi_n(\vec{x})$ pak řešením časové Schrödingerovy rovnice pro $\phi_n(\vec{x},t)$ je

$$\phi_n(\vec{x},t) = \phi_n(\vec{x},0)e^{\frac{i}{\hbar}E_n t}$$

$$\Rightarrow \langle A\rangle = \int d\vec{x}\,\phi_n^*(\vec{x},t)\hat{A}\phi_n(\vec{x},t) = const.$$

Časový vývoj oč. středních hodnot možný jen u **superpozic vlastních stavů Hamiltoniánu** = **nestacionární stavy**

Je-li $|\phi(t=0)\rangle = \sum_m c_m|\psi_m\rangle$ a $\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$ pak řešením časové Schrödingerovy rovnice pro $|\phi(t)\rangle$ je

$$|\phi(t)\rangle = \sum_m c_m\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_m t}|\psi_m\rangle$$

$$\langle A\rangle = \sum_{nm}\langle\psi_n|\hat{A}|\psi_m\rangle e^{i\frac{E_n - E_m}{\hbar}t} \neq const.$$

pokud matice elementů $\langle\psi_n|\hat{A}|\psi_m\rangle$ není diagonální

Veličiny, který sdílejí vlastní stavy s Hamiltoniánem, tedy komutují s Hamiltoniánem, jsou v čase konstantní.

Zdroje:

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

- *Sekce videí od* Stacionární Schrödingerova rovnice: https://youtu.be/7cnUDFAX-sE
- *až po* Časový vývoj k. m. systému: https://youtu.be/m63smqVSo9A

Příště:

Komutační relace – obecný postup kvantování