10 MATEMATICKÝ FORMALIZMUS KVANTOVEJ MECHANIKY

10.1 ÚVOD

V doterajšom výklade sme používali formalizmus vlnových funkcií, pomocou ktorého sme boli schopní riešiť v zásade všetky problémy týkajúce sa pohybu častice vo vonkajšom potenciáli. K vlnovým funkciám sme prišli pomerne prirodzene vychádzajúc z de Broglieho hypotézy a z Bornovej pravdepodobnostnej interpretácie.

V priebehu výkladu sme však niekoľkokrát videli, že zobrazenie stavu fyzikálnej sústavy pomocou stavovej vlnovej funkcie nie je jedinou možnosťou ako postupovať. Tak napríklad vieme, že stavovú vlnovú funkciu, zodpovedajúcu ľubovoľnému viazanému stavu atómu vodíka, možno rozvinúť do úplného systému stacionárnych stavov

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \sum_{n,l,m,s} C_{n,l,m,s}\psi_{n,l,m,s}(\boldsymbol{r}) \tag{1}$$

kde n, l, m, s sú po rade hlavné, orbitálne, magnetické a spinové kvantové čísla a $\psi_{n,\,l,\,m,\,s}(\boldsymbol{r})$ sú príslušné vlastné funkcie hamiltoniánu. Ak poznáme hodnoty koeficientov $C_{n,\,l,\,m,\,s}$ v rozklade (1) (a ich fyzikálny význam), potom je týmto stavová funkcia $\psi(\boldsymbol{r})$ určená jednoznačne. Preto môžu koeficienty $C_{n,\,l,\,m,\,s}$ reprezentovať uvažovaný stav práve tak dobre ako stavová funkcia $\psi(\boldsymbol{r})$.

V tejto kapitole budeme sledovať problém podrobnejšie a ukážeme si, že reprezentácia stavu pomocou vlnovej funkcie i pomocou koeficientov rozvoja typu (1) sú dve konkrétne realizácie rovnakého všeobecného prístupu.

Mnohé z postupov, ktoré tu budeme spomínať, sme tiež použili i v jednoduchom dvojrozmernom prípade spinového formalizmu (kapitola 5). Odporúčame čitateľovi, aby si zopakoval túto kapitolu a tvrdenia ďalej uvedené ilustroval na príkladoch matíc typu 2 × 2.

V princípe môžeme s formalizmom vlnových funkcií vystačiť, ale predsa je užitočné zoznámiť sa i so všeobecnou formuláciou kvantovej mechaniky. Najmä v úvahách teoretického charakteru je všeobecný formalizmus často prehľadnejší a ľahšie vyniknú mnohé súvislosti, ktoré sú vo formalizme vlnových funkcií skryté v dôsledku technických podrobností.

Všeobecný formalizmus nie je samoúčelný. Často i pri praktickom výpočte je vhodné použiť takú reprezentáciu stavov uvažovaného systému, ktorá čo najlepšie zodpovedá charakteru danej úlohy. Podobne v úlohách z mechaniky volíme takú súradnicovú sústavu, v ktorej riešenie úlohy bude technicky jednoduché. Táto analógia je v skutočnosti (ako ďalej uvidíme) presnejšia, ako sa azda teraz môže zdať. Ako ilustráciu si ukážeme príklad harmonického oscilátora.

Skúsenosť s formalizmom vlnových funkcií i s opisom špinu naznačuje niektoré požiadavky na všeobecný matematický formalizmus kvantovej mechaniky.

Predovšetkým hľadaný formalizmus musí dávať jednoduchú možnosť zohľadniť princíp superpozície, t. j. skutočnosť, že ak sa uvažovaná sústava môže nachádzať v istých dvoch stavoch, potom sa môže nachádzať i v stave, ktorý je ich superpozíciou. Matematické objekty, ktoré budú zobrazovať vo formalizme stavy, musia sa dať vhodne lineárne „skladať". Takejto požiadavke vyhovujú vektory (prvky abstraktných vektorových priestorov), pre ktoré je definovaná lineárna operácia súčtu a násobenia číslom. V analógii s formalizmom vlnových funkcií potom očakávame, že fyzikálnym veličinám budú zodpovedať lineárne operátory pôsobiace vo vektorovom priestore.

Vo všeobecnom formalizme musí byť zachovaný i pravdepodobnostný charakter jeho fyzikálnej interpretácie. Ak uvažujeme dva stavy (vektory), potom musí existovať (lineárny) predpis umožňujúci nájsť amplitúdu pravdepodobností (vo všeobecnosti komplexné číslo) toho, že sústava nachádzajúca sa v jednom zo stavov sa súčasne nachádza i v druhom. V prípade vlnových funkcií takejto amplitúde zodpovedal výraz typu

$$\int \Phi^*(\boldsymbol{r})\,\psi(\boldsymbol{r})\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$$

ktorý má všetky vlastnosti skalárneho súčinu dvoch vektorov. Očakávame teda, že priestor stavov bude vektorový priestor so skalárnym súčinom. Podrobnejšia analýza ukazuje,[137] že to bude *Hilbertov priestor.*

V nasledujúcom článku matematického charakteru sa preto zoznámime s definíciou a vlastnosťami Hilbertových priestorov a až v ďalších článkoch uvedieme podrobnosti všeobecného formalizmu kvantovej mechaniky.

10. HILBERTOV PRIESTOR

V tomto článku uvedieme definíciu a vlastnosti Hilbertovho priestoru. Obmedzíme sa pritom len na najpotrebnejšie poznatky, úplnejšiu informáciu môže čitateľ získať z úvodných učebníc funkcionálnej analýzy.[138]

---

[137] Podrobnosti možno nájsť v už citovanej Diracovej monografii, ktorá je písaná s veľkým fyzikálnym citom, otázky viac matematického charakteru však nerozoberá. Matematická stránka vecí je mimoriadne presne a korektne diskutovaná vo von Neumanovej klasickej monografii [18], ktorá sa ale číta dosť ťažko.

Vektorový priestor. Množinu $\mathscr{M}$, na ktorej je definovaná operácia súčtu jej prvkov (pre $f, g \in \mathscr{M}$, $(f+g) \in \mathscr{M}$) a násobenia komplexným číslom (pre $c \in \mathscr{C}$, $f \in \mathscr{M}$, $(cf) \in \mathscr{M}$.) nazývame vektorovým priestorom,[139] ak platí:

1. sčítanie je komutatívne, t. j. $f + g = g + f$ pre ľubovoľné $f, g \in \mathscr{M}$
2. sčítanie je asociatívne, t. j. $f + (g + h) = (f + g) + h$, pre ľubovoľné $f, g, h \in \mathscr{M}$
3. existuje nulový[140] prvok, t. j. existuje $0 \in \mathscr{M}$ tak, že platí $0 + f = f$ pre ľubovoľné $f \in \mathscr{M}$
4. ku každému prvku $f \in \mathscr{M}$ existuje inverzný prvok $-f \in \mathscr{M}$ taký, že platí: $f + (-f) = 0$
5. pre ľubovoľné $f, g \in \mathscr{M}$ a ľubovoľné $a, b \in \mathscr{C}$ platí

$$a(f+g) = af + ag, \quad (a+b)f = af + bf, \quad (ab)f = a(bf)$$

6. $1f = f$ pre ľubovoľné $f \in \mathscr{M}$

Prvky množiny $\mathscr{M}$ nazývame vektory. Odporúčame čitateľovi, aby si túto a nasledujúce definície a tvrdenia ilustroval na vhodných príkladoch, akými sú:

a) množina všetkých n-tíc $z = (z_1, ..., z_n)$, $z_i \in \mathscr{C}$ s operáciou sčítania

$$(x_1, ..., x_n) + (y_1, ..., y_n) = (x_1 + y_1, ..., x_n + y_n)$$

a násobenia číslom

$$c(x_1, ..., x_n) = (cx_1, ..., cx_n)$$

b) množina všetkých nekonečných postupností komplexných čísel $\{a\}_{n=1}^{\infty}$, pre ktoré existuje konečný súčet $\sum_{n=1}^{\infty} |a_n|^2$ s obdobne definovanými operáciami,

c) množina všetkých komplexných funkcií reálnej premennej na intervale $(-\infty, \infty)$, pre ktoré existuje konečný integrál $\sum_{n=1} \int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(x)|^2 \mathrm{d}x$ s obvykle definovanými operáciami súčtu dvoch funkcií a násobenia funkcie číslom.

---

[138] Odporúčame napríklad Šilovovu knihu [32]. Špeciálnou učebnicou funkcionálnej analýzy, orientovanou na aplikáciu v kvantovej teórii, sú skriptá MFF UK v Prahe J. Blank – P. Exner – M. Havlíček: Vybrané kapitoly z matematické fyziky. SPN, Praha 1975 (1. diel) a 1978 (2. diel).

[139] V matematickej literatúre sa vektorovým priestorom nazýva množina $\mathscr{M}$. spolu s operáciami na nej definovanými. Detailmi tohto typu sa zapodievať nebudeme.

[140] Tu sme v označení nedôslední: 0 (nula) značí aj nulový prvok množiny M. aj nulu komplexných čísel, čo sú v princípe dve rôzne veci. V praxi sa však odlišné označenie nepoužíva a z kontextu je vždy zrejmé, o čo ide.

Súčasne je dobre pestovať si i geometrickú predstavivosť na modeli vektorov v obyčajnom trojrozmernom priestore. (Je to síce vektorový priestor nad telesom reálnych, a nie komplexných čísel, ale pre mnohé úvahy to nie je podstatné.)

Skalárny súčin. Skalárnym súčinom nazývame predpis, ktorý každým dvom vektorom f, g vektorového priestoru $\mathscr{M}$ priradí komplexné číslo (f, g) tak, že platí:

1. $(f, g) = (g, f)^*$ pre ľubovoľné $f, g \in \mathscr{M}$
2. $(f, g + h) = (f, g) + (f, h)$ pre ľubovoľné $f, g, h \in \mathscr{M}$
3. $(f, cg) = c(f, g)$ pre ľubovoľné $f, g \in \mathscr{M}$, $c \in \mathscr{C}$
4. (f, f) J^{e} reálne a platí $(f, f) \geq 0$ pre ľubovoľné $f \in \mathscr{M}$, pričom $(f, f) = 0$ len pre $f = 0$.

Na základe uvedených vlastností už možno ľahko dokázať ďalšie, ako napr.

$$(cf, g) = c^*(f, g)$$

V uvedených príkladoch vektorových priestorov môžeme zaviesť skalárny súčin nasledovne:

a) $(x, y) = \sum_{i=1}^{n} x_i^* y_i$ b) $(a, b) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n^* b_n$ c) $(f, g) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, f^*(x) g(x)$

Vo vektorových priestoroch, na ktorých je definovaný skalárny súčin, možno definovať normu (dĺžku) vektora označenú ako $\|f\|$ vzťahom

$$\|f\| = \sqrt{(f, f)} \tag{1}$$

Pre skalárny súčin platí dôležitá *Schwarzova nerovnosť*:[141]

$$|(f, g)|^2 \leq \|f\|^2 . \|g\|^2 \tag{2}$$

Nerovnosť (2) dokážeme ľahko.[142] Utvorme pre komplexné λ výraz

$$0 \leq (f - \lambda g, f - \lambda g) = \|f\|^2 + \lambda^2 \|g\|^2 - \lambda(f, g) - \lambda^*(f, g)^*$$

označme teraz

$$(f, g) = |(f, g)| . \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}$$

a zvoľme $\lambda = t\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}$, t reálne. Dostaneme

$$0 \leq \|f\|^2 + t^2 \|g\|^2 - 2t|(f, g)|$$

[141] V prípade vektorového priestoru nad reálnymi číslami Schwarzova nerovnosť hovorí, že kosínus uhla zovretého dvoma vektormi je v absolútnej hodnote menší alebo rovný 1.

[142] Všimnime si, že použijeme rovnaký trik ako pri odvodení vzťahu neurčitosti v 2. kapitole.

čo musí byť splnené pre všetky reálne t. Pretože to je kvadratický trojčlen, musí jeho diskriminant spĺňať podmienku

$$|(f, g)|^2 - \|f\|^2 . \|g\|^2 \leq 0$$

čo je vzťah (2).

Vo vektorových priestoroch s normou možno zaviesť prirodzene metriku a na jej základe topologické pojmy. Nebudeme sa zaoberať týmito otázkami, uveďme len definíciu konvergencie postupnosti vektorov.

Hovoríme, že postupnosť $\{f_n\}_{n=1}^{\infty}$ vektorov z normovaného vektorového priestoru $\mathscr{M}$ konverguje k vektoru $f \in \mathscr{M}$, ak platí

$$\lim_{n\to\infty} \|f_n - f\| = 0 \tag{3}$$

Poznamenajme, že v priestore so skalárnym súčinom možno zaviesť i inú definíciu, a to *slabej konvergencie*. Hovoríme, že postupnosť $\{f_n\}_{n=1}^{\infty}$ vektorov z vektorového priestoru M konverguje k vektoru $f \in \mathscr{M}$. v slabom zmysle, ak pre ľubovoľný vektor $g \in \mathscr{M}$ platí

$$\lim_{n\to\infty} (g, f_n) = (g, f) \tag{4}$$

V ďalšom, ak neuvedieme inak, budeme chápať konvergenciu vždy v silnom zmysle.

Zavedieme teraz pojem úplného priestoru.

Najprv potrebujeme pojem cauchyovskej postupnosti. O postupnosti $\{f_n\}_{n=1}^{\infty}$ hovoríme, že je *cauchyovská,* ak platí

$$\forall \varepsilon > 0 \ \exists M \ \forall m, n > \mathrm{M}: \|f_n - f_m\| < \varepsilon$$

O normovanom vektorovom priestore hovoríme, že je *úplný*, ak v ňom každá cauchyovská postupnosť má limitu, t. j. ak existuje $f \in \mathscr{M}$ také, že platí $\lim\limits_{n\to\infty} f_n = f$.

Vo vektorovom priestore je zavedený obvyklým spôsobom pojem *lineámej závislosti*. Hovoríme, že vektory $f_1, ..., f_n$ sú lineárne nezávislé, ak rovnica

$$\alpha_1 f_1 + \alpha_2 f_2 + \ldots + \alpha_n f_n = 0$$

je splnená len pre $\alpha_1 = \alpha_2 = \ldots = \alpha_n = 0$

Ak vo vektorovom priestore maximálny počet lineárne nezávislých vektorov je konečný, potom tomuto počtu hovoríme *rozmer* vektorového priestoru. V opačnom prípade hovoríme, že vektorový priestor je *nekonečnerozmerný.*

Dôležitým prípadom lineárne nezávislých vektorov sú vektory navzájom ortogonálne. V priestore so skalárnym súčtom sa dva vektory f, g nazývajú ortogonálne, ak platí $(f, g) = 0$. Usporiadaná množina[143] $\{f_n\}_{n=1}^{N}$ vektorov sa nazýva ortogonálnou, ak každé dva jej rôzne prvky sú navzájom ortogonálne. Ak navyše platí $\|f\| = 1$ pre všetky n, potom množinu nazývame ortonormálnou. Čitateľ si ľahko môže sám dokázať, že vektory ľubovoľnej konečnej podmnožiny z ortogonálnej množiny sú lineárne nezávislé. Množina $\{f_n\}_{n=1}^{N}$ vektorov sa nazýva úplná, ak sa ľubovoľný vektor f uvažovaného priestoru dá vyjadriť v tvare

$$f = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i f_i \tag{5}$$

Poznamenajme, že nie v každom priestore musí taká úplná množina existovať. Priestor, v ktorom existuje spočítateľná úplná množina, sa nazýva separabilný. V prípade, že vektory úplnej množiny sú ortonormálne, je dokonca rozklad (5) jednoznačný a koeficienty α_i sú určené vzťahom

$$\alpha_i = (f_i, f)$$

o čom sa možno ľahko presvedčiť vynásobením vzťahu (5) zľava vektorom f_i (v zmysle skalárneho súčinu). Úplnú ortonormálnu usporiadanú množinu vektorov budeme nazývať *bázou.*

Máme teraz už dosť prostriedkov, aby sme mohli definovať pojem *Hilbertov priestor*. Budeme tak nazývať vektorový priestor so skalárnym súčinom, ktorý je úplný a separabilný.[144] V ďalšom, ak nepovieme inak, budeme pod priestorom $\mathscr{H}$ rozumieť Hilbertov priestor. Pripomeňme si teraz niekoľko definícií a tvrdení o funkcionáloch a operátoroch na Hilbertovom priestore.

Predpis $T[f]$, ktorý vektorom Hilbertovho priestoru $f \in \mathscr{H}$ priraďuje komplexné čísla, sa nazýva funkcionál. Je to teda zobrazenie T: $\mathscr{H} \to \mathscr{C}$. Funkcionál T je lineárny, ak platí

$$T[af + \beta g] = \alpha T[f] + \beta T[g] \text{ pre všetky } f, g \in \mathscr{H};\ \alpha, \beta \in \mathscr{C}$$

Na množine všetkých lineárnych funkcionálov na Hilbertovom priestore $\mathscr{H}$. možno jednoducho definovať operácie sčítania a násobenia číslom a možno sa presvedčiť o tom, že táto množina tvorí vektorový priestor, ktorý sa nazýva *algebricky duálny* k priestoru $\mathscr{H}$, a označuje sa $\mathscr{H}^f$. Špeciálnym prípadom lineárnych funkcionálov sú spojité lineárne funkcionály, t. j. také, pre ktoré z tvrdenia $\lim\limits_{n\to\infty} f_n = f$ plynie tvrdenie $\lim\limits_{n\to\infty} T[f_n] = T[f]$. Spojité funkcionály tvoria opäť vektorový priestor, označujeme ho $\mathscr{H}^*$ ($\mathscr{H},^* \subset \mathscr{H}'$) a nazývame ho duálnym k $\mathscr{H}$.

---

143 Pripúšťame i prípad $N = \infty$.

144 V niektorých učebniciach sa separabilnosť nepožaduje.

Dôležitý príklad spojitého lineárneho funkcionálu na Hilbertovom priestore predstavuje skalárny súčin. Skutočne, na skalárny súčin (g, f) sa možno, pri fixovanom $g \in \mathscr{M}$, dívať ako na predpis, ktorý každému $f \in \mathscr{M}$ priradí isté komplexné číslo. Možno jednoducho ukázať, že takto definovaný funkcionál je lineárny a spojitý. Platí aj dôležité opačné tvrdenie: Ku každému $T \in \mathscr{M}^*$ existuje práve jeden vektor $g_T \in \mathscr{M}$ taký, že pre všetky $f \in \mathscr{M}$ platí $T[f] = (g_T, f)$.

Predpis, ktorý vektorom (nie nevyhnutne všetkým) z Hilbertovho priestoru priraďuje opäť vektory tohto priestoru, sa nazýva *operátor*. Je to teda zobrazenie $\mathsf{A}: \mathscr{M} \to \mathscr{M}$. Definičný obor[145] (množinu vektorov, pre ktoré je predpis A definovaný) budeme značiť D_A. *Obor hodnôt* (t. j. množinu všetkých vektorov $f \in \mathscr{M}$, pre ktoré existuje $g \in \mathscr{M}$ také, že platí $f = Ag$) budeme značiť $\mathsf{A}D_A$. Hovoríme, že dva operátory A a B sú si rovné, ak platí $D_A = D_B$ a $\mathsf{A}f = \mathsf{B}f$ pre všetky $f \in D_A$.

Operátor A sa nazýva lineárny, ak platí:

1. Definičný obor D_A je lineárny podpriestor $\mathscr{M}$. Z toho vyplýva, že pre všetky $f, g \in D_A$ pre ľubovoľné $\alpha, \beta \in \mathscr{C}$ platí $\alpha f + \beta g \in D_A$.

2. Pre všetky $f, g \in D_A$ a ľubovoľné $\alpha, \beta \in \mathscr{C}$ platí $\mathsf{A}(\alpha f + \beta g) = \alpha \mathsf{A} f + \beta \mathsf{A} g$.

Na množine operátorov zavádzame prirodzene pojem súčtu dvoch operátorov a pojem násobenia operátora číslom. *Súčtom* $\mathsf{A} + \mathsf{B}$ nazývame operátor C, pre ktorý platí

$$\mathsf{C}f = \mathsf{A}f + \mathsf{B}f$$

pre všetky $f \in D_c = D_A \cap D_B$. *α-násobkom* operátora A nazývame operátor $\mathsf{C} = \alpha\mathsf{A}$, pre ktorý platí $\mathsf{C}f = \alpha\mathsf{A}f$ pre všetky $f \in D_c = D_A$. Súčin operátorov A, B definujeme ako zložené zobrazenie $\mathsf{C} = \mathsf{AB}$ definované vzťahom $\mathsf{C}f = \mathsf{A}(\mathsf{B}f)$ pre všetky $f \in D_B$, pritom však také, že $\mathsf{B}f \in D_A$.

Špeciálnym prípadom operátora je jednotkový operátor (identické zobrazenie, vektoru je priradený ten istý vektor) a nulový operátor (každému vektoru je priradený nulový vektor). Pre jednotkový a nulový operátor často nebudeme zavádzať osobitné symboly a budeme ich značiť ako l a O (teda číslami). Z kontextu však bude vždy zrejmé, že ide o operátor.

Hovoríme, že operátor B je inverzný k operátoru A ak platí $D_B = \mathsf{A}D_A$, $\mathsf{B}D_B = D_A$ a platí $\mathsf{BA}f = f$ pre všetky $f \in D_A$ a $\mathsf{AB}f = f$ pre všetky $f \in D_B$. Inverzný operátor označujeme ako A^{-1}.

Dôležitú triedu operátorov tvoria spojité *operátory.* Hovoríme, že operátor A je spojitý, ak pre ľubovoľnú konvergentnú postupnosť $\{f_n\}_{n=1}^{\infty}, f_n \in D_A$, pre ktorú $\lim\limits_{n\to\infty} f_n = f \in D_A$ platí $\lim\limits_{n\to\infty} (\mathsf{A}f_n) = \mathsf{A}f$.

---

145 Vo fyzikálnych úvahách definičný obor uvažovaného operátora často špeciálne neskúmame, hoci, striktne vzaté, je to nedôslednosť, ktorá niekedy môže viesť k chybným záverom. Bližšie pozri napr. v článku o spojitom spektre operátora.

Pre lineárne operátory platí dôležité tvrdenie: Lineárny operátor A je spojitý vtedy a len vtedy, ak je *ohraničený*, t. j. ak existuje reálne $C > 0$ také, že platí

$$\| \mathsf{A}f \| \leq C\|f\|$$

pre všetky $f \in D_A$.

Dá sa ukázať, že ak operátor A je lineárny spojitý (t. j. ohraničený), potom, ak aj nie je pôvodne definovaný na celom uvažovanom Hilbertovom priestore, dá sa jeho definičný obor rozšíriť na celý Hilbertov priestor (pri zachovaní lineárnosti a ohraničenosti). Preto ak sa v ďalšom stretneme s lineárnym ohraničeným operátorom, budeme ho automaticky považovať za definovaný na celom Hilbertovom priestore. Poznamenajme, že takýto predpoklad zďaleka nie je triviálny, ako to uvidíme neskôr na príkladoch niektorých neohraničených operátorov.

Ak A je lineárny spojitý operátor, potom skalárny súčin $(g, \mathsf{A}f)$ predstavuje pri ľubovoľnom fixovanom $g \in M$ spojitý lineárny funkcionál (premennej $f \in \mathscr{M}$). Z vlastností funkcionálov na Hilbertovom priestore vieme, že tento funkcionál sa dá realizovať ako skalárny súčin premenného vektora f s iným pevným vektorom g', t. j. pre ľubovoľné g existuje (a pritom jednoznačne) vektor $g' \in \mathscr{M}$ taký, že platí

$$(g, \mathsf{A}f) = (g', f)$$

pre všetky $f \in \mathscr{M}$. Operátor, ktorý priraďuje každému vektoru g vektor g' sa nazýva *hermitovsky združený* k operátoru A a značí sa A^+.

Z tejto definície vyplýva, že operátor A^+ je určený jednoznačne, je lineárny a dá sa ukázať, že je spojitý.

Z definície A^+ teda vyplýva dôležitý vzťah

$$(g, \mathsf{A}f) = = (\mathrm{A}^+g, f) \tag{6}$$

platí pre všetky $f, g \in \mathscr{M}$.

Pre fyzikálnu interpretáciu sú dôležité *spojité hermitovské operátory*[146], t. j. spojité lineárne operátory, pre ktoré platí $\mathsf{A} = \mathsf{A}^+$.

Operácia hermitovského združenia má nasledujúce (ľahko dokázateľné) vlastnosti

$$(\mathsf{AB})^+ = \mathsf{B}^+\mathsf{A}^+ \tag{7}$$

$$(\alpha\mathsf{A})^+ = \alpha^*\mathsf{A}^+ \tag{8}$$

[146] V matematickej literatúre sa obvykle pod hermitovským operátorom automaticky myslí spojitý operátor. My budeme v tomto prípade používať pojem spojitý hermitovsky operátor.

Ďalším dôležitým typom operátora sú *unitárne operátory*. Lineárny spojitý operátor U sa nazýva unitárny, ak k nemu existuje inverzný operátor U^{-1} a ak platí

$$\mathsf{U}^{-1} = \mathsf{U}^{+} \tag{9}$$

t. j.

$$\mathsf{U}\mathsf{U}^{+} = \mathsf{U}^{+}\mathsf{U} = 1 \tag{10}$$

Unitárny operátor má dôležitú vlastnosť, že zachováva skalárny súčin, t. j. platí (dôkaz je triviálny)

$$(\mathsf{U}f, \mathsf{U}g) = (f, g) \tag{11}$$

pre všetky $f, g \in \mathscr{H}$.

Posledným typom operátora, o ktorý sa budeme zaujímať, sú *projektory* (projekčné operátory). Projektorom sa nazýva spojitý hermitovský operátor P, ktorý je idempotentný, t. j. pre ktorý platí

$$\mathsf{P}^2 = \mathsf{P} \tag{12}$$

Názov projektor bude jasnejší, ak si uvedomíme, že ľubovoľný vektor $f \in \mathscr{H}$ môžeme vyjadriť v tvare[147]

$$f = \mathsf{P}f + (1 - \mathsf{P})f \tag{13}$$

Na základe vzťahu (12) sa dá ľahko ukázať, že vektory $f_1 = \mathsf{P}f$ a $f_2 = (1 - \mathsf{P})f$ sú ortogonálne. Platí tiež $f_1 \in \mathscr{H}_P$, $f_2 \in \mathscr{H}_P^{\perp}$, kde $\mathscr{H}_P$ je podpriestor priestoru $\mathscr{H}$ tvorený všetkými takými vektormi $g \in \mathscr{H}$, pre ktoré platí $\mathsf{P}g = g$ a $\mathscr{H}_P^{\perp}$ je podpriestor všetkých vektorov $g' \in \mathscr{H}$, ktoré sú ortogonálne na všetky vektory z $\mathscr{H}_P$.[148] Vektor f_1 (resp. f_2) sa nazýva ortogonálnou projekciou vektora f do podpriestoru $\mathscr{H}_P$ (resp. $\mathscr{H}_P^{\perp}$).

Podľa vzťahu

$$f_1 = \mathsf{P}f \tag{14}$$

teda operátor P priradí každému vektoru jeho projekciu na podpriestor $\mathscr{H}_P$. Neskôr uvidíme, ako skonštruovať projektor na vopred daný podpriestor Hilbertovho priestoru.

[147] Nasledujúce tvrdenia nebudeme dokazovať. Čitateľ si jednoduché dôkazy môže urobiť ako cvičenie.

[148] Názorne si môžeme predstaviť $\mathscr{H}_P$ ako napríklad rovinu v trojrozmernom priestore a $\mathscr{H}_P^{\perp}$ ako priamku na ňu kolmú. Vektory f_1 resp. f_2 sú potom priemety vektora f do tejto roviny resp. priamky.

Na záver tohto článku ešte zavedieme pojmy *vlastnej hodnoty* a *vlastného vektora* operátora. Nech A je lineárny operátor na Hilbertovom priestore. Komplexné číslo λ nazývame vlastnou hodnotou operátora A, ak existuje nenulový vektor $f \in D_A$ tak, že platí

$$\mathsf{A}f = \lambda f$$

Vektor f potom nazývame vlastným vektorom operátora A, prislúchajúcim k vlastnej hodnote λ.

Ak A je spojitý hermitovský operátor, potom platí

1. všetky jeho vlastné hodnoty sú reálne čísla;

2. vlastné vektory prislúchajúce rôznym vlastným hodnotám sú ortogonálne;

3. množina vlastných vektorov prislúchajúcich rovnakej vlastnej hodnote tvorí podpriestor priestoru $\mathscr{H}$ (a teda dá sa v ňom zvoliť ortonormálna báza).

Dôkaz tvrdení je jednoduchý a vlastne sme ho robili na špeciálnom prípade Hilbertovho priestoru kvadraticky integrovateľných funkcií v kapitole 2.

10.3 MATEMATICKÝ FORMALIZMUS KVANTOVEJ MECHANIKY

V úvode k tejto kapitole sme už naznačili, že v rámci matematického formalizmu kvantovej mechaniky priradíme stavu uvažovaného fyzikálneho systému vektor v Hilbertovom priestore. Hilbertov priestor stavov budeme označovať $\mathscr{H}$ a stavy-vektory v priestore $\mathscr{H}$ budeme podľa Diraca označovať ako $|\varphi\rangle$, $|\psi\rangle$, $|f\rangle$ a pod. Výhody takéhoto označenia budú zrejmé neskôr. Skalárny súčin dvoch vektorov $|\varphi\rangle, |\psi\rangle \in \mathscr{H}$ budeme označovať

$$\langle\varphi|\psi\rangle \tag{1}$$

pričom platí $\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle^*$.

Zavádzanie i samostatné označenie typu $\langle\varphi|$, ktoré má význam funkcionálu na Hilbertovom priestore. (Teda $\langle\varphi| \in \mathscr{H}^*$. Ako vieme z predchádzajúceho článku, na skalárny súčin (1) s premenným vektorom $|\psi\rangle$ sa môžeme pozerať ako na funkcionál $\langle\varphi|$ (priradený k vektoru $|\varphi\rangle$), ktorý každému vektoru $|\psi\rangle$ priradí isté komplexné číslo podľa predpisu (1). Funkcionály typu $\langle\psi|$ sú vektorom z $\mathscr{H}$ jednoznačne priradené, tvoria tiež vektorový priestor $\mathscr{H}^*$. Vektorom typu $\langle\psi|$ sa hovorí tiež bra-vektory, na rozdiel od vektorov typu $|\varphi\rangle$, ktoré sa nazývajú ket-vektory. Názov pochádza z anglického slova bracket (zátvorka) a vznikol z toho, že „spojením“ (mnemotechnicky) vektoru bra a vektoru ket vznikne skalárny súčin – zátvorka – typu

$$\langle\varphi|\psi\rangle$$

Pripomeňme, že v komplexnom Hilbertovom priestore je skalárny súčin antilineárny v prvej komponente, preto ket-vektoru $\alpha|\varphi\rangle$ je priradený bra-vektor $\alpha^*\langle\varphi|$, aby platilo

$$\langle\alpha\varphi|\psi\rangle = \alpha^*\langle\varphi|\psi\rangle$$

Teraz začneme budovať formalizmus, ktorý vychádza z predpokladu (postulátu), že stavu fyzikálneho systému je priradený ket-vektor určitého Hilbertovho priestoru $\mathscr{M}$.

V analógii s formalizmom vlnových funkcií potom predpokladáme, že každej fyzikálnej veličine je priradený určitý spojitý hermitovský operátor na Hilbertovom priestore.[149] Strednú hodnotu veličiny A v stave $|\varphi\rangle$ potom vypočítame podľa vzťahu

$$\bar{A} = \langle\varphi|\mathsf{A}|\varphi\rangle \tag{2}$$

kde A je operátor priradený veličine *A*. Pritom stredná hodnota jednotkového operátora (operátora priradeného triviálnej fyzikálnej veličine, ktorá je vždy rovná jednej) musí byť zrejme rovná jednej, preto musí platiť

$$\langle\varphi|1|\varphi\rangle = \langle\varphi|\varphi\rangle$$

teda vektory prislúchajúce stavom musia byť normované. Symbol v (2) treba chápať ako skalárny súčin vektora $\mathsf{A}|\varphi\rangle$ s vektorom $|\varphi\rangle$. Vo výrazoch typu (2) teda operátor „pôsobí doprava“

$$\langle\psi|\mathsf{A}|\varphi\rangle \equiv \langle\psi|\mathsf{A}\varphi\rangle \tag{3}$$

Vzhľadom na to, že operátor A je hermitovský, je to však to isté, ako keby pôsobil „doľava“, t. j. platí

$$\langle\mathsf{A}\psi|\varphi\rangle = \langle\psi|\mathsf{A}\varphi\rangle \tag{4}$$

Vo všeobecnom prípade lineárneho spojitého (nie nevyhnutne hermitovského) operátora môžeme vo výrazoch typu (3) nahradiť „pôsobenie doprava“ „pôsobením doľava“, ak operátor vymeníme za hermitovský združený[150], t. j. platí

$$\langle\psi|\mathsf{B}|\varphi\rangle \equiv \langle\psi|\mathsf{B}\varphi\rangle = \langle\mathsf{B}^+\psi|\varphi\rangle \tag{5}$$

Často však potrebujeme úplnejšiu predpoveď o výsledkoch merania, než akú poskytuje výpočet strednej hodnoty (2). Úplná predpoveď o výsledkoch merania

---

[149] Neskôr ešte podmienky kladené na operátor priradený fyzikálnej veličine zovšeobecnime.
[150] Pozri definíciu hermitovský združeného operátora v predchádzajúcom článku.

veličiny A v stave $|\varphi\rangle$, ktorú kvantová mechanika môže (v svojej pravdepodobnostnej interpretácii) poskytnúť, obsahuje (pre prípad diskrétnych možných hodnôt):

1. udanie všetkých hodnôt a_n, ktoré môžu byť výsledkom merania,
2. udanie pravdepodobností P_n, s ktorými môžeme v stave $|\varphi\rangle$ namerať jednotlivé hodnoty a_n.

Opäť v analógii s formalizmom vlnových funkcií postulujeme:

Meraním veličiny A môžeme namerať iba niektorú z vlastných hodnôt operátora A.

Výpočet pravdepodobnosti P_n bol vo formalizme vlnových funkcií založený na rozvoji vlnovej funkcie do systému vlastných funkcií. Aby takýto rozvoj bol možný, musíme urobiť ďalší predpoklad:

Fyzikálnej veličine je priradený taký spojitý hermitovský operátor, ktorého vlastné vektory tvoria úplný systém[151].

Ak vlastný vektor príslušný vlastnej hodnote a_n označíme ako $|a_n\rangle$, čo znamená, že platí (stále predpokladáme diskrétne spektrum)

$$\mathsf{A}|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle \tag{6}$$

potom predpoklad o úplnosti hovorí, že ľubovoľný stavový vektor $|\varphi\rangle$ možno písať v tvare

$$|\varphi\rangle = \sum_n c_n |a_n\rangle \tag{7}$$

V ďalšom budeme predpokladať, že systém vektorov $|a_n\rangle$ je ortonormovaný (čo vždy možno dosiahnuť), teda že platí podmienka ortonormálnosti

$$\langle a_n|a_m\rangle = \delta_{nm} \tag{8}$$

Postulujeme potom, že pravdepodobnosť P_n namerať v stave $|\varphi\rangle$ hodnotu a_n veličiny A je daná vzťahom

$$P_n = |c_n|^2 \tag{9}$$

kde c_n je koeficient rozvoja (7).

Koeficienty c_n nájdeme ľahko, keď vynásobíme vzťah (7) zľava bra-vektorom $\langle a_m|$. Dostaneme (po využití (8))

$$c_m = \langle a_m|\varphi\rangle \tag{10}$$

---

[151] V anglickej literatúre sa pre takýto operátor používa termín „observable“, po slovensky by sa možno dal použiť termín „pozorovateľná“.

a teda platí

$$P_n = |\langle a_n|\varphi\rangle|^2 \tag{11}$$

Všimnime si teraz formu vzťahu (7), ktorú dostaneme, ak doň za c_n dosadíme zo vzťahu (10). Platí

$$|\varphi\rangle = \sum_n \langle a_n|\varphi\rangle |a_n\rangle \tag{12}$$

Vo vzťahu (12) sú výrazy $\langle a_n|\psi\rangle$ komplexné čísla, ktoré násobia vektory $|a_n\rangle$. Užitočnejšiu formu zápisu dostaneme, ak tieto komplexné čísla budeme namiesto pred vektor, ktorý násobia, písať zaň (čo je vecou konvencie v označení násobenia vektora komplexným číslom). Dostaneme tak

$$|\varphi\rangle = \sum_n |a_n\rangle\langle a_n|\varphi\rangle \tag{13}$$

Vidíme teda, že výraz $\sum_n |a_n\rangle\langle a_n|$ môžeme chápať ako operátor[152], ktorý vektoru $|\varphi\rangle$ priradí opäť vektor $|\varphi\rangle$. Je to teda jednotkový operátor:

$$\sum_n |a_n\rangle\langle a_n| = 1 \tag{14}$$

Vzťah (14) nazývame podmienkou úplnosti systému $\{|a_n\rangle\}$, lebo, ako je zrejmé, vzťah (14) hovorí, že ľubovoľný vektor $|a_n\rangle \in \mathscr{M}$ možno vyjadriť v tvare (7).

Ako ukážku manipulácie s Diracovou symbolikou si teraz overíme, že postuláty (2) a (11) sú navzájom konzistentné. Podľa (11) platí

$$\bar{A} = \Sigma_n P_n a_n = \Sigma_n |\langle a_n|\varphi\rangle|^2 a_n = \Sigma_n \langle a_n|\varphi\rangle^* \langle a_n|\varphi\rangle a_n =$$

$$= \Sigma_n \langle \varphi|a_n\rangle\langle a_n|\varphi\rangle = \Sigma_n \langle \varphi|\mathrm{A}|a_n\rangle\langle a_n|\varphi\rangle =$$

$$= \langle \varphi|\mathrm{A}\Sigma_n |a_n\rangle\langle a_n|\varphi\rangle = \langle \varphi|\mathrm{A}1|\varphi\rangle = \langle \varphi|\mathrm{A}|\varphi\rangle$$

[152] Je to vlastne nekonečná suma operátorov, pričom treba povedať, že otázkami zmyslu konvergencie takýchto výrazov sme sa nezaoberali. Nebudeme sa týmto problémom venovať podrobnejšie. Stačí nám intuitívny pohľad na vec a fakt, že vzťah (13) je dobre definovaný pre každý vektor $|\varphi\rangle$.

čo je vzťah (2). Pri úpravách sme použili vzťah (14) a vzťah (6), podľa ktorého sme písali[153]

$$a_n\langle \varphi|a_n\rangle = \langle \varphi|a_n|a_n\rangle = \langle \varphi|\mathsf{A}|a_n\rangle$$

Vieme, že meraním možno získať iba niektorú z vlastných hodnôt a_n. Môžeme sa pýtať, v akom stave sa sústava bude nachádzať po meraní. Musíme si pritom uvedomiť, že vo vzťahu typu (6) nie vždy musia byť veľkosti vlastných hodnôt a_n pre rôzne n rôzne (t. j. jednej vlastnej hodnote môže prislúchať viacero lineárne nezávislých vlastných vektorov). Znamená to potom, že aj v rozvoji (7) viacero vlastných vektorov $|a_n\rangle$ prislúcha tej istej vlastnej hodnote. Nebudeme tu opakovať naše diskusie o charaktere merania v kvantovej mechanike, uvedieme rovno postulát:

Predpokladajme, že pri konkrétnom meraní veličiny A na sústave v stave $|\varphi\rangle$ bola nameraná hodnota $a = a_i$. Ak hodnota a_i je nedegenerovaná, t. j. prislúcha jej (až na fázu) jediný normovaný vektor $|a_i\rangle$, potom po meraní sa sústava bude nachádzať v stave $|a_i\rangle$

Túto zmenu stavu možno formálne popísať pomocou projekčného operátora[154]

$$\mathsf{P}_{a_j} = |a_i\rangle\,\langle a_i| \tag{15}$$

Skutočne, pôsobením operátora (15) na stav (7) dostaneme

$$\mathsf{P}_{a_j}|\varphi\rangle = |a_i\rangle\langle a_i|\sum_n c_n|a_n\rangle = \sum_n c_n|a_i\rangle\langle a_i|a_n\rangle = \sum_n c_n|a_i\rangle\delta_{in} = c_i|a_i\rangle$$

čo je (až na normalizáciu) naozaj stav $|a_i\rangle$ po meraní. Operátor P_{a_j} naozaj zo stavu $|\varphi\rangle$ vyprojektuje jeho zložku v „smere“ $|a_i\rangle$. Po normalizácii teda dostaneme, že pri meraní, ktorého výsledkom je nedegenerovaná vlastná hodnota a_i, prejde sústava zo stavu $|\varphi\rangle$ do stavu

$$\frac{1}{\langle a_i|\varphi\rangle}\mathsf{P}_{a_j}|\varphi\rangle$$

Pre normalizačný koeficient $c_i \equiv \langle a_i|\varphi\rangle$ platí

$$P_i = |c_i|^2 = |\langle a_n|\varphi\rangle|^2 = \langle \varphi|\mathsf{P}_{a_j}|\varphi\rangle \tag{16}$$

---

153 Výraz typu $\langle \varphi|\alpha|\psi\rangle$ kde α je číslo, je skalárny súčin vektorov $|\varphi\rangle$ a $\alpha|\psi\rangle$.

154 O tom, že operátor P_{aj}, je projekčný, t. j. spojitý hermitovský a platí P^2_{aj}f,= P_{aj} sa čitateľ môže ľahko presvedčiť.

takže nakoniec možno redukciu stavu pri nameraní hodnoty $|a_i\rangle$ znázorniť schémou

$$|\varphi\rangle \to \frac{1}{\sqrt{\langle\varphi|\mathsf{P}_{a_j}|\varphi\rangle}} \cdot \mathsf{P}_{a_j}|\varphi\rangle \tag{17}$$

kde P_{a_j}, je projekčný operátor (15). Stav (17) sa od $|a_i\rangle$ líši nanajvýš fázou, čo je nepodstatné.

Ak pri meraní veličiny A nameriame hodnotu a_i ktorá je rovná degenerovanej vlastnej hodnote operátora A, potom redukciu stavu možno vyjadriť pomocou rovnakej schémy (17), ibaže operátor P_a bude projekčný operátor na podpriestor tvorený stavmi prislúchajúcimi vlastnej hodnote a. Ľahko sa možno presvedčiť o tom, že operátor P_a má tvar

$$\mathsf{P}_a = \sum_{n:a_n=a} |a_n\rangle\langle a_n| \tag{18}$$

kde sumujeme iba cez vlastné vektory prislúchajúce vlastnej hodnote a. Operátor P_a vyprojektuje zo stavu $|\varphi\rangle$ jeho priemet na podpriestor tvorený týmito vektormi, Pri meraní nastane redukcia vyjadrená schémou

$$|\varphi\rangle \to \frac{1}{\sqrt{\langle\varphi|\mathsf{P}_a|\varphi\rangle}} \cdot \mathsf{P}_a|\varphi\rangle \tag{19}$$

Nebudeme na tomto mieste opakovať diskusiu o vlastných vektoroch komutujúcich operátorov a o úplnom systéme komutujúcich operátorov, ktoré sa do všeobecného formalizmu prenášajú z formalizmu vlnových funkcií bezo zmeny.

Ukážeme si iba formálne odvodenie vzťahu neurčitosti, ktoré je vo všeobecnom formalizme prehľadnejšie a geometricky názornejšie. Uvažujme dva hermitovské operátory A, B, pre ktoré platí[155]

$$[\mathsf{A}, \mathsf{B}] = \mathrm{i}\mathsf{C}$$

Nech pre jednoduchosť[156] v stave $|\varphi\rangle$ platí

$$\bar{A} = \langle\varphi|\mathsf{A}|\varphi\rangle = 0 \qquad \bar{B} = \langle\varphi|\mathsf{B}|\varphi\rangle = 0$$

Potom platí:

$$\overline{(\Delta A)^2}\;\overline{(\Delta B)^2} = \langle\varphi|\mathsf{A}^2|\varphi\rangle\,\langle\varphi|\mathsf{B}^2|\varphi\rangle = \langle\mathsf{A}\varphi|\mathsf{A}\varphi\rangle\,\langle\mathsf{B}\varphi|\mathsf{B}\varphi\rangle =$$
$$= \|\,\mathsf{A}|\varphi\rangle\|^2\,\|\mathsf{B}|\varphi\rangle\|^2$$

[155] Ukážte ako cvičenie, že takto definovaný operátor C je hermitovský.
[156] Zovšeobecnenie na prípad $\bar{A}$, $\bar{B} \neq 0$ je už jednoduché.

Využitím Schwartzovej nerovnosti však dostaneme

$$\overline{(\Delta A)^2}\;\overline{(\Delta B)^2} = |\langle \mathsf{A}\varphi|\mathsf{B}\varphi\rangle|^2 = |\langle \varphi|\mathsf{AB}|\varphi\rangle|^2 \geq (\mathrm{Im}\langle \varphi|\mathsf{AB}|\varphi\rangle)^2 =$$

$$= \left(\frac{1}{2\mathrm{i}}\langle \varphi|\mathsf{AB}|\varphi\rangle - \frac{1}{2\mathrm{i}}\langle \varphi|\mathsf{AB}|\varphi\rangle^*\right)^2 = \frac{1}{4}\left(\frac{1}{\mathrm{i}}\langle \varphi|\mathsf{AB}-\mathsf{BA}|\varphi\rangle\right)^2 = \frac{1}{4}(\langle \varphi|\mathsf{C}|\varphi\rangle)^2$$

platí teda

$$\overline{(\Delta A)^2}\;\overline{(\Delta B)^2} \geq \frac{1}{4}(\langle \varphi|\mathsf{C}|\varphi\rangle)^2 \tag{21}$$

V prípade, že C je číslo $\mathsf{C} = C$ (presnejšie operátor rovný násobku jednotkového operátora) dostaneme

$$\overline{(\Delta A)^2}\;\overline{(\Delta B)^2} \geq \frac{1}{4}C^2 \tag{22}$$

Diskusie o fyzikálnom význame vzťahu neurčitosti nebudeme opakovať.

Tým máme zavedenú fyzikálnu interpretáciu všeobecného formalizmu kvantovej mechaniky; obmedzili sme sa však iba na formalizmus týkajúci sa určitého časového okamihu. Otázkami opisu časového vývoja fyzikálnej sústavy sa budeme zaoberať v osobitnom článku tejto kapitoly.

Poznamenajme ešte na záver, že experimentálne priamo verifikovateľné sú jedine predpovede získané na základe vzťahu (11) (resp. vzťahu (2), ktorý je jeho dôsledkom). Výsledok v (11) sa však nezmení, ak namiesto vektora $|\varphi\rangle$ priradíme tomu istému stavu vektor s inou fázou napr.

$$e^{\mathrm{i}\alpha}|\varphi\rangle \tag{23}$$

kde α je reálne číslo. Znamená to, že vektory $|\varphi\rangle$ a $e^{\mathrm{i}\alpha}|\varphi\rangle$ sú priradené tomu istému stavu. Množinu vektorov (23), ktoré sa navzájom líšia iba fázou, nazývame normovaným lúčom v Hilbertovom priestore. Striktne hovoriac stavu fyzikálneho systému je priradený lúč v Hilbertovom priestore. Poznamenajme však hneď, že to neznamená, že pri výpočtoch nemusíme dávať pozor na fázu. Mnohé výsledky sú totiž odvodené pre istú fázovú konvenciu, ktorú pri výpočtoch potom musíme rešpektovať.

10.4 TEÓRIA REPREZENTÁCIÍ

Pri praktických výpočtoch je niekedy vhodné používať formalizmus v tvare, v akom sme ho opísali, t. j. pracovať s vektormi a operátormi bezsúradnicovým spôsobom. Inokedy je ale technicky výhodnejšie zaviesť vo vektorovom priestore súradnice a pracovať s nimi.[157] V tomto článku ukážeme, ako takéto súradnice v priestore stavov zaviesť a ako možno prechádzať od jedného systému súradníc k inému.

Základná myšlienka je očividná: treba v priestore stavov zvoliť vhodnú bázu a vektory reprezentovať ich zložkami vo zvolenej báze.

Podľa nášho predpokladu priestor stavov je separabilný Hilbertov priestor, preto v ňom možno zvoliť úplnú postupnosť ortonormálnych vektorov; označme ju $\{|\varphi\rangle\}_{n=1}^{\infty}$. Budeme predpokladať, že priestor je nekonečnorozmerný, t. j. zvolená báza má nekonečne veľa prvkov. V niektorých prípadoch, ako je napríklad opis spinu častice v kapitole 5, vystačíme s konečnorozmerným vektorovým priestorom. Potrebné vzťahy v takomto prípade sú úplne analogické nekonečnorozmernému prípadu. Vo vzťahoch obsahujúcich znak sumácie nebudeme preto vypisovať hranice (t. j. nebudeme písať napr. $\sum_{n=1}^{\infty}$ ale iba $\sum_{n}$).

Podmienky ortonormálnosti a úplnosti systému $\{|\varphi\rangle\}$ sú

$$\langle\varphi_n|\varphi_m\rangle = \delta_{nm} \tag{1}$$

$$\sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = 1 \tag{2}$$

Vzhľadom na (2) môžeme každý vektor $|\varphi\rangle$ vyjadriť v tvare

$$|\varphi\rangle = \sum_n a_n|\varphi_n\rangle = \sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\varphi\rangle \tag{3}$$

Koeficienty $a_n = \langle\varphi_n|\varphi\rangle$ sa nazývajú zložky (Fourierove komponenty) vektora $|\varphi\rangle$ v báze $\{|\varphi_n\rangle\}$ a jednoznačne určujú – reprezentujú – vektor $|\varphi\rangle$. Je užitočné koeficienty a_n usporiadať do tvaru stĺpca (s nekonečným počtom riadkov). Vektor $|\varphi\rangle$ je potom jednoznačne reprezentovaný takýmto stĺpcom

$$|\varphi\rangle \sim \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle\varphi_1|\varphi\rangle \\ \langle\varphi_2|\varphi\rangle \\ \langle\varphi_3|\varphi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{4}$$

Ak poznáme komponenty vektora v danej báze, možno jednoducho vyjadriť skalárny súčin dvoch vektorov, napr. $|\varphi\rangle$ a $|\psi\rangle$. Vektor $|\varphi\rangle$ máme už vyjadrený v (3) a vektor $|\psi\rangle$ vyjadríme obdobne v báze $\{|\varphi_n\rangle\}$

$$|\psi\rangle = \sum_n b_n|\varphi_n\rangle = \sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\psi\rangle \tag{5}$$

[157] Podobne aj napríklad v úlohách z mechaniky je niekedy výhodné pracovať s rovnicami „vo vektorovom tvare“. Inokedy je výhodnejšie pracovať so súradnicami vektorov.

Pre skalárny súčin $\langle\varphi|\psi\rangle$ dostaneme vyjadrenie

$$\langle\varphi|\psi\rangle = (\sum_n a_n^*\langle\varphi_n|)(\sum_n b_m|\varphi_m\rangle) = \sum_n\sum_m a_n^* b_m\langle\varphi_n|\psi_m\rangle = \sum_n\sum_m a_n^* b_m \delta_{nm}$$

bude teda

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \sum_n a_n^* b_n = \sum_n\langle\varphi_n|\varphi\rangle^*\langle\varphi_n|\psi\rangle = \sum_n\langle\varphi|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\psi\rangle \tag{6}$$

Vzťah (6) ukazuje, že je vhodné priradiť bra-vektoru $\langle\varphi|$ riadkovú maticu (s nekonečným počtom stĺpcov)

$$\langle\varphi| \sim (a_1^*, a_2^*, \ldots) \tag{7}$$

Keďže ket-vektoru je priradený stĺpec (4), môžeme skalárny súčin dvoch vektorov chápať ako násobenie riadku typu (7) so stĺpcom typu (4) v zmysle maticového násobenia[158] (matice typu (l, ∞) s maticou typu (∞, 1)).

Všimnime si, že vzťah (6) môžeme dostať i priamo, ak využijeme podmienku úplnosti (2) a do skalárneho súčinu „vsunieme jednotkový operátor" v tvare (2). Dostaneme

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\varphi|1|\psi\rangle = \langle\varphi|\sum_n|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\psi\rangle = \sum_n\langle\varphi|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\psi\rangle$$

čo je vzťah (6). Trik so „vsunutím" jednotky sa používa mimoriadne často a treba si ho zapamätať. Pripomeňme si tu druhý častý trik (ktorý sme už viackrát použili), a to násobenie vektorovej rovnosti vhodným bra-vektorom a využitie podmienky ortonormálnosti (1). Príklad

$$|\varphi\rangle = \sum_n a_n|\varphi_n\rangle$$

$$\langle\varphi_n|\varphi\rangle = \sum_n a_n\langle\varphi_m|\varphi_n\rangle$$

$$\langle\varphi_m|\varphi_n\rangle = a_m$$

S týmito dvoma trikmi sa dá zvládnuť celá teória reprezentácií tak ľahko, že by sme zvyšok tohto článku mohli nechať čitateľovi ako cvičenie.

Ostáva nám zodpovedať otázku, ako je reprezentovaný operátor v prípade, že vektory sú reprezentované jednostĺpcovými maticami. Použijeme spomínané triky a prepíšeme vektorovú rovnosť

$$|\psi\rangle = \mathsf{A}|\varphi\rangle$$

[158] Porovnaj so skalárnym súčinom v spinovom priestore (kapitola 5).

do tvaru

$$\langle \varphi_n | \psi \rangle = \langle \varphi_n | \mathsf{A} | \varphi \rangle$$

$$\langle \varphi_n | \psi \rangle = \sum_m \langle \varphi_n | \mathsf{A} | \varphi_m \rangle \langle \varphi_{mn} | \varphi \rangle$$

$$b_n = \sum_m A_{nm} a_m \tag{8}$$

kde sme zaviedli označenie

$$A_{nm} = \langle \varphi_n | \mathsf{A} | \varphi_m \rangle \tag{9}$$

Vidíme, že operátor A je jednoznačne[159] reprezentovaný maticou

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \end{pmatrix} \tag{10}$$

a vzťah (8) budeme chápať ako maticové násobenie. Reprezentácia operátorov maticami (9) má tú vlastnosť, že súčinu operátorov je priradený súčin príslušných matíc, t. j. operátoru $\mathsf{C} = \mathsf{A}.\mathsf{B}$ je priradená matica

$$\boldsymbol{C}_{ik} = \sum_n \boldsymbol{A}_{in} \boldsymbol{B}_{nk}$$

kde $\boldsymbol{A}_{ij}$, $\boldsymbol{B}_{ij}$ sú matice priradené operátorom A, B. Dôkaz je jednoduchý a využíva trik so „vsunutím jednotky“.

Všimnime si ešte, že ak operátor A je hermitovský, potom platí

$$\boldsymbol{A}^*_{nm} = \langle \varphi_n | \mathsf{A} | \varphi_m \rangle^* = \langle \mathsf{A} \varphi_m | \varphi_n \rangle = \langle \varphi_m | \mathsf{A}^+ | \varphi_n \rangle = \langle \varphi_m | \mathsf{A} | \varphi_n \rangle = \boldsymbol{A}_{mn}$$

V konečnorozmernom prípade nazývame maticu, pre ktorú platí

$$\boldsymbol{A}_{nm} = \boldsymbol{A}^*_{mn} \tag{11}$$

hermitovskou maticou. Budeme používať tento názov aj v nekonečnorozmernom prípade.[160]

---

[159] Pre ohraničený operátor sa jednoznačnosť priradenia operátor ↔ matica dá ľahko ukázať. Pre všeobecnejšie operátory môžeme naraziť na ťažkosti a takéto prípady treba preskúmať zvlášť, čo robiť nebudeme.

[160] Nie je to celkom korektné, pretože nie každej (nekonečnorozmernej) matici, ktorá spĺňa vzťah (11), zodpovedá spojitý hermitovský operátor. Vzťah (11) nezaručuje totiž spojitosť (ohraničenosť).

Vektory (a operátory) môžeme reprezentovať vo viacerých bázach. Všimnime si preto vzťahy medzi zložkami vektorov v rôznych bázach a tak isto vzťahy medzi maticami reprezentujúcimi ten istý operátor v rôznych bázach.

Predpokladajme, že v danom vektorovom priestore máme dve bázy; prvú označíme $|a_1\rangle$, $|a_2\rangle$, …, druhú $|b_1\rangle$, $|b_2\rangle$, … Pri prvej báze budeme hovoriť o A-reprezentácii, pri druhej o B-reprezentácii.

Zložky vektora $|\psi\rangle$ v A-reprezentácii sú $\langle a_i|\psi\rangle$, v B-reprezentácii $\langle b_i|\psi\rangle$. Každá z báz tvorí úplný ortonormovaný systém, a preto

$$\sum_n |a_n\rangle\langle a_n| = 1, \qquad \sum_n |b_n\rangle\langle b_n| = 1 \tag{12}$$

Ak do skalárneho súčinu $\langle a_i|\psi\rangle$ vsunieme jednotkový operátor zapísaný v tvare druhého z rozkladov (12), dostaneme:

$$\langle a_i|\psi\rangle = \sum_k \langle a_i|b_k\rangle\langle b_k|\psi\rangle \tag{13}$$

Rovnica (13) predstavuje vzťah medzi zložkami vektora v A- a B-reprezentáciách. Ak zavedieme maticu U_{ik} vzťahom $U_{ik} = \langle a_i|b_k\rangle$, môžeme prepísať (13) na tvar

$$\langle a_i|\psi\rangle = \sum_k U_{ik}\langle b_k|\psi\rangle \tag{14}$$

Matica (nekonečnorozmerná) U_{ik} spĺňa podmienku

$$\sum_k U_{ik}(U_{jk})^* = \sum_k \langle a_i|b_k\rangle\langle b_k|a_j\rangle = \langle a_i|a_j\rangle = \delta_{ij} \tag{15}$$

Takúto maticu budeme volať (podobne ako v konečnorozmernom prípade – pozri (5.8.8)) unitárnou.

Nech teraz D je operátor. V A-reprezentácii je operátor D reprezentovaný maticou s prvkami $\langle a_i|\mathsf{D}|a_k\rangle$, v B-reprezentácii maticou s prvkami $\langle b_i|\mathsf{D}|b_k\rangle$. Pre prechod od jednej reprezentácie k druhej stačí položiť $\mathsf{D} = \mathbf{1}\mathsf{D}\mathbf{1}$ a vyjadriť jednotkový operátor pomocou (12). Dostaneme:

$$\langle a_i|\mathsf{D}|a_k\rangle = \sum_m \sum_s \langle a_i|b_k\rangle\langle b_m|\mathsf{D}|b_s\rangle\langle b_s|a_k\rangle \tag{16}$$

Pomocou matice s prvkami $U_{ik} = \langle a_i|b_k\rangle$ môžeme (16) upraviť na tvar

$$\langle a_i|\mathsf{D}|a_k\rangle = \sum_m \sum_s U_{im}\langle b_m|\mathsf{D}|b_s\rangle(U^+)_{sk} \tag{17}$$

kde $(U^+)_{sk} = (U_{ks})^* = \langle a_k|b_s\rangle^* = \langle b_s|a_k\rangle$. Rovnice (14) a (17) predstavujú vzťahy medzi vyjadreniami operátorov a vektorov v A- a B-reprezentáciách. Prechod od jednej reprezentácie k druhej teda sprostredkuje unitárna matica U_{ik}. Je dobré uvedomiť si názornú geometrickú interpretáciu prvkov tejto matice: V prípade reálneho Hilbertovho priestoru prvky $U_{ik} = \langle a_i | b_k \rangle$ sú vlastne smerové kosínusy jednotlivých vektorov jednej bázy voči druhej báze.

Prakticky volíme vhodnú bázu zväčša tak, že zvolíme určitý úplný systém komutujúcich operátorov a za bázu potom volíme systém (ortonormálny) ich spoločných vlastných vektorov. Čitateľ si sám môže overiť, že v tomto prípade matice reprezentujúce operátory zvoleného úplného systému (a operátory, ktoré sú ich funkciami) budú diagonálne matice.[161]

Na záver ešte terminologickú poznámku. Na stĺpcové matice, ktoré reprezentujú vektory v určitej báze, sa môžeme pozerať aj ako na určitú konkrétnu realizáciu Hilbertovho priestoru.[162] Operátormi na tomto Hilbertovom priestore sú práve matice. Preto často zamieňame pojmy stavový vektor a vektor-stĺpec reprezentujúci stavový vektor, ako aj pojmy operátor a matica reprezentujúca operátor.

10.5 PRÍPAD SPOJITÉHO SPEKTRA

V doterajšej diskusii sme sa obmedzili iba na veličiny, ktorým sú priradené spojité hermitovské operátory s čisto diskrétnym spektrom. Prax ale ukazuje, že nie všetkým fyzikálne zaujímavým veličinám sa dajú priradiť takéto operátory, čo však vedie k podstatným matematickým ťažkostiam.[163] Budeme ich ilustrovať niekoľkými príkladmi na konkrétnej realizácii Hilbertovho priestoru stavov na vlnových funkciách v jednorozmernom prípade.[164] Presnejšie: budeme uvažovať Hilbertov priestor komplexných funkcií jednej reálnej premennej kvadratický integrovateľných na intervale $(-\infty, \infty)$, t. j. takých, že

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, |\varphi(x)|^2 < \infty \qquad (1)$$

Jedna ťažkosť spočíva v tom, že fyzikálne relevantný operátor – akým je napríklad operátor x (násobenie súradnicou) – nemusí byť definovateľný na celom Hilbertovom priestore. Naozaj, z podmienky (1) ešte nevyplýva, že aj funkcia $\psi(x) = x\varphi(x)$ je kvadratický integrovateľná.

Horšie však je, že z podmienky (1) nevyplýva ani existencia integrálu typu

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, \varphi^*(x) x \varphi(x) \qquad (2)$$

[161] S diagonálnymi maticami sa technicky manipuluje oveľa jednoduchšie. Tu je príčina toho, že pre danú konkrétnu úlohu je jedna reprezentácia technicky výhodnejšia ako druhá.

[162] Normovateľné postupnosti, ako vieme, tvoria Hilbertov priestor.

[163] K fyzikálnym zriedkavejšie, lebo často problém odstránime, ak si predstavíme sústavu uzavretú v konečnom (hoci obrovskom) objeme a použijeme periodické okrajové podmienky.

[164] Pozri diskusiu v závere predchádzajúceho článku.

ktorý by mal reprezentovať strednú hodnotu súradnice v (normovanom!) stave $\varphi(x)$. Zdalo by sa, že ťažkosť môžeme obísť tak, že sa obmedzíme len na také kvadraticky integrovateľné funkcie, ktoré klesajú v ∞ k nule rýchlejšie ako, povedzme, $1/x^2$. Narazíme však na to, že priestor takýchto funkcií nie je úplný. Iná ťažkosť sa objaví pri operátore $\mathsf{p} = -\mathrm{i}\hbar\partial/\partial x$, ktorý nemá v uvažovanom Hilbertovom priestore žiadny vlastný vektor. Naozaj, rovnica

$$\mathsf{p}\varphi(x) = p\varphi(x) \tag{3}$$

má síce netriviálne riešenie $\varphi(x) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}$ pre ľubovoľné p, lenže funkcia $\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}$ nie je kvadratický integrovateľná, a nepatrí do Hilbertovho priestoru stavov.

Rovnica

$$\mathsf{x}\varphi_a(x) = a\varphi_a(x) \tag{4}$$

dokonca vôbec nemá riešenie v priestore obyčajných funkcií okrem triviálneho $\varphi(x) = 0$. V zmysle zovšeobecnených funkcií však platí

$$x\delta(x-a) = a\delta(x-a) \tag{5}$$

Ukážme si teraz, ako ťažkosti tohto druhu formálne elegantne obišiel Dirac v svojej teórii reprezentácií operátorov so spojitým spektrom. Jeho argumentácia je síce skôr intuitívna ako matematicky presná, ale jeho formalizmus je veľmi praktický a názorný. Fyzici ho preto bežne používajú.

Pripomeňme si opäť situáciu v prípade operátora hybnosti vo formalizme vlnových funkcií (v jednom rozmere). Doteraz sme ťažkosti obchádzali zväčša tak, že sme používali „normovanie na konečný objem“ (pozri článok 2.2). Diracov formalizmus namiesto toho pracuje s rovinnými vlnami „normovanými na δ-funkciu“.

Funkcie

$$\Phi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp(\mathrm{i}px/\hbar)$$

spĺňajú vzťah

$$\mathsf{p}\Phi_P(x) = p\Phi_P(x)$$

nepatria však do Hilbertovho priestoru funkcií s integrovateľným kvadrátom. Nazvime ich preto zovšeobecnené vlastné funkcie operátora p. Tieto funkcie majú však mnohé vlastnosti podobné ako funkcie tvoriace bázu v Hilbertovom priestore: Podľa článku 7.3 funkcie $\Phi_P(x)$ tvoria ortonormovaný systém v zmysle

$$\int\Phi^*_{P'}(x)\Phi_P(x)\,\mathrm{d}x = \delta(p-p')$$

ktorý je úplný, t. j. „ľubovoľnú“ funkciu $\psi(x)$ možno vyjadriť v tvare

$$\psi(x) = \int c(p)\Phi_P(x)\,\mathrm{d}p$$

kde

$$c(p) = \int \Phi_P^*(x)\,\psi(x)\,\mathrm{d}x$$

Po dosadení do predchádzajúceho vzťahu dostaneme podmienku úplnosti

$$\int \Phi_P(x)\Phi_P^*(x')\,\mathrm{d}p = \delta(x - x')$$

Rovinné vlny „normované na δ-funkciu“ môžeme teda použiť ako „spojitú bázu“ v priestore stavov.

Vráťme sa teraz naspäť k všeobecnému formalizmu. Majme hermitovský operátor A priradený nejakej veličine. Nech jeho zovšeobecnené vlastné hodnoty, definované formálnym vzťahom

$$\mathsf{A}|a\rangle = a|a\rangle \tag{7}$$

(kde $|a_n\rangle$ je zovšeobecnený[165] vlastný vektor príslušný k hodnote a) pokrývajú celú reálnu os $(-\infty,\infty)$. Pre konkrétnosť si môžeme predstavovať pod A operátor hybnosti na priestore kvadratický integrovateľných funkcií.

Predpoklad o úplnosti systému vlastných vektorov $\{|a_n\rangle\}$ hovorí, že každý vektor Hilbertovho priestoru môžeme písať v tvare

$$|\varphi\rangle = \int \mathrm{d}a\, c(a)|a\rangle \tag{8}$$

kde $c(a)$ je vhodná funkcia (Fourierova transformácia). Je užitočné normovať vektory $|a_n\rangle$ tak, aby platilo

$$\langle a|a'\rangle = \delta(a - a') \tag{9}$$

Potom totiž z (8) po vynásobení vektorom $\langle a'|$ dostaneme

$$\langle a'|\varphi\rangle = \int \mathrm{d}a\, c(a)\langle a'|a\rangle = \int \mathrm{d}a\, c(a)\delta(a - a') = c(a')$$

Teda platí:

$$c(a) = \langle a|\varphi\rangle \tag{10}$$

čo predstavuje „Fourierovu transformáciu“.

[165] V ďalšom už prívlastok „zovšeobecnený“ budeme často vynechávať; z kontextu bude zrejmé, kam takýto prívlastok patrí.

Po dosadení (10) do (8) dostaneme formálny tvar podmienky úplnosti

$$1 = \int \mathrm{d}a\, |a\rangle\langle a| \tag{11}$$

Vidíme teraz zrejmú analógiu s reprezentáciou vektorov v báze (spočítateľnej) Hilbertovho priestoru. Funkcia $c(a)$ je analógiou Fourierových koeficientov (4.4), podmienka (9) je analógiou podmienky (4.1) a podmienka (11) analógiou (4.2). Operátor B potom tiež reprezentujeme „maticou“ so spojité sa meniacimi indexmi

$$B_{aa'} = \langle a|\mathsf{B}|a'\rangle \tag{12}$$

Ľahko sa presvedčíme o tom, že pre takéto reprezentácie vektorov a operátorov ostanú formálne splnené všetky vzťahy z predchádzajúceho článku, iba sumovania sa nahradia integrálmi, vzťah (4.1) vzťahom (9) a vzťah (4.2) vzťahom (11). O systéme (zovšeobecnených) vektorov $|a\rangle$ preto často zjednodušene hovoríme ako o (spojitej) báze Hilbertovho priestoru. Striktne vzaté toto pomenovanie neobstojí, lebo vektory $|a\rangle$ nie sú prvkami tohto priestoru, ktorý naďalej ostáva separabilný, a teda v ňom existuje nanajvýš spočítateľná báza.

Prechod od jednej „spojitej bázy“ $\{|a\rangle\}$ k inej báze $\{|b\rangle\}$ potom v analógii so vzťahmi (4.14) a (4.17) sprostredkuje „unitárna matica“

$$U_{ba} = \langle b|a\rangle \tag{13}$$

Ostáva nám ešte pripomenúť si postuláty súvisiace s meraním v prípade spojitého spektra. V platnosti ostáva predpoklad, že výsledkom merania veličiny A „môže byť“ ľubovoľná (zovšeobecnená) vlastná hodnota operátora A. Slová môže byť sme napísali v úvodzovkách preto, že zrejme nemá zmysel pýtať sa na pravdepodobnosť namerať presne určitú hodnotu a. Zmysel má jedine pravdepodobnosť namerať niektorú hodnotu z intervalu $\Delta = (a,\ a')$ a pre túto pravdepodobnosť postulujeme

$$P(\Delta) = \int_\Delta \mathrm{d}a\, |c(a)|^2 \tag{14}$$

kde $c(a)$ je funkcia z rozkladu (8), ktorej kvadrát je teda hustotou pravdepodobnosti.

Formálnejšie možno (v analógii so vzťahom (3.16)) pravdepodobnosť $\mathrm{P}(\Delta)$ vyjadriť i pomocou projekčného operátora

$$\mathrm{P}(\Delta) = \int_\Delta |a\rangle \mathrm{d}a \langle a| \tag{15}$$

v tvare

$$P(\Delta) = \langle \varphi|\mathsf{P}(\Delta)|\varphi\rangle \tag{16}$$

Strednú hodnotu veličiny a počítame obvyklým spôsobom, t. j.

$$\bar{A} = \langle \varphi | \mathsf{A} | \varphi \rangle \tag{17}$$

Na záver tohto článku ešte naznačíme, akým smerom sa uberajú rigorózne matematické úvahy, ktoré dávajú oprávnenie „elegantnému, ale matematicky nedefinovanému Diracovmu formalizmu, ktorý fyzici už počas niekoľkých generácií používajú“.[166]

Predovšetkým treba zohľadniť fakt, ktorý sme videli ilustrovaný na viacerých príkladoch, že Hilbertov priestor ako priestor stavov je na niektoré účely „príliš veľký“, pre iné účely zasa „príliš malý“. Fyzikálne je napríklad neprijateľné, aby pre stav nebola definovaná stredná hodnota súradnice. Videli sme však, že takýto stav patrí do Hilbertovho priestoru kvadratický integrovateľných funkcií. V príkladoch za touto kapitolou je naznačená konštrukcia stavu lineárneho harmonického oscilátora, ktorý je normovateľný, ale zodpovedá mu nekonečná stredná hodnota energie. Takýto stav je opäť fyzikálne neprijateľný. Vidno teda, že v tomto zmysle je Hilbertov priestor priveľký a bolo by ho treba zúžiť na nejaký priestor „fyzikálne realizovateľných stavov“. Na druhej strane by Hilbertov priestor bolo treba i rozšíriť, aby obsahoval i (experimentálne nerealizovateľné ale z teoretického hľadiska užitočné) zovšeobecnené stavy napríklad typu rovinných vĺn. Takéto zovšeobecnené stavy vlastne potrebujeme len na to, aby sme mohli pracovať v reprezentácii, v ktorej „realizovateľný“ vektor $|\varphi\rangle$ Hilbertovho priestoru je reprezentovaný pomocou (Fourierových) koeficientov typu

$$\langle a | \varphi \rangle \tag{18}$$

kde $|a\rangle$ formálne označuje zovšeobecnený stav. Koeficienty typu (18) sa síce nedajú realizovať ako skalárny súčin v Hilbertovom priestore, ale môžeme ich definovať ako funkcionály na priestore vektorov $|\varphi\rangle$. Výrazy typu $\langle \varphi | a \rangle$ potom môžeme čisto formálne definovať vzťahom

$$\langle \varphi | a \rangle = \langle a | \varphi \rangle^*$$

Ak sú definované funkcionály $\langle a|$, potom môžeme nazvať zobecnenou vlastnou hodnotou „hermitovského“ operátora A také číslo a, pre ktoré existuje (nenulový) funkcionál $\langle a|$ taký, že platí:

$$\langle a | \mathsf{A} | \varphi \rangle = a \langle a | \varphi \rangle$$

pre všetky $|\varphi\rangle$ z priestoru „realizovateľných“ stavov. Funkcionál $\langle a|$ môžeme nazvať zovšeobecneným vlastným vektorom operátora A.

[166] Voľný citát z knihy A. Böhma, The Rigged Hilbert Space and Quantum Mechanics, zo série Lecture Notes in Physics, Springer-Verlag 1978.

Ak pre systém zovšeobecnených vlastných vektorov operátora A platí, že skalárny súčin ľubovoľných vektorov $|\varphi\rangle$, $|\psi\rangle$ môžeme vyjadriť v tvare

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \int \mathrm{d}a\, \langle\varphi|a\rangle\langle a|\psi\rangle \tag{19}$$

potom vektory $|a\rangle$ tvoria „úplný systém" a môžeme formálne (v zmysle vzťahu (19)) zaviesť označenie

$$1 = \int \mathrm{d}a\, |a\rangle\langle a| \tag{20}$$

resp.

$$|\psi\rangle = \int \mathrm{d}a\, |a\rangle\langle a|\psi\rangle \tag{21}$$

Vzťahy (20), (21) stačia na to, aby sme mohli používať pre vektory $|\varphi\rangle$, … Diracov formalizmus. Základná idea rigorózneho matematického prístupu k tejto problematike je teda pomerne jednoduchá. Presné formulácie, dôkazy a zistenie toho, o aké priestory ide v prípade „realizovateľných" vektorov $|\varphi\rangle$ a zovšeobecnených vektorov $|a\rangle$ sú dosť náročné. Príslušným matematickým aparátom je teória tzv. Geľfandových tripletov.[167] Pre prvé zoznámenie sa s použitím tohto matematického aparátu odporúčame už citovanú monografiu A. Böhma, kde je podrobne a matematicky korektne spracovaný problém lineárneho harmonického oscilátora.

10.6 *x*-REPREZENTÁCIA A *p*-REPREZENTÁCIA

V tomto článku si ukážeme, že na formalizmus vlnových funkcií, používaný v predchádzajúcich kapitolách, sa môžeme pozerať ako na reprezentáciu v „spojitej báze" vlastných stavov operátora x. Ukážeme tým vlastne, že formalizmus vlnových funkcií, ktorý predsa len mal určité význačné postavenie pri našom intuitívnom a induktívnom spôsobe budovania aparátu kvantovej mechaniky, je len špeciálnym prípadom všeobecnej schémy opísanej v tejto kapitole.

Pre jednoduchosť uvažujme jednorozmerný pohyb častice. Všeobecnému stavu častice je priradený ket-vektor $|\psi\rangle$ z Hilbertovho priestoru. Vlastné stavy operátora súradnice x prislúchajúce k hodnote x označme $|x\rangle$. Platí teda[168]

$$\mathsf{x}|x\rangle = x|x\rangle \tag{1}$$

[167] Terminológia, zdá sa, nie je celkom ustálená; príslušný ruský termín je „osnaščennoje prostranstvo Gilberta", anglický: „Rigged Hilbert Space".

[168] Stav $|x\rangle$ by mal byť stav, v ktorom s istotou nameriame hodnotu súradnice x. Takýto stav, samozrejme, nie je prakticky realizovateľný, ide teda o „zovšeobecnený" vlastný stav operátora x.

V „spojitej báze“ $\{|x\rangle\}$ je stav $|\psi\rangle$ reprezentovaný zložkami

$$\langle x|\psi\rangle \tag{2}$$

Pri fixovanom $|\psi\rangle$ definuje výraz (2) komplexnú funkciu reálnej premennej x, ktorá podľa (5.19) má význam amplitúdy pravdepodobnosti v x-priestore. To sú presne vlastnosti stavovej vlnovej funkcie, zodpovedajúcej stavu $|\psi\rangle$. Označme teda

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle \tag{3}$$

Ukážme si teraz, že operátoru x v tejto reprezentácii zodpovedá podľa očakávania obyčajné násobenie súradnicou x. Operátor x je reprezentovaný maticou

$$\langle x'|\mathsf{x}|x''\rangle$$

ktorú vzhľadom na (1) a na podmienku normovanosti

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x - x')$$

môžeme vyjadriť v tvare

$$\langle x'|\mathsf{x}|x''\rangle = x''\delta(x' - x'') \tag{4}$$

Zo vzťahu (4) a z podmienky úplnosti

$$\int |x\rangle\,\mathrm{d}x\langle x| = 1$$

máme

$$\langle x|\mathsf{x}|\psi\rangle = \int \mathrm{d}x'\langle x|\mathsf{x}|x'\rangle\langle x'|\psi\rangle = \int \mathrm{d}x'\,x'\;\delta(x' - x)\,\psi(x') = x\,\psi(x)$$

čo hovorí, že zložky vektora $\mathsf{x}|\psi\rangle$ v súradnicovej reprezentácii sú

$$\langle x|\mathsf{x}|\psi\rangle = x\,\psi(x) \equiv x\langle x|\psi\rangle$$

a túto rovnicu sme použili vo formalizme vlnových funkcií v tvare

$$\mathsf{x}\,\psi(x) = x\,\psi(x)$$

Teraz nájdeme operátor hybnosti v súradnicovej reprezentácii. Budeme vychádzať z toho, že vlastné stavy operátoru p spĺňajú rovnicu

$$\mathsf{p}|p\rangle = p|p\rangle$$

a sú normované na δ-funkciu $\langle p|p\rangle = \delta(p - p')$

V súradnicovej reprezentácii už tieto stavy poznáme.

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}$$

Pre maticové elementy operátora p v x-reprezentácii platí (využívame $1 = = \int \mathrm{d}p'|p'\rangle\langle p'|$)

$$\begin{aligned}\langle x'|\mathsf{p}|x''\rangle &= \iint \mathrm{d}p'\mathrm{d}p''\langle x'|p'\rangle\langle p'|\mathsf{p}|p''\rangle\langle p''|x''\rangle = \\ &= \iint \mathrm{d}p'\mathrm{d}p''\langle x'|p'\rangle p''\delta(p'-p'')\langle p''|x''\rangle = \\ &= \iint \mathrm{d}p'\langle x'|p'\rangle p'\langle p'|x''\rangle = \\ &= \int \frac{\mathrm{d}p'}{2\pi\hbar}p'\mathrm{e}^{\mathrm{i}p'(x'-x'')/\hbar} = \\ &= \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x'}\int \frac{\mathrm{d}p'}{2\pi\hbar}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p'(x'-x'')/\hbar} = \\ &= \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x'}\delta(x'-x'')\end{aligned}$$

Pre vektor $|\mathsf{p}|x\rangle$ potom platí

$$\begin{aligned}\langle x|\mathsf{p}|\psi\rangle &= \int \mathrm{d}x'\langle x|\mathsf{p}|x'\rangle\langle x'|\psi\rangle = \\ &= \int \mathrm{d}x'\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x'}\delta(x'-x'')\langle x'|\psi\rangle = \\ &= \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}\langle x|\psi\rangle\end{aligned}$$

a to je známy vzťah, ktorý sme vo formalizme vlnových funkcií písali v tvare

$$\mathsf{p}\,\psi(x) = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)$$

Úplne rovnakým postupom dostaneme

$$\langle x'|\mathsf{p}^2|\psi\rangle = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\langle x|\psi\rangle$$

a toto spolu so vzťahom

$$\langle x|\mathsf{V}(\mathsf{x})\,\psi\rangle = V(x)\langle x|\psi\rangle = V(x)\,\psi(x)$$

stačí na to, aby sme z bezčasovej Schrödingerovej rovnice zapísanej vo všeobecnom tvare

$$\mathsf{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

$$\mathsf{H} = \frac{1}{2m}\mathsf{p}^2 + V(x) \tag{5}$$

prišli v súradnicovej reprezentácii k známemu tvaru

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\langle x|\psi\rangle + V(x)\langle x|\psi\rangle = E\langle x|\psi\rangle \tag{5'}$$

kde

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

Schrödingerovu rovnicu (5') sme používali vo formalizme vlnových funkcií v 2. až 9. kapitole.

Časová závislosť stavu je vo všeobecnom formalizme popísaná vektorom $|\psi(t)\rangle$ ktorý je riešením Schrödingerovej rovnice

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \mathsf{H}|\psi(t)\rangle$$

kde H je hamiltonián sústavy. Pre časticu vo vonkajšom poli s potenciálovou energiou $V(x)$ je H dané vzťahom (5). Ak časovú Schrödingerovu rovnicu prepíšeme tým istým postupom ako vyššie do súradnicovej reprezentácie[169] dostaneme

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle x|\psi(t)\rangle = \left[-\frac{\hbar}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\right]\langle x|\psi(t)\rangle$$

čo je v zápise $\langle a|\psi(t)\rangle \equiv \psi(x, t)$ časová Schrödingerova rovnica vo formalizme vlnových funkcií.

Celkom analogickým postupom by sme mohli bezčasovú Schrödingerovu rovnicu prepísať i do p-reprezentácie. Vyjadrenie operátora p je v nej jednoduché

$$\langle p'|\mathsf{p}|p''\rangle = p''\delta(p' - p'') \tag{6}$$

Vyjadrenie operátora x je o čosi zdĺhavejšie, ale prebieha po už vychodených koľajach

[169] Báza nezávisí od času a je úplne rovnaká ako tá, ktorú sme používali vyššie.

$$\langle p'|\mathsf{p}|p''\rangle = \iint \mathrm{d}x'\mathrm{d}x''\langle p'|x'\rangle\langle x'|\mathsf{x}|x''\rangle\langle x''|p''\rangle =$$

$$= \iint \mathrm{d}x'\mathrm{d}x'' \frac{1}{2\pi\hbar} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}p'x'/\hbar} x'' \delta(x'-x'') \mathrm{e}^{\mathrm{i}p''x''/\hbar} =$$

$$= \int \frac{\mathrm{d}x'}{2\pi\hbar} x' \mathrm{e}^{-\mathrm{i}x'(p'-p'')/\hbar} =$$

$$= \mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \int \frac{\mathrm{d}x'}{2\pi\hbar} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}x'(p'-p'')/\hbar} =$$

$$= \mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \delta(p'-p'')$$

Analogicky

$$\langle p'|\mathsf{p}|p''\rangle = \left(\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial p'}\right)^n \delta(p'-p'') \tag{7a}$$

$$\langle p'|\mathsf{V}(\mathsf{x})|p''\rangle = \mathsf{V}\left(\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial p'}\right) \delta(p'-p'') \tag{7b}$$

Pomocou vzťahov (6) a (7) už môžeme prepísať bezčasovú Schrödingerovu rovnicu do p-reprezentácie. Výsledok bude

$$E\langle p|\psi\rangle = \frac{p^2}{2m}\langle p|\psi\rangle + \mathsf{V}\left(\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial p'}\right)\langle p|\psi\rangle$$

pričom $\langle p|\psi\rangle = \psi(p)$ je stavovou vlnovou funkciou v p-reprezentácii.

Pre lineárny harmonický oscilátor by sme týmto postupom pre bezčasovú Schrödingerovu rovnicu dostali v x-reprezentácii.

$$E\langle x|\psi\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\langle x|\psi\rangle + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \langle x|\psi\rangle \tag{8}$$

a v p-reprezentácii

$$E\langle p|\psi\rangle = \frac{\hbar^2}{2m} p^2 \langle p|\psi\rangle - \frac{m\omega^2\hbar^2}{2}\frac{\partial^2}{\partial p^2}\langle p|\psi\rangle \tag{9}$$

pričom riešenia v jednej a v druhej reprezentácii sú viazané vzťahmi

$$\langle x|\psi\rangle = \int \mathrm{d}p\, \langle x|p\rangle\langle p|\psi\rangle$$

$$\langle p|\psi\rangle = \int \mathrm{d}x\, \langle p|x\rangle\langle x|\psi\rangle$$

Rovnice (8) a (9) sú vyjadrením tej istej abstraktnej rovnice

$$\mathsf{H}|\psi\rangle = \frac{\mathsf{p}^2}{2m}|\psi\rangle + \frac{m\omega^2}{2}\mathsf{x}^2|\psi\rangle \tag{10}$$

v dvoch rôznych reprezentáciách.

Teraz vidno, že rôzne reprezentácie abstraktných operátorových rovníc v Hilbertovom priestore sú v istom zmysle analógiou dobre známej situácie z elementárnej mechaniky. Druhý Newtonov zákon môžeme totiž písať buď v „abstraktnom" vektorovom tvare

$$\boldsymbol{F} = m\boldsymbol{a} \tag{11}$$

alebo v zložkách odpovedajúcich určitému výberu bázy (súradných osí)

$$F_x = ma_x, \quad F_y = ma_y, \quad F_z = ma_z \tag{12}$$

Všeobecný zápis Schrödingerovej rovnice je analógom „abstraktného vektorového zápisu" (11) a Schrödingerove rovnice (8) a (9) sú analógmi vzťahov (12) v dvoch súradných sústavách.

Pre lineárny harmonický oscilátor sa však ukazuje, že najvýhodnejšou reprezentáciou nie je ani x-reprezentácia, ani p-reprezentácia, ale energetická reprezentácia, s ktorou sa budeme podrobnejšie zaoberať v nasledujúcom článku. Toto je tiež reprezentácia, v ktorej Heisenberg objavil kvantovú mechaniku.

10.7 HARMONICKÝ OSCILÁTOR V ENERGETICKEJ REPREZENTÁCII

Ako ukážku výhodného použitia všeobecného formalizmu nájdeme teraz spektrum lineárneho harmonického oscilátora.

Lineárny harmonický oscilátor je fyzikálny systém daný hamiltoniánom

$$\mathsf{H} = \frac{1}{2m}\mathsf{p}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\mathsf{x}^2 \tag{1}$$

kde x a p sú hermitovské operátory (súradnice a hybnosti), ktoré spĺňajú komutačné pravidlo

$$[\mathsf{x}, \mathsf{p}] = \mathrm{i}\hbar \tag{2}$$

Ukazuje sa, že je výhodné zaviesť pomocné operátory a, a^+ a N definované vzťahmi[170]

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + i\frac{p}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \tag{3}$$

$$a^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - i\frac{p}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \tag{4}$$

$$N = a^+a \tag{5}$$

V ďalšom postupe budeme skúmať vzťahy medzi operátormi a, a^+, N a H. Z nasledujúcich tvrdení nebudeme všetky podrobne dokazovať, čitateľ si tak môže urobiť sám ako cvičenie.

Predovšetkým z definičných vzťahov (3), (4) a (5) vyplýva, že operátory a a a^+ sú navzájom hermitovsky združené (označenie sme už tak volili) a operátor N je hermitovský:[171]

$$N^+ = (a^+a)^+ = a^+a^{++} = a^+a = N$$

Priamym výpočtom ľahko overíme, že platia komutačné vzťahy:

$$[a, a^+] = 1 \tag{6}$$

$$[a, N] = a, \quad [a^+, N] = -a^+ \tag{7}$$

Zo vzťahov (3), (4) môžeme vyjadriť operátory x a p.

$$\begin{aligned} x &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(a + a^+) \\ p &= \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}i(a - a^+) \end{aligned} \tag{8}$$

po dosadení do (1) dostaneme vyjadrenie Hamiltoniánu pomocou operátorov a, a^+ (pri úprave použijeme aj vzťah (6)):

$$H = \hbar\omega\left(a^+a + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega\left(N + \frac{1}{2}\right) \tag{9}$$

[170] Trik so zavedením kreačných a anihilačných operátorov a^+ a a má také široké použitie, že si ho treba zapamätať.

[171] Pretože neskúmame súčasne i definičné obory (neohraničených!) operátorov a, a^+, N … majú všetky naše „dôkazy“ len formálny charakter. Rigorózny postup by bol mnohonásobne dlhší a náročnejší. Čitateľ sa s ním môže zoznámiť napr. v monografii A. Böhma citovanej v predchádzajúcom článku, ale pri prvom čítaní kvantovej mechaniky to rozhodne neodporúčanie.

Spektrum hamiltoniánu nájdeme, keď nájdeme spektrum operátora N. Predpokladajme[172] teda, že existuje systém vlastných stavov $|c\rangle$ operátora N:

$$\mathrm{N}|c\rangle = c|c\rangle$$

kde vlastné hodnoty c sú zatiaľ bližšie nešpecifikované.

Ukážeme si teraz, že vlastné hodnoty operátora N sú nezáporné (samozrejme, že sú reálne, pretože $\mathrm{N} = \mathrm{N}^{+}$).

Skutočne platí:

$$c = \langle c|\mathrm{N}|c\rangle = \langle c|\mathrm{a}^{+}\mathrm{a}|c\rangle = \langle c|\mathrm{a}^{+}\mathrm{a}|c\rangle = \langle c'|c'\rangle \geq 0$$

kde $|c'\rangle|\mathrm{c}) = a|c\rangle$

Všimnime si, že ak $c = 0$, potom vektor $|c'\rangle$ má nulovú normu, teda je to nulový vektor.

Ukážeme si teraz, že v prípade $c \neq 0$ je vektor $|c'\rangle = \mathrm{a}|c\rangle$ tiež vlastným vektorom operátora N, prislúchajúci k vlastnej hodnote $c' = c - 1$. Je to jednoduchý dôsledok komutačného vzťahu (7):

$$\mathrm{Na}|c\rangle = (\mathrm{Na} - \mathrm{aN} + \mathrm{aN})|c\rangle = ([\mathrm{N}, \mathrm{a}] + \mathrm{aN})|c\rangle =$$
$$= (-\mathrm{a} + \mathrm{a}c)|c\rangle = (c - 1)\mathrm{a}|c\rangle$$

Platí teda (už po zohľadnení správnej normalizácie)[173]

$$|c - 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{c}}\mathrm{a}|c\rangle \tag{10}$$

Zdôraznime opäť, že pomocou operátora a možno zo stavu $|c\rangle$ vyrobiť nový vlastný stav $|c - 1\rangle$ iba vtedy, keď $c \neq 0$.

Podobne možno ľahko ukázať, že platí (už pre ľubovoľné c)

$$|c + 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{c+1}}\mathrm{a}^{+}|c\rangle \tag{11}$$

Vzhľadom na vlastnosti (10) a (11) nazývajú sa a^{+} a a zvyšovacím a znižovacím operátorom. Častejšie sa však používajú názvy kreačný a anihilačný operátor (dôvod tohto pomenovania bude zrejmý až v kapitole venovanej sekundárnemu kvantovaniu).

Ďalšia myšlienka je už jednoduchá: ak by bolo možné opakovaným pôsobením operátora a vychádzajúc z nejakého stavu $|c\rangle$ „vyrábať" stále ďalšie vlastné

[172] K tomuto predpokladu sa o chvíľu vrátime.
[173] Predpokladáme, že spektrum H je nedegenerované.

stavy operátora N s vlastnými hodnotami vždy o jednotku nižšími, prišli by sme do sporu s tvrdením, že tieto vlastné hodnoty musia byť nezáporné. Musí teda nastať taká situácia, že pôsobením operátora a už nemôžeme nový vlastný stav „vyrobiť“, a to, ako vieme, bude len vtedy, ak pri opakovanom pôsobení operátora a narazíme na stav s nulovou vlastnou hodnotou, teda stav $|0\rangle$, pre ktorý platí

$$\mathsf{N}|0\rangle = 0|0\rangle \tag{12}$$

Ukázali sme tak, že ak existuje aspoň jeden vlastný stav operátora N, potom musí existovať aj vlastný stav s nulovou vlastnou hodnotou. Nulovú vlastnú hodnotu sme ale dostali postupným znižovaním o jednotku, vychádzajúc z ľubovoľnej vlastnej hodnoty c. Preto číslo c musí byť celé číslo.

V ďalšom budeme preto označovať vlastné stavy N symbolom $|n\rangle$:

$$\mathsf{N}|n\rangle = n|n\rangle \tag{13}$$

Vychádzajúc zo stavu $|0\rangle$ možno pomocou operátora a^+ skonštruovať ľubovoľný stav $|n\rangle$. Platí (podľa (11))

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\mathsf{a}^+)^n|0\rangle \tag{14}$$

Podľa vzťahu (8) už je zrejmé, že $|n\rangle$ sú aj vlastné stavy hamiltoniánu a platí

$$\mathsf{H}|n\rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega|n\rangle \tag{15}$$

Vlastné hodnoty operátora energie teda sú

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad n = 0,\, 1,\, 2,\, \ldots \tag{16}$$

Náš doterajší postup bol zatiaľ čisto formálny, pod operátormi sme si zatiaľ nepredstavovali nijakú ich konkrétnu realizáciu na určitom Hilbertovom priestore. Podstatné boli len algebraické vzťahy medzi operátormi, z nich význačnú úlohu zohrali komutačné vzťahy (2). Musíme teraz ešte overiť, či taký Hilbertov priestor, spĺňajúci všetky predpoklady (menovite existenciu aspoň jedného vlastného stavu operátora N), existuje. V podstate môžeme postupovať dvoma spôsobmi.

Prvý spôsob. Algebraické vzťahy typu (1), (2) pokladáme fyzikálne za prvotné a dodatočne sa pokúsime skonštruovať abstraktný Hilbertov priestor, na ktorom existuje ich operátorová realizácia. Konštrukcia takého priestoru je jednoduchá. Vyjdeme z abstraktne chápaných „objektov“ $|0\rangle$, $|1\rangle$, $|2\rangle$, …, a abstraktný Hilbertov priestor definujeme ako priestor všetkých ich (formálnych) lineárnych kombinácií[174]. Príslušný skalárny súčin na tomto priestore definujeme tak, aby platilo $\langle n|n'\rangle = \delta_{nn'}$. Vektory $|n\rangle$ potom tvoria bázu takto skonštruovaného Hilbertovho priestoru a vzťahy (10) a (11) potom môžeme považovať za vzťahy, ktorými sú *definované* operátory a a a^+. Ostatné operátory potom definujeme pomocou príslušných vyjadrení z operátorov a, a^+ (napr. (8), (9)). Čitateľ sa sám môže presvedčiť, že na takto skonštruovanom Hilbertovom priestore budú splnené všetky predpoklady, na ktorých boli založené naše úvahy. Vektory $|n\rangle$ tvoria bázu energetickej reprezentácie, v ktorej operátoru H prislúcha diagonálna matica s elementmi E_0, E_1, E_2, … Operátorom a, a^+ priradíme matice

$$a_{mn} = \langle m|\mathsf{a}|n\rangle, \qquad a^+_{mn} = \langle m|\mathsf{a}^+|n\rangle$$

Z (10) a (11) vyplýva

$$a_{mn} = \sqrt{n}\;\delta_{m,\,n-1}, \qquad a^+_{mn} = \sqrt{n+1}\;\delta_{m,\,n+1} \tag{17}$$

takže matice a_{mn}, a a^+_{mn} sú:

$$a_{mn} = \begin{pmatrix} . & \sqrt{1} & . & . & . \\ . & . & \sqrt{2} & . & . \\ . & . & . & \sqrt{3} & . \\ . & . & . & . & \text{atď.} \end{pmatrix} \qquad a^+_{mn} = \begin{pmatrix} . & . & . & . & . \\ 1 & . & . & . & . \\ . & \sqrt{2} & . & . & . \\ . & . & \sqrt{3} & . & . \\ . & . & . & \text{atď.} & . \end{pmatrix}$$

kde bodky označujú nuly.

Maticové elementy operátorov x a p dostaneme už rýchlo. Z rovníc (8) s využitím (17) dostaneme

$$x_{kj} = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2} (\sqrt{j}\,\delta_{k,\,j-1} + \sqrt{j+1}\,\delta_{k,\,j+1}) \tag{18}$$

$$p_{kj} = \mathrm{i}\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2} (\sqrt{j+1}\,\delta_{k,\,j+1} - \sqrt{j}\,\delta_{k,\,j-1})$$

Tento spôsob svojím duchom zodpovedá Heisenbergovmu prístupu ku kvantovej mechanike. To, že Heisenberg sa mohol v podstate analýzou spektroskopických dát dostať až k „maticovej mechanike“, k maticovým elementom typu (18), je

[174] Presnejšie ako zaplnenie takého priestoru.

spojené s faktom, že[175] interakcia žiarenia s nabitou časticou je daná v dipólovom priblížení maticovými elementárni $(\boldsymbol{r})_{mn}$. Pre lineárny harmonický oscilátor je interakcia daná maticovými elementárni $(x)_{mn}$ Rovnice (18) ukazujú, že $x_{mn} \neq 0$ len pre $m = n \pm 1$. Oscilátor môže preto absorbovať a emitovať len kvantá s energiou $\hbar\omega$, kde ω je kruhová frekvencia oscilátora a $\hbar\omega$ je rozdiel energií medzi dvoma susednými stavmi oscilátora.

Druhý spôsob svojím duchom viac zodpovedá Schrödingerovmu prístupu ku kvantovej mechanike, chápanej ako „vlnovej mechanike". Tam od začiatku predpokladáme, že máme daný Hilbertov priestor vlnových funkcií a na ňom operátory $\mathsf{x} = x$, $\mathsf{p} = -\mathrm{i}\hbar\partial/\partial x$. Potom, aby mal celý postup až po vzťah (16) oprávnenie, musíme explicitne skonštruovať aspoň jeden vlastný stav operátora N. Ak sa nám to podarí, ukážeme tým tiež, že „heisenbergovský" a „schrödingerovský" prístup sú – aspoň v tomto prípade – ekvivalentné.

Vyberieme si stav $|0\rangle$, ktorý spĺňa podmienku

$$\mathsf{a}|n\rangle = 0|0\rangle \tag{19}$$

a preto aj

$$\mathsf{N}|0\rangle = \mathsf{a}^{+}\mathsf{a}|0\rangle = 0|0\rangle$$

Budeme pracovať v x-priestore a zavedieme označenie $\psi_0(x) = \langle x|0\rangle$. Operátor a vyjadríme podľa (3) a postupom podrobne diskutovaným v predchádzajúcom článku prepíšeme (19) do x-reprezentácie. Dostaneme tak

$$\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\psi_0(x) = 0$$

Riešením tejto diferenciálnej rovnice je

$$\psi_0(x) = A\exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right), \qquad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

Z požiadavky normovanosti $\psi_0(x)$ nájdeme konštantu A a dostávame

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right)$$

čo je dobre známa vlnová funkcia základného stavu lineárneho harmonického oscilátora.

---

[175] Pozri kapitolu 9.

Tento výsledok spolu s vyjadrením operátora a^+ pomocou (4) a vzťahom (14) vedie k

$$\psi_n(x) = \langle x|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\mathsf{a}^+)^n \psi_0(x), \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{20}$$

kde $\psi_n(x)$ je vlastnou funkciou n-tého excitovaného stavu lineárneho harmonického oscilátora

$$\mathsf{H}\psi_n(x) = E_n \psi_n(x)$$

Operátor a^+ má v x-reprezentácii tvar

$$\mathsf{a}^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \tag{21}$$

a čitateľ sa môže sám presvedčiť, že podľa vzťahu (20) dostaneme nám už známe vlnové funkcie stacionárnych stavov (4.6.14).

10.8 OPIS ČASOVÉHO VÝVOJA

Doteraz sme sa zaoberali formalizmom opisu stavu fyzikálnej sústavy v určitom časovom okamihu. Ak chceme zobraziť časový vývoj, potom prirodzene predpokladáme, že v každom časovom okamihu t je stavu sústavy priradený určitý vektor Hilbertovho priestoru. Označíme ho napríklad $|\psi(t)\rangle$. Podľa analógie s formalizmom vlnových funkcií potom predpokladáme, že bude platiť Schrödingerova rovnica[176]

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle = \mathsf{H}|\psi(t)\rangle \tag{1}$$

kde H je hamiltonián uvažovanej sústavy. Prakticky sa opäť (1) používa ako pohybová rovnica, t. j. hľadáme jej riešenie $|\psi(t)\rangle$ spĺňajúce určitú začiatočnú podmienku typu

$$|\psi(t=0)\rangle = |\varphi\rangle \tag{2}$$

Rovnicu (1) so začiatočnou podmienkou (2) možno (prinajmenej formálne) jednoducho vyriešiť. Skonštruujeme operátor

$$\mathsf{U}(t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathsf{H}t/\hbar} \tag{3}$$

[176] Pojem derivácie vektorovej funkcie reálnej premennej sme formálne nezaviedli. Čitateľ si vhodnú definíciu sám môže doplniť.

S výrazmi tohto typu sme sa zatiaľ nestretli a detailnejšie sa s ich definíciou zaoberať nebudeme. Pod takýmito funkciami operátorov si môžeme predstaviť napríklad mocninný rad, v našom prípade

$$e^{-\mathrm{i}\mathsf{H}t/\hbar} = 1 - \frac{\mathrm{i}\mathsf{H}t}{\hbar} + \frac{1}{2!}\left(\frac{-\mathrm{i}\mathsf{H}t}{\hbar}\right)^2 + \ldots$$

Charakter konvergencie opäť nebudeme skúmať podrobnejšie[177].

Čitateľ sa môže presvedčiť o tom, že takto definovaný operátor je unitárny, t. j. platí

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

Pomocou operátora $\mathsf{U}(t)$ možno riešenie rovnice (1) spĺňajúce začiatočnú podmienku (2) zapísať v tvare[178]

$$|\psi(t)\rangle = \mathsf{U}(t)|\psi\rangle \tag{4}$$

Ak poznáme spektrum hamiltoniánu

$$\mathsf{H}|a\rangle = E_n|a\rangle$$

potom operátor $\mathsf{U}(t)$ možno vyjadriť v tvare[179]

$$\mathsf{U}(t) = \Sigma_n |n\rangle\, e^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar}\langle n| \tag{5}$$

Techniku riešenia SchR zodpovedajúcu vzťahu (5) už poznáme; ide o použitie rozvoja do úplného systému stacionárnych stavov.

Vyššie uvedený spôsob popisu časového vývoja sústavy sa nazýva *Schrödingerov obraz*.

Často je užitočný iný spôsob popisu časového vývoja (s ktorým sme sa zatiaľ nestretli), a to Heisenbergov obraz.

Stavu, ktorý je opísaný v Schrödingerovom obraze vektorom $|\psi(t)\rangle \equiv |\psi_S(t)\rangle$ priraďme vektor Hilbertovho priestoru

$$|\psi_H\rangle = \mathsf{U}^+(t)|\psi_S(t)\rangle = e^{+\mathrm{i}Ht/\hbar}|\psi_S(t)\rangle \tag{6}$$

---

[177] Môžeme si predstaviť pod výrazom typu $\sum_1^\infty \mathsf{A}_n$ jeho tzv. silnú limitu, t. j. taký operátor A, pre ktorý platí pre ľubovoľný vektor $\mathsf{A}|\varphi\rangle = \lim_{N\to\infty}\sum_1^\infty \mathsf{A}_n|\varphi\rangle$

[178] Keďže operátor $\mathsf{U}(t)$ je unitárny, bude stav $|\psi(t)\rangle$ správne normovaný, ak stav $|\varphi\rangle$ je normovaný.

[179] Vzťah (5) sa dá tiež chápať ako jedna z možných definícií operátorového výrazu exp $(-\mathrm{i}\mathsf{H}t/\hbar)$

Jednoducho si možno overiť, že platí:

$$\frac{\partial}{\partial t}|a_n\rangle = 0 \tag{7}$$

teda vektor $|\psi_H\rangle$ priradený podľa (6) stavu sústavy nezávisí od času. Pritom priradenie vektora $|\psi_H\rangle$ je jednoznačné, stav $|\psi_S\rangle$ možno jednoznačne zrekonštruovať

$$|\psi_S(t)\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar}|\psi_H\rangle \tag{8}$$

Vektor $|\psi_H\rangle$ preto môže rovnako dobre reprezentovať stav sústavy ako vektor $|\psi_S(t)\rangle$. Fyzikálnu informáciu – napr. strednú hodnotu veličiny A v čase t – možno pomocou vektora $|\psi_H\rangle$ získať aj tak, že najprv podľa (8) nájdeme $|\psi_S(t)\rangle$ a potom už postupujeme štandardne:

$$\bar{A}(t) = \langle \psi_S(t)|\mathsf{A}|\psi_S(t)\rangle = \langle \psi_H|\mathsf{U}^+\mathsf{A}\mathsf{U}|\psi_H\rangle \tag{9}$$

Podľa (9) je však zrejmé, že ak zavedieme označenie

$$\mathsf{A}_H(t) = \mathsf{U}^+(t)\mathsf{A}\mathsf{U}(t) \tag{10}$$

potom $\mathsf{A}_H(t)$ je (od času závislý) operátor, pomocou ktorého možno vyjadriť strednú hodnotu priamo pomocou $|\psi_H\rangle$:

$$\bar{A}(t) = \langle \psi_H|\mathsf{A}_H(t)|\psi_H\rangle \tag{11}$$

Vyjadrenia stavov a operátorov v tvare (6) a (10) nazývame *Heisenbergovým obrazom*. V tomto obraze vektory priradené stavom od času nezávisia, časový vývoj v sústave je opísaný vhodnou časovou závislosťou operátorov: ak v Schrödingerovom obraze je fyzikálnej veličine priradený operátor A, potom v Heisenbergovom obraze je tej istej veličine priradený operátor A_H podľa vzťahu (10).

Úlohu pohybovej rovnice hrá namiesto Schrödingerovej rovnice rovnica, ktorú dostaneme z (10) derivovaním podľa času. Po elementárnych úpravách dostaneme

$$\dot{\mathsf{A}}_H(t) = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}[\mathsf{H}, \mathsf{A}_H(t)] \tag{12}$$

Túto rovnicu potom treba riešiť so začiatočnou podmienkou[180]

$$\mathsf{A}_H(t = 0) = \mathsf{A}$$

---

[180] Skutočnosť, že rovnosť vektorov a operátorov priradených v Schrödingerovom a Heisenbergovom obraze stavom a veličinám požadujeme práve v čase $t = 0$, je konvencia. Práve tak dobre by sme mohli vybrať ľubovoľný iný časový okamih.

Názorne si možno predstaviť rozdiel medzi Schrödingerovým a Heisenbergovým obrazom tak, že v Schrödingerovom obraze vektory stavov „rotujú" s časom v Hilbertovom priestore a operátory sa nemenia, kým v Heisenbergovom obraze vektory stavov sú konštantné a operátory sa menia s časom tak, aby stredné hodnoty (9) a (11) boli rovnaké.

Často sa stretávame so situáciami, v ktorých

$$\mathsf{H} = \mathsf{H}_0 + \mathsf{H}' \tag{13}$$

kde H_0 nerobí nijaké ťažkosti pri riešení problému ani v Heisenbergovom ani v Schrödingerovom obraze. Vtedy možno použiť interakčný alebo Diracov obraz, pri ktorom časová závislosť operátorov je daná len „neporušeným" hamiltoniánom H_0 a časová závislosť stavov len „poruchou" (interakčným hamiltoniánom) H'. Veličiny vyjadrené v interakčnom obraze označujeme indexom *I*. Vzťah medzi interakčným a Schrödingerovým obrazom je daný rovnicami

$$\begin{aligned} |\psi_I(t)\rangle &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0 t/\hbar}|\psi_S(t)\rangle \\ \mathsf{A}_I(t) &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}/\hbar H_0 t}\mathsf{A}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}/\hbar H_0 t} \end{aligned} \tag{14}$$

a pre časové derivácie dostaneme:

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi_I(t)\rangle = e^{\mathrm{i}/\hbar \mathsf{H}_0 t}(\mathsf{H}-\mathsf{H}_0)|\psi_S(t)\rangle$$

Ak teraz zapíšeme $(\mathsf{H} - \mathsf{H}_0) = \mathsf{H}'$, vsunieme pred $|\psi_S(t)\rangle$ jednotkový operátor zapísaný v tvare $1 = \exp(-\mathrm{i}/\hbar \mathsf{H}_0 t)\ \exp(\mathrm{i}/\hbar \mathsf{H}_0 t)$ a použijeme druhú z rovníc (14) pre definíciu veličiny $\mathsf{H}_I'(t)$ dostaneme:

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi_I(t)\rangle = \mathsf{H}_I'|\psi_I(t)\rangle \tag{15}$$

Pre časovú deriváciu operátorov dostaneme tým istým postupom ako pri odvodení rovnice (12) výsledok

$$\dot{\mathsf{A}}_I(t) = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}[\mathsf{H}_0, \mathsf{A}_I(t)] \tag{16}$$

V interakčnom obraze máme teda dva druhy pohybových rovníc: (15) a (16). Operátor H_0 je obvykle volený tak, že riešenie rovníc (16) poznáme.

Na záver tohto článku ešte uvedieme formálny postup odvodenia *vzťahu neurčitosti pre čas a energiu*. Niekoľko ilustratívnych príkladov sme uviedli v kapitole o nestacionárnej poruchovej teórii.

V kvantovej mechanike nevystupuje čas ako fyzikálna veličina (t. j. nie je mu priradený operátor), ale ako parameter v pohybovej rovnici. Napriek tomu sa bežne hovorí o „meraní času“. Ak sa však bližšie zamyslíme nad princípmi konštrukcie hodín, vidíme, že fakticky meriame nejakú inú fyzikálnu veličinu (napríklad uhol výchylky kyvadla), ktorá je s časom spojená pomocou teoretického prepočtu. Vhodné automatické zariadenie takýto prepočet vykonáva, takže „stupnica prístroja“ už môže byť ciachovaná v jednotkách času. Ďalší formálny postup nebude úplne zodpovedať tejto myšlienke, ale v podstate sa dá takto interpretovať.

Nech A je operátor prislúchajúci veličine A, ktorý (v Schrödingerovom obraze) nezávisí explicitne od času. Potom časovú závislosť strednej hodnoty $\bar{A}$ v stave $|\psi(t)\rangle$ opisuje rovnica

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\bar{A} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\psi(t)|\mathsf{A},\mathsf{H}|\varphi(t)\rangle \tag{17}$$

Zvoľme si určitý časový okamih a určime stredné kvadratické odchýlky

$$(\Delta A)^2 \equiv \langle\, \psi(t)|(\mathsf{A} - \bar{A})^2|\psi(t)\rangle$$

$$(\Delta E)^2 \equiv \langle\, \psi(t)|(\mathsf{H} - \bar{E})^2|\psi(t)\rangle$$

Pre ΔA a ΔE platí vzťah neurčitosti v tvare (3.21)

$$\Delta A\,.\,\Delta E \geq \frac{1}{2}|\langle\, \psi(t)|(\mathsf{A},\, \mathsf{H})|\,\psi(t)\rangle| \tag{18}$$

Ak použijeme vzťah (17) môžeme prepísať (18) do tvaru

$$\frac{\Delta A}{|\mathrm{d}\bar{A}/\mathrm{d}t\,|}\cdot\Delta E \geq \frac{1}{2}\hbar \tag{19}$$

Hodnota $\bar{A}$ sa s časom mení, rýchlosť tejto zmeny je daná výrazom $\mathrm{d}\bar{A}/\mathrm{d}t$. Pretože však veličina A je „rozmazaná“ okolo hodnoty $\bar{A}$ o hodnotu $\sim\Delta A$, dá sa (signifikantným spôsobom) prakticky zaregistrovať iba taká zmena $\bar{A}$, ktorá je porovnateľná s ΔA . Charakteristická doba, za ktorú nastane takáto zmena (označme ju τ_A) je potom daná vzťahom

$$\tau_A = \frac{\Delta A}{|\mathrm{d}\bar{A}/\mathrm{d}t\,|}$$

Platí teda vzťah

$$\tau_A.\Delta E \geq \frac{1}{2}\hbar \tag{20}$$

V princípe čas τ_A je závislý od toho, o akú veličinu A ide. Možno hľadať takú veličinu, pre ktorú je tento čas najkratší. Označme ho τ. Čas τ takto charakterizuje samotný fyzikálny systém v uvažovanom stave $|\psi(t)\rangle$ (v zvolenom okamihu t). Je to vlastne charakteristická doba, za ktorú sa stav systému časovým vývojom podstatne zmení. Platí pritom vzťah neurčitosti

$$\tau \Delta E \geq \hbar/2 \tag{21}$$

10.9 MATICA HUSTOTY

Opis stavu sústavy vektorom v Hilbertovom priestore je z hľadiska kvantovej mechaniky úplným opisom stavu. V niektorých situáciách však takýto opis stavu nie je možný a vtedy stav sústavy opisujeme maticou hustoty. Používame ju v dvoch typických prípadoch. Po prvé vtedy, keď uvažovaná sústava je časťou (podsústavou) väčšej sústavy a po druhé vtedy, keď o sústave nemôžeme získať úplnú informáciu a musíme používať metódy štatistickej fyziky.

Matica hustoty ako opis podsústavy.

Uvažujme sústavu S skladajúcu sa z dvoch podsústav S_1 a S_2. Premenné opisujúce S_1 označíme symbolom x, premenné S_2 symbolom ξ. Stav zloženej sústavy S nech je opísaný vektorom $|\psi\rangle$ z Hilbertovho priestoru sústavy S. V x, ξ-reprezentácii má vektor $|\psi\rangle$ zložky $\langle x, \xi|\psi\rangle$. Nech operátor A pôsobí iba na premenné sústavy S_1

$$\langle x', \xi'|\mathsf{A}|x, \xi\rangle = \langle x'|\mathsf{A}|x\rangle\delta(\xi' - \xi) \tag{1}$$

Stredná hodnota operátora A v stave $|\psi\rangle$ sústavy S bude

$$\bar{A} = \langle \psi|\mathsf{A}|\psi\rangle = \int \mathrm{d}x'\mathrm{d}\xi'\mathrm{d}x''\mathrm{d}\xi''\langle \psi|x', \xi'\rangle\langle x', \xi'|\mathsf{A}|x'', \xi''\rangle\langle x'', \xi''|\psi\rangle$$

Po využití (1) máme

$$\bar{A} = \int \mathrm{d}x'\mathrm{d}x''\mathrm{d}\xi'\langle \psi|x', \xi'\rangle\langle x'|\mathsf{A}|x''\rangle\langle x'', \xi'|\psi\rangle \tag{2}$$

Vo veľmi špeciálnom prípade stav S odpovedá tomu, že S_1 sa nachádza v stave $|\psi_1\rangle$ a S_2 v stave $|\psi_2\rangle$. Vtedy platí

$$\langle x, \xi|\psi\rangle = \langle x|\psi_1\rangle\langle \xi|\psi_2\rangle \tag{3}$$

Po dosadení (3) do (2) a využití $\int\langle \psi_2|\xi\rangle\langle \xi|\psi_2\rangle\mathrm{d}\xi = 1$ dostaneme

$$\bar{A} = \int \mathrm{d}x'\mathrm{d}x''\mathrm{d}\xi'\langle \psi_1|x'\rangle\langle x'|\mathsf{A}|x''\rangle\langle x''|\psi_1\rangle = \langle \psi_1|\mathsf{A}|\psi_1\rangle$$

Tento výsledok ukazuje, že v prípade (3) sa sústava naozaj nachádza v stave $|\psi_1\rangle$. Fyzikálne je to jasné, lebo (3) hovorí, že v stave $|\psi\rangle$ zloženej sústavy niet žiadnych korelácií medzi premennými x a ξ. Všeobecne toto ale neplatí, korelácia medzi podsústavami existuje a pre stav $|\psi\rangle$ neplatí (3).

Vo všeobecnom prípade pre výpočet strednej hodnoty používame vzťah (2). Je užitočné definovať operátor

$$\langle x''|\boldsymbol{\rho}|x'\rangle = \int \mathrm{d}\xi' \langle x'', \xi'|\psi\rangle\langle\psi|x', \xi'\rangle \tag{4}$$

a prepísať (2) do tvaru

$$\bar{A} = \int \mathrm{d}x'\mathrm{d}x'' \langle x''|\boldsymbol{\rho}|x'\rangle\langle x'|\mathsf{A}|x''\rangle \tag{5}$$

V špeciálnom prípade (3) pre $\langle x''|\boldsymbol{\rho}|x'\rangle$ dostávame

$$\langle x''|\boldsymbol{\rho}|x'\rangle = \int \mathrm{d}\xi' \langle x''|\psi_1\rangle\langle\xi'|\psi_2\rangle\langle\psi_1|x'\rangle\langle\psi_2|\xi'\rangle = \langle x''|\psi_1\rangle\langle\psi_1|x'\rangle \tag{6}$$

odkiaľ vidno, že v prípade (3) je operátor $\boldsymbol{\rho}$ projektorom na jednorozmerný podpriestor stavov sústavy S_1

$$\boldsymbol{\rho} = |\psi_1\rangle\langle\psi_1| \tag{6'}$$

Po dosadení (6) alebo (6') do (5) vidíme, že v tomto prípade pre stredné hodnoty všetkých operátorov A pôsobiacich len na premenné podsústavy S_1 platí $A = \langle\psi_1|\mathsf{A}|\psi_1\rangle$

Vo všeobecnom prípade ale (3) neplatí a operátor $\boldsymbol{\rho}$ nie je projektorom na jednorozmerný podpriestor Hilbertovho priestoru sústavy S_1.

Maticu s elementárni $\langle x''|\boldsymbol{\rho}|x'\rangle$ nazývame maticou hustoty a samotný operátor $\boldsymbol{\rho}$ nazývame operátorom hustoty alebo štatistickým operátorom.

Teraz uvedieme ešte prepis predchádzajúcich vzťahov pre prípad, keď premenné charakterizujúce podsústavy S_1, S_2 môžu nadobúdať iba diskrétne hodnoty. Možné hodnoty premenných sústavy S_1 označíme ako m a sústavy S_2 ako n. V m, n-reprezentácii má stav $|\psi\rangle$ sústavy S zložky $\langle m, n|\psi\rangle$. Pre maticové elementy operátora A pôsobiaceho len na premenné sústavy S_1 platí

$$\langle m, n|\mathsf{A}|m', n'\rangle = A_{mm'}\delta_{nn'} \tag{7}$$

Pre stredné hodnoty takéhoto operátora v stave $|\psi\rangle$ máme

$$\bar{A} = \sum_{m,n} \langle\psi|m,n\rangle\langle m,m|\mathsf{A}|m',n'\rangle\langle m',n'|\psi\rangle = \sum_{m,m'} A_{mm'}\rho_{m'm} \tag{8}$$

kde

$$\rho_{m'm} = \sum_n \langle m', n|\psi\rangle\langle\psi|m, n\rangle \tag{9}$$

Výraz na pravej strane (8) je stopou (spurom) matice, ktorá je súčinom matíc **A** a **ρ**. Preto môžeme prepísať (8) na

$$\bar{A} = \mathrm{Sp}(\mathbf{A}\boldsymbol{\rho}) \tag{8'}$$

Stopa matice nezávisí od výberu bázy a vzťah (8') platí nezávisle od výberu reprezentácie. V prípade, keď premenné môžu nadobúdať spojitú množinu hodnôt, je pravá strana (8') definovaná pravou stranou v (5).

Vlastnosti matice hustoty.

Priamo z (9) vidno, že matica **ρ** má jednotkovú stopu. Skutočne

$$\mathrm{Sp}(\mathbf{A}\boldsymbol{\rho}) = \sum_n \rho_{mm} = \sum_n \langle \psi | m, n\rangle\langle m, n|\psi\rangle = \langle \psi|\psi\rangle = 1$$

Matica s prvkami ρ_{mm} je ďalej pozitívne definitná. Aby sme to dokázali, zostrojme projekčný operátor

$$\mathsf{P}_\xi = |\xi\rangle\langle\xi|, \quad |\xi\rangle = \sum_m \xi_m |m\rangle \tag{10}$$

Vlastné hodnoty projekčného operátora P_ξ, tak ako každého projekčného operátora sú 0, 1. Stredná hodnota operátora nemôže byť nikdy menšia ako jeho najmenšia vlastná hodnota, a preto stredné hodnoty musia byť nezáporné. Odtiaľ

$$\mathrm{Sp}(\boldsymbol{\rho}\mathsf{P}_\xi) = \sum_{m,m'} \rho_{mm'}\xi_m\xi^*_{m'} \geq 0 \tag{11}$$

Maticu $\rho_{mm'}$ spĺňajúcu nerovnosť (11), nazývame pozitívne definitnou.

Ak sústava S_1 je v interakcii so zvyškom sústavy S, nemôžeme vo všeobecnosti zapísať časovú závislosť matice hustoty pre podsústavu S_1. Ak však interakcia medzi S_1 a zvyškom S je od istého času t_0 nulová (alebo zanedbateľná), môžeme pre $t > t_0$ nájsť pohybovú rovnicu pre $\rho_{mm'}(t)$.

Predpokladajme, že pre $t > t_0$ sú stavy $|m, n\rangle$ vlastnými stavmi operátorov energie podsústavy S_1 a zvyšku sústavy S, označeného ako S_2. Pretože energia interakcie je nulová, bude vektor $|\psi(t)\rangle$ závisieť od času nasledovne

$$|\psi(t)\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\mathsf{H}_1 + \mathsf{H}_2)t/\hbar}|\psi(t_0)\rangle$$

kde H_1, H_2 sú operátory energie pre S_1, S_2. Ak využijeme hermitovosť H_1 a H_2 a to, že H_1 a H_2 komutujú, dostaneme:

$$\langle m, n|\psi(t)\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_{1m} + E_{2m})t/\hbar}\langle m, n|\psi(t_0)\rangle$$

kde E_{1m} a E_{2m} sú energie podsústav S_1, S_2 v stave $|m, n\rangle$. Po dosadení tohto výrazu do (9) (ak nahradíme $|\psi\rangle$ vektorom $|\psi(t)\rangle$ dostaneme:

$$\rho_{mm'}(t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_{1m}t/\hbar}\rho_{mm'}(t_0)\mathrm{e}^{+E_{1m'}t/\hbar} \tag{12}$$

Pre operátor $\boldsymbol{\rho}$ je táto podmienka ekvivalentná zápisu

$$\boldsymbol{\rho}(t) = e^{-i\mathsf{H}_1 t/\hbar}\rho(t_0)e^{i\mathsf{H}_1 t/\hbar} \tag{13}$$

odkiaľ derivovaním dostaneme:

$$i\hbar\frac{d\rho}{dt} = [\mathsf{H}_1, \boldsymbol{\rho}] \tag{14}$$

Matica hustoty ako opis štatistického súboru.

Najprv stručne opíšeme spôsob, ktorým v štatistickej fyzike opisujeme stav sústavy. Stav makroskopickej sústavy je charakterizovaný istými makroskopickými veličinami, napríklad objemom a energiou alebo objemom a teplotou. Pre určitosť si môžme predstaviť ideálny plyn v istom objeme a s istou celkovou (vnútornou) energiou, alebo ideálny plyn v istom objeme a s istou teplotou udržiavanou rezervoárom, s ktorým je plyn v tepelnom kontakte.

Pri výpočte termodynamických veličín v takomto makroskopický určenom stave (makrostave) priradíme sústave najprv istý štatistický súbor. Tento súbor sa skladá z mnohých identických sústav, pričom každá z nich sa nachádza v určitom kvantovomechanickom stave (tzv. „mikrostave“) opísanom vektorom Hilbertovho priestoru. Pre ideálny plyn vektor $|\psi_i\rangle$ priradený i-temu mikrostavu obsahuje úplnú informáciu o stave sústavy častíc, z ktorých sa plyn skladá. Na základe informácie o makrostave priradíme každému mikrostavu $|\psi_i\rangle$ zo štatistického súboru istú pravdepodobnosť p_i. Strednú hodnotu $\bar{A}$ veličiny A v určitom makrostave počítame potom podľa vzťahu

$$\bar{A} = \sum_i p_i \langle \psi_i|\mathsf{A}|\psi_i\rangle \tag{15}$$

kde na pravej strane sčitujeme cez všetky mikrostavy daného štatistického súboru.

Pre plyn uzavretý v izolovanej nádobe s objemom V a s vnútornou energiou plynu E uvažujeme na pravej strane (15) všetky mikrostavy s energiou z intervalu $(E, E + \delta E)$, kde δE je veľmi malé $\delta E \lll E$ a každému mikrostavu priradíme rovnakú pravdepodobnosť $p_i = 1/N$, kde N je počet mikrostavov s energiou v intervale $(E, E + \delta E)$ (uvažujeme len mikrostavy s nulovou celkovou hybnosťou). Toto rozdelenie pravdepodobností v štatistickom súbore nazývame *mikrokanonickým rozdelením.*

Pre plyn v kontakte s rezervoárom udržiavajúcim konštantnú teplotu T plynu uvažujeme na pravej strane (15) všetky mikrostavy (s nulovou celkovou hybnosťou a momentom hybnosti) a mikrostavu s energiou E_i priradíme pravdepodobnosť $p_i = C\exp(-E_i/kT)$, kde normovacia konštanta C zaručuje splnenie podmienky $\Sigma p_i = 1$ a k je Boltzmannova konštanta. Toto rozdelenie pravdepodobností v štatistickom súbore sa nazýva *kanonickým rozdelením.*

Z diskusie vidno, že stavy $|\psi_i\rangle$, ktoré vystupujú na pravej strane (15) nemusia tvoriť úplnú bázu Hilbertovho priestoru. Pri kanonickom rozdelení sme uvažovali všetky stavy, zatiaľ čo v prípade mikrokanonického rozdelenia uvažujeme iba stavy s celkovou energiou v úzkom intervale $(E, E + \delta E)$.

Podľa toho, čo sme hovorili vyššie, by sa mohlo zdať, že výpočet stredných hodnôt pomocou (15) možno použiť len pre makroskopické sústavy. Nie je to ale pravda. Pomocou štatistickej fyziky niekedy opisujeme i mikroskopické sústavy. Predstavme si napríklad atóm vodíka v dutine zahriatej na vysokú (aby kT bolo rádové 10 eV) teplotu T. V dutine bude elektromagnetické žiarenie a atóm vodíka s ním bude v tepelnej rovnováhe. Strednú hodnotu určitej fyzikálnej veličiny charakterizujúcej atóm vodíka budeme počítať podľa (15) pričom stavy $|\psi_i\rangle$ na pravej strane (15) budú stavy atómu vodíka s určitou hodnotou energie E_i a pravdepodobnosti p_i budú zas dané ako $p_i = C\exp(-E_i/kT)$.

Všeobecne vzťah (15) používame vtedy, ak sa sústava s pravdepodobnosťami p_i nachádza v stavoch $|\psi_i\rangle$.

Takto opísaný stav sústavy je podstatne odlišný od stavu opísaného vektorom Hilbertovho priestoru

$$|\psi\rangle = \sum_i \sqrt{p_i}\,|\psi_i\rangle \tag{16}$$

Skutočne, pre strednú hodnotu veličiny A v stave (16) máme

$$\bar{A} = \langle\psi|\mathsf{A}|\psi\rangle = \sum_{i,k} \sqrt{p_i p_k}\,\langle\psi_i|\mathsf{A}|\psi_k\rangle \tag{17}$$

Vyjadrenia $\bar{A}$ v (15) a (17) sú rovnaké len vtedy ak $\langle\psi_i|\mathsf{A}|\psi_k\rangle = 0$ pre všetky $i \neq k$.

Strednú hodnotu $\bar{A}$ v (15) môžeme tiež zapísať v tvare

$$\bar{A} = \sum_k \langle\psi_k|\boldsymbol{\rho}\mathsf{A}|\psi_k\rangle = \mathrm{Sp}(\boldsymbol{\rho}\mathsf{A}) \tag{18}$$

kde štatistický operátor $\boldsymbol{\rho}$ je definovaný vzťahom

$$\rho = \sum_i |\psi_i\rangle p_i \langle\psi_i| \tag{19}$$

Skutočne, ak (19) dosadíme do (18) a využijeme ortonormovanosť stavov $|\psi_i\rangle$ máme

$$\bar{A} = \sum_{i,k} \langle\psi_k|\psi_i\rangle p_i \langle\psi_i|\mathsf{A}|\psi_k\rangle = \sum_{i,k} \delta_{ik} p_i \langle\psi_i|\mathsf{A}|\psi_k\rangle = \sum_{i,k} p_i \langle\psi_i|\mathsf{A}|\psi_i\rangle$$

a to je práve rovnica (15).

Operátory $|\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ vystupujúce v (19) sú projektormi na jednorozmerné podpriestory Hilbertovho priestoru tvorené násobkami vektorov $|\psi_i\rangle$ číslom. Štatistický operátor $\boldsymbol{\rho}$ daný rovnicou (19) je takto lineárnou superpozíciou projektorov. V prípade, že pre p_i v (19) platí $p_i = 0$ pre i rôzne od istého pevného k a $p_k = 1$ máme

$$\boldsymbol{\rho} = |\psi_k\rangle\langle\psi_k| \tag{20}$$

stredná hodnota ľubovoľnej veličiny A je daná výrazom

$$\bar{A} = \langle\psi_k|\mathsf{A}|\psi_k\rangle \tag{21}$$

Opis stavu sústavy pomocou štatistického operátora $\boldsymbol{\rho}$ daného rovnicou (20) je teda ekvivalentný opisu sústavy vektorom $|\psi_k\rangle$.

Napokon ešte uvedieme podmienky, ktoré musí operátor $\boldsymbol{\rho}$ spĺňať, ak má byť opis stavu pomocou neho ekvivalentný opisu stavu vektorom z Hilbertovho priestoru.

Pre každý operátor typu (19) platí

$$\boldsymbol{\rho} = \boldsymbol{\rho}^+ \tag{22a}$$

Podmienka $\Sigma p_i = 1$ implikuje

$$\mathrm{Sp}(\boldsymbol{\rho}) = 1 \tag{22b}$$

Pre druhú mocninu operátora $\boldsymbol{\rho}$ z (19) dostávame

$$\boldsymbol{\rho\rho} = \sum_i |\psi_i\rangle p_i^2 \langle\psi_i|$$

a v prípade $p_i = \delta_{ik}$, $i = 1, 2, 3, \ldots, k$ pevné, máme

$$\boldsymbol{\rho\rho} = \boldsymbol{\rho} \tag{22c}$$

Podmienky (22a, b, c) sú nutnými podmienkami pre to, aby $\boldsymbol{\rho}$ mal tvar (20). Možno tiež ukázať, že sú to aj postačujúce podmienky. Každý hermitovský operátor možno diagonalizovať a vo vhodnej báze zapísať v tvare (19), kde p_i budú reálne čísla a $|\psi_i\rangle$ sú vektory bázy. Podmienky (22b, c) potom vedú k $p_i = \delta_{ik}$, a tým k (20).

10.10 ZHRNUTIE

Zopakujeme tu stručne logickú štruktúru základných postulátov kvantovej mechaniky. Pripomíname opäť, že v rámci pomerne značnej „pedagogickej licencie“ naše zhrnutie bude len schematické, bez nároku na rigoróznosť. Podrobnosti možno nájsť buď v texte kapitoly alebo (častejšie) v špeciálnych monografiách.

1. Stavu fyzikálnej sústavy je priradený vektor (presnejšie lúč) v Hilbertovom priestore.

2. Fyzikálnym veličinám sú priradené hermitovské operátory v Hilbertovom priestore. O (zovšeobecnených) vlastných vektoroch týchto operátorov predpokladáme, že tvoria úplný ortonormovaný systém.

Vlastný stav operátora A je definovaný vzťahom (diskrétne spektrum)

$$\mathsf{A}|\Phi_n\rangle = A_n|\Phi_n\rangle$$

Podmienka ortonormálnosti

$$\langle\Phi_n|\Phi_m\rangle = \delta_{nm}$$

Podmienka úplnosti

$$\sum_n |\Phi_n\rangle\langle\Phi_n| = 1$$

3. Pri meraní veličiny A v stave $|\psi\rangle$ je možné namerať iba niektorú z hodnôt A_n (t. j. niektorú z vlastných hodnôt operátora A) a to s pravdepodobnosťou

$$P_n = |\langle\Phi_n|\psi\rangle|^2$$

Pre strednú hodnotu veličiny $\bar{A}$ platí

$$\bar{A} = \langle\psi|\mathsf{A}|\psi\rangle$$

4. Pri meraní nastane zmena stavu; po meraní veličiny A, pri ktorom sa získala hodnota A_i sa sústava bude nachádzať v stave

$$|\psi'\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle\psi|\mathsf{P}_{A_i}|\psi\rangle}}\mathsf{P}_{A_i}|\psi\rangle$$

kde $|\psi\rangle$ je stav pred meraním a P_{A_i} je projekčný operátor na podpriestor vlastných stavov operátora A prislúchajúcich hodnote A_i.

V nedegenerovanom prípade

$$\mathsf{P}_{A_i} = |\Phi_n\rangle\langle\Phi_n| = 1| \quad \text{(nesčitovať cez } i\text{)}$$

Stav sústavy je jednoznačne určený zadaním hodnôt veličín, ktorým prislúcha úplný systém komutujúcich operátorov.

5. Ak poznáme stav $|\Phi\rangle$ v okamihu $t = t_0$, potom (v Schrödingerovom obraze) bude stav sústavy v ľubovoľnom neskoršom čase (až do ďalšieho merania!) určený riešením Schrödingerovej rovnice

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \mathsf{H}|\psi(t)\rangle$$

so začiatočnou podmienkou $|\psi(t = t_0)\rangle = |\Phi\rangle$.

6. Pri praktickom výpočte je niekedy užitočné prejsť k určitej reprezentácii vektorov v Hilbertovom priestore. Vyberieme najprv bázu reprezentácie – úplný ortonormovaný systém stavov $\{|\chi_n\rangle\}$. Ľubovoľný stav $|\psi\rangle$ bude v tejto báze reprezentovaný koeficientmi rozvoja

$$|\psi\rangle = \Sigma c_n|\chi_n\rangle$$

teda

$$|\psi\rangle \leftrightarrow \{c_n\} \qquad c_n = \langle\chi_n|\psi\rangle$$

Operátor A bude reprezentovaný (nekonečnorozmernou) maticou

$$\mathsf{A} \leftrightarrow A_{mn}, \qquad A_{mn} = \langle\chi_m|\mathsf{A}|\chi_n\rangle$$

Vzťahu

$$|\psi'\rangle = \mathsf{A}|\psi\rangle$$

potom zodpovedá maticový vzťah

$$c'_n = \sum_m A_{mn}c_m$$

pričom c'_n reprezentujú stav $|\psi'\rangle$, t. j. $c'_n = \langle\chi_n|\psi'\rangle$.

Rôznym výberom báz možno dostať rôzne (ekvivalentné) reprezentácie. Súvis medzi súradnicami toho istého vektora v dvoch reprezentáciách je daný (nekonečnorozmernou) unitárnou maticou $U_{nm} = \langle\chi'_n|\chi_m\rangle$

$$\langle\chi'_n|\psi\rangle = \sum_m \langle\chi'_n|\chi_m\rangle\langle\chi_m|\psi\rangle$$

kde $\{|\chi_n\rangle\}$ a $\{|\chi'_n\rangle\}$ sú dve bázy.

7. Doteraz sme sa obmedzili na prípad diskrétnych spektier. V prípade spojitého spektra možno v podstate použiť analogický formalizmus s tým, že v príslušných vzťahoch nahradíme sumovanie integráciou a podmienky úplnosti a ortonormálnosti budú mať tvar

$$\int|a\rangle\mathrm{d}a\langle a| = 1$$

$$\langle a|a'\rangle = \delta(a - a')$$

10.11 PRÍKLADY A PROBLÉMY

1. Súčet diagonálnych členov matice voláme jej stopou (spurom) a značíme Sp**A**. Dokážte, že stopa matice nezávisí od voľby bázy, v ktorej je matica vyjadrená.
2. Dokážte, že absolútna hodnota vlastných hodnôt unitárneho operátora sa rovná jednej.

3. Uvažujte pre jednoduchosť trojrozmerný vektorový priestor s bázou $|e_1\rangle$, $|e_2\rangle$, $|e_3\rangle$. Skonštruujte projekčný operátor, ktorý zodpovedá projekcii do „smeru“ $|e_1\rangle$. Aká matica mu zodpovedá v tejto báze? Podobne urobte pre projekciu do „roviny“ $|e_2\rangle$, $|e_3\rangle$.

4. Uvažujte n-rozmerný vektorový priestor s bázou $|e_1\rangle, ..., |e_n\rangle$. Nech $\mathbf{A}$ je $n \times n$ nesingulárna (t. j. existuje $\mathbf{A}^{-1}$) hermitovská matica. Ukážte, že vhodným výberom bázy môžeme maticu $\mathbf{A}$ diagonalizovať.
Návod: Ukážte najprv, že matica má n vlastných vektorov, overte ich ortogonálnosť a využite ich pri konštrukcii novej bázy.

5. Nech $\mathbf{A}$ je $n \times n$ rozmerná hermitovská matica. Ukážte, že platí

$$\det(e^{\mathbf{A}}) = \exp(\mathrm{Sp}\,\mathbf{A})$$

Návod: Ukážte, že tvrdenie nezávisí od zvolenej reprezentácie a dokážte ho pre prípad diagonálnej matice.

6. Dokážte platnosť formálnej identity

$$e^{\lambda \mathsf{A}}\mathsf{B}e^{-\lambda \mathsf{A}} = \mathsf{B} + \lambda[\mathsf{A}, \mathsf{B}] + \frac{\lambda^2}{2!}[\mathsf{A}, [\mathsf{A}, \mathsf{B}]]$$

Návod: Derivujte rovnosť podľa parametra λ, položte vo výsledku $\lambda = 0$ a porovnajte obe strany. Derivujte rovnosť dvakrát podľa parametra λ. a položte $\lambda = 0$ atď.

7. Pre lineárny harmonický oscilátor nájdite stredné hodnoty $\langle n|\mathsf{x}^2|n\rangle$ a $\langle n|\mathsf{p}^2|n\rangle$. Použite formalizmus kreačných a anihilačných operátorov.

8. Pre trojrozmerný izotropný harmonický oscilátor nájdite kreačný operátor, ktorý pôsobením na základný stav dá stav s kvantovými číslami $E = (1 + \frac{3}{2})\hbar\omega$, $l = 1$, $m = 1$.
Návod: Uvedomte si, že vo formalizme vlnových funkcií sa bezčasová SchR dala riešiť separáciou premenných v sférických i v karteziánskych súradniciach. Vyjadrite potom hľadaný operátor ako vhodnú kombináciu kreačných operátorov zodpovedajúcich excitáciám v smere súradnicových osí.

9. Označme stacionárne stavy harmonického oscilátora ako $|n\rangle$. Ukážte, že vektor

$$|\Phi\rangle = \sum_{1}^{\infty} \frac{1}{n}|n\rangle$$

je normalizovateľný. Určte strednú hodnotu energie oscilátora v stave $|\Phi\rangle$. Prediskutujte význam výsledku. Uvedomte si, že ťažkostí vznikajú preto, že hamiltonián je neohraničený (hoci má diskrétne spektrum).

10. Napíšte Schrödingerovu rovnicu pre pohyb častice v poli potenciálu $V(\boldsymbol{r})$ v p-reprezentácii!

11. Ukážte (pre jednoduchosť v jednorozmernom prípade), že pre operátory súradnice a hybností v Heisenbergovom obraze platia pohybové rovnice

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathsf{x}_H = \frac{1}{m}\mathsf{p}_H, \qquad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathsf{x}_H = -\left(\frac{\partial \mathsf{V}}{\partial x}\right)_H$$

kde m je hmotnosť častice a V je potenciál. Nájdite príslušné rovnice pre lineárny harmonický oscilátor a porovnajte ich s rovnicami klasickej mechaniky. Bude uzáver z takéhoto porovnania rovnaký i pre iné sústavy ako je harmonický oscilátor?

12. Ukážte, že ak matica hustoty zodpovedá štatistickému súboru (vzájomne neintegrujúcich) sústav, potom v Schrödingerovom obraze operátor $\boldsymbol{\rho}$ spĺňa tiež pohybovú rovnicu (9.9). (Treba si uvedomiť, že operátor $\boldsymbol{\rho}$ nezodpovedá veličine ale stavu, preto nie je prekvapujúce, že závisí od čase v Schrödingerovom obraze.)

13. Uvažujte atóm vodíka v termodynamickej rovnováhe so žiarením v dutine s teplotou T nasledujúcimi spôsobmi:
a) atóm je opísaný kanonickým rozdelením pri teplote T.
b) zložená sústava (atóm plus žiarenie) je opísaná mikrokanonickým rozdelením.
Napokon
c) zloženú sústavu opisujeme (teoreticky je to možné) stavom Hilbertovho priestoru s ostrou hodnotou energie. Prediskutujte, či je atóm vodíka vo všetkých troch prípadoch opísaný rovnakým štatistickým operátorom. Pripomíname, že pre makroskopickú sústavu s teplotou T platí

$$\frac{\partial}{\partial E} \ln n(E) = \frac{1}{kT}$$

kde $n(E)$ je počet stavov s energiou menšou ako E.