Kompatibilní a nekompatibilní veličiny, komutátory

definice:

komutátor $[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ (když $[\hat{A},\hat{B}]=0$, lze zaměňovat pořadí působení $\hat{A},\hat{B}$)

1) $[\hat{A},\hat{B}]=0$ ($\hat{A},\hat{B}$ komutují) $\rightarrow$ veličiny A, B jsou kompatibilní

2) $[\hat{A},\hat{B}]\neq 0$ ($\hat{A},\hat{B}$ nekomutují) $\rightarrow$ veličiny A, B jsou nekompatibilní

Př. poloha a hybnost

v 1D: výpočet provedeme v souřadnicové reprezentaci $\hat{x} \rightarrow x \quad \hat{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$

$$[\hat{x},\hat{p}]\psi(x) = (\hat{x}\hat{p}-\hat{p}\hat{x})\psi(x) = x\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\psi(x) - \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}x\psi(x) = x\frac{\hbar}{i}\frac{d\psi}{dx} - \frac{\hbar}{i}x\frac{d\psi}{dx} - \frac{\hbar}{i}\psi$$

$= i\hbar\psi$ $\rightarrow$ komutátor je konstanta $[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar$ (precizněji $[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar\hat{1}$)

ve 3D: operátory složek polohy $\hat{x},\hat{y},\hat{z}$ – triviální působení v souř. reprezentaci

operátory složek hybnosti $\hat{p}_x \rightarrow \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$, $\hat{p}_y \rightarrow \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}$, $\hat{p}_z \rightarrow \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}$

$[\hat{x},\hat{p}_x] = i\hbar \quad [\hat{y},\hat{p}_y] = i\hbar \quad [\hat{x},\hat{p}_y] = 0 \quad [\hat{y},\hat{p}_x] = 0$ apod.

1 Kompatibilní veličiny – společné vlastní stavy

veličiny A, B s komutujícími operátory $\hat{A},\hat{B}$, t.j. $[\hat{A},\hat{B}]=0$

důsledky nulového komutátoru:

- Je-li $|\psi\rangle$ vlastní stav $\hat{A}$ s vlastní hodnotou α, pak $|\varphi\rangle = \hat{B}|\psi\rangle$ je rovněž vlastní stav $\hat{A}$ se stejnou vlastní hodnotou α.

  odvození: $\hat{A}|\psi\rangle = \alpha|\psi\rangle \rightarrow \hat{A}|\varphi\rangle = \hat{A}\hat{B}|\psi\rangle = \hat{B}\hat{A}|\psi\rangle = \hat{B}\alpha|\psi\rangle = \alpha|\varphi\rangle$

- Lze najít úplný soubor společných vlastních stavů $\hat{A}$ a $\hat{B}$

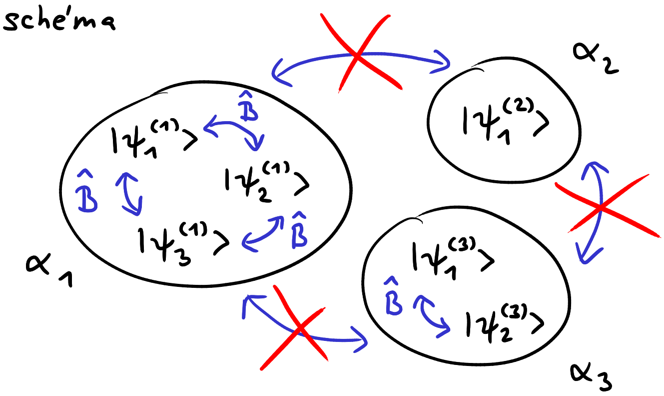
  odvození: 1. vlastní stavy $\hat{A}$ tvoří disjunktní podprostory Hilbertova prostoru

  2. podle 1. důsledku působení operátoru $\hat{B}$ na vl. stavy $\hat{A}$ nevede k opuštění (ani částečnému) příslušného podprostoru

  $\rightarrow$ vlastní podprostory $\hat{A}$ jsou invariantní vůči působení $\hat{B}$

  3. v každém podprostoru můžeme diagonalizovat $\hat{B}$ a najít tak společné vl. stavy $\hat{A}$ a $\hat{B}$

schéma



diagonalizace v rámci α_3 podprostoru

$$\hat{B}|\psi_1^{(3)}\rangle = B_{11}|\psi_1^{(3)}\rangle + B_{21}|\psi_2^{(3)}\rangle$$
$$\hat{B}|\psi_2^{(3)}\rangle = B_{12}|\psi_1^{(3)}\rangle + B_{22}|\psi_2^{(3)}\rangle$$

diag.

$$\hat{B}|\alpha_3\beta_1^{(3)}\rangle = \beta_1^{(3)}|\alpha_3\beta_1^{(3)}\rangle$$
$$\hat{B}|\alpha_3\beta_2^{(3)}\rangle = \beta_2^{(3)}|\alpha_3\beta_2^{(3)}\rangle$$

- obecně - společné vlastní stavy $|\alpha_m \beta_n^{(m)}\rangle$: $\hat{A}|\alpha_m \beta_n^{(m)}\rangle = \alpha_m |\alpha_m \beta_n^{(m)}\rangle$

$\hat{B}|\alpha_m \beta_n^{(m)}\rangle = \beta_n^{(m)} |\alpha_m \beta_n^{(m)}\rangle$

- při měření takové stavy poskytnou ostrou hodnotu $A = \alpha_m$ i $B = \beta_n^{(m)}$

- využití symetrie systému při hledání vlastních stavů $\hat{H}$

symetrie systému - Hamiltonián komutuje s operátorem spojeným s danou symetrií (je invariantní vůči dané operaci symetrie)

→ lze hledat společné vlastní stavy

→ předchystaný symetrický tvar vlastních stavů $\hat{H}$

Př. vlastní stavy částice v symetrickém 1D potenciálu splňujícím $V(-x) = V(x)$

operátor symetrie - operátor parity $\hat{\pi}$ s působením $\hat{\pi} f(x) = f(-x)$

Hamiltonián $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$ komutuje s $\hat{\pi}$: $[\hat{H}, \hat{\pi}] = 0$

tj. nezávislá na pořadí aplikace $\hat{H}$ (vyčíslení energie) a $\hat{\pi}$ (záměna $x \to -x$)

vlastní funkce $\hat{\pi}$ jsou sudé a liché funkce:

$$\hat{\pi} f(x) = f(-x) = \lambda f(x) \quad \to \quad \lambda = +1 \text{ sudé}, \quad \lambda = -1 \text{ liché}$$

(formálně důsledkem $\hat{\pi}^+ = \hat{\pi}$ a $\hat{\pi}^2 = 1$ → reálné vl. hodnoty λ splňující $\lambda^2 = 1$)

→ podle věty o společných vl. stavech hledáme řešení $\hat{H}\psi = E\psi$ ve tvaru sudých a lichých ψ

2 Nekompatibilní veličiny - princip neurčitosti

- důsledek nenulového komutátoru $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$: zobecněný Heisenbergův princip neurčitosti

$$\sqrt{\langle(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle)^2\rangle}\sqrt{\langle(\hat{B} - \langle\hat{B}\rangle)^2\rangle} \geq \frac{1}{2}|\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle| \quad \text{pro libovolný stav } |\psi\rangle$$

zkráceně $\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2}|\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle|$, kde ΔA je neurčitost zavedená jako

$$\Delta A = \sqrt{\langle(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle)^2\rangle} \quad \text{(střední kvadratická odchylka od střední hodnoty)}$$

odvození: počítejme normu $|\varphi\rangle = (\alpha\hat{A} + i\hat{B})|\psi\rangle$, kde α je libovolné reálné číslo

$$\langle\varphi|\varphi\rangle = \langle\psi|(\alpha\hat{A} - i\hat{B})(\alpha\hat{A} + i\hat{B})|\psi\rangle = \alpha^2\langle\hat{A}^2\rangle + \langle\hat{B}^2\rangle + \alpha\, \underbrace{i\langle\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\rangle}_{\text{reálné } K \text{ (zkusit +)}}$$

norma ≥ 0 pro $\forall\alpha$ → diskriminant rovnice v α ≤ 0

diskriminant $= K^2 - 4\langle A^2\rangle\langle B^2\rangle \leq 0 \quad \to \quad \langle A^2\rangle\langle B^2\rangle \geq \frac{1}{4}K^2$

dále nahradíme $\hat{A} \to \hat{A} - \langle A\rangle$, $\hat{B} \to \hat{B} - \langle B\rangle$ - komutátor nezměněn

Pozn. I když je komutátor $[\hat{A},\hat{B}] = \hat{C}$ nenulový operátor, může existovat stav s $\langle\hat{C}\rangle = 0$ a potom je přípustné $\Delta A = 0$ při konečném ΔB a naopak nebo dokonce $\Delta A = \Delta B = 0$

Př. relace neurčitosti poloha – hybnost

- speciální případ s konstantním $[\hat{A},\hat{B}]$, kdy nezáleží na stavu

$\hat{A} = \hat{x}$, $\hat{B} = \hat{p}$: $\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{1}{2} |\langle[\hat{x},\hat{p}]\rangle| = \frac{1}{2}\hbar$, protože $[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar$

- rovnost naplňuje např. základní stav HO s $\Delta x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$ a $\Delta p = \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}$
- vztah reciprocity mezi Δx a Δp byl dobře patrný u vlnových balíků:

  balík úzký v prostoru (malé Δx) $\longleftrightarrow$ široké spektrum zastoupených vln (velké Δp)

- relace umožňuje „kvalifikovaný" hrubý odhad energie základního stavu v jednoduchých případech (viz cvičení)