Pozorovatelné veličiny a výsledky měření

Martin Štefaňák

18. března 2021

Přehled

Přehled

Pozorovatelné pro částici v $\mathbb{R}^3$

Klasická mechanika

- Stavový prostor — fázový prostor $\Gamma = \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 = \mathbb{R}^6$
- Stav — poloha a hybnost $(\vec{x}, \vec{p}) \in \Gamma$
- Pozorovatelné — reálné funkce na fázovém prostoru $f(\vec{x}, \vec{p})$
- Např. hamiltonova funkce — celková energie

$$H(\vec{x}, \vec{p}) = \frac{p^2}{2M} + V(\vec{x})$$

- Možné hodnoty pozorovatelné — obor hodnot funkce f

Kvantová mechanika

- Stavový prostor — Hilbertův prostor $\mathscr{H} = L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$
- Stav — vlnová funkce $\psi \in \mathscr{H}$
- Pozorovatelné — hermitovské (resp. samosdružené) operátory $\hat{A}$ na $\mathscr{H}$
- Možné hodnoty pozorovatelné — spektrum operátoru $\sigma(\hat{A})$

Přiřazení operátorů pozorovatelným pro částici v $\mathbb{R}^3$

Poloha a hybnost

$$(\hat{Q}_j\psi)(\vec{x}) = x_j\psi(\vec{x}), \quad (\hat{P}_j\psi)(\vec{x}) = -i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x_j}(\vec{x})$$

Princip korespondence

$$f(x_j, p_j) \quad \longrightarrow \quad f(\hat{Q}_j, \hat{P}_j)$$

Celková energie

$$H(x_j, p_j) = \frac{p^2}{2M} + V(\vec{x}) \quad \longrightarrow \quad \hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2M} + V(\hat{\vec{Q}})$$

$$(\hat{H}\psi)(\vec{x}) \quad = \quad -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta\psi(\vec{x}) + V(\vec{x})\psi(\vec{x})$$

Hermitovské operátory

- Kvantový systém s Hilbertovým prostorem konečné dimenze — $\mathscr{H} = \mathbb{C}^N$
- Sdružený operátor k operátoru $\hat{A}$ — $\hat{A}^\dagger$

$$\left(\psi, \hat{A}\phi\right) = \left(\hat{A}^\dagger\psi, \phi\right), \quad \forall \psi, \phi \in \mathscr{H}$$

- Hermitovský operátor — je roven svému sdruženému operátoru

$$\hat{A} = \hat{A}^\dagger$$

- V Diracově zápisu — pro $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ je jedno, zda působí doleva nebo doprava

$$\langle\psi|\hat{A}|\phi\rangle \equiv \left(\psi, \hat{A}\phi\right) = \left(\hat{A}\psi, \phi\right)$$

Matice hermitovského operátoru

- Pracujeme v nějaké ortonormální bázi

$$\{|j\rangle,\ j = 1,\ldots,N\}\,, \quad \langle i|j\rangle = \delta_{ij}$$

- Operátor je v bázi reprezentován maticí $N \times N$

$$A = (A_{ij}) = \left(\langle i|\hat{A}|j\rangle\right), \quad i,j = 1,\ldots,N$$

- Hermitovské sdružení matice — transpozice + komplexní sdružení

$$A^\dagger = \left(A^\dagger_{ij}\right) = (\overline{A}_{ji})$$

- Matice hermitovského operátoru v ONB je rovna svému hermitovskému sdružení

$$A^\dagger = \left(A^\dagger_{ij}\right) = (\overline{A}_{ji}) = \left(\overline{\langle j|\hat{A}|i\rangle}\right) = \left(\langle i|\hat{A}|j\rangle\right) = (A_{ij}) = A$$

Spektrum operátoru

- Výsledky měření pozorovatelné odpovídají spektru příslušného operátoru $\sigma(\hat{A})$
- Na konečné dimenzi je spektrum rovno množině vlastních čísel

$$\sigma(\hat{A}) = \{a_m,\ m = 1, \ldots, N\}, \quad \hat{A}|\psi_m\rangle = a_m|\psi_m\rangle, \quad |\psi_m\rangle \neq 0$$

- $|\psi_m\rangle$ je vlastní vektor operátoru $\hat{A}$
- Vlastní čísla lze najít jako kořeny charakteristického polynomu

$$\det(A - \lambda I) = 0 = (\lambda - a_1) \cdot (\lambda - a_2) \cdot \ldots \cdot (\lambda - a_N)$$

Spektrum a vlastní vektory hermitovských operátorů

- Vlastní čísla reálná — můžeme naměřit pouze reálné hodnoty pozorovatelných

$$\hat{A} = \hat{A}^\dagger \implies \sigma(\hat{A}) \subset \mathbb{R}$$

- Jsou diagonalizovatelné — vlastní vektory hermitovského operátoru tvoří ONB

$$\langle\psi_m|\hat{A}|\psi_n\rangle = a_m\langle\psi_m|\psi_n\rangle = a_n\langle\psi_m|\psi_n\rangle \implies (a_m - a_n)\langle\psi_m|\psi_n\rangle = 0$$

$$a_m \neq a_n \implies \langle\psi_m|\psi_n\rangle = 0$$

- Matice operátoru v bázi jeho vlastních vektorů je diagonální

$$A = \left(\langle\psi_m|\hat{A}|\psi_n\rangle\right) = (a_m\delta_{mn}) = \begin{pmatrix} a_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_2 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & \ddots & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & a_N \end{pmatrix}$$

Přehled

Pravděpodobnosti výsledků měření

- Hodnota pozorovatelné je určena měřením
- Bornovo pravidlo — výsledky jednotlivých měření jsou náhodné
- Můžeme určit pouze pravděpodobnosti možných výsledků

Měření pozorovatelné

- Stav částice před měřením je $|\psi\rangle$
- Měřím pozorovatelnou $\hat{A}$ s prostým spektrem

$$\hat{A}|\psi_m\rangle = a_m|\psi_m\rangle, \quad a_m \neq a_n,\ m \neq n, \quad \langle\psi_m|\psi_n\rangle = \delta_{mn}$$

- Mohu naměřit některou z vlastních hodnot a_m
- Ve vlastním stavu $|\psi_m\rangle$ má pozorovatelná $\hat{A}$ hodnotu a_m
- Pr. naměření hodnoty a_m na stavu $|\psi\rangle$ = pr. přechodu do vlastního stavu $|\psi_m\rangle$

$$W_{\psi,a_m} = W_{\psi\to\psi_m} = |\langle\psi_m|\psi\rangle|^2$$

Měření v kvantové mechanice

- Pokud $|\psi\rangle$ není vlastní vektor $\hat{A}$ — její hodnota není v tomto stavu určená
- Parsevalova rovnost — W_{ψ,a_m} je pravděpodobnostní rozdělení

$$\|\psi\|^2 = 1 = \sum_{m=1}^{N} |\langle\psi_m|\psi\rangle|^2 = \sum_{m=1}^{N} W_{\psi,a_m}$$

- Po měření popíšeme stav částice vlastním vektorem, který odpovídá výsledku

$$\text{stav částice } |\psi\rangle, \text{ měřím } \hat{A} \longrightarrow \text{vyjde } a_m \longrightarrow \text{stav částice je } |\psi_m\rangle$$

- Měřením se stav částice může nevratně změnit

Přehled

Spin elektronu

- Z různých experimentů vyplynulo, že elektron má vlastní magnetický moment
- Vlastní magnetický moment je důsledek vlastního momentu hybnosti — spinu
- Projekce spinu elektronu do libovolného směru může nabývat hodnot $\pm\frac{\hbar}{2}$
- Elektron má spin velikosti $\frac{1}{2}$ (v jednotkách $\hbar$)
- Spin je ryze kvantová vlastnost, nemá analogii v klasické mechanice
- Prostor stavů spinu elektronu — Hilbertův prostor dimenze 2

Projekce spinu do osy z

- Standardní ONB — vlastní vektory projekce spinu do osy z

$$\mathscr{H} = [|z,+\rangle, |z,-\rangle]_\lambda \simeq \mathbb{C}^2, \quad \langle z,+|z,-\rangle = 0$$

- Operátor projekce spinu do osy z — $\hat{S}_z$

$$\hat{S}_z|z,+\rangle = +\frac{\hbar}{2}|z,+\rangle, \quad \hat{S}_z|z,-\rangle = -\frac{\hbar}{2}|z,-\rangle$$

- Matice operátoru ve standardní bázi je hermitovská

$$S_z = \begin{pmatrix} \langle z,+|\hat{S}_z|z,+\rangle & \langle z,+|\hat{S}_z|z,-\rangle \\ \langle z,-|\hat{S}_z|z,+\rangle & \langle z,-|\hat{S}_z|z,-\rangle \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Spinor

- Obecný stav spinu — superpozice stavů s kladnou a zápornou projekcí do osy z

$$|\psi\rangle = a|z,+\rangle + b|z,-\rangle \equiv \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, \quad |a|^2 + |b|^2 = 1$$

- Koeficienty spinoru — amplitudy pr. naměření kladné (záporné) projekce do osy z

$$W_{\psi,z+} = |\langle z,+|\psi\rangle|^2 = |a|^2, \quad W_{\psi,z-} = |\langle z,-|\psi\rangle|^2 = |b|^2$$

Projekce spinu do os x, y

- Můžeme měřit projekci spinu do jiných směrů, výsledek měření je vždy $\pm\frac{\hbar}{2}$
- Projekce do os x, y — operátory $\hat{S}_x$, $\hat{S}_y$ — vlastní vektory $|x,\pm\rangle$, $|y,\pm\rangle$

$$\hat{S}_x|x,\pm\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}|x,\pm\rangle, \qquad \hat{S}_y|y,\pm\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}|y,\pm\rangle$$

- Matice operátorů projekce spinu do os x, y a z ve standardní bázi

$$S_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad S_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad S_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

- Zápis pomocí Pauliho matic

$$S_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i, \quad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

- Vlastní čísla Pauliho matic jsou ± 1 — projekce spinu do hlavních os je $\pm\frac{\hbar}{2}$

Komutační relace pro složky spinu

- Tvar matic složek spinu lze odvodit z vlastností momentu hybnosti
- Klasicky — Poissonovy závorky složek momentu hybnosti

$$\{l_i, l_j\} = \sum_m \left(\frac{\partial l_i}{\partial x_m}\frac{\partial l_j}{\partial p_m} - \frac{\partial l_i}{\partial p_m}\frac{\partial l_j}{\partial x_m} \right) = \varepsilon_{ijk} l_k$$

- Kvantově — Poissonova závorka přejde v komutátor operátorů

$$\{A, B\} \longrightarrow -\frac{i}{\hbar}\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = -\frac{i}{\hbar}\left(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\right)$$

- Pro matice složek spinu platí komutační relace

$$[S_i, S_j] = S_i S_j - S_j S_i = i\hbar\varepsilon_{ijk} S_k$$

Projekce spinu do libovolného směru

- Směr daný jednotkovým vektorem — $\vec{n} = (n_1, n_2, n_3)$, $n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 1$
- Operátor projekce spinu do směru $\vec{n}$

$$\hat{S}_{\vec{n}} = \vec{n} \cdot \hat{\vec{S}} = n_i \hat{S}_i$$

- Matice operátoru

$$S_{\vec{n}} = \frac{\hbar}{2}\vec{n} \cdot \vec{\sigma} = \frac{\hbar}{2} n_i \sigma_i = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} n_3 & n_1 - in_2 \\ n_1 + in_2 & -n_3 \end{pmatrix}$$

- Charakteristický polynom

$$\begin{aligned} \det\left(\vec{n} \cdot \vec{\sigma} - \lambda I\right) &= -(n_3 - \lambda)(n_3 + \lambda) - (n_1 - in_2)(n_1 + in_2) \\ &= \lambda^2 - (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) = \lambda^2 - 1 \end{aligned}$$

- Kořeny jsou ± 1 — vlastní čísla $\hat{S}_{\vec{n}}$ jsou $\pm\frac{\hbar}{2}$

Spin v homogenním magnetickém poli

- Důsledkem spinu je vlastní magnetický moment elektronu
- Operátor vlastního magnetického momentu elektronu — násobek op. spinu

$$\hat{\mu}_i = -\frac{2\mu_B}{\hbar}\hat{S}_i, \quad \text{Bohrův magneton} - \quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} \doteq 9.274 \cdot 10^{-24} J \cdot T^{-1}$$

- Energie magnetického momentu ve vnějším poli — Hamiltonián

$$\hat{H} = -\hat{\vec{\mu}} \cdot \vec{B} = \frac{2\mu_B}{\hbar}\hat{\vec{S}} \cdot \vec{B} = \frac{2\mu_B B}{\hbar}\hat{\vec{S}} \cdot \vec{b} = \frac{2\mu_B B}{\hbar}\hat{S}_{\vec{b}}, \quad \vec{b} = \frac{\vec{B}}{B}, \quad B = \|\vec{B}\|$$

- Vlastní čísla hamiltoniánu — možné energie spinu v magnetickém poli

$$E_\pm = \pm\mu_B B$$

Spin v homogenním magnetickém poli

- Magnetické pole ve směru osy z

$$H = \frac{2\mu_B B}{\hbar} S_z = \mu_B B \sigma_3 = \begin{pmatrix} \mu_B B & 0 \\ 0 & -\mu_B B \end{pmatrix}$$

- Vlastní vektory hamiltoniánu jsou vlastní vektory $\hat{S}_z$

$$\hat{H}|z,\pm\rangle = \pm\mu_B B|z,\pm\rangle$$

- Obecný spinor — a, b jsou amplitudy pr. naměření energie $E_\pm$

$$|\psi\rangle = a|z,+\rangle + b|z,-\rangle \quad \Longrightarrow \quad W_{\psi,E_+} = |a|^2, \quad W_{\psi,E_-} = |b|^2$$

Přehled

Hybnost kvantové částice

- Částice na přímce — Hilbertův prostor je $\mathscr{H} = L^2(\mathbb{R}, dx)$
- Hybnosti je přiřazen operátor $\hat{P}$

$$(\hat{P}\psi)(x) = -i\hbar\frac{d\psi}{dx}(x)$$

- Rovnice na vlastní čísla a vlastní vektory — diferenciální rovnice

$$\hat{P}\psi = p\psi \quad \longrightarrow \quad -i\hbar\psi' = p\psi \quad \longrightarrow \quad \psi_p(x) = Ae^{\frac{i}{\hbar}px},\ p \in \mathbb{R}$$

- Řešení ψ_p není kvadraticky integrabilní — není to vlastní vektor

$$|\psi_p(x)|^2 = |A|^2 \quad \Longrightarrow \quad \|\psi_p\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} |A|^2 dx = \infty$$

Operátor hybnosti kvantové částice na přímce nemá žádná vlastní čísla

Spektrum operátoru

- Spektrum operátoru pro dim $\mathscr{H} = \infty$ je složitější

$$\lambda \in \sigma(\hat{A}) \Longleftrightarrow \hat{A} - \lambda \text{ není bijekce } D(\hat{A}) \longrightarrow \mathscr{H}$$

Bodové spektrum σ_p

- $\hat{A} - \lambda$ není prostý

$$\exists \psi \neq 0, \quad \hat{A}\psi = \lambda\psi$$

- λ je vlastní číslo
- ψ je vlastní vektor
- Stejné jako pro kon. dim.

Spojité spektrum σ_c

- $\hat{A} - \lambda$ není na (surjektivní)
- $\lambda \notin \sigma_p(\hat{A})$, a zároveň $\exists$ posloupnost jednotkových vektorů $\{\psi_n\}$, která nemá konvergentní podposloupnost, taková, že

$$\lim_{n\to\infty} (\hat{A} - \lambda)\psi_n = 0$$

Hybnost kvantové částice

- Operátor hybnosti má pouze spojité spektrum
- Pro každé $p \in \mathbb{R}$, $\varepsilon > 0$ můžeme definovat kvadraticky integrabilní funkce $\psi_{p,\varepsilon}$

$$\psi_{p,\varepsilon}(x) = e^{\frac{i}{\hbar}px}\sqrt{\frac{\hbar}{\varepsilon\pi}}\frac{\sin\left(\frac{\varepsilon x}{\hbar}\right)}{x}, \qquad \|\psi_{p,\varepsilon}\|^2 = \frac{\hbar}{\varepsilon\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{\sin^2\left(\frac{\varepsilon x}{\hbar}\right)}{x^2}dx = 1$$

$$(\hat{P} - p)\psi_{p,\varepsilon}(x) = ie^{\frac{i}{\hbar}px}\sqrt{\frac{\hbar\varepsilon}{\pi}}\left(\frac{\hbar\sin\left(\frac{\varepsilon x}{\hbar}\right)}{x^2\varepsilon} - \frac{\cos\left(\frac{\varepsilon x}{\hbar}\right)}{x}\right) \xrightarrow{\varepsilon\to 0} 0$$

- Spojité spektrum operátoru hybnosti je celá reálná osa — $\sigma_c(\hat{P}) = \mathbb{R}$
- Hybnost kvantové částice nelze určit absolutně přesně
- Teoreticky může být neurčitost v hybnosti libovolně malá