1. Matematyka Fizyki Kwantowej: Cześć Trzecia

Piotr Szańkowski

Ćwiczenia nr. 3 : Podstawowy aparatu matematycznego mechaniki kwantowej.

I. OPERATORY

Operator to odwzorowanie $\hat{A} : V \to V$, które działa na stan, w efekcie produkując inny stan:

$$\hat{A}\Psi = \Psi' \tag{1}$$

Operator jest liniowy gdy zachodzi

$$\hat{A}\,(a\,\Psi + b\,\Phi) = a\hat{A}\Psi + b\hat{A}\Phi \tag{2}$$

A. Operatory w skończenie wymiarowych przestrzeniach

Podobnie jak w przypadku wektorów, operatory można przedstawić w postaci macierzowej. Punktem wyjścia jest obserwacja, że ze względu na własność liniowości, aby określić działanie operatora na dowolny wektor wystarczy wiedzieć jak ten operator działa na wektory ortonormalnej bazy $\{\varphi_i\}_{i=1,\ldots,N}$.

$$\hat{A}\varphi_j = \varphi_j' = \sum_{i=1}^{N} \langle \varphi_i | \varphi_j' \rangle \varphi_i = \sum_{i=1}^{N} \langle \varphi_i | \hat{A}\varphi_j \rangle \varphi_i \tag{3}$$

Zestaw współczynników

$$\langle \varphi_i | \hat{A}\varphi_j \rangle \equiv \langle \varphi_i | \hat{A} | \varphi_j \rangle \equiv A_{i\,j} \tag{4}$$

nazywamy *elementami macierzowymi* operatora. Zobaczmy jak wygląda działanie operatora na dowolny stan w języku elementów macierzowych:

$$\hat{A}\Psi = \sum_{i=1}^{N} \hat{A} c_i \varphi_i = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} c_i A_{j\,i} \varphi_j = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{N} A_{1\,i} c_i \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^{N} A_{N\,i} c_i \end{bmatrix} \tag{5}$$

Co jest równe mnożeniu dwóch macierzy:

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{N} A_{1\,i} c_i \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^{N} A_{iN} c_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{1\,1} & \ldots & A_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{N1} & \ldots & A_{N\,N} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_N \end{bmatrix} \tag{6}$$

Przykłady —

1. W trójwymiarowej przestrzeni Euklidesowej wybierzmy ortonormalną bazę

$$\{ \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \} \tag{7}$$

W tej bazie, operator odbicia względem płaszczyzny xy jest zdefiniowany przez macierz

$$\hat{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}. \tag{8}$$

Takie $\hat{A}$ rzeczywiście odbije z-ową składową wektora:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ y \\ -z \end{bmatrix}. \tag{9}$$

2. W informatyce kwantowej jedną z podstawowych bramek logicznych jest bramka Hadamarda, która transformuje stany bazowe kubitu $\{\varphi_0, \varphi_1\}$ na ortonormalne stany:

$$\hat{H}\varphi_0 = \frac{\varphi_0 + \varphi_1}{\sqrt{2}} \equiv \varphi_+, \tag{10}$$

$$\hat{H}\varphi_1 = \frac{\varphi_0 - \varphi_1}{\sqrt{2}} \equiv \varphi_-. \tag{11}$$

Wykorzystamy tę definicję do obliczenia macierzy bramki Hadamarda:

$$H_{00} = \langle\varphi_0|\hat{H}\varphi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\langle\varphi_0|\varphi_1\rangle + \langle\varphi_0|\varphi_1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}\,, \tag{12}$$

$$H_{01} = \langle\varphi_0|\hat{H}\varphi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,, \tag{13}$$

$$H_{10} = \langle\varphi_1|\hat{H}\varphi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,, \tag{14}$$

$$H_{11} = \langle\varphi_1|\hat{H}\varphi_1\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}\,, \tag{15}$$

co nam daje

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} H_{00} & H_{01} \\ H_{10} & H_{11} \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}. \tag{16}$$

3. Za pewne bardzo dobrze pamiętasz, że mnożenie macierzy (a co za tym idzie działanie operatorów liniowych) nie jest przemienne

$$\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A} \tag{17}$$

B. Operatory w przestrzeniach funkcji falowych

W przypadku przestrzeni funkcji falowych o nieskończonych wymiarach nie można oczywiście zastosować macierzowego zapisu operatorów liniowych. Jednakże pojęcie elementu macierzowego operatora ciągle jest dobrze określone.

Dla przestrzeni z przeliczalną bazą, $\{\varphi_i(x)\}_{i=1,2,\ldots}$, definicję (4) zadziała równie dobrze:

$$A_{ij} = \langle\varphi_i|\hat{A}\varphi_j\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_i^*(x)(\hat{A}\varphi_j(x))dx, \tag{18}$$

z tą różnicą, że teraz mamy nieskończenie wiele elementów macierzowych. Działanie operatora na dowolny stan wyraża się przez nieskończone sumy:

$$\hat{A}\psi = \sum_{i=1}^{\infty} c_i \hat{A}\varphi_i = \sum_{i=1}^{\infty}\sum_{j=1}^{\infty} A_{ji} c_i \varphi_j(x). \tag{19}$$

Dla baz zawierających nieprzeliczalnie wiele funkcji, $\{\varphi_k(x)\}_{k\in\mathbb{R}}$, element macierzowy staje się funkcją od dwóch zmiennych:

$$A(k,k') = \langle\varphi_k|\varphi_{k'}\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_k^*(x)(\hat{A}\varphi_{k'}(x))dx, \tag{20}$$

a działanie operatora na dowolny stan ma postać podwójnej całki

$$\hat{A}\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dk\, c(k)\hat{A}\varphi_k(x) = \tag{21}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dk \int_{-\infty}^{\infty} dk' c(k) A(k',k)\varphi_{k'}(x) \tag{22}$$

Przykłady —

1. Operator różniczkowania:

$$\hat{D}_X\psi(x) = \frac{\partial}{\partial x}\psi(x). \tag{23}$$

2. Operator mnożenia przez x:

$$\hat{X}\psi(x) = x\psi(x) \tag{24}$$

3. Operator mnożenia przez funkcję f:

$$\hat{f}\psi(x) = f(x)\psi(x) \tag{25}$$

Zadania

Zadanie 6: Znajdź element macierzowy operatora różniczkowania $\hat{D}_X = \partial/\partial x$ w bazie fal płaskich $\{\varphi_k(x) = (2\pi)^{-1/2}\exp(-ikx)\}_{k\in\mathbb{R}}$.
Rozwiązanie —
Z definicji

$$\begin{aligned} D_X(k,k') = \langle\varphi_k|\hat{D}_X\varphi_{k'}\rangle &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx}\frac{\partial}{\partial x}e^{-ik'x}dx = \\ &= -\frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(k'-k)x} = -i\delta(k'-k) \end{aligned} \tag{26}$$

Zadanie 7: Znajdź element macierzowy operatora mnożenia przez x w bazie fal płaskich $\{\varphi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-ikx}\}_{k\in\mathbb{R}}$.
Rozwiązanie —
Z definicji

$$\begin{aligned} X(k,k') = \langle\varphi_k|\hat{X}\varphi_{k'}\rangle &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx}xe^{-ik'x}dx = \\ &= \frac{i}{2\pi}\frac{\partial}{\partial k'}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(k'-k)x} = i\frac{\partial}{\partial k'}\delta(k'-k) \end{aligned} \tag{27}$$

Zadanie 8: Znajdź element macierzowy operatora mnożenia przez funkcję f ($\hat{f} = f(x)$) w bazie fal płaskich.
Rozwiązanie —
Z definicji

$$\begin{aligned} f(k,k') = \langle\varphi_k|\hat{f}\varphi_{k'}\rangle &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx}f(x)e^{-ik'x}dx = \\ &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{-i(k'-k)x} = \frac{1}{2\pi}\mathcal{F}[f](k'-k)\,, \end{aligned} \tag{28}$$

gdzie $\mathcal{F}[f](k)$ to tzw. *transformata Fouriera* funkcji f.

II. HERMITOWSKIE SPRZĘŻENIE

Hermitowskie sprzężenie operatora, $\hat{A}^\dagger$, to operator zdefiniowany równaniem

$$\langle\hat{A}^\dagger\Psi|\Phi\rangle = \langle\Psi|\hat{A}\Phi\rangle, \tag{29}$$

dla dowolnej pary wektorów Φ i Ψ.

Sprawdźmy jaki jest związek między elementami macierzowymi $\hat{A}$ i $\hat{A}^\dagger$. W przestrzeni stanów o przeliczalnym wymiarze mamy:

$$(A^\dagger)_{ij} = \langle \varphi_i | \hat{A}^\dagger \varphi_j \rangle = \langle \hat{A}^\dagger \varphi_j | \varphi_i \rangle^* = \langle \varphi_j | \hat{A} \varphi_i \rangle^* = A^*_{ji} \tag{30}$$

Czyli: $(.)^\dagger = ((.)^T)^* = ((.)^*)^T$.

W przestrzeni o nieprzeliczalnym wymiarze:

$$(A^\dagger)(k, k') = \langle \varphi_k | \hat{A}^\dagger \varphi_{k'} \rangle = \langle \varphi_{k'} | \hat{A} \varphi_k \rangle^* = A^*(k', k), \tag{31}$$

przestawienie kolejności argumentów w elemencie macierzowym to ciągły odpowiednik transpozycji.

Zadania

Zadanie 9: Znajdź sprzężenie hermitowskie operatora różniczkowania $\hat{D} = \partial/\partial x$.

Rozwiązanie —

Z definicji operator sprzężonego (29):

$$\langle \phi | \hat{D} \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \phi^*(x) \left(\frac{\partial \psi(x)}{\partial x} \right) = \tag{32}$$

$$= \underbrace{\phi^*(x)\psi(x)\Big|_{-\infty}^{\infty}}_{\to 0} - \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\frac{\partial \phi(x)}{\partial x} \right)^* \psi(x) = \tag{33}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \left(-\frac{\partial}{\partial x} \phi(x) \right)^* \psi(x) = \langle \hat{D}^\dagger \phi | \psi \rangle, \tag{34}$$

a więc

$$\hat{D}^\dagger = -\hat{D}. \tag{35}$$

Zadanie 10: Znajdź sprzężenie hermitowskie operatora mnożenia przez funkcję rzeczywistą f.

Rozwiązanie —

Z definicji operator sprzężonego (29):

$$\langle \phi | \hat{f} \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \phi^*(x) \left(f(x) \psi(x) \right) = \tag{36}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(f(x)^* \phi(x) \right)^* \psi(x) = \tag{37}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \left(f(x) \phi(x) \right)^* \psi(x) = \langle \hat{f}^\dagger \phi | \psi \rangle, \tag{38}$$

a więc

$$\hat{f}^\dagger = \hat{f}. \tag{39}$$

III. WIDMO OPERATORA

Każdy operator posiada zestaw wektorów, które przekształcają się pod wpływem tego operatora w bardzo prosty sposób

$$\hat{A} \phi_a = a \phi_a \tag{40}$$

gdzie a jest liczbą (może być 0 lub dowolna inna liczba zespolona). Liczba a to wartość własna operatora $\hat{A}$ odpowiadająca wektorowi własnemu ϕ_a.

Widmo (spektrum) operatora to zbiór wszystkich jego wartości własnych.

W mechanice kwantowej operatory reprezentują wielkości fizyczne, takie jak pęd, moment pędu itd. Wartości własne, to możliwe wartości jakie dana wielkość fizyczna może przyjmować (stąd kwantyzacja niektórych wielkości fizycznych). Wektory własne operatora, to stany układu, w których dana wielkość fizyczna przyjmuje konkretną wartość.

W związku z tą interpretacją, żądamy aby operator reprezentujący jakąś wielkość fizyczną miał tylko rzeczywiste wartości własne. Jak się okazuje, operatory *samosprzężone* lub *hermitowskie* spełniają to żądanie.

A. Własności operatorów samosprzężonych

Operator $\hat{H}$ nazywamy hermitowskim jeśli zachodzi

$$\hat{H}^\dagger = \hat{H} \tag{41}$$

Można pokazać, że:

1. Wszystkie wartości własne są rzeczywiste
2. Każdy operator hermitowski ma dim$V$ wartości własnych, którym odpowiada dim$V$ wektorów własnych (dim$V$ to wymiar przestrzeni Hilberta, której działa operator $\hat{H}$)
3. Wektory własne, którym odpowiadają różne wartości własne są wzajemnie ortogonalne

Druga i trzecia własność implikuje, że z wektorów własnych hermitowskiego operatora możemy skonstruować ortonormalną bazę!

B. Problem własny: przypadek skończenie wymiarowy

Problem własny, czyli problem polegający na wyznaczeniu widma i wektorów własnych operatora. W przypadku skończenie wymiarowych przestrzeni jest to dobrze znany z algebry elementarnej problem znalezienia wartości i wektorów własnych macierzy $N \times N$. Opiszemy tu krok po kroku procedurę prowadzącą do rozwiązania.

1. Wybieramy dowolną bazę $\{\varphi_i\}_{i=1,\ldots,N}$
2. Wyznaczamy macierz operator $\hat{H}$ w wybranej bazie, tj. obliczamy elementy macierzowe
$$H_{ij} = \langle \varphi_i | \hat{H} \varphi_j \rangle, \tag{42}$$
a następnie układamy te elementy w tablicę (reprezentację macierzową):
$$\begin{bmatrix} H_{11} & \ldots & H_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{N1} & \ldots & H_{NN} \end{bmatrix} \tag{43}$$
3. Wypisujemy równanie własne
$$\begin{bmatrix} H_{11} & \ldots & H_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{N1} & \ldots & H_{NN} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1^{(e)} \\ \vdots \\ c_N^{(e)} \end{bmatrix} = e \begin{bmatrix} c_1^{(e)} \\ \vdots \\ c_N^{(e)} \end{bmatrix} \tag{44}$$
$$\Leftrightarrow \begin{bmatrix} H_{11} - e & \ldots & H_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{N1} & \ldots & H_{NN} - e \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1^{(e)} \\ \vdots \\ c_N^{(e)} \end{bmatrix} = 0, \tag{45}$$
gdzie e to szukana wartość własna a $c_i^{(e)}$ to współczynniki rozkładu wektora własnego odpowiadającego tej wartości własnej.
4. Równanie (45) ma nietrywialne rozwiązanie (tzn. $\phi_e \neq 0$) wtedy i tylko wtedy gdy
$$\det \begin{bmatrix} H_{11} - e & \ldots & H_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{N1} & \ldots & H_{NN} - e \end{bmatrix} = 0 \tag{46}$$
5. Rozwiązujemy równanie (46). Pierwiastki tego równania to wartości własne $\{e_i\}_{i=1,\ldots,N}$ (hermitowskie operatory mają zawsze N takich pierwiastków).

6. Wektor własny,

$$\phi_i = \begin{bmatrix} c_1^{(e_i)} \\ \vdots \\ c_N^{(e_i)} \end{bmatrix}, \tag{47}$$

odpowiadający danej wartości własnej e_i znajdujemy podstawiając tą wartość własną do równania własnego (44) co daje nam układ N równań na N współczynników rozkładu $c_j^{(e_i)}$.

Zadania

Zadanie 11: Pokaż, że operator Hadamarda jest hermitowski.
Rozwiązanie —

$$\hat{H}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1^* & 1^* \\ 1^* & -1^* \end{bmatrix}^T = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} = \hat{H} \tag{48}$$

Zadanie 12: Znajdź widmo i funkcje własne operatora Hadamarda.

C. Problem własny: przypadek nieskończenie wymiarowy

Metoda opisana w poprzedniej sekcji działa tylko i wyłącznie w przypadku skończonego wymiaru przestrzeni, kiedy możemy użyć reprezentacji macierzowej operatorów i wektorów. W przypadku nieskończenie wymiarowych należy rozwiązać równanie własne

$$\hat{H}\phi(x) = E\phi(x), \tag{49}$$

które za zwyczaj jest pewnym liniowym, cząstkowym równaniem różniczkowym, a co za tym idzie, nie można podać prostej recepty na rozwiązanie tego problemu. Można powiedzieć, że wszelkie zagadnienia mechaniki kwantowej, w końcu sprowadzą się do znalezienia rozwiązań równania własnego (49).

Zadania

Zadanie 13: Pokaż, że operator pędu $\hat{P} = -i\hat{D} = -i\partial/\partial x$ jest hermitowski.

Zadanie 14: Znajdź widmo i stany własne operatora pędu $\hat{P} = -i\partial/\partial x$.
Rozwiązanie —
Wypisujemy równanie własne dla operatora $\hat{P}$:

$$-i\hbar \frac{\partial \phi_p(x)}{\partial x} = p\phi_p(x). \tag{50}$$

Podstawiamy postać rozwiązania $\phi_p(x) = a\exp(\lambda x)$ do równania (50):

$$-i\hbar\lambda e^{\lambda x} = pe^{\lambda x}, \tag{51}$$

stąd dostajemy, że

$$\lambda = i\frac{p}{\hbar}, \tag{52}$$

A więc operator $\hat{p}$ ma nieprzeliczalnie wiele wartości własnych $p \in \mathbb{R}$, mówimy, że $\hat{p}$ ma widmo ciągłe. Każdej wartości własnej odpowiada funkcja własna dana wzorem

$$\psi_p(x) = ae^{i\frac{px}{\hbar}}. \tag{53}$$

Odpowiednio dobierając współczynnik a możemy skonstruować z ϕ_p bazę ortonormalną:

$$\langle \phi_p | \phi_{p'} \rangle = |a|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-i(p-p')x/\hbar} = 2\pi\hbar |a|^2 \delta(p - p'). \tag{54}$$

Zgodnie z konwencją normujemy wybieramy $a = (2\pi\hbar)^{-1/2}$.

IV. RELACJE KOMUTACJI

Komutator operatorów jest zdefiniowany jako

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}. \tag{55}$$

Zadania

Zadanie 15: Oblicz komutator operatorów położenia $\hat{X}\psi(x) = x\psi(x)$ i pędu $\hat{P}\psi(x) = -i\hbar\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}$.

Rozwiązanie —

Komutator operatorów jest operatorem, sprawdzimy bezpośrednim rachunkiem jak on działa na dowolną funkcję falową:

$$[\hat{X}, \hat{P}]\psi(x) = \hat{X}(\hat{P}\psi(x)) - \hat{P}(\hat{X}\psi(x)) = \tag{56}$$

$$= -i\hbar\hat{X}\frac{\partial\psi(x)}{\partial x} + i\hbar\frac{\partial x\psi(x)}{\partial x} = \tag{57}$$

$$= -i\hbar\left(x\frac{\partial\psi(x)}{\partial x} - \psi(x) - x\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}\right) = \tag{58}$$

$$= i\hbar\psi(x), \tag{59}$$

a więc

$$[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar\hat{I}, \tag{60}$$

gdzie $\hat{I}$ to identyczność - operator, który nie robi nic: $\hat{I}\psi = \psi$.

Zadanie 16: Dane są dwa operatory hermitowskie $\hat{A}$ i $\hat{B}$. Pokaż, że jeśli A i B komutują (są przemienne), to wektory własne operatora $\hat{A}$ są też wektorami własnymi operatora $\hat{B}$.

Rozwiązanie —

Z założenia mamy, że

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0 \Rightarrow \hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}. \tag{61}$$

Niech ϕ_a będzie wektorem własnym $\hat{A}$ odpowiadający wartości własnej a:

$$\hat{A}\phi_a = a\phi_a. \tag{62}$$

Teraz podziałajmy komutatorem A z B na ten stan:

$$0 = [\hat{A}, \hat{B}]\phi_a = \hat{A}(\hat{B}\phi_a) - \hat{B}(\hat{A}\phi_a) = \hat{A}(\hat{B}\phi_a) - a\hat{B}\phi_a, \tag{63}$$

stąd

$$\hat{A}(\hat{B}\phi_a) = a(\hat{B}\phi_a), \tag{64}$$

a więc wektor $\phi' = \hat{B}\phi_a$ także jest wektorem własnym $\hat{A}$*o tej samej* wartości własnej co ϕ_a. Stąd wynika, że ϕ' musi być proporcjonalny do ϕ_a (dlaczego?), czyli:

$$\phi' = \hat{B}\phi_a = b\phi_a, \tag{65}$$

gdzie b jest liczbą. Równanie (65) oznacza, że ϕ_a jest także stanem własnym $\hat{B}$ z wartością własną równą stałej proporcjonalności b.

Wnioski —

Gdy obserwable A i B są reprezentowane przez komutujące operatory hermitowskie zawsze można wybrać bazę ortonormalną, która będzie złożona z wektorów własnych obu operatorów. Innymi słowy, jeśli układ jest w stanie o określonej wartości wielkości A to także ma określoną wartość B.

Zadanie 17: Dane są dwa operatory hermitowskie $\hat{A}$ i $\hat{B}$, które mają nieznikający komutator: $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$. Pokaż, że nie jest możliwe jednoczesne zmierzenie wartości wielkości fizycznej A i B z dowolną dokładnością (*Zasada nieoznaczoności Heisenberga*).

Wstęp —

Załóżmy, że układ znajduje się w stanie Ψ. W ogólności Ψ jest superpozycją stanów własnych A lub B:

$$\Psi = \sum_i c_i^{(A)} \phi_{a_i} = \sum_i c_i^{(B)} \phi_{b_i}, \tag{66}$$

gdzie ϕ_{a_i} (ϕ_{b_i}) to stany własne operatora $\hat{A}$ ($\hat{B}$) odpowiadające wartościom własnym a_i (b_i) (WAŻNE: $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$ stany własne A nie są stanami własnymi B!). Wykonując pomiar wielkości A (lub B) nie możemy być pewni jaki wynik otrzymamy. Mechanika kwantowa pozwala nam przewidzieć prawdopodobieństwo otrzymania danego wyniki, np. pomiar A na stanie Ψ da a_i z prawdopodobieństwem $|c_i^{(A)}|^2$, itp.

Innym ważnym pytaniem jakie możemy zadać w takiej sytuacji jest: *jaką wartość A (B) otrzymamy jeśli wielokrotnie (idealnie - nieskończenie wiele razy) powtórzymy pomiar na identycznie przygotowanych stanach Ψ?* Innymi słowy, jaka jest wartość średnia A (B)? Odpowiedź jest dana przez wzór

$$\langle \hat{A} \rangle \equiv \langle \Psi | \hat{A} \Psi \rangle. \tag{67}$$

Jak w każdym problemie natury probabilistycznej sama wartość średnia niesie tylko część interesujących informacji. Najprostszą wielkością, która informuje nas o dokładności estymacji mierzonej wielkości przy pomocy średniej jest *dyspersja*, zdefiniowana jako średni kwadrat odchylenia od wartości średniej:

$$\sigma_A^2 \equiv \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle = \langle \hat{A}^2 \rangle - (\langle \hat{A} \rangle)^2. \tag{68}$$

Zauważ, że dla stanu własnego $\hat{A}$ dyspersja znika:

$$\langle \phi_a | \hat{A}^2 \phi_a \rangle = a^2 ||\phi_a||^2 = a^2 = \langle \phi_a | \hat{A} \phi_a \rangle^2. \tag{69}$$

Nasze zadanie będzie polegać na pokazaniu, że jeśli A nie komutuje z B, to jeśli na jakimś stanie dyspersja jednej wielkości maleje, to dyspersja drugiej rośnie.

Zadania pomocnicze —

Na początek zdefiniujemy kilka wielkości i pokażemy parę faktów, które później nam się przydadzą.

1. *Odchylenie od średniej*:

$$\overline{\hat{A}} \equiv \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle \,, \tag{70}$$

$$\overline{\hat{B}} \equiv \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle \,. \tag{71}$$

   Własności tych operatorów niewiele się różnią od własności oryginałów:

$$\overline{\hat{A}}^\dagger = \hat{A}^\dagger - \langle \hat{A} \rangle^* = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle = \overline{\hat{A}}, \tag{72}$$

$$\langle \overline{\hat{A}} \rangle = \langle \hat{A} \rangle - \langle \langle \hat{A} \rangle \rangle = 0, \tag{73}$$

$$\langle (\overline{\hat{A}})^2 \rangle = \sigma_A^2, \tag{74}$$

   i analogicznie dla B. Operatory z kreską mają taki sam komutator jak operatory oryginalne:

$$[\overline{\hat{A}}, \overline{\hat{B}}] = (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)(\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) - (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle)(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) = \tag{75}$$

$$= \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = [\hat{A}, \hat{B}], \tag{76}$$

   bo liczby komutują z dowolnym operatorem.

2. Sprzężenie hermitowskie iloczynu operatorów:

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger, \tag{77}$$

co natychmiast widać z definicji operatora sprzężonego:

$$
\begin{aligned}
\langle\Psi|\hat{A}\hat{B}\Psi\rangle &= \langle\hat{A}^\dagger\Psi|\hat{B}\Psi\rangle = \\
&= \langle\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger\Psi|\Psi\rangle,
\end{aligned}
\tag{78}
$$

z drugiej strony mamy, że

$$
\langle\Psi|(\hat{A}\hat{B})\Psi\rangle = \langle(\hat{A}\hat{B})^\dagger\Psi|\Psi\rangle,
\tag{79}
$$

skąd wynika równość (77).

3. Komutator operatorów też jest operatorem. Dla wygody nazwiemy ten operator:

$$
[\hat{A},\hat{B}] \equiv i\hbar\hat{C},
\tag{80}
$$

wtedy $\hat{C}$ jest operatorem hermitowskim (można to sprawdzić bezpośrednim rachunkiem). Porównaj tą definicją z komutatorem położenia i pędu:

$$
[\hat{X},\hat{P}] = i\hbar\hat{I},
\tag{81}
$$

w tym przypadku $\hat{C} = \hat{I}$.

Rozwiązanie —

Przejdźmy do właściwego zadania. Zacznijmy od zdefiniowania pomocniczego operatora

$$
\hat{G} \equiv \overline{\hat{A}} + i\lambda\overline{\hat{B}},
\tag{82}
$$

gdzie λ jest dowolną liczbą rzeczywistą. Dla dowolnego stanu zachodzi:

$$
0 \leqslant ||\hat{G}\Psi||^2 = \langle\hat{G}\Psi|\hat{G}\Psi\rangle,
\tag{83}
$$

wykorzystujemy definicję operatora sprzężonego

$$
0 \leqslant \langle\Psi|\hat{G}^\dagger\hat{G}\Psi\rangle.
\tag{84}
$$

Obliczamy sprzężenie $\hat{G}$ na boku,

$$
\hat{G}^\dagger = \overline{\hat{A}}^\dagger + (i\lambda)^*\overline{\hat{B}}^\dagger = \overline{\hat{A}} - i\lambda\overline{\hat{B}},
\tag{85}
$$

gdzie użyliśmy własności (72). Wstawiamy ten wynik i wymnażamy operatory $\hat{G}^\dagger$ i $\hat{G}$:

$$
0 \leqslant \langle\overline{\hat{A}}^2 + \lambda^2\overline{\hat{B}}^2 - i\lambda(\overline{\hat{A}\hat{B}} - \overline{\hat{B}\hat{A}})\rangle.
\tag{86}
$$

Zgodnie z (74), (76) i (80) dostajemy:

$$
0 \leqslant \sigma_A^2 + \lambda^2\sigma_B^2 + \lambda\hbar\langle\hat{C}\rangle.
\tag{87}
$$

Nierówność ta musi być spełniona dla dowolnego λ, a to oznacza, że wyróżnik dwumianu z prawej strony musi być nie dodatni:

$$
\Delta = \hbar^2\langle\hat{C}\rangle^2 - 4\sigma_A^2\sigma_B^2 \leqslant 0,
\tag{88}
$$

stąd dostajemy *zasadę nieoznaczoności Heisenberga*:

$$
\sigma_A^2\sigma_B^2 \geqslant \frac{\hbar^2}{4}\langle\hat{C}\rangle^2,
\tag{89}
$$

wracając do oryginalnych oznaczeń

$$
\langle(\hat{A} - \langle A\rangle)^2\rangle\langle(\hat{B} - \langle\hat{B}\rangle)^2\rangle \geqslant \frac{1}{4}|\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle|^2.
\tag{90}
$$