Lehký úvod do kvantové teorie

1 Unitární prostory (prostory se skalárním součinem)

Ve Fyzice 1 jsme rozšířili pojem vektoru na obecnější objekty,než jsou uspořádané trojice a zavedli lineární vektorový prostor. Pozorně si znovu tuto pasáž přečtěte! Nyní analogicky rozšíříme pojem skalárního součinu pro různé lineární vektorové prostory. Budeme důsledně používat Diracovu symboliku, kterou zavedl Paul Adrien Maurice Dirac pro kvantovou teorii. Prvky lineárních vektorových prostorů jsou značeny symboly $|\,\mathbf{f}>, |\,\mathbf{x}>, |\,\mathbf{a}>$ a skalární součiny $<\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}>, <\mathbf{x}\,|\,\mathbf{y}>, <\mathbf{a}\,|\,\mathbf{b}>$ atd.

Prostor reálných trojic $\mathcal{R}^3$

Prvky vektorového prostoru budeme označovat

$$|\,\mathbf{f}> \;=\; (f_1, f_2, f_3)\,; \qquad |\,\mathbf{g}> \;=\; (g_1, g_2, g_3)$$

a jejich skalární součin je zaveden standardním způsobem:

$$<\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}> \;\equiv\; f_1 g_1 + f_2 g_2 + f_3 g_3 \;=\; f_k g_k. \tag{1}$$

Norma vektoru (velikost) se definuje vztahem

$$\|\,\mathbf{f}\,\| \;\equiv\; \sqrt{<\mathbf{f}\,|\,\mathbf{f}>} \;\overset{\text{pro } \mathcal{R}^3}{=}\; \sqrt{f_1^2 + f_2^2 + f_3^2}\,. \tag{2}$$

Pro reálné trojice znázorněné jako úsečky opatřené šipkami je norma vektoru rovna délce úsečky a platí $<\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}> \;=\; \|\,\mathbf{f}\,\|\cdot\|\,\mathbf{g}\,\|\cdot\cos\alpha$, kde α je úhel sevřený oběma vektory. Z tohoto vztahu plyne okamžitě *Schwartzovo lemma*:

► $$\left|<\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}>\right| \;\le\; \|\,\mathbf{f}\,\|\cdot\|\,\mathbf{g}\,\|. \tag{3}$$

Výsledkem operace skalárního součinu je číslo, v případě lineárního vektorového prostoru $\mathcal{R}^3$ reálné číslo, v obecném případě bude výhodné uvažovat i o čísle komplexním. Norma vektoru (velikost) musí ale vždy být nezáporné reálné číslo.

Prostor reálných *N*-tic $\mathcal{R}^N$

Prvky tohoto prostoru jsou nyní reálné *N*-tice

$$|\,\mathbf{f}> \;=\; (f_1, \ldots, f_N)\,, \qquad |\,\mathbf{g}> \;=\; (g_1, \ldots, g_N)\,; \qquad f_l\,, g_l \in \mathcal{R}\,,$$

definici skalárního součinu rozšíříme přirozeným způsobem:

► $$< \mathbf{f} \,|\, \mathbf{g} > \;\equiv\; f_1 g_1 + \cdots + f_N g_N \;=\; \sum_{k=1}^{N} f_k g_k \;=\; f_k g_k \,. \tag{4}$$

V platnosti zůstává definice normy i Schwartzovo lemma.

Prostor komplexních N-tic C^N

Prvky tohoto prostoru jsou nyní komplexní N-tice

$$|\,\mathbf{f}> \;=\; (f_1, \ldots, f_N)\,, \qquad |\,\mathbf{g}> \;=\; (g_1, \ldots, g_N)\,;. \qquad f_l\,,\, g_l \in C\,.$$

Skalární součin definujeme v jednom z argumentů komplexně sdružený (v této učebnici bude komplexně sdružený levý argument):

► $$< \mathbf{f} \,|\, \mathbf{g} > \;\equiv\; f_1^* g_1 + \cdots + f_N^* g_N \;=\; \sum_{k=1}^{N} f_k^* g_k \;=\; f_k^* g_k \,. \tag{5}$$

Pro komplexní číslo $z = a + i\,b$ je velikost (norma) čísla dána vztahem

$$\| z \| = \sqrt{z^* z}\;.$$

Právě proto, aby pro komplexní čísla zůstalo v platnosti, že norma vektoru je odmocnina skalárního součinu vektoru se sebou samým, je v definici skalárního součinu komplexní sdružení v jednom z argumentů. Při výše uvedené definici skalárního součinu bude výsledkem sice komplexní číslo, ale norma vektoru zůstane reálná nezáporná:

$$\| f \| = \sqrt{\langle f \,|\, f \rangle} = \sqrt{f_1^* f_1 + \cdots + f_N^* f_N} \;=\; \sqrt{\left| f_1^2 \right| + \cdots + \left| f_N^2 \right|} \;\geq\; 0 \;\;.$$

Opět platí Schwartzovo lemma.

Prostor komplexních posloupností (N-tice s $N \to \infty$) l^2

Nyní již nepůjde o N-tice, ale o celé posloupnosti komplexních čísel:

$$|\,\mathbf{f}> = \{f_1,\; \ldots\,,\; f_n,\; \ldots\} = \{f_l\}_{l=1}^{\infty}\;, \qquad |\,\mathbf{g}> = \{g_l\}_{l=1}^{\infty}\;; \qquad f_l, g_l \;\in C\,.$$

Pokusme se skalární součin definovat obdobně, jako v předchozích příkladech:

► $$< \mathbf{f} \,|\, \mathbf{g} > \equiv f_1^* g_1 + \cdots + f_n^* g_n + \cdots = \sum_{k\,=\,1}^{\infty} f_k^* g_k = f_k^* g_k \,. \tag{6}$$

Takto definovaný skalární součin má smysl jen pro konvergentní posloupnosti. Do prostoru l^2 můžeme zahrnout jen takové prvky $|\,\mathbf{f}>$, pro které je $||\,\mathbf{f}\,|| < \infty$, tj. požadujeme

$$\sum_{k=1}^{\infty} f_k^* f_k = \sum_{k=1}^{\infty} \left| f_k \right|^2 \;<\; \infty \qquad \text{pro } \forall\, |\,\mathbf{f}> \in l^2\,. \tag{7}$$

Potom je

$$|<\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}>| \;=\; |\sum_{k=1}^{\infty} f_k^* g_k \,| \;\leq\; \|\mathbf{f}\|\cdot\|\mathbf{g}\| \;<\; \infty \qquad \text{pro } \forall\,|\,\mathbf{f}>, |\,\mathbf{g}> \in l^2 \,,$$

tj. Schwartzovo lemma platí i v případě nekonečných posloupností.

Prostor komplexních funkcí reálné proměnné $\mathcal{L}^2$ (– ∞ , ∞)

Při dalším zobecnění prostoru l^2 si můžeme index k představit spojitý. Místo k budeme psát x: f_x. Výraz f_x není ale nic jiného než komplexní funkce reálné proměnné (spojitého indexu), kterou je zvykem zapisovat ve tvaru $f\,(x)$, tj. prvky našeho prostoru budou

$$|\,\mathbf{f}> \equiv f_x \equiv f(x)\,, \qquad |\,\mathbf{g}> \equiv g_x \equiv g(x)\,; \qquad x \in \mathcal{R}, \quad f\,, g \in \mathcal{C}\,.$$

Součet ve skalárním součinu se stane integrálem:

► $$<\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}> \;\equiv\; \int_{-\infty}^{+\infty} f^*(x)\, g(x)\, \mathrm{d}x\,. \tag{8}$$

Analogicky jako v l^2 je třeba do prostoru $\mathcal{L}^2$ zahrnout jen prvky s $\|\mathbf{f}\| < \infty$, tj. požadujeme, aby

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f^*(x)\, f(x)\, \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2\, \mathrm{d}x \;<\; \infty \qquad \text{pro } \forall\; f(x) \in \mathcal{L}^2\,. \tag{9}$$

Potom je

$$|<\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}>| \;=\; |\int_{-\infty}^{+\infty} f^*(x)\, g(x)\, \mathrm{d}x\,| \;\leq\; \|\mathbf{f}\|\cdot\|\mathbf{g}\| \;<\; \infty \qquad \text{pro } \forall\,|\,\mathbf{f}>, |\,\mathbf{g}> \in \mathcal{L}^2$$

a skalární součin má smysl. Schwartzovo lemma platí i pro integrály. $\mathcal{L}^2$ se někdy nazývá *prostor funkcí integrovatelných s kvadrátem*. Lze ho definovat i pro jiný definiční obor než celou reálnou osu (– ∞ , ∞), potom píšeme $\mathcal{L}^2$ ($\mathcal{M}$), kde $\mathcal{M}$ je definiční obor funkcí $f\,(x) \in \mathcal{L}^2(\mathcal{M})$.

Nyní můžeme přistoupit k obecné definici prostorů se skalárním součinem.

Unitární prostor

Unitárním prostorem (neboli prostorem se skalárním součinem) nazveme lineární vektorový prostor $\mathcal{V}$(s operací $+ : \mathcal{V} \times \mathcal{V} \to \mathcal{V}$ a operací $\cdot : \mathcal{C} \times \mathcal{V} \to \mathcal{V}$), na kterém je definována další operace

$$<\;|\;> \;:\quad \mathcal{V} \times \mathcal{V} \to \mathcal{C}$$

(tzv. skalární součin) s vlastnostmi

1) $<\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}+\mathbf{h}> \;=\; <\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}>+<\mathbf{f}\,|\,\mathbf{h}>,$

2) $<\mathbf{f}\,|\,\alpha\,\mathbf{g}> \;=\; \alpha<\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}>,$

3) $<\mathbf{g}\,|\,\mathbf{f}> \;=\; <\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}>^{*} \qquad\qquad (\Rightarrow <\alpha\,\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}>=\alpha^{*}<\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}>)\,,$

4) $<\mathbf{f}\,|\,\mathbf{f}> \;\geq\; 0 \quad ; \qquad <\mathbf{f}\,|\,\mathbf{f}> \;=\; 0 \qquad \Leftrightarrow \qquad |\,\mathbf{f}>=0.$

Poznámka 1 První dvě operace v definici znamenají linearitu v pravém argumentu. Z třetí operace plyne antilinearita v levém argumentu (aditivnost + vytknutí komplexně sdružené konstanty).

Poznámka 3: Symbolika zápisu pochází od P. A. M. Diraca. Nazývá se také braketová symbolika nebo brakety (z anglického bracket = závorka).

$<|>$ „braket“;

$<|$ „bra“ (lze přesně definovat, naznačená operace skalárního součinu);

$|>$ „ket“ (vektor z $\mathcal{V}$).

Poznámka 4: Pro komplexní N-tice lze interpretovat $|\,\mathbf{f}>$ jako sloupcovou matici, $<\mathbf{f}\,|$ jako transponovanou komplexně sdruženou matici:

$$|\,\mathbf{f}> \;=\; \begin{pmatrix} f_1 \\ \vdots \\ f_N \end{pmatrix}; \qquad <\mathbf{f}\,| \;=\; \begin{pmatrix} f_1^{*} & \cdots & f_N^{*} \end{pmatrix}.$$

Potom je skalární součin

$$<\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}> \;=\; \begin{pmatrix} f_1^{*} & \cdots & f_N^{*} \end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix} g_1 \\ \vdots \\ g_N \end{pmatrix} \;=\; f_k^{*}g_k$$

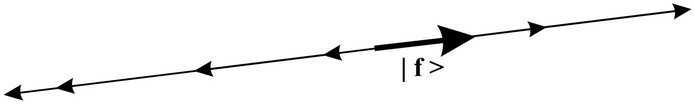
definován za pomoci maticového násobení. Pro jiné prostory než N-tice není pro naše účely třeba jednotlivé části skalárního součinu $<\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}>$ nějak interpretovat.

Poznámka 5: Pro $\mathcal{L}^2$ lze chápat $<\mathbf{f}\,| \;=\; \int\limits_{-\infty}^{+\infty} f^{*}(x)\;\cdots\;\mathrm{d}x$ jako naznačenou operaci skalárního součinu. Je jen třeba doplnit patřičnou funkci, na kterou operace působí. Podobná situace je u derivování, napíšeme-li jen d/dx.

Poznámka 6: Diracova symbolika mimořádně zjednodušila většinu zápisů v kvantové teorii. Matematikové k ní z počátku byli nedůvěřiví, nicméně ji po určité době akceptovali. Dnes si nedokážeme zápis dějů probíhajících v mikrosvětě bez této symboliky představit. Zejména zápisy projekčních operátorů, věty o úplnosti nebo věty o spektrálním rozvoji by bez této symboliky byly mimořádně nepřehledné a kostrbaté.

Paprsek

Nechť $\mathcal{V}$ je unitární prostor a $|\,\mathbf{f}>$ jeho nenulový prvek. Paprskem nataženým na $|\,\mathbf{f}>$ nazveme množinu prvků $\{|\,\mathbf{g}>;\ |\,\mathbf{g}> = \alpha\,|\,\mathbf{f}>;\quad \alpha \in \mathcal{C}\setminus\{0\},\qquad |\,\mathbf{f}>, |\,\mathbf{g}> \in \mathcal{V}\}$.



Obr. E1: Paprsek.

Hilbertův prostor

Hilbertův prostor je úplný unitární prostor (hranice prostoru je jeho součástí).

2 Operátory

Operátorem rozumíme zobrazení

$$\hat{\mathbf{A}}:\quad \mathcal{V} \to \mathcal{V}\,,$$

které prvku $|\,\mathbf{f}>$ prostoru $\mathcal{V}$ přiřazuje prvek $|\,\mathbf{g}>$ tohoto prostoru:

$$\hat{\mathbf{A}}|\,\mathbf{f}> = |\,\mathbf{g}>.$$

V platnosti zůstává běžné názvosloví používané pro zobrazení (*vzor, obraz, definiční obor, obor hodnot…*).

◖ **Příklad 1: prostor $\mathcal{R}^3$**

Operátorem na $\mathcal{R}^3$ může být libovolná matice 3×3, například

$$\hat{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix};\qquad |\,\mathbf{f}> = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}\qquad \Rightarrow$$

$$\hat{\mathbf{A}}|\,\mathbf{f}> = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 3 \end{pmatrix} = |\,\mathbf{g}>,\qquad \text{obecně}$$

$$\hat{\mathbf{A}}|\,\mathbf{f}> = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_3 \\ f_2 + f_3 \end{pmatrix}.$$

◗

◖ **Příklad 2: prostor $\mathcal{L}^2$ (– ∞ , ∞)**

Za typický operátor na prostoru funkcí můžeme považovat derivaci funkce. Vždy musíme ale vybírat funkce integrovatelné s kvadrátem a zkontrolovat, zda si i po derivování tuto vlastnost ponechaly:

$$\hat{\mathbf{D}} \equiv \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}; \qquad |\,\mathbf{f}> = x\,\mathrm{e}^{-x} \qquad \Rightarrow$$

$$\hat{\mathbf{D}}|\,\mathbf{f}> = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(x\,\mathrm{e}^{-x}\right) = (1-x)\,\mathrm{e}^{-x} = |\,\mathbf{g}>.$$

◗

Jednotkový operátor

Jednotkový operátor je definován předpisem

► $$\hat{\mathbf{1}}|\,\mathbf{f}> \;\equiv\; |\,\mathbf{f}>. \tag{10}$$

Pro N-tice je jednotkovým operátorem diagonální matice s jednotkami na diagonále (jednotková matice) – ověřte!

Kvadrát operátoru

Druhou mocninu operátoru můžeme definovat, je-li obor funkčních hodnot operátoru podmnožinou jeho definičního oboru, potom lze psát

$$\hat{\mathbf{A}}^2\,|\,\mathbf{f}> \;\equiv\; \hat{\mathbf{A}}\left(\hat{\mathbf{A}}\,|\,\mathbf{f}>\right). \tag{11}$$

◖ **Příklad 3: druhá mocnina derivace**

Druhá mocnina derivace je podle předchozí definice druhou derivací dané funkce:

$$\hat{\mathbf{D}} \equiv \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}; \qquad |\,\mathbf{f}> = \mathrm{e}^{-x^2} \qquad \Rightarrow$$

$$\hat{\mathbf{D}}^2\,|\,\mathbf{f}> \;\equiv\; \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\mathrm{e}^{-x^2}\right) \;=\; \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(-2x\,\mathrm{e}^{-x^2}\right) \;=\; (-2+4x^2)\,\mathrm{e}^{-x^2}\;.$$

◗

Inverzní operátor

Inverzním operátorem k $\hat{\mathbf{A}}$ nazveme takový operátor $\hat{\mathbf{A}}^{-1}$, že pro něho platí

► $$\hat{\mathbf{A}}\cdot\hat{\mathbf{A}}^{-1} = \hat{\mathbf{A}}^{-1}\cdot\hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{1}}. \tag{12}$$

K danému operátoru $\hat{\mathbf{A}}$ může být nalezení inverzního operátoru značně obtížné, někdy inverzní operátor neexistuje vůbec.

Sdružený operátor

Sdruženým operátorem k $\hat{\mathbf{A}}$ nazveme takový operátor $\hat{\mathbf{A}}^{\dagger}$, že pro něho platí

► $$<\mathbf{f}\,|\hat{\mathbf{A}}\,\mathbf{g}> \;=\; <\hat{\mathbf{A}}^{\dagger}\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}>. \tag{13}$$

Působení původního operátoru v pravé straně skalárního součinu dopadne stejně jako působení k němu sdruženého operátoru v levé části skalárního součinu. Sdružený operátor nemusí vždy existovat.

Poznámka: Nalézt sdružený operátor pro matice je velmi snadné, původní matici stačí komplexně sdružit a poté transponovat (překlopit kolem diagonály), tj.

$$\hat{\mathbf{A}}^{\dagger} = (\hat{\mathbf{A}}^{*})^{T}\,.$$

Komutativita operátorů

Pro operátory je obecně $\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}} \neq \hat{\mathbf{B}}\hat{\mathbf{A}}$. Říkáme, že operátory nekomutují. Míru nekomutativnosti můžeme posoudit za pomoci tzv. *komutátoru*

► $$[\hat{\mathbf{A}},\hat{\mathbf{B}}] \equiv \hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}} - \hat{\mathbf{B}}\hat{\mathbf{A}}\,. \tag{14}$$

Je-li komutátor operátorů $\hat{\mathbf{A}}$, $\hat{\mathbf{B}}$ nulový, operátory komutují, je-li různý od nuly nekomutují. Výsledkem komutátoru je opět operátor.

Všechny dosud uvedené operátory byly lineární. V kvantové teorii se setkáme především se dvěma druhy lineárních operátorů – operátory *unitárními* a operátory *Hermitovými*. Uveďme nyní definice těchto operátorů.

Hermitovy operátory

Definice: Hermitův operátor působí v obou částech skalárního součinu stejně, tj.

► $$<\hat{\mathbf{A}}\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}> = <\mathbf{f}\,|\,\hat{\mathbf{A}}\mathbf{g}>\,. \tag{15}$$

Věta: Pro Hermitův operátor je sdružený operátor roven původnímu, je *samosdružený*:

► $$\hat{\mathbf{A}}^{\dagger} = \hat{\mathbf{A}}\,. \tag{16}$$

Důkaz: Plyne okamžitě z definice sdruženého operátoru.

Poznámka: V přesné matematice se definice samosdruženého a Hermitova operátoru nepatrně liší požadavky na definiční obor, pro naše účely nebudeme samosdružené a Hermitovy operátory rozlišovat. Vzhledem k tomu, že Hermitův operátor působí v obou částech skalárního součinu stejně, často se píše

$$<\hat{\mathbf{A}}\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}> = <\mathbf{f}\,|\,\hat{\mathbf{A}}\mathbf{g}> = <\mathbf{f}\,|\,\hat{\mathbf{A}}\,|\,\mathbf{g}>\,.$$

Centrální pozice $\hat{\mathbf{A}}$ naznačuje, že podle vlastního uvážení můžeme operátorem zapůsobit vlevo či vpravo. Tato struktura se někdy nazývá Diracův sendvič.

3 Spektrální teorie

V teorii operátorů patří k základním úlohám nalézt směry, ve kterých se působení daného operátoru projevuje jako komplexní natahování:

$$\hat{\mathbf{A}}\,|\,\mathbf{f}> = \lambda|\mathbf{f}>; \qquad \lambda \in C. \tag{17}$$

Vektor $|\,\mathbf{f}>$ se nazývá *vlastním vektorem* (charakteristickým vektorem) operátoru $\hat{\mathbf{A}}$ a koeficient natahování λ *vlastním číslem* (charakteristickým číslem). Například u tenzoru setrvačnosti leží vlastní vektory ve směru os, ve kterých těleso při rotaci „nehází“. U lineárních operátorů je i každý násobek vlastního vektoru vlastním vektorem se stejným vlastním číslem. Jde tedy o celý paprsek v Hilbertově prostoru, neboli *vlastní směr*. Takových vlastních směrů a čísel může existovat u lineárních operátorů celá řada, jejich maximální počet je roven *dimenzi prostoru* (počtu prvků báze). U separabilních prostorů můžeme tedy úlohu nalezení vlastních čísel a vektorů formulovat rovnicemi:

$$\hat{\mathbf{A}}\,|\,\mathbf{f}_k> = \lambda_k|\mathbf{f}_k>; \qquad k = 1, 2, \ldots; \quad \lambda_k \in C. \tag{18}$$

Množina všech vlastních čísel $\{\lambda_1, \ldots, \lambda_n, \ldots\}$ se nazývá *spektrum operátoru* $\hat{\mathbf{A}}$ Nalezneme-li spektrum operátoru a jeho vlastní vektory, můžeme relativně snadno řešit rovnice obsahující tento operátor. Pomocí vlastních čísel a vektorů lze například řešit soustavy obyčejných lineárních diferenciálních rovnic (viz kapitola 1.5).

Vlastní čísla a vektory hermitovského operátoru

Věta: Hermitovský operátor má reálná vlastní čísla a vlastní vektory dvou různých vlastních čísel jsou navzájem kolmé.

Důkaz: Při výpočtu skalárního součinu využijeme hermitovosti a působíme operátorem v pravé i v levé části skalárního součinu. Výsledek musí být stejný:

$$<\mathbf{f}_k\,|\,\hat{\mathbf{A}}\,\mathbf{f}_k> \;=\; \begin{cases} <\mathbf{f}_k\,|\,\lambda_k\,\mathbf{f}_k> = \lambda_k <\mathbf{f}_k\,|\,\mathbf{f}_k> \\ <\hat{\mathbf{A}}\,\mathbf{f}_k\,|\,\mathbf{f}_k> = \lambda_k^* <\mathbf{f}_k\,|\,\mathbf{f}_k> \end{cases} \quad\Rightarrow\quad \lambda_k = \lambda_k^* \quad\Rightarrow\quad \lambda_k \in \mathcal{R}.$$

Vlastní čísla jsou tedy reálná. V druhé části budeme postupovat obdobně. Pro vlastní číslo z levé části skalárního součinu využijeme první části důkazu:

$$<\mathbf{f}_k\,|\,\hat{\mathbf{A}}\,\mathbf{f}_l> \;=\; \begin{cases} <\mathbf{f}_k\,|\,\lambda_l\,\mathbf{f}_l> = \lambda_l <\mathbf{f}_k\,|\,\mathbf{f}_l> \\ <\hat{\mathbf{A}}\,\mathbf{f}_k\,|\,\mathbf{f}_l> = \lambda_k^* <\mathbf{f}_k\,|\,\mathbf{f}_l> = \lambda_k <\mathbf{f}_k\,|\,\mathbf{f}_l> \end{cases}$$

$$\Downarrow$$

$$\lambda_l < \mathbf{f}_k \,|\, \mathbf{f}_l > = \lambda_k < \mathbf{f}_k \,|\, \mathbf{f}_l > ,$$

$$\Downarrow$$

$$(\lambda_l - \lambda_k) < \mathbf{f}_k \,|\, \mathbf{f}_l > = 0 ,$$

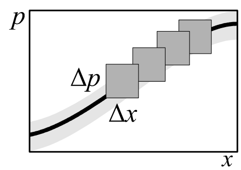
$$\Downarrow$$

$$< \mathbf{f}_k \,|\, \mathbf{f}_l > = 0 \text{ pro } \lambda_k \neq \lambda_l \, .$$

Poznámka 1: Reálné vlastní hodnoty hermitovských operátorů budou v kvantové teorii využity jako možné výsledky měření dynamické proměnné, které odpovídá operátor $\hat{\mathbf{A}}$. Ani kolmost vlastních vektorů není bez užitku. Vhodný hermitovský operátor nám může v podobě svých vlastních vektorů „porodit“ výhodnou ortonormální bázi v Hilbertově prostoru.

4 Základní axiomy a definice

I. Redefinice stavu



V klasické mechanice je stav částice určen polohou a hybností. Vzhledem k tomu, že v mikrosvětě nelze současně tyto veličiny měřit a měření jedné ovlivní měření druhé, je nutné pojem stavu definovat novým způsobem. Fázové trajektorie již nelze v mikrosvětě popsat křivkami. Vnímáme je s přesností danou relacemi neurčitosti $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$. Můžeme si představit, že fázovou trajektorii vidíme rozmazanou čáru s rozlišením daným čtverečkem o ploše $\hbar/2$ (sledujeme-li jednu souřadnici a jí odpovídající hybnost). Zaveďme si nejprve některé pojmy.

Kompatibilita: Řekneme, že dvě dynamické proměnné jsou kompatibilní, jestliže měření jedné veličiny neovlivní měření veličiny druhé. Příkladem kompatibilních proměnných jsou souřadnice (x, y), příkladem nekompatibilních proměnných jsou souřadnice a jí odpovídající hybnost (x, p_x). Kompatibilita je symetrická vlastnost:

$$(A \text{ komp } B) \quad \Rightarrow \quad (B \text{ komp } A) \, . \tag{19}$$

Stav systému: Řekneme, že známe stav systému, známe-li výsledek měření některé úplné množiny pozorovatelných. Stavem tedy nazveme jen to, co lze ve skutečnosti současně změřit.

Základním rysem nové teorie musí být nekomutující objekty – operátory. Místo dynamických proměnných z klasické mechaniky (souřadnice, hybnost, energie, moment hybnosti,…) budeme používat operátory (operátor souřadnice, hybnosti,…). Nekomutativnost těchto operátorů bude vyjadřovat nekomutativnost aktu měření dynamických proměnných v mikrosvětě. Veličiny naměřené přístrojem v mikrosvětě jsou reálná čísla, někdy spojitá (poloha částice), někdy diskrétní (například jednotlivé hladiny energie elektronu vázaného v atomu). Jak získat z operátoru dynamické proměnné sadu reálných čísel spojitého nebo diskrétního charakteru? Takovou sadou je právě spektrum hermitovských operátorů. *Dynamickým proměnným budeme tedy přiřazovat hermitovské operátory*.

Každý operátor působí na prvky nějakého Hilbertova prostoru $\mathcal{H}$. Musíme se tedy ptát, jaký význam bude v naší teorii mít sám Hilbertův prostor a také prvky, na které operátory působí. Později uvidíme, že příliš nezáleží na volbě Hilbertova prostoru. Podstatné jsou spíše vztahy mezi dynamickými proměnnými, nyní operátory. Kvantová mechanika založená na prostoru $\mathcal{L}^2$ funkcí integrovatelných s kvadrátem je známá Schrödingerova vlnová mechanika vedoucí na Schrödingerovu rovnici a vlnové funkce. Kvantová teorie založená na prostoru l^2 posloupností sčitatelných s kvadrátem je Heisenbergova maticová mechanika. Obě teorie se na první pohled zdají naprosto odlišné. Přesto vlastní čísla operátorů v obou teoriích jsou stejná a obě teorie tak dávají stejné předpovědi. Hilbertův prostor se všemi svými prvky a s operátory, které na prvky působí, koresponduje s vlastnostmi celého systému z klasické mechaniky. *Místo systému budeme proto v kvantové teorii hovořit o Hilbertově prostoru daného systému* (například Hilbertův prostor elektronu).

Zbývá rozluštit poslední hádanku – k čemu jsou prvky Hilbertova prostoru? Již v úvodu jsme si řekli, že v mikrosvětě sám akt měření ovlivní stav systému. Před měřením je systém v jiném stavu než po měření. Akt měření dynamické proměnné zastupuje v kvantové teorii hermitovský operátor této proměnné. Působením tohoto operátoru na prvek prostoru dostáváme jiný prvek tohoto prostoru. A to je přesně to, co hledáme. *Prvky (vektory) prostoru tedy představují stav systému*. Akt měření koresponduje s působením příslušného operátoru na stav (prvek prostoru) a nový stav je prvek, který vznikl působením operátoru.

Vlastní číslo operátoru prezentuje naměřenou hodnotu a vypovídá tak o stavu systému. Víme už, že násobky každého vlastního vektoru jsou opět vlastním vektorem. V $\mathcal{H}$ tedy existuje k danému vlastnímu číslu celý vlastní směr (paprsek). Stavu systému proto musí odpovídat celý paprsek v $\mathcal{H}$, nikoli jen jeden jediný vektor. Přicházíme tak ke třem základním *axiomům* kvantové teorie, které říkají, jak spolu korespondují klasické a kvantové pojmy:

systém	$\rightarrow$	Hilbertův prostor $\mathcal{H}$
stav systému	$\rightarrow$	paprsek natažený na $\vert\psi>$
dynamická proměnná A	$\rightarrow$	hermitovský operátor $\hat{\mathbf{A}}$

Nejjednodušší přiřazení operátorů

Vyjdeme z duality vlna částice

$$\begin{pmatrix} E/c \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} \omega/c \\ \mathbf{k} \end{pmatrix} \tag{20}$$

Tedy

$$\begin{aligned} E &= \hbar\omega, \\ \mathbf{p} &= \hbar\mathbf{k}. \end{aligned} \tag{21}$$

Pokud si vzpomeneme na pravidla pro Fourierovu reänsformaci

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} &\rightarrow -\mathrm{i}\,\omega, \\ \nabla &\rightarrow -\mathrm{i}\,\mathbf{k}. \end{aligned} \tag{22}$$

Můžeme kombinací posledních dvou výrazů získat přirozené operátory pro kvantovou teorii budovanou na prostoru L^2:

$$\begin{aligned} E &\to \hat{E} = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}, \\ \mathbf{p} &\to \hat{\mathbf{p}} = -\mathrm{i}\hbar\nabla. \end{aligned} \tag{23}$$

Hamiltonově funkci potom bude příslušet operátor

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x}) \qquad \to \qquad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{x}) \tag{24}$$

Rovnice pro vlastní čísla Hamiltonova operátoru je

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{x})\right)\psi = E\psi\,, \tag{25}$$

což je známá Schrödingerova rovnice pro vlastní čísla operátoru energie. Její řešení existuje pro každou energii, ale my musíme vybrat pouze řešení integrovatelná s kvadrátem, jen taková řešení zajistí existenci velikosti stavu, tj. prvku Hilbertova prostoru. Řešení této rovnice se liší pro různé průběhy potenciální energie. Energetické spektrum má význam hodnot, které můžeme na systému naměřit. Samotná vlnová funkce má význam amplitudy pravděpodobnosti nalézt systém v daném stavu, samotná pravděpodobnost je kvadrátem amplitudy:

$$w = \psi^*\psi\,. \tag{26}$$