Posunovací operátory, předpovědi výsledků měření

Martin Štefaňák

27. října 2020

Přehled

Posunovací operátory

- Užitečný nástroj pro práci s pozorovatelnými s ekvidistantním spektrem a jejich vlastními vektory

Definice

$\hat{A}$ je posunovací operátor k $\hat{B}$ s posunutím $\Delta \Longleftrightarrow \left[\hat{B},\hat{A}\right] = \Delta\hat{A}$

- $\hat{A}$ zobrazuje vl. vektory $\hat{B}$ na vl. vektory $\hat{B}$ (nebo 0)

$$\hat{B}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle, \quad \hat{A}|\psi\rangle \neq 0 \Longrightarrow \hat{B}(\hat{A}|\psi\rangle) = (\lambda+\Delta)\hat{A}|\psi\rangle$$

- $\hat{A}$ je posunovací k $\hat{B}$ s $\Delta \Longrightarrow \hat{A}^\dagger$ je posunovací k $\hat{B}^\dagger$ s $-\overline{\Delta}$

$\hat{B}$ je pozorovatelná

$\hat{B} = \hat{B}^\dagger \Longrightarrow \Delta \in \mathbb{R}$, $\hat{A}$ je posunovací s Δ, $\hat{A}^\dagger$ je posunovací s $-\Delta$

Přehled

1. Posunovací operátory pro harmonický oscilátor
2. Posunovací operátory pro moment hybnosti
3. Předpovědi výsledků měření

Posunovací operátory pro hamiltonián LHO

- Hamiltonián LHO, spektrum a vlastní vektory

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2M} + \frac{1}{2}M\omega^2\hat{Q}^2, \quad \hat{H}|n\rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega|n\rangle, \quad n \in \mathbb{Z}_+$$

- Má ekvidistantní spektrum — $\Delta E = E_{n+1} - E_n = \hbar\omega$
- Komutační relace pro polohu a hybnost — $\left[\hat{Q}, \hat{P}\right] = i\hbar$
- Posunovací operátory lze zvolit ve tvaru

$$\hat{a}_\pm = C\left(\hat{Q} \mp \frac{i}{M\omega}\hat{P}\right) \implies \left[\hat{H}, \hat{a}_\pm\right] = \pm\hbar\omega\hat{a}_\pm$$

- Volba C — komutátor $\hat{a}_\pm$

$$[\hat{a}_-, \hat{a}_+] \stackrel{!}{=} 1 \implies C = \sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}}$$

Kreační a anihilační operátor

$$\hat{a}_\pm = \sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}}\left(\hat{Q} \mp \frac{i}{M\omega}\hat{P}\right), \quad \left[\hat{H}, \hat{a}_\pm\right] = \pm\hbar\omega\hat{a}_\pm, \quad [\hat{a}_-, \hat{a}_+] = 1$$

- Působení na vlastní vektory hamiltoniánu

$$\hat{a}_\pm|n\rangle = \alpha_n^\pm|n \pm 1\rangle, \quad \alpha_n^+ = \sqrt{n+1}, \quad \alpha_n^- = \sqrt{n}$$

- $\hat{a}_- \equiv \hat{a}$ — anihilační operátor — ubere jedno kvantum energie
- $\hat{a}_+ \equiv \hat{a}^\dagger$ — kreační operátor — přidá jedno kvantum energie
- $\hat{a}_+\hat{a}_- \equiv \hat{a}^\dagger\hat{a}$ — operátor počtu kvant

$$\hat{a}_+\hat{a}_-|n\rangle = \sqrt{n}\hat{a}_+|n-1\rangle = n|n\rangle$$

Maticová reprezentace posunovacích operátorů

- Maticové elementy $\hat{a}_\pm$

$$\langle n|\hat{a}_\pm|m\rangle = \alpha_m^\pm \,\delta_{n,m\pm 1}$$

- Maticová reprezentace $\hat{a}_-$ v bázi $\{|n\rangle\}$

$$a_- = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \ldots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \ldots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ldots \end{pmatrix}$$

- Maticová reprezentace $\hat{a}_+$ — hermitovské sdružení

$$a_+ = a_-^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \ldots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \ldots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \ldots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ldots \end{pmatrix}$$

Poloha pomocí posunovacích operátorů

$$\hat{Q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega}}\,(\hat{a}_+ + \hat{a}_-)$$

- Maticové elementy

$$\langle n|\hat{Q}|m\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega}}(\alpha_m^+\,\delta_{n,m+1} + \alpha_m^-\,\delta_{n,m-1})$$

- Maticová reprezentace $\hat{Q}$ v bázi $\{|n\rangle\}$

$$Q = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega}}\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \dots \end{pmatrix}$$

Hybnost pomocí posunovacích operátorů

$$\hat{P} = i\sqrt{\frac{M\hbar\omega}{2}}\,(\hat{a}_+ - \hat{a}_-)$$

- Maticové elementy

$$\langle n|\hat{P}|m\rangle = i\sqrt{\frac{M\hbar\omega}{2}}(\alpha_m^+\,\delta_{n,m+1} - \alpha_m^-\,\delta_{n,m-1})$$

- Maticová reprezentace $\hat{P}$ v bázi $\{|n\rangle\}$

$$P = i\sqrt{\frac{M\hbar\omega}{2}}\begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & -\sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \dots \end{pmatrix}$$

Algebraické odvození spektra $\hat{H}$

- Existence posunovacích operátorů $\Longrightarrow$ spektrum je ekvidistantní
- $\hat{H}$ je zdola omezený $\Longrightarrow$ vlastní hodnoty $E_n \geq 0$

$$\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle \geq 0 \implies \sigma_{\hat{H}} \subset \langle 0, \infty)$$

- Existuje základní stav $|0\rangle$ — stav s nejnižší energií E_0

$$\hat{a}_-|0\rangle = 0$$

- Hodnota E_0

$$\hat{H}|0\rangle = \hbar\omega\left(\hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2}\right)|0\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega|0\rangle \implies E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\hat{a}_+^n|0\rangle \implies \hat{H}|n\rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega|n\rangle$$

Tvar vlastních funkcí $\hat{H}$

- Vlnová funkce základního stavu je určená rovnicí

$$\hat{a}_-\psi_0 = 0 \implies \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right)\psi_0 = 0, \quad \xi = \sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}}x$$

- Řešení rovnice

$$\psi_0(\xi) = C_0 e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

- Vlnové funkce excitovaných stavů

$$\begin{aligned} \hat{a}_+ &= \hat{a}_-^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right) \\ \psi_n(\xi) &= C_n \left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\frac{\xi^2}{2}} \end{aligned}$$

Koherentní stavy LHO

- Vlastní vektory anihilačního operátoru

$$\hat{a}_-\phi_\alpha = \alpha\phi_\alpha \implies \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right)\phi_\alpha = \alpha\phi_\alpha$$

- Řešení existuje pro každé $\alpha \in \mathbb{C}$

$$\phi_\alpha(\xi) = C_\alpha e^{-\frac{1}{2}(\xi - \sqrt{2}\alpha)^2}, \quad \forall\alpha \in \mathbb{C}\ \phi_\alpha \in L^2(\mathbb{R}, d\xi)$$

- Anihilační operátor má nespočetně mnoho vlastních vektorů
- $\hat{a}_-$ není samosdružený, jeho vlastní vektory netvoří ON bázi

$$(\phi_\alpha, \phi_\beta) \neq 0\ \forall\alpha, \beta \in \mathbb{C}$$

- Stavy blízké klasické fyzice — minimalizují relace neurčitosti, jednoduchý časový vývoj

Přehled

1. Posunovací operátory pro harmonický oscilátor
2. Posunovací operátory pro moment hybnosti
3. Předpovědi výsledků měření

Posunovací operátory pro moment hybnosti

- $\hat{L}_3$ má ekvidistantní spektrum — $\sigma(\hat{L}_3) = \{m\hbar | m \in \mathbb{Z}\}$
- Společné vlastní vektory $\hat{L}_3$ a $\hat{L}^2$ — $|l, m\rangle$

$$\hat{L}_3|l, m\rangle = m\hbar|l, m\rangle, \quad \hat{L}^2|l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1)|l, m\rangle$$

- Posunovací operátory $\hat{L}_\pm$ — nemění l, změní m o ± 1

$$\left[\hat{L}^2, \hat{L}_\pm\right] = 0, \quad \left[\hat{L}_3, \hat{L}_\pm\right] = \pm\hbar L_\pm$$

- Komutační relace pro moment hybnosti

$$\left[\hat{L}_i, \hat{L}_j\right] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k$$

- Posunovací operátory $\hat{L}_\pm$

$$\hat{L}_\pm = \hat{L}_1 \pm i\hat{L}_2$$

Posunovací operátory pro moment hybnosti

- Působení na vlastní vektory momentu hybnosti

$$\hat{L}_{\pm}|l,m\rangle = \alpha^{\pm}_{l,m}|l,m\pm 1\rangle$$

- Zápis $\hat{L}^2$ pomocí $\hat{L}_3$, $\hat{L}_{\pm}$

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_3^2 + \hat{L}_+\hat{L}_- - \hbar\hat{L}_3 = \hat{L}_3^2 + \hat{L}_-\hat{L}_+ + \hbar\hat{L}_3$$

- Velikost $|\alpha^{\pm}_{l,m}|$

$$|\alpha^{\pm}_{l,m}| = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m\pm 1)}$$

- Fázová konvence — $\alpha^{\pm}_{l,m} \geq 0$

Maticová reprezentace posunovacích operátorů

- Maticové elementy $\hat{L}_\pm$

$$\langle l, m|\hat{L}_\pm|l', m'\rangle = \alpha^\pm_{l,m}\delta_{l,l'}\delta_{m,m'\pm 1}$$

- Matice operátoru $\hat{L}_-$ v bázi $\{|l, m\rangle\}$ $(L_+ = L_-^\dagger)$

$$L_- = \hbar \left(\begin{array}{c|ccc|ccccc|c}
0 & & & & & & & & & \\ \hline
 & 0 & 0 & 0 & & & & & & \\
 & \sqrt{2} & 0 & 0 & & & & & & \\
 & 0 & \sqrt{2} & 0 & & & & & & \\ \hline
 & & & & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \\
 & & & & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & \\
 & & & & 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 & 0 & \\
 & & & & 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 & \\
 & & & & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & \\ \hline
 & & & & & & & & & \ddots
\end{array}\right)$$

Maticová reprezentace $\hat{L}_{1,2}$

- Maticové elementy $\hat{L}_1 = \frac{1}{2}(\hat{L}_+ + \hat{L}_-)$

$$\langle l, m|\hat{L}_1|l', m'\rangle = \frac{1}{2}\delta_{l,l'}\left(\alpha^+_{l,m}\delta_{m,m'+1} + \alpha^-_{l,m}\delta_{m,m'-1}\right)$$

- Maticové elementy $\hat{L}_2 = \frac{i}{2}(\hat{L}_- - \hat{L}_+)$

$$\langle l, m|\hat{L}_2|l', m'\rangle = \frac{i}{2}\delta_{l,l'}\left(\alpha^-_{l,m}\delta_{m,m'-1} - \alpha^+_{l,m}\delta_{m,m'+1}\right)$$

- Matice $L_{1,2}$ jsou blokově diagonální, bloky určené hodnotou l
- Nenulové prvky jen v pásech nad a pod diagonálou

Matice $\hat{L}_1$

$$L_1 = \hbar \left(\begin{array}{c|ccc|ccccc|c}
0 & & & & & & & & & \\ \hline
 & 0 & 1/\sqrt{2} & 0 & & & & & & \\
 & 1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} & & & & & & \\
 & 0 & 1/\sqrt{2} & 0 & & & & & & \\ \hline
 & & & & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \\
 & & & & 1 & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}} & 0 & 0 & \\
 & & & & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}} & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}} & 0 & \\
 & & & & 0 & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}} & 0 & 1 & \\
 & & & & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \\ \hline
 & & & & & & & & & \ddots
\end{array}\right)$$

Matice $\hat{L}_2$

$$L_2 = i\hbar \left(\begin{array}{c|ccc|ccccc|c}
0 & & & & & & & & & \\ \hline
 & 0 & -1/\sqrt{2} & 0 & & & & & & \\
 & 1/\sqrt{2} & 0 & -1/\sqrt{2} & & & & & & \\
 & 0 & 1/\sqrt{2} & 0 & & & & & & \\ \hline
 & & & & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & \\
 & & & & 1 & 0 & -\sqrt{\frac{3}{2}} & 0 & 0 & \\
 & & & & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}} & 0 & -\sqrt{\frac{3}{2}} & 0 & \\
 & & & & 0 & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}} & 0 & -1 & \\
 & & & & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \\ \hline
 & & & & & & & & & \ddots
\end{array}\right)$$

Přehled

1. Posunovací operátory pro harmonický oscilátor

2. Posunovací operátory pro moment hybnosti

3. Předpovědi výsledků měření

Měření v kvantové mechanice

- Pokud ψ není vlastní vektor $\hat{A} \Longrightarrow$ hodnota $\hat{A}$ není určená
- Hodnoty pozorovatelných jsou určené měřením
- Měření je náhodný proces, vybere se jedna z možností
- Pravděpodobnost výsledku měření $\hat{A}$ na stavu ψ

$$W_{\psi, A=a_j} = \|\hat{P}_j \psi\|^2, \quad a_j \in \sigma_p(\hat{A})$$

- $\hat{P}_j$ je ortogonální projektor na příslušný vlastní podprostor
- Po měření musíme aktualizovat popis stavu podle výsledku

$$\psi \longrightarrow \frac{\hat{P}_j \psi}{\|\hat{P}_j \psi\|}$$

Vlastní hodnota a_j má násobnost 1

- Vlastní vektor je určený jednoznačně

$$\hat{A}|j\rangle = a_j|j\rangle$$

- Ortogonální projektor na vlastní podprostor

$$\hat{P}_j = |j\rangle\langle j|, \quad \hat{P}_j|\psi\rangle = \langle j|\psi\rangle|j\rangle$$

- Pr. výsledku měření $\Longleftrightarrow$ pr. přechodu do vlastního stavu

$$W_{\psi,A=a_j} = |\langle j|\psi\rangle|^2 = W_{|\psi\rangle\rightarrow|j\rangle}$$

Konzistence s teorií pravděpodobnosti

- Pro jednoduchost — $\hat{A}$ má prosté čistě bodové spektrum
- Vlastní vektory $\hat{A}$ — $\{|j\rangle\}$ tvoří ON bázi
- Parsevalova rovnost

$$\|\psi\|^2 = \sum_j |\langle j|\psi\rangle|^2 = 1$$

- $\{|\langle j|\psi\rangle|^2\}$ tvoří pravděpodobnostní rozdělení
- Ve stavu $|j\rangle$ má pozorovatelná $\hat{A}$ hodnotu a_j

Má smysl postulovat, že $|\langle j|\psi\rangle|^2$ je pravděpodobnost naměření hodnoty a_j na částici ve stavu $|\psi\rangle$

Vlastní hodnota a má násobnost $1 < n < \infty$

- V degenerovaném podprostoru zvolíme nějakou ON bázi

$$\hat{A}|a,j\rangle = a|a,j\rangle, \quad \langle a,j|a,k\rangle = \delta_{j,k}, \quad j,k = 1,\ldots,n$$

- Ortogonální projektor na vlastní podprostor

$$\hat{P}_a = \sum_{j=1}^{n} |a,j\rangle\langle a,j|, \quad \hat{P}_a|\psi\rangle = \sum_{j=1}^{n} \langle a,j|\psi\rangle|a,j\rangle$$

- Pr. výsledku měření $\Longleftrightarrow$ součet pr. přechodu do vlastních stavů

$$W_{\psi,A=a} = \sum_{j=1}^{n} |\langle a,j|\psi\rangle|^2 = \sum_{j=1}^{n} W_{|\psi\rangle\to|a,j\rangle}$$

- Pravděpodobnost nezávisí na volbě báze

$\hat{A}$ má spojité spektrum

- Bodům ze spojitého spektra přiřadíme zobecněné vlastní vektory

$$\langle a|\hat{A}|\phi\rangle = a\langle a|\phi\rangle, \quad \langle a|a'\rangle = \delta(a-a')$$

- Hustota pravděpodobnosti naměření a ve stavu $|\psi\rangle$

$$w_{\psi}(a) = |\langle a|\psi\rangle|^2$$

- Pravděpodobnost, že výsledek měření leží v intervalu (a_1, a_2)

$$W_{\psi, A\in(a_1,a_2)} = \int_{a_1}^{a_2} |\langle a|\psi\rangle|^2 da$$

Poloha a hybnost

Poloha

- Amplituda pravděpodobnosti —- vlnová funkce v x-reprezentaci

$$w_\psi(x) = |\langle x|\psi\rangle|^2 = |\psi(x)|^2$$

- Odpovídá Bornově interpretaci vlnové funkce

Hybnost

- Amplituda pravděpodobnosti —- vlnová funkce v p-reprezentaci

$$w_\psi(p) = |\langle p|\psi\rangle|^2 = |\tilde{\psi}(p)|^2$$

- $\tilde{\psi}$ je Fourierova transformace ψ

Střední hodnota pozorovatelné

- $\hat{A}$ má čistě bodové spektrum

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = \sum_j a_j W_{\psi, A=a_j} = \sum_j a_j |\langle j|\psi\rangle|^2$$

- $\hat{A}$ má spojité spektrum

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = \int_{\sigma(\hat{A})} a\, w_\psi(a) da = \int_{\sigma(\hat{A})} a\, |\langle a|\psi\rangle|^2 da$$

- Oba vztahy lze přepsat kompaktně

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = \langle \psi|\hat{A}|\psi\rangle$$

Střední kvadratická odchylka

- Definice střední kvadratické odchylky $\hat{A}$ ve stavu ψ

$$\left(\Delta_\psi \hat{A}\right) = \sqrt{\langle(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle_\psi)^2\rangle_\psi} = \sqrt{\langle\hat{A}^2\rangle_\psi - \langle\hat{A}\rangle_\psi^2} \geq 0$$

- Indikuje přesnost určení hodnoty $\hat{A}$ ve stavu ψ
- ψ je vlastní vektor $\Longrightarrow$ neurčitost je nulová

$$\hat{A}\psi = a\psi \implies \langle\hat{A}\rangle_\psi = a, \quad \langle\hat{A}^2\rangle_\psi = a^2 \implies \left(\Delta_\psi \hat{A}\right) = 0$$

- $\hat{A}$ má spojité spektrum $\Longrightarrow$ neurčitost nemůže být nulová
- Zobecněné vlastní funkce lze libovolně přesně aproximovat $\Longrightarrow$ neurčitost kompatibilních pozorovatelných může být teoreticky libovolně malá

Poloha a hybnost

Polohu částice mohu určit libovolně přesně

$$
\begin{aligned}
\delta_{y,\varepsilon}(x) &= \begin{cases} 0 & , |x-y| > \varepsilon \\ \frac{1}{2\varepsilon} & , |x-y| \leq \varepsilon \end{cases} \\
\langle \hat{Q} \rangle_{\delta_{y,\varepsilon}} &= y, \quad \left(\Delta_{\delta_{y,\varepsilon}} \hat{Q}\right) = \frac{\varepsilon}{\sqrt{3}}
\end{aligned}
$$

Hybnost částice mohu určit libovolně přesně

$$
\begin{aligned}
\psi_{p,\varepsilon}(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}px} \frac{\hbar}{\varepsilon x} \sin\left(\frac{\varepsilon x}{\hbar}\right) \\
\langle \hat{P} \rangle_{\psi_{p,\varepsilon}} &= p, \quad \left(\Delta_{\psi_{p,\varepsilon}} \hat{P}\right) = \frac{\varepsilon}{\sqrt{3}}
\end{aligned}
$$

Poloha a hybnost nejsou kompatibilní $\Longrightarrow$ nemohu to udělat současně

Relace neurčitosti

$\forall$ $\hat{A}$ a $\hat{B}$ samosdružené, $\forall\ \psi \in D(\hat{A}\hat{B}) \cap D(\hat{B}\hat{A})$ platí nerovnost

$$\left(\Delta_\psi \hat{A}\right)\left(\Delta_\psi \hat{B}\right) \geq \frac{1}{2}\left|\langle\left[\hat{A}, \hat{B}\right]\rangle_\psi\right|$$

Rovnost nastává pro ψ, která jsou řešením rovnice

$$\left[\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle_\psi - i\alpha(\hat{B} - \langle\hat{B}\rangle_\psi)\right]\psi = 0, \quad \alpha \in \mathbb{R}$$

Omezení stavů díky $\exists$ nekompatibilních pozorovatelných

Heisenbergovy relace neurčitosti

$$\left[\hat{Q}, \hat{P}\right] = i\hbar \implies \forall\psi,\ \left(\Delta_\psi \hat{Q}\right)\left(\Delta_\psi \hat{P}\right) \geq \frac{\hbar}{2}$$