Úvod do kvantové mechaniky

Přednáška č. 6

Verze 2024.1

Dosavadní poznatky o komutátorech

Každou měřitelnou fyzikální veličinu A lze reprezentovat operátorem vystavěným z rozlišitelných (měřitelných) stavů. Má-li veličina měřitelné hodnoty a_n odpovídající stavům $|a_n\rangle$, pak její operátor vypadá jako $\hat{A} = \sum_n a_n |a_n\rangle\langle a_n|$ a platí $\hat{A}|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle$. Pokud veličina B nesdílí s veličinou A stejnou sadu vlastních stavů, tedy neplatí $\hat{B}|a_n\rangle = b_n|a_n\rangle$, pak operátory spolu nekomutují, tj. $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$ a $[\hat{A},\hat{B}] \neq 0$.

Existuje **tedy** souvislost mezi chybou měření v důsledku kvantové náhodnosti a nenulovostí komutátoru.

Které veličiny spolu nekomutují? Jsou to ty, které mají v klasické mechanice nenulovou **Poissonovu závorku**. Klasickou limitou komutátoru je Poissonova záborka

$$[\hat{X},\hat{Y}] \to i\hbar[X,Y]_P = i\hbar\left\{\frac{\partial X}{\partial q}\frac{\partial Y}{\partial p} - \frac{\partial Y}{\partial q}\frac{\partial X}{\partial p}\right\}$$

Metoda kanonického kvantování

Klasickým veličinám *A*, *B* a *C* pro něž platí $[A,B]_P = C$ budou přiřazeny operátory $\hat{A}$, $\hat{B}$ a $\hat{C}$, pro které platí

$$\boxed{[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = i\hbar\hat{C}} \Rightarrow \boxed{[\hat{q},\hat{p}] = i\hbar}$$

Cesta

z klasiky do kvantovky

z kvantovky do klasiky

Ehrenfestův teorém

Pro očekávané střední hodnoty souřadnice a impulsu platí klasické pohybové rovnice $\langle x\rangle = \langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle \quad \langle p\rangle = \langle\psi|\hat{p}|\psi\rangle$

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{x}\rangle = \frac{1}{m}\langle\hat{p}\rangle}$$

díky vztahům: $\left[\frac{\hat{p}^2}{2m},\hat{x}\right] = -\frac{i\hbar}{m}\hat{p}$

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{p}\rangle = -\left\langle\frac{\partial}{\partial\hat{q}}V(\hat{q})\right\rangle}$$

$$[V(\hat{q}),\hat{p}] = i\hbar\frac{\partial}{\partial\hat{q}}V(\hat{q})$$

Obecně platí

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{A}\rangle = -i\hbar\langle[\hat{A},\hat{H}]\rangle + \left\langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right\rangle$$

Ehrenfestův theorém je příkladem **principu korespondence**

Rozplývání vlnového balíku volné částice

Částice s dokonale určitou hybností $\Delta p \to 0$ odpovídá rovinné vlně a je dokonale delokalizovaná, $\Delta x \to \infty$.

Jakkoliv lokalizovaná částice $\Delta x < \infty$, musí mít konečně široké spektrum hybností $\Delta p > 0$. Neurčitost v Δx se musí zvětšovat.

Vlnový balík

Např: $\psi(x,t) = \left(\frac{2}{\pi\Delta^2}\right)^{\frac{1}{4}}\int_{-\infty}^{\infty}dp\ e^{-\frac{(p-p_0)^2}{\Delta^2}}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}$

Symetrické rozdělení hybností kolem p_0 (může být $p_0 = 0$).

Platí $\langle\hat{p}\rangle = p_0$ a $\langle\hat{p}^2\rangle = p_0^2 + \frac{\Delta^2}{4}$

Integrováním v $t = 0$: $\psi(x,0) = \left(\frac{2}{\pi\Delta^2}\right)^{\frac{1}{4}}\frac{\Delta}{\sqrt{2\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}p_0x}e^{-\frac{\Delta^2}{4\hbar^2}}$

Platí $\langle\hat{x}\rangle = 0$ a $\langle\hat{x}^2\rangle = \frac{\hbar^2}{\Delta^2} \Rightarrow (\Delta p)^2(\Delta x)^2 = \frac{\hbar^2}{4}$

Gaussovský balík má ideální tvar pro minimální neurčitost.

V **Heisenbergově obraze** platí

$$\frac{d}{dt}\hat{x}(t) = \frac{\hat{p}}{m} \Longrightarrow \hat{x}(t) = \hat{x}(0) + \frac{\hat{p}}{m}t$$

$$\langle\hat{x}^2(t)\rangle = \left\langle\left(\frac{\hat{p}t}{m}+\hat{x}\right)\left(\frac{\hat{p}t}{m}+\hat{x}\right)\right\rangle = \frac{\langle\hat{p}^2\rangle t^2}{m^2} + \langle\hat{x}^2\rangle$$

Čím větší hmostnost, tím menší rozplývání

Čím větší lokalizace, tím větší rozplývání

$$\boxed{\langle\hat{x}^2(t)\rangle = \frac{\Delta^2t^2}{4m^2} + \frac{\hbar^2}{\Delta^2}} \quad \boxed{(\Delta x(t))^2(\Delta p(t))^2 = \frac{\hbar^2}{4} + \frac{\Delta^4}{16m^2}t^2}$$

Relace neurčitosti

Kvantová mechanika přináší náhodnost výsledků měření veličin připravených a měřených v různých bázích stavů. Neurčitost s tím spojenou lze kvantifikovat:

Střední hodnota a střední kvadratická odchylka

Veličina A $\rightarrow$ operátor $\hat{A}$ $\rightarrow$ střední hodnota $\langle\hat{A}\rangle$ a střední kvadratická odchylka $(\Delta A)^2 = \left\langle\left(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle\right)^2\right\rangle = \langle\hat{A}^2\rangle - \langle\hat{A}\rangle^2$

Odvození relací neurčitosti

Předpoklady: $\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{B}|\psi\rangle = 0$

$(\Delta A)^2 = \langle\psi|\hat{A}^2|\psi\rangle = \langle\psi_a|\psi_a\rangle$, $(\Delta B)^2 = \langle\psi|\hat{B}^2|\psi\rangle = \langle\psi_b|\psi_b\rangle$

Nerovnost Cauchy-Schwartz: $\langle\psi_a|\psi_a\rangle\langle\psi_b|\psi_b\rangle \geq |\langle\psi_a|\psi_b\rangle|^2$

Komplexní čísla $z = x + iy \rightarrow |z|^2 = x^2 + y^2 \geq y^2$

$$(\Delta A)^2(\Delta B)^2 = \langle\psi_a|\psi_a\rangle\langle\psi_b|\psi_b\rangle \geq |\langle\psi_a|\psi_b\rangle|^2$$

$$|z|^2 = |\langle\psi_a|\psi_b\rangle|^2 \geq \frac{1}{2i}(z - z^*) = \frac{1}{2i}(\langle\psi_a|\psi_b\rangle - \langle\psi_b|\psi_a\rangle)$$

$$\boxed{(\Delta A)^2(\Delta B)^2 \geq \left(\frac{1}{2i}\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle\right)^2} \Rightarrow \boxed{(\Delta p)^2(\Delta x)^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}}$$

Čím lépe lokalizujeme částici, tím větší je neurčitost v hybnosti a obráceně.

Klasický harmonický oscilátor

Je dobré si rozmyslet základní vztahy v klasickém harmonickém oscilátoru

$p = \frac{\partial L}{\partial\dot{x}} = m\dot{x}$ Definice kanonické hybnosti

Lagrangian: $L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{m\omega^2}{2}x^2$

Kanonicky sdružené veličiny $x \leftrightarrow p$

Hamiltonian: $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2$

Bezrozměrné jednotky aby $H = \frac{\hbar\omega}{2}(\ldots)$

rozměr energie

bez rozměru

Tedy $\frac{m\omega^2}{2}x^2 \overset{\text{def.}}{=} \frac{\hbar\omega}{2}q^2 \Longrightarrow q = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x \Longrightarrow \dot{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\dot{q}$

Lagrangian: $L = \frac{\hbar}{2\omega}\dot{q}^2 - \frac{\hbar\omega}{2}q^2$

kanonicky sdružená hybnost

$\tilde{p} = \frac{\partial L}{\partial\dot{q}} = \frac{\hbar}{\omega}\dot{q} \Longrightarrow H = \dot{q}\tilde{p} - L = \frac{\omega}{2\hbar}\tilde{p}^2 + \frac{\hbar\omega}{2}q^2$

$q \leftrightarrow \tilde{p}$

To není tvar Hamiltoniánu, který chceme, ale tady lze správně spočítat Poisonovu závorku $[q,\tilde{p}]_P = 1 \Longrightarrow [\hat{q},\hat{\tilde{p}}] = i\hbar$

Chceme bezrozměrnou hybnost $\tilde{p} \overset{\text{def.}}{=} \hbar\pi$ a $\hat{\tilde{p}} = \hbar\hat{\pi}$ ($\hat{\pi}$ není kan.)

$$\boxed{H = \frac{\hbar\omega}{2}(\hat{\pi}^2 + \hat{q}^2)} \text{ ale pozor } \boxed{[\hat{q},\hat{\pi}] = i}$$

Převody mezi veličinami

$q = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$

$\pi = \frac{\tilde{p}}{\hbar} = \frac{1}{\sqrt{\hbar m\omega}}p$

Zdroje:

Přednáška UKM z roku 2021: https://www.mancal.cz/teaching/introduction-to-quantum-theory-lecture/

- *Sekce videí od Ehrenfestův teorém* : https://youtu.be/fhH2dwShA48
- *až po Klasický harmonický oscilátor 2. část*: https://youtu.be/mTxWvkwBaH4

Příště: **Kvantový harmonický oscilátor**