II. Formalismus kvantové teorie 1

Začneme s konečnými LVP, nekonečně dim. Hilbert. p. později

1. Opakování LVP (komentované s ohledem na QM)

Lineární vektor. prostor (LVP) = Prostor stavů (ket space)

Def: LVP = {vektorů ϕ} s operacemi + ; násob. $\mathbb{C}$ číslem

tj uzavřený vůči těmto operacím:

$\forall \phi, \psi \in V \Rightarrow a\phi + b\psi \in V$ .. Princip superpozice

(kočky pana Schrodingera – viz interpretace)

další algeb. požadavky (Axiomy): Asoc. +; komut +, $\exists\, 0 + \phi = \phi$, $\exists -V$

distrib pro vektory i čísla, Asoc $\cdot\, \mathbb{C}$, $\exists\, 1 \cdot \phi = \phi$

zopakujte: lineární závislost, dimenze, báze

Skalární součin (inner product) ... amplitudy pravděpod.

$(\psi | \phi) \in \mathbb{C}$ splňující:

1) $(\psi|\phi) = (\phi|\psi)^*$

2) $(\phi | c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1(\phi|\psi_1) + c_2(\phi,\psi_2)$ .. linearita ve 2. argumentu

1,+2) $\Rightarrow$ $(c_1\phi_1 + c_2\phi_2 | \psi) = c_1^*(\phi_1,\psi) + c_2^*(\phi_2,\psi)$ antilinearita v 1. argum.

3) $(\phi,\phi) \geq 0$; rovnost $\Leftrightarrow \phi = 0$ .. posit. definitnost → důležitá pro pravděpod. int.

pozn: norma $\|\phi\| = \sqrt{(\phi|\phi)}$

zopakujte: ON báze $\{\phi_i,\ i = 1..d\}$ $(\phi_i,\phi_j) = \delta_{ij}$

rozklad $\forall \psi\ \exists c_i$: $\psi = \sum_i c_i \phi_i$ přitom $c_i = (\phi_i|\psi)$

tj. $\forall$ konečný LVP je izomorfní s $\mathbb{C}^d$

→ připomenout zápis skalár. souč. v bazi $(\phi|\psi) = \sum f_i^* c_i$

Duální postor V^* : $\equiv$ prostor $\forall$ lin. funkcionálů nad V (bra space)

(pozor: v ∞ dim budeme přísnější)

v konečné dim. je V a V^* izomorfní tj $\mathbb{C}^d$

DK: označme $F(\phi_i) = f_i^*$ pak $\forall\, F(\psi) = f_i^* c_i \equiv (\phi|\psi)$

kde $|\phi\rangle = \sum f_i |\phi_i)$ .. tj. libovolný lin. fcionál lze reprezentovat skalárním součinem

v ∞ dim musíme dávat bacha na konvergenci $\sum_1^\infty$ – později

značení (matematické) fcionál odpovídající vektoru ϕ:

$$F_\phi(\psi) = (\phi, \psi)$$

Diracova notace:

ket vektory z V : $|\psi\rangle$ ... v koneč. dim slopc. vekt. $\begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_d \end{pmatrix}$

bra vektory z V^* : $\langle\phi|$ ... v koneč dimenzi řád. vektory

$\langle\psi|$ vlastně odpovídá působení fcionálu F_ψ tj
a řádkovému vektoru $(c_1^*, \dots, c_d^*)$

poznámka: skalární součin $\langle\phi|\psi\rangle$ můžeme číst jako maticové násobení řád. matice $1\times d$ a slop. matice $d\times 1$

přechod $|\psi\rangle \to \langle\psi| = |\psi\rangle^+$ lze chápat jako hermit. sdružení

pozn $(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle)^+ = c_1^*\langle\psi_1| + c_2^*\langle\psi_2| \leftrightarrow F_{(c_1\psi_1 + c_2\psi_2)}$

Lineární operátory

pozorovatelné (měřit.) veličiny a transformace stavů

Lineární operátor $\hat{A}: V \to V$
tj $\forall |\psi\rangle \in V \ \exists |\phi\rangle \equiv \hat{A}|\psi\rangle \in V$ (v ∞ dim opatrnější)

linearita $\hat{A}(c_1|\phi_1\rangle + c_2|\phi_2\rangle) = c_1 \hat{A}|\phi_1\rangle + c_2\hat{A}|\phi_2\rangle$

... ON baze + linearita ... $\hat{A}$ jednoznačně zadán čísly $a_{ij} \equiv \langle\phi_i|A|\phi_j\rangle$

v koneč. dimenzi lze ztotožnit $\hat{A}$ a matici a_{ij}

→ Diracova notace $\langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle$; $\hat{A}|\psi\rangle$; $\langle\psi|\hat{A}$
všechno maticové násobení

např $A|\psi\rangle = \sum_j a_{ij} c_j$

- rovnost operátorů $\hat{A} = \hat{B} \Leftrightarrow \hat{A}|\phi\rangle = \hat{B}|\phi\rangle \quad \forall |\phi\rangle$
- nulový a jednotkový operátor $\hat{O}, \hat{I}$ (často prostě $0, 1$ → z kontextu)
- sčítání operátorů: $\hat{A} + \hat{B}$
  $(\hat{A} + \hat{B}) + \hat{C} = \hat{A} + (\hat{B} + \hat{C})$
- násobení operátorů: $\hat{A}\hat{B}$ .. skládání zobr, či násobení matic

  pozor $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$ (obecně) ... def $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$

  obvyklý trik: $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} + [\hat{A}, \hat{B}]$
- funkce operátoru $f(\hat{A}) = \sum_n f_n \hat{A}^n$ .. např: $e^{\hat{A}} = \sum_n \frac{1}{n!} \hat{A}^n$

pozor: vektoru $A|\psi\rangle$ neodpovídá lin fcionál $F_{A|\psi\rangle} \neq \langle\psi|A$
ale $F_{A|\psi\rangle} = \langle\psi|A^+$

kde A^+ je hermitovsky sdružená matice $(A^+)_{ij} = a_{ji}^*$

SDRUŽENÝ OPERÁTOR (adjoint)

matematická definice: $B = A^+$ pokud $(B\phi|\psi) = (\phi, A\psi)$ $\forall \phi,\psi \in V$

pozn: v ∞ dim to komplikují def obory … později

v kon dimenzích: dosadíme bázi:

$$a_{ij} = \langle \phi_i, A\phi_j) = (B\phi_i, \phi_j) = (\phi_j, B\phi_i)^* = B_{ji}^*$$

tj opravdu A^+ odpovídá hermit. sdruž. matice $a^+_{ji} = B_{ij}$

vlastnosti:
$$(cA)^+ = c^* A^+$$
$$(A+B)^+ = A^+ + B^+$$
$$(AB)^+ = B^+ A^+$$

DK viz cvičení

pozn: pro matice rovněž platí

vnější součin $|\psi\rangle\langle\phi|$ $\equiv$ operátor

def: $(|\psi\rangle\langle\phi|)|u\rangle \equiv (\langle\phi|u\rangle)\,|\psi\rangle$

$\langle\phi|u\rangle$ … $\mathbb{C}$-číslo

v Dirac. notaci
$$\begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_d \end{pmatrix} (f_1^* \cdots f_d^*) = \begin{pmatrix} c_1 f_1^* & \cdots & c_1 f_d^* \\ \vdots & & \\ c_d f_1^* & \cdots & c_d f_d^* \end{pmatrix}$$

pozn: výraz $|\psi\rangle\langle\phi|u\rangle = (|\psi\rangle\langle\phi|)|u\rangle = |\psi\rangle(\langle\phi|u\rangle)$

lze libovolně uzávorkovat (matic. násobení) $\to \Rightarrow$ def

asociativita

platí $\quad (|\psi\rangle\langle\phi|)^+ = |\phi\rangle\langle\psi|$

pozn: Rozvoj operátoru do baze lze psát

$$\hat{A} = \hat{I}\hat{A}\hat{I} = \sum_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i|\,\hat{A} \sum_j |\phi_j\rangle\langle\phi_j| = \sum_{ij} a_{ij} |\phi_i\rangle\langle\phi_j| = \sum_j |\tilde{\phi}_j\rangle\langle\phi_j|$$

$$\tilde{\phi}_j \equiv \hat{A}|\phi_j\rangle$$

přitom jsem užil tzv. rozklad jedničky $\hat{I} = \sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n|$ (relace úplnosti)

podobně lze odvozovat vyjádření jiných výrazů v bázi

např $\quad \langle\phi|\psi\rangle = \langle\phi|\hat{I}|\psi\rangle = \sum_n \underbrace{\langle\phi|\phi_n\rangle}_{f_n^*}\underbrace{\langle\phi_n|\psi\rangle}_{c_n} = \sum_n f_n^* c_n$

(ortogonální) projekční operátor:

$\hat{P}^2 = \hat{P}$ (Idempotence) .. tj $|b\rangle = P|a\rangle$ pak $P|b\rangle = |b\rangle$

$P = P^+$ (ortogonalita) .. tj $|f\rangle = P|\psi\rangle$ a $|\bar{f}\rangle = |\psi\rangle - |f\rangle = (I-P)|\psi\rangle$

pak $\langle\bar{f}|f\rangle = 0 \;>\; \langle\psi|(I-P^+)P|\psi\rangle = 0$

PŘ: $\hat{P} = |\phi\rangle\langle\phi| \leftarrow$ pokud $\langle\phi|\phi\rangle = 1$ .. nebo $P = \dfrac{1}{\langle\phi|\phi\rangle}|\phi\rangle\langle\phi|$ vždy

Samosdružené operátory — pozorovatelné

v kon. dim $A = A^+$ (prostě maticově) → Hermitovské operátory

v ∞ dim se tyto dva pojmy mohou lišit | tj $\langle\phi|A|\psi\rangle = \langle\psi|A|\phi\rangle^* \ \forall \psi, \phi$

Vlastní čísla a vektory

doporučení: zopakovat lin. algebru, podobnostní transf.; diagonalizace

$\hat{A}|\phi\rangle = \lambda|\phi\rangle$

$\langle\phi|\hat{A} = \lambda\langle\phi|$

hermit. matice

$|\hat{A} - \lambda\hat{I}| = 0$ charakteristický pol.

→ $\lambda \in \mathbb{R}$

→ levé a pravé vl. v. totožné

→ vl. v. pro $\lambda \neq \lambda'$ ortogonální

→ lze vybrat bázi z vlastních vektorů

obvyklá notace $\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$ … předp. normování $\langle a|a\rangle = 1$

nebo (degenerace ≡ netriv vlastní podprostor):

$$\hat{A}|a,k\rangle = a|a,k\rangle \qquad k = 1,\dots d_a \ ; \ \sum d_a = d$$

→ ON báze $\langle a,k|a',k'\rangle = \delta_{aa'}\delta_{kk'}$

platí: $\langle a,k|\hat{A}|a',k'\rangle = a\,\delta_{aa'}\delta_{kk'}$

→ spektrální rozklad $\hat{A} = \sum_a a \underbrace{\sum_k |a,k\rangle\langle a,k|}_{P_a} = \sum_a a\hat{P}_a$

projektor na vlastní podprostor $\hat{P}_a = \sum_k |a,k\rangle\langle a,k|$

(ověřte: $\hat{P}_a^2 = \hat{P}_a$; $\hat{P}_a^+ = \hat{P}_a$) nedegenerované spektrum → prostě $\hat{P}_a = |a\rangle\langle a|$

funkce operátoru: $f(\hat{A}) = \sum_a f(a)\hat{P}_a$

… zobecnění pro případ nekonverg. Taylorova rozvoje

pozn: • projektor .. Hermitovský

- vl. č. jen 0, 1 … $P|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle = P^2|\psi\rangle = \lambda^2|\psi\rangle \ \forall|\psi\rangle$; $\lambda^2 = \lambda$
- působí jako 0 na svém jádru, jinde jako $\hat{I}$
- je sám sobě spektrálním rozkladem
- $(I - P)$ je projektor na ortogonální doplněk

• relace $\hat{A} = \sum_{ak} |ak\rangle a \langle ak|$ je vlastně $\hat{A} = U\Lambda U^+$

kde U je matice přechodu k bázi z vl. v.