Úvod do kvantové mechaniky

Přednáška č. 5

Verze 2024.2

Dosavadní poznatky ve zkratce

Časová a bezčasová Schrödingerova rovnice

Časovou Schrödingerovu rovnici lze považovat za **fundametální rovnici nerelativistické kvantové mechaniky**

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

Bečasová Schrödingerova je speciální případ

$$\psi(\vec{x},t=t_0) = \psi_n(\vec{x}),$$
$$\hat{H}\psi_n(\vec{x}) = E_n\psi(\vec{x})$$

$$\psi(\vec{x},t) = \psi_n(\vec{x})e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)},$$

Triviální fáze, neprojeví se v žádném měření!

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

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi_n(\vec{x})e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)} = -\frac{i}{\hbar}E_n\psi_n(\vec{x})e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)} = -\frac{i}{\hbar}\;\hat{H}\psi_n(\vec{x})e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)}$$

$$\boxed{\hat{H}\psi(\vec{x},t) = E\psi(\vec{x},t)}$$

Evoluční operátor

Unitární evoluce

Časový vývoj lze "zabalit" do operátoru

$$\boxed{|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi(t_0)\rangle}$$

Musí splňovat Schrödingerovu r.

Při časovém vývoji podle Schrödingerovy rovnice se zachovává norma stavového vektoru, tedy:

$$\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \langle\psi(t_0)|\underbrace{\hat{U}^+(t)\hat{U}(t)}|\psi(t_0)\rangle,$$

Časový vývoj zpět v čase

$$U^{-1}(t) = U(-t) = \hat{U}^+(t)$$

Evoluční operátor splňuje Schrödingerovu rovnici

$$\frac{\partial}{\partial t}\,\hat{U}(t) = -\frac{i}{\hbar}\,\hat{H}\hat{U}(t)$$

Počáteční podmínka

$$U(t=t_0) = 1$$

$$\boxed{U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}}$$

Vývoj hustoty pravděpodobnosti

Rovnice kontinuity: zákon zachování pravděpodobnosti

Pravděpodobnost nalezení částice v objemu V

$W = \int_V d\vec{x}\psi^*(\vec{x})\psi(\vec{x})$ - hledáme její časovou změnu.

Použitím časové Schrödingerovy rovnice

$$\frac{d}{dt}W = -\int_V d\vec{x}\;\nabla\cdot\left[\underbrace{\frac{i\hbar}{2m}(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi)}_{\vec{j}}\right]$$

$\vec{j}$ - hustota toku pravděpodobnosti

Hustota pravděpodobnosti: $w(\vec{x},t) = \psi^*(\vec{x},t)\psi\;(\vec{x},t)$

Diferenciální vyjádření:

$$\boxed{\vec{j} = \frac{\hbar}{m}Im(\psi^*\nabla\psi) \qquad \frac{\partial}{\partial t}w(\vec{x},t) + \nabla\cdot\vec{j} = 0}$$

Pro reálné funkce, nebo pro komplexní funkce s konstantní fází je hustota toku pravděpodobnosti $\vec{j}$ rovna nule.

Komutační relace a kvantování

Jaký je vztah komutačních relací a přechodu klasická-kvantová fyzika? **Komutátor $[\hat{q},\hat{p}] = \hat{q}\hat{p} - \hat{p}\hat{q} = i\hbar$ vyjadřuje Bohrovu kvantovací podmínku na akci** – jak je to možné?

Vztah klasických a kvantových frekvencí vázaného pohybu:

$$\omega_{n,n-\alpha} = \alpha\frac{E_n - E_{n-\alpha}}{\hbar\alpha} \approx \frac{\alpha}{\hbar}\frac{dE(n)}{dn}$$

V klasické limitě je energie pomalu se měnící funkcí kvantového čísla n.

Akce

Původní Bohrova kvantovací podmínka $J = nh = n2\pi\hbar$ a tedy:

$$\omega_{n,n-\alpha} \approx 2\pi\alpha\frac{dE(n)}{d(hn)} = 2\pi\alpha\frac{dE(J)}{dJ}$$

Energie jako funkce akce

Zapomenutý vztah z teoretické mechaniky: $\frac{\partial E}{\partial J} = \frac{\omega}{2\pi}$

Kvantovo- klasické přiřazení

$$\omega_{n,n-\alpha} \approx \alpha\omega_T = \alpha\omega_n$$

Kanonické kvantování

Jestliže klasická fyzika reprezentuje fyzikální problém pomocí kanonicky sdružených veličin A a B jejichž Poissonova závorka dává veličinu C, pak jsou těmto veličinám v kvantové teorii přiřazeny operátory $\hat{A}$, $\hat{B}$ a $\hat{C}$ takové, že platí:

$$\boxed{[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = i\hbar\hat{C}.}$$

Kvantová mechanika v "obrazech"

Obvykle vyjadřujeme časový vývoj v KM pomocí vývoje stavu $|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi_0\rangle$. Měřitelné jsou ale pouze střední hodnoty, tedy

$$\langle\hat{A}\rangle = \langle\psi_0|U^+(t)\hat{A}U(t)|\psi_0\rangle.$$

Toto lze považovat, za střední hodnotu časově závislého operátoru za použití konstatního stavového vektoru počáteční podmínky.

Této formulaci kvantové dynamiky říkáme **Heisenbergův obraz**.

Operátor v Heisenbergově obraze:

$$\boxed{\hat{A}^{(H)} = U^+(t)\hat{A}U(t), \qquad |\psi^{(H)}(t)\rangle = U^+(t)|\psi(t)\rangle = |\psi_0\rangle}$$

Standardní kvantová mechanika s časovým vývojem stavového vektoru a konstantními operátory se obvykle označuje jako **Schrödingerův obraz**.

Mezistupněm mezi **H** a **S** obrazy je tzv. **Diracův obraz**. Pro Hamiltonián $H = H_0 + H_I$ a tedy $U_0 = \exp(-\frac{i}{\hbar}H_0t)$ definujeme

$$\hat{A}^{(I)} = U_0^+(t)\hat{A}U_0(t), \qquad |\psi^{(I)}(t)\rangle = U_0^+(t)|\psi(t)\rangle$$

Pohybová rovnice v Heisenbergově obraze

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t}|\psi^{(H)}(t)\rangle = 0, \qquad \frac{\partial}{\partial t}\hat{A}^{(H)}(t) = \frac{i}{\hbar}[H,\hat{A}^{(H)}(t)]}$$

Zdroje:

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

- *Sekce videí od Evoluční operátor* : https://youtu.be/sHvJ2f5s25c (Pro rovnici kontinuity zatím nemáne video)
- *až po* Kanonické kvantování: https://youtu.be/fhH2dwShA48

Příště: **Ehrenfestův teorém a relace neurčitosti**