

První postulát kvantové fyziky

Bylo potřeba připravit základy v jaderných operátorech a obecně neomezených samosdružených operátorech, abychom mohli vyslovit a diskutovat znění prvního postulátu kvantové fyziky ve formě, v jaké jej budeme uvažovat.

Obecně platí, že u postulátů kvantové fyziky se můžete setkat s mnoha formulacemi zahrnujícími malé i větší rozdíly. I v povinné literatuře B–E–H je postupně diskutováno několik reformulací, či alternativ, pod stejnými označeními, což může být celkem matoucí. Přístup zvolený zde je pokusem o celkem širokou obecnost bez těchto mezikroků, umožněný tím, že s kvantovou fyzikou máte již značné zkušenosti a nepřekvapí vás.

Postulát 1 (o matematickém rámci).

- Každému kvantovému systému přísluší komplexní Hilbertův prostor \mathcal{H} , který nazýváme stavovým prostorem daného systému.
- Každému stavu systému odpovídá nějaký statistický operátor (matice hustoty) na stavovém prostoru.
- Každé pozorovatelné veličině daného systému odpovídá nějaký samosdružený operátor na \mathcal{H} .

V případě bodu a) se můžeme setkat i s omezenější formulací, kdy již samotný postulát vymezíme pouze na separabilní Hilbertovy prostory. Vzhledem k tomu, že fyzice taková změna nijak výrazně neublíží, v některých oblastech během semestru můžeme separabilitu pro zjednodušení předpokládat, ale zatím ponechme takto.

Statistické operátory

S pojmem *statistický operátor* jsme se nesetkali, ale jeho definice je s naší přípravou již jednoduchá: jedná se o *jaderný* operátor W , který je vymezen dvěma dalšími podmínkami, $W \geq 0$ a $\text{Tr } W = 1$. Díky našim znalostem o jaderných a jiných omezených operátorech můžeme hned několik jeho vlastností jmenovat:

- statistický operátor je hermitovský, a tedy normální,
- má nejvýše spočetně mnoho vlastních čísel, která jsou nezáporná a jdou seřadit se svými násobnostmi do nerostoucí posloupnosti,
- vlastní prostory jsou konečněrozměrné a vzájemně ortogonální,
- součet vlastních hodnot je jedna.

Dokážeme tedy každý statistický operátor psát ve formě

$$W = \sum_{n < n_0 \leq \omega} w_n E_n, \quad w_0 \geq w_1 \geq \dots > 0, \quad \sum_{n < n_0} w_n = 1, \quad (1)$$

kde projektory E_n jsou *jednorozměrné* a vzájemně ortogonální, jinými slovy, jedná se o nejvýše spočetnou afinní kombinaci jednorozměrných projektorů. I množina všech statistických operátorů je uzavřená vůči provádění dalších afinních kombinací, které nazveme *směšováním* stavů W . Posloupnost $(w_n)_{n < n_0}$ nic nebrání rozšířit na (potenciálně zobecněnou) posloupnost $(w_n)_{n < \dim \mathcal{H}}$ nulami, a tomuto kroku se nebudeme bránit, ale myšlenkou rozkladu (1) je, že *existuje* taková suma, která více než spočetně mnoho členů nevyžaduje.

Jednorozměrné projektory E mají mezi statistickými operátory zvláštní pozici v tom, že jsou samy svým rozkladem (1) s $n_0 = 1$, $w_0 = 1$, $E_0 = E$. Na množině statistických operátorů, která je díky uzavřenosti vůči afinním kombinacím konvexní, tvoří hranici, a nejdou napsat jako směs jiných dvou stavů. Z tohoto důvodu je nazýváme *čistými stavy* a všechny ostatní volby W stavy *smíšenými*.

Co možná z kurzu KVANO2, kde smíšené stavy byly zavedeny, nebylo patrné, je, že nikdy, ani na nespočetnědimenzionálním prostoru, není třeba uvažovat více než spočetné (především nepotřebujeme *spojité*) směsi. Rozklad (1) již sám o sobě není jednoznačný, pokud má W mimo své jádro degenerované vlastní prostory, a

k němu vlivem směřování různých stavů přibývá i alternativa s projektory, které nejsou vzájemně ortogonální, ale každá, libovolně získaná, směs, *nějaký* nejvýše spočetný rozklad tvaru (1) umožňuje.

Z vlastností statistického operátoru W lze najít ortonormální báze $(\varphi_n)_{n < \dim \mathcal{H}}$ splňující

$$W\varphi_n = w_n\varphi_n, \quad \forall n < \dim \mathcal{H}. \quad (2)$$

Operátor W je potom směsí čistých stavů daných projektory E_n na podprostory dané těmito vektory φ_n . Protože takových členů s nenulovým w_n je nejvýše spočetně mnoho, je výhodné ve většině situací zkoumat chování pro čisté stavy E_n samotné, a namísto projektorů je charakterizovat těmito jednotkovými *stavovými vektory* φ_n . Bez výjimky pro všechny statistické předpovědi kvantové mechaniky platí, že známe-li jejich hodnoty pro stavové vektory φ_n , pak dosazení smíšeného stavu W odpovídá zprůměrování těchto předpovědí s vahami danými w_n . To je důvodem, proč se v úvodních kurzech kvantové mechaniky postulát 1 běžně formuluje ve verzi, kde stavy systému jsou popsány paprsky v \mathcal{H} , i když se jedná o objektivně slabší formulaci. Upozorníme však na to, že další běžný výklad, kdy matematickým objektem přiřazeným fyzikálnímu stavu je jednotkový stavový vektor sám, již není pro formulaci postulátu vhodný, protože se nejedná o *jednoznačné* přiřazení.

Jestliže tedy řekneme „stav φ “, myslíme tím vždy „čistý stav popsaný projektorem E_φ na podprostor $\{\varphi\}_{\text{lin}}$ “.

V kvantové mechanice se běžně člověk setkává s potřebou počítat *překryv* stavových vektorů φ, ψ , definovaný jako $P(\varphi, \psi) := |\langle \varphi | \psi \rangle|^2$. V jazyce projektorů platí $P(\varphi, \psi) = \text{Tr}(E_\varphi E_\psi)$ a tento vzorec má přímočaré zobecnění na překryv dvou statistických operátorů W_1, W_2 jako

$$P(W_1, W_2) := \text{Tr}(W_1 W_2), \quad (3)$$

lineární v obou argumentech. Jedná se o hodnotu v intervalu $\langle 0, 1 \rangle$, ač součin dvou pozitivních operátorů si obecně pozitivitu nezachovává. Zvláštní případ

$$P(W, W) = \text{Tr } W^2 \in \langle 0, 1 \rangle \quad (4)$$

nazveme *čistotou* stavu W . Z definice je evidentní, že se jedná o součet druhých mocnin vah w_n a jedinou možností, jak dosáhnout horní meze 1, je čistý stav, smíšené stavy jsou tedy takové, které mají čistotu menší než 1. Další ekvivalentní kritérium čistého stavu je podmínka $W^2 = W$.

Samosdruženost

Význam bodu c) se projeví zejména s postulátem měření, který vyslovíme až později, opět po nějakých dalších matematických vsuvkách. Prozatím jej berme jako daný a podívejme se, jak ovlivní náš pohled na některé základní fyzikální systémy – například již volnou částici na přímce.

Popis volné bezspinové kvantové částice je určen volbou za stavového prostoru $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ a několika základních pozorovatelných – operátoru polohy, hybnosti a energie (Hamiltoniánu). Že se jedná skutečně o popis polohy v tom smyslu, že vlnovým funkcím přikládá význam hustoty pravděpodobnosti, bude plynout až ze druhého postulátu (měření), a energie v tom smyslu, že částice s daným Hamiltoniánem se chová jako volná, až ze třetího (časový vývoj), ale zatím se alespoň můžeme pobavit o tom, jak tyto jednoduché operátory zapadají do naší definice samosdruženosti.

Poloha

Operátor **polohy** je určen předpisem

$$Q: (L^2(\mathbb{R})) \rightarrow L^2(\mathbb{R}): \psi(x) \mapsto x\psi(x), \quad (5)$$

který, aby vůbec pravá strana dávala smysl jako vektor v $L^2(\mathbb{R})$, sám vymezuje *přirozený definiční obor*

$$D(Q) = \{\psi(x) \in L^2(\mathbb{R}) \mid x\psi(x) \in L^2(\mathbb{R})\}. \quad (6)$$

Ukážeme, že *na tomto oboru* se jedná o neomezený, ale samosdružený operátor.

Že se jedná o lineární operátor, o tom není sporu. Ovšem první nutnou podmínkou pro samosdruženost je hustá definovanost, tedy $D(Q) = \mathcal{H}$, a ta už není vidět na první pohled. Jedná se ovšem typicky o velmi rychlé ověření: často se povede ukázat, že součástí definičního oboru je nějaký jednoduchý prostor, o kterém už samotným víme, že je v \mathcal{H} hustý, a tedy hustotu zajistí už tato podmnožina $D(T)$. V případě operátoru Q postačí takto vzít Schwartzův prostor $\mathcal{S}(\mathbb{R})$, který je uzavřený vůči násobení jakýmkoli polynomem, tedy i x .

Podobně snadno se přesvědčíme o symetrii Q . To bychom v principu nemuseli, protože podmínka samosdruženosti je formulovaná podobně a šlo by k ní přistoupit rovnou, ale a) symetrie je na ověření jednodušší, b) pokud by nevyšla, nemá cenu pokračovat a ušetříme si práci a c) může se poštěstít, že některé získané poznatky použijeme znovu. Symetrie Q je dána podmínkou

$$\forall \varphi, \psi \in D(Q): (\varphi, Q\psi) \stackrel{?}{=} (Q\varphi, \psi), \quad (7)$$

tedy

$$\forall \varphi, \psi \in L^2(\mathbb{R}), x\varphi, x\psi \in L^2(\mathbb{R}): \int_{\mathbb{R}} \varphi(x)^* (x\psi(x)) dx \stackrel{?}{=} \int_{\mathbb{R}} (x\varphi(x))^* \psi(x) dx, \quad (8)$$

ovšem na pravé straně máme evidentně dvakrát stejný integrál.

Je tedy $D(Q) \subset D(Q^*)$ a pro samosdruženost zbývá dokázat, že $D(Q^*)$ neobsahuje žádné nové vektory, které již do $D(Q)$ nepatřily – jinými slovy, že každý vektor $\varphi \in L^2(\mathbb{R})$, který splňuje

$$\exists \eta \in L^2(\mathbb{R}): \forall \psi \in D(Q): (\eta, \psi) = (\varphi, Q\psi), \quad (9)$$

také splňuje podmínky (6) (a že potom $\eta = Q\varphi$, ale to je již jasné z $Q \subset Q^*$). **Toto je nový krok** ve výpočtu, bez kterého by tvrdit samosdruženost Q nebylo oprávněné.

Jak se o této skutečnosti přesvědčit? Rozepišme

$$(\eta, \psi) - (\varphi, Q\psi) = \int_{\mathbb{R}} \eta(x)^* \psi(x) dx - \int_{\mathbb{R}} \varphi(x)^* x\psi(x) dx = \int_{\mathbb{R}} (\eta(x) - x\varphi(x))^* \psi(x) dx \stackrel{!}{=} 0 \quad \forall \psi \in D(Q) \quad (10)$$

a na základě hustoty $D(Q)$ v \mathcal{H} by se chtělo říci, že $(\eta(x) - x\varphi(x))$ je nutně nulovým vektorem v $L^2(\mathbb{R})$, pro $\varphi \in D(Q)$ že zvolíme $\eta = Q\varphi$ a pro jiná φ nebude existovat $\eta \in L^2(\mathbb{R})$, aby se $x\varphi(x)$ rovnalo. Dopouštíme se ovšem potenciální chyby, že rovnost (10) by mohla být splněna s nějakou funkcí $\eta(x) - x\varphi(x)$, která sama $L^2(\mathbb{R})$ není, pouze má náhodou nulový integrál v součinu s libovolným ψ , což musíme vyloučit!

Jestliže dokážeme, že $\eta(x) - x\varphi(x) \in L^2(\mathbb{R})$, pak předchozí argument již lze použít a důkaz dokončit. Pokud (10) platí pro všechna $\psi \in D(Q)$, zvolme speciálně $\psi := \psi_0 \chi_{(-n,n)}$ pro nějaké pevné ψ_0 a $n \in \mathbb{N}$. Výsledek tohoto součinu neopustí $D(Q)$, protože stále je prvkem $L^2(\mathbb{R})$ a jeho x -násobek rovněž – mimo interval $(-n, n)$ násobíme nulu a uvnitř něj hodnoty $|x|$ jsou shora omezeny n . Proto

$$\forall \psi_0 \in L^2(\mathbb{R}): \forall n \in \mathbb{N}: \int_{\mathbb{R}} (\eta(x) - x\varphi(x))^* \chi_{(-n,n)}(x) \psi_0(x) dx = \int_{\mathbb{R}} (\chi_{(-n,n)}(x) (\eta(x) - x\varphi(x)))^* \psi_0(x) dx = 0 \quad (11)$$

Funkce $\chi_{(-n,n)}(x)(\eta(x) - x\varphi(x))$ ovšem $L^2(\mathbb{R})$ integrabilní již je určitě: je rozdílem $\chi_{(-n,n)}\eta$, což je díky (9), a součinu $\varphi \in L^2(\mathbb{R})$ s omezenou funkcí $\chi_{(-n,n)}(x)x$. O této funkci tedy již můžeme tvrdit, že je nulová v $L^2(\mathbb{R})$, a proto $\eta(x) - x\varphi(x)$ je nula skoro všude na $(-n, n)$. Nakonec sjednocením všech n se skutečně dozvídáme, že je nula skoro všude na \mathbb{R} , takže $\eta(x) - x\varphi(x) = 0$ v $L^2(\mathbb{R})$, což byl poslední zbývajících element odvození.

Hybnost

Předchozí je jen jedna ukázka toho, co vskutku ověření samosdruženosti může obnášet, a ne vždy sleduje stejné triky. Srovnáme v následujícím s ověřením samosdruženosti operátoru **hybnosti**, který známe daný pouze svým předpisem

$$P: (L^2(\mathbb{R})) \rightarrow L^2(\mathbb{R}): \psi(x) \mapsto -i\hbar\psi'(x). \quad (12)$$

Konstanta \hbar má pouze rozměrový charakter a pro naše účely budeme operátor zkoumat bez ní, tedy $-i\psi'(x)$. Definiční obor není zadán, zkusme tedy uvažovat přirozený definiční obor

$$D_0 = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}) \mid \psi' \in L^2(\mathbb{R})\}. \quad (13)$$

Do D_0 opět patří $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ jako podmnožina, takže s hustou definovaností není problém. Dalším krokem je symetrie. Necht' $\varphi, \psi \in D_0$, zkusme

$$(P\varphi, \psi) \stackrel{?}{=} (\varphi, P\psi) \quad (14)$$

$$\int_{\mathbb{R}} (-i\varphi'(x))^* \psi(x) dx \stackrel{?}{=} \int_{\mathbb{R}} \varphi(x)^* (-i\psi'(x)) dx$$

Můžeme toto říci? Narážíme na problém zmíněný na úvodní hodině: volbou funkce $\varphi(x)$ skokové, jejíž derivace je v $L^2(\mathbb{R})$ nulová, můžeme dosáhnout toho, že první integrál je nulový, zatímco druhý má zcela libovolnou hodnotu. Derivační operátor s přirozeným definičním oborem (13) tedy není symetrický!

Bude potřeba obor D_0 okrájet, aby takovéto sporné funkce neobsahoval. Přesně za tímto účelem jsme si zavedli absolutní spojitost. Upravme tedy definiční obor výrazu (12) na funkce, které kromě podmínek (13) vyžadují ještě tuto vlastnost. Taková množina je Sobolevovým prostorem $H^1(\mathbb{R})$. Hustou podmnožinu $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ obsahuje nadále.

S podmínkou absolutní spojitosti φ, ψ je integrand v

$$(P\varphi, \psi) - (\varphi, P\psi) = i \int_{\mathbb{R}} (\varphi'(x)^* \psi(x) + \varphi(x)^* \psi'(x)) dx \quad (15)$$

derivací absolutně spojitě funkce $\varphi(x)^* \psi(x)$ a jeho integrálem je tedy

$$\int_{\mathbb{R}} (\varphi'(x)^* \psi(x) + \varphi(x)^* \psi'(x)) dx = [\varphi(x)^* \psi(x)]_{-\infty}^{+\infty} =: \lim_{x \rightarrow +\infty} \varphi(x)^* \psi(x) - \lim_{x \rightarrow -\infty} \varphi(x)^* \psi(x). \quad (16)$$

To je podle našich vědomostí o absolutní spojitosti již nula a situace symetrie je zachráněna.

Ukážeme, že volba definičního oboru $D(P) = H^1(\mathbb{R})$ zajišťuje vskutku i samosdruženost takového operátoru P . Důkaz zahrnuje nějaké podobné myšlenky jako v případě Q , ale upozorníme na to, že nelze začít stejným způsobem, tj. hledat, jestli $\eta - (-i\varphi') \in L^2(\mathbb{R})$. Důvodem je, že k získání takové podmínky bychom potřebovali integraci per partes, a tím využívali absolutní spojitosti funkce φ , kterou teprve máme dokazovat!

Jednou ze společných myšlenek je vymezení se na kompaktní intervaly $K = \langle a, b \rangle \subset \mathbb{R}$ a ukázání patřičných vlastností funkcí $\varphi \in D(P^*)$ na nich, poté rozšíření na celé \mathbb{R} . K tomu ale dospějeme jiným trikem než zúžením funkcí ψ na K , protože takové funkce by v krajních bodech měly skoky a opustily $D(P)$.

Z tohoto důvodu vyrobíme *další zúžení* operátoru P na $\dot{P} \subset P$, vymezený definičním oborem

$$D(\dot{P}) := \{\psi \in H^1(\mathbb{R}) \mid \text{supp } \psi \text{ je kompaktní}\} = H^1(\mathbb{R}) \cap C_c(\mathbb{R}), \quad (17)$$

který je stále v \mathcal{H} hustý. O něm již netvrdíme samosdruženost. Použijeme ale zajímavý argument, kdy ukážeme, že P je sdruženým operátorem \dot{P} . Protože \dot{P} si zachovává symetrii a naše P je symetrickým rozšířením tohoto pomocného operátoru, platí

$$\dot{P} \subset P \subset P^* \subset (\dot{P})^*, \quad (18)$$

ovšem tím, že v této řadě inkluzí dáme rovnost mezi druhý a čtvrtý člen, již vyplyne $P = P^*$.

Plánem práce tedy je ukázat, že $(\dot{P})^* = P$, což znamená:

$$\varphi \in L^2(\mathbb{R}) \wedge \exists \eta \in L^2(\mathbb{R}) : \forall \psi \in D(\dot{P}) : (\eta, \psi) = (\varphi, \dot{P}\psi) \implies \varphi \in D(P), \eta = P\varphi. \quad (19)$$

Tím dokážeme $\dot{P}^* \subset P$, druhá inkluze je již řečena v (18). Zvolíme postup příkladu 7.2.7 (kde je udělán obecněji pro interval $J \subset \mathbb{R}$, což budeme držet na paměti).

Integrál $(\varphi, \dot{P}\psi)$, vystupující v (19), *pořád* nemůžeme transformovat pomocí per partes, přistoupíme tedy k problému z druhé strany a per partes použijeme na (η, ψ) , kde ψ derivovat můžeme a η bychom potřebovali integrovat. Z předpokladu je $\eta \in L^2(\mathbb{R}) \subset L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R})$, takže na kompaktním intervalu K skutečně integrovat lze jako

$$\bar{\varphi}_K(x) := \int_a^x i\eta(t) dt + c, \quad c \in \mathbb{C}. \quad (20)$$

Jakožto integrál L^1_{loc} -funkce na kompaktu je $\bar{\varphi}_K$ absolutně spojitě, omezené, odsud L^2 -integrabilní, a splňuje $-i\bar{\varphi}'_K = \eta$. Má tedy všechny předpoklady náležitosti do $H^1(K) = D(P)$, což jsou vlastnosti, které bychom rádi

ukázali i o φ . Cílem bude ukázat, že $\bar{\varphi}_K$ se na K shoduje s φ a významem c potom bude $\varphi(a)$, ale na to je ještě brzy.

Volme nyní $\psi_K \in D(\dot{P})$ takové, že $\text{supp } \psi_K \subset K$. Z (19) se dozvídáme

$$(\eta, \psi_K) = (\varphi, \dot{P}\psi_K) = (\varphi, -i\psi'_K) = -i \int_{\mathbb{R}} \varphi(x)^* \psi'_K(x) dx = -i \int_K \varphi(x)^* \psi'_K(x) dx = (\varphi_K, \dot{P}\psi_K), \quad (21)$$

kde jsme si pracovníě označili $\varphi_K := \varphi \chi_K$, a zároveň platí

$$\begin{aligned} (\bar{\varphi}_K, \dot{P}\psi_K) &= -i \int_K \bar{\varphi}_K(x)^* \psi'_K(x) dx = -i[\varphi_K(x)^* \psi_K(x)]_a^b + i \int_K \bar{\varphi}'_K(x)^* \psi_K(x) dx = 0 + \int_K (-i\bar{\varphi}'_K(x))^* \psi_K(x) dx \\ &= (\eta, \psi_K). \end{aligned} \quad (22)$$

Protože máme dvě vyjádření pro stejné (η, ψ_K) , můžeme psát

$$\forall \psi_K \in D(\dot{P}), \text{supp } \psi_K \subset K: (\bar{\varphi}_K - \varphi_K, \dot{P}\psi_K) = 0. \quad (23)$$

Jak se přesvědčit, že odsud již plyne $\bar{\varphi}_K = \varphi_K$? Rozdíl $\bar{\varphi}_K - \varphi_K$ integrujeme *ještě jednou* a dostaneme funkci

$$\bar{\psi}_K(x) := \int_a^x i(\bar{\varphi}_K(t) - \varphi_K(t)) dt \quad (24)$$

patřící také do $H^1(K)$, navíc správnou volbou konstanty c (přispívající k integrálu členem $c(x-a)$) zajistíme, aby v obou krajních bodech a, b platilo $\bar{\psi}_K(x) = 0$ a tedy $\bar{\psi}_K(x)$ šla rozšířit na spojitou funkci na \mathbb{R} . Tím splňuje všechny náležitosti pro vektor ψ_K , který jsme používali v (23). Ovšem

$$\dot{P}\bar{\psi}_K = -i\bar{\psi}_K = \bar{\varphi}_K - \varphi_K \quad (25)$$

a vztah (23) pak říká, že $(\bar{\varphi}_K - \varphi_K, \bar{\varphi}_K - \varphi_K) = 0$ a tedy $\bar{\varphi}_K - \varphi_K = 0$ skoro všude na \mathbb{R} .

Ať jsme začali s jakýmkoli K , dozvídáme se, že funkce φ_K , tedy φ zúžená na K , je skoro všude rovna funkci $\bar{\varphi}_K$, která je absolutně spojitá, a její $-i \times$ derivací na intervalu K je $\eta(x)$. Absolutní spojitost tedy platí i pro celé φ a $-i\varphi' = \eta \in L^2(\mathbb{R})$. Funkce φ splňující předpoklad (19) tedy patří do $L^2(\mathbb{R})$, je absolutně spojitá a má v $L^2(\mathbb{R})$ derivaci, což jsou přesně podmínky pro $\varphi \in D(P)$, a $P\varphi = \eta$.

Jak jsme argumentovali před začátkem výpočtu, co jsme právě ukázali, je, že P je sdruženým operátorem \dot{P} . Rovnost $P = P^*$ pak plyne z řetězce inkluzí (18).