Měření, kompatibilita pozorovatelných, částice ve sféricky symetrickém potenciálu

Martin Štefaňák

13. října 2020

Přehled

1. Měření v kvantové částice
2. Kompatibilita pozorovatelných
3. Částice ve sféricky symetrickém potenciálu

Přehled

1 Měření v kvantové částice

2 Kompatibilita pozorovatelných

3 Částice ve sféricky symetrickém potenciálu

Stavy a pozorovatelné v klasické

Klasická mechanika

- Stav — poloha a hybnost $(q, p) \in \Gamma$
- Pozorovatelné — reálné funkce na fázovém prostoru $f(q, p)$
- Stav je pozorovatelná

Kvantová mechanika

- Stav — nenulový vektor $\psi \in \mathscr{H}$
- Pozorovatelné — samosdružené operátory $\hat{A}$ na $\mathscr{H}$
- Stav není pozorovatelná

Kvantové částici musíme stav přiřadit na základě výsledků měření pozorovatelných

Měření v kvantové mechanice

LHO

- Měříme energii — vyjde hodnota $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$
- $\hat{H}$ má prosté spektrum — vlastní funkce ψ_n určena jednoznačně
- Po měření je stav popsán vlastní funkcí ψ_n

Postulát 3

- Stav před měřením ψ
- Měřím pozorovatelnou $\hat{A}$, naměřím vlastní hodnotu a_j
- Stav po měření je popsán vektorem $\phi = \frac{\hat{P}_j\psi}{\|\hat{P}_j\psi\|}$
- $\hat{P}_j$ je OG projektor na vlastní podprostor
- Pravděpodobnost výsledku měření a_j je rovna

$$W_{\psi, A=a_j} = \|\hat{P}_j\psi\|^2$$

Měření v kvantové mechanice

LHO

- Stav před měřením
$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_0 + \psi_1)$$
- Můžeme naměřit energie $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ nebo $E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega$
- Oba možné výsledky mají pravděpodobnost $\frac{1}{2}$
- Po měření popíšeme stav LHO vlastním vektorem ψ_0 nebo ψ_1

Po měření musíme aktualizovat popis stavu

Měření v kvantové mechanice

Klasická mechanika

- Stav určuje jednoznačně hodnotu všech pozorovatelných
- Měření pouze odhalí hodnotu
- Stav se nezmění

Kvantová mechanika

- Stav určuje možné hodnoty pozorovatelných
- Měření náhodně vybere jednu z možností
- Stav se obecně změní

Měření v kvantové mechanice — prosté spektrum

- $\hat{A}$ má prosté spektrum

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

- OG 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

$$W_{\psi,A=a_j} = \|\hat{P}_j\psi\|^2 = |\langle j|\psi\rangle|^2 = W_{\psi\to j}$$

Stav LHO po měření energie je určen jednoznačně bez ohledu na stav před měřením

Izotropní oscilátor — degenerované spektrum

- $\hat{H}$ má degenerované spektrum

$$\hat{H}|n_1, n_2, n_3\rangle = E_N|n_1, n_2, n_3\rangle, \quad N = n_1 + n_2 + n_3$$

- OG projektor na vlastní podprostor

$$\hat{P}_N = \sum_{\substack{n_1, n_2, n_3 \\ n_1 + n_2 + n_3 = N}} |n_1, n_2, n_3\rangle\langle n_1, n_2, n_3|$$

- Stav po měření stále závisí na stavu před měřením

$$\hat{P}_N|\psi\rangle = \sum_{\substack{n_1, n_2, n_3 \\ n_1 + n_2 + n_3 = N}} \langle n_1, n_2, n_3|\psi\rangle|n_1, n_2, n_3\rangle$$

Měření v kvantové mechanice

- Stav izotropního oscilátoru není po měření energie určen jednoznačně
- Musíme měřit nějaké další pozorovatelné

Kompatibilní pozorovatelné

Měření nové pozorovatelné nesmí znehodnotit předchozí výsledky

Přehled

1 Měření v kvantové částice

2 Kompatibilita pozorovatelných

3 Částice ve sféricky symetrickém potenciálu

Pozorovatelné s čistě bodovým spektrem

- Pozorovatelné $\hat{A}$ a $\hat{B}$ mají společné vlastní vektory

$$\hat{A}\psi_{i,j} = a_i\psi_{i,j}, \quad \hat{B}\psi_{i,j} = b_j\psi_{i,j}$$

- Vlastní vektory tvoří ON bázi
- $\forall a_i, b_j$ je vlastní vektor $\psi_{i,j}$ určen jednoznačně
- Po měření $\hat{A}$ (a_i) a $\hat{B}$ (b_j) je stav popsán $\psi_{i,j}$
- Opakování měření už stav nezmění

- $\hat{A}$ a $\hat{B}$ mají společné vlastní vektory $\Longrightarrow$ jsou kompatibilní
- Můžeme je měřit současně $\Longleftrightarrow$ ve stavu $\psi_{i,j}$ mají obě přesné hodnoty

Kompatibilita pozorovatelných

- $\hat{A}$ a $\hat{B}$ mají společné vlastní vektory — operátory komutují

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$$

- Obecnější podmínka, lze použít i pro operátory se spojitým spektrem

- $\hat{A}$ a $\hat{B}$ jsou kompatibilní $\Longleftrightarrow \left[\hat{A}, \hat{B}\right] = 0$
- $\left\{ \hat{A}^{(j)} \middle| j = 1, \dots k \right\}$ jsou kompatibilní $\Longleftrightarrow \left[\hat{A}^{(i)}, \hat{A}^{(j)}\right] = 0$ $\forall i, j = 1, \dots k$

Kompatibilita pozorovatelných

- Složky polohy jsou kompatibilní — $\left[\hat{Q}_i, \hat{Q}_j\right] = 0$
- Složky hybnosti jsou kompatibilní — $\left[\hat{P}_i, \hat{P}_j\right] = 0$
- Složky polohy a hybnosti ve stejném směru kompatibilní nejsou

$$\left[\hat{Q}_i, \hat{P}_j\right] = i\hbar\delta_{ij} \Longrightarrow \text{ relace neurčitosti}$$

- Složky momentu hybnosti nejsou kompatibilní

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

- $\hat{L}_j$ nemají společné vlastní vektory
- Moment hybnosti kvantové částice není vektor

Spin-$\frac{1}{2}$

- Spin — vlastní moment hybnosti

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

- Spin-$\frac{1}{2}$ — projekce do libovolného směru je $\pm\frac{\hbar}{2}$

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

- Operátor projekce spinu do osy z

$$\hat{S}_z|z,\pm\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}|z,\pm\rangle$$

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

Spin-$\frac{1}{2}$

- Operátor projekce spinu do osy x

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

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

- Operátor projekce spinu do osy y

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

$$S_y = \begin{pmatrix} \langle z,+|\hat{S}_y|z,+\rangle & \langle z,+|\hat{S}_y|z,-\rangle \\ \langle z,-|\hat{S}_y|z,+\rangle & \langle z,-|\hat{S}_y|z,-\rangle \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

Spin-$\frac{1}{2}$

- $\hat{S}_j$ nejsou kompatibilní — nemají společné vlastní vektory
- Vlastní vektory $\hat{S}_x$

$$
\begin{aligned}
|x,+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|z,+\rangle + |z,-\rangle) \\
|x,-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|z,+\rangle - |z,-\rangle)
\end{aligned}
$$

- Částice ve stavu $|z,+\rangle$, měřím projekci spinu do osy x
- Mohu naměřit obě hodnoty se stejnou pravděpodobností

$$
W_{x,+} = |\langle x,+|z,+\rangle|^2 = \frac{1}{2}, \quad W_{x,-} = |\langle x,-|z,+\rangle|^2 = \frac{1}{2}
$$

Měření $\hat{S}_z$ a $\hat{S}_x$ nejsou kompatibilní

- Částice ve stavu $|z,+\rangle$, měřím projekci spinu do osy x
- Naměřím kladnou projekci — stav částice je popsán ketem $|x,+\rangle$
- Měřím projekci spinu do osy z
- Mohu naměřit obě hodnoty se stejnou pravděpodobností

$$W_{z,+} = |\langle z,+|x,+\rangle|^2 = \frac{1}{2}, \quad W_{z,-} = |\langle z,-|x,+\rangle|^2 = \frac{1}{2}$$

Měření $\hat{S}_x$ smazalo informaci o předchozím měření $\hat{S}_z$

Úplná množina pozorovatelných

- $\left\{ \hat{A}^{(j)} \middle| j = 1, \dots k \right\}$ kompatibilní pozorovatelné
- Mají čistě bodová spektra
- Společné vlastní vektory

$$\hat{A}^{(j)}\psi_{n_1,\dots n_k} = \alpha_{n_j}^{(j)}\psi_{n_1,\dots n_k}, \quad j = 1, \dots k$$

- ÚMP $\Longleftrightarrow \forall \left\{ \alpha_{n_1}^{(1)}, \dots \alpha_{n_k}^{(k)} \right\}$ má vlastní podprostor dimenzi 1
- Po měření ÚMP je stav částice určen jednoznačně $\left\{ \alpha_{n_1}^{(1)}, \dots \alpha_{n_k}^{(k)} \right\}$, resp. kvantovými čísly $n_1, \dots n_k$
- Stav po měření je popsán společným vlastním vektorem $\psi_{n_1,\dots n_k}$ bez ohledu na stav před měřením
- Měření ÚMP lze použít k jednoznačné přípravě stavu
- Volba ÚMP — hamiltonián $\hat{H}$ + další kompatibilní pozorovatelné

Přehled

1. Měření v kvantové částice
2. Kompatibilita pozorovatelných
3. Částice ve sféricky symetrickém potenciálu

Částice ve sféricky symetrickém potenciálu

- Hamiltonián tvaru $\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2M} + V(r)$.
- $\hat{H}$, $\hat{L}^2$ a $\hat{L}_3$ jsou kompatibilní — společné vlastní funkce

$$\hat{L}_3\psi = \mu\psi, \quad \hat{L}^2\psi = \lambda\psi, \quad \hat{H}\psi = E\psi$$

- V kartézských souřadnicích — soustava PDR
- Ve sférických souřadnicích — separace proměnných — ODR

$$\begin{aligned}
\hat{L}_3 &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} \\
\hat{L}^2 &= -\hbar^2\left(\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right) \\
\hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hat{L}^2}{2Mr^2} + V(r).
\end{aligned}$$

Částice ve sféricky symetrickém potenciálu

- Společná vlastní funkce v separovaném tvaru

$$\psi(r, \theta, \varphi) = g(r) f(\theta) h(\varphi)$$

- Postupně řešíme ODR

$$\begin{aligned} \hat{L}_3\psi = \mu\psi &\quad\Longrightarrow\quad \text{ODR pro } h(\varphi) \\ \hat{L}^2\psi = \lambda\psi &\quad\Longrightarrow\quad \text{ODR pro } f(\theta) \\ \hat{H}\psi = E\psi &\quad\Longrightarrow\quad \text{ODR pro } g(r) \end{aligned}$$

Společné vlastní funkce $\hat{L}_3$ a $\hat{L}^2$

- Vlastní funkce $\hat{L}_3$ známe

$$h(\varphi) = e^{im\varphi}, \quad \mu = m\hbar, \quad m \in \mathbb{Z}$$

- Společná vlastní funkce s $\hat{L}^2$, substituce $t = \cos\theta$, $F(t) = f(\theta)$

$$\left((1-t^2)F'\right)' + \left(\frac{\lambda}{\hbar^2} - \frac{m^2}{1-t^2}\right) F = 0$$

- $F(t)$ musí být omezená na intervalu $\langle -1, 1)$
- Řešení lze hledat ve tvaru řady
- F je omezená $\Longleftrightarrow$ řada je konečná $\Longrightarrow$ podmínka na vlastní čísla

Společné vlastní funkce $\hat{L}_3$ a $\hat{L}^2$

- Vlastní čísla $\hat{L}^2$ — určená orbitálním kvantovým číslem l

$$\lambda = \hbar^2 l(l+1), \quad l \in \mathbb{Z}_+$$

- Omezení na magnetická kvantová čísla m

$$m = l, l-1, \ldots -l$$

- Společné vlastní funkce $\hat{L}_3$ a $\hat{L}^2$ — kulové funkce $Y_{l,m}$

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = C_{lm} P_l^m(\cos\theta) e^{im\varphi}$$

- Přidružené Legendreovy polynomy

$$P_l^m(t) = \frac{(1-t^2)^{\frac{m}{2}}}{2^l l!} \frac{d^{l+m}}{dt^{l+m}} (t^2-1)^l$$

Vlastnosti kulových funkcí

- Normalizace

$$C_{lm} = (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}}$$

- Kulové funkce tvoří ONB v prostoru $L^2(\langle 0,\pi) \times \langle 0, 2\pi), \sin\theta d\theta d\varphi)$
- $\hat{L}^2$ má čistě bodové spektrum

$$\sigma(\hat{L}^2) = \left\{\hbar^2 l(l+1) | l \in \mathbb{Z}_+\right\}$$

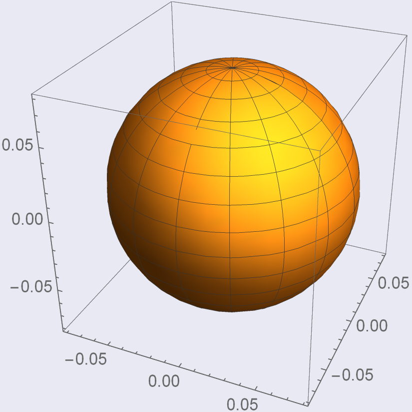
- Pro kulové funkce platí

$$\begin{aligned} \hat{L}_3 Y_{lm} &= m\hbar Y_{lm}, \quad m = l, l-1, \ldots -l, \\ \hat{L}^2 Y_{lm} &= \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}, \quad l \in \mathbb{Z}_+ \end{aligned}$$

Úhlové rozdělení hustoty pravděpodobnosti

$$w(\theta,\varphi) = |Y_{lm}(\theta,\varphi)|^2 \sim |P_l^m(\cos\theta)|^2$$

s-stav — $l = 0$



- Kulová funkce je konstantní

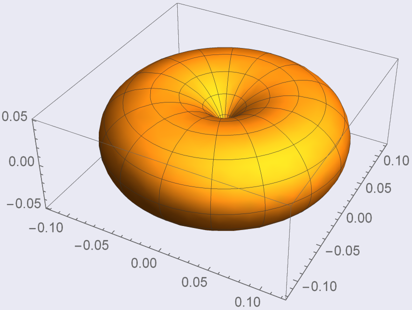
$$Y_{00}(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

- Rozdělení je sféricky symetrické

Úhlové rozdělení hustoty pravděpodobnosti — *p*-stavy

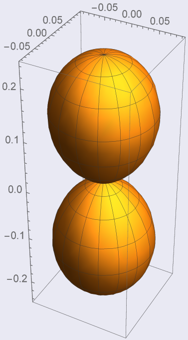
$l = 1,\ m = \pm 1$

$$Y_{1,\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{\pm i\varphi}$$



$l = 1,\ m = 0$

$$Y_{1,0}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta$$

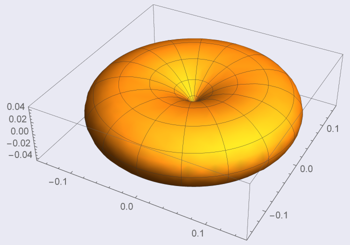


Úhlové rozdělení hustoty pravděpodobnosti — *d*-stavy

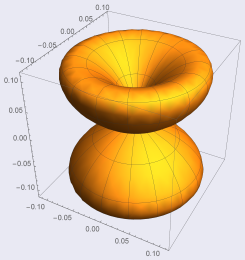
$$Y_{2,\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta e^{\pm 2i\varphi}, \quad Y_{2,\pm 1} = \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta - 1)$$

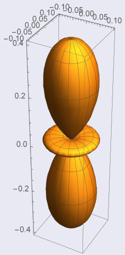
$l = 1,\ m = \pm 2$



$l = 1,\ m = \pm 1$



$l = 1,\ m = 0$



Rovnice pro radiální funkci

- Společná vlastní funkce $\hat{H}$, $\hat{L}^2$ a $\hat{L}_3$

$$\psi_{E,l,m}(r,\theta,\varphi) = g(r)Y_{l,m}(\theta,\varphi), \quad \hat{H}\psi_{E,l,m} = E\psi_{E,l,m}$$

- Substituce — $g(r) = \frac{\chi(r)}{r}$

$$\hat{H}_{ef}\chi = E\chi, \quad \hat{H}_{ef} = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2}{dr^2} + V_{ef}(r).$$

- Částice na polopřímce v efektivním potenciálu

$$V_{ef}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2}$$

- Kvadratická integrabilita + okrajová podmínka

$$\int_0^\infty |\chi(r)|^2 dr < \infty, \quad \chi(0) = 0$$