

Kvantová fyzika

Představení předmětu

Václav Potoček

17. 2. 2020

Ke kvantové fyzice lze přistupovat mnoha směry:

- od klasické fyziky,
- od funkcionální analýzy,
- od informatiky,
- od aplikací.

Ve třetím ročníku jste se seznámili s kvantovou teorií „*pro fyziky*“:

- s principem korespondence, přiřazujícím kvantově teoretické veličiny klasickým,
- s fyzikálně relevantními soustavami – potenciálovou jámou, harmonickým oscilátorem, atomem vodíku,
- s problémy interakce systémů, pozorováním veličin, ...
- se zvláštnostmi kvantové teorie, které nemají klasický protějšek.

Kvantovou teorii lze také vybudovat „*pro matematiky*“ jako rigorózní sadu axiomů, vět a důkazů a teprve později jeho závěry propojovat s reálným světem.

Kvantovou teorii lze také vybudovat „*pro matematiky*“ jako rigorózní sadu axiomů, vět a důkazů a teprve později jeho závěry propojovat s reálným světem.

V předmětu 02KFA chci volit střední cestu: představení kvantové teorie „*pro matematické fyziky*“.

Cíl předmětu: doplnit, jak jen bude praktické rigorózně, chybějící místa, která fyzika zanechala:

- přesné definice pojmů a znění postulátů,
- předpoklady tvrzení a důsledky jejich nedodržení,
- význam konkrétních detailů postulátů.

Podívejme se na typické řešení kvantově mechanické úlohy, s jakým se člověk setkává: nekonečná potenciálová jáma.

Podívejme se na typické řešení kvantově mechanické úlohy, s jakým se člověk setkává: nekonečná potenciálová jáma.

Ze „Slabikáře kvantové mechaniky“:

Problémů s definičními obory operátorů se v tomto textu dotkneme jen občas a nesystematicky. Nejnutnější základy jsou shrnuty v následující vsuvce. Matematicky založenější čtenáře opět odkazujeme např. na [1].

Cvičení 25 *Nalezněte vlastní hodnoty energie kvantové částice pohybující se v jednorozměrné konstantní "nekonečně hluboké potenciálové jámě", tj. v potenciálu $V(x) = 0$ pro $|x| < a$ a $V(x) = \infty$ pro $|x| > a$.*

Návod: Předpokládejte, že vlnové funkce jsou všude spojité a nulové pro $|x| \geq a$.

Příklad

Energie systému \rightarrow Hamiltonián

$$H : \psi(x) \mapsto -\frac{\hbar^2}{2M}\psi''(x) + V(x)\psi(x)$$

Potenciálová funkce nekonečné potenciálové jámy:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & -a < x < a, \\ \infty & \text{jinak.} \end{cases}$$

Rovnice pro vlastní stavy:

$$H\psi(x) = E\psi(x) \quad \dots \quad E = ?, \psi(x) = ?$$

$$\text{tj. } -\psi''(x) = \lambda\psi(x) \quad \text{na } x \in (-a, a).$$

Příklad

Diferenciální rovnici vyřešíme za předepsaných podmínek

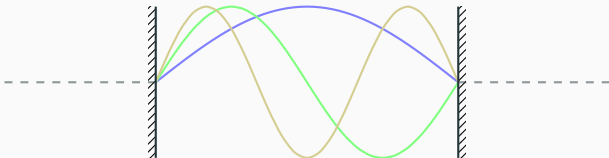
Návod: Předpokládejte, že vlnové funkce jsou všude spojité a nulové pro $|x| \geq a$.

jako

$$\psi(x) = A\chi_{(-a,a)}(x) \sin\left(m\frac{\pi}{2a}(x+a)\right), \quad m \in \mathbb{N}$$

$$-\psi''(x) = \left(\frac{\pi}{2a}\right)^2 m^2 \psi(x),$$

$$E \in \sigma(H) = \{E_0, 4E_0, 9E_0, \dots\}; \quad E_0 = \frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{\pi}{2a}\right)^2.$$



Zadání jsme splnili a výsledek dává smysl, ale silně závisí na „návodu“ hledat řešení ve spojitých funkcích.

Zadání jsme splnili a výsledek dává smysl, ale silně závisí na „návodu“ hledat řešení ve spojitých funkcích.

Vlnové funkce v kvantové mechanice jsou ovšem z podstaty L^2 funkce, tedy například následující funkce je zcela v pořádku:

$$\varphi(x) = \begin{cases} 1, & -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2}, \\ 0 & \text{jinak.} \end{cases}$$

Její derivace je 0 na intervalech $(-a, -a/2)$, $(-a/2, +a/2)$, $(a/2, a)$, tedy nula *skoro všude* – z hlediska L^2 platí $\varphi'(x) = 0$.

Zadání jsme splnili a výsledek dává smysl, ale silně závisí na „návodu“ hledat řešení ve spojitých funkcích.

Vlnové funkce v kvantové mechanice jsou ovšem z podstaty L^2 funkce, tedy například následující funkce je zcela v pořádku:

$$\varphi(x) = \begin{cases} 1, & -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2}, \\ 0 & \text{jinak.} \end{cases}$$

Její derivace je 0 na intervalech $(-a, -a/2)$, $(-a/2, +a/2)$, $(a/2, a)$, tedy nula *skoro všude* – z hlediska L^2 platí $\varphi'(x) = 0$.

Tedy triviálně i $-\varphi''(x) = 0$ a měli bychom nenulovou vlnovou funkci splňující rovnici $H\varphi = 0$, tedy vlastní funkci nulové energie!

Příklad

Co hůře, funkce

$$\varphi_\alpha(x) = \begin{cases} e^{\sqrt{-\alpha}x}, & -a < x < a, \\ 0 & x = -a \vee x = a, \end{cases}$$

skoro všude spojitá, dokáže splnit $-\varphi'' = \alpha\varphi$ pro *libovolné* $\alpha \in \mathbb{C}$ a stále v krajních bodech dosáhnout nuly.

Nevinně vyhlížející „návod“ je v tomto příkladě klíčovým prvkem zadání problému, bez kterého bychom dostali *nepravdivé* výsledky. Ale odkud se vzal?

Co hůře, funkce

$$\varphi_\alpha(x) = \begin{cases} e^{\sqrt{-\alpha}x}, & -a < x < a, \\ 0 & x = -a \vee x = a, \end{cases}$$

skoro všude spojitá, dokáže splnit $-\varphi'' = \alpha\varphi$ pro *libovolné* $\alpha \in \mathbb{C}$ a stále v krajních bodech dosáhnout nuly.

Nevinně vyhlížející „návod“ je v tomto příkladě klíčovým prvkem zadání problému, bez kterého bychom dostali *nepravdivé* výsledky. Ale odkud se vzal?

Z této poznámky:

Problémů s definičními obory operátorů se v tomto textu dotkneme jen občas a nesystematicky. Nejnutnější základy jsou shrnuty v následující vsuvce. Matematicky založenější čtenáře opět odkazujeme např. na [1].

Příklad

Co hůře, funkce

$$\varphi_\alpha(x) = \begin{cases} e^{\sqrt{-\alpha}x}, & -a < x < a, \\ 0 & x = -a \vee x = a, \end{cases}$$

skoro všude spojitá, dokáže splnit $-\varphi'' = \alpha\varphi$ pro libovolné $\alpha \in \mathbb{C}$ a stále v krajních bodech dosáhnout nuly.

Nevinně vyhlížející „návod“ je v tomto příkladě klíčovým prvkem zadání problému, bez kterého bychom dostali *nepravdivé* výsledky. Ale odkud se vzal?

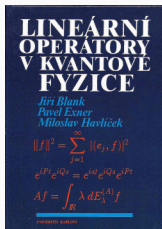
Z této poznámky:

Problémů s definičními obory operátorů se v tomto textu dotkneme jen občas a nesystematicky. Nejnutnější základy jsou shrnuty v následující vsuvce. Matematicky založenější čtenáře opět odkazujeme např. na [1].

V předmětu 02KFA se budeme věnovat právě tomuto „[1]“.

Hlavní literatura k přednášce:

M. Havlíček, P. Exner, J. Blank – *Lineární operátory v kvantové fyzice*
(Karolinum, Praha, 1993), vybrané části.



Pár dalších příkladů

Pár dalších nejasností, které pečlivější teorie zodpoví:

- Co znamená $\langle x|\psi\rangle$, $\langle p|\psi\rangle$, zejména v kontextu L^2 tříd funkcí?
- Proč dříve používané předpoklady řešení jsou zrovna takové?
 - Ve kterých případech by šly zeslabit, zesílit, vyměnit za jiné a s jakými důsledky?
 - Jak je stanovit u nové, neznámé úlohy?
- Co reprezentují zobecněné vlastní hodnoty a jejich zobecněné vlastní stavy? Jak je interpretovat, ne-li jako prvky stavového prostoru?
- Co způsobí kolaps vlnové funkce při měření spojitě veličiny, kdy vlastní stav by byl nefyzikální?

a více.

Struktura 4+2, na cvičeních budeme spíše předvádět řešené příklady.

Přednášky i cvičení v bezkontaktní výuce dobrovolné (záznamy se souhlasem účastníků k dispozici), v případě otevření kontaktní výuky budu na cvičeních očekávat účast a aktivitu.

Podmínka zápočtu v případě bezkontaktního konání semestru: písemně vypracovaný úkol většího rozsahu.

Předmět vychází z předchozí znalosti

- 02KVAN Kvantová mechanika,
- 02KVANM2 Kvantová mechanika 2,
- 01FAN1, 01FA2 Funkcionální analýza 1 a 2

a Funkcionální analýza 3 je výhodou (relevantní části však na aplikační úrovni doplníme).

Pokud někdo neabsolvoval, například přechodem z jiného zaměření, kontaktujte mne prosím na Teams.

Doplnění k funkcionální analýze:

- tenzorový součin prostorů a operátorů,
- Fourierův–Plancherelův operátor,
- Bochnerův integrál vektorových a operátorových funkcí,
- absolutní spojitost, Sobolevovy prostory,
- jaderné operátory (operátory se stopou),
- neomezené lineární operátory,
- projektorová míra, integrace podle ní, spektrální teorém,
- rozšíření spektrální teorie operátorů na Hilbertových prostorech,
- samosdružená rozšíření symetrických operátorů.

Fyzika:

- postuláty kvantové teorie,
- zobecněné měření v kvantové fyzice,
- spektrální vlastnosti základních operátorů,
- principiální rozdíl mezi symetrií a samosdružeností,
- fyzikální význam definičního oboru operátorů,
- úplné soubory komutujících operátorů vs. operátory s diskrétními a spojitými spektry,
- transformační grupy a jejich generátory,
- formalizace popisu soustav nerozlišitelných částic.

Tento předmět není myšlen jako

1. Rozšíření Funkcionální analýzy – spíše její využití.
Důkazy tvrzení pro nás nejsou centrální a většinou je ani uvádět nebudeme.
2. Náhrada úvodu do kvantové fyziky – předpokládám její znalost.
Nebudeme se ani učit počítat nové, exotické soustavy či interakce, spíše dělat, co dříve, ale správněji.
3. Jediný požadavek ke státnicovému předmětu stejného jména.
Většina otázek je ve skutečnosti z dřívější látky.