

Třetí postulát kvantové fyziky

Pro vyslovení třetího postulátu potřebujeme tentokrát doplnit jen jednu rychlou definici.

Definice. Operátorovou funkci $U: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathcal{U}(\mathcal{H})$ nazveme **unitárním propagátorem**, splňuje-li

$$\forall r, s, t \in \mathbb{R}: U(t, s)U(s, r) = U(t, r) \quad (1)$$

a je-li v obou parametrech silně spojitá.

Postulát 3 (o časovém vývoji).

- a) Časový vývoj *uzavřeného* kvantového systému je popsán unitárním propagátorem: existuje takové $U(t, s)$, že pro všechna t, s je

$$W_t = U(t, s)W_s U(t, s)^{-1}, \quad \text{resp.} \quad \psi_t = U(t, s)\psi_s \text{ (pro čistý stav)}. \quad (2)$$

- b) Propagátor *konzervativního* systému $U(t, s)$ splňuje $\forall t, s, \tau \in \mathbb{R}: U(t + \tau, s + \tau) = U(t, s)U(\tau, 0)$ a je určen pozorovatelnou energie – Hamiltoniánem jako

$$U(t, s) = e^{-i(t-s)H}. \quad (3)$$

- c) Časový vývoj systému s časově závislým Hamiltoniánem je pro smíšené, resp. čisté stavy určen rovnicemi

$$\begin{aligned} i \frac{d}{dt}(W_t \psi) &= (H(t)W_t - W_t H(t))\psi, \\ i \frac{d}{dt}\psi &= H(t)\psi. \end{aligned} \quad (4)$$

Všechny tři části postulátu spolu souvisejí. Část a) je univerzálně platná, ale neurčuje žádnou spojitost s fyzikou. Část b) ukazuje, jak může propagátor být jednoduše vyjádřen pomocí operátoru energie, ale funguje jen pro konzervativní systémy. Část c) nakonec zobecňuje Schrödingerovu rovnici, která plyne z b), i na systémy ne-konzervativní. Toto pochopitelně otevírá několik otázek o vzájemné konzistenci požadavků, kterou dnes a zítra prozkoumáme.

Stoneův teorém

Nejprve prozkoumáme, jak souvisí části a) a b). Dodatečná podmínka na propagátor $U(t + \tau, s + \tau) = U(t, s)U(\tau, 0)$ vyjadřuje nezávislost časového vývoje fyzikální soustavy na volbě počátku časové reference, což je jednoduše definice konzervativity. Unitární propagátor je tak plně předepsán jednodušším zobrazením $U: \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{U}(\mathcal{H})$ jako $U(t, s) = U(t - s)$ (použití stejného symbolu U typicky nepůsobí žádné zmatení), které má vlastnosti **silně spojitě jednoparametrické grupy unitárních operátorů**, či jednodušeji silně spojitě jednoparametrické unitární grupy (v tomto textu budeme zkráceně psát SSUG).

Požadavek silné spojitosti je při vyjádření b) motivován tím, že podle pravidel funkcionálního počtu z *bodové* spojitosti funkcí e^{-itx} v parametru t plyne *silná* spojitost e^{-itH} z hlediska stejného parametru. Ukážeme, že je i postačující podmínkou k opačnému závěru. Pro tento účel prozkoumáme hlavní vlastnosti silně SSUG.

Z grupové vlastnosti $U(t + s) = U(t)U(s)$ a z podmínek unitarity okamžitě plynou následující vlastnosti:

- libovolné dva prvky SSUG komutují,
- $U(0) = I$,
- $U(-t) = U(t)^{-1} = U(t)^*$.

Pro pevné $\psi \in \mathcal{H}$ dále zkoumejme vektorovou funkci $f : t \mapsto U(t)\psi$. Ze silné spojitosti plyne, že pro $t \rightarrow 0$ konverguje $f(t)$ k ψ , přičemž může a nemusí konvergovat také derivace v nule, definovaná limitou

$$f'(0) = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(t) - f(0)}{t} = \lim_{t \rightarrow 0} \left(\frac{U(t) - I}{t} \psi \right). \quad (5)$$

Sestavíme množinu D všech takových ψ . Linearita vystupujících zobrazení implikuje, že se jedná o podprostor \mathcal{H} , a že

$$T : D \rightarrow \mathcal{H} : \psi \mapsto \lim_{t \rightarrow 0} \left(\frac{U(t) - I}{it} \psi \right) \quad (6)$$

tedy předepisuje nějaký lineární operátor. Takto definované T nazveme **generátorem** SSUG $U(t)$.

Poznámky: Jakmile $\psi \in D$, patří do D také $U(s)\psi$ pro každé s a operátor T s $U(s)$ komutuje. Obojí plyne z následujícího rozpisu:

$$TU(s)\psi = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{U(t)U(s)\psi - U(s)\psi}{it} = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{U(s)(U(t)\psi - \psi)}{it} = U(s) \lim_{t \rightarrow 0} \frac{U(t)\psi - \psi}{it} = U(s)T\psi. \quad (7)$$

Věta (11.1.1). Jestliže $A \in \mathcal{L}_{sa}(\mathcal{H})$, pak $U : t \mapsto e^{itA}$ je SSUG a A je její generátor.

Důkaz. Všechny podmínky SSUG plynou z pravidel funkcionálního počtu, o silné spojitosti jsme v této souvislosti mluvili již výše a ostatní jsou podobně přímočarými důsledky. Přesvědčme se tedy o druhé části tvrzení. Označme T generátor $U(t)$.

Nechť $\psi \in D(A)$. Limitu na pravé straně (6) můžeme pro $U(t) = e^{itA}$ ekvivalentně vyjádřit pomocí funkce operátoru A jako

$$\lim_{t \rightarrow 0} f_t(A)\psi, \quad f_t(x) = (e^{itx} - 1)/(it). \quad (8)$$

Funkce f_t je pro $t \neq 0$ omezená a spojitá, což jsou postačující podmínky i pro $f_t \in L^\infty(\mathbb{R}, dE_H)$. Dále funkce $x \mapsto x$ patří do $L^2(\mathbb{R}, dE_H)$. Vyjádříme

$$\|(f_t(A) - A)\psi\|^2 = \int_{\mathbb{R}} |f_t(x) - x|^2 d\mu_\psi^{(A)}. \quad (9)$$

V integrandu na pravé straně vystupuje funkce shora omezená funkcí $(2|x|)^2$, která je podle $d\mu_\psi^{(A)}$ pro $\psi \in D(A)$ L^1 -integrabilní a tvoří tak integrabilní majorantu potřebnou pro převedení na integrál limitní funkce. Ovšem

$$\forall x \in \mathbb{R} : \lim_{t \rightarrow 0} f_t(x) = x \quad (10)$$

a tedy

$$\lim_{t \rightarrow 0} \|(f_t(A) - A)\psi\|^2 = 0, \quad \lim_{t \rightarrow 0} f_t(A)\psi = A\psi. \quad (11)$$

Odsud také $\psi \in D(T)$ a $T\psi = A\psi$.

Nechť naopak $\psi \in D(T)$. Limita $\lim_{t \rightarrow 0} f_t(A)\psi$ tedy existuje a je rovna $T\psi =: \varphi$. Stejný výsledek platí pro normy:

$$\forall \varepsilon > 0 : \exists \delta > 0 : \forall t \in \mathbb{R}, |t| < \delta : \|f_t(A)\psi\| - \|\varphi\| < \varepsilon \quad (12)$$

Za ε zvolíme libovolně. Pro $|t| < \delta$ je

$$\begin{aligned} \|f_t(A)\psi\|^2 &< (\|\varphi\| + \varepsilon)^2, \\ \int_{\mathbb{R}} |f_t(x)|^2 d\mu_\psi^{(A)}(x) &< (\|\varphi\| + \varepsilon)^2. \end{aligned} \quad (13)$$

Protože na levé straně jedná o integrály nezáporných funkcí, můžeme použít Fatouovo lemma. Podle něj můžeme integrovat $\liminf_{t \rightarrow 0} |f_t(x)|^2 = \lim_{t \rightarrow 0} |f_t(x)|^2 = x^2$ a integrál bude shora omezen $\liminf_{t \rightarrow 0}$ integrálů, ale protože všechny sdílejí (alespoň na δ -okolí nuly) stejnou horní mez, je tento výraz konečný. Rovnice

$$\int_{\mathbb{R}} x^2 d\mu_\psi^{(A)}(x) < \infty \quad (14)$$

je však předpisem pro náležitost ψ do $D(A)$. Spolu s předchozím výsledkem již $A = T$. \square

Neméně důležitá je věta, která ukazuje opačný směr, ale kterou již ponecháme bez důkazu.

Věta (Stone, 11.1.2). Ke každé SSUG $U : \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{U}(\mathcal{H})$ existuje právě jeden samosdružený operátor A takový, že $\forall t \in \mathbb{R} : U(t) = e^{itA}$.

Toto pro **konzervativní** systémy opravňuje současnou platnost částí a) a b) postulátu: splňuje-li propagátor $U(t, s)$ podmínku invariance vůči časovému posunu, pak $t \mapsto U(t, 0)$ tvoří SSUG, ke které nalezneme generátor a podle Stoneovy věty je samosdruženým operátorem. Část b) potom říká, že tímto operátorem musí být (záporně vzatý) Hamiltonián. Naopak, vyjdeme-li z rovnice (3), první věta říká, že $U(s + \tau, s)$ je SSUG z hlediska parametru τ , z čehož snadno odvodíme, že splňuje (1).

Poznámka: Pro *hermitovský* operátor A je operátorová funkce $U(t) = e^{itA}$ *stejněměrně* spojitá. Naopak generátorem stejnoměrně spojitě jednoparametrické unitární grupy je omezený operátor, protože limitu $(U(t) - I)/(it)$ lze provést v operátorové normě. Platí tedy analogie obou tvrzení za těchto úprav předpokladů i závěrů. Ovšem v kvantové fyzice Hamiltoniány běžně omezené nejsou.

Schrödingerova rovnice

Třetí část postulátu je ještě zcela jiné formy než první dvě a mluví o vývoji stavu jako o diferenciální rovnici. Podíváme se nejprve, jak rovnice tohoto tvaru vznikne z (2) v případě konzervativního systému, o kterém již máme dodatečnou informaci poskytnutou částí b).

Věta. Nechť $H \in \mathcal{L}_{sa}(\mathcal{H})$ je Hamiltonián konzervativního systému, nechť pro některé $s \in \mathbb{R}$ je $\psi_s \in D(H)$. Pak funkce $\mathbb{R} \rightarrow \mathcal{H} : t \mapsto \psi_t$, předepsaná (2), splňuje $\forall t \in \mathbb{R} : \psi_t \in D(H)$, je diferencovatelná a pro její derivaci platí

$$i \frac{d\psi_t}{dt} = H\psi_t. \quad (15)$$

Důkaz. Pro $\psi \in D(H)$ máme $\forall t \in \mathbb{R} : U(t)\psi \in D(H)$ v důsledku skutečnosti, že $U(t)$, jakožto funkce H , komutuje s H současně jako omezený operátor:

$$U(t-s)H \subset HU(t-s), \quad \psi_s \in D(H) \Rightarrow \psi_t = U(t-s)\psi_s \in D(H). \quad (16)$$

Derivaci na levé straně (15) lze psát jako

$$i \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\psi_{t+\tau} - \psi_t}{\tau} = i \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{U(\tau+t-s)\psi_s - U(t-s)\psi_s}{\tau} = -U(t-s) \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{U(\tau)\psi_s - \psi_s}{i\tau} \quad (17)$$

Ovšem na pravé straně rozeznáváme definiční vztah pro generátor $U(t)$ působící na $\psi_s \in D(H)$. Protože generátorem je $-H$, existence limity je podmínkou $\psi_s \in D(H)$ zaručena a hodnota pravé strany rovnice je $U(t-s)H\psi_s = HU(t-s)\psi_s = H\psi_t$. \square

Věta (17.1.1). Nechť W_s je statistický operátor vystupující v (2) a H Hamiltonián uzavřeného systému. Platí-li $W_s D(H) \subset D(H)$, pak pro všechna $\psi \in D(H)$ je funkce $\mathbb{R} \rightarrow \mathcal{H} : t \mapsto W_t \psi$ diferencovatelná a splňuje rovnici

$$i \frac{d}{dt} W_t \psi = (H W_t - W_t H) \psi. \quad (18)$$

Důkaz. Ze vztahu $U(t)D(H) \subset D(H)$ odvodíme

$$W_t D(H) = U(t-s)W_s U(s-t)D(H) \stackrel{(16)}{\subset} U(t-s)W_s D(H) \stackrel{\text{předp.}}{\subset} U(t-s)D(H) \stackrel{(16)}{\subset} D(H), \quad (19)$$

takže vlastnost $W_t D(H) \subset D(H)$ se také, podobně jako v minulé větě $\psi_t \in D(H)$, přenáší z s na všechna $t \in \mathbb{R}$, což dává smysl pravé straně (18). Pro levou stranu potom

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{W_{t+\tau} - W_t}{\tau} \psi = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{U(\tau)W_t U(-\tau) - W_t}{\tau} \psi = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{U(\tau)W_t U(-\tau) - U(\tau)W_t + U(\tau)W_t - W_t}{\tau} \psi \quad (20)$$

Po poslední úpravě lze limitu rozdělit na dvě části, které zvlášť konvergují k $iW_t H \psi$ a $-iH W_t \psi$. \square

Všimněme si obzvlášť, že rovnice (19) je formulována v „silném“ smyslu, akcí na vektor ψ . Důvodem je, že operátor vystupující na její pravé straně zpravidla není omezený. Takový by nemohl být limitou omezených operátorů ve stejnoměrné topologii, a tedy ani derivací.

Nyní je evidentní, že část c) postulátu je formulována jako zobecnění těchto dvou závěrů, platných pro konzervativní systémy, náhradou operátoru H za operátorovou funkci $H(t)$. Tam ale záruky, které dávají konzervativní systémy, končí. Zatímco pro konzervativní systém je Schrödingerova rovnice ekvivalentní formulaci (3) (protože $e^{-i(t-s)H}\psi_s$ je jejím řešením na $D(H)$ a odsud spojitě rozšíříme), která je části a) ekvivalentní a jen dodává význam generátoru časového vývoje, v části c) se může ledacos pokazit:

- vektor ψ_s , který byl v $D(H(s))$, se může vyvinout na $\psi_t \notin D(H(t))$,
- množina počátečních vektorů, pro které Schrödingerova rovnice má řešení na daném intervalu, nemusí být hustá (a určovat tak propagátor jednoznačně), a pokud je, není zaručeno, že vývojový operátor má vlastnosti propagátoru,
- naopak, derivací akce propagátoru na ψ nemusíme dostat samosdružený operátor.

Je tedy třeba brát části a) a c) tak, že se vzájemně doplňují. O vývoji nekonzervativního systému tak třetí postulát požaduje, aby byl jednak unitární, ale k tomu ještě určený Schrödingerovou rovnicí. O některých situacích, kdy z časově závislého Hamiltoniánu můžeme unitární propagátor s jistotou sestavit, se pobavíme na příští hodině.