

# Kapitola 1

## Fyzikálna motivácia

*Quantum mechanics is magic.*

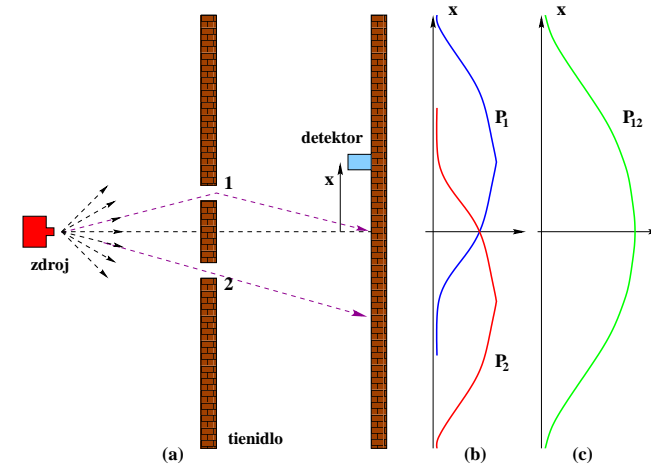
Daniel M. Greenberger

Historicky kvantová mechanika vznikla ako teória popisu mikroskopických fyzikálnych objektov (atómov), dynamika ktorých sa neradi zákonmi klasickej fyziky. Predovšetkým to bol vlnovo-časticový dualizmus, t.j. fakt, že objekty, ktoré sme štandardne popisovali ako častice, sa v istých situáciách správajú ako vlny (a naopak, t.j. vlny sa správajú ako častice), vysvetlenie ktorého podmienilo vznik kvantovej teórie. Jedným zo zaujímavých aspektov vzniku kvantovej mechaniky sú i jej epistemologické dôsledky – fyzika opúšťa doménu intuitívne akceptovaných pojmov (viac-menej intuitívne vieme, čo je to makroskopický objekt, napr. kyvadlo, vieme, čo asi znamená pojem poloha či hybnosť, dokonca naša intuícia nám i napovie ako máme pozorovať kyvadlo a určiť jeho polohu) a začíname používať abstraktné pojmy, ktoré nie sú odvodené od našej “makroskopickej” skúsenosti. Navyiac, kvantová teória nedáva odpovede na otázky typu “prečo”, dáva nám však odozvy na otázky “ako”. Je to “kuchárska kniha”, pomocou ktorej vieme spočítať pravdepodobnosti istých procesov, resp. korelácie medzi prípravou a meraním konkrétnych fyzikálnych systémov.

Napriek tomu, že vo svojich prednáškach sa budem venovať predovšetkým formálnym a konceptuálnym aspektom kvantovej teórie, považujem za rozumné začať našu diskusiu fyzikálnou motiváciou. V prvej časti tejto kapitoly sa oboznámime s princípom *superpozície*, ktorý pridávajú kvantovej mechanike príchut’ “magickosti”. Povieme si niečo o vlnovo-časticovom dualizme a naučíme sa niektoré základné pravidlá kvantovej mechaniky. V druhej časti sa budem venovať popisu polarizačných vlastností svetla, pomocou ktorých prirodzeným spôsobom zavediem pojem *stavu* fyzikálneho systému.

### 1.1 Princíp superpozície

Najprv budeme analyzovať ako sa klasické častice správajú pri prechode štrbín na tienidlo. Potom sa pozrieme ako sa cez takéto štrbiny šíria klasické vlny (napríklad, vlny na vodnej hladine). Nakoniec budeme analyzovať čisto kvantovú situáciu keď cez dve štrbiny prechádza lúč elektrónov.



Obrázok 1.1: Dvojštrbinový experiment s klasickými časticami.

#### 1.1.1 Dvojštrbinový experiment s klasickými časticami

Predstavme si, že máme k dispozícii zdroj klasických častíc (napr. nábojov), ktoré vyletujú zo zdroja rovnakou rýchlosťou náhodnými smermi (viď. obr. 1.1). Pred takýmto zdrojom je prekážka s jednou štrbinou. Predpokladáme, že ak častica dopadne na prekážku, úplne sa prekážkou “pohltnú”, t.j. neodrazí sa od nej. Priemer štrbiny je väčší ako veľkosť častíc. Častice teda stredom štrbiny prelietajú bez prekážky. Na krajoch štrbiny sa však ich smer môže meniť (napríklad, v dôsledku odrazu na kraji štrbiny). Následne na tienidle za štrbinou môžeme pozorovať (merať pomocou detektoru) koľko častíc  $N(x)$  priletí do istého bodu  $x$ . Podielom počtu častíc v bode  $x$  k celkovému počtu  $N$  častíc, ktoré preleteli štrbinou dostaneme v limite veľkých  $N$  pravdepodobnostné rozdelenie  $P(x)$  častíc na tienidlo. Konkrétny tvar tohoto pravdepodobnostného rozdelenia závisí od konkrétnej fyzikálnej situácie. Vo všeobecnosti je to však hladká funkcia s maximom na spojnici medzi zdrojom častíc a centrom štrbiny.

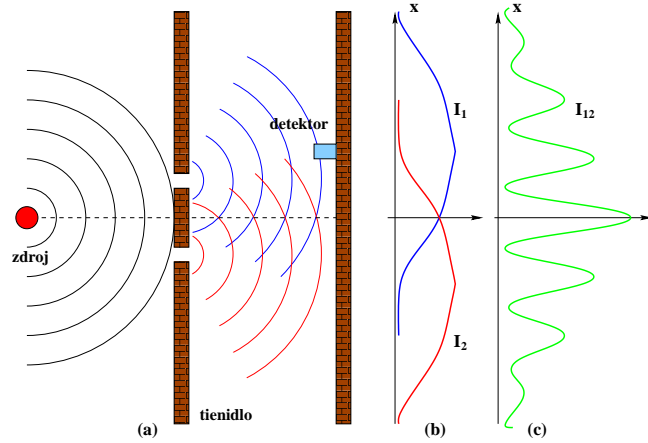
Predstavme si teraz, že na prekážke sú dve štrbiny (pozri obr. 1.1). Častice môžu náhodne prelietať cez jednu či druhú štrbinu, v dôsledku čoho na tienidle dostaneme pravdepodobnostné rozdelenie častíc  $P_{12}$ , ktoré je sumou pravdepodobnostného rozdelenia získaného pri prelete častíc cez štrbinu číslo 1 a číslo 2, t.j.

$$P_{12} = P_1 + P_2. \quad (1.1)$$

V tomto prípade sa teda pravdepodobnostné rozdelenia jednoducho sčítajú. Znamená to, že dva procesy, t.j. prelet cez štrbiny 1 a 2 sú úplne nezávislé. Navyiac, v klasickej fyzike, môžeme ľahko priebežne zisťovať, ktorá častica preletela ktorou štrbinou. Mohli by sme napríklad do každej štrbiny nainštalovať malé farbivé zariadenia (spraye).<sup>2</sup> Častice letiace cez štrbinu 1 by sa nafarbili na modro, častice letiace cez štrbinu 2 by sa nafarbili na červeno. Na tienidle by sme potom hravo mohli určiť, ktorá častica preletela cez ktorú štrbinu.

<sup>1</sup>Dôležitým aspektom tejto úvahy je, že častice sa pri prelete štrbinou nedrobia na kúsky, t.j. dopadajú na tienidlo v svojom pôvodnom tvare.

<sup>2</sup>Tieto farbivé zariadenia, fungujú tak, že nemenia dráhu letu častíc.

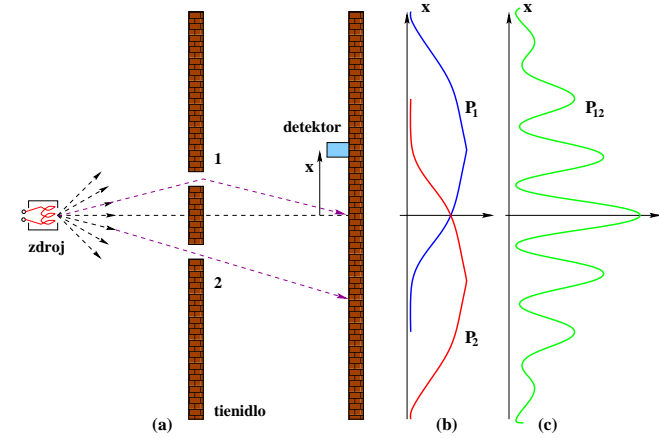


Obrázok 1.2: Dvojštřbinový experiment s vlnami na vodnej hladine.

### 1.1.2 Dvojštřbinový experiment s vlnami

Predstavme si teraz vodnú plochu ohraničenú stenami absorbujúcimi vlny. V strede tejto plochy je zariadenie, ktoré vytvára kruhové vlny. Dostatočne ďaleko od centra týchto kruhových vln je prepážka s dvoma štřbinami, cez ktoré môže exitácia (vlna) na vodnej hladine prechádzať ďalej. Za touto prekážkou sa v istej vzdialenosti nachádza ďalšia bariéra, ktorá úplne pohlcuje vlny. Pred touto bariérou umiestnime detektor, ktorý meria výšky (amplitúdu) vlny v bode  $x$  (pozri obr. 1.2). Štvorec amplitúdy vlny je proporcionálny intenzite vlny v danom bode. Inými slovami detektor meria energiu prenesenú vlnou od zdroja k detektoru. Necháme teraz zdroj vln oscilovať s istou frekvenciou  $\omega$ . Zdroj generuje vlny tejto frekvencie. Ak by sme teraz tieto vlny nechali prejsť štřbinou číslo 1, potom v daný moment  $t$  by sme na bariére v bode  $x$  zaregistrovali vlnu, ktorú by sme mohli formálne reprezentovať komplexnou amplitúdou  $A_1 e^{i\omega t}$ , kde absolútna hodnota *komplexnej* amplitúdy  $A_1$  určuje intenzivnosť vlny ako  $I_1 = |A_1|^2$ . Analogicky, by sme mohli zaregistrovať intenzitu vlny šíriacej sa zo štřbiny číslo 2 ako  $I_2 = |A_2|^2$ . Každá z intenzít  $I_1$  a  $I_2$  má maximum, poloha ktorého je určená umiestnením štřbiny na prekážke a vzdialenosťou bariéry na ktorej meriame intenzitu od prekážky.

Teraz si však predstavme, že obe štřbiny sú otvorené a vlny zo zdroja prechádzajú súčasne cez ne. V tomto prípade budeme na bariére detekovať intenzitu vln  $I_{12}$ , ktorá nie je jednoduchým súčtom intenzít vln prechádzajúcich zo štřbiny 1 a 2 (pozri obr. 1.2). Intenzita  $I_{12}$  vykazuje sériu maxim a minim, ktoré vznikajú v dôsledku *interferencie* vln prechádzajúcich dvoma štřbinami. Ak sa v bode  $x$  stretávajú dve vlny, rozdiel dráh ktorých od štřbiny je rovný nepárnemu počtu polovic vlnových dĺžok  $\lambda$  [t.j.  $(2k + 1) \cdot \lambda/2$ ] potom je interferencia medzi vlnami *deštruktívna* a intenzita dosahuje minimum. Naopak, ak sa rozdiel dráh rovná párnemu počtu polovic vlnových dĺžok, potom vďaka *konštruktívnej* interferencii intenzita dosahuje svoje maximum. Inými slovami, ak je rozdiel fáz medzi amplitúdami dvoch vln rovný  $2n\pi$ , potom je interferencia *konštruktívna*, ak je rozdiel fáz rovný  $(2n + 1)\pi$ , interferencia je *deštruktívna*. Formálne



Obrázok 1.3: Dvojštřbinový experiment s elektrónmi.

môžeme zapísať intenzitu dvoch interferujúcich vln ako

$$I_{12} = |A_1 + A_2|^2 = |A_1|^2 + |A_2|^2 + 2|A_1| \cdot |A_2| \cos \delta, \quad (1.2)$$

kde  $\delta = \phi_1 - \phi_2$  označuje rozdiel fáz dvoch komplexných amplitúd  $A_j = |A_j| \exp(i\phi_j)$  ( $j = 1, 2$ ). Alternatívne môžeme zapísať intenzivnosť interferujúcich vln cez intenzity jednotlivých komponent, t.j.

$$I_{12} = |A_1 + A_2|^2 = I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} \cos \delta. \quad (1.3)$$

Člen  $2\sqrt{I_1 I_2} \cos \delta$  popisuje interferenciu medzi vlnami.

#### Otázka na zamyslenie

Čo by sa stalo, ak by sme v každej zo štřbiny púšťali do vody farbu v nepatrných množstvách? Napríklad v štřbine 1 modrú farbu, v štřbine 2 červenú. Inými slovami, poznali by sme dráhy jednotlivých vln podielajúcich sa na interferencii. Zmenil by sa teraz interferenčný obraz?

### 1.1.3 Dvojštřbinový experiment s kvantovými objektami

Predpokladajme teraz, že máme k dispozícii zdroj mikroskopických kvantových objektov (napríklad, elektrónov). Tak ako v prípade klasických častíc necháme najprv elektróny prejsť cez jednu štřbinu. Na tienidle za prekážkou so štřbinou umiestnime ideálne<sup>3</sup> detektory (kaskádové zosilovače), ktoré zaregistrujú elektróny v mieste ich dopadu. Po prejedení dostatočného počtu elektrónov nameriame pravdepodobnostné rozdelenie  $P_1(x)$  [resp.  $P_2(x)$ ] elektrónov na tienidle. Toto rozdelenie má jedno maximum ležiace na priamke spájajúcej zdroj so stredom štřbiny. Situácia je analogická ako v prípade klasických častíc (pozri obr. 1.3)

Nechajme teraz prechádzať elektróny oboma štřbinami. V prípade klasických častíc je v pravdepodobnostné rozdelenie určené sumou pravdepodobností dvoch možných procesov

<sup>3</sup>Pod ideálnym detektorom rozumieme zariadenie, ktoré detekuje elektróny so 100% účinnosťou.

[vid'. rovnicu (1.1)]. V kvantovom prípade sa však deje niečo úplne iné. Pravdepodobnostné rozdelenie  $P_{12}(x)$  sa nerovná súčtu  $P_1(x)$  a  $P_2(x)$ , t.j.

$$P_{12}(x) \neq P_1(x) + P_2(x), \quad (1.4)$$

čo znamená, že kvantové častice môžu interferovať ako vlny. Tu treba zdôrazniť, že interferenčný obrazec na tienidle je vytvorený z detekcie jednotlivých elektrónov v konkrétnych bodoch. Elektróny sa pri registrácii správajú ako častice. Dokonca i pri prechode jednou štrbinou sa (aspoň v istej aproximácii) správajú ako častice. Akonáhle však existujú dve možnosti prechodu cez prekážku, potom medzi nimi nastáva interferencia analogická ako pri šírení vln na hladine vody - elektróny sa teda v istých situáciách (napr. pri detekcii) správajú ako častice a v iných situáciách ako vlny. Tento vlnovo-časticový dualizmus je jednou zo základných čít kvantovej mechaniky a predstavuje zásadnú zmenu paradigmy v porovnaní s klasickou mechanikou. Na makroskopickej úrovni objekty pozorujeme buď ako vlny alebo ako častice. Dokonca na klasickej úrovni máme tendenciu tvrdiť, že objekty *existujú* ako vlny alebo častice. Naviac, o klasickej častici v dvojštrbinovom experimente jednoznačne tvrdíme, že prešla buď jednou alebo druhou štrbinou. Toto tvrdenie je experimentálne verifikovateľne (pozorovaním častíc pri štrbinách, resp. ich farbením pri prechode štrbín ako sme o tom už hovorili). Kvantové objekty sa však pri prechode dvoma štrbinami správajú ako vlny, teda *súčasne* prechádzajú oboma štrbinami. Preto stavy kvantových objektov môžeme popisovať komplexnými amplitúdami pravdepodobnosti a pravdepodobnostné rozdelenia ako štvorce absolútnych hodnôt týchto amplitúd. Preto, prechod štrbinou  $j$  ( $j = 1, 2$ ) môže asociovať s amplitúdou pravdepodobnosti  $\psi_j(x)$  a pravdepodobnosť ako  $P_j(x) = |\psi_j(x)|^2$ . Pravdepodobnostné rozdelenie popisujúce situáciu v dvojštrbinovom experimente sa potom vyjadruje ako

$$P_{12}(x) = |\psi_1(x) + \psi_2(x)|^2 = |\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2 + 2|\psi_1(x)| \cdot |\psi_2(x)| \cos \delta, \quad (1.5)$$

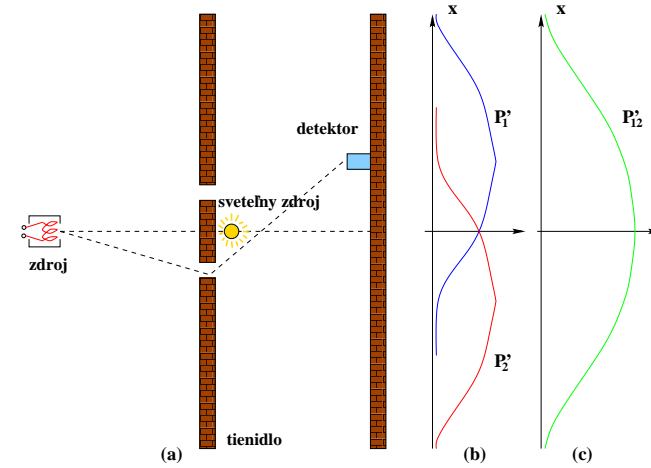
kde  $\delta$  reprezentuje rozdiel fáz dvoch komplexným amplitúd  $\psi_1(x)$  a  $\psi_2(x)$ , Teraz si môžeme položiť otázku, či by sme predsa len nemohli experimentálne zistiť, ktorou z dvoch štrbín elektrón preletel.

### 1.1.4 Welcher Weg

V prípade klasickej častice preletujúcej cez štrbinu môžeme nielen určiť kam častica dopadne na tienidlo, ale ešte počas letu môžeme merať jej rýchlosť a smer. Naviac, tým, že častica je dostatočne masívna, pozorovaním jej stav (rýchlosť a smer letu) nemeníme. Ak by sme ešte vedeli, ktorým smerom častica vyletela zo zdroja a akú mala rýchlosť, mohli by sme z jej dráhy za tienidlom určiť polohu štrbiny na prekážke. Inými slovami, mohli by sme určiť, ktorou štrbinou častica preletela. Je to vlastne to isté ako keby sme časticu prelietajúcu danou štrbinou nafarbili. Na dynamike letu a tvare pravdepodobnostného rozdelenia by sa nič nezmenilo. Stavy klasickej (makroskopických) objektov sa pozorovaním nemenia. Jeden a ten istý objekt môžeme premerať mnohokrát bez toho aby sa v dôsledku merania jeho stav zmenil. <sup>4</sup> V prípade kvantových objektov je situácia iná. Ak sa pokúsime zmerať polohu častice pri prelete štrbinami <sup>5</sup> narušíme jej stav a interferenčný člen v pravdepodobnostnom rozdelení (1.5) môže úplne zmiznúť (pozri obr. 1.4).

<sup>4</sup>Napríklad, knihu môžete prečítať mnohokrát bez toho aby sa jej obsah zmenil. Nielen to, knihu môžete prepísať, či skopírovať na xeroxe a stále máte tú istú knihu, tú istú informáciu.

<sup>5</sup>Ešte z dob "veľkých" diskusií medzi zakladateľmi kvantovej teórie sa v teoretickej fyzike zachovalo niekoľko nemeckých výrazov, ktoré sa stali súčasťou nášho "folklóru". Napríklad, *Welcher Weg* (ktorá dráha) sa používa



Obrázok 1.4: Dvojštrbinový experiment s elektrónmi II. Pri detekcii častíc s cieľom určiť, ktorou štrbinou elektrón prešiel strácame interferenčný obraz.

Konkrétne, polohu elektrónu tesne za štrbinou môžeme merať tak, že ich budeme osvetľovať svetlom istej vlnovej dĺžky. Svetlo sa na elektrónoch rozptyľuje čo môžeme pozorovať ako krátke záblesky. Pri každom takomto záblesku určíme polohu elektrónu. Tu je dôležité zdôrazniť, že pokiaľ je vlnová dĺžka dopadajúceho svetla dostatočne malá (v porovnaní so vzdialenosťou medzi štrbinami) záblesk sa vždy objaví iba pri jednej zo štrbín. Teda pri takejto detekcii sa elektrón správa ako častica, ktorá preletela buď jednou alebo druhou štrbinou. Na druhej strane, stav v dôsledku zákona zachovania hybnosti sa stav elektrónu pri rozptyle svetla sa narušil - elektrón získava pri rozptyle svetla hybnosť, veľkosť a smer ktorej sú do istej miery *náhodné* veličiny. V dôsledku tohto sa elektrón čiastočne "odchýli" od svojej pôvodnej dráhy (presnejšie mení sa jeho stav). Následne sa mení pravdepodobnostné rozdelenie  $P_{12}(x)$  - interferenčný obraz sa stráca. Narušenie stavu je tým menšie čím je väčšia vlnová dĺžka svetla <sup>6</sup> pretože tým menšia je veličina náhodného impulzu odovzdaného elektrónu. Preto sa interferenčný obrazec môže pri detekcii elektrónov (čiastočne) zachovať. Musíme si však uvedomiť, že čím väčšia je vlnová dĺžka svetla, tým menšia je presnosť lokalizácie elektrónu. V prípade, že táto vlnová dĺžka je porovnateľná resp. väčšia ako vzdialenosť medzi štrbinami, svetlo rozptýlené elektrónmi nám nemôže poskytnúť informáciu o tom, ktorou štrbinou elektrón preletel. Vidíme teda, že v kvantovej mechanike existujú vzájomne sa vylučujúce možnosti určenia štrbín, ktorými prelietajú elektróny a pozorovaním interferenčného ovrazu. Naraz oboje nemôžeme vidieť (poznať).

na označenie štandardnej situácie pri analýze problému, ktorou štrbinou preletela častica. Iným príkladom je pojem *Gedankenexperiment* (pomyselný experiment), ktorý sa stal súčasťou metodologického aparátu modernej fyziky.

<sup>6</sup>Hybnosť svetla je nepriamoúmerná jeho vlnovej dĺžke, a teda pri veľkých vlnových dĺžkach rozptyľovaného svetla náhodná hybnosť odovzdaná elektrónu je malá.

### Čo si treba zapamätať

- (1) Pravdepodobnosť  $P$  experimentálneho výsledku je rovná štvorcu absolútnej hodnoty amplitúdy pravdepodobnosti  $\psi$ ;  $P = |\psi|^2$ .
- (2) Ak sa fyzikálny proces môže realizovať dvoma (niekoľkými) vzájomne vylučujúcimi sa spôsobmi charakterizovanými amplitúdami  $\psi_1$  a  $\psi_2$ , potom celková amplitúda procesu je rovná sume amplitúd, t.j.  $\psi = \psi_1 + \psi_2$  a korešpondujúca pravdepodobnosť má tvar

$$P_{12} = |\psi_1 + \psi_2|^2 = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + 2|\psi_1| \cdot |\psi_2| \cos \delta$$

- (3) Kvantovo-mechanická interferencia sa dá pozorovať iba vtedy, ak sa nesnažíme zistiť, ktorá sa vzájomnevylučujúcich sa možností sa realizovala. Ak poznáme, ktorá z alternatív sa realizovala, potom má výsledná pravdepodobnosť tvar

$$P_{12} = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2.$$

#### Poznámky

• Pri meraní sa fáza komplexnej amplitúdy  $\psi_j = |\psi_j|e^{i\phi_j}$  mení náhodne. Rozdiel fáz medzi dvoma amplitúdami po meraní je  $\delta = \phi_1 - \phi_2$ . Predpokladajme, že rozdiel fáz  $\delta$ , má pravdepodobnostné rozdelenie  $p(\delta)$ . Potom pravdepodobnostné rozdelenie  $P_{12}(x)$  vyjadrené vzt'ahom (1.5) ešte musíme prestredovať, cez všetky možné uhly  $\delta$ , t.j.

$$\begin{aligned} \overline{P}_{12}(x) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} P_{12}(x)p(\delta)d\delta \\ &= |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + 2|\psi_1| \cdot |\psi_2| \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} p(\delta) \cos \delta d\delta. \end{aligned} \quad (1.6)$$

Predpokladajme, že prírastok fázy je pri rozptyle svetla úplne náhodný, t.j.  $p(\delta) = \text{const.} = 1$ . Keďže  $\int_{-\pi}^{\pi} \cos \delta d\delta = 0$ , vidíme, že v tomto prípade sa kvantová koherencia úplne stratila. Pre zachovanie kvantovej koherencie je nevyhnutné zabezpečiť, aby sa fázy komplexných amplitúd náhodne nemenili.

• Kvantová mechanika je štatistická teória - poskytuje nám pravdepodobnostné rozdelenia výsledkov meraní fyzikálnych veličín. Nevysvetľuje však samotnú podstatu, príčinu, štatistického charakteru fyzikálnych procesov (t.j. výsledkov pozorovaní). Táto štatistická povaha kvantovej mechaniky bola a je zdrojom mnohých vedeckých diskusií - najznámejšia je diskusia medzi Albertom Einsteinom a Nielsom Bohrom. Albert Einstein neveril, že by "Boh

hral v kocky" a hľadal deterministické vysvetlenie pravdepodobnostného charakteru výsledkov meraní.<sup>7</sup> Medzi (neúspešné) pokusy vysvetliť štatistický charakter kvantovej mechaniky patrí i predpoklad o existencii *skrytých parametrov*, t.j. ak by sme poznali *všetky* veličiny charakterizujúce fyzikálne systémy, potom by štatistická interpretácia kvantovej mechaniky stratila svoje opodstatnenie. Predpoklady o skrytých parametroch sú však nekonzistentné so základnými postulátmi kvantovej mechaniky (o tomto budeme hovoriť v našich prednáškach neskôr).

• Klasická mechanika vysvetľuje dynamiku jednotlivých objektov. Každý objekt môže (v princípe) pozorovať bez toho, aby sme zmenili jeho stav. Pozorovateľ nie je súčasťou pozorovaného objektu. V kvantovej fyzike je situácia dramaticky odlišná, meranie (pozorovanie) mení stav pozorovaného systému.<sup>8</sup> Pričom táto zmena je vo všeobecnosti úplne náhodná. Ak teda hovoríme o konkrétnom stave systému máme skôr na mysli stav nekonečne veľkého súboru rovnako pripravených objektov (resp. parametre prístroja, ktorý generoval takýto súbor). Meraním každého elementu súboru získame časť informácie o pravdepodobnostných rozdeleniach relevantných fyzikálnych veličín (napr. poloha, rýchlosť). Samozrejme, že výsledky meraní nám potom umožňujú (v kontexte už známej informácie) určovať stavy fyzikálnych systémov.

## 1.2 Stavy fyzikálnych systémov

Stav fyzikálneho systému je jedným z kľúčových pojmov modernej fyziky. Implicitne sa predpokladá, že fyzikálne systémy "objektívne" existujú a že sú poznateľné prostredníctvom meraní. Poznateľnosť sa formálne dá vyjadriť faktom, že existuje (konečný) súbor veličín, ktoré majú svoju operačnú definíciu (t.j. čosi ako kuchárska kniha) obsahujúcu návod na to, ako tieto veličiny merať. Tieto fyzikálne veličiny v princípe jednoznačne identifikujú objekt a ich hodnoty určujú stav skúmaného fyzikálneho objektu.

Množina všetkých možných stavov reprezentuje **stavový priestor** daného fyzikálneho systému. Každý "bod" stavového priestoru, na druhej strane, korešponduje konkrétnemu stavu systému<sup>9</sup>. V klasickej fyzike je stavovým priestorom konfiguračný, resp. fázový priestor, ktorý je **reálnym vektorovým priestorom**. Napríklad, klasickej častici, reprezentovanej materiálým bodom pohybujúcim sa v jednom rozmere, korešponduje dvojrozmerný fázový priestor. Jeden rozmer tohoto priestoru je asociovaný s priestorovou súradnicou  $x$  a druhý je asociovaný s hybnosťou (rýchlosťou)  $p$  tejto častice. Typickým príkladom takejto materiálnej častice je harmonický oscilátor, stav ktorého je reprezentovaný bodom na kružnici so stredom v počiatku fázového priestoru. A harmonický pohyb oscilátora korešponduje pohybu po tejto kružnici vo fázovom priestore s danou uhlovou rýchlosťou. Ako ďalší príklad, ktorému sa budeme venovať podrobnejšie, uvedieme polarizačné stavy svetla.

<sup>7</sup>Citujem z Einsteinovho listu Bohrovi (pozri [?]): "You believe in a dice-playing God and I in perfect laws in the world of things existing as real objects, which I try to grasp in a wildly speculative way."

<sup>8</sup>V istom zmysle je pozorovateľ aktívnym tvorcom nového stavu. Tým, že sa "pýtame" konkrétne otázky meníme svet konkrétnym spôsobom (ak by sme sa pýtali iné otázky svet by vyzeral inakšie). Ak teda skúmame vlnové vlastnosti elektrónu, tento sa správa ako vlna. Ak skúmame jeho korpuskulárne vlastnosti správa sa ako častica.

<sup>9</sup>Neskôr sa v našich prednáškach stretneme s pojmom pravdepodobnostného rozdelenia na stavovom priestore. Takýto popis korešponduje situácii, kedy sa systém nenachádza v presne definovanom stave, ale existuje s istou pravdepodobnosťou v mnohých možných stavoch. A práve charakter tejto "súčasnej" existencie systému v mnohých stavoch je čosi, čím sa klasické objekty dramaticky odlišujú od objektov kvantových.

### 1.2.1 Polarizované svetlo

Predpokladajme, že v smere osi  $z$  sa šíri svetlo. Z Maxwellovej teórie vieme, že svetlo je elektromagnetické pole. V prípade voľného poľa je svetlo jednoznačne opísané vektorom elektrického poľa  $\vec{E}(\vec{r}, t)$  v bode  $\vec{r}$  a čase  $t$ . Vektor elektromagnetického poľa je kolmý k smeru šírenia svetla (t.j. k osi  $z$ ). Z Maxwellových rovníc vyplýva, že v našom prípade vektor magnetického poľa je určený jednoduchým vzťahom  $\vec{B} = \vec{e}_z \times \vec{E}$  a

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = E_x(\vec{r}, t)\vec{e}_x + E_y(\vec{r}, t)\vec{e}_y, \quad (1.7)$$

kde  $\vec{e}_x$ ,  $\vec{e}_y$  a  $\vec{e}_z$  sú jednotkové vektory v smere osí  $x$ ,  $y$  a  $z$ . Vektor elektrického poľa je reálnou veličinou a z Maxwellových rovníc pre voľne sa šíriace pole nájdeme riešenia, pre komponenty  $E_x(\vec{r}, t)$  a  $E_y(\vec{r}, t)$  v tvare

$$\begin{aligned} E_x(\vec{r}, t) &= E_x^0 \cos(kz - \omega t + \alpha_x); \\ E_y(\vec{r}, t) &= E_y^0 \cos(kz - \omega t + \alpha_y). \end{aligned} \quad (1.8)$$

V rovnici (1.8) veličina  $k = 2\pi/\lambda$  reprezentuje vlnový vektor;  $\omega = 2\pi\nu$  je korešpondujúca frekvencia a  $\alpha_x$  ( $\alpha_y$ ) je fáza komponenty poľa  $E_x(\vec{r}, t)$  [ $E_y(\vec{r}, t)$ ]. Reálne amplitúdy komponent poľa sme označili ako  $E_x^0$  a  $E_y^0$ . Hustota energie voľného poľa sa vyjadruje štandardným vzťahom

$$\begin{aligned} \varepsilon(\vec{r}, t) &= \frac{1}{8\pi} [\vec{E}(\vec{r}, t)^2 + \vec{B}(\vec{r}, t)^2] \\ &= \frac{1}{4\pi} [(E_x^0)^2 \cos^2(kz - \omega t + \alpha_x) + (E_y^0)^2 \cos^2(kz - \omega t + \alpha_y)]. \end{aligned} \quad (1.9)$$

Z posledného výrazu môžeme nájsť hodnotu *strednej* hustoty energie za jednu periódu

$$\varepsilon(\vec{r}) = \frac{1}{T} \int_0^T \varepsilon(\vec{r}, t) dt = \frac{1}{8\pi} [(E_x^0)^2 + (E_y^0)^2]. \quad (1.10)$$

Z praktických dôvodov môžeme komponenty poľa (1.8) reprezentovať ako reálne časti komplexných veličín

$$\begin{aligned} E_x(\vec{r}, t) &= \text{Re} \{ E_x \exp[i(kz - \omega t)] \}; \\ E_y(\vec{r}, t) &= \text{Re} \{ E_y \exp[i(kz - \omega t)] \}; \end{aligned} \quad (1.11)$$

kde sme zaviedli označenie  $E_x = E_x^0 e^{i\alpha_x}$  a  $E_y = E_y^0 e^{i\alpha_y}$ . Teraz môžeme hustotu energie (1.10) prepísať vo forme

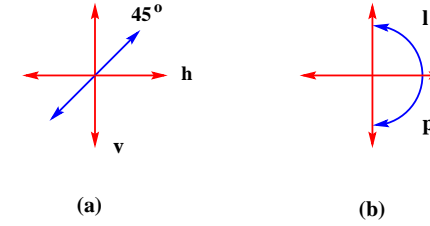
$$\varepsilon(\vec{r}) = \frac{1}{8\pi} [|E_x|^2 + |E_y|^2]. \quad (1.12)$$

V takejto *komplexnej* forme môžeme teda vektor elektrického poľa (1.7) reprezentovať ako

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = [E_x \vec{e}_x + E_y \vec{e}_y] \exp[-i(\omega t - kz)]. \quad (1.13)$$

Inými slovami, charakterizujeme teraz vektor elektrického poľa komplexnými veličinami.

Polarizačné vlastnosti svetla sú v našom prípade opísané komponentami  $E_x$  a  $E_y$  elektrického poľa. Vo všeobecnom prípade komplexných veličín  $E_x$  a  $E_y$  máme do činenia s elipticky polarizovaným svetlom. Na druhej strane, môžeme taxatívne vymenovať niekoľko



Obrázok 1.5: Na obrázku (a) sme schematicky znázornili vektory korešpondujúce vertikálnej ( $v$ ) a horizontálnej ( $h$ ) linearizovanému svetelnému poľu. Tiež, je tu zobrazený vektor svetla polarizovaného v smere  $45^\circ$ . Na obrázku (b) je ľavo- a pravo-polarizované "svetlo".

špecifických prípadov (pozri obr. 1.5)

1.  $E_y = 0$  – lineárna polarizácia v smere osi  $x$  (horizontálna polarizácia);
2.  $E_x = 0$  – lineárna polarizácia v smere osi  $y$  (vertikálna polarizácia);
3.  $E_x = E_y$  – lineárna polarizácia pozdĺž osi potočnej o  $45^\circ$ ;
4.  $E_y = iE_x$  – pravo polarizované svetlo;
5.  $E_y = -iE_x$  – ľavo polarizované svetlo.

Uvažujme teraz svetelné pole dopadajúce na  $x$ -polarizátor, cez ktorý môže prechádzať  $x$ -polarizované svetlo, ale  $y$ -polarizované svetlo je týmto polarizátorom úplne pohltené. Takýto polarizátor sme formálne zobrazili na obr. 1.6. Keď svetlo prejde takýmto polarizátorom, jeho  $y$  komponenta je pohltená, čo znamená, že pomer intenzity dopadajúceho svetla a svetla, ktoré prešlo polarizátorom má tvar:

$$\frac{I}{I_0} = \frac{|E_x|^2}{|E_x|^2 + |E_y|^2}. \quad (1.14)$$

Vieme tiež, že svetlo môžeme reprezentovať ako súbor fotónov.<sup>10</sup> Jeden fotón sa nedá deliť - teda predpokladáme, že polarizátorom buď prejde alebo neprejde. Znamená to teda, že v takejto korpuskulárnej reprezentácii môžeme hovoriť iba o pravdepodobnosti  $P$ , že fotón prešiel polarizátorom. Táto pravdepodobnosť je rovná pomeru intenzít dopadajúceho a prejdeho svetla, t.j.

$$P = \frac{|E_x|^2}{|E_x|^2 + |E_y|^2}. \quad (1.15)$$

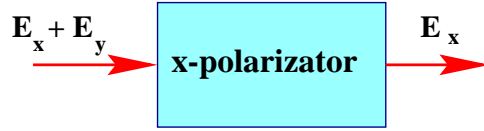
Ak budeme reprezentovať svetelné pole normovanou intenzitou

$$\vec{E}_N = \frac{E_x}{\sqrt{|E_x|^2 + |E_y|^2}} \vec{e}_x + \frac{E_y}{\sqrt{|E_x|^2 + |E_y|^2}} \vec{e}_y \quad (1.16)$$

potom môžeme hovoriť, že pravdepodobnosť toho, že fotón prešiel polarizátorom  $x$  sa rovná štvorcovej amplitúdy pred vektorom  $\vec{e}_x$ . Toto je jednoduché heuristické pravidlo, ktoré neskôr obľebíme do elegantnej matematickej formy.

Predstavme si teraz trochu zložitejší experiment. Za  $x$ -polarizátor umiestnime ešte  $y$ -polarizátor (pozri obr. 1.7). Je vcelku pochopiteľné, že v tomto prípade na výstupe nebudeme

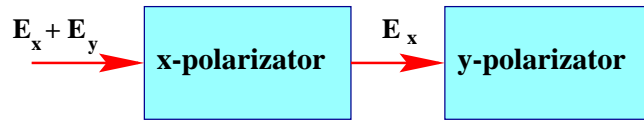
<sup>10</sup>V kvantovej teórii je svetelné pole reprezentované kvantovaným elektromagnetickým poľom. V reprezentácii druhého kvantovania sa excitácie jednotlivých módov elektromagnetického poľa nazývajú fotónmi.



Obrázok 1.6: Schematické zobrazenie  $x$ -polarizátora. Z ľavej strany vchádza doň svetla s obojma, t.j. vertikálnou ( $x$ ) i horizontálnou ( $y$ ) komponentami. Z pravej strany však už vychádza iba vertikálne ( $x$ ) polarizované svetlo.

pozorovať žiadne svetlo. Ak však medzi  $x$  a  $y$  polarizátory umiestnime polarizátor  $x'$ , potom na výstupe môžeme pozorovať svetlo, ktoré je opísané vektorom elektrického poľa  $E'_y \vec{e}_y$ . Amplitúdu tohoto poľa nájdeme veľmi jednoducho. Stačí ak spravíme jednoduchú rotáciu polarizačnej bázy. Konkrétne, novú bázu  $\{\vec{e}'_x, \vec{e}'_y\}$  vyjadríme cez starú bázu  $\{\vec{e}_x, \vec{e}_y\}$  ako

$$\vec{e}'_x = \cos \varphi \vec{e}_x + \sin \varphi \vec{e}_y; \quad \vec{e}'_y = -\sin \varphi \vec{e}_x + \cos \varphi \vec{e}_y. \quad (1.17)$$



Obrázok 1.7: Svetlo najprv prechádza cez  $x$ -polarizátor. Potom cez  $y$ -polarizátor. Na výstupe, samozrejme, nemôžeme detekovať svetlo, pretože toto bolo úplne pohltené dvoma komplementárnymi polarizátormi.

Samozrejme, inverzná transformácia má tvar

$$\vec{e}_x = \cos \varphi \vec{e}'_x - \sin \varphi \vec{e}'_y; \quad \vec{e}_y = \sin \varphi \vec{e}'_x + \cos \varphi \vec{e}'_y. \quad (1.18)$$

Z predádzajúcich transformácií je zjavné, že uhol rotácie  $\varphi$  sa dá vyjadriť ako skalárny súčin  $\cos \varphi = \vec{e}'_x \cdot \vec{e}_x$ , resp.  $\sin \varphi = \vec{e}'_x \cdot \vec{e}_y$ .

Teraz už môžeme zapísať experiment s tromi polarizátormi v jednoduchšej matematickej forme. Komplexné elektrické pole v jednotlivých etapách prechodu cez polarizátory má nasledovný tvar:

**pred polarizátorom  $x$**

$$\vec{E}_1 = E_x \vec{e}_x + E_y \vec{e}_y; \quad (1.19)$$

**za polarizátorom  $x$  (t.j. pred polarizátorom  $x'$ )**

$$\vec{E}_2 = (\vec{E}_1 \vec{e}_x) \vec{e}_x = \vec{E}_x \vec{e}_x = E_x \cos \varphi \vec{e}'_x - E_x \sin \varphi \vec{e}'_y; \quad (1.20)$$

**za polarizátorom  $x'$  (t.j. pred polarizátorom  $y$ )**

$$\vec{E}_3 = (\vec{E}_2 \vec{e}'_x) \vec{e}'_x = E_x \cos \varphi \vec{e}'_x = E_x \cos^2 \varphi \vec{e}_x + E_x \sin \varphi \cos \varphi \vec{e}_y; \quad (1.21)$$

**za polarizátorom  $y$**

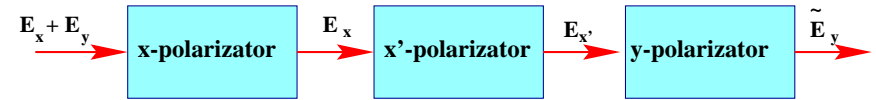
$$\vec{E}_4 = (\vec{E}_3 \vec{e}_y) \vec{e}_y = E_x \cos \varphi \sin \varphi \vec{e}_y = \tilde{E}_y \vec{e}_y. \quad (1.22)$$

Vidíme teda, že pomer intenzít pred polarizátorom  $x'$  a za polarizátorom  $y$  je daný vzťahom

$$\frac{I}{I_0} = \cos^2 \varphi \sin^2 \varphi = |\vec{e}'_x \cdot \vec{e}_y|^2 |\vec{e}'_x \cdot \vec{e}_x|^2. \quad (1.23)$$

Ak budeme interpretovať tento výsledok vo fotónovej reprezentácii, potom dospejeme k záveru, že pravdepodobnosť toho, že fotón prejde systémom polarizátorov je rovná  $\cos^2 \varphi \sin^2 \varphi$ . Tiež sa môžeme presvedčiť o tom, že pravdepodobnosť toho, že fotón prejde polarizátorom  $x'$  je vyjadrená vzťahom

$$P = \frac{|\vec{E} \vec{e}'_x|^2}{|\vec{E} \vec{e}'_x|^2 + |\vec{E} \vec{e}'_y|^2}. \quad (1.24)$$



Obrázok 1.8: Systém troch polarizátorov. V porovnaní so situáciou zobrazenou na obr. 1.7, časť svetla cez systém polarizátorov prechádza.

Z predchádzajúcich ponaučení vyplýva, že *komplexné* vektory, ich amplitúdy, skalárne súčiny a lineárne transformácie medzi nimi sú vhodným formalizmom na vyjadrenie matematickej štruktúry kvantovej mechaniky. Preto nasledujúcu kapitolu venovanú matematickému formalizmu kvantovej mechaniky začneme popisom priestorov komplexných vektorov.

### Čo si treba zapamätať

- (1) Skalárny súčin medzi vektormi  $\vec{e}_j$  (reprezentujúcimi polarizačné stavy fotóna) zohráva významnú úlohu pri výpočte pravdepodobnosti toho, že fotón prejde cez daný polarizátor.
- (2) Jeden polarizačný stav svetla môže byť reprezentovaný ako *superpozícia* iných polarizačných stavov.
- (3) Pôsobenie  $x$  polarizátora (resp. akéhokoľvek polarizátora) môžeme interpretovať ako lineárnu transformáciu medzi komplexnými vektormi. Takýto polarizátor formálne zobrazuje vektor  $E_x \vec{e}_x + E_y \vec{e}_y$  do vektora  $E_x \vec{e}_x$ .

## Kapitola 2

# Matematický formalizmus

*Physical laws should have mathematical beauty.*

Paul A.M. Dirac

### 2.1 Komplexné vektorové priestory

**Definícia 2.1** *Nech  $V$  je množina objektov (vektorov),  $\mathbf{C}$  označuje množinu komplexných čísiel, “+” označuje grupovú operáciu **súčtu** a nakoniec nech “ $\cdot$ ” označuje operáciu **násobenia** komplexným číslom. Potom sa štvorica  $(V, \mathbf{C}, +, \cdot)$  nazýva **komplexným vektorovým priestorom** ak spĺňa nasledujúce vlastnosti:*

(1)  $(V, +)$  je **Abelovou grupou**, t.j. spĺňa podmienky

- (a)  $\forall \vec{x}, \vec{y} \in V \Rightarrow \vec{x} + \vec{y} \in V$  (uzavretosť)
- (b)  $\forall \vec{x}, \vec{y}, \vec{z} \in V \Rightarrow \vec{x} + (\vec{y} + \vec{z}) = (\vec{x} + \vec{y}) + \vec{z}$  (distributívnosť)
- (c)  $\exists \vec{0} \in V, \forall \vec{x} \in V \Rightarrow \vec{x} + \vec{0} = \vec{x}$  (nulový element)
- (d)  $\forall \vec{x} \in V : \exists (-\vec{x}) \in V$  taký, že  $\vec{x} + (-\vec{x}) = \vec{0}$  (inverzný element)
- (e)  $\forall \vec{x}, \vec{y} \in V \Rightarrow \vec{x} + \vec{y} = \vec{y} + \vec{x}$  (abelovosť)

(2) **Násobenie komplexným číslom** spĺňa podmienky

- (a)  $\forall a \in \mathbf{C}; \vec{x} \in V \Rightarrow a \cdot \vec{x} \in V$  (uzavretosť)
- (b)  $\forall \vec{x} \in V \Rightarrow 1 \cdot \vec{x} = \vec{x}$  (jednotkový element)
- (c)  $\forall c, d \in \mathbf{C}; \vec{x} \in V \Rightarrow (c \cdot d) \cdot \vec{x} = c \cdot (d \cdot \vec{x})$  (asociatívnosť)
- (d)  $\forall c, d \in \mathbf{C}; \vec{x}, \vec{y} \in V \Rightarrow c \cdot (\vec{x} + \vec{y}) = c \cdot \vec{x} + c \cdot \vec{y}$   
a taktiež  $(c + d) \cdot \vec{x} = c \cdot \vec{x} + d \cdot \vec{x}$  (distributívnosť)

Aby sme lepšie pochopili zmysel tejto definície preanalýzujeme niekoľko relevantných príkladov.

1. *Nulový element* Začnime s priam triviálneho dôkazu tvrdenia  $0 \cdot \vec{x} = \vec{0}$ . Na dôkaz použijeme axiomy z definície 2.1.

$$\begin{aligned} \vec{0} &\stackrel{(1d)}{=} -\vec{x} + \vec{x} \\ &\stackrel{(2b)}{=} -\vec{x} + 1 \cdot \vec{x} \\ &= -\vec{x} + (1 + 0) \cdot \vec{x} \\ &\stackrel{(2d)}{=} -\vec{x} + 1 \cdot \vec{x} + 0 \cdot \vec{x} \\ &\stackrel{(2b)}{=} -\vec{x} + \vec{x} + 0 \cdot \vec{x} \\ &\stackrel{(2d)}{=} \vec{0} + 0 \cdot \vec{x} \\ &\stackrel{(1c)}{=} 0 \cdot \vec{x}. \end{aligned}$$

2.  $\mathbf{C}^2$  Toto je množina dvojkomponentných vektorov tvaru

$$\vec{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}, \quad (2.1)$$

kde  $a_i$  sú *komplexné čísla*. Operácie súčtu a násobenia komplexným číslom sú definované ako

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} a_1 + b_1 \\ a_2 + b_2 \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

$$c \cdot \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} c \cdot a_1 \\ c \cdot a_2 \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

Teraz ľahko dokážeme, že množina  $\mathbf{C}^2$ , na ktorej sú definované operácie súčtu (2.2) a súčiny (2.3) spĺňa podmienky určené definíciou 2.1. Nakoniec ešte poznamenám, že vektorový priestor  $\mathbf{C}^2$ , hrá dôležitú úlohu pri popise častíc so spinom 1/2 (pozri kapitolu ??).

3. *Množina reálnych funkcií jednej premennej*  $f : \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}$  Ak definujeme na tejto množine grupové operácie ako

$$\begin{aligned} (f_1 + f_2)(x) &:= f_1(x) + f_2(x) \\ (c \cdot f)(x) &:= c \cdot f(x) \end{aligned} \quad (2.4)$$

potom ľahko preveríme, platnosť podmienok 1. a 2. z definície 2.1. Znamená to, že množina funkcií  $f$ , na ktorej je definovaná operácia súčtu a súčiny (2.4) je komplexným vektorovým priestorom.

4. *Komplexné matice  $n \times n$*  Predpokladajme množinu  $n \times n$  matíc

$$M = \begin{pmatrix} m_{11} & \cdots & m_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ m_{n1} & \cdots & m_{nn} \end{pmatrix}, \quad (2.5)$$

kde maticové elementy  $m_{ij}$  sú komplexné čísla. Operácie súčtu a skalárneho súčinu sú definované ako

$$\begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_{11} & \cdots & b_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{n1} & \cdots & b_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} + b_{11} & \cdots & a_{1n} + b_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} + b_{n1} & \cdots & a_{nn} + b_{nn} \end{pmatrix}, \quad (2.6)$$

$$c \cdot \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c \cdot a_{11} & \cdots & c \cdot a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ c \cdot a_{n1} & \cdots & c \cdot a_{nn} \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

V tomto prípade opäť ľahko ukážeme, že množina matíc s operáciami (2.6) a (2.7) je komplexným vektorovým priestorom<sup>1</sup>

### 2.1.1 Báza a rozmer vektorového priestoru

Z definície 2.1 je zrejmé, že jeden vektor môžeme reprezentovať ako sumu dvoch (či viacerých) iných vektorov. Napríklad,

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + 2 \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2.8)$$

V tejto situácii je prirodzené, že sa pýtame, či je možné reprezentovať nejaký vektor  $\vec{x}_j$  z množiny vektorov  $\{\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_k\}$  cez ostatné vektory tejto množiny. Táto otázka sa dá formulovať i trochu inakšie, a to: Môžeme reprezentovať nulový vektor  $\vec{0}$  ako lineárnu kombináciu vektorov  $\{\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_k\}$ , t.j.

$$\sum_{j=1}^k \lambda_j \vec{x}_j = \vec{0} \quad (2.9)$$

s nenulovými koeficientami  $\lambda_j$ ?

**Definícia 2.2** Množina vektorov  $\{\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_k\}$  sa nazýva **lineárne nezávislou** ak rovnica

$$\sum_{j=1}^k \lambda_j \vec{x}_j = \vec{0} \quad (2.10)$$

má iba triviálne riešenie  $\lambda_1 = \dots = \lambda_k = 0$ . Ak táto rovnica má riešenie aspoň pre jedno  $\lambda_j \neq 0$ , potom sa množina vektorov nazýva **lineárne závislou**.

Teraz sa vrátíme k našej pôvodnej otázke a vyšetríme, či sa niektoré vektory z množiny  $\{\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_k\}$  dajú reprezentovať cez iné vektory tejto množiny.

<sup>1</sup>Chcem vás iba upozorniť na fakt, že často používame matice ako objekty, ktoré pôsobia na vektory. Z nášho príkladu je však zjavné, že matice môžeme tiež uvažovať ako elementy (vektory) vektorového priestoru.

**Lema 2.1** Žiaden vektor z množiny **lineárne nezávislých** vektorov  $\{\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_k\}$  sa nedá vyjadriť ako lineárna kombinácia ostatných vektorov tejto množiny, t.j. neexistuje  $\lambda_j$ , ktoré by bolo riešením rovnice

$$\lambda_1 \vec{x}_1 + \dots + \lambda_{j-1} \vec{x}_{j-1} + \lambda_{j+1} \vec{x}_{j+1} + \dots + \lambda_k \vec{x}_k = \vec{x}_j \quad (2.11)$$

V množine **lineárne závislých** vektorov nájdeme aspoň jeden taký vektor  $\vec{x}_j$ , ktorý sa dá vyjadriť ako lineárna kombinácia ostatných vektorov.

**Dôkaz:** Spravte ho ako cvičenie!

**Príklad:** Množina  $\{\vec{0}\}$  pozostávajúca iba z nulového vektora, je lineárne závislá.

Teraz keď sme už zdefinovali pojem lineárnej nezávislosti prejdeme k definícii **rozmeru** (dimenzie) vektorového priestoru. Som si istý, že všetci máte intuitívnu predstavu o dimenzii priestoru. Rovina je dvojrozmerná, priestor, v ktorom existujeme je trojrozmerný.<sup>2</sup> Predstavte si na chvíľu rovinu. Je pre vás zrejmé, že každý vektor v tejto rovine sa dá reprezentovať ako lineárna kombinácia dvoch lineárne nezávislých vektorov  $\vec{e}_1$  a  $\vec{e}_2$ . V rovine teda nenájdeme tri lineárne nezávislé vektory. Preto hovoríme, že rovina je *dvojrozmerným* priestorom.

**Definícia 2.3 Rozmer** vektorového priestoru  $V$  je určený počtom lineárne nezávislých vektorov vo  $V$ .

**Definícia 2.4** Množina vektorov  $\{\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_k\}$  sa nazýva **bázou** vektorového priestoru  $V$  ak

- (a) ak vektory  $\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_k$  sú lineárne nezávislé;
- (b) ak  $\forall \vec{x} \in V: \exists \lambda_i \in \mathbf{C} \Rightarrow \vec{x} = \sum_{i=1}^k \lambda_i \vec{x}_i$ .

Podmienka (b) hovorí o tom, že každý vektor  $\vec{x}$  vektorového priestoru  $V$  môžeme reprezentovať ako lineárnu kombináciu báзовých vektorov. Podmienka (a) zaručuje, že množina báзовých vektorov je minimálna. Samozrejme, že v danom vektorovom priestore môžeme definovať veľa rozdielnych báz (t.j. množín báзовých vektorov). V  $N$ -rozmernom priestore každá z týchto báz bude obsahovať presne  $N$  vektorov.

**Príklady**

- (1) Predpokladajme vektorový priestor  $\mathbf{C}^2$ . Každý element tohoto priestoru môžeme reprezentovať ako stĺpec

$$\vec{x} = \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{pmatrix}.$$

Preto dva vektory

$$\vec{x}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \vec{x}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.12)$$

zohrávajú úlohu báзовých vektorov v  $\mathbf{C}^2$ . Analogická konštrukcia platí v  $N$  rozmernom priestore  $\mathbf{C}^N$ .

<sup>2</sup>Mnohí z vás vedia o tom, že čas, vo fyzikálnej teórii reprezentuje ďalší rozmer, a tak svet, v ktorom žijeme je štvorrozmerným časopriestorovým kontinuumom.



- (2) Ako príklad nekonečne-rozmerného vektorového priestoru uvidíme priestor komplexných mnohočlenov, t.j. množinu

$$V = \{c_0 + c_1 z + c_2 z^2 + \dots + c_k z^k \mid k \text{ je ľubovoľné celé číslo; } \forall c_i \in \mathbf{C}\}. \quad (2.13)$$

Dva mnohočleny sa navzájom rovnajú ak pre všetky  $z \in \mathbf{C}$  nadobúdajú rovnaké hodnoty. Operácie sčítu a súčinu sú definované štandardným spôsobom. Množina  $\{1, z, z^2, \dots\}$  je lineárne nezávislá a obsahuje nekonečne veľa prvkov. Dokážte, že  $V$  je vektorovým priestorom s bázou  $\{1, z, z^2, \dots\}$ .

## 2.1.2 Skalárny súčin a norma na vektorových priestoroch

Najprv zadefinujeme pojem **skalárneho súčinu** medzi dvoma vektormi vektorového priestoru.

**Definícia 2.5** Operácia komplexného skalárneho súčinu na vektorovom priestore priradzuje akémukoľvek páru vektorov  $\vec{x}, \vec{y} \in V$  komplexné číslo  $(\vec{x}, \vec{y}) \in \mathbf{C}$  podľa nasledujúcich pravidiel:

$$(1) \quad \forall \vec{x}, \vec{y}, \vec{z} \in V; \alpha_i \in \mathbf{C} : (\vec{x}, \alpha_1 \vec{y} + \alpha_2 \vec{z}) = \alpha_1 (\vec{x}, \vec{y}) + \alpha_2 (\vec{x}, \vec{z}); \quad (\text{linearita})$$

$$(2) \quad \forall \vec{x}, \vec{y} \in V : (\vec{x}, \vec{y}) = (\vec{y}, \vec{x})^* \quad (\text{symetria})$$

$$(3) \quad \forall \vec{x} \in V : (\vec{x}, \vec{x}) \geq 0 \quad (\text{pozitívnosť})$$

$$(4) \quad \forall \vec{x} \in V : (\vec{x}, \vec{x}) = 0 \Leftrightarrow \vec{x} = \vec{0}$$

Podmienky (1-4) v definícii komplexného skalárneho súčinu medzi vektormi sú veľmi podobné podmienkam v definícii obyčajného skalárneho súčinu medzi reálnymi vektormi. Výnimkou je podmienka (2), ktorú sme museli použiť pretože teraz operujeme s komplexnými číslami. Tiež vás chcem upozorniť na to, že linearitu [pozri podmienku (1)] sme definovali iba vo vzťahu k druhému argumentu. Vo vzťahu k prvému argumentu je skalárny súčin **anti-lineárny**, t.j.

$$\forall \vec{x}, \vec{y}, \vec{z} \in V; \alpha_i \in \mathbf{C} : (\alpha_1 \vec{x} + \alpha_2 \vec{y}, \vec{z}) = \alpha_1^* (\vec{x}, \vec{z}) + \alpha_2^* (\vec{y}, \vec{z}). \quad (2.14)$$

Nakoniec ešte poznamenám, že vektorové priestory, na ktorých je definovaná operácia komplexného skalárneho súčinu sa nazývajú **unitárnymi vektorovými priestormi**.

### Príklady:

- (1) Skalárny súčin na  $\mathbf{C}^N$

Nech dva komplexné vektory  $\vec{x}, \vec{y} \in \mathbf{C}^N$  majú komponenty  $x_i$  a  $y_i$ . Potom komplexný skalárny súčin medzi týmito vektormi definujeme ako

$$(\vec{x}, \vec{y}) = \sum_{i=1}^N x_i^* y_i, \quad (2.15)$$

kde \* označuje operáciu komplexného zdruzenia. Preverte, že (2.15) spĺňa podmienky definície 2.5.

- (2) Skalárny súčin na kvadraticky-integrovaných funkciách

Kvadraticky-integrované funkcie  $\psi(x) \in \mathcal{L}^2(\mathbf{R})$  spĺňajú podmienku

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx < \infty. \quad (2.16)$$

Skalárny súčin dvoch funkcií  $\psi(x), \phi \in \mathcal{L}^2(\mathbf{R})$  je definovaný ako

$$(\psi, \phi) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)^* \phi(x) dx. \quad (2.17)$$

Dokážte, že vzťah (2.17) spĺňa všetky podmienky definície 2.5.

Veľmi dôležitou vlastnosťou komplexného skalárneho súčinu je **Schwarzova nerovnosť**, ktorú v ďalšom použijeme mnohokrát pri rôznych dôkazoch.

### Teoréma 2.2 (Schwarzova nerovnosť)

Pre akékoľvek vektory unitárneho vektorového priestoru (t.j.  $\vec{x}, \vec{y} \in V$ ) platí

$$|(\vec{x}, \vec{y})|^2 \leq (\vec{x}, \vec{x})(\vec{y}, \vec{y}). \quad (2.18)$$

**Dôkaz:** Pre akékoľvek komplexné číslo  $\alpha$  platí

$$\begin{aligned} 0 &\leq (\vec{x} + \alpha \vec{y})(\vec{x} + \alpha \vec{y}) \\ &= (\vec{x}, \vec{x}) + \alpha (\vec{x}, \vec{y}) + \alpha^* (\vec{y}, \vec{x}) + |\alpha|^2 (\vec{y}, \vec{y}) \\ &= (\vec{x}, \vec{x}) + 2v \operatorname{Re}(\vec{x}, \vec{y}) - 2w \operatorname{Im}(\vec{x}, \vec{y}) + (v^2 + w^2)(\vec{y}, \vec{y}) \\ &:= f(v, w), \end{aligned} \quad (2.19)$$

kde  $v = \operatorname{Re}(\alpha)$  a  $w = \operatorname{Im}(\alpha)$ . Aby sme dostali najsilnejšie možné ohraničenie v definícii (2.18) musíme minimalizovať pravú stranu rovnice (2.19). To znamená, že musíme nájsť extrémum funkcie  $f(v, w)$ . Preto musíme vyriešiť rovnice

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial f}{\partial v}(v, w) = 2\operatorname{Re}(\vec{x}, \vec{y}) + 2v(\vec{y}, \vec{y}) \\ 0 &= \frac{\partial f}{\partial w}(v, w) = -2\operatorname{Im}(\vec{x}, \vec{y}) + 2w(\vec{y}, \vec{y}). \end{aligned} \quad (2.20)$$

Riešením týchto rovníc nájdeme

$$\alpha_{\min} = v_{\min} + iw_{\min} = -\frac{\operatorname{Re}(\vec{x}, \vec{y}) - i\operatorname{Im}(\vec{x}, \vec{y})}{(\vec{y}, \vec{y})} = -\frac{(\vec{y}, \vec{x})}{(\vec{y}, \vec{y})}. \quad (2.21)$$

Teraz dosadíme hodnotu  $\alpha$  (2.21) do vzťahu (2.19) a dostaneme

$$0 \leq (\vec{x}, \vec{x}) - \frac{(\vec{y}, \vec{x})(\vec{x}, \vec{y})}{(\vec{y}, \vec{y})}, \quad (2.22)$$

odkiaľ potom vyplýva Schwarzova nerovnosť (2.18). Rovnosť nastáva iba vtedy ak dva vektory  $\vec{x}$  a  $\vec{y}$  sú lineárne závislé, t.j.  $\vec{x} = \gamma \vec{y}$ .

Teraz, keď už sme definovali skalárny súčin dvoch komplexných vektorov, môžeme prejsť k veľmi dôležitému pojmu ortogonalita vektorov.

**Definícia 2.6** Dva vektory  $\vec{x}, \vec{y} \in V$  sú navzájom **ortogonálne** ak ich skalárny súčin je rovný nule, t.j.

$$(\vec{x}, \vec{y}) = 0 \quad (2.23)$$

Niekedy budeme označovať vektor ortogonálny k  $\vec{x}$  ako  $\vec{x}_\perp$ .

Teraz sa vrátíme k problému výberu bázy. Konkrétne, zdefinujeme pojem **ortogonálnej bázy**, ktorá bude veľmi užitočná pri rozklade vektorov  $\vec{x}$ .

**Definícia 2.7** Ortogonálnou bázou v  $N$ -rozmernom vektorovom priestore sa nazýva množina  $N$  lineárne nezávislých vektorov  $\{\vec{x}_i\}$  ( $i = 1, \dots, N$ ), takých, že

$$(\vec{x}_i, \vec{x}_j) = 0; \quad \forall i \neq j. \quad (2.24)$$

#### Príklad

Vo vektorovom priestore  $\mathbb{C}^3$  tri vektory

$$\vec{x}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \vec{x}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 3 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \vec{x}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix}; \quad (2.25)$$

tvoria ortogonálnu bázu.

### 2.1.3 Rozklad vektorov

Vyberme si nejakú ortogonálnu bázu  $\{\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N\}$  v  $N$ -rozmernom vektorovom priestore. Potom každý vektor tohoto priestoru môžeme reprezentovať ako

$$\vec{x} = \sum_{i=1}^N \lambda_i \vec{x}_i \quad (2.26)$$

Našou úlohou je nájsť koeficienty rozkladu  $\lambda_i$ . Z ortogonalít bázových vektorov vyplýva, že skalárny súčin vektoru  $\vec{x}$  s ktorýmkoľvek bázovým vektorom má tvar

$$(\vec{x}_i, \vec{x}) = \lambda_i (\vec{x}_i, \vec{x}_i). \quad (2.27)$$

Z poslednej rovnice nájdeme explicitný tvar pre koeficient  $\lambda_i$  a potom môžeme vzt'ah (2.26) prepísať v tvare

$$\vec{x} = \sum_{i=1}^N \frac{(\vec{x}_i, \vec{x})}{(\vec{x}_i, \vec{x}_i)} \vec{x}_i. \quad (2.28)$$

Vidíme, že rozklad vektoru  $\vec{x}$  do konkrétnej bázy je dobre definovaný za predpokladu, že žiaden so skalárnych súčinov  $(\vec{x}_i, \vec{x}_i)$  nie je nulový. Takáto veličina je rovná štvorcu dĺžky vektora.

Aby sme jasne pochopili o čom hovorím, predpokladajme na chvíľu dvojrozmerný priestor reálnych vektorov  $\mathbb{R}^2$

$$\vec{x} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

Dĺžka takéhoto vektoru v rovine je definovaná ako  $l = \sqrt{a^2 + b^2}$ . Navyše platí, že ak vynásobíme vektor reálnym číslom  $\alpha$ , potom dĺžka vektoru  $\alpha\vec{x}$  sa rovná  $l = |\alpha|\sqrt{a^2 + b^2}$ . Nakoniec si ešte pripomenieme, že dva vektory  $\vec{x}_1$  a  $\vec{x}_2$  v rovine spĺňajú tzv. trojuholníkovú nerovnosť, t.j. dĺžka vektoru  $\vec{x}_1 + \vec{x}_2$  je vždy menšia ako suma dĺžok vektorov  $\vec{x}_1$  a  $\vec{x}_2$ .

Pojem dĺžky vektora môžeme formalizovať ak zavedieme pojem **norma** vektora  $\vec{x}$ . Tento koncept bude pre nás veľmi dôležitý pokiaľ budeme chcieť explicitne určiť ako blízko, resp. ďaleko, sú od seba "vzdialené" dva vektory. Norma je tiež veľmi dôležitá pri definícii konvergencie vo vektorových priestoroch.

**Definícia 2.8** S každému vektoru  $\vec{x} \in V$  vektorového priestoru  $V$  môžeme priradiť reálne číslo  $\|\vec{x}\|$  - **normu**, pričom

$$(1) \quad \forall \vec{x} \in V : \quad \|\vec{x}\| \geq 0 \text{ and } \|\vec{x}\| = 0 \Leftrightarrow \vec{x} = \vec{0} \quad (\text{pozitívnosť})$$

$$(2) \quad \forall \vec{x} \in V, \alpha \in \mathbb{C} : \quad \|\alpha\vec{x}\| = |\alpha| \cdot \|\vec{x}\| \quad (\text{linearita})$$

$$(3) \quad \forall \vec{x}, \vec{y} \in V : \quad \|\vec{x} + \vec{y}\| \leq \|\vec{x}\| + \|\vec{y}\| \quad (\text{trojuholníková nerovnosť})$$

Vektorový priestor s normou sa nazýva **normovaným vektorovým priestorom**. Medzi skalárnymi súčinom a normou na vektorovom priestore existuje veľmi úzky vzťah.

**Lema 2.2** Ak je na komplexnom vektorovom priestore zadaný skalárny súčin, potom môžeme normu vektora  $\vec{x}$  definovať ako

$$\|\vec{x}\| = \sqrt{(\vec{x}, \vec{x})} \quad (2.29)$$

#### Dôkaz

- Vlastnosti (1) a (2) normy priamo vyplývajú z definície 2.5 skalárneho súčinu.
- Na dôkaz trojuholníkovy nerovnosti použijeme Schwarzovu nerovnosť:

$$\begin{aligned} \|\vec{x} + \vec{y}\|^2 &= |(\vec{x} + \vec{y}, \vec{x} + \vec{y})| \\ &= |(\vec{x}, \vec{x} + \vec{y}) + (\vec{y}, \vec{x} + \vec{y})| \\ &\leq |(\vec{x}, \vec{x} + \vec{y})| + |(\vec{y}, \vec{x} + \vec{y})| \\ &\leq \|\vec{x}\| \cdot \|\vec{x} + \vec{y}\| + \|\vec{y}\| \cdot \|\vec{x} + \vec{y}\| \end{aligned} \quad (2.30)$$

Ak obe časti predchádzajúceho vzt'ahu vydáme členom  $\|\vec{x} + \vec{y}\|$  dostaneme trojuholníkovú nerovnosť. Samozrejme, tu musíme predpokladať, že  $\vec{x} + \vec{y} \neq \vec{0}$ . Ak by však  $\vec{x} + \vec{y} = \vec{0}$  potom Schwarzova nerovnosť je triviálne splnená.

Z predchádzajúcej lemy priamo vyplýva, že každý unitárny vektorový priestor jednoznačne určuje normovaný vektorový priestor. Chceme vás upozorniť, že opačné tvrdenie nie je pravdivé, t.j. nie každá norma definuje skalárny súčin.

Teraz, keď sme už zaviedli pojem normy môžeme definovať **ortonormálnu bázu**, v ktorej má rozklad (2.28) jednoduchý tvar.

**Definícia 2.9** Množina  $N$  vzájomne ortogonálnych lineárne nezávislých vektorov  $\{\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N\}$  jednotkovej dĺžky, t.j.  $\|\vec{x}_i\|^2 = (\vec{x}_i, \vec{x}_i) = 1$ , tvorí **ortonormovanú bázu** v  $N$ -rozmernom vektorovom priestore  $V$ . Každý vektor  $\vec{x} \in V$  sa dá potom rozložiť ako

$$\vec{x} = \sum_{i=1}^N (\vec{x}_i, \vec{x}) \vec{x}_i = \sum_{i=1}^N \alpha_i \vec{x}_i, \quad (2.31)$$

**Komponenty** vektora  $\vec{x}$  v báze  $\{\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N\}$  sú určené vzťahom  $\alpha_i = (\vec{x}_i, \vec{x})$ .

Na to aby sme mohli aktívne používať ortonormované bázy musíme poznať konštruktívny predpis ako ich vytvárať. Existuje niekoľko takýchto ortogonalizačných procedúr. Najznámejšia je **Gram-Schmidtova** procedúra, pomocou ktorej z množiny  $\mathcal{S} = \{\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N\}$  lineárne nezávislých vektorov môžeme zostrojiť množinu ortonormovaných vektorov  $\{\vec{e}_1, \dots, \vec{e}_N\}$ , podľa nasledovného predpisu:

**Prvý krok** Z množiny  $\mathcal{S}$  vyberieme vektor  $\vec{f}_1 = \vec{x}_1$  a vytvoríme z neho normovaný vektor

$$\vec{e}_1 = \vec{f}_1 / \|\vec{f}_1\|. \quad (2.32)$$

Tu spomeniem, že vektor  $\vec{x}_1$  má istotne nenulovú normu, pretože predpokladáme, že patrí do množiny lineárne nezávislých vektorov.

**Druhý krok** Vytvoríme vektor

$$\vec{f}_2 = \vec{x}_2 - (\vec{x}_2, \vec{e}_1) \vec{e}_1 \quad (2.33)$$

normovaním ktorého dostaneme druhý vektor ortonormovanej bázy, t.j.

$$\vec{e}_2 = \vec{f}_2 / \|\vec{f}_2\|. \quad (2.34)$$

Vektory  $\vec{x}_1$  a  $\vec{x}_2$  sú lineárne nezávislé a preto  $\vec{f}_2 \neq \vec{0}$ . Z konštrukcie vektorov  $\vec{e}_j$ , je zrejmé, že  $(\vec{e}_1, \vec{e}_2) = 0$ .

**k-ty krok** Vytvoríme vektor

$$\vec{f}_k = \vec{x}_k - \sum_{i=1}^{k-1} (\vec{x}_k, \vec{e}_i) \vec{e}_i. \quad (2.35)$$

Keďže  $\mathcal{S}$  je množinou lineárne nezávislých vektorov, potom platí, že  $\vec{f}_k \neq \vec{0}$  a môžeme zostrojiť normovaný vektor

$$\vec{e}_k = \vec{f}_k / \|\vec{f}_k\|. \quad (2.36)$$

Lahko ukážeme, že tento vektor je normovaný na jednotku a kolmý k všetkým vektorom  $\vec{e}_j$  pre  $1 \leq j < k$ .

**N-ty krok** V tomto kroku ukončíme celý proces konštrukcie ortonormovanej bázy. Na konci Gram-Schmidtovej procedúry dostaneme množinu  $\mathcal{B} = \{\vec{e}_1, \dots, \vec{e}_N\}$  ortonormovaných vektorov.

### 2.1.4 Úplnosť a Hilbertove priestory

V predchádzajúcej časti našich prednášok sme sa oboznámili s mnohými pojmami dôležitými pri vyšetrovaní vektorových priestorov. Zaviedli sme pojem skalárneho súčinu, normy, bázy, rozmeru vektorového priestoru. Na to, aby sme mohli zdefinovať **Hilbertove priestory** musíme ešte definovať pojem **úplnosti** vektorového priestoru.

Predpokladajme postupnosť elementov vektorového priestoru

$$\{\vec{x}_i\}_{i=0, \dots, \infty} \equiv (\vec{x}_0, \vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots). \quad (2.37)$$

**Definícia 2.10** Postupnosť  $\{\vec{x}_i\}_{i=0, \dots, \infty}$  elementov normovaného vektorového priestoru  $V$  konverguje k vektoru  $\vec{x} \in V$  ak  $\forall \epsilon > 0, \exists n_0$  také, že pre všetky  $n > n_0$  platí

$$\|\vec{x} - \vec{x}_n\| \leq \epsilon. \quad (2.38)$$

Niekedy nevieme presne, ktorý je limitný element  $\vec{x}$ , a preto môžeme definovať nasledovnú postupnosť:

**Definícia 2.11** Postupnosť  $\{\vec{x}_i\}_{i=0, \dots, \infty}$  elementov normovaného vektorového priestoru  $V$  sa nazýva **Cauchyho postupnosťou** ak  $\forall \epsilon > 0, \exists n_0$  také, že pre všetky  $n, m > n_0$  platí

$$\|\vec{x}_m - \vec{x}_n\| \leq \epsilon. \quad (2.39)$$

**Poznámka** Nie každá Cauchyho postupnosť konverguje. Konkrétne, existujú prípady, kedy limitné elementy postupnosti nie sú elementami vektorového priestoru  $V$ . Aby sme ilustrovali tento prípad, uvažujme vektorový priestor

$$V := \{\vec{x} : \text{iba konečný počet komponent týchto vektorov je nenulových}\}$$

Príkladom sú vektory  $\vec{x} = (1, 2, 3, 4, 5, 0, \dots)$ . Množina  $V$  je vektorovým priestorom s operáciou súčtu definou ako

$$\vec{x} + \vec{y} = (x_1 + y_1, x_2 + y_2, \dots)$$

a operáciou násobenia komplexným číslom

$$c \cdot \vec{x} = (cx_1, cx_2, \dots).$$

Teraz ešte musíme definovať skalárny súčin na tomto priestore:

$$(\vec{x}, \vec{y}) = \sum_{k=1}^{\infty} x_k^* y_k.$$

Z Lemy 2.2 potom vyplýva i definícia normy na priestore  $V$ .

Uvažujme teda postupnosť vektorov

$$\begin{aligned}\vec{x}_1 &= (1, 0, 0, 0, 0 \dots) \\ \vec{x}_2 &= (1, \frac{1}{2}, 0, 0, 0 \dots) \\ \vec{x}_3 &= (1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2^2}, 0, 0 \dots) \\ \vec{x}_4 &= (1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2^2}, \frac{1}{2^3}, 0 \dots) \\ &\vdots \\ \vec{x}_k &= (1, \frac{1}{2}, \dots, \frac{1}{2^{k-1}}, 0 \dots).\end{aligned}$$

Pre každé  $n_0$  nájdeme také  $m$  a  $n$ , že  $m > n > n_0$  a

$$\|\vec{x}_m - \vec{x}_n\| = \|(0, \dots, 0, \frac{1}{2^n}, \frac{1}{2^{m-1}}, 0 \dots)\| \leq \frac{1}{2^{n-1}}.$$

Znamená to teda, že  $\{\vec{x}_i\}_{i=0, \dots, \infty}$  je Cauchyho postupnosťou. Z druhej strany však limitný vektor nie je elementom vektorového priestoru  $V$  pretože má nekonečne veľa nenulových elementov.

**Definícia 2.12** Vektorový priestor sa nazýva úplným ak každá Cauchyho postupnosť prvkov  $\vec{x} \in V$  konverguje k elementu, ktorý je prvkom  $V$ .

**Definícia 2.13** Úplný unitárny vektorový priestor nazývame **Hilbertovým priestorom**  $\mathcal{H}$ .

### 2.1.5 Stav kvantových systémov

V kvantovej teórii musíme byť schopní popisovať fyzikálne systémy, ktoré sa nachádzajú v superpozícii vzájomne sa vylučujúcich stavov - musíme teda vhodným spôsobom reprezentovať superpozície stavov. Ako sme sa už presvedčili na popis superpozícií sú vhodné vektorové priestory. Zo superpozičného princípu vyplýva, že nie všetky kvantové stavy sú vzájomne ortogonálne, znamená to, že medzi kvantovými stavmi existuje "prekryv", ktorý reprezentujeme skalárnym súčinom medzi týmito stavmi. Preto teda vyžadujeme aby stavy kvantových systémov boli popisované prvkami vektorového priestoru so skalárnym súčinom. Vzhľadom na pravdepodobnostný charakter kvantovej mechaniky musíme tiež vyžadovať aby na tomto priestore bola norma (táto je priamo definovaná skalárnym súčinom). Nakoniec ešte potrebujeme, aby bol tento vektorový priestor úplný. Je pochopiteľné aby sme vyžadovali, že Cauchyho postupnosť fyzikálnych stavov konverguje k fyzikálnemu stavu. Z týchto podmienok automaticky prichádzame k dôležitému postulátu

**Postulát 1** Stav kvantových systémov sa opisujú vektormi Hilbertových priestorov.

### 2.1.6 Diracov formalizmus

Doteraz sme označovali vektory v tvare  $\vec{x}$  a skalárne súčiny sme písali v tvare  $(\vec{x}, \vec{y})$ . Dirac zaviedol konvenciu

$$\vec{x} \leftrightarrow |x\rangle, \quad (2.40)$$

v ktorej sa vektor  $|x\rangle$  nazýva **ket**. Pred tým ako v Diracovom formalizme zavedieme pojem skalárneho súčinu budeme sa chvíľu venovať **lineárnym funkciám na vektorových priestoroch**.

**Definícia 2.14** Zobrazenie  $f : V \rightarrow \mathbf{C}$  z vektorového priestoru  $V$  na množinu komplexných čísiel sa nazýva **lineárne** ak pre všetky prvky  $|\psi\rangle, |\phi\rangle \in V$  a akékoľvek komplexné čísla  $\alpha, \beta \in \mathbf{C}$  platí

$$f(\alpha|\psi\rangle + \beta|\phi\rangle) = \alpha f(|\psi\rangle) + \beta f(|\phi\rangle). \quad (2.41)$$

Z predchádzajúcej definície vyplýva, že z dvoch lineárnych funkcií  $f_1$  a  $f_2$  môžeme zostrojiť lineárnu kombináciu  $\mu f_1 + \nu f_2$ , ktorá je opäť lineárnou funkciou. Inými slovami, lineárne funkcie tvoria lineárny priestor, na ktorom môžeme definovať skalárny súčin. Priestor lineárnych funkcií na vektorovom priestore  $V$  sa nazýva **duálnym priestorom**  $V^*$ .

Teraz definujeme lineárnu funkciu  $f_{|\phi\rangle} : V \rightarrow \mathbf{C}$ , kde  $|\phi\rangle \in V$ , takú, že pre každý vektor  $|\psi\rangle \in V$  platí

$$f_{|\phi\rangle}(|\psi\rangle) := (|\phi\rangle, |\psi\rangle). \quad (2.42)$$

Miesto funkcie  $f_{|\phi\rangle}$  môžeme tiež písať symbol

$$f_{|\phi\rangle} \leftrightarrow \langle \phi | \quad (2.43)$$

a skalárny súčin medzi vektormi  $|\phi\rangle$  a  $|\psi\rangle$  môžeme zapísať ako

$$(|\phi\rangle, |\psi\rangle) \equiv \langle \phi | \psi \rangle. \quad (2.44)$$

Dirac nazval objekt  $\langle \phi |$  ako **bra**. Ľavá časť skalárneho súčinu sa volá teda **bra**, pravá **ket**, a spolu tvoria zátvorku (**bracket**) skalárneho súčinu (2.44). Ešte raz chcem zdôrazniť, že **ket** je elementom vektorového priestoru  $V$  a **bra** je elementom duálneho priestoru  $V^*$ .

## 2.2 Lineárne operátory

Doteraz sme sa venovali popisu vektorov v Hilbertových priestoroch, ktoré korešpondujú čistým stavom kvantových systémov. Vo svojom časovom vývoji každý kvantový systém prechádza sekvenciou stavov. Musíme preto zaviesť formalizmus, pomocou ktorého sa dá opísať prechod kvantového systému z jedného stavu do druhého. Inými slovami, chceme opísať transformácie medzi vektormi Hilbertového priestoru. Keďže kvantová mechanika je lineárnou teóriou<sup>3</sup> sústredíme sa na popis lineárnych operátorov v Hilbertových priestoroch.

### 2.2.1 Definícia lineárnych operátorov a Diracov formalizmus

**Definícia 2.15** Lineárny operátor  $\hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  priradzuje ku každému vektoru  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  vektor  $\hat{A}|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ , pričom platí, že  $\forall \psi, \phi \in \mathcal{H}, \forall \alpha, \beta \in \mathbb{C}$

$$\hat{A}(\alpha|\psi\rangle + \beta|\phi\rangle) = \alpha\hat{A}|\psi\rangle + \beta\hat{A}|\phi\rangle \quad (2.45)$$

Lineárny operátor je jednoznačne určený svojim pôsobením na bázové vektory Hilbertovho priestoru  $\mathcal{H}$ . Vyberme teda ortonormovanú bázu  $\{|e_i\rangle | i = 1, \dots, N\}$  v  $\mathcal{H}$ . Pôsobením operátora  $\hat{A}$  na bázové vektory  $|e_i\rangle$  dostaneme novú množinu vektorov  $\{|f_i\rangle | i = 1, \dots, N\}$ :

$$|f_i\rangle := \hat{A}|e_i\rangle. \quad (2.46)$$

Každý z vektorov  $|f_i\rangle$  môžeme reprezentovať ako superpozíciu bázových vektorov  $|e_j\rangle$

$$|f_i\rangle := \sum_j A_{ji} |e_j\rangle, \quad (2.47)$$

kde  $A_{ji}$  sú maticové elementy operátora  $\hat{A}$  v báze  $\{|e_i\rangle\}$ , t.j.

$$A_{ji} = \langle e_j | (\hat{A}|e_i\rangle) \equiv \langle e_j | \hat{A} | e_i \rangle. \quad (2.48)$$

Tieto elementy jednoznačne reprezentujú lineárne operátory v maticovej forme. Vektory danej ortonormovanej bázy  $\{|e_i\rangle | i = 1, \dots, N\}$  môžeme reprezentovať ako stĺpec s jedným nenulovým elementom rovným jednotke, t.j.

$$|e_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}; \quad |e_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \dots |e_N\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2.49)$$

Potom každý vektor  $|g\rangle$  Hilbertovho priestoru môžeme zapísať v báze  $\{|e_i\rangle\}$  ako  $|g\rangle = \sum_i g_i |e_i\rangle$ . Tento rozklad môžeme prepísať ako stĺpec čísiel

$$|g\rangle = \sum_i g_i |e_i\rangle = \begin{pmatrix} g_1 \\ g_2 \\ \vdots \\ g_N \end{pmatrix} \quad (2.50)$$

<sup>3</sup>Toto o zd'aleka nie je triviálne tvrdenie. Existuje mnoho nelineárnych zovšeobecnení kvantovej mechaniky.

a potom operátor  $\hat{A}$  prepíšeme ako maticu

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & \cdots & A_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{N1} & \cdots & A_{NN} \end{pmatrix}. \quad (2.51)$$

Teraz zavedieme Diracovo označenie pre lineárne operátory. Budeme najprv uvažovať jednotkový operátor  $\hat{1}$ , ktorý zobrazuje každý vektor sám na seba. Uvažujme teda vektor  $|f\rangle$ , ktorý v báze  $\{|e_i\rangle | i = 1, \dots, N\}$  má tvar

$$|f\rangle = \sum_{j=1}^N |e_j\rangle \langle e_j | f \rangle. \quad (2.52)$$

Tento rozklad môžeme formálne prepísať ako

$$|f\rangle = \left( \sum_{j=1}^N |e_j\rangle \langle e_j| \right) |f\rangle. \quad (2.53)$$

Objekt v zátvorke pravej časti rovnice (2.53) je operátor, ktorý zobrazuje vektor  $|f\rangle$  sám na seba. Z predchádzajúcej diskusie je teda zrejmé, že takýto objekt môžeme nazvať jednotkovým operátorom, ktorý v danej báze reprezentujeme ako

$$\hat{1} = \sum_{j=1}^N |e_j\rangle \langle e_j|. \quad (2.54)$$

Ďalej zapíšeme ľubovoľný lineárny operátor v Diracovej forme. Najprv využijeme identitu

$$\hat{A} = \hat{1} \hat{A} \hat{1}. \quad (2.55)$$

Ak každý z jednotkových operátorov v rovnici (2.55) nahradíme rozkladom (2.54) potom operátor  $\hat{A}$  môžeme prepísať v tvare

$$\begin{aligned} \hat{A} &= \left( \sum_{j=1}^N |e_j\rangle \langle e_j| \right) \hat{A} \left( \sum_{k=1}^N |e_k\rangle \langle e_k| \right) \\ &= \sum_{j,k=1}^N |e_j\rangle \left( \langle e_j | \hat{A} | e_k \rangle \right) \langle e_k| \\ &= \sum_{j,k=1}^N A_{jk} |e_j\rangle \langle e_k| \end{aligned} \quad (2.56)$$

kde sme použili označenie  $A_{jk} = \langle e_j | \hat{A} | e_k \rangle$ . Vidíme teda, že ak poznáme maticové elementy operátora  $\hat{A}$  v báze  $|e_j\rangle$ , potom môžeme tento operátor elegantne reprezentovať v Diracovom zápise (2.56).

### 2.2.2 Združené a Hermitove operátory

Kvantová mechanika je lineárna teória a operátory, ktoré používa na popis fyzikálnych veličín sú lineárne. Musíme však zdôrazniť, že nie všetky lineárne operátory korešpondujú fyzikálnym veličinám (resp. pozorovateľným veličinám). Iba špeciálna trieda lineárnych operátorov popisuje pozorovateľné veličiny. V ďalšom sa budeme venovať definícii týchto operátorov.

Predpokladajme operátor  $\hat{A}$ . V ortonormovanej báze  $\{|e_j\rangle\}$  jeho maticové elementy zapíšeme ako

$$A_{ji} = \langle e_j | (\hat{A} |e_i\rangle) = (\langle e_j | \hat{A} |e_i\rangle), \quad (2.57)$$

kde sme zapísali skalárny súčet dvoma spôsobmi. Prvý zápis je transparentný, pretože máme jasne definovanú operáciu pôsobenia operátora  $\hat{A}$  na *ket* vektor. Musíme však presne zdefinovať aký je zmysel *bra* vektoru  $\langle e_j | \hat{A}$ , resp. musíme určiť akému *ket* vektoru tento *bra* zodpovedá. Na to budeme potrebovať nasledujúcu definíciu.

**Definícia 2.16** **Združený operátor**  $\hat{A}^\dagger$  korešpondujúci operátoru  $\hat{A}$ , je taký, že  $\forall |x\rangle, |y\rangle \in \mathcal{H}$  platí

$$\left( |y\rangle, \hat{A}^\dagger |x\rangle \right)^* = \left( \hat{A}^\dagger |x\rangle, |y\rangle \right) := \left( |x\rangle, \hat{A} |y\rangle \right), \quad (2.58)$$

resp. v Diracovom zápise, pre združený operátor platí

$$\langle y | \hat{A}^\dagger |x\rangle := \langle x | \hat{A} |y\rangle^*. \quad (2.59)$$

Jedna z najdôležitejších vlastností združených operátorov je obsiahnutá v nasledovnej leme:

**Lema 2.4** Pred dva združené operátory  $\hat{A}$  a  $\hat{B}$  platí

$$\left( \hat{A}\hat{B} \right)^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger. \quad (2.60)$$

**Dôkaz** Vzťah (2.60) dokážeme nasledovne:

$$\begin{aligned} \left( |y\rangle, (\hat{A}\hat{B})^\dagger |x\rangle \right) &= \left( (\hat{A}\hat{B}) |x\rangle, |y\rangle \right)^* \\ &= \left( \hat{A}(\hat{B}|x\rangle), |y\rangle \right)^* \\ &= \left( \hat{B}|x\rangle, \hat{A}^\dagger |y\rangle \right)^* \\ &= \left( |y\rangle, \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger |x\rangle \right). \end{aligned}$$

Keďže postupnosť predchádzajúcich vzťahov platí pre všetky vektory  $|x\rangle$  a  $|y\rangle$ , potom  $\left( \hat{A}\hat{B} \right)^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger$ , čo bolo treba dokázať.  $\square$

Vo všeobecnosti sa združený operátor  $\hat{A}^\dagger$  nerovná operátoru  $\hat{A}$ . Existuje však trieda operátorov, ktoré túto vlastnosť majú.

**Definícia 2.17** Operátor  $\hat{A}$  sa nazýva **Hermitovým** alebo **samozdruženým**, ak pre  $\forall |x\rangle, |y\rangle \in \mathcal{H}$  platí

$$\langle y | \hat{A} |x\rangle = \langle x | \hat{A} |y\rangle^*. \quad (2.61)$$

V konečno-rozmerných Hilbertových priestoroch samozdružené a Hermitove operátory sú rovnaké. V nekonečne rozmerných Hilbertových priestoroch Hermitove a samozdružené operátory nie sú ekvivalentné. Rozdiel je v oblasti definície operátorov  $\hat{A}$  a  $\hat{A}^\dagger$ . V ďalšom budeme uvažovať predovšetkým konečno-rozmerné Hilbertove priestory, a tak nebudeme robiť rozdiel medzi samozdruženými a Hermitovými operátormi.

### 2.2.3 Vlastné hodnoty, vlastné vektory a spektrálna teoréma

Hermitove operátory hrajú kľúčovú úlohu v kvantovej mechanike. Ich vlastnostiam sa teda budeme podrobnejšie venovať. Začneme definíciou vlastných hodnôt a vlastných vektorov lineárnych operátorov.

**Definícia 2.18** Lineárny operátor  $\hat{A}$  pôsobiaci v  $N$ -rozmernom Hilbertovom priestore  $\mathcal{H}$  má **vlastný vektor**  $|\lambda\rangle$  a korešpondujúce **vlastné hodnoty**  $\lambda$  definované ako

$$\hat{A}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle, \quad (2.62)$$

resp.

$$\left( \hat{A} - \lambda \hat{1} \right) |\lambda\rangle = 0. \quad (2.63)$$

Z definície (2.63) plynie, že

$$\det \left( \hat{A} - \lambda \hat{1} \right) = 0. \quad (2.64)$$

Táto rovnica je ekvivalentná komplexnému polynómu rádu  $N$ . Takýto polynóm má presne  $N$  riešení, ktoré určujú vlastné hodnoty  $\lambda$ .

**Lema 2.5** Pre Hermitove operátory platí, že

- (1) ich všetky vlastné hodnoty sú **reálne** čísla;
- (2) vlastné vektory asociované s rôznymi vlastnými hodnotami sú navzájom **ortogonálne**.

**Dôkaz:**

(1) Nech  $\lambda$  je vlastná hodnota korešpondujúca vlastnému vektoru  $|\lambda\rangle$  Hermitovho operátora  $\hat{A}$ . Potom z hermitovosti  $\hat{A}$  vyplýva, že

$$\lambda^* = \langle \lambda | \hat{A} | \lambda \rangle^* = \langle \lambda | \hat{A}^\dagger | \lambda \rangle = \langle \lambda | \hat{A} | \lambda \rangle = \lambda,$$

odkiaľ plynie, že  $\lambda$  je reálne číslo.

(2) Nech  $|\lambda\rangle$  a  $|\mu\rangle$  sú dva vlastné vektory  $\hat{A}$  korešpondujúce dvom **rôznym** vlastným hodnotám  $\lambda$  a  $\mu$ . Potom

$$\begin{aligned} (\langle\mu|\hat{A}|\lambda\rangle)^* &= \langle\lambda|\hat{A}|\mu\rangle; \Rightarrow \\ \lambda\langle\lambda|\mu\rangle &= \mu\langle\lambda|\mu\rangle \end{aligned}$$

Ak  $\lambda$  a  $\mu$  sú rôzne, potom s predchádzajúceho vzťahu plynie, že  $\langle\lambda|\mu\rangle = 0$ , teda korešpondujúce vlastné vektory sú ortogonálne.

V každom experimente výsledok merania fyzikálnej veličiny je **reálne** číslo. Preto, ak chceme fyzikálne veličiny opisovať ako operátory, musíme požadovať, aby ich vlastné hodnoty boli reálne čísla. Takúto požiadavku spĺňajú iba Hermitove operátory.

**Postulát 2** Fyzikálne (pozorovateľné) veličiny v kvantovej mechanike sa opisujú Hermitovými operátormi na Hilbertových priestoroch. Vlastné hodnoty  $\lambda_i$  Hermitových operátorov korešpondujú možným výsledkom merania.

Nie vždy rôznymi vlastnými vektormi  $|\lambda_1\rangle$  a  $|\lambda_2\rangle$  operátora  $\hat{A}$ , t.j.  $\langle\lambda_1|\lambda_2\rangle = 0$ , korešpondujú rôzne vlastné hodnoty. Vlastná hodnota  $\lambda$  sa nazýva  **$d$ -krát degenerovaná** ak existuje množina  $d$  lineárne nezávislých vektorov  $\{|\lambda_1\rangle, \dots, |\lambda_d\rangle\}$ , takých, že

$$\hat{A}|\lambda_j\rangle = \lambda|\lambda_j\rangle; \quad j = 1, \dots, d \quad (2.65)$$

t.j. všetky tieto vektory majú rovnakú vlastnú hodnotu. Všetky lineárne superpozície vektorov  $\{|\lambda_1\rangle, \dots, |\lambda_d\rangle\}$  tvoria  $d$ -rozmerný vektorový priestor. V takomto priestore môžeme nájsť bázu. Uvažujme teda Hermitov operátor  $\hat{A}$  s vlastnými hodnotami  $\lambda_1, \dots, \lambda_k$ , ktoré sú  $d(\lambda_j)$ -krát degenerované. Každý vlastnej hodnote  $\lambda_i$  korešponduje ortonormálna báza s  $d(\lambda_i)$  vektormi. Z Lemy 2.5 vieme, že vektory asociované s rôznymi vlastnými hodnotami sú vzájomne ortogonálne. Takto sme našli  $\sum_{i=1}^k d(\lambda_k)$  ortonormálnych *vlastných* vektorov Hermitovho operátora  $\hat{A}$ . Dokopy máme  $N$  takýchto vlastných vektorov, ktoré tvoria bázu Hilbertovho priestoru  $\mathcal{H}$ , na ktorom pôsobí operátor  $\hat{A}$ .

### Teoréma 2.3 (Teoréma úplnosti)

Vlastné vektory  $|\lambda_i\rangle$  akéhokolvek Hermitovho operátora  $\hat{A} = \sum_i \lambda_i |\lambda_i\rangle\langle\lambda_i|$  na Hilbertovom priestore  $\mathcal{H}$  tvoria bázu tohoto priestoru. To znamená, že  $\forall |x\rangle \in \mathcal{H}$  nájdeme koeficienty  $x_i$  také, že

$$|x\rangle = \sum_i x_i |\lambda_i\rangle. \quad (2.66)$$

**Poznámka:** Nie každý *lineárny* operátor  $\hat{A}$  na  $N$ -rozmernom Hilbertovom priestore má  $N$  lineárne nezávislých vektorov. Ako príklad uviem maticu  $2 \times 2$

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.67)$$

ktorá má iba jednu vlastnú hodnotu  $\lambda = 0$ . Teda jej každý vlastný vektor musí spĺňať rovnicu

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

odkiaľ vyplýva, že  $b = 0$ , a teda  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  je jediný normovaný vlastný vektor matice (2.67).

Každý Hermitov operátor môžeme rozložiť v báze jeho vlastných vektorov  $|\lambda_i\rangle$  ako

$$\hat{A} = \sum_i \lambda_i |\lambda_i\rangle\langle\lambda_i| \quad (2.68)$$

kde  $\lambda_i$  sú vlastné hodnoty  $\hat{A}$ . Rozklad operátora  $\hat{A}$  do tvaru (2.68) sa nazýva diagonalizáciou. V Hilbertovom priestore môžeme zaviesť veľa báz. Medzi inými je to i kanonická báza, vektory ktorej majú tvar

$$|e_j\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.69)$$

Ak teda chceme prepísať operátor  $\hat{A}$  v kanonickej (resp. akejkolvek inej) báze musíme nájsť *zobrazenie* medzi bázami. Rozložme teda vlastný vektor  $|\lambda_i\rangle$  operátora  $\hat{A}$  v báze  $|e_j\rangle$ , t.j.  $|\lambda_i\rangle = \sum_j \alpha_{ji} |e_j\rangle$ . Toto zobrazenie je realizované **unitárnym operátorom**  $\hat{U}$

$$\hat{U} = \sum_{j=1}^N |\lambda_j\rangle\langle e_j| = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \cdots & \alpha_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \alpha_{N1} & \cdots & \alpha_{NN} \end{pmatrix}. \quad (2.70)$$

**Definícia 2.19** Lineárny operátor  $\hat{U}$  na Hilbertovom priestore  $\mathcal{H}$  sa nazýva **unitárnym operátorom** ak zobrazuje celý Hilbertov priestor na sám seba, t.j.  $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  a súčasne  $\forall |\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}$

$$\langle\psi|\hat{U}^\dagger\hat{U}|\phi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle, \quad (2.71)$$

čo znamená, že pri unitárnych transformáciách sa zachováva skalárny súčin.

Podmienku unitárnosti (2.71) tiež môžeme prepísať v tvare

$$\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{1}; \quad \text{resp.} \quad \hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{1}. \quad (2.72)$$

Pre unitárne operátory v konečno-rozmerných Hilbertových priestoroch platí

**Teoréma 2.4**

Vlastné vektory akéhokolvek unitárneho operátora  $\hat{U}$  v  $N$ -rozmernom Hilbertovom priestore  $\mathcal{H}$  tvoria úplnú bázu a vlastné hodnoty majú vždy tvar  $e^{i\varphi}$  kde  $\varphi$  je reálny parameter.

**Dôkaz:** Prvú časť dôkazu toho, že vlastné vektory unitárnych operátorov tvoria úplnú bázu ponechám ako cvičenie. Pozrime sa však podrobnejšie na tvrdenie, že vlastné hodnoty týchto operátorov majú tvar  $e^{i\varphi}$ . Nech teda  $|\lambda\rangle$  je vlastným vektorom  $\hat{U}$ , t.j.  $\hat{U}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$ , potom využijúc vzťah (2.72) zapíšeme

$$|\lambda\rangle = \hat{U}^\dagger \hat{U}|\lambda\rangle = \lambda \hat{U}^\dagger |\lambda\rangle. \quad (2.73)$$

Z rovnice (2.73) je zrejmé, že  $\lambda \neq 0$ , pretože v opačnom prípade by stav  $|\lambda\rangle$  bol nulovým vektorom, ktorý nikdy nie je vlastným vektorom lineárneho operátora. Ak vynásobíme ľavú i pravú stranu rovnice (2.73) bra vektorom  $\langle\lambda|$  dostaneme vzťah

$$\frac{1}{\lambda} = \langle\lambda|\hat{U}^\dagger|\lambda\rangle = \left(\langle\lambda|\hat{U}|\lambda\rangle\right)^* = \lambda^*, \quad (2.74)$$

odkiaľ vyplýva

$$|\lambda|^2 = 1, \quad \Leftrightarrow \lambda = e^{i\varphi}. \quad (2.75)$$

**2.2.4 Operátorové funkcie**

V kvantovej mechanike sa často vyskytujú operátory, ktoré sú definované ako funkcie operátorov  $F(\hat{A})$ . Typickým príkladom sú napríklad Hamiltoniány. Preto je dôležité, aby sme poznali vlastnosti takýchto funkcií. Existujú dve možnosti ako môžeme definovať funkcie matíc. Jedna možnosť je definovať tieto funkcie na vlastných hodnotách týchto matíc (pozri Definíciu 2.20), druhá možnosť je definovať ich v tvare nekonečných radov (Definícia 2.21).

**Definícia 2.20** Nech  $\hat{A}$  je lineárny operátor na  $\mathcal{H}$  s vlastnými hodnotami  $a_i$  a vlastnými vektormi  $|a_i\rangle$ . Ďalej nech funkcia  $f(z) : \mathbf{C} \rightarrow \mathbf{C}$  zobrazuje množinu komplexných čísel na množinu komplexných čísel. Potom definujeme funkciu  $f(\hat{A})$  ako

$$f(\hat{A}) := \sum_{i=1}^N f(a_i) |a_i\rangle \langle a_i|. \quad (2.76)$$

**Definícia 2.21** Nech  $\hat{A}$  je lineárny operátor na  $\mathcal{H}$ . Nech funkcia  $f(z) : \mathbf{C} \rightarrow \mathbf{C}$  sa dá rozložiť do radu

$$f(z) = \sum_{k=1}^{\infty} f_k z^k \quad (2.77)$$

potom definujeme operátorovú funkciu  $f(\hat{A})$  ako

$$f(\hat{A}) = \sum_{k=1}^{\infty} f_k \hat{A}^k \quad (2.78)$$

**Definícia 2.22** Nech funkcia  $g(z) : \mathbf{C} \rightarrow \mathbf{C}$  je definovaná ako  $g(z) = \frac{df(z)}{dz}$ , potom derivácia operátorovej funkcie  $f(\hat{A})$  je

$$\frac{df(\hat{A})}{d\hat{A}} = g(\hat{A}). \quad (2.79)$$

Teraz dokážeme, že definície 2.20 a 2.22 určujú identické operátorové funkcie:

$$\begin{aligned} f(\hat{A}) &= \sum_{k=1}^{\infty} f_k \hat{A}^k \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} f_k \left( \sum_{j=1}^N a_j |a_j\rangle \langle a_j| \right)^k \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} f_k \sum_{j=1}^N a_j^k |a_j\rangle \langle a_j| \\ &= \sum_{j=1}^N \left( \sum_{k=1}^{\infty} f_k a_j^k \right) |a_j\rangle \langle a_j| \\ &= \sum_{j=1}^N f(a_j) |a_j\rangle \langle a_j| \end{aligned} \quad (2.80)$$

V prípade operátorov, vlastné vektory ktorých netvoria ortonormovanú bázu, nemôžeme využiť definíciu 2.20, a tak funkcie týchto operátorov definujeme pomocou vzťahu (2.78). V kvantovej mechanike sa však s takýmito operátormi nestretávame, a preto môžeme používať obe definície.

**Príklad:**

Nech  $\hat{A}$  je Hermitov operátor s vlastnými hodnotami  $a_i$  a vlastnými vektormi  $|a_i\rangle$ . Nájdime operátor  $\hat{U} = \exp(i\hat{A})$ :

$$\hat{U} = \exp(i\hat{A}) = \exp\left(i \sum_{j=1}^N a_j |a_j\rangle \langle a_j|\right) = \sum_{j=1}^N e^{i a_j} |a_j\rangle \langle a_j|. \quad (2.81)$$



Vidíme teda, že  $\hat{U}$  má vlastné vektory  $|a_i\rangle$  a vlastné hodnoty  $e^{ia_j}$ , kde  $a_j$  sú reálne čísla. Z definície 2.19 teda vyplýva, že  $\hat{U}$  je unitárny operátor, čo môžeme priamo preveriť, pretože pre operátor (2.81) platí podmienka (2.72). Dá sa ukázať, že platí i všeobecnejšie tvrdenie:

**Lema 2.6** Pre akýkoľvek unitárny operátor  $\hat{U}$  môžeme nájsť taký Hermitov operátor  $\hat{H}$ , že platí

$$\hat{U} = \exp(i\hat{H}). \quad (2.82)$$

#### Príklady:

(1) Dokážte, že pre každý unitárny operátor  $\hat{U}$  a každú funkciu  $f(\hat{A})$  platí:

$$f(\hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U}) = \hat{U}^\dagger f(\hat{A}) \hat{U}. \quad (2.83)$$

(2) Dokážte, že funkcii  $f(z) = \sum_{k=1}^{\infty} f_k(z - z_0)^k$  korešponduje operátorová funkcia  $f(\hat{A}) = \sum_{k=1}^{\infty} f_k(\hat{A} - z_0 \hat{1})^k$ .

Predpokladajme ďalej, že operátor  $\hat{A}(s)$  parametricky závisí od reálneho parametra  $s$ . Tak ako v prípade  $c$ -číselných funkcií, môžeme zaviesť pojem derivácie operátoru:

$$\frac{d\hat{A}}{ds}(s) := \lim_{\Delta s \rightarrow 0} \frac{\hat{A}(s + \Delta s) - \hat{A}(s)}{\Delta s}. \quad (2.84)$$

Z predchádzajúcej definície derivácie operátora potom môžeme odvodiť následovný vzťah pre ľubovoľné dva lineárne operátory  $\hat{A}(s)$  a  $\hat{B}(s)$ :

$$\frac{d(\hat{A}\hat{B})}{ds}(s) = \frac{d\hat{A}}{ds}(s)\hat{B}(s) + \hat{A}(s)\frac{d\hat{B}}{ds}(s). \quad (2.85)$$

Tu musím zdôrazniť, že usporiadanie operátorov vo vzťahu (2.85) zohráva veľkú úlohu.

**Definícia 2.23 Komutátor** dvoch operátorov  $\hat{A}$  a  $\hat{B}$  je definovaný ako

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (2.86)$$

Komutátor  $c$ -čísel (t.j. matíc  $1 \times 1$ ) je vždy rovný nule. Vo všeobecnosti, dva operátory nekomutujú, t.j.  $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$ . Ako príklad môžeme uviesť Pauliho spinové operátory, ktoré môžeme reprezentovať ako  $2 \times 2$  matice:

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_0 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}; & \hat{\sigma}_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \\ \hat{\sigma}_2 &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; & \hat{\sigma}_3 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.87)$$

Pauliho operátory spĺňajú následovné komutačné vzťahy

$$[\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j] = i\epsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k, \quad i, j, k = 1, 2, 3 \quad (2.88)$$

kde  $\epsilon_{ijk}$  je úplne antisymetrický tenzor. Komutačné vzťahy (2.88) budeme neskôr aktívne využívať.

**Lema 2.7** Pre ľubovoľné lineárne operátory  $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$  na Hilbertovom priestore  $\mathcal{H}$  platí

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}; \quad (2.89)$$

$$0 = [\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] \quad (2.90)$$

Dôkaz predchádzajúcej lemy môžeme previesť priamou previerkou vzťahov definovaných rovnicami (2.89) a (2.90).

Pre komutujúce operátory odvodíme užitočné vzťahy, ktoré využijeme pri analýze kvantovo-mechanických meraní. Medzi iným platí, že pozorovateľné veličiny, operátory ktorých komutujú, môžu byť simultánne pozorované (detaily tohoto tvrdenia preanalýzujeme v nasledujúcej kapitole).

**Lema 2.8** Dva komutujúce operátory  $\hat{A}$  a  $\hat{B}$  na Hilbertovom priestore  $\mathcal{H}$  majú spoločné vlastné vektory, t.j. tieto operátory môžu byť simultánne diagonalizované.

**Dôkaz:** Pre jednoduchosť budeme predpokladať, že oba operátory majú nedegenerované spektrum vlastných hodnôt. Zvolíme si ďalej bázu  $\{|a_i\rangle\}$ , v ktorej je  $\hat{A}$  diagonálny. Keďže predpokladáme, že operátory  $\hat{A}$  a  $\hat{B}$  komutujú, potom platí

$$\hat{A}(\hat{B}|a_i\rangle) = \hat{B}\hat{A}|a_i\rangle = a_i(\hat{B}|a_i\rangle); \quad (2.91)$$

odkiaľ vyplýva, že ak  $|a_i\rangle$  je vlastným vektorom  $\hat{A}$ , potom i  $\hat{B}|a_i\rangle$  je vlastným vektorom  $\hat{A}$  s vlastnou hodnotou  $a_i$ . Keďže sme predpokladali, že spektrum vlastných stavov je nedegenerované, potom musí platiť, že

$$\hat{B}|a_i\rangle = b_i|a_i\rangle, \quad (2.92)$$

čo znamená, že  $|a_i\rangle$  je vlastným vektorom  $\hat{B}$  s vlastnou hodnotou  $b_i$ .  $\square$

**Lema 2.9** Nech  $\hat{A}$  a  $\hat{B}$  sú dva operátory na Hilbertovom priestore  $\mathcal{H}$  také, že  $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{1}$ . Potom pre deriváciu operátorovej funkcie  $f(\hat{A})$  platí

$$[\hat{B}, f(\hat{A})] = \frac{df}{dA}(\hat{A}). \quad (2.93)$$

**Dôkaz:** Operátorovú funkciu  $f(\hat{A})$  reprezentujeme radom (2.78), a tak môžeme komutátor v pravej časti rovnice (2.93) prepísať v tvare

$$[\hat{B}, f(\hat{A})] = [\hat{B}, \sum_k f_k \hat{A}^k] = \sum_k f_k [\hat{B}, \hat{A}^k]. \quad (2.94)$$

Ďalej musíme spočítať komutátor  $[\hat{B}, \hat{A}^k]$ . Indukciou dokážeme, že

$$[\hat{B}, \hat{A}^k] = k[\hat{B}, \hat{A}^{k-1}] \quad (2.95)$$

Pre  $k = 1$  je rovnica splnená. Predpokladajme, že platí pre  $k = n$ . Pre  $k = n + 1$  môžeme s pomocou vzťahu (2.89) rovnicu (2.95) prepísať ako

$$[\hat{B}, \hat{A}^{(n+1)}] \equiv [\hat{B}, \hat{A}^n \hat{A}] = [\hat{B}, \hat{A}^n] \hat{A} + \hat{A}^n [\hat{B}, \hat{A}]. \quad (2.96)$$

Keďže predpokladáme vzťah  $[\hat{B}, \hat{A}] = \hat{1}$ , potom z indukčného predpokladu dostávame

$$[\hat{B}, \hat{A}^{(n+1)}] = n \hat{A}^{(n-1)} \hat{A} + \hat{A}^n = (n + 1) \hat{A}^n. \quad (2.97)$$

Teraz pre komutátor  $[\hat{B}, f(\hat{A})]$  nájdeme

$$\begin{aligned} [\hat{B}, f(\hat{A})] &= \sum_k f_k [\hat{B}, \hat{A}^k] \\ &= \sum_k f_k k \hat{A}^{(k-1)} \\ &= \frac{df}{d\hat{A}}(\hat{A}), \end{aligned} \quad (2.98)$$

čo ukončuje náš dôkaz.  $\square$

**Lema 2.10** Pre ľubovoľné operátory  $\hat{A}$  a  $\hat{B}$  s na Hilbertovom priestore  $\mathcal{H}$  platí

$$e^{\hat{B}} \hat{A} e^{-\hat{B}} = \hat{A} + [\hat{B}, \hat{A}] + \frac{1}{2} [\hat{B}, [\hat{B}, \hat{A}]] + \dots \quad (2.99)$$

Z tejto lemy priamo vyplýva, že ak  $[\hat{B}, [\hat{B}, \hat{A}]] = 0$ , potom

$$e^{\hat{B}} \hat{A} e^{-\hat{B}} = \hat{A} + [\hat{B}, \hat{A}]. \quad (2.100)$$

**Dôkaz:** Definujme funkciu jednej reálnej premennej

$$f(\alpha) = e^{\alpha \hat{B}} \hat{A} e^{-\alpha \hat{B}} \quad (2.101)$$

Túto funkciu môžeme rozložiť do Taylorovho radu v okolí  $\alpha = 0$ , t.j.

$$f(\alpha) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\alpha^k}{k!} \left. \frac{d^k f(\alpha)}{d\alpha^k} \right|_{\alpha=0}.$$

Pre derivácie funkcie  $f(\alpha)$  v okolí  $\alpha = 0$  nájdeme

$$\begin{aligned} \left. \frac{df(\alpha)}{d\alpha} \right|_{\alpha=0} &= [\hat{B}, \hat{A}]; \\ \left. \frac{d^2 f(\alpha)}{d\alpha^2} \right|_{\alpha=0} &= [\hat{B}, [\hat{B}, \hat{A}]]; \\ &\vdots \end{aligned}$$

odkiaľ indukciou dokážeme Lemu 2.7.  $\square$

## 2.3 Operátory s kontinuálnym spektrom

Doteraz sme sa venovali operátorom na konečno-rozmerných Hilbertových priestoroch. V kvantovej fyzike sú mnohé systémy s nekonečne-rozmernými stavovými priestormi. Samozrejme, že lineárne operátory v týchto priestoroch sú tiež nekonečne-rozmerné. Väčšina výsledkov, ktoré sme odvodili v predchádzajúcich častiach tejto kapitoly pre konečno-rozmerné Hilbertove priestory platí i v nekonečne-rozmerných priestoroch. Napriek tomu existujú niektoré rozdiely, ktoré musíme prediskutovať.

### 2.3.1 Operátor polohy

Vo vlnovej mechanike sa stav častice vo voľnom priestore popisuje kvadraticky-integrovaťelnou vlnovou funkciou  $\psi(x)$ , štvorec absolútnej hodnoty ktorej determinuje pravdepodobnosť (hustotu pravdepodobnosti), nájsť časticu v bode  $x$ . Našou úlohou teraz bude reprezentovať vlnovú funkciu v Diracovom formalizme.

V konečno-rozmernom Hilbertovom priestore stav častice, reprezentovaný ket vektorom  $|\phi\rangle$  môžeme rozložiť v ortonormovanej báze  $\{|e_i\rangle\}$  a tento rozklad reprezentovať ako stĺpec:

$$|\phi\rangle \leftrightarrow \begin{pmatrix} \langle e_1 | \phi \rangle \\ \vdots \\ \langle e_n | \phi \rangle \end{pmatrix}. \quad (2.102)$$

Elementy stĺpca  $\langle e_j | \phi \rangle$  reprezentujú skalárne súčiny medzi bra vektormi báзовých stavov a ket vektormi stavu  $|\phi\rangle$  našej častice. Analogicky môžeme interpretovať vlnovú funkciu ako komponentu vektora reprezentovaného stĺpcom s nekonečne veľkým počtom členov. Schematicky by sme teda stavový vektor  $|\Psi\rangle$  v nekonečne rozmernom Hilbertovom priestore mohli reprezentovať ako

$$|\Psi\rangle \leftrightarrow \begin{pmatrix} \vdots \\ \psi(x) \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad (2.103)$$

Teraz musíme zdefinovať skalárny súčin medzi stavovými vektormi  $|\Psi\rangle$  a  $|\Phi\rangle$ :

$$(|\Psi\rangle, |\Phi\rangle) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)^* \phi(x) dx. \quad (2.104)$$

Máme teda *nekonečný* priestor stavovýc vektorov (kvadraticky integrovateľných funkcií)  $\mathcal{H}$  s definovaným skalárnym súčinom (2.104). Takýto priestor má veľa báz, jednou z nich je báza ortonormálnych Hermitových polynómov, ktorí budeme detailne študovať pri analýze kvantového harmonického oscilátora. Takýto vektorový priestor je úplný. Keďže je na ňom zadaná i operácia skalárneho súčinu (a teda i norma), potom je tento priestor Hilbertovým priestorom.

V konečno-rozmernej priestore sme skalárny súčin v Diracovom formalizme reprezentovali ako súčin dvoch vektorov, *bra* a *ket*, z ktorých prvý bol z duálneho priestoru a druhý z unitárneho vektorového priestoru. Analogickým spôsobom môžeme v prípade nekonečne rozmernej Hilbertových priestorov zdefinovať **lineárny funkcionál**  $\langle x_0 |$

$$(\langle x_0 |) |\Psi\rangle = \langle x_0 | \Psi\rangle = \psi(x_0). \quad (2.105)$$

Hoci tento funkcionál už píšeme priamo vo forme *bra* vektoru, musíme však ešte ukázať, že spĺňa podmienku linearity. Potom budeme môcť interpretovať ľavú stranu rovnice (2.105) ako skalárny súčin medzi dvoma *ket* vektormi, t.j.

$$(|x_0\rangle, |\Psi\rangle) = \langle x_0 | \Psi\rangle = \psi(x_0). \quad (2.106)$$

Tu si môžeme zadať otázku čo znamená *ket* vektor  $|x_0\rangle$  korešpondujúci *bra* vektoru  $\langle x_0 |$ , a aká vlnová funkcia  $\delta_{x_0}(x)$  mu korešponduje? Ak použijeme definíciu skalárneho súčinu pre kvadraticky-integrovateľné funkcie (2.104) potom môžeme zapísať

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta_{x_0}^*(x) \psi(x) dx = (|x_0\rangle, |\Psi\rangle) = \langle x_0 | \Psi\rangle = \psi(x_0). \quad (2.107)$$

Vidíme teda, že ak má platiť vzťah (2.104) potom  $\delta_{x_0}(x)^*$  musí byť  $\delta$ -funkciou (viac o temperovaných funkcionáloch nájdete v Apendixe x), a teda, vlnová funkcia **bra** vektoru  $\langle x_0 |$  je  $\delta$ -funkciou. Dobré však vieme, že takéto funkcie **nie** sú kvadraticky-integrovateľné, a preto nie sú elementami Hilbertovho priestoru kvadraticky-integrovateľných funkcií. Napriek tomuto faktu,  $\delta$ -funkcie sú veľmi užitočné pri analýze stavov fyzikálnych systémov a preto Hilbertov priestor rozšírime o tieto funkcie. Na to, aby sme mohli konzistentne s nimi narábať budeme musieť ďalej žiadať aby

$$\langle \Psi | x_0\rangle := (\langle x_0 | \Psi\rangle)^* = \psi^*(x_0). \quad (2.108)$$

Pre ľubovoľné dva vektory  $|\Psi\rangle, |\Phi\rangle \in \mathcal{H}$  zapíšeme skalárny súčin ako

$$\langle \Phi | \Psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(x)^* \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \langle \Phi | x\rangle \langle x | \Psi\rangle dx = \langle \Phi | \left( \int_{-\infty}^{\infty} |x\rangle \langle x| dx \right) = |\Psi\rangle, \quad (2.109)$$

odkiaľ vyplýva rozklad operátorovej jednotky

$$\int_{-\infty}^{\infty} |x\rangle \langle x| dx = \hat{1} \quad (2.110)$$

Ak teraz vložíme operátorovú jednotku (2.110) do rovnice (2.106), t.j.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x_0 - x) \psi(x) dx = \langle x_0 | \Psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle x_0 | x\rangle \langle x | \Psi\rangle dx = \int_{-\infty}^{\infty} \langle x_0 | x\rangle \psi(x) dx, \quad (2.111)$$

potom dostaneme podmienku ortogonality v tvare

$$\langle x_0 | x\rangle = \delta(x_0 - x) \quad (2.112)$$

Ďalej odvodíme explicitný tvar operátora polohy  $\hat{x}$  v Diracovom formalizme na základe definície jeho strednej hodnoty, t.j.

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \hat{x} | \Psi\rangle &:= \int_{-\infty}^{\infty} x |\psi(x)|^2 dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \langle \Psi | x\rangle x \langle x | \Psi\rangle dx \\ &= \langle \Psi | \left( \int_{-\infty}^{\infty} x |x\rangle \langle x| dx \right) | \Psi\rangle. \end{aligned} \quad (2.113)$$

Odtiaľto dostaneme pre  $\hat{x}$

$$\hat{x} = \int_{-\infty}^{\infty} x |x\rangle \langle x| dx = \hat{x}^\dagger. \quad (2.114)$$

Z posledného vzťahu je zrejmé, prečo *ket* vektory,  $|x\rangle$ , ktoré nie sú elementami kvadraticky-integrovateľného Hilbertovho priestoru sú užitočné - tieto vektory sú vlastnými stavmi operátora polohy  $\hat{x}$

$$\hat{x} |x_0\rangle = x_0 |x_0\rangle. \quad (2.115)$$

### 2.3.2 Operátor hybnosti

Tak ako sme zaviedli operátor polohy zaviedeme i operátor hybnosti. Najprv zdefinujeme **lineárny funkcionál**  $\langle p |$

$$\langle p | \Psi\rangle := \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar} \psi(x) dx, \quad (2.116)$$

ktorému korešponduje *ket* vektor  $|p\rangle$  definovaný vzťahom

$$\langle p | \Psi\rangle^* = \tilde{\psi}^*(p) =: \langle \Psi | p\rangle. \quad (2.117)$$

Ak do ľavej časti rovnice (2.116) dosadíme operátorovú jednotku (2.110) dostaneme vzťah

$$\langle p | \Psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle p | x\rangle \langle x | \Psi\rangle dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar} \psi(x) dx, \quad (2.118)$$

odkiaľ nájdeme

$$\langle p | x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx/\hbar} ; \quad \langle x | p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}, \quad (2.119)$$

kde druhý zo vzťahov sme dostali z rovnice (2.117).

Z teórie temperovaných funkcionálov vieme, že

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ip(x-y)/\hbar} dp = \delta(x-y). \quad (2.120)$$

Znamená to teda, že pre ľubovoľné dva vlastné stavy  $|x\rangle$  a  $|y\rangle$  operátoru polohy  $\hat{x}$  platí z rovnice (2.112) vzťah

$$\langle x|y\rangle = \delta(x-y) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ip(x-y)/\hbar} dp = \langle x| \left( \int_{-\infty}^{\infty} |p\rangle\langle p| dp \right) |y\rangle, \quad (2.121)$$

odkiaľ dostaneme rozklad pre jednotkový operátor  $\hat{\mathbb{1}}$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |p\rangle\langle p| dp = \hat{\mathbb{1}} \quad (2.122)$$

Tiež môžeme nájsť vzťah ortogonalít medzi rôznymi *ket* vektormi, t.j

$$\langle p_0|p\rangle = \delta(p_0 - p). \quad (2.123)$$

*Ket* vektory  $|p\rangle$  sú vlastnými stavmi operátora hybnosti  $\hat{p}$  s vlastnými stavmi  $p$ . Preto spektrálny rozklad  $\hat{p}$  má tvar

$$\hat{p} = \int_{-\infty}^{\infty} p |p\rangle\langle p| dp. \quad (2.124)$$

Z predchádzajúceho je teda zrejmé, že

$$\hat{p}|p_0\rangle = p_0|p_0\rangle. \quad (2.125)$$

### 2.3.3 Operátor hybnosti v reprezentácii vlastných stavov operátora polohy

Operátor hybnosti  $\hat{p}$  v báze svojich vlastných vektorov má tvar (2.124). Vieme však, že každý operátor môžeme zapísať v rôznych bázach, a tak sa pozrieme aký tvar má  $\hat{p}$  v báze vlastných vektorov operátoru polohy. Deriváciou ľavej i pravej časti rovnice (2.119) nájdeme

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \langle x|p\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} = p \langle x|p\rangle. \quad (2.126)$$

Odtiaľto potom vidíme, že

$$\begin{aligned} \langle x|\hat{p}|\Psi\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \langle x|p\rangle p \langle p|\Psi\rangle dp \\ &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \int_{-\infty}^{\infty} \langle x|p\rangle \langle p|\Psi\rangle dp \\ &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \langle x| \left( \int_{-\infty}^{\infty} |p\rangle\langle p| dp \right) |\Psi\rangle \\ &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \langle x|\Psi\rangle. \end{aligned} \quad (2.127)$$

čo znamená, že operátor hybnosti v báze vlastných stavov operátoru polohy má tvar diferenciálneho operátora

$$\hat{p} \leftrightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (2.128)$$

Nakoniec ešte odvodíme explicitný tvar pre komutátor operátorov polohy a hybnosti:

$$\begin{aligned} \langle x|[\hat{x}, \hat{p}]|\Psi\rangle &= -i\hbar \left[ x \frac{\partial}{\partial x} \langle x|\Psi\rangle - \frac{\partial}{\partial x} (x \langle x|\Psi\rangle) \right] \\ &= i\hbar \langle x|\Psi\rangle \end{aligned} \quad (2.129)$$

odkiaľ dostaneme Heisenbergov-Weylov komutačný vzťah

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \hat{\mathbb{1}} \quad (2.130)$$

#### Komentár:

- (1) Doteraz sme uvažovali iba jednorozmerné systémy. Predchádzajúce argumenty však platia i pre  $d$ -rozmerné systémy. V tomto prípade

$$\hat{\vec{x}} = \hat{x}_1 \vec{e}_1 + \dots + \hat{x}_d \vec{e}_d, \quad (2.131)$$

pričom  $[\hat{x}_m, \hat{x}_n] = 0$ . Analogicky, pre  $d$ -rozmerný operátor hybnosti máme výraz

$$\hat{\vec{p}} = \hat{p}_1 \vec{e}_1 + \dots + \hat{p}_d \vec{e}_d. \quad (2.132)$$

Nakoniec ešte zapíšeme rovnicu

$$[\hat{x}_m, \hat{p}_n] = i\delta_{m,n} \hbar \hat{\mathbb{1}}. \quad (2.133)$$

vyjadrujúcu Heisenbergov-Weylov komutačný vzťah pre  $d$ -rozmerné operátory polohy a hybnosti.

## Kapitola 3

### Kvantové meranie

*No elementary phenomenon is a phenomenon until it is a recorded phenomenon, ...*

John A. Wheeler <sup>1</sup>

Doposiaľ sme formulovali dva postuláty kvantovej mechaniky. Druhý z nich hovorí o tom, že výsledky merania pozorovateľnej veličiny sú vlastné hodnoty zodpovedajúceho Hermitovského operátora. Keďže však potenciálnych výsledkov je mnoho, musíme ešte určiť s akou *pravdepodobnosťou* získame konkrétny výsledok. Na rozdiel od klasickej mechaniky, kde meranie v princípe neovplyvňuje stav fyzikálneho systému, v kvantovej mechanike proces meranie, t.j. získavania novej informácie o stave systému privádza k zmene stavu. V tejto kapitole teda budeme študovať ako sa zmení stav systému po meraní a aká je pravdepodobnosť namerania konkrétneho výsledku.

#### 3.1 Projekčný postulát

Meranie v kvantovej teórii je v istom zmysle hrou s jednou hlavnou úlohou - na základe *a priori* vedomosti (to čo už vieme) "uhádnuť" čo najlepšie čo sa môže stať. Predpokladáme, že ešte pred meraním vieme, v akom stave sa systém nachádza, t.j. vieme, v ktorom vlastnom stave danej pozorovateľnej veličiny je systém. V tomto prípade ďalšie meranie nám iba potvrdí túto vedomosť a meraním sa stav systému nezmení. Inými slovami, ak po prvom meraní zopakujeme meranie tej istej pozorovateľnej veličiny, mali by sme dostať rovnaký výsledok. Situácia pred prvým meraním je však odlišná - vtedy sme ešte nevedeli nič o hodnote pozorovateľnej veličiny. Nemohli sme teda s určitosťou vedieť aký bude výsledok merania. Očakávame, že stav systému po prvom meraní sa zmení v porovnaní so stavom pred prvým meraním. Aký je naviac prírodný stav, ktorý zodpovedá vlastnej hodnote  $a_i$  Hermitovského operátora  $\hat{A}$ ? Je to zodpovedajúci vlastný vektor! Preto je celkom prirodzené urobiť nasledujúci postulát pre pozorovateľné veličiny <sup>2</sup> s nedegenerovaným spektrom vlastných hodnôt.

<sup>1</sup>Tento citát pokračuje i ďalej: "until it has been brought to a close by an irreversible act of amplification such as the blackening of a grain of silver bromide emulsion or the triggering over photon detector".

<sup>2</sup>Ďalej budem ekvivalentne používať pojem pozorovateľná veličina a pojem pozorovateľná. Gramaticky to možno nie je úplne korektné, ale vo fyzikálnej komunite sa takýto termín štandardne používa.

**Postulát 3(a)** Stav kvantovomechanického systému po meraní pozorovateľnej veličiny  $\hat{A}$  s výsledkom daným nedegenerovanou vlastnou hodnotou  $a_i$  je korešpondujúcim vlastným stavom  $|\alpha_i\rangle$  tejto pozorovateľnej.

Pre pozorovateľné veličiny s degenerovaným spektrom vlastných hodnôt máme problém, pretože nevieme, ktorý z vlastných stavov danej pozorovateľnej a danú vlastnú hodnotu sa realizoval. Aby sme našli správnu odpoveď, musíme sa najprv uistiť, že meriame iba pozorovateľnú veličinu  $\hat{A}$ . Novým meraním tejto pozorovateľnej nezískame žiadnu ďalšiu informáciu o meranom kvantovomechanickom systéme. Preto, nedáva zmysel, aby sme vybrali jeden alebo druhý vlastný stav. V skutočnosti, ak by som predpokladal, že musíme *náhodne* vybrať jeden z vlastných stavov, potom by som vlastne predpokladal, že sme získali (resp. môžeme získať) z experimentu nejakú informáciu navyše, a teda spektrum pozorovateľnej nie je degenerované. To znamená, že po meraní musíme brať do úvahy všetky vlastné stavy. To je možné len vtedy, ak uvažujeme koherentnú superpozíciu týchto stavov. Ale akú koherentnú superpozíciu? Aby sme zvládli tento problém, zavedieme nový druh Hermitovského operátora - **projekčný operátor**.

**Definícia 3.1** Operátor  $\hat{P}$  sa nazýva **projekčným operátorom**, ak platí:

$$\hat{P} = \hat{P}^\dagger \quad ; \quad \hat{P} = \hat{P}^2. \quad (3.1)$$

Príklady projekčných operátorov sú

1.  $\hat{P} = |\psi\rangle\langle\psi|$ ,
2. Ak  $\hat{P}$  je projekčný operátor, potom aj  $\hat{I} - \hat{P}$  je projektor,
3.  $\hat{P} = \hat{I}$ .

**Cvičenie:** Dokážte, že tri príklady uvedené vyššie sú projekčné operátory!

**Lema 3.1** *Vlastné hodnoty projekčného operátora môžu nadobúdať iba hodnoty 0 a 1.*

**Dôkaz:** Pre vlastný vektor  $|\lambda\rangle$  a vlastnú hodnotu  $\lambda$  platí

$$\lambda|\lambda\rangle = \hat{P}|\lambda\rangle = \hat{P}^2|\lambda\rangle = \lambda^2|\lambda\rangle. \quad (3.2)$$

Odtiaľ priamo dostávame  $\lambda = 0$  alebo  $\lambda = 1$   $\square$ .

Pre množinu ortonormálnych vektorov  $\{|\psi_i\rangle\}$  projekčný operátor  $\hat{P} = \sum_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$  projektuje stav  $|\psi\rangle$  na podpriestor generovaný vektormi  $\{|\psi_i\rangle\}$ . To je presne to, čo potrebujeme na všeobecnejšiu formuláciu tretieho postulátu kvantovej mechaniky.

Ešte raz preformulujeme tretí postulát, ale teraz už aj pre pozorovateľné veličiny s degenerovanými vlastnými hodnotami.

**Postulát 3(b)** Stav kvantovomechanického systému po meraní ľubovoľnej pozorovateľnej veličiny  $\hat{A}$  s výsledkom daným možnou degenerovanou vlastnou hodnotou  $a_i$  je

$$\hat{P}_i|\psi\rangle, \quad (3.3)$$

kde  $\hat{P}_i$  je projekčný operátor na podpriestore (Hilbertovho priestoru  $\mathcal{H}$ ) generovanom všetkými vlastnými vektormi  $\{|\psi_{ij}\rangle\}$  operátora  $\hat{A}$  prisluchajúcim k vlastnej hodnote  $a_i$ , t.j.

$$\hat{P}_i = \sum_j |\psi_{ij}\rangle\langle\psi_{ij}|. \quad (3.4)$$

Experimenty ukázali, že tento postulát veľmi dobre popisuje výsledky meraní, a preto ho musíme prijať aspoň ako skvele fungujúcu pracovnú hypotézu. Hovorím to preto, lebo existuje zopár ľudí, ktorým sa tento postulát veľmi nepozdáva. Argumentujú citlivou otázkou, ako a kedy sa objaví redukcia kvantového stavu. V skutočnosti sme na túto otázku v našej diskusii neodpovedali a ani tak neurobíme z jednoduchého dôvodu. **Nikto** naozaj nepozná odpoveď na tieto otázky, ktoré sú už oddávna predmetom diskusií. Ľudia prišli s novými interpretáciami kvantovej mechaniky<sup>3</sup> alebo aj priamo s návrhmi na zmeny v rovniciach kvantovej mechaniky. Nikto však doteraz tento problém uspokojivo nevyriešil. Vyvoláva to isté obavy, pretože to znamená, že nerozumieme dôležitému aspektu kvantovej mechaniky. Na druhej strane, existuje jeden veľmi závažný dôvod pre použitie projekčného postulátu: **Keď robíme kvantovomechanické výpočty, funguje úplne perfektne!**

Pokračujme teda ďalej v našom skúmaní postulátov kvantovej mechaniky. Teraz už vieme, aké sú výsledky meraní a aký je stav systému po meraní. Ešte stále však nevieme, aká je pravdepodobnosť pre špecifický výsledok merania. Aby sme to nejakou rozumne odhadli, musíme zvážiť vlastnosti pravdepodobností, ktoré chceme použiť pri popise výsledkov meraní v kvantovej mechanike. Keď už budeme poznať rozumné požiadavky, potom môžeme prikočiť k formulácii nových postulátov.

Pravdepodobnosť  $p(A_i)$  získat' výstup z merania  $A_i$  (čo je zvyčajne množina kladných výsledkov) je nezáporné číslo nie väčšie ako jednotka, t.j.  $0 \leq p(A_i) \leq 1$ . Rovnako, je zrejmé, že požadujeme, aby pravdepodobnosť výstupu merania zodpovedajúca prázdnej množine bola nulová, t.j.  $p(\emptyset) = 0$ , zatiaľ čo pre pravdepodobnosť množiny všetkých prvkov požadujeme jednotku, t.j.  $p(1) = 1$ .

Toto sú takmer triviálne požiadavky. Skutočne dôležitým je však správanie sa pravdepodobností pre zjednotenú množinu. Určite chceme, aby sa pravdepodobnosti udalostí, ktoré sa navzájom vylučujú, spočítavali, t.j. ak máme množiny  $A_1, A_2$ , kde  $A_1 \cap A_2 = \emptyset$ , požadujeme

$$p(A_1 \cup A_2) = p(A_1) + p(A_2). \quad (3.5)$$

<sup>3</sup>Najprominentnejšia z nich je Everettova teória mnohých svetov.

V nasledujúcom postuláte budem formulovať definíciu, ktorá spĺňa všetky vyššie uvedené vlastnosti.

**Postulát 4** Pravdepodobnosť, že pri meraní pozorovateľnej veličiny  $\hat{A}$  získame vlastnú hodnotu  $a_i$  je daná vzťahom

$$p_i = \|\hat{P}_i|\psi\rangle\|^2 = \langle\psi|\hat{P}_i|\psi\rangle. \quad (3.6)$$

Pre nedegenerované vlastné hodnoty s vlastnými vektormi  $|\psi_i\rangle$  sa táto pravdepodobnosť zjednoduší na výraz

$$p_i = |\langle\psi_i|\psi\rangle|^2. \quad (3.7)$$

Ľahko sa presvedčíme, že Postulát 4 spĺňa všetky kritéria, ktoré sme od pravdepodobnosti požadovali. Túto dôležitú teóriu prvýkrát dokázal Gleason v roku 1957. Bolo to prekvapenie. Iba použitím štruktúry Hilbertovho priestoru v kvantovej mechanike spolu s primeranými vlastnosťami, ktoré požadujeme pre pravdepodobnosti výsledkov (výstupov) kvantovomechanického merania, nemôžeme dostať nič iné ako vzťah (3.6)! Dôkaz tohoto tvrdenia je príliš komplikovaný, aby sme ho tu a teraz previedli. Ku Gleasonovej teóremu sa ešte vrátíme v jednej z ďalších prednášok keď budeme hovoriť o logike kvantových predpokladov.

## 3.2 Stredné hodnoty a odchýlky

Teraz keď už poznáme výstupy z merania, ako aj korešpondujúce pravdepodobnosti, môžeme použiť kvantovú mechaniku na výpočet strednej hodnoty konkrétnej pozorovateľnej veličiny a odchýlky od strednej hodnoty.

Čo musíme experimentálne podniknúť, aby sme dokázali určiť strednú hodnotu pozorovateľnej veličiny? Po prvé, musíme, "nastaviť" meraciu aparatúru tak, aby merala presne pozorovateľnú veličinu  $\hat{A}$ , o ktorú nám ide. Ďalej, musíme zostrojiť také zariadenie, ktoré pripraví kvantový systém v požadovanom kvantovom stave koľkokrát to bude potrebné. Ideálne by bolo, ak by sme mali nekonečný počet kvantových systémov pripravených v rovnakom počiatočnom stave (takúto množinu systémov zvyčajne nazývame **súbor**). Teraz môžeme previesť náš experiment. Naše zariadenie na prípravu stavov pripraví prvú časticu v konkrétnom stave  $|\Psi\rangle$  a častica vstúpi do meracieho zariadenia. Pri meraní získame konkrétny výstup (výsledok merania), t.j. jednu z vlastných hodnôt pozorovateľnej veličiny  $\hat{A}$ . Zopakujeme celý experiment od začiatku a nameriame inú vlastnú hodnotu. Každý konkrétny výsledok merania je úplne náhodný a po  $N$  opakovaní experimentu dostaneme vlastnú hodnotu  $a_i$  ako výstup merania  $N_i$ -krát. Po ukončení meraní vieme určiť strednú hodnotu výsledkov merania, pre ktorú platí

$$\langle\hat{A}\rangle_{|\psi\rangle}(N) = \sum_i \frac{N_i}{N} a_i. \quad (3.8)$$

Pre veľký počet pokusov, t.j. veľké  $N$ , sa pomer  $\frac{N_i}{N}$  blíži k pravdepodobnosti  $p_i$ , ktorú vieme vypočítať podľa Postulátu 4. Zistujeme, že platí:

$$\langle \hat{A} \rangle_{|\psi\rangle}(N) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_i \frac{N_i}{N} a_i = \sum_i p_i a_i = \sum_i a_i \langle \psi | \hat{P}_i | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle. \quad (3.9)$$

Teraz už vieme odvodiť aj kvantovomechanický výraz pre odchýlku nameraných výsledkov od strednej hodnoty. Ak poznáme pravdepodobnosti  $p_i$  a vlastné hodnoty  $a_i$ , dostávame

$$(\Delta A)_{|\psi\rangle}^2 = \sum_i p_i (a_i - \langle \hat{A} \rangle_{|\psi\rangle})^2 = \sum_i p_i a_i^2 - \left( \sum_i p_i a_i \right)^2 = \langle \hat{A}^2 \rangle_{|\psi\rangle} - \langle \hat{A} \rangle_{|\psi\rangle}^2. \quad (3.10)$$

Po týchto definíciách už môžeme analyzovať výsledky merania v kvantovej mechanike.

### 3.3 Vzťahy neurčitosti

V klasickej mechanike sme schopní namerať každú veličinu s ľubovoľnou presnosťou. V skutočnosti je to tak aj v prípade kvantovej mechaniky. Nič nám nebráni v tom, aby sme systém pripravili v dobre definovanej polohe a súčasne urobili meranie, ktoré nám s neobyčajnou presnosťou povie, kde častica je. Skutočný problém oproti klasickej mechanike vznikne, keď sa pokúsime určiť hodnoty dvoch rozdielnych pozorovateľných veličín. Opäť, v klasickej mechanike neexistuje zákon, ktorý by nám bránil namerať dve veličiny s ľubovoľnou presnosťou. Kvantová mechanika je však iná. Iba veľmi obmedzená množina pozorovateľných veličín môže byť súčasne meraná s ľubovoľnou presnosťou. Takéto veličiny sa nazývajú **kompatibilné** alebo **komutujúce**. Vo všeobecnosti platí, že neurčitosti v meraní dvoch veličín podliehajú vzťahu, v ktorom je ich súčin vo všeobecnosti rôzny od nuly. Tento vzťah sa nazýva **vzťahom neurčitosti**.

#### Teoréma 3.1

Pre dve pozorovateľné veličiny  $\hat{A}$  a  $\hat{B}$  platí pre ich neurčitost'  $\Delta \hat{X} = \sqrt{\langle \hat{X}^2 \rangle - \langle \hat{X} \rangle^2}$  vzťah neurčitosti

$$\Delta \hat{A} \Delta \hat{B} \geq \frac{|[\hat{A}, \hat{B}]|}{2}. \quad (3.11)$$

**Dôkaz** Zdefinujme dva ket vektory

$$\begin{aligned} |\phi_A\rangle &= (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) |\psi\rangle, \\ |\phi_B\rangle &= (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) |\psi\rangle. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Použitím týchto vektorov zistujeme, že platí

$$\sqrt{|\langle \phi_A | \phi_A \rangle| \cdot |\langle \phi_B | \phi_B \rangle|} = \Delta \hat{A} \Delta \hat{B}. \quad (3.13)$$

Teraz môžeme použiť Schwarzovu nerovnosť, aby sme našli spodnú hranicu súčinu neurčitostí dvoch veličín

$$|\langle \phi_A | \phi_B \rangle| \leq \Delta \hat{A} \Delta \hat{B}. \quad (3.14)$$

Aby sme mohli vypočítať ľavú stranu vo vzťahu (3.14), musíme najprv určiť reálnu a imaginárnu zložku skalárneho súčinu  $\langle \phi_A | \phi_B \rangle$ . Tu platí

$$\operatorname{Re} \langle \phi_A | \phi_B \rangle = \frac{1}{2} (\langle \hat{A} \hat{B} + \hat{B} \hat{A} \rangle - 2 \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle), \quad (3.15)$$

$$\operatorname{Im} \langle \phi_A | \phi_B \rangle = \frac{1}{2i} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle. \quad (3.16)$$

Teraz môžeme dosadiť rovnice (3.15) a (3.16) do vzťahu (3.14) a dostaneme

$$\Delta \hat{A} \Delta \hat{B} \geq \sqrt{(\operatorname{Re} \langle \phi_A | \phi_B \rangle)^2 + (\operatorname{Im} \langle \phi_A | \phi_B \rangle)^2} \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|, \quad (3.17)$$

čím je vzťah (3.11) je dokázaný  $\square$ .

Z rovnice (3.11) vidíme, že nutnou podmienkou k tomu, aby sme súčasne mohli merať dve veličiny bez neurčitosti, je  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ , t.j. pozorovateľné veličiny musia komutovať. V skutočnosti je to zároveň aj postačujúca podmienka.

#### Teoréma 3.2

Dve pozorovateľné veličiny  $\hat{A}$  a  $\hat{B}$  môžeme súčasne merať presne, t.j.  $\Delta \hat{A} = \Delta \hat{B} = 0$ , ak komutujú.

**Dôkaz:** Z rovnice (3.11) vidíme, že zo vzťahu  $\Delta \hat{A} = \Delta \hat{B} = 0$  priamo vyplýva podmienka  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ , t.j. nutná podmienka. Aby sme dokázali opačný smer Teorémy 3.2, t.j. postačujúcu podmienku, musíme si uvedomiť, že dve komutujúce veličiny majú rovnaké vlastné stavy. Ak predpokladáme, že kvantovomechanický systém je v jednom z týchto stavov  $|\psi\rangle$ , potom z rovníc (3.11) a (3.12) vyplýva, že  $|\psi_A\rangle$  a  $|\psi_B\rangle$  sú lineárne závislé. Teraz už iba stačí, ak si uvedomíme, že v prípade lineárne závislých vektorov  $|\psi_A\rangle$  a  $|\psi_B\rangle$  máme v Schwarzovej nerovnosti rovnosť, z ktorej vyplýva, že  $\Delta \hat{A} = \Delta \hat{B} = 0$   $\square$ .

Ďalej si vyjasníme, čo vlastne vzťah neurčitosti znamená, pretože v literatúre je v tomto smere dosť nejasností. Predstavme si, že máme súbor s nekonečným počtom identicky pripravených kvantových systémov, ktoré sú v stave  $|\psi\rangle$ . Chceme zmerať dve pozorovateľné veličiny  $\hat{A}$  a  $\hat{B}$ . Ak rozdelíme súbor systémov (všetky v stave  $|\psi\rangle$ ) na dve polovice, potom na prvej polovici môžeme merať  $\hat{A}$ , a na druhej iba  $\hat{B}$ . Meranie povedie k stredným hodnotám  $\langle \hat{A} \rangle$  a  $\langle \hat{B} \rangle$ , ktoré majú neurčitosti  $\Delta \hat{A}$  a  $\Delta \hat{B}$ . Z tejto úvahy je jasné, že neurčitosti v meraní dvoch pozorovateľných veličín nevznikajú vplyvom "aktu" merania. V tomto prípade ide o **vnútornú vlastnosť každého kvantového systému**. Samozrejme, poruchy vplyvom samotného merania môžu zvýšiť neurčitost', ale **nie sú** príčinou existencie týchto neurčitostí.

Chcel by som poznamenať, že niekedy možno nájsť vzťah neurčitosti v tvare

$$\Delta \hat{A} \Delta \hat{B} \geq |[\hat{A}, \hat{B}]|, \quad (3.18)$$

v ktorom je pravá strana nerovnosti dvojnásobne väčšia ako vo vzťahu (3.11). Dôvodom extra faktoru 2 je fakt, že vzťah (3.18) v skutočnosti popisuje odlišnú situáciu ako v Teoréme 3.2. Vzťah (3.18) sa vzťahuje na *súčasné* meranie dvoch pozorovateľných veličín na **jednom** kvantovom systéme. Znamená to, že uskutočňujeme meranie veličiny  $\hat{A}$  na každom systéme

súboru a súčasne meriame  $\hat{B}$  na tom isto systéme. Meranie veličiny  $\hat{A}$  bude meniť (narúšať) stav systému a následné meranie  $\hat{B}$  môže byť preto neurčité. Predstavme si napr., že chceme odmerať polohu elektrónu a súčasne jeho hybnosť. Polohu určíme napr. rozptylom svetla na elektróne. Ak chceme určiť polohu presne, potom musíme použiť svetlo s veľmi krátkou vlnovou dĺžkou. Fotóny s krátkou vlnovou dĺžkou majú veľkú hybnosť. Preto, keď sa rozptyľujú na elektrón, jeho hybnosť v dôsledku zákona zachovania, sa môže zmeniť. V dôsledku tejto zmeny bude neurčitost' hybnosti elektrónu väčšia. Je to príklad problému, ktorý nastáva, keď chceme merať súčasne dve nekomutujúce veličiny.

K problému simultánneho merania nekomutujúcich veličín sa ešte vrátíme pri analýze zovšeobecnených kvázidistribúcií vo fázových priestoroch a definícii propenzít.

### 3.3.1 Stopa operátora

Predtým, ako si zavedieme operátor hustoty, vysvetlíme si pojem stopy operátora.

**Definícia 3.2** Stopa operátora  $\hat{A}$  na  $N$ -rozmernom Hilbertovom priestore je definovaná vzťahom

$$\text{Tr}(\hat{A}) = \sum_{i=1}^N \langle \psi_i | \hat{A} | \psi_i \rangle \quad (3.19)$$

pre každú ortonormálnu bázu  $|\psi_i\rangle$ .

Konkrétne, ak  $|\psi_i\rangle$  vyberieme ako vlastné vektory  $\hat{A}$ , vidíme, že stopa je iba súčet vlastných hodnôt operátora  $\hat{A}$ .

Niekoľko vlastností stopy operátora, ktoré môžu pomôcť pri výpočtoch.

#### Teoréma 3.3

Pre každé dva operátory  $\hat{A}$  a  $\hat{B}$  na Hilbertovom priestore  $\mathcal{H}$  a unitárny operátor  $\hat{U}$  platí

$$\text{Tr}(\hat{A}\hat{B}) = \text{Tr}(\hat{B}\hat{A}), \quad (3.20)$$

$$\text{Tr}(\hat{A}) = \text{Tr}(\hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger). \quad (3.21)$$

**Dôkaz:** Dokážeme iba prvé tvrdenie, pretože druhé vyplýva priamo z prvého ( $\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{1}$ ). Platí

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\hat{A}\hat{B}) &= \sum_{n=1}^N \langle \psi_n | \hat{A}\hat{B} | \psi_n \rangle \\ &= \sum_{n=1}^N \langle \psi_n | \hat{A} \hat{1} \hat{B} | \psi_n \rangle \\ &= \sum_{n=1}^N \langle \psi_n | \hat{A} \sum_{k=1}^N |\psi_k\rangle \langle \psi_k| \hat{B} | \psi_n \rangle \\ &= \sum_{k=1}^N \sum_{n=1}^N \langle \psi_n | \hat{A} | \psi_k \rangle \langle \psi_k | \hat{B} | \psi_n \rangle \\ &= \sum_{k=1}^N \sum_{n=1}^N \langle \psi_k | \hat{B} | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \hat{A} | \psi_k \rangle \\ &= \sum_{k=1}^N \langle \psi_k | \hat{B} \sum_{n=1}^N |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \hat{A} | \psi_k \rangle \\ &= \sum_{k=1}^N \langle \psi_k | \hat{B} \hat{1} \hat{A} | \psi_k \rangle \\ &= \sum_{k=1}^N \langle \psi_k | \hat{B} \hat{A} | \psi_k \rangle \\ &= \text{Tr}(\hat{B}\hat{A}). \end{aligned}$$

**Poznámka:** Ak zapíšeme operátor v maticovej norme, potom je stopa jednoducho súčet diagonálnych prvkov matice.

Zavedli sme stopu, aby sme mohli zapísať niektoré z výrazov v predchádzajúcich kapitolách iným spôsobom, ktorý nám neskôr zabezpečí ich zovšeobecnenie pomocou operátora hustoty definovaného v nasledujúcej časti.

V postuláte 4 sme vyjadrili pravdepodobnosť nájsť vlastnú hodnotu  $a_i$  pri meraní pozorovateľnej  $\hat{A}$  v stave  $|\psi\rangle$ . Túto pravdepodobnosť tiež môžeme prepísať s využitím stopy: Použitím stopy môžeme písať

$$p_i = \langle \psi_i | \hat{P}_i | \psi \rangle = \text{Tr}(\hat{P}_i |\psi\rangle \langle \psi|).$$

Analogicky stredná hodnota veličiny  $\hat{A}$  meranej na systéme v kvantovom stave  $|\psi\rangle$  sa dá zapísať ako

$$\langle \hat{A} \rangle_{|\psi\rangle} = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \text{Tr}(\hat{A} |\psi\rangle \langle \psi|).$$

Konkrétne to znamená, že pravdepodobnosť  $p_i$  nájsť vlastnú hodnotu  $a_i$  nie je nič iné ako stredná hodnota projektora  $\hat{P}_i$ .

## 3.4 Operátor hustoty

Keď hovoríme o teórii merania je celkom prirodzené zaviesť nový spôsob popisu stavu kvantového systému. Doposiaľ sme systém popisovali stavovým vektorom, t.j. čistým stavom,



ktorý môže byť **koherentnou (lineárnou)** superpozíciou mnohých ďalších stavových vektorov, napr.

$$|\psi\rangle = \alpha_1|\psi_1\rangle + \alpha_2|\psi_2\rangle. \quad (3.22)$$

Kvantovomechanický systém v tomto stave je ideálny na popis kvantovej interferencie. Je potrebné pripomenúť, že takýto stav je idealizáciou oproti skutočnému stavu kvantového systému pripravenému v experimente. Pri experimente stále existuje nejaká štatistická neurčitost', ktorá môže byť napríklad príčinou nedokonalosti prípravy kvantového stavu. To znamená, že nemáme iba kvantovú neurčitost', ale aj zdroj **klasického** štatistického šumu, ktorý spôsobuje ďalšiu neurčitost' stavu. Napríklad, v dôsledku príležitostnej chyby, ktorá sa objavuje náhodne v čase (bez toho, aby sme o nej vedeli), môžeme pripraviť nesprávny kvantový stav. Otázkou potom ostáva, ako najelegantnejšie popísať takúto experimentálnu situáciu. Je zrejmé, že to nepôjde iba pridaním stavových vektorov, t.j. zapísaním koherentnej superpozície.

Aby sme porozumeli prečo potrebujeme **operátor hustoty**, uvidíme najprv príklad experimentálnej situácie, kde popis pomocou čistého stavu (vektoru z uvažovaného Hilbertovho priestoru) zlyháva. Predstavme si teda situáciu, kedy horúca pec obsahuje generuje dvojhladinové atómové systémy. Predpokladáme, že každý z týchto dvojhladinových systémov je v náhodnom čistom stave. Predpokladajme ďalej, že s pravdepodobnosťou  $p_i$  je systém v stave  $|\psi_i\rangle$ . Predstavme si, že v peci je malý otvor, cez ktorý dvojhladinové atómy unikajú a vytvárajú atómový zväzok. Tento zväzok postupuje smerom k meraciemu zariadeniu postavenom experimentátorom, ktorý by chcel merať pozorovateľnú veličinu  $\hat{A}$ . Našou úlohou ako teoretikov je predpovedať, čo experimentátor vo svojom pokuse nameria.

Uvedomujeme si, že každý atóm v atómovom zväzku je v čistom stave  $|\psi_i\rangle$  s pravdepodobnosťou  $p_i$ . Experimentátor však nevie, v ktorom konkrétnom stave sa každá častica nachádza. Pozná iba pravdepodobnostnú distribúciu možných stavov. Ak experimentátor uskutoční svoje meranie na  $N$  atómoch vo zväzku, potom zaznamená  $N_i \approx Np_i$ -krát časticu v stave  $|\psi_i\rangle$ . Pre každý z týchto čistých stavov  $|\psi_i\rangle$  vieme, ako vypočítať strednú hodnotu pozorovateľnej veličiny  $\hat{A}$ , ktorú meráme. Je to jednoducho  $\langle\psi_i|\hat{A}|\psi_i\rangle = \text{Tr}(\hat{A}|\psi_i\rangle\langle\psi_i|)$ . Akú strednú hodnotu však experimentátor zistí pre  $N$  meraní? Pre veľké  $N$  je pravdepodobnosť výskytu stavu  $|\psi_i\rangle$  daná vzťahom  $p_i = \frac{N_i}{N}$ . Stredná hodnota pozorovaná experimentátorom je preto

$$\langle\hat{A}\rangle = \sum_i \text{Tr}(\hat{A}|\psi_i\rangle\langle\psi_i|). \quad (3.23)$$

Táto rovnica je úplne presná a pomocou nej sme schopní vypočítať výsledok každého experimentu. Ak je však počet možných stavov  $|\psi_i\rangle$  naozaj veľký, potom máme pred sebou veľa počítania. Pre každý stav  $|\psi_i\rangle$  musíme vypočítať  $\text{Tr}(\hat{A}|\psi_i\rangle\langle\psi_i|)$  a potom spočítať tieto hodnoty váhované pravdepodobnosťami  $p_i$ . Ak by sme uvažovali inú pozorovateľnú veličinu, museli by sme opäť podstúpiť tento zdĺhavý výpočet. Dá sa však zaviesť elegantnejší spôsob zápisu. Prepíšeme rovnicu (3.23) v nasledovnom tvare

$$\begin{aligned} \langle\hat{A}\rangle &= \sum_i p_i \text{Tr}(\hat{A}|\psi_i\rangle\langle\psi_i|) \\ &= \text{Tr}(\hat{A} \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|) \\ &= \text{Tr}(\hat{A}\hat{\rho}). \end{aligned} \quad (3.24)$$

Posledná rovnosť je definíciou **operátora hustoty**. Ak poznám operátor hustoty  $\hat{\rho}$  pre konkrétnu situáciu (v tomto prípade napr. pec generujúcu atómový zväzok), potom môžem

celkom ľahko vypočítať strednú hodnotu, ktorá sa nameria v experimente. Ak experimentátor zmení meracie zariadenie a začne merať inú pozorovateľnú veličinu  $\hat{B}$ , potom stále môžeme výsledok merania predpovedať pomocou operátora hustoty.

**Cvičenie:** Dokážte, že platí  $\langle f(\hat{A}) \rangle = \text{Tr}[f(\hat{A})\hat{\rho}]$ .

Predtým, ako si povieme o niektorých vlastnostiach operátora hustoty, ešte raz zdôrazním rozdiel medzi **koherentnou superpozíciou** kvantových stavov a **štatistickou zmesou**. Ak je kvantovomechanický systém v koherentnej superpozícii rôznych stavov, potom každý súbor je v rovnakom **čistom stave**

$$|\psi\rangle = \sum_i \alpha_i |\psi_i\rangle. \quad (3.25)$$

Je to úplný rozdiel v porovnaní so **štatistickou zmesou**, kde každý systém v súbore je s pravdepodobnosťou  $|\alpha_i|^2$  v čistom stave  $|\psi_i\rangle$ . Zodpovedajúci operátor hustoty je

$$\hat{\rho} = \sum_i |\alpha_i|^2 |\psi_i\rangle\langle\psi_i|. \quad (3.26)$$

Presvedčte sa sami, že dva stavy (3.25) a (3.26) sú rozdielne, t.j.

$$\hat{\rho} = \sum_i |\alpha_i|^2 |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \neq |\psi\rangle\langle\psi|. \quad (3.27)$$

Operátor hustoty má nasledujúce vlastnosti, ktoré tiež môžu slúžiť ako definícia tohoto operátora.

#### Teoréma 3.4

Pre každý operátor hustoty  $\hat{\rho}$  platí

1.  $\hat{\rho}$  je Hermitov operátor,
2.  $\hat{\rho}$  je kladne semidefinitný, t.j.  $\forall|\psi\rangle; \langle\psi|\hat{\rho}|\psi\rangle \geq 0$ ,
3.  $\text{Tr}(\hat{\rho}) = 1$ .

**Dôkaz:** Pretože sme už vzťahom (3.24) definovali operátor hustoty, musíme dokázať hore uvedenú teorému. Z definície vyplýva

$$\hat{\rho}^\dagger = \left(\sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|\right)^\dagger = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| = \hat{\rho}. \quad (3.28)$$

Vzťah (3.28) platí, lebo  $|\psi_i\rangle\langle\psi_i|$  je projekčný operátor. Tým sme dokázali bod 1. Pre bod 2 platí

$$\begin{aligned} \langle\psi|\hat{\rho}|\psi\rangle &= \langle\psi|\left(\sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|\right)|\psi\rangle \\ &= \sum_i p_i \langle\psi|\psi_i\rangle\langle\psi_i|\psi\rangle \\ &= \sum_i p_i |\langle\psi_i|\psi\rangle|^2 \geq 0. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Posledná rovnosť (bod 3) vyplýva zo skutočnosti, že pravdepodobnosti  $p_i$  sú normované, t.j.  $\sum_i p_i = 1$ . Potom môžeme písať

$$\text{Tr}(\hat{\rho}) = \text{Tr} \left( \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \right) = \sum_i p_i \text{Tr}(|\psi_i\rangle\langle\psi_i|) = \sum_i p_i = 1. \quad (3.30)$$

Dôkaz je skončený  $\square$ .

Dalej uvádzame niektoré iné jednoduché ale užitočné vlastnosti operátora hustoty  $\hat{\rho}$ , ktoré možno odvodiť z teórie 3.4.

1.  $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho} \Leftrightarrow \hat{\rho}$  vyjadruje čistý stav.
2. Všetky vlastné hodnoty  $\hat{\rho}$  ležia v intervale medzi 0 a 1.

**Dôkaz:** Cvičenie!

Teraz sa ešte pozrieme na jednu dôležitú vlastnosť operátorov hustoty. Táto sa týka jeho dekompozície (rozloženia) do čistých stavov. Otázka znie, či je táto dekompozícia jediná alebo existuje mnoho spôsobov, ako získať daný operátor hustoty ako štatistickú zmes čistých stavov? Odpoveď nájdeme, ak sa pozrieme na konkrétny jednoduchý príklad. Uvažujeme operátor hustoty reprezentujúci "úplne zmiešaný" stav dvojhladinového systému, t.j.

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}(|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|). \quad (3.31)$$

Z rovnice (3.31) priamo vidíme, že tento operátor hustoty je generovaný pecou emitujúcou atómy v stavoch  $|0\rangle$  alebo  $|1\rangle$ . Každý z týchto stavov sa realizuje s pravdepodobnosťou 50%.

Teraz si predstavme situáciu keď pec emituje dvojhladinové atómy v stavoch

$$|\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$$

s pravdepodobnosťou 50% detekcie každého zo stavov  $|+\rangle$  a  $|-\rangle$ . Tento druhý režim pece generuje rovnaký operátor hustoty ako prvý.

$$\begin{aligned} \hat{\rho} &= \frac{1}{2}(|+\rangle\langle +| + |-\rangle\langle -|) \\ &= \frac{1}{4}(|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 1|) + \frac{1}{4}(|0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 0| - |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 1|) \\ &= \frac{1}{2}(|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|). \end{aligned} \quad (3.32)$$

Rovnaký operátor hustoty môžeme teda získať rozdielnymi spôsobmi. V skutočnosti vieme nájsť *nekonečný* počet spôsobov, ako reprezentovať daný operátor hustoty. Čo to znamená? Znamená to, že operátor hustoty je zle definovaný, keďže nevie rozlišovať medzi rôznymi experimentálnymi realizáciami? Odpoveď je **NIE!** Ak dve rôzne experimentálne realizácie dávajú rovnaký operátor hustoty, potom (ako sme videli vyššie) nájdeme rovnaké stredné hodnoty pre hocikakú pozorovateľnú veličinu, ktorú sa rozhodneme merať. Ak kvantový systém v zmiešanom stave dáva rovnaké predpovede pre **všetky** možné merania, potom sme nútení prehlásiť, že dva stavy sú v skutočnosti rovnaké! Samozrejme, toto sa musí experimentálne potvrdiť a ukazuje sa, že je to naozaj pravda. Omnoho zaujímavejší je fakt, že ak by sme vedeli rozlíšiť dve situácie popísané rovnakým operátorom hustoty, potom by sme mohli prenášať signály nadsvetelnou rýchlosťou.

### 3.5 Zmiešané stavy, spletené stavy a rýchlosť svetla

V predchádzajúcej časti sme zaviedli operátor hustoty na popis tých situácií, v ktorých máme **neúplnú informáciu** o príprave kvantového stavu. Toto však nie je jediná situácia, kedy musíme použiť operátor hustoty. V tejto časti vám ukážem, že popis pomocou operátora hustoty sa stáva nevyhnutným i v prípade keď skúmame iba malú časť (*subsystém*) nejakého väčšieho systému. Aj keď je tento väčší systém v čistom stave, menší systém, ku ktorému máme prístup, je zvyčajne v zmiešanom stave. Táto myšlienka nás napokon privedie k poznaniu, že dve rôzne prípravy kvantového stavu popísané rovnakým operátorom hustoty nemôžu byť experimentálne rozlíšiteľné, pretože v tom prípade by sme boli schopní posielat' správy nadsvetelnou rýchlosťou. Takáto predstava je nezlučiteľná so základným postulátom špeciálnej teórie relativity.

Aby sme porozumeli tomuto novému pohľadu na operátor hustoty, musím vám vysvetliť, ako sa popisuje kvantovomechanický systém, ktorý pozostáva z viac ako jednej častice. Toto je účelom nasledujúceho paragrafu.

#### 3.5.1 Kvantová mechanika mnohočasticových systémov

Najprv sa sústredíme na situáciu, keď kompozitný kvantový systém pozostáva z dvoch subsystémov (častíc). Zovšeobecnenie na ľubovoľný počet podsystémov (častíc) bude už potom samozrejmé.

Predpokladajme dve častice pripravené v čistých stavoch. Stav každej častice je popísaný vo svojom Hilbertovom priestore. Pre časticu  $A$  máme Hilbertov priestor  $\mathcal{H}_A$  generovaný množinou básových stavov  $\{|\phi_i\rangle_A\}_{i=1,\dots,N}$ , pre časticu  $B$  priestor  $\mathcal{H}_B$  generovaný stavmi  $\{|\psi_j\rangle_B\}_{j=1,\dots,M}$ . Majme časticu  $A$  v stave  $|\Phi\rangle_A = \sum_{i=1}^N a_i |\phi_i\rangle_A$  a časticu  $B$  v stave  $|\Psi\rangle_B = \sum_{j=1}^M b_j |\psi_j\rangle_B$ . Celkový stav dvoch častíc je potom daný **tenzorovým súčinom** dvoch stavov

$$|\Phi\rangle_A \otimes |\Psi\rangle_B = \sum_{i=1}^N a_i |\phi_i\rangle_A \otimes \sum_{j=1}^M b_j |\psi_j\rangle_B, \quad (3.33)$$

kde

$$\sum_{i=1}^N a_i |\phi_i\rangle_A \otimes \sum_{j=1}^M b_j |\psi_j\rangle_B = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M a_i b_j |\phi_i\rangle_A \otimes |\psi_j\rangle_B. \quad (3.34)$$

Stav  $|\Phi\rangle_A \otimes |\Psi\rangle_B$  je vektorom vo väčšom Hilbertovom priestore  $\mathcal{H}_{AB} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ , ktorý je generovaný novou množinou básových stavov  $\{|\phi_i\rangle_A \otimes |\psi_j\rangle_B\}$ . Dimenzia  $\dim \mathcal{H}_{AB}$  Hilbertovho priestoru  $\mathcal{H}_{AB}$  je daná súčinom  $\dim \mathcal{H}_A \cdot \dim \mathcal{H}_B$ .

*Skalárny súčin* medzi dvoma vektormi  $|\psi_1\rangle_A \otimes |\psi_2\rangle_B$  a  $|\phi_1\rangle_A \otimes |\phi_2\rangle_B$  je definovaný ako

$${}_A\langle\psi_1| \otimes {}_B\langle\psi_2| (|\phi_1\rangle_A \otimes |\phi_2\rangle_B) = {}_A\langle\psi_1|\phi_1\rangle_A \cdot {}_B\langle\psi_2|\phi_2\rangle_B. \quad (3.35)$$

To znamená, že skalárny súčin tenzorového súčinu stavov je iba súčin skalárnych súčinov v každom Hilbertovom priestore resp. podpriestore.

*Tenzorový súčin* lineárnych operátorov je definovaný ako pôsobenie každého operátora na všetky možné stavy súčinu. Definujeme

$$\hat{A} \otimes \hat{B} (|\Phi\rangle_A \otimes |\Psi\rangle_B) = (\hat{A}|\Phi\rangle_A) \otimes (\hat{B}|\Psi\rangle_B). \quad (3.36)$$

Vo všetkých týchto definíciách som použil iba **súčinové stavy**, t.j. stavy v tvare  $|\phi\rangle \otimes |\psi\rangle$ , pretože tvoria bázu. Otázka však znie, či všetky možné stavy kompozitného systému môžeme zapísať v tvare tenzorového súčinu. Odpoveď je evidentne **nie**, pretože vieme napísať lineárnu superpozíciu rôznych súčinových stavov. Príkladom takejto lineárnej superpozície je stav

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle). \quad (3.37)$$

Pokúsme sa prepísať stav (3.37) ako tenzorový súčin  $|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$  a predpokladajme, že  $|\psi_1\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$  a  $|\psi_2\rangle = \gamma|0\rangle + \delta|1\rangle$ . Potom sa snažíme vyriešiť rovnicu

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle) = (\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle) \otimes (\gamma|0\rangle + \delta|1\rangle) = \alpha\gamma|00\rangle + \alpha\delta|01\rangle + \beta\gamma|10\rangle + \beta\delta|11\rangle$$

pre komplexné amplitúdy  $\alpha, \beta, \delta, \gamma$ . Z uvedeného vyplýva, že  $\alpha\delta = \beta\gamma = 0$ . Ak by sme položili  $\alpha = 0$ , potom by bolo aj  $\alpha\gamma = 0$  a neplatila by rovnosť. Podobne, ak by sme vzali  $\delta = 0$ , potom by aj  $\beta\delta = 0$  a strany by sa opäť nerovnali. Teda pre  $\alpha = 0$  alebo  $\delta = 0$  dochádza k rozporu. Stavy, ktoré nemožno zapísať v súčinovom tvare, nazývame **spletené stavy**.<sup>4</sup> V ďalších častiach prednášok sa budeme podrobne venovať neklasickým vlastnostiam spletených stavov. Kvantovo-mechanické spletenie je jednou zo základných rekvizít pri kvantovom spracovaní informácie. Umožňujú také fenomény ako teleportáciu kvantových stavov, kvantovú kryptografiu, kvantové husté kódovanie (quantum dense coding) alebo kvantové počítanie.

Ako zapíšeme tenzorový súčin, keď kvantové stavy uvažujeme ako stĺpcové vektory? Spôsob, akým to urobíme je v podstate ľubovoľný ale, niektoré zo zápisov sú pohodlnejšie pri výpočtoch. Tenzorový súčin medzi  $m$ -zložkovým a  $n$ -zložkovým vektorom budeme zapisovať podľa nasledovného predpisu

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_m \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} \\ \vdots \\ a_m \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 b_1 \\ \vdots \\ a_m b_n \end{pmatrix}. \quad (3.38)$$

Tenzorový súčin lineárneho operátora  $\hat{A}$  definovanom na  $m$ -rozmernom priestore a operátora  $\hat{B}$  definovaného na  $n$ -rozmernom priestore je daný v maticovom označení ako

$$\hat{A} \otimes \hat{B} = \begin{pmatrix} a_{11} & \dots & a_{1m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \dots & a_{mm} \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} b_{11} & \dots & b_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{n1} & \dots & b_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}\hat{B} & \dots & a_{1m}\hat{B} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}\hat{B} & \dots & a_{mm}\hat{B} \end{pmatrix}$$

<sup>4</sup>V anglickej literatúre sa používa pojem *entangled states*, a tak budeme niekedy používať i termín *entangled stavy*.

$$= \begin{pmatrix} a_{11} \begin{pmatrix} b_{11} & \dots & b_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{n1} & \dots & b_{nn} \end{pmatrix} & \dots & a_{1m} \begin{pmatrix} b_{11} & \dots & b_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{n1} & \dots & b_{nn} \end{pmatrix} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} \begin{pmatrix} b_{11} & \dots & b_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{n1} & \dots & b_{nn} \end{pmatrix} & \dots & a_{mm} \begin{pmatrix} b_{11} & \dots & b_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{n1} & \dots & b_{nn} \end{pmatrix} \end{pmatrix}. \quad (3.39)$$

Najjednoduchším explicitným príkladom sú vektory a operátory v 2-rozmernom Hilbertovom priestore. Platí

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 b_1 \\ a_1 b_2 \\ a_2 b_1 \\ a_2 b_2 \end{pmatrix}. \quad (3.40)$$

a

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}b_{11} & a_{11}b_{12} & a_{12}b_{11} & a_{12}b_{12} \\ a_{11}b_{21} & a_{11}b_{22} & a_{12}b_{21} & a_{12}b_{22} \\ a_{21}b_{11} & a_{21}b_{12} & a_{22}b_{11} & a_{22}b_{12} \\ a_{21}b_{21} & a_{21}b_{22} & a_{22}b_{21} & a_{22}b_{22} \end{pmatrix}. \quad (3.41)$$

Toto označenie pre tenzorový súčin stĺpcových vektorov a matic nám zaručuje, že vzťah  $\hat{A} \otimes \hat{B}|\phi\rangle \otimes |\psi\rangle = \hat{A}|\phi\rangle \otimes \hat{B}|\psi\rangle$  platí, keď urobíme všetky náležité operácie s maticami a stĺpcovými vektormi.

### 3.5.2 Ako popísať podsystém veľkého systému?

Predstavme si nasledujúcu situáciu: Úplný systém, ktorý uvažujeme, pozostáva z dvoch častíc z  $N$  resp.  $M$ -rozmerným Hilbertovým priestorom  $\mathcal{H}_A$  ( $\mathcal{H}_B$ ) a s bázovými vektormi  $\{|\phi_i\rangle_A\}_{i=1,\dots,N}$ , resp.  $\{|\psi_j\rangle_B\}_{j=1,\dots,M}$ . Predpokladajme ďalej, že dve častice sa nachádzajú v zmiešanom stave  $\hat{\rho}_{AB}$ . Alica má k dispozícii (vlastní) časticu  $A$ , Bob časticu  $B$  a odmietá Alici akýkoľvek prístup k svojej častici. Teraz si predstavme, že Alica urobí meranie iba na svojej častici (nemá prístup k tej, ktorú má Bob). To znamená, že meria pozorovateľnú veličinu, ktorej zodpovedá operátor  $\hat{A} \otimes \hat{1}_B$ . Operátor na Bobovej strane musí byť jednotkový operátor  $\hat{1}_B$ , pretože na jeho častici sa nič nemeria. Chceme vypočítať strednú hodnotu asociovanú s výsledkom tohoto merania, t.j.

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr}_{AB}[(\hat{A} \otimes \hat{1}_B)\hat{\rho}_{AB}], \quad (3.42)$$

kde  $\text{Tr}_{AB}$  znamená operáciu stopy cez obidva subsystémy, t.j. cez Alicinu a Bobovu časticu. Tento popis je úplne správny a vždy dáva správny výsledok. Ak však potrebujeme iba výsledok merania na Alicinej častici, potom by bolo vhodné nájsť spôsob, ako popísať iba jej systém bez ohľadu na druhý. Teraz odvodím takýto matematický objekt, ktorý sa nazýva **redukovaný operátor hustoty**.

Začnime s rovnicou (3.42) a použijeme definíciu stopy

$$\begin{aligned}
\langle \hat{A} \rangle &= \text{Tr}_{AB}[(\hat{A} \otimes \hat{1}_B)\hat{\rho}_{AB}] \\
&= \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M {}_A\langle \phi_i | {}_B\langle \psi_j | (\hat{A} \otimes \hat{1}_B)\hat{\rho}_{AB} | \phi_i \rangle_A | \psi_j \rangle_B \\
&= \sum_{i=1}^N {}_A\langle \phi_i | \hat{A} \left( \sum_{j=1}^M {}_B\langle \psi_j | \hat{\rho}_{AB} | \psi_j \rangle_B \right) | \phi_i \rangle_A \\
&= \text{Tr}_A \left[ \hat{A} \left( \sum_{j=1}^M {}_B\langle \psi_j | \hat{\rho}_{AB} | \psi_j \rangle_B \right) \right] \\
&= \text{Tr}_A(\hat{A}\hat{\rho}_A).
\end{aligned} \tag{3.43}$$

V poslednom kroku sme rozštiepili operáciu stopy na dve časti. Z rozštiepenia je jasné, že stav Alicinho systému je popísaný **redukovaným operátorom hustoty**

$$\hat{\rho}_A = \sum_{j=1}^M {}_B\langle \psi_j | \hat{\rho}_{AB} | \psi_j \rangle_B = \text{Tr}_B(\hat{\rho}_{AB}), \tag{3.44}$$

kde posledná rovnosť predstavuje operáciu **parciálnej** alebo **čistočnej stopy**. Výsledkom je, že redukovaný operátor hustoty  $\hat{\rho}_A$  dovoľuje Alici popísať výsledok merania na jej vlastnej častici (systéme) bez ohľadu na Bobovu časticu, t.j.

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr}_A(\hat{A}\hat{\rho}_A).$$

Predstavte si, že máme operátor hustoty  $\hat{\rho}_{AB}$ . Otázka znie, ako sa dá explicitne určiť redukovaný operátor hustoty. Uvažujme najprv čistý stav  $\hat{\rho}_{AB}$ , ktorý je daný ako tenzorový súčin čistých stavov dvoch podsystemov, t.j.  $\hat{\rho}_{AB} = |\phi_1\rangle_A |\psi_1\rangle_B {}_A\langle \phi_1 | {}_B\langle \psi_1 | = |\phi_1\rangle_A {}_A\langle \phi_1 | \otimes |\psi_1\rangle_B {}_B\langle \psi_1 |$ . Potom z rovnice (3.44) čiastočnú stopu určíme ako

$$\begin{aligned}
\text{Tr}_B(|\phi_1\rangle_A {}_A\langle \phi_1 | \otimes |\psi_1\rangle_B {}_B\langle \psi_1 |) &= \sum_{j=1}^M {}_B\langle \psi_j | (|\phi_1\rangle_A {}_A\langle \phi_1 | \otimes |\psi_1\rangle_B {}_B\langle \psi_1 |) | \psi_j \rangle_B \\
&= \sum_{j=1}^M |\phi_1\rangle_A {}_A\langle \phi_1 | {}_B\langle \psi_j | \psi_1 \rangle_B {}_B\langle \psi_1 | \psi_j \rangle_B \\
&= |\phi_1\rangle_A {}_A\langle \phi_1 |.
\end{aligned} \tag{3.45}$$

Teraz je už jasné, ako postupovať v prípade ľubovoľného operátora hustoty dvoch podsystemov. Zapišme teda operátor hustoty v súčinovej báze, t.j.

$$\hat{\rho}_{AB} = \sum_{i,k=1}^N \sum_{j,l=1}^M \rho_{ijkl} |\phi_i\rangle_A |\psi_j\rangle_B {}_A\langle \phi_k | {}_B\langle \psi_l | = \sum_{i,k=1}^N \sum_{j,l=1}^M \rho_{ijkl} |\phi_i\rangle_A {}_A\langle \phi_k | \otimes |\psi_j\rangle_B {}_B\langle \psi_l |. \tag{3.46}$$

Keď použijeme rovnicu (3.44) zistíme, že platí

$$\begin{aligned}
\hat{\rho}_A = \text{Tr}_B(\hat{\rho}_{AB}) &= \sum_{c=1}^M {}_B\langle \psi_c | \left( \sum_{i,k=1}^N \sum_{j,l=1}^M \rho_{ijkl} |\phi_i\rangle_A {}_A\langle \phi_k | \otimes |\psi_j\rangle_B {}_B\langle \psi_l | \right) | \psi_c \rangle_B \\
&= \sum_{c=1}^M \sum_{i,k=1}^N \sum_{j,l=1}^M \rho_{ijkl} |\phi_i\rangle_A {}_A\langle \phi_k | ({}_B\langle \psi_c | \psi_j \rangle_B) ({}_B\langle \psi_l | \psi_c \rangle_B) \\
&= \sum_{c=1}^M \sum_{i,k=1}^N \sum_{j,l=1}^M \rho_{ijkl} |\phi_i\rangle_A {}_A\langle \phi_k | \delta_{cj} \delta_{lc} \\
&= \sum_{i,k=1}^N \left( \sum_{c=1}^M \rho_{icck} \right) |\phi_i\rangle_A {}_A\langle \phi_k | = \sum_{i,k=1}^N \alpha_{ik} |\phi_i\rangle_A {}_A\langle \phi_k |
\end{aligned} \tag{3.47}$$

kde  $\alpha_{ik} = \sum_c \rho_{icck}$ .

**Príklad:** Uvažujme dva dvojhladinové systémy  $A$  a  $B$ . Označme báзовé stavy v oboch Hilbertových priestoroch (podpriestoroch) ako  $|1\rangle$  a  $|2\rangle$ . Báзовé stavy v celkovom Hilbertovom priestore potom tvoria množinu  $\{|11\rangle, |12\rangle, |21\rangle, |22\rangle\}$ . Teraz v tejto báze zapišeme stav celého systému

$$\begin{aligned}
\hat{\rho}_{AB} &= \frac{1}{3} |11\rangle\langle 11| + \frac{1}{3} |11\rangle\langle 12| + \frac{1}{3} |11\rangle\langle 21| \\
&+ \frac{1}{3} |12\rangle\langle 11| + \frac{1}{3} |12\rangle\langle 12| + \frac{1}{3} |12\rangle\langle 21| \\
&+ \frac{1}{3} |21\rangle\langle 11| + \frac{1}{3} |21\rangle\langle 12| + \frac{1}{3} |21\rangle\langle 21|.
\end{aligned} \tag{3.48}$$

V ďalšom kroku urobíme čiastočnú stopu cez podsystem  $B$ . Znamená to, že zosumujeme všetky tie členy, ktoré obsahujú stavy v tvare  $|i\rangle_B {}_B\langle i|$ . Výsledok potom zapišeme ako

$$\hat{\rho}_A = \frac{2}{3} |1\rangle\langle 1| + \frac{1}{3} |1\rangle\langle 2| + \frac{1}{3} |2\rangle\langle 1| + \frac{1}{3} |2\rangle\langle 2|. \tag{3.49}$$

Rovnica (3.49) vskutku nepopisuje čistý stav pretože sa ľahko môžeme presvedčiť o tom, že  $\det \hat{\rho}_A \neq 0$ , resp.  $\text{Tr} \hat{\rho}_A^2 < 1$ . Nie je to náhoda, že som vybral práve tento príklad. Alicin systém je v zmiešanom stave (nekoherentná superpozícia), hoci celkový systém je v čistom stave (3.48). Aby sme sa o tom presvedčili, stačí iba overiť, že platí

$$\hat{\rho}_{AB} = |\Psi\rangle_{AB} {}_{AB}\langle \Psi|, \tag{3.50}$$

kde  $|\Psi\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} |11\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} |12\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} |21\rangle$ . Toto je evidentne čistý stav! Alicin redukovaný operátor hustoty (3.49) však popisuje zmiešaný stav!

S takouto situáciou sa stretávame v kvantovej fyzike veľmi často. Kedykoľvek majú Alica a Bob celkový systém v čistom stave, ktorý sa však **nedá** napísať ako súčinový stav  $|\phi\rangle \otimes |\psi\rangle$ , potom redukovaný operátor hustoty popisujúci jeden z podsystemov reprezentuje **zmiešaný** stav. Takéto stavy dvojjasticové stavy sa nazývajú **spletené** a ako sme už spomenuli, majú niekoľko zvláštnych vlastností, ktorým sa ešte budeme podrobne venovať.

Teraz sa pozrime, ako nám toto všetko pomôže odhaliť (vcelku mysteriózne) spojenie medzi špeciálnou teóriou relativity a zmiešanými stavmi.

### 3.5.3 Rýchlosť svetla a zmiešané stavy

Už sme sa presvedčili o tom, že vďaka kvantovému spleteniu sa kvantové podsystemy môžu nachádzať v zmiešaných stavoch. Stav podsystemu je potom popísaný operátorom hustoty, takým že  $\text{Tr} \hat{\rho}_A^2 < 1$ . Keď sme zaviedli operátor hustoty, povedal som, že konkrétny zmiešaný stav môže byť realizovaný rôznymi spôsobmi. Uviedol som príklad

$$\begin{aligned}\hat{\rho} &= \frac{1}{2}|0\rangle\langle 0| + \frac{1}{2}|1\rangle\langle 1| \\ &= \frac{1}{2}|+\rangle\langle +| + \frac{1}{2}|-\rangle\langle -|,\end{aligned}$$

kde  $|\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \pm |1\rangle)$ . Poukázal som však na to, že tieto dve realizácie sú fyzikálne *identické*, pretože nie sme schopní ich experimentálne rozlíšiť. Ukážeme si, že ak by sme boli schopní rozlíšiť dve realizácie (rozklady do čistých stavov) popísané rovnakým operátorom hustoty, potom by sme mohli **posielat' signály nadsvetelnou rýchlosťou**, t.j. porušil by sa základný postulát špeciálnej teórie relativity.

Predstavme si dve osoby, Alicu a Boba, ktorý sa v istý moment zídu a v experimente si pripraví pár spletených dvojhľadínových častíc pripravených v stave

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|++\rangle + |--\rangle). \quad (3.51)$$

Potom sa Alica a Bob navzájom vzdialia, povedzme, na vzdialenosť jedného svetelného roka. V tejto situácii chce Alica poslať Bobovi poslať jeden bit informácie, t.j. odpoveď na jeho otázku, ktorá môže byť **áno** alebo **nie**. Na transfer jedného bitu informácie chce použiť entanglovaný pár častíc, ktorý spoluvlastní s Bobom. Transfer jedného bitu informácie chce urobiť prostredníctvom *lokálneho* merania, ktoré spraví na svojej častici.

Ešte vopred sa s Bobom dohodne, že odpoveď **áno** bude korešpondovať lokálnemu meraniu v báze  $|0\rangle; |1\rangle$ . Samozrejme, pravdepodobnosť, že nájde stav  $|0\rangle$  je  $p_0 = \frac{1}{2}$ , pravdepodobnosť nájsť stav  $|1\rangle$  sa rovná  $p_1 = \frac{1}{2}$ . Ak Alica namerá stav  $|0\rangle$ , celý systém bude v stave  $|0\rangle\langle 0| \otimes \hat{1}|\psi\rangle \sim |00\rangle$ , ak namerá stav  $|1\rangle$ , celý systém potom bude v stave  $|1\rangle\langle 1| \otimes \hat{1}|\psi\rangle \sim |11\rangle$ .

Ak chce Alica poslať odpoveď **nie**, potom spraví lokálne merania v báze  $|+\rangle, |-\rangle$ . Pravdepodobnosť, že nájde stav  $|+\rangle$  je  $p_+ = \frac{1}{2}$ , pre stav  $|-\rangle$   $p_- = \frac{1}{2}$ . Ak Alica namerá stav  $|+\rangle$ , potom celý systém bude v stave  $|+\rangle\langle +| \otimes \hat{1}|\psi\rangle \sim |++\rangle$ , ak namerá  $|-\rangle$ , celý systém potom bude v stave  $|-\rangle\langle -| \otimes \hat{1}|\psi\rangle \sim |--\rangle$ .

Znamená to teda, že zaslanie jedného bitu informácie v tomto "protokole" by malo byť realizované lokálnym výberom bázy, v ktorej Alica robí meranie.

Čo z toho vyplýva pre Bobov systém? Keďže výsledkom merania je náhodný, Bob bude mať svoju časticu v zmiešanom stave. Ak chcela Alica poslať **áno**, potom Bobova častica bude po Alicinom meraní v stave

$$\hat{\rho}_{ano} = \frac{1}{2}|0\rangle\langle 0| + \frac{1}{2}|1\rangle\langle 1| \quad (3.52)$$

a ak chcela Alica poslať **nie**, potom Bob nájde svoju časticu v stave

$$\hat{\rho}_{nie} = \frac{1}{2}|+\rangle\langle +| + \frac{1}{2}|-\rangle\langle -|. \quad (3.53)$$

Ak by bol Bob schopný fyzikálne rozlíšiť tieto dva operátory hustoty, potom by mohol zistiť, ktoré z meraní Alica uskutočnila. V tom prípade by vedel usúdiť, aká je Alicina odpoveď na otázku. Navyiac, túto odpoveď by mohol získať v princípe "okamžite" (určite skôr ako za jeden rok, ktorý by potreboval klasický signál na prekonanie vzdialenosti medzi Alicou a Bobom). Znamenalo by to, že kvantové spletenie by umožnilo komunikáciu superluminálnou rýchlosťou. Špeciálna teória relativity však kategoricky takúto možnosť vylučuje. Znamená to teda, že Bob v princípe nemôže rozlíšiť dva operátory hustoty (3.52) a (3.53).

K problému spuerluminálnej komunikácie sa ešte vrátíme pri analýze Bellových nerovností a pri analýze kvantového klonovania. Zatiaľ teda ukončíme našu diskusiu konštatovaním, že všetky rozklady operátora hustoty sú fyzikálne ekvivalentné.

# Kapitola 4

## Dynamika a symetrie

*The simplicities of natural laws arise through the complexities of the languages we use for their expression.*

Eugene P. Wigner <sup>1</sup>

Doposiaľ sme sa zaoberali iba stacionárnymi systémami, t.j. neuvažovali sme časový vývoj kvantovomechanických objektov. Predpokladali sme iba prípravu týchto objektov v istých (konkrétnych) kvantovomechanických stavoch a ich následné meranie. V skutočnosti sa každý systém vyvíja v čase, a tak potrebujeme poznať kvantovomechanické pravidlá pre časový vývoj. Budeme sa im venovať v tejto časti.

### 4.1 Schrödingerova rovnica

Je dobre známe, že predpis, ktorý určuje vývoj kvantovomechanického systému je daný Schrödingerovou rovnicou. Predtým ako budeme túto rovnicu formulovať ako ďalší postulát, uvažujme aké kritériá by mal spĺňať vhodný operátor kvantovomechanického časového vývoja. Potom sa presvedčíme, že Schrödingerova rovnica spĺňa tieto podmienky spĺňa. V skutočnosti, akonáhle akceptujeme tieto vlastnosti, nemáme príliš veľkú voľnosť pri výbere Schrödingerovej rovnice.

**Definícia 4.1** Operátor časového vývoja  $\hat{U}(t_2, t_1)$ , ktorý zobrazuje kvantový stav  $|\psi(t_1)\rangle$  na stav  $|\psi(t_2)\rangle$ , spĺňa vlastnosti

1.  $\hat{U}(t_2, t_1)$ , je unitárny.
2. Platí  $\hat{U}(t_2, t_1)\hat{U}(t_1, t_0) = \hat{U}(t_2, t_0)$ . (vlastnosť semi-grupy)
3.  $\hat{U}(t, t_1)$  je diferencovateľný podľa  $t$ .

Aký je dôvod týchto predpokladov? Predovšetkým, operátor časového vývoja zobrazuje fyzikálne stavy na fyzikálne stavy. To znamená, že ľubovoľný normalizovaný stav  $|\psi(t_0)\rangle$  je

<sup>1</sup>Ešte jeden pekný citát od Wignera: *The language of mathematics reveals itself [to be] unreasonably effective in the natural sciences ... a wonderful gift which we neither understand nor deserve. We should be grateful for it and hope that it will remain valid in future research and that it will extend, for better or for worse, to our pleasure even though perhaps to our bafflement, to wide branches of learning.*

zobrazený na normalizovaný stav  $|\psi(t_1)\rangle$ , t.j. pre ľubovoľný  $|\psi(t_0)\rangle$

$$\langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle = \langle \psi(t_1) | \psi(t_1) \rangle = \langle \psi(t_0) | \hat{U}^\dagger(t_1, t_0) \hat{U}(t_1, t_0) | \psi(t_0) \rangle. \quad (4.1)$$

Preto sa javí ako rozumná požiadavka, aby  $\hat{U}(t_1, t_0)$  bol unitárny operátor.

Druhá vlastnosť operátora časového vývoja požaduje, aby nevznikal rozdiel ak najprv vyvíjame systém z  $t_0$  do  $t_1$  a potom z  $t_1$  do  $t_2$ , alebo ak ho priamo vyvíjame z  $t_0$  do  $t_2$ . Je to veľmi rozumná požiadavka, ale treba si uvedomiť, že neplatí ak systém meriame v medzičase  $t_1$ . V skutočnosti *nesmieme* interagovať so systémom.

Tretia podmienka sa týka matematickej vhodnosti a fyzikálnej skúsenosti. Každý systém sa vyvíja v čase spojitě. Toto pozorovanie je potvrdené experimentálne. Dynamika sa vo fyzike zvyčajne popisuje diferenciálnymi rovnicami, ktoré už zahrňujú fakt, že pozorovateľné kvantily a fyzikálne stavy sú diferencovateľné v čase. Niektorí sa na tomto mieste môže počuďovať, o čom je potom rozruch okolo tzv. kvantových skokov. Podstatou je, že hovoríme o časovom vývoji *uzavretých* kvantovomechanických systémov. To znamená, že hráme úlohu “vonkajších” pozorovateľov a nepôsobíme na systém, a najmä, že ho nemerame. Ako som už hovoril, pri meraní sa stav systému naozaj môže meniť nespojitě, prinajmenšom podľa Postulátu 4, ktorý je dobre otestovaný. Možno teda konštatovať, že kvantový stav uzavretého systému sa mení hladko (spojitě), pokiaľ nie je systém meraný (vtedy interaguje s vonkajším pozorovateľom).

Aké ďalšie závery možno urobiť z vlastností operátora časového vývoja? Uvažujme operátor časového vývoja pre veľmi krátky časový rozdiel medzi  $t$  a  $t_0$ . Ak využijeme jeho diferencovateľnosť v čase (vlastnosť 3 jeho definície 4.1), potom nájdeme

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_0)(t - t_0) + \dots \quad (4.2)$$

Tu sme využili predpoklad, že časový vývoj uzavretého kvantovomechanického systému je hladký. Operátor  $\hat{H}(t_0)$ , ktorý sa objavuje na pravej strane rovnice sa nazýva *Hamiltonov operátor* daného systému. Aplikujme ho na počiatočný stav  $|\psi(t_0)\rangle$  a derivujme podľa času  $t$  na oboch stranách. Nachádzame

$$i\hbar \partial_t |\psi(t)\rangle \equiv i\hbar \partial_t (\hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle) \approx \hat{H}(t_0) |\psi(t_0)\rangle. \quad (4.3)$$

Ak spravíme limitu  $t \rightarrow t_0$ , napokon nachádzame

$$i\hbar \partial_t |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle. \quad (4.4)$$

Toto je Schrödingerova rovnica v Diracovej notácii, vo forme nezávislej na koordinátnom systéme. Aby sme ozrejmili spojitost' s Schrödingerovou rovnicou vo vlnovej mechanike budeme uvažovať Hamiltonov operátor pre časticu, ktorá sa pohybuje v jednorozmernom potenciáli  $V(x, t)$ . Teraz pre Schrödingerovu rovnicu v  $x$ -reprezentácii dostaneme tvar

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t \langle x | \psi(t) \rangle &= \langle x | i\hbar \partial_t | \psi(t) \rangle \\ &= \langle x | \hat{H} | \psi(t) \rangle \\ &= \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(\hat{x}, t) \right) \langle x | \psi(t) \rangle. \end{aligned}$$

Od predpokladov vlastností operátora časového vývoja, ktoré boli urobené vyššie, sme sa takto dostali k diferenciálnej rovnici pre časový vývoj stavového vektora. Samozrejme, že tento výsledok musí byť opäť otestovaný v experimentoch. Niekedy je ťažkou úlohou nájsť správny tvar Hamiltonovho operátora  $\hat{H}$ , ktorý riadi časový vývoj systému. Sformulujme teraz výsledok našich úvah do nasledujúceho postulátu.

**Postulát 5** Časový vývoj kvantového stavu izolovaného kvantovomechanického systému je určený Schrödingerovou rovnicou

$$i\hbar\partial_t|\psi(t)\rangle = \hat{H}(t)|\psi(t)\rangle. \quad (4.5)$$

kde  $\hat{H}$  je Hamiltonov operátor daného systému.

Hamiltonov operátor je pozorovateľnou (veľičinou), ktorá určuje vlastné hodnoty energie kvantovomechanického systému. Tejto otázke sa ešte budeme venovať neskôr. Nasledujúca diskusia viac ozrejní časový vývoj kvantovomechanického systému. Zvlášť sa zameriame na skúmanie kvantovomechanických symetrií a zachovávajúcich sa veličín (kvantít).

## 4.2 Heisenbergov obraz

V predchádzajúcej časti sme uvažovali časový vývoj kvantovomechanického stavového vektora. V skutočnosti sme "sústriedili" celý časový vývoj do stavu a pozorovateľné veličiny zostali časovo nezávislé. Tento pohľad na časový vývoj sa nazýva *Schrödingerov obraz*. Nie je to však jediný spôsob popisu kvantovej dynamiky. Môžeme uvažovať aj opačný extrém, t.j. stavy môžeme nechať časovo invariantné a v čase vyvíjať pozorovateľné (veľičiny). Tu musíme zodpovedať na otázku: "Ako nájdeme časový vývoj kvantovomechanických pozorovateľných veličín?" K tomu potrebujeme istý návod, vhodnú vlastnosť, ktorá musí byť rovnaká v oboch "obrazoch" kvantovej mechaniky. Taká vlastnosť musí byť experimentálne verifikovateľná. Konkrétne, využijeme je skutočnosť, že stredná hodnota ľubovoľnej pozorovateľnej veličiny musí byť rovnaká v oboch obrazoch. Uvažujme najskôr strednú hodnotu operátora  $\hat{A}_S$  v Schrödingerovom obraze v čase  $t$ , s počiatočným stavom  $|\psi(t_0)\rangle$ . Ak použijeme riešenie Schrödingerovej rovnice pre stavové vektory, potom pre strednú hodnotu nájdeme v tvare

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi(t) | \hat{A}_S | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t_0) | \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{A}_S \hat{U}(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle. \quad (4.6)$$

Z rovnice (4.6) vidíme, že jej pravú stranu môžeme interpretovať aj ako strednú hodnotu časovo závislého operátora

$$\hat{A}_H(t) = \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{A}_S \hat{U}(t, t_0) \quad (4.7)$$

v počiatočnom stave  $|\psi(t_0)\rangle$ . To znamená, že

$$\langle \psi(t) | \hat{A}_S | \psi(t) \rangle = \langle \hat{A} \rangle = \langle \psi(t_0) | \hat{A}_H(t) | \psi(t_0) \rangle. \quad (4.8)$$

Keď uvažujeme stavy systému ako časovo nezávislé a pozorovateľné veličiny ako vyvíjajúce sa v čase, hovoríme o *Heisenbergovom obraze* kvantovej mechaniky. Ako sme videli v rovnici (4.8), oba obrazy, Schrödingerov obraz a Heisenbergov obraz, dávajú presne tie isté predpovede pre fyzikálne, pozorovateľné veličiny. Podľa konkrétneho problému ale môže byť výhodou voľba jedného alebo druhého obrazu.

Podobne ako stavy v Schrödingerovom obraze, Heisenbergove operátory spĺňajú diferenciálnu rovnicu pre časový vývoj. Táto sa ľahko získava časovou deriváciou rovnice (4.7). K tomu

potrebujeme najprv poznať časovú deriváciu operátora časového vývoja. Ak budeme reprezentovať časový vývoj stavového vektora v tvare  $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle$ , potom dosadením tohoto výrazu do Schrödingerovej rovnice (4.4) nájdeme vzťah

$$i\hbar\partial_t\hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle = \hat{H}(t)\hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle \quad (4.9)$$

odkiaľ dostaneme

$$i\hbar\partial_t\hat{U}(t, t_0) = \hat{H}(t)\hat{U}(t, t_0). \quad (4.10)$$

Za predpokladu, že operátor v Schrödingerovom obraze nie je *explicitne* závislý od času, dostaneme následovný vzťah

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\hat{A}_H(t) &= \frac{d}{dt}\left(\hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{A}_S\hat{U}(t, t_0)\right) \\ &= \frac{\partial\hat{U}^\dagger(t, t_0)}{\partial t}\hat{A}_S\hat{U}(t, t_0) + \hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{A}_S\frac{\partial\hat{U}(t, t_0)}{\partial t} \\ &= \frac{i}{\hbar}\hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{H}(t)\hat{A}_S\hat{U}(t, t_0) + \hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{A}_S\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t)\hat{U}(t, t_0) \\ &= \frac{i}{\hbar}\hat{U}^\dagger(t, t_0)[\hat{H}(t), \hat{A}_S]\hat{U}(t, t_0) \\ &= \frac{i}{\hbar}[\hat{H}(t), \hat{A}_S]_H \end{aligned} \quad (4.11)$$

$$= \frac{i}{\hbar}[\hat{H}_H(t), \hat{A}_H]. \quad (4.12)$$

Ak operátor  $\hat{A}_S$  je v Schrödingerovom obraze explicitne závislý od času potom môžeme predchádzajúcu rovnicu prepísať v tvare

$$\frac{d}{dt}\hat{A}_H(t) = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}(t), \hat{A}_H(t)] + \left(\frac{\partial\hat{A}_S}{\partial t}\right)_H(t). \quad (4.13)$$

Táto rovnica pre časový vývoj operátorov sa nazýva *Heisenbergovu rovnicou*

### Poznámky:

(1) Jednou z výhod Heisenbergovho obrazu je, že má priamy analóg v klasickej mechanike. V skutočnosti sa dá táto analógia chápať ako potvrdenie stotožnenia Hamiltoniánu  $\hat{H}$  s energiou daného systému.<sup>2</sup>

(2) Popri *Schrödingerovej* a *Heisenbergovej* reprezentácii existuje i ďalšia užitočná reprezentácia, tzv. *Diracova*, resp. *interakčná reprezentácia*. V tejto sa v čase menia ako stavy tak i operátory.

## 4.3 Symetrie a zákony zachovania

Po zavedení Heisenbergovho obrazu prišiel čas prediskutovať koncept symetrií a ich vzťah k zákonom zachovania. Toto je asi jeden z najelegantnejších princípov, ktorý platí v prírode - s každou symetriou je asociovaný nejaký zákon zachovania

<sup>2</sup>Na tomto mieste nebudem zachádzať v tejto diskusii do detailov - je však dôležité si pamätať, že jedným z nosných princípov pri formulovaní kvantovej mechaniky bol *princíp korešpondencie*, na základe ktorého sa ku klasickým veličinám priradzovali kvantové veličiny. Pričom vzťahy medzi týmito kvantovými objektami mali analogické ako medzi korešpondujúcimi klasickými veličinami. Preto sa v kvantovej mechanike zaviedli pojmy ako kanonicky združené premené, k Poissonovým zátvorkám sa priradili komutačné vzťahy etc.

### 4.3.1 Koncept symetrie

Ak sme schopní pozerat' sa na systém za rôznych podmienok, a ten sa nám javí stále rovnako, hovoríme, že systém má symetriu. V tejto časti postavíme toto jednoduché tvrdenie na pevné základy. Prečo sa zaujímate o symetrie? Odpoveď je jednoduchá. Robia náš život jednoduchším. Ak máme symetriu v danom probléme, potom aj riešenie bude mať túto symetriu. Samotná symetria v riešení sa vyjadruje v existencii veličiny, ktorá sa zachováva pre každé riešenie problému. Vždy nás samozrejme zaujímajú veličiny, ktoré sa zachovávajú. Prirodzenou otázkou je, ako sú tieto zachovávajúce sa veličiny spojené so symetriou daného problému. Sú dva spôsoby ako formulovať symetrie: aktívny a pasívny spôsob. Ak predpokladáme, že transformujeme systém  $S$  na nový systém  $S'$ , potom hovoríme o aktívnej transformácii, t.j. aktívne meníme systém. Ak meníme súradničnú sústavu, v ktorej uvažujeme ten istý systém, potom hovoríme o pasívnej transformácii. My sa ďalej sústreďme na aktívny pohľad, ktorý je hádam jednoduchší pre výklad.

Jedným z príkladov rozdielu medzi pasívnou a aktívnou transformáciou systému je "inverzia" (obrátenie) času: Je možné si predstaviť systém, v ktorom všetky hybnosti častíc  $\vec{p}$  v istý moment zameníme na  $-\vec{p}$ , t.j. v tejto aktívnej transformácii sme zmenili znamienka hybností, čo efektívne znamená, že systém sa začne vyvíjať "dozadu". Inými slovami, pri tejto aktívnej transformácii sme efektívne "otočili" čas. Na druhej strane nie sme schopní skutočne "otočiť" čas, toto by zodpovedalo pasívnej transformácii.

Sformalizujme teraz, čo myslíme pod pojmom symetria. V aktívnom pohľade máme na mysli, že systém  $S$  a transformovaný  $S' = TS$  vyzerajú rovnako. Čo znamená v kvantovej mechanike, že " $S$  a  $S'$  vyzerajú rovnako". Jediné veličiny, ktoré sú v rámci kvantovej paradigmy prístupné pozorovateľovi sú stredné hodnoty, resp. pravdepodobnosti prechodu. Dva systémy sú teda v kvantovej mechanike rovnaké, ak pravdepodobnosti prechodu medzi zodpovedajúcimi stavmi sú rovnaké. Pre väčšiu presnosť' prijmeme nasledujúcu definíciu.

**Definícia 4.2** Transformácia  $\hat{T}$  je nazývaná **transformáciou symetrie** ak pre všetky vektory  $|\Phi\rangle$  a  $|\psi\rangle$  systému  $S$  a pre zodpovedajúce vektory  $|\Phi'\rangle = \hat{T}|\Phi\rangle$  a  $|\psi'\rangle = \hat{T}|\psi\rangle$  systému  $S'$  platí

$$|\langle\psi|\phi\rangle| = |\langle\psi'|\phi'\rangle|. \quad (4.14)$$

Z tejto definície vidno, že kvantové stavy sa transformujú podľa vzťahu  $|\Phi'\rangle = \hat{T}|\Phi\rangle$ . Z toho vyplýva, že pozorovateľná veličina, ktorá má tvar  $\hat{A} = \sum_j a_j |a_j\rangle\langle a_j|$ , sa transformuje podľa predpisu  $\hat{A}' = \hat{T}\hat{A}\hat{T}^\dagger$ .

Teraz sa sústreďme na otázku, ktoré transformácie  $\hat{T}$  sú možnými transformáciami symetrie? Pretože všetky pravdepodobnosti prechodu musia byť zachované, dalo by sa očakávať, že transformácie symetrie sú automaticky unitárnymi transformáciami. Takýto záver by ale bol predčasný z dvoch dôvodov. Po prvé, nepožadovali sme, aby sa zachovával skalárny súčin, ale iba jeho *absolútna* hodnota. Po druhé, nepožadovali sme dokonca ani linearitu transformácie  $T$ .

Wigner, dokázal, že transformácia symetrie  $\hat{T}$  nemôže byť omnoho viac všeobecnejšia než unitárna transformácia:<sup>3</sup>

<sup>3</sup>V prvom priblížení týchto prednášok vám neposkytnem d'kaz tejto teóremy. Tí, ktorí by predsa len chceli vedieť niečo viac, môžu sa pozrieť do knihy K. Gottfried, *Quantum Mechanics I* (Benjamin, 1966).

#### Teorema 4.1 (Wignerova)

Každá transformácia symetrie môže byť vyjadrená unitárnou transformáciou alebo anti-unitárnou transformáciou.

Pre anti-unitárnu transformáciu platí

$$\hat{U}(\alpha|\phi\rangle + \beta|\psi\rangle) = \alpha^* \hat{U}|\phi\rangle + \beta^* \hat{U}|\psi\rangle. \quad (4.15)$$

Lahko ukážete, že táto transformácia zachováva pravdepodobnosti pravdepodobnosti prechodov medzi dvoma stavmi. Determinant unitárnych transformácie je rovný jednej. Determinant anti-unitárnej operácie je rovný -1. Typickým príkladom anti-unitárnej symetrie je inverzia času. Tejto sa budeme podrobnejšie venovať neskôr.

Systém je zvyčajne symetrický vzhľadom na viacero transformácií. V skutočnosti je užitočné uvažovať grupy symetrií. Tieto grupy môžu byť diskkrétne (dajú sa očíslovať celými číslami) alebo spojité (dajú sa parametrizovať reálnymi číslami).

**Definícia 4.3** Spojitá grupa symetrií je množina transformácií symetrií, ktorá sa dá parametrizovať reálnym parametrom tak, že transformácie symetrií je možno diferencovať vzhľadom k tomuto parametru.

#### Príklad.

Každý Hermitovský operátor  $\hat{A}$  podmieňuje existenciu spojitej grupy symetrie, pri využití definície

$$\hat{U}(\epsilon) := e^{i\hat{A}\epsilon/\hbar}. \quad (4.16)$$

Samozrejme, že operátor  $\hat{U}(\epsilon)$  je diferencovateľný podľa parametra  $\epsilon$ .

Doposiaľ sme sa naučili, ktoré transformácie môžu byť transformáciami symetrií. Transformácia symetrie kvantovomechanického systému je buď unitárnou, alebo anti-unitárnou transformáciou. Predsa len, nie každá transformácia symetrie je aj symetriou daného kvantového systému. Príčina tkvie v tom, že nie je postačujúce požadovať, aby konfigurácia systému bola symetrická v danom časovom okamihu, ale taktiež, aby táto symetria bola zachovávaná počas dynamiky systému.

V opačnom prípade by sme boli schopní odlišiť dva "symetrické" stavy iba tým, že by sme ich nechali vyvíjať sa. Invariantnosť konfiguračnej symetrie počas časového vývoja vedie k pozorovateľným veličinám, ktoré sa zachovávajú v čase. Pretože hovoríme o časovom vývoji kvantového systému, uvedomujeme si, že Hamiltonov operátor hrá centrálnu úlohu v teórii symetrií kvantovomechanického systému. Táto skutočnosť' nie je prekvapivá, pretože počiatočný stav (s istou symetriou) a Hamiltonov operátor plne určujú budúcnosť' systému.

Predpokladajme, že máme symetriu, ktorá sa zachováva v čase. V počiatočnom čase zobrazuje symetria stav  $|\psi\rangle$  na  $|\psi'\rangle = \hat{T}|\psi\rangle$ . Časový vývoj pôvodného systému  $S$  je daný Hamiltonovým operátorom  $\hat{H}$ , kým pre transformovaný systém  $S'$  je daný  $\hat{H}' = \hat{T}\hat{H}\hat{T}^\dagger$ . Potom môžeme zapísať

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\psi(0)\rangle \quad (4.17)$$



pre časový vývoj v  $S$ . Časový vývoj transformovaného systému  $S'$  je riadený Hamiltonovým operátorom  $\hat{H}'$ ,

$$|\psi(t)\rangle' = e^{-i\hat{H}'t/\hbar}|\psi(0)\rangle'. \quad (4.18)$$

Na druhej strane môžeme na stav  $|\psi'\rangle$  nazerať ako na kvantový stav pôvodného systému  $S$ . To znamená, že by mohol byť použitý časový vývoj systému  $S$ , ktorý je riadený Hamiltonovým operátorom  $\hat{H}$ , čím by sme dospeli k

$$|\psi(t)\rangle'' = e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\psi(0)\rangle'. \quad (4.19)$$

Ak je symetria systému zachovávaná pre všetky časy, potom sa dva stavy  $|\psi(t)\rangle'$  a  $|\psi(t)\rangle''$  nemôžu líšiť viac než o fázový faktor, t.j.

$$|\psi(t)\rangle'' = e^{i\phi}|\psi(t)\rangle'. \quad (4.20)$$

pretože musí platiť:

$$|\langle\psi'|\psi'\rangle| = |\langle\psi(t)'\psi(t)''\rangle| \quad (4.21)$$

Keďže rovnica (4.21) musí platiť pre všetky stavové vektory, Hamiltonove operátory  $\hat{H}$  a  $\hat{H}'$  sa môžu líšiť iba o konštantu, ktorá je fyzikálne nepozorovateľná (tým vzniká ten istý globálny fázový faktor  $e^{i\Phi}$  vo všetkých kvantových stavoch), a preto tieto dva Hamiltonove operátory sú v podstate identické. Preto môžeme formulovať lemu

**Lema 4.1** Symetria systému  $S$ , zachovávaná sa pre všetky časy, musí byť unitárnou alebo anti-unitárnou transformáciou  $\hat{T}$ , ktorá ponecháva Hamiltonov operátor invariantným, t.j.

$$\hat{H} = \hat{H}' = \hat{T}\hat{H}\hat{T}^\dagger. \quad (4.22)$$

Pre danú grupu symetrií parametrizovaná parametrom  $\epsilon$  môžeme určiť zachovávajúcu sa pozorovateľnú  $\hat{G}$  definovanú ako

$$\hat{G} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} i \frac{\hat{U}(\epsilon) - \hat{1}}{\epsilon}. \quad (4.23)$$

Operátor  $\hat{G}$  sa tiež nazýva aj **generátorom grupy symetrie**. Prečo sa  $\hat{G}$  zachováva? Z rovnice 4.23) vidíme, že pre malé  $\epsilon$  môžeme formálne rozložiť evolučný operátor do tvaru

$$\hat{U}(\epsilon) = \hat{1} - i\epsilon\hat{G} + O(\epsilon^2), \quad (4.24)$$

Veličina  $\hat{G}$  je Hermitovským operátorom a  $O(\epsilon^2)$  znamená, že všetky ďalšie členy obsahujú prinajmenšom faktor  $\epsilon^2$  a sú preto veľmi malé. Teraz vieme, že Hamiltonov operátor je invariantný voči transformáciám symetrie, t.j.

$$\hat{H} = \hat{H}' = \hat{U}(\epsilon)\hat{H}\hat{U}^\dagger(\epsilon). \quad (4.25)$$

Pre malé hodnoty  $\epsilon$  nachádzame

$$\begin{aligned} \hat{H} &= (\hat{1} - i\hat{G}\epsilon)\hat{H}(\hat{1} + i\hat{G}\epsilon) \\ &= \hat{H} - i[\hat{G}, \hat{H}]\epsilon + O(\epsilon^2). \end{aligned} \quad (4.26)$$

Keďže táto rovnosť musí platiť pre ľubovoľne malé  $\epsilon$ , potom z predchádzajúceho vzťahu vyplýva

$$[\hat{G}, \hat{H}] = 0. \quad (4.27)$$

Teraz si pripomenieme Heisenbergovu rovnicu (4.13), z ktorej vyplýva, že rýchlosť zmeny pozorovateľnej veličiny  $\hat{G}$  je v Heisenbergovom obraze úmerná komutátoru (4.27)

$$\frac{d\hat{G}_H}{dt} = i\hbar[\hat{G}, \hat{H}]_H = 0. \quad (4.28)$$

Preto stredná hodnota pozorovateľnej veličiny  $\hat{G}$  je konštantná, čo zodpovedá tvrdeniu, že  $\hat{G}$  je zachovávaná sa veličina, t.j.

$$\frac{\langle\psi(t)|\hat{G}|\psi(t)\rangle}{dt} = \frac{\langle\psi(0)|\hat{G}_H(t)|\psi(0)\rangle}{dt} = 0. \quad (4.29)$$

Takto prichádzame k dôležitej teóreme.

#### Teoréma 4.2

Generátor spätnej grupy symetrie kvantového systému je veličina zachovávaná sa počas časového vývoja daného kvantového systému.

### 4.3.2 Translačná symetria a zachovanie hybnosti

Teraz budeme skúmať posunutia (translácie) kvantovomechanických systémov. Opäť zvolíme aktívny pohľad na transformácie. Najprv potrebujeme definovať, čo myslíme pod posunutím systému o vzdialenosť  $a$  doprava. Takáto transformácia  $\hat{T}_a$  musí zobrazovať stavy  $|\psi\rangle$  systému na také stavy  $|\psi_a\rangle = \hat{T}_a|\psi\rangle$ , že

$$\langle x|\psi_a\rangle = \langle x - a|\psi\rangle. \quad (4.30)$$

Aby sme zistili ktorý operátor  $\hat{T}_a$  generuje posunutia stavu  $|\psi\rangle$  vrátime sa k definícii (4.30). Ak použijeme reprezentáciu operátora identity  $\hat{1} = \int dp|p\rangle\langle p|$  potom môžeme zapísať

$$\begin{aligned} \langle x|\hat{T}_a|\psi\rangle &= \langle x - a|\psi\rangle \\ &= \int dp \langle x - a|p\rangle\langle p|\psi\rangle \\ &= \int dp \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip(x-a)/\hbar} \langle p|\psi\rangle \\ &= \int dp \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipa/\hbar} e^{ipx/\hbar} \langle p|\psi\rangle \\ &= \int dp e^{-ipa/\hbar} \langle x|p\rangle\langle p|\psi\rangle \\ &= \langle x| \left( \int dp e^{-ipa/\hbar} |p\rangle\langle p| \right) |\psi\rangle \\ &= \langle x| e^{-i\hat{p}a/\hbar} |\psi\rangle. \end{aligned} \quad (4.31)$$

Pretože posledný vzťah platí pre ľubovľný stav  $|\psi\rangle$ , potom operátor posunutia musí mať tvar

$$\hat{T}_a = e^{-i\hat{p}a/\hbar}. \quad (4.32)$$

Znamená to teda, že operátor hybnosti je *generátorom posunutí*. Z rovnice (4.23) potom vyplýva, že v translačne invariantnom systéme sa zachováva hybnosť, t.j.

$$\frac{d\langle\psi(t)|\hat{p}|\psi(t)\rangle}{dt} = 0.$$

### Komentár

Uvažujeme Hamiltonov operátor častice v potenciále  $V(\hat{x})$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}). \quad (4.33)$$

Operátor hybnosti je samozrejme translačne invariantný. Ak by sme chceli, aby v systéme asociovanom s Hamiltoniánom (4.33) sa zachovávala hybnosť, potom musí platiť, že potenciál  $V(\hat{x})$  je translačne invariantný, t.j. musí spĺňať podmienku  $V(x) = V(x+a)$  pre všetky  $a$ . To však znamená, že tento potenciál musí byť *konštantný*.

### 4.3.3 Rotačná symetria a zachovanie momentu hybnosti

Ďalšou veľmi dôležitou symetriou je *rotačná symetria*. Pri analýze tejto symetrie budeme uvažovať systém v trojrozmernom priestore. Vlnovú funkciu  $\psi_\alpha(r, \phi, \theta)$  systému v takomto priestore môžeme parametrizovať polárnymi súradnicami

$$x_1 = r \cos \phi \sin \theta \quad (4.34)$$

$$x_2 = r \sin \phi \sin \theta \quad (4.35)$$

$$x_3 = r \cos \theta \quad (4.36)$$

Uvažujeme najprv rotáciu  $\hat{R}_z(\alpha)$  o uhol  $\alpha$  okolo osi  $z$ . Táto rotácia je definovaná ako

$$\psi_\alpha(r, \phi, \theta) = \psi(r, \phi - \alpha, \theta). \quad (4.37)$$

V predchádzajúcej časti sme zistili, že posunutia (translácie) sú generované operátorom hybnosti. Teraz ukážeme, že rotácie sú generované operátorom momentu hybnosti. Operátor momentu hybnosti častice je daný vzťahom

$$\hat{l} = \hat{x} \times \hat{p} = (\hat{x}_2\hat{p}_3 - \hat{x}_3\hat{p}_2)\vec{e}_1 + (\hat{x}_3\hat{p}_1 - \hat{x}_1\hat{p}_3)\vec{e}_2 + (\hat{x}_1\hat{p}_2 - \hat{x}_2\hat{p}_1)\vec{e}_3, \quad (4.38)$$

kde symbol  $\times$  označuje vektorový súčin dvoch vektorov  $\hat{p} = \hat{p}_1\vec{e}_1 + \hat{p}_2\vec{e}_2 + \hat{p}_3\vec{e}_3$  a  $\hat{x} = \hat{x}_1\vec{e}_1 + \hat{x}_2\vec{e}_2 + \hat{x}_3\vec{e}_3$ , pričom  $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$ .

Pretože uvažujeme rotácie okolo osi  $z$ , t.j.  $\vec{e}_3$ , sústredíme sa na komponentu  $\hat{l}_3$  operátora momentu hybnosti. V  $x$ -reprezentácii nachádzame pre tento operátor nájdeme

$$\hat{l}_3 = \frac{\hbar}{i} \left( x_1 \frac{\partial}{\partial x_2} - x_2 \frac{\partial}{\partial x_1} \right). \quad (4.39)$$

Tento výraz môžeme previesť do polárnych súradníc. Využijeme na to cyklické pravidlo

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \phi} &= \frac{\partial x_1}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial x_1} + \frac{\partial x_2}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial x_2} \\ &= \frac{\partial(r \cos \phi \sin \theta)}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial x_1} + \frac{\partial(r \sin \phi \sin \theta)}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial x_2} \\ &= -r \sin \phi \sin \theta \frac{\partial}{\partial x_1} + r \cos \phi \sin \theta \frac{\partial}{\partial x_2} \\ &= -x_2 \frac{\partial}{\partial x_1} + x_1 \frac{\partial}{\partial x_2} \\ &= \frac{i}{\hbar} \hat{l}_3. \end{aligned} \quad (4.40)$$

Teraz pre generátor rotácií odvodíme diferenciálnu rovnicu

$$\begin{aligned} \langle \vec{x} | \frac{\partial \hat{R}_z(\alpha)}{\partial \alpha} | \psi \rangle &= \frac{\partial}{\partial \alpha} \langle \vec{x} | \hat{R}_z(\alpha) | \psi \rangle \\ &= \frac{\partial}{\partial \alpha} \langle r, \phi - \alpha, \theta | \psi \rangle \\ &= -\frac{\partial}{\partial \phi} \langle r, \phi - \alpha, \theta | \psi \rangle \\ &= -\frac{\partial}{\partial \phi} \langle \vec{x} | \hat{R}_z(\alpha) | \psi \rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar} \langle \vec{x} | \hat{l}_3 \hat{R}_z(\alpha) | \psi \rangle. \end{aligned} \quad (4.41)$$

Keďže táto rovnica platí pre všetky vlnové funkcie  $|\psi\rangle$ , dostávame pre operátor rotácie rovnicu

$$\frac{\partial \hat{R}_z(\alpha)}{\partial \alpha} = -\frac{i}{\hbar} \hat{l}_3 \hat{R}_z(\alpha). \quad (4.42)$$

S počiatočnej podmienke  $\hat{R}_z(0) = \hat{1}$  je riešením tejto diferenciálnej rovnice operátor

$$\hat{R}_z(\alpha) = e^{-i\hat{l}_3\alpha/\hbar} = e^{-i\hat{l}_3\alpha/\hbar} \quad (4.43)$$

Analogicky môžeme pre operátor rotácie okolo ľubovoľnej osi  $\vec{n}$  nájsť vzťah

$$\hat{R}_z(\alpha) = e^{-i\hat{l}_3\alpha/\hbar} \quad (4.44)$$

Každý systém, ktorý je invariantný voči ľubovoľným rotáciám okolo osi  $\vec{n}$ , zachováva zložku momentu hybnosti v danom smere, t.j. zachováva  $\hat{l}_{\vec{n}}$ . Keďže kinetická energia častice je invariantná voči ľubovoľnej rotácii (skontroluj!), moment hybnosti sa zachováva, ak častica je v potenciáli, ktorý je symetrický voči rotáciám okolo osi  $\vec{n}$ . Elektrón atómu vodíka má Hamiltonov operátor

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(|\vec{x}|). \quad (4.45)$$

Rotácie ponechávajú dĺžky vektorov nezmenené. Preto  $|\vec{x}|$ , a spolu s ním aj  $V(|\vec{x}|)$ , sú invariantné voči rotáciám okolo ľubovoľnej osi. To znamená, že sa zachováva každá zložka operátora momentu hybnosti, t.j. celkový moment hybnosti sa nemení.

## 4.4 Všeobecné vlastnosti momentu hybnosti

V predchádzajúcej časti sme skúmali niektoré transformácie symetrie, generátory týchto symetrií a niektoré ich vlastnosti. Symetrie hrajú vo fyzike kľúčovú úlohu. Medzi najdôležitejšie patrí koncept rotačnej symetrie a jeho generátor, moment hybnosti. Doteraz sme uvažovali špecifický príklad orbitálneho momentu hybnosti, ktorý sa dá odvodiť z klasického momentu hybnosti s využitím princípu korešpondencie. Napriek tomu nachádzame v kvantovej mechanike situácie s momentom hybnosti, ktorý nemá žiadny klasický analóg. Najdôležitejším takým príkladom je spin elektrónu. V nasledujúcej časti rozvineme všeobecnú teóriu kvantovomechanického momentu hybnosti, a to cez zavedenie pojmu reprezentácií grupy.

### 4.4.1 Rotácie

Ako aj v predchádzajúcich diskusiách symetrií budeme používať pohľad aktívnych rotácií, t.j. systém je otočený, kým súradnicový systém zostáva nezmenený. Rotácia okolo osi  $\vec{n}$  o kladný uhol  $\Phi$  je takou, ktorá spĺňa pravidlo pravej ruky.

V trojrozmernom priestore sú rotácie dané maticami  $3 \times 3$ . Rotácia okolo osi  $x$  o uhol  $\phi$  je daná

$$\mathcal{R}_x(\phi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \phi & -\sin \phi \\ 0 & \sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix}. \quad (4.46)$$

Rotácie okolo osi  $y$  sú analogicky reprezentované maticou

$$\mathcal{R}_y(\phi) = \begin{pmatrix} \cos \phi & 0 & \sin \phi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \phi & 0 & \cos \phi \end{pmatrix} \quad (4.47)$$

a nakoniec pre rotácie okolo osi  $z$  platí

$$\mathcal{R}_z(\phi) = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (4.48)$$

Použitím rozvoja funkcií  $\sin$  a  $\cos$  do radu pre malé uhly, t.j.

$$\sin \epsilon = \epsilon + O(\epsilon^2) \quad \cos \epsilon = 1 - \frac{\epsilon^2}{2}, \quad (4.49)$$

môžeme rozvinúť rotačné matice (3.47-3.49) až do druhého rádu v  $\epsilon$ . Nachádzame tak

$$\mathcal{R}_x(\epsilon) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 - \frac{\epsilon^2}{2} & -\epsilon \\ 0 & \epsilon & 1 - \frac{\epsilon^2}{2} \end{pmatrix}, \quad (4.50)$$

$$\mathcal{R}_y(\epsilon) = \begin{pmatrix} 1 - \frac{\epsilon^2}{2} & 0 & \epsilon \\ 0 & 1 & 0 \\ -\epsilon & 0 & 1 - \frac{\epsilon^2}{2} \end{pmatrix}, \quad (4.51)$$

$$\mathcal{R}_z(\epsilon) = \begin{pmatrix} 1 - \frac{\epsilon^2}{2} & -\epsilon & 0 \\ \epsilon & 1 - \frac{\epsilon^2}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (4.52)$$

Zo skúsenosti už vieme, že rotácie okolo tej istej osi komutujú, kým rotácie okolo rôznych osí vo všeobecnosti nekomutujú. Táto jednoduchá skutočnosť nám umožní odvodiť kánonické komutačné vzťahy medzi operátormi momentu hybnosti.

Aby sme videli efekt nekomutatívnosti rotácií okolo rôznych osí, spočítame špeciálnu kombináciu otočení. Najprv otočíme systém o infinitezimálny uhol  $\epsilon$  okolo osi  $y$  a potom o ten istý uhol okolo osi  $x$ :

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_x(\epsilon)\mathcal{R}_y(\epsilon) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 - \frac{\epsilon^2}{2} & -\epsilon \\ 0 & \epsilon & 1 - \frac{\epsilon^2}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 - \frac{\epsilon^2}{2} & 0 & \epsilon \\ 0 & 1 & 0 \\ -\epsilon & 0 & 1 - \frac{\epsilon^2}{2} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 - \frac{\epsilon^2}{2} & 0 & \epsilon \\ \epsilon^2 & 1 - \frac{\epsilon^2}{2} & -\epsilon \\ -\epsilon & \epsilon & 1 - \epsilon^2 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.53)$$

Teraz spočítajme

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_x(-\epsilon)\mathcal{R}_y(-\epsilon)\mathcal{R}_x(\epsilon)\mathcal{R}_y(\epsilon) &= \begin{pmatrix} 1 - \frac{\epsilon^2}{2} & 0 & -\epsilon \\ \epsilon^2 & 1 - \frac{\epsilon^2}{2} & \epsilon \\ \epsilon & -\epsilon & 1 - \epsilon^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 - \frac{\epsilon^2}{2} & 0 & \epsilon \\ \epsilon^2 & 1 - \frac{\epsilon^2}{2} & -\epsilon \\ -\epsilon & \epsilon & 1 - \epsilon^2 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & -\epsilon^2 & 0 \\ \epsilon^2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathcal{R}_z(\epsilon^2). \end{aligned} \quad (4.54)$$

Toto je vzťah, ktorý využijeme pri odvodení komutačných vzťahov medzi operátormi momentu hybnosti.

### 4.4.2 Grupové reprezentácie a komutačné vzťahy momentu hybnosti

Už vieme, že v kvantovej mechanike existujú rôzne momenty hybnosti, ktorých dvoma príkladmi sú orbitálny moment hybnosti a spin. Isteže nemusia byť nevyhnutne reprezentované maticami  $3 \times 3$ , ako rotácie v predchádzajúcej časti. Avšak všetky tieto momenty hybnosti majú isté spoločné vlastnosti, ktoré potvrdzujú ich klasifikáciu ako momentov hybnosti. Týmto sa dostávame k diskusii grúp a ich reprezentácií.

V prvej časti o vektorových priestoroch sme už spoznali, čo je grupa. Zopakujeme vlastnosti grupy  $G$  a jej elementov  $x, y, z$ .

1.  $\forall x, y \in G : x \cdot y = z \in G$
2.  $\exists 1 \in G : \forall x \in G : x \cdot 1 = x$
3.  $\forall x \in G : \exists x^{-1} \in G : x^{-1} \cdot x = 1$  and  $x \cdot x^{-1} = 1$
4.  $\forall x, y, z \in G : x \cdot (y \cdot z) = (x \cdot y) \cdot z$

Všimnite si, že sme nežiadali, aby prvky grupy komutovali vzhľadom ku grupovej operácii. Príčinou je, že zamýšľame skúmať rotácie, ktoré sú isto nekomutatívne. Fundamentálnou grupou, ktorou sa zaoberáme je grupa rotácií v trojrozmernom priestore, t.j. grupa matíc  $3 \times 3$ . Táto grupa predstavuje všetky naše intuitívne poznatky o rotáciách. Každá ďalšia

grupa operátorov pôsobiacich na vlnové funkcie, ktorí by sme chceli nazývať grupou rotácií, musí spĺňať základné vlastnosti grupy trojrozmerných rotácií. Táto myšlienka je zahrnutá v pojme reprezentácie grupy.

**Definícia 4.4** Reprezentáciou grupy  $G$  elementov  $x$  je grupa  $S$  unitárnych operátorov  $\hat{D}(x)$ , takých že existuje zobrazenie  $\mathcal{T} : G \rightarrow S$ , ktoré priradzuje každému  $x \in G$  operátor  $\hat{D}(x) \in S$ , pričom operácia grupy sa zachováva, t.j. pre všetky  $x, y, \in G$  s  $x \cdot y = z$  platí

$$\hat{D}(x) \cdot \hat{D}(y) = \hat{D}(z). \quad (4.55)$$

To znamená, že obe grupy  $G$  a  $S$  sú v podstate rovnaké, pretože ich prvky zdieľajú navzájom tie isté vlastnosti. Ak teraz máme reprezentáciu grupy rotácií, je prirodzené potom hovoriť, že operátory, ktoré tvoria túto reprezentáciu sú operátormi rotácií.

V kvantovej mechanike musia byť rotácie (pootočenia) reprezentované unitárnymi operátormi pôsobiacimi na stavové vektory. Pre rotácie okolo osi  $\vec{n}$  tieto unitárne operátory musia tvoriť množinu operátorov  $\hat{U}(\phi)$ , parametrizovanú uhlom  $\phi$ . Už vieme, že unitárne operátory sa dajú reprezentovať v tvare

$$\hat{U}(\phi) = e^{-i\hat{J}_n\phi/\hbar} \quad (4.56)$$

kde  $\hat{J}_n$  je Hermitov operátor a  $\hbar$  je Planckova konštanta, ktorú v tejto etape diskusie zavádzame iba z dôvodov neskoršej interpretácie. Operátor  $\hat{J}_n$  je operátorom momentu hybnosti pozdĺž osi  $\vec{n}$  a môžeme prepísať ako  $\hat{J}_n = \vec{J} \cdot \vec{n}$ , kde ako vždy  $\vec{J} = \hat{J}_x\vec{e}_x + \hat{J}_y\vec{e}_y + \hat{J}_z\vec{e}_z$ . Ďalej nájdeme explicitný výraz pre komutátory jednotlivých komponent operátora momentu hybnosti. Na to využijeme fakt, že operátor hybnosti tvorí reprezentáciu grupy rotácií, t.j., že platí rovnica (4.55). Z rovnice (4.54) potom dostaneme pre infinitizimálne rotácie operátorový vzťah

$$e^{i\hat{J}_x\epsilon/\hbar}e^{i\hat{J}_y\epsilon/\hbar}e^{-i\hat{J}_x\epsilon/\hbar}e^{-i\hat{J}_y\epsilon/\hbar} = e^{-i\hat{J}_z\epsilon^2/\hbar}. \quad (4.57)$$

Ak rozložíme obe strany tejto rovnice do Taylorovho radu, potom pre členy do rádu  $\mathcal{O}(\epsilon^2)$  dostaneme

$$\mathbb{1} + [\hat{J}_y, \hat{J}_x]\epsilon^2/\hbar^2 = \mathbb{1} - i\hat{J}_z\epsilon^2/\hbar, \quad (4.58)$$

odkiaľ nájdeme komutačný vzťah

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar\hat{J}_z. \quad (4.59)$$

Rovnakým spôsobom môžeme získať komutačný vzťah medzi ľubovoľnými dvoma zložkami operátora momentu hybnosti. Platí

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{J}_k. \quad (4.60)$$

Tento komutačný vzťah *de facto* môže byť použitý i ako definícia operátora momentu hybnosti.

### 4.4.3 Vlastné hodnoty operátora momentu hybnosti

Zo základného komutačného vzťahu pre komponenty operátora momentu hybnosti (4.60) môžeme odvodiť vlastné vektory týchto operátorov. Z komutačného vzťahu (4.60) je zrejmé, že tri komponenty operátora momentu hybnosti, t.j. operátory  $\hat{J}_x$ ,  $\hat{J}_y$  a  $\hat{J}_z$ , nemajú spoločné vlastné vektory. Na druhej strane štvorec operátora momentu hybnosti  $\hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$  komutuje s každou so svojich komponent. Ďalej sa sústredíme na komponentu  $\hat{J}_z$ , pre ktorú nájdeme

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_z] = 0. \quad (4.61)$$

Keďže oba tieto operátory komutujú, znamená to, že majú spoločné vlastné vektory, ktoré označíme ako  $|j, m\rangle$ . Keďže operátor  $\hat{J}^2$  je pozitívny, môžeme jeho vlastné hodnoty reprezentovať ako

$$\hat{J}^2|j, m\rangle = \hbar^2j(j+1)|j, m\rangle. \quad (4.62)$$

Kde  $j$  sú kladné čísla medzi nulou a nekonečnom. Vlastné hodnoty operátora  $\hat{J}_z$  v stave  $|j, m\rangle$  zapíšeme ako

$$\hat{J}_z|j, m\rangle = \hbar m|j, m\rangle. \quad (4.63)$$

Teraz sa sústredíme na problém ako z jedného vlastného vektora  $|j, m\rangle$  môžeme generovať druhý vlastný vektor. Na tento účel zavedieme dva operátory  $\hat{J}_+$  a  $\hat{J}_-$ ,

$$\hat{J}_\pm = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y. \quad (4.64)$$

pre ktoré platí následovný komutačný vzťah

$$[\hat{J}_z, \hat{J}_\pm] = \pm\hbar\hat{J}_\pm. \quad (4.65)$$

S použitím tohto komutačného vzťahu ľahko nájdeme, že

$$\begin{aligned} \hat{J}_z(\hat{J}_+|j, m\rangle) &= (\hat{J}_+\hat{J}_z + \hbar\hat{J}_+)|j, m\rangle \\ &= (\hat{J}_+\hbar m + \hbar\hat{J}_+)|j, m\rangle \\ &= \hbar(m+1)\hat{J}_+|j, m\rangle. \end{aligned} \quad (4.66)$$

odkiaľ vyplýva

$$(\hat{J}_+|j, m\rangle) = \alpha_+(j, m)|j, m+1\rangle. \quad (4.67)$$

kde  $\alpha_+(j, m)$  je komplexné číslo. Znamená to teda, že pôsobením operátora  $\hat{J}_+$  na stav  $|j, m\rangle$  získaváme nový vlastný stav operátora  $\hat{J}$  s vlastnou hodnotou väčšou o jednotku (v jednotkách  $\hbar$ ). Preto teda môžeme hovoriť o operátore  $\hat{J}_+$  ako o stúpajúcom operátore.

Analogicky môžeme nájsť ako pôsobí operátor  $\hat{J}_-$  na stav  $|j, m\rangle$

$$(\hat{J}_-|j, m\rangle) = \alpha_-(j, m)|j, m-1\rangle. \quad (4.68)$$

Tu opäť je  $\alpha_-(j, m)$  komplexné číslo. Vidíme, že operátor  $\hat{J}_-$  pôsobí klesajúci operátor.

Pred chvíľou sme zaviedli takú parametrizáciu, že vlastné hodnoty operátora  $\hat{J}^2$  boli proporcionálne súčinu  $j(j+1)$ . Teraz bude našou úlohou určiť aké hodnoty môže nadobúdať parameter  $m$  pre danú hodnotu  $j$ . Aby sme to zistili budeme uvažovať pozitívny operátor

$$\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2. \quad (4.69)$$

Jeho stredná hodnota v stave  $|j, m\rangle$  má tvar

$$\langle j, m | \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 | j, m \rangle = \hbar^2(j(j+1) - m^2) \geq 0. \quad (4.70)$$

odkiaľ nájdeme, že parameter  $m$  musí byť ohraničený, t.j.

$$|m| \leq \sqrt{j(j+1)}. \quad (4.71)$$

Z predchádzajúcich poznámok vieme, že operátory  $\hat{J}_\pm$  umožňujú zvyšovať a znižovať vlastnú hodnotu  $m$  o jednotku. Z rovnice (4.71) však vyplýva, že existujú hraničné hodnoty  $m_{max}$  a  $m_{min}$  také, že

$$\hat{J}_+ |j, m_{max}\rangle = 0 |j, m_{max} + 1\rangle = 0, \quad (4.72)$$

a

$$\hat{J}_- |j, m_{min}\rangle = 0 |j, m_{min} - 1\rangle = 0. \quad (4.73)$$

Potom platí

$$\begin{aligned} \hat{J}_- \hat{J}_+ |j, m_{max}\rangle &= 0, \\ \hat{J}_+ \hat{J}_- |j, m_{min}\rangle &= 0. \end{aligned} \quad (4.74)$$

Aby sme mohli určiť explicitné hodnoty  $m_{max}$  a  $m_{min}$  prepíšeme operátory  $\hat{J}_- \hat{J}_+$  a  $\hat{J}_+ \hat{J}_-$  v termínoch operátorov  $\hat{J}^2$  a  $\hat{J}_z$ :

$$\hat{J}_+ \hat{J}_- = (\hat{J}_x + i\hat{J}_y)(\hat{J}_x - i\hat{J}_y) = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 - i[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 + \hbar\hat{J}_z, \quad (4.75)$$

a

$$\hat{J}_- \hat{J}_+ = (\hat{J}_x - i\hat{J}_y)(\hat{J}_x + i\hat{J}_y) = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + i[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar\hat{J}_z. \quad (4.76)$$

Odtiaľto potom nájdeme

$$\begin{aligned} 0 &= \hat{J}_- \hat{J}_+ |j, m_{max}\rangle = (\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar\hat{J}_z) |j, m_{max}\rangle \\ &= \hbar^2(j(j+1) - m_{max}(m_{max} + 1)) |j, m_{max}\rangle. \end{aligned} \quad (4.77)$$

čo implikuje, že

$$m_{max} = j. \quad (4.78)$$

Analogicky pre  $m_{min}$  nájdeme zo vzťahu

$$\begin{aligned} 0 &= \hat{J}_+ \hat{J}_- |j, m_{min}\rangle = (\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 + \hbar\hat{J}_z) |j, m_{min}\rangle \\ &= \hbar^2(j(j+1) + m_{min}(1 - m_{min})) |j, m_{min}\rangle. \end{aligned} \quad (4.79)$$

hodnotu

$$m_{min} = -j. \quad (4.80)$$

Z predchádzajúceho vyplýva, že  $m$  sa môže nadobúdať hodnoty:

$$-j, -j+1, \dots, j-1, j. \quad (4.81)$$

čo znamená, že  $2j$  musí byť celým číslom, a teda

$$j = \frac{n}{2}, \quad n \in \mathcal{N}. \quad (4.82)$$

Odtiaľto prichádzame k veľmi dôležitému poznaniu, že kvantovo-mechanické častice patria do jednej z dvoch možných tried. Buď ich operátor momentu hybnosti má vlastné hodnoty asociované s celými číslami  $j = 0, 1, 2, \dots$  a vtedy takéto častice nazývame *bozónami*. Na druhej strane, ak hodnoty  $j$  majú hodnoty  $j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$ , potom o týchto časticiach hovoríme ako o *fermiónoch*. Ku kvantovo-štatistickým vlastnostiam bozónov a fermiónov sa dostaneme neskôr.

Teraz sa ešte sústreďíme na určenie komplexných čísel  $\alpha_\pm(j, m)$  v rovniciach

$$\hat{J}_\pm |j, m\rangle = \alpha_\pm(j, m) |j, m \pm 1\rangle. \quad (4.83)$$

Absolútne hodnoty týchto komplexných čísel nájdeme keď vypočítame normy vektorov z pravej i ľavej častice rovnice (4.83), t.j.

$$\begin{aligned} |\alpha_+(j, m)|^2 &= \|\hat{J}_+ |j, m\rangle\|^2 = \langle j, m | (\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar\hat{J}_z) |j, m\rangle \\ &= \hbar(j(j+1) - m(m+1)). \end{aligned} \quad (4.84)$$

a

$$\begin{aligned} |\alpha_-(j, m)|^2 &= \|\hat{J}_- |j, m\rangle\|^2 = \langle j, m | (\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 + \hbar\hat{J}_z) |j, m\rangle \\ &= \hbar(j(j+1) - m(m-1)). \end{aligned} \quad (4.85)$$

Ak vyberieme fázu stavov  $|j, m\rangle$  tak, že parametre  $\alpha_\pm(j, m)$  budú vždy kladné, potom náš finálny výsledok popisujúci pôsobenie operátorov  $\hat{J}_\pm$  na vlastné stavy  $|j, m\rangle$  operátora  $\hat{J}_z$  zapíšeme v tvare

$$\begin{aligned} \hat{J}_+ |j, m\rangle &= \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m+1)} |j, m+1\rangle, \\ \hat{J}_- |j, m\rangle &= \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m-1)} |j, m-1\rangle. \end{aligned} \quad (4.86)$$

## 4.5 Spin-1/2 alebo $q$ -bit

V tejto časti sa budeme v krátkosti venovať kvantovému spinu-1/2 a ozrejníme jeho vzťah k základnej jednotke kvantovej informácie - kvantovému bitu.

Nedeliteľnou jednotkou klasickej informácie je *bit*, ktorý je reprezentovaný binárnou možnosťou  $\{0, 1\}$ . Korešpondujúcou jednotkou kvantovej informácie je kvantový bit, t.j. *q-bit*. *Q-bit* opisuje stav najelementárnejšie kvantového systému. Najmenším netriviálnym Hilbertovým

priestorom je dvojrozmerný Hilbertov priestor, v ktorom môžeme zdefinovať bázu  $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ . Každý vektor v tomto priestore potom môžeme reprezentovať ako

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle, \quad (4.87)$$

kde komplexné amplitúdy  $\alpha$  a  $\beta$  sú normované na jednotku, t.j.  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ .  $Q$ -bit je teda stavom (4.87) v dvojrozmernom Hilbertovom priestore.

Vo fyzike sa rovnica (4.87) štandardne interpretuje ako spinový stav častice so spinom  $1/2$  (napr. vnútorný stav elektrónu). V tomto prípade sa bázové stavy  $|0\rangle$  a  $|1\rangle$  asociujú so spinovými stavmi “hore”  $|\uparrow\rangle$  a  $|\downarrow\rangle$  pozdĺž osi  $z$ . Dve reálne čísla charakterizujúce stav  $q$ -bitu (t.j. komplexné čísla  $\alpha$  a  $\beta$  s normovacou podmienkou a zanedbanou globálnou fázou stavu) popisujú orientáciu spinu v trojrozmernom priestore -  $\alpha = \cos \theta/2$  a  $\beta = e^{i\phi} \sin \theta/2$ , kde  $\theta$  je polárny a  $\phi$  azimutálny uhol.

Vrátme sa teraz k rotáciám v trojrozmernom priestore. V predchádzajúcej diskusii som ukázal, že generátormi týchto rotácií sú operátory momentu hybnosti  $\hat{J}_x$ ,  $\hat{J}_y$  a  $\hat{J}_z$ , ktoré spĺňajú komutačný vzťah (4.60). Tu poznamenám, že “defining” reprezentácia grupy rotácií je trojrozmerná ale najjednoduchšia netriviálna ireducibilná reprezentácia je dvojrozmerná. Táto reprezentácia má tvar:

$$\hat{J}_k = \frac{1}{2}\hat{\sigma}_k; \quad k = x, y, z \quad (4.88)$$

kde  $\hat{\sigma}_k$  sú Pauliho matice

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.89)$$

Toto je dvoj-rozmerná ireducibilná reprezentácia grupy rotácií, ktorá je jednoznačne definovaná s presnosťou do unitárnej zmeny bázy. Keďže vlastné hodnoty operátorov  $\hat{J}_k$  sú  $\pm \frac{1}{2}\hbar$ , volá sa táto reprezentácia spin-1/2.

Pauliho matice majú tú vlastnosť, že antikomutujú a že ich štvorec je rovný jednotke, t.j.

$$\hat{\sigma}_k \hat{\sigma}_l + \hat{\sigma}_l \hat{\sigma}_k = 2\delta_{k,l} \hat{1}. \quad (4.90)$$

Vidíme teda, že

$$\left(\vec{n} \hat{\sigma}\right)^2 = \sum_{k,l} n_k n_l \hat{\sigma}_k \hat{\sigma}_l = \sum_k n_k^2 \hat{1} = \hat{1}, \quad (4.91)$$

kde  $\vec{n}$  je jednotkový vektor určujúci smer v troj-rozmernom priestore. Ak teraz rozložíme teraz operátor rotácie  $\hat{U}(\vec{n}, \theta)$  v smere osi  $\vec{n}$  o uhol  $\theta$  dostaneme [pozri rovnicu (4.56)]

$$\hat{U}(\vec{n}, \theta) = e^{-i\frac{\theta}{2}\vec{n} \cdot \hat{\sigma}} = \hat{1} \cos \frac{\theta}{2} - i\vec{n} \cdot \hat{\sigma} \sin \frac{\theta}{2}. \quad (4.92)$$

Keďže najvšeobecnejšia unitárna matica  $2 \times 2$  s determinantom rovným jednotke môže byť reprezentovaná v tvare (4.92), potom môžeme asociovať  $q$ -bit ako stav častice so spinom  $1/2$ . Navyiac, akúkoľvek unitárnu transformáciu na tomto stave môžeme reprezentovať ako rotáciu spinu  $1/2$ .

Zaujímavou vlastnosťou reprezentácie  $\hat{U}(\vec{n}, \theta)$  je že pri rotácii o uhol  $2\pi$  okolo ktorejkoľvek osi platí, že

$$\hat{U}(\vec{n}, \theta = 2\pi) = -1. \quad (4.93)$$

Inými slovami naša reprezentácia je definovaná “s presnosťou na znamienko”

$$\hat{U}(R_1) \cdot \hat{U}(R_2) = \pm \hat{U}(R_1 \cdot R_2). \quad (4.94)$$

Táto reprezentácia grupy rotácií sa nazýva *spinorovou* reprezentáciou.<sup>4</sup>

Ak pootočime systém súradníc, potom rotácia  $\hat{R}(\vec{n}m\theta)$  bude rotáciou o rovnaký uhol, ale okolo pootočenej osi. Tri komponenty operátora momentu hybnosti sa pri rotáciách transformujú ako

$$\hat{U}(R) \hat{J}_k \hat{U}(R)^\dagger = R_{kl} \hat{J}_l. \quad (4.96)$$

Znamená to teda, že ak  $|m\rangle$  je vlastným stavom operátora  $\hat{J}_z$

$$\hat{J}_z |m\rangle = m|m\rangle, \quad (4.97)$$

potom  $\hat{U}(R)|m\rangle$  je vlastným stavom operátora  $\hat{R}\hat{J}_z$  s tou istou vlastnou hodnotou

$$\begin{aligned} \hat{R}\hat{J}_z(\hat{U}(R)|m\rangle) &= \hat{U}(R)\hat{J}_z\hat{U}(R)^\dagger\hat{U}(R)|m\rangle \\ &= \hat{U}(R)\hat{J}_z|m\rangle \\ &= m(\hat{U}(R)|m\rangle). \end{aligned} \quad (4.98)$$

Pretom môžeme zostrojiť vlastné vektory operátora momentu hybnosti pozdĺž osi  $\vec{n} = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)$  tak, že pootočime vlastné vektory operátora  $\hat{J}_z$  okolo osi  $\vec{n}' = (-\sin \phi, \cos \phi, 0)$ . V prípade našej reprezentácie spinu  $1/2$  táto rotácia sa dá vyjadriť ako

$$\exp\left[-i\frac{\theta}{2}\vec{n}' \cdot \hat{\sigma}\right] = \exp\left[\frac{\theta}{2}\begin{pmatrix} 0 & -e^{-i\phi} \\ e^{i\phi} & 0 \end{pmatrix}\right] = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -e^{-i\phi} \sin \frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}. \quad (4.99)$$

Ak použijeme túto transformáciu no pootočenie stavu  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ , t.j. vlastného stavu operátora  $\hat{J}_z$  potom dostaneme stav

$$|\psi(\theta, \phi)\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\phi/2} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi/2} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}. \quad (4.100)$$

Lahko sa presvedčíme o tom, že (4.100) je vlastným stavom operátora

$$\vec{n} \cdot \hat{\sigma} = \begin{pmatrix} \cos \theta & e^{-i\phi} \sin \theta \\ e^{i\phi} \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix}. \quad (4.101)$$

Znamená to teda, že rovnica (4.87) s  $\alpha = e^{-i\phi/2} \cos \frac{\theta}{2}$  a  $\beta = e^{i\phi/2} \sin \frac{\theta}{2}$  môže byť interpretovaná ako spin orientovaný v smere určenom uhlami  $(\theta, \phi)$ .

Stredná hodnota operátora  $\hat{\sigma}_z$  v stave (4.100) je

$$\langle \psi(\theta, \phi) | \hat{\sigma}_z | \psi(\theta, \phi) \rangle = \cos^2 \frac{\theta}{2} - \sin^2 \frac{\theta}{2} = \cos \theta \quad (4.102)$$

<sup>4</sup>Je faktom, že rotácia o uhol  $2\pi$  nemá žiadne pozorovateľné dôsledky na jednom spine  $1/2$ . Na druhej strane, ak budeme predpokladat' dva spiny  $1/2$ , potom môžeme detekovať dôsledky takejto rotácie. Konkrétne, predpokladajme “stroj”, ktorý pôsobí na takýto dvojspinový systém podľa nasledujúcich pravidiel: ak je prvý spin v stave  $|\uparrow\rangle$ , potom s druhým spinom sa nič nedeje. Ak však je druhý spin v stave  $|\downarrow\rangle$ , potom sa druhý spin pootočí o uhol  $2\pi$ . Takáto kondicionálna operácia spôsobí, že ak je prvý spin v superpozícii stavov  $|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle$ , potom

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1 + |\downarrow\rangle_1) |\downarrow\rangle_2 \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1 - |\downarrow\rangle_1) |\downarrow\rangle_2. \quad (4.95)$$

Znamená to, že na druhom spine nemôžeme namerat' žiadnu zmenu. Stav prvého spinu sa však dramaticky zmenil - stav po transformácii je ortogonálny k počiatočnému stavu. Takáto zmena je samozrejme pozorovateľná.

## 4.6 Skladanie momentov hybnosti

Doteraz sme sa zaoberali momentom hybnosti jednej častice. Väčšinou však kvantové systémy pozostávajú z mnohých častíc (napr. atóm vodíka), pričom každá z týchto častíc má svoj moment hybnosti. Otázka potom znie aký je moment hybnosti celého kompozitného systému. Táto problém skladania momentov sa však nevzťahuje iba na mnohočasticové systémy. I jedna izolovaná častica môže mať viacero momentov hybnosti. Napríklad, elektrón v centrálnom potenciáli má **orbitálny moment hybnosti** a **vnútorný moment hybnosti**, ktorý sa nazýva **spin**. Samozrejme, potom vyvstáva otázka aký je celkový moment hybnosti elektrónu.

Uvažujme teda časticu v centrálnom potenciáli, Hamiltonián ktorej je daný vzťahom

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(|\hat{x}|), \quad (4.103)$$

kde  $\hat{p}$  je lineárna hybnosť častice,  $m$  je jej hmotnosť a  $V(|\hat{x}|)$  je operátor opisujúci centrálny potenciál. Z prechádzajúcej diskusie vieme, že v dynamike riadenej takýmto Hamiltoniánom je operátor orbitálneho momentu hybnosti integrálom pohybu. Je to tým, že Hamiltonián (4.103) je invariantný voči rotáciám okolo ľubovoľnej osi. Na popis dynamiky elektrónu sa však Hamiltonián (4.103) použiť nedá. Problém je v tom, že popri orbitálnom momente elektrón má ešte i vnútorný moment, na popis ktorého potrebujeme doplniť Hamiltonián  $\hat{H}_0$  o ďalšie členy. Tieto členy sa dajú odvodiť z relativistickej teórie elektrónu (t.j., Diracovej rovnice). Ja sa tu obmedzím iba na krátky heuristický argument (eufemizmus pre mávanie rukami). Korektné odvodenie nájdete v literatúre. Takže: elektrón, ktorý sa pohybuje v centrálnom potenciáli okolo stredu ( $\vec{x} = 0$ ) generuje prúd, v dôsledku čoho vzniká magnetické pole. Na druhej strane spin elektrónu podmieňuje vznik magnetického momentu, orientácia ktorého závisí od orientácie spinu: spin vo vzťahu k rovine otáčania môže byť orientovaný buď smerom hore alebo smerom dole. Znamená to teda, že elektrón má v magnetickom poli  $\vec{B}$  rôzne energie v závislosti od orientácie spinu. Táto energia je rovná  $-\mu_0 \vec{S} \cdot \vec{B}$ , kde  $-\mu_0 \vec{S}$  je magnetický moment elektrónu a  $\vec{S} = \hbar(\hat{\sigma}_1 \vec{e}_1 + \hat{\sigma}_2 \vec{e}_2 + \hat{\sigma}_3 \vec{e}_3)$  je operátor elektrónového spinu. Magnetické pole generované rotujúcim spinom je proporcionálne orbitálnemu momentu hybnosti<sup>5</sup> a preto musíme Hamiltonián (4.103) doplniť o člen

$$\hat{H}_1 = -\xi \vec{S} \otimes \vec{L} = \xi(\hat{S}_1 \otimes \hat{L}_1 + \hat{S}_2 \otimes \hat{L}_2 + \hat{S}_3 \otimes \hat{L}_3), \quad (4.104)$$

kde  $\xi$  je interakčná konštanta, ktorú tu nebudeme špecifikovať. Chcem vás upozorniť na fakt, že operátory  $\vec{S}$  a  $\vec{L}$  pôsobia na rôznych Hilbertových priestoroch. Konkrétne,  $\vec{S}$  pôsobí na 2-rozmernom Hilbertovom priestore elektrónového spinu a  $\vec{L}$  na Hilbertovom priestore popisujúcom orbitálny pohyb elektrónu.

Ľahko sa presvedčíme o tom, že komponenty spinu  $\hat{S}_i$  komutujú s Hamiltoniánom  $\hat{H}_0$ , t.j.  $[\hat{H}_0, \hat{S}_i] = 0$ , avšak nekomutujú s totálnym Hamiltoniánom  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$ . Takiež komponenty

<sup>5</sup>Čím vyšší je orbitálny moment hybnosti, tým väčší je prúd indukovaný rotujúcim elektrónom a tým väčšie je magnetické pole.

orbitálneho momentu hybnosti nekomutujú s Hamiltoniánom  $\hat{H}$ . Napríklad,

$$\begin{aligned} [\hat{L}_1, \hat{H}] &= [\hat{L}_1, \hat{H}_1] \\ &= [\hat{L}_1, -\xi \vec{S} \cdot \vec{L}] \\ &= -\xi [\hat{L}_1, \sum_{i=1}^3 \hat{S}_i \cdot \hat{L}_i] \\ &= -i\hbar \xi \hat{S}_2 \hat{L}_3 + i\hbar \xi \hat{S}_3 \hat{L}_2 \end{aligned} \quad (4.105)$$

a

$$\begin{aligned} [\hat{S}_1, \hat{H}] &= [\hat{S}_1, \hat{H}_1] \\ &= -\xi [\hat{S}_1, \sum_{i=1}^3 \hat{S}_i \cdot \hat{L}_i] \\ &= -\xi i\hbar \hat{S}_3 \hat{L}_2 + \xi i\hbar \hat{S}_2 \hat{L}_3, \end{aligned} \quad (4.106)$$

Na druhej strane, ľahko nájdeme, že

$$[\hat{L}_i + \hat{S}_i, \hat{H}] = 0. \quad (4.107)$$

Inými slovami, suma dvoch operátorov  $\hat{J} \equiv \vec{S} + \vec{L}$  komutuje s Hamiltoniánom  $\hat{H}$ , čo znamená, že celkový moment hybnosti sa zachováva. Z predchádzajúcej diskusie poznáme vlastné vektory operátorov  $\hat{S}$  a  $\hat{L}$ . Keďže tieto operátory nekomutujú s Hamiltoniánom  $\hat{H}$ , tieto vlastné stavy nie sú vlastnými stavmi tohoto Hamiltoniánu. Našou snahou teda je nájsť takú bázu, vektory ktorej sú súčasne vlastnými stavmi totálneho Hamiltoniánu  $\hat{H}$  a celkového momentu hybnosti  $\hat{J}$ .

### 4.6.1 Vlastné stavy sumy dvoch operátorov hybnosti

Najprv si spomenieme, že jednotlivé komponenty operátoru hybnosti  $\hat{J}$  navzájom nekomutujú. Budme teda hľadať spoločné vlastné vektory operátorov  $\hat{J}^2$ ,  $\hat{J}_z$  a  $\hat{H}$ .

Aby bola naša diskusia čo najvšeobecnejšia, budeme predpokladať dva ľubovoľné operátory momentu hybnosti  $\hat{j}^{(1)} \in \mathcal{H}_1$  a  $\hat{j}^{(2)} \in \mathcal{H}_2$ . Celkový operátor momentu hybnosti  $\hat{J}$  je daný sumou

$$\hat{J} := \hat{j}^{(1)} \otimes \hat{1} + \hat{1} \otimes \hat{j}^{(2)} \quad (4.108)$$

Pre jednoduchosť v ďalšej diskusii nebudeme explicitne vypisovať operátorové jednotky v definícii  $\hat{J}$  - priestor na ktorý pôsobia operátory  $\hat{j}^{(i)}$  je implicitne určený indexom  $m$ .

Tak isto ako v prípade jedného operátora hybnosti, štvorec operátora  $\hat{J}^2$  komutuje so všetkými svojimi komponentami, napríklad  $[\hat{J}^2, \hat{J}_z] = 0$ . Budeme teda ďalej hľadať spoločné vlastné stavy  $|J, M\rangle$  operátorov  $\hat{J}^2$  a  $\hat{J}_z$

$$\begin{aligned} \hat{J}^2 |J, M\rangle &= \hbar J(J+1) |J, M\rangle, \\ \hat{J}_z |J, M\rangle &= \hbar M |J, M\rangle. \end{aligned} \quad (4.109)$$

Keďže stavy  $|j^{(1)}, m^{(1)}\rangle$  tvoria bázu v priestore  $\mathcal{H}_1$  a stavy  $|j^{(2)}, m^{(2)}\rangle$  tvoria bázu v  $\mathcal{H}_2$ , potom “súčinové” stavy  $|j^{(1)}, m^{(1)}\rangle \otimes |j^{(2)}, m^{(2)}\rangle$  tvoria bázu v priestore  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  pričom báзовých stavov je  $(2j^{(1)} + 1)(2j^{(2)} + 1)$

Znamená to, že vlastné stavy  $|J, M\rangle$  môžeme reprezentovať v báze  $|j^{(1)}, m^{(1)}\rangle \otimes |j^{(2)}, m^{(2)}\rangle$ . Aby sme tento rozklad našli, budeme postupovať následovným spôsobom. Zdefinujeme najprv “stúpajúci” ( $\hat{J}_+$ ) a “klesajúci” ( $\hat{J}_-$ ) operátor

$$\begin{aligned}\hat{J}_- &= \hat{j}_-^{(1)} + \hat{j}_-^{(2)}; \\ \hat{J}_+ &= \hat{j}_+^{(1)} + \hat{j}_+^{(2)},\end{aligned}\quad (4.110)$$

kde  $\hat{j}_\pm^{(k)} = \hat{j}_x^{(k)} \pm i\hat{j}_y^{(k)}$ . Tieto operátory spĺňajú následovné komutačné vzťahy

$$\begin{aligned}[\hat{J}_z, \hat{J}_\pm] &= [\hat{j}_z^{(1)} + \hat{j}_z^{(2)}, \hat{j}_\pm^{(1)} + \hat{j}_\pm^{(2)}] \\ &= [\hat{j}_z^{(1)}, \hat{j}_\pm^{(1)}] + [\hat{j}_z^{(2)}, \hat{j}_\pm^{(2)}] \\ &= \pm \hbar \hat{j}_\pm^{(1)} \pm \hbar \hat{j}_\pm^{(2)} \\ &= \pm \hbar \hat{J}_\pm.\end{aligned}\quad (4.111)$$

S využitím týchto komutačných vzťahov nájdeme ako pôsobí “klesajúci” operátor  $\hat{J}_-$  na stav  $|J, M\rangle$ :

$$\hat{J}_- |J, M\rangle = \hbar \sqrt{J(J+1) - M(M-1)} |J, M-1\rangle. \quad (4.112)$$

ktorý implicitne definuje procedúru generovani všetkých stavov  $|J, M\rangle$ :

**Krok 1.** Najprv identifikujeme stav s maximálnou hodnotou  $M_{max}$ . Ak máme dva operátory hybnosti maximálny vlastný stav ich sumy nemôže byť väčší ako  $J_{max} = j^{(1)} + j^{(2)}$ . Otázkou je, ktorý vlastný stav by mohol mať celkový moment hybnosti rovný  $J_{max}$  a súčasne  $M = J_{max}$ ? Je pochopiteľné, že takýto stav môže byť iba kombináciou dvoch *paralelných* momentov hybnosti. Inými slovami, budeme predpokladať, že extrémny stav má tvar

$$|J = j^{(1)} + j^{(2)}, M = j^{(1)} + j^{(2)}\rangle = |j^{(1)}, j^{(1)}\rangle \otimes |j^{(2)}, j^{(2)}\rangle. \quad (4.113)$$

Aby sme si overili tento náš predpoklad presvedčíme sa, že

$$\begin{aligned}\hat{J}^2 |J, M\rangle &= \hbar^2 J(J+1) |J, M\rangle, \\ \hat{J}_z |J, M\rangle &= \hbar M |J, M\rangle,\end{aligned}\quad (4.114)$$

kde  $J = M = j^{(1)} + j^{(2)}$ .

**Krok 2.** Teraz budeme na stav  $|J, M\rangle$  opakovaně pôsobiť klesajúcim operátorom  $\hat{J}_-$  definovaným vzťahom (4.110). Túto procedúru budeme opakovať až dostaneme stav  $|J, M = -J\rangle$ .

**Krok 3.** Procedúrou, ktorú sme opísali v kroku 2. dostaneme iba  $2J_{max} + 1$  stavov. My však vieme, že celkový počet báзовých stavov je  $(2j^{(1)} + 1)(2j^{(2)} + 1)$ . V treťom kroku teda vygenerujeme zbytok stavov. S týmto cieľom si vyberieme stav  $|J - 1, M = J - 1\rangle$  a zopakujeme na ňom procedúru z druhého kroku, t.j. opakované pôsobenie klesajúceho operátora  $\hat{J}_-$ . Táto procedúra sa ukončí keď operátor  $\hat{J}_-$  bude pôsobiť na “najnižší” možný stav, t.j. na stav keď dva momenty hybnosti sú opačne orientované. V tomto prípade sa momenty odčítajú a teda  $J_{min} = |j^{(1)} - j^{(2)}|$ . Absolútnu hodnotu musíme uvažovať preto, lebo moment hybnosti má z definície nezáporné vlastné hodnoty.

**Krok 4.** Celú stratégiu budeme opakovať až nakoniec vytvoríme novú bázu pozostávajúcu z  $(2j^{(1)} + 1)(2j^{(2)} + 1)$  stavov.<sup>6</sup>

#### 4.6.2 Skladanie dvoch spinov 1/2

Operátory momentu hybnosti častice so spinom 1/2 sa môžu reprezentovať Pauliho spinovými operátormi  $\hat{\sigma}_i$ :

$$\hat{j}_x = \hbar \hat{\sigma}_x; \quad \hat{j}_y = \hbar \hat{\sigma}_y; \quad \hat{j}_z = \hbar \hat{\sigma}_z. \quad (4.115)$$

Lahko sa presvedčíme o tom, že táto definícia spĺňa komutačné vzťahy pre operátory momentu hybnosti. Operátor momentu hybnosti pre každý z dvoch spinov 1/2 má teda tvar  $\hat{j} = \hbar(\hat{\sigma}_x \vec{e}_x + \hat{\sigma}_y \vec{e}_y + \hat{\sigma}_z \vec{e}_z)$ . Operátor celkového momentu hybnosti má tvar

$$\hat{J} = \hat{j}^{(1)} + \hat{j}^{(2)}. \quad (4.116)$$

pričom stúpajúci ( $\hat{J}_+$ ) a klesajúci ( $\hat{J}_-$ ) operátor vyjadríme ako

$$\begin{aligned}\hat{J}_- &= \hat{j}_-^{(1)} + \hat{j}_-^{(2)}, \\ \hat{J}_+ &= \hat{j}_+^{(1)} + \hat{j}_+^{(2)}.\end{aligned}\quad (4.117)$$

Z predchádzajúcej diskusie je jasné, že maximálna vlastná hodnota celkového operátora hybnosti je  $J = 1$ . Stav s maximálnym momentom hybnosti ( $J = 1$  a  $M = 1$ ) má tvar

$$|J = 1, M = 1\rangle = |j^{(1)} = \frac{1}{2}, m^{(1)} = \frac{1}{2}\rangle \otimes |j^{(2)} = \frac{1}{2}, m^{(2)} = \frac{1}{2}\rangle, \quad (4.118)$$

a ak použijeme označenie

$$\begin{aligned}|\uparrow\rangle &= |j^{(1)} = \frac{1}{2}, m^{(1)} = \frac{1}{2}\rangle, \\ |\downarrow\rangle &= |j^{(1)} = \frac{1}{2}, m^{(1)} = -\frac{1}{2}\rangle,\end{aligned}\quad (4.119)$$

potom ho môžeme prepísať v tvare

$$|J = 1, M = 1\rangle = |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle. \quad (4.120)$$

Teraz sa pozrieme ako vyzerá explicitný tvar stavu  $|J = 1, M = 0\rangle$ , ktorý dostaneme pôsobením klesajúceho operátora na stav  $|J = 1, M = 1\rangle$

$$\begin{aligned}|J = 1, M = 0\rangle &= \frac{\hat{J}_- |J = 1, M = 1\rangle}{\hbar \sqrt{2}} \\ &= \frac{(\hat{j}_-^{(1)} + \hat{j}_-^{(2)}) |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle}{\hbar \sqrt{2}} \\ &= \frac{|\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle + |\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle}{\sqrt{2}}.\end{aligned}\quad (4.121)$$

<sup>6</sup>Aby sme sa presvedčili, že naozaj nám naša procedúra poskytne  $(2j^{(1)} + 1)(2j^{(2)} + 1)$  stavov, spočítame explicitne počet stavov, ktoré vygenerujeme:

$$\begin{aligned}\sum_{i=J_{min}}^{J_{max}} (2i + 1) &= \sum_{i=J_{min}}^0 (2i + 1) - \sum_{i=0}^{J_{min}-1} (2i + 1) = (J_{max} + 1)^2 - J_{min}^2 = (j^{(1)} + j^{(2)} + 1)^2 - (j^{(1)} - j^{(2)})^2 \\ &= (2j^{(1)} + 1)(2j^{(2)} + 1).\end{aligned}$$



Ak ešte raz nechame pôsobiť operátor  $\hat{J}_-$  nájdeme stav  $|J = 1, M = -1\rangle$

$$\begin{aligned} |J = 1, M = -1\rangle &= \frac{\hat{J}_- |J = 1, M = 0\rangle}{\hbar\sqrt{2}} \\ &= \frac{(\hat{j}_-^{(1)} + \hat{j}_-^{(2)}) |J = 1, M = 0\rangle}{\hbar\sqrt{2}} \\ &= |\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle. \end{aligned} \quad (4.122)$$

Zatiaľ sme našli tri vlastné stavy. Vieme však, že Hilbertov priestor dvoch spinov  $1/2$  je štvor-rozmerný, preto musíme nájsť ešte štvrtý stav. Týmto je stav s hodnotou celkového momentu hybnosti  $J = 0$ . Tento stav samozrejme má iba jednu možnú hodnotu  $M = 0$ . Tento *singletný* stav má tvar

$$|J = 0, M = 0\rangle = \frac{|\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} - \frac{|\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (4.123)$$

Lahko sa presvedčíme, že tento stav je kolmý na stavy  $|J = 1, M = m\rangle$  ( $m = 0, \pm 1$ ). Týmto sme teda ukončili konštrukciu vlastných stavov operátora momentu hybnosti dvoch spinov  $1/2$ .

## Kapitola 5

### Jednoduché kvantové systémy

V tejto kapitole sa budeme venovať tým najjednoduchším kvantovým systémom: jednorozmernému kvantovému haromickému oscilátoru, dvojhľadinovej kvantovej častici a nakoniec budeme študovať veľmi jednoduchý model interakcie medzi takýmito systémami. Táto analýza nám pomôže pochopiť základné črty kvantovej dynamiky.

#### 5.1 Kvantové systémy s jedným stupňom vol'nosti

Pred tým ako sa budeme podrobne venovať jednorozmernému kvantovému oscilátoru vrátime sa ešte k operátorom polohy  $\hat{q}$  a hybnosti  $\hat{p}$ , komutátor ktorých je

$$[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar \hat{1}. \quad (5.1)$$

Našou bezprostrednou úlohou teraz bude nájsť konkrétnu realizáciu týchto operátorov, t.j. budeme konštruovať reprezentáciu algebry Lie asociovanej s komutačným vzťahom (5.1).

V 2. kapitole sme ukázali, že operátory polohy a hybnosti majú *spojité* spektrum. My však nájdeme ich reprezentáciu cez operátory s diskretným spektrom.

##### 5.1.1 Kreačné a anihilačné operátory

Zadefinujeme dva operátory  $\hat{a}$  a  $\hat{a}^\dagger$

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left( \lambda \hat{q} + \frac{i}{\lambda} \hat{p} \right); \quad \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left( \lambda \hat{q} - \frac{i}{\lambda} \hat{p} \right), \quad (5.2)$$

pre ktoré platí komutačný vzťah

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{1}. \quad (5.3)$$

Tieto dva operátory nie sú pozorovateľnými veličinami. Dokonca to nie su ani Hermitove operátory. Sú však navzájom Hermitovo združené. L'ahko sa presvedčíme o tom, že operátor  $\hat{n} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$  je Hermitov pozitívne definitný operátor. Konkrétne, pre každý stav  $|\Psi\rangle$  platí

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \hat{a}^\dagger \hat{a} | \Psi \rangle &= \sum_j \langle \Psi | \hat{a}^\dagger | \xi_j \rangle \langle \xi_j | \hat{a} | \Psi \rangle \\ &= \sum_j |\langle \xi_j | \hat{a} | \Psi \rangle|^2 \geq 0 \end{aligned} \quad (5.4)$$

Nájdeme teraz vlastné vektory operátora  $\hat{n}$ . Budeme teda riešiť rovnicu

$$\hat{n}|n\rangle = n|n\rangle, \quad (5.5)$$

a budeme predpokladať, že táto má aspoň jedno netriviálne riešenie, ktorému korešponduje vektor  $|n\rangle$ . Potom platí

$$\hat{a}\hat{n}|n\rangle = \hat{a}n|n\rangle; \quad \hat{a}^\dagger\hat{n}|n\rangle = \hat{a}^\dagger n|n\rangle, \quad (5.6)$$

odkiaľ dostaneme

$$(\hat{n} + 1)\hat{a}|n\rangle = n\hat{a}|n\rangle; \quad (\hat{n} - 1)\hat{a}^\dagger|n\rangle = n\hat{a}^\dagger|n\rangle, \quad (5.7)$$

čo znamená, že

$$\hat{n}\{\hat{a}|n\rangle\} = (n - 1)\{\hat{a}|n\rangle\}; \quad \hat{n}\{\hat{a}^\dagger|n\rangle\} = (n + 1)\{\hat{a}^\dagger|n\rangle\}; \quad (5.8)$$

Inými slovami, pôsobením operátora  $\hat{a}$  na vlastný stav  $|n\rangle$  operátora  $\hat{n}$  opäť dostávame vlastný stav  $\hat{n}$ , teraz však s vlastnou hodnotou  $(n - 1)$ . Analogicky, pôsobením operátora  $\hat{a}^\dagger$  na stav  $|n\rangle$  dostávame nový vlastný stav operátora  $\hat{n}$  s vlastnou hodnotou  $(n + 1)$ , t.j.

$$\hat{a}|n\rangle \simeq |n - 1\rangle; \quad \hat{a}^\dagger|n\rangle \simeq |n + 1\rangle; \quad (5.9)$$

Zo vzťahu (5.9) je zrejmé, že ak budeme pôsobiť operátorom  $\hat{a}$  na stav  $|n\rangle$   $n$ -krát dospejeme do vlastného stavu operátora  $\hat{n}$  s vlastnou hodnotou rovnou nule, t.j.

$$\hat{a}|0\rangle = 0|0\rangle. \quad (5.10)$$

Keďže operátor  $\hat{n}$  má nezáporné spektrum, stav  $|0\rangle$  je jeho vlastným stavom s najmenšou vlastnou hodnotou. Ďalej budeme tento stav nazývať **vákuovým** stavom a budeme predpokladať, že je normovaný na jednotku, t.j.  $\langle 0|0\rangle = 1$ . Pre jednoduchosť budeme ďalej predpokladať, že vákuum  $|0\rangle$  je nedegenerovaným stavom. V tomto prípade môžeme pôsobením naň operátorom  $\hat{a}^\dagger$  postupne vygenerovať všetky vlastné stavy operátora  $\hat{n}$

$$|n\rangle = c_n (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle, \quad (5.11)$$

kde  $c_n$  sú normovacie konštanty, ktoré ľahko určíme zo vzťahu

$$\langle n|n\rangle = c_n^* c_n \langle 0 | \hat{a}^n (\hat{a}^\dagger)^n | 0 \rangle = c_n^* c_n n! = 1. \quad (5.12)$$

Hravo môžeme predpokladať, že  $c_n$  sú reálne čísla<sup>1</sup> a potom

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle, \quad (5.13)$$

L'ahko sa presvedčíme o tom, že vlastné stavy  $|n\rangle$  operátora  $\hat{n}$  sú nielen normované, ale i navzájom ortogonálne, t.j.

$$\langle n|m\rangle = \delta_{m,n}. \quad (5.14)$$

<sup>1</sup>Znamená to, že stav  $|n\rangle$  definujeme s presnosťou do globálnej fázy, čo je úplne OK.

Zo vzťahu (5.13) je zřejmé, že

$$\begin{aligned}\hat{a}^\dagger|n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^{n+1}|0\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle; \\ \hat{a}|n\rangle &= \frac{n}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^{n-1}|0\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle.\end{aligned}\quad (5.15)$$

Operátor  $\hat{n} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$  sa nazýva operátorom *počtu častíc*. Zo vzťahu (5.15) potom nachádzame prirodzené pomenovanie pre  $\hat{a}$  a  $\hat{a}^\dagger$  ako operátor anihilácie a kreácie častíc. Táto terminológia sa stáva úplne jasnou vo formalizme *druhého kvantovania*, v ktorom prechod od jedného stavu k druhému je asociovaný s kreáciou, resp. anihiláciou častíc.

Ortonormované vektory  $|n\rangle$  tvoria bázu v Hilbertovom priestore kvantového systému s jedným stupňom voľnosti. Rozklad na jednotku má v tejto báze tvar

$$\sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n| = \hat{1}. \quad (5.16)$$

Kreačné a anihilačné operátory v tejto báze majú nasledovné maticové elementy

$$\begin{aligned}\langle n|\hat{a}^\dagger|m\rangle &= \sqrt{m+1}\delta_{n,m+1}; \\ \langle n|\hat{a}|m\rangle &= \sqrt{m}\delta_{n,m-1};\end{aligned}\quad (5.17)$$

Znamená to, že tieto operátory môžeme tiež reprezentovať ako

$$\begin{aligned}\hat{a}^\dagger &= \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{n+1}|n+1\rangle\langle n|; \\ \hat{a} &= \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{n+1}|n\rangle\langle n+1|;\end{aligned}\quad (5.18)$$

Odtiaľto potom ľahko nájdeme vzťah

$$(\hat{a}^\dagger)^k(\hat{a})^l = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sqrt{(n+k)!(n+l)!} |n+k\rangle\langle n+l|. \quad (5.19)$$

Pre kvantový systém s jedným stupňom voľnosti môžeme akýkoľvek operátor  $\hat{A}$  reprezentovať ako sumu elementárnych monómov

$$\hat{A} = \sum_{k,l=0}^{\infty} c_{kl}(\hat{a}^\dagger)^k(\hat{a})^l, \quad (5.20)$$

alebo v tvare rozkladu cez diady

$$\hat{A} = \sum_{n,m} \langle n|\hat{A}|m\rangle |n\rangle\langle m| \quad (5.21)$$

Ako ilustráciu môžeme uviesť rozklad projektoru  $\hat{P}_0 = |0\rangle\langle 0|$  na vákuový stav, ktorý sa dá vyjadriť ako suma monómov

$$\hat{P}_0 = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} (\hat{a}^\dagger)^n (\hat{a})^n. \quad (5.22)$$

Dôkaz tohoto vzťahu vám nechám ako cvičenie.

Všimnime si, že pokiaľ by operátory  $\hat{a}^\dagger$  a  $\hat{a}$  komutovali, potom by sme výraz v pravej časti rovnice mohli explicitne presumovať a dostali by sme  $\exp(-\hat{a}^\dagger\hat{a})$ . Naše operátory však nekomutujú. Napriek tomu sa môžeme snažiť aspoň formálne vyjadriť sumu v pravej časti rovnice (5.22) v uzavretom tvare. Aby sme to mohli spraviť zavedieme termín **normálne usporiadanie**, ktorý korešponduje situácii kedy všetky kreačné operátory sú naľavo od anihilačných operátorov, tak ako je to v monómoch v pravej časti rovnice (5.22). Zavedieme tiež pojem **normálneho súčinu** operátorov  $\hat{a}^\dagger$  a  $\hat{a}$ , ktorý reprezentuje akýkoľvek súčin operátorov  $\hat{a}^\dagger$  a  $\hat{a}$  v normálnom tvare. Normálny súčin sa označuje dvojbodkou pred a za výrazom, ktorý má byť v normálnom tvare. Napríklad, operátorový súčin  $\hat{a}\hat{a}^\dagger$  vďaka komutačnému vzťahu (5.2) sa rovná

$$\hat{a}\hat{a}^\dagger = \hat{a}^\dagger\hat{a} + 1 \quad (5.23)$$

avšak korešpondujúci normálny súčin je

$$:\hat{a}\hat{a}^\dagger := \hat{a}^\dagger\hat{a}. \quad (5.24)$$

Znamená to teda, že pod znakom normálneho súčinu všetky operátory navzájom komutujú, t.j.

$$:\hat{a}\hat{a}^\dagger := \hat{a}^\dagger\hat{a} : \quad (5.25)$$

S využitím pojmu normálneho účinu môžeme reprezentovať projektor  $\hat{P}_0$  daný vzťahom (5.22) v uzavretej forme

$$\begin{aligned}\hat{P}_0 &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} (\hat{a}^\dagger)^n (\hat{a})^n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} : (\hat{a}^\dagger\hat{a})^n := : \exp(-\hat{a}^\dagger\hat{a}) :\end{aligned}\quad (5.26)$$

Analogicky môžeme akýkoľvek projektor  $\hat{P}_n = |n\rangle\langle n|$  zapísať ako

$$\hat{P}_n = : \frac{(\hat{a}^\dagger\hat{a})^n}{n!} \exp(-\hat{a}^\dagger\hat{a}) : \quad (5.27)$$

V danom prípade môže zaviesť i generujúcu funkciu pre všetky projektory  $\hat{P}_n$  a zapísať výraz (5.27) v elegantnej forme

$$\hat{P}_n = \frac{(-1)^n}{n!} \left( \frac{d}{d\lambda} \right)^n : \exp(-\lambda\hat{a}^\dagger\hat{a}) : \Big|_{\lambda=1}. \quad (5.28)$$

Spomenieme si teraz, že z teóremy Taylora<sup>2</sup> platí, že

$$\sum_{n=0}^{\infty} \hat{P}_n = : e^{-(\lambda-1)\hat{a}^\dagger\hat{a}} : \Big|_{\lambda=1} = 1, \quad (5.29)$$

čo ešte raz dokazuje úplnosť bázy vektorov  $|n\rangle$ .

<sup>2</sup>Teorému Taylora môžeme vyjadriť v tvare

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\xi^n}{n!} \left( \frac{d}{d\lambda} \right)^n f(\lambda) = e^{\xi \frac{d}{d\lambda}} f(\lambda) = f(\lambda + \xi).$$

### 5.1.2 Reprezentácia operátorov $\hat{q}$ a $\hat{p}$ v báze $|n\rangle$

Z definície kreačného a anihilačného operátora (5.2) nájdeme

$$\hat{q} = \frac{1}{\lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger); \quad \hat{p} = \frac{\lambda}{i} \sqrt{\frac{\hbar}{2}} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger), \quad (5.30)$$

odkiaľ pre maticové elementy operátorov polohy a momentu  $\hat{p}$  a  $\hat{q}$  v báze  $|n\rangle$  nájdeme

$$\begin{aligned} \langle n | \hat{q} | m \rangle &= \frac{1}{\lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2}} [\sqrt{n+1} \delta_{n+1,m} + \sqrt{n} \delta_{n,m+1}]; \\ \langle n | \hat{p} | m \rangle &= \frac{\lambda}{i} \sqrt{\frac{\hbar}{2}} [\sqrt{n+1} \delta_{n+1,m} - \sqrt{n} \delta_{n,m+1}]; \end{aligned} \quad (5.31)$$

Vidíme teda, že v operátory  $\hat{q}$  a  $\hat{p}$  sú v báze  $|n\rangle$  nediagonálne, t.j.

$$\begin{aligned} \langle n | \hat{q} | m \rangle &= \frac{1}{\lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ & & \vdots & & \ddots \end{pmatrix}; \\ \langle n | \hat{p} | m \rangle &= \frac{\lambda}{i} \sqrt{\frac{\hbar}{2}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ -\sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & -\sqrt{3} & 0 & \dots \\ & & \vdots & & \ddots \end{pmatrix}; \end{aligned} \quad (5.32)$$

Teraz sa pokúsime zapísať tieto operátory v diagonálnom tvare, t.j. budeme hľadať ich vlastné hodnoty a vlastné vektory:

$$\hat{q}|q\rangle = q|q\rangle; \quad \hat{p}|p\rangle = p|p\rangle. \quad (5.33)$$

V báze  $|n\rangle$  tieto rovnice majú tvar

$$\begin{aligned} \sum_{m=0}^{\infty} \langle n | \hat{q} | m \rangle \langle m | q \rangle &= q \langle n | q \rangle; \\ \sum_{m=0}^{\infty} \langle n | \hat{p} | m \rangle \langle m | p \rangle &= p \langle n | p \rangle, \end{aligned} \quad (5.34)$$

Ak označíme  $\langle n | q \rangle = c_n$  a  $\langle n | p \rangle = d_n$ , potom môžeme prepísať predchádzajúce rovnice v maticovom tvare

$$\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ & & \vdots & & \ddots \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \\ \vdots \end{pmatrix} = x \cdot \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (5.35)$$

kde sme použili označenie  $x = \lambda \sqrt{\frac{2}{\hbar}} q$ . Analogicky pre vlastné stavy operátora  $\hat{p}$  zapíšeme rovnicu v maticovom tvare

$$\frac{1}{i} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ -\sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & -\sqrt{3} & 0 & \dots \\ & & \vdots & & \ddots \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} d_0 \\ d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ d_4 \\ \vdots \end{pmatrix} = y \cdot \begin{pmatrix} d_0 \\ d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ d_4 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (5.36)$$

kde  $y = \frac{1}{\lambda} \sqrt{\frac{2}{\hbar}} p$ .

Z maticových rovníc (5.35) a (5.36) dostaneme dva systémy lineárnych algebraických rovníc pre amplitúdy  $c_n$

$$\begin{aligned} \sqrt{1}c_1 &= x \cdot c_0 \\ \sqrt{1}c_0 + \sqrt{2}c_2 &= x \cdot c_1 \\ \sqrt{2}c_1 + \sqrt{3}c_3 &= x \cdot c_2 \\ \sqrt{3}c_2 + \sqrt{4}c_4 &= x \cdot c_3 \\ &\vdots = \vdots \end{aligned} \quad (5.37)$$

a pre amplitúdy  $d_n$

$$\begin{aligned} -i\sqrt{1}d_1 &= y \cdot d_0 \\ i\sqrt{1}d_0 - i\sqrt{2}d_2 &= y \cdot d_1 \\ i\sqrt{2}d_1 - i\sqrt{3}d_3 &= y \cdot d_2 \\ i\sqrt{3}d_2 - i\sqrt{4}d_4 &= y \cdot d_3 \\ &\vdots = \vdots \end{aligned} \quad (5.38)$$

Z predchádzajúcich dvoch systémov rovníc dostaneme rekurentné vzťahy pre amplitúdy  $c_n$

$$\begin{aligned} c_1 &= \frac{x}{\sqrt{1}} c_0 \\ c_2 &= \frac{x}{\sqrt{2}} c_1 - \frac{\sqrt{1}}{\sqrt{2}} c_0 \\ &\vdots \\ c_n &= \frac{x}{\sqrt{n}} c_{n-1} - \frac{\sqrt{n-1}}{\sqrt{n}} c_{n-2} \end{aligned} \quad (5.39)$$

a pre amplitúdy  $d_n$

$$\begin{aligned} d_1 &= i \frac{y}{\sqrt{1}} d_0 \\ d_2 &= i \frac{y}{\sqrt{2}} d_1 + \frac{\sqrt{1}}{\sqrt{2}} d_0 \\ &\vdots \\ d_n &= i \frac{y}{\sqrt{n}} d_{n-1} + \frac{\sqrt{n-1}}{\sqrt{n}} d_{n-2} \end{aligned} \quad (5.40)$$

Ďalej sa budeme podrobne venovať riešeniu rekurentného vzťahu (5.39). Pre jednoduchosť zavedieme nové označenie  $c_n = e_n/\sqrt{n!}$ . Pre amplitúdy  $e_n$  dostaneme z rovnice (5.39) rekurentný vzťah

$$e_n = x e_{n-1} - (n-1)e_{n-2}. \quad (5.41)$$

Teraz si spomenieme, že Hermitove polynómy definované ako

$$H_n(\xi) = e^{\xi^2} \left( -\frac{d}{d\xi} \right)^n e^{-\xi^2} \quad (5.42)$$

spĺňajú rekurentný vzťah

$$H_n(\xi) = 2\xi H_{n-1}(\xi) - 2(n-1)H_{n-2}(\xi), \quad (5.43)$$

pričom

$$\begin{aligned} H_0(\xi) &= 1; \\ H_1(\xi) &= 2\xi; \\ H_2(\xi) &= 4\xi^2 - 2; \\ H_3(\xi) &= 8\xi^3 - 12\xi; \\ H_4(\xi) &= 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12. \end{aligned} \quad (5.44)$$

Teraz už ľahko nájdeme riešenia pre amplitúdy  $c_n$  a  $d_n$

$$\begin{aligned} c_n(q) &= \langle n|q \rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n \left( \frac{\lambda}{\sqrt{\hbar}} q \right) c_0(q); \\ d_n(p) &= \langle n|p \rangle = \frac{(i)^n}{\sqrt{2^n n!}} H_n \left( \frac{1}{\lambda\sqrt{\hbar}} p \right) d_0(p); \end{aligned} \quad (5.45)$$

Na to, aby sme úplne určili amplitúdy  $c_n$  a  $d_n$  musíme ešte nájsť  $c_0$  a  $d_0$ . Tieto nájdeme z podmienky ortogonálnosti vlastných stavov operátora polohy

$$\langle q'|q \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \langle q'|n \rangle \langle n|q \rangle = \delta(q' - q) \quad (5.46)$$

a analogicky pre operátor hybnosti. Dosadením riešenia (5.45) do rovnice (5.46) nájdeme

$$c_0^*(q') c_0(q) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2^n n!} H_n \left( \frac{\lambda}{\sqrt{\hbar}} q' \right) H_n \left( \frac{\lambda}{\sqrt{\hbar}} q \right) = \delta(q' - q). \quad (5.47)$$

Teraz si spomenieme <sup>3</sup> že pre Hermitove polynómy platí

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2^n n!} H_n(\xi) H_n(\eta) = \sqrt{\pi} e^{\xi^2} \delta(\xi - \eta). \quad (5.48)$$

<sup>3</sup>Alebo sa pozrieme do tabuliek. Napríklad A.P.Prudnikov, Yu.A.Brychkov, and O.I.Marychev: *Integrals and Sums: Special Functions, vol.2* (Nauka, Moscow, 1982), p.710, formula 5.12.2.1

a preto z rovnice (5.47) dostaneme pre absolútnu hodnotu amplitúdy  $c_0$  výraz

$$|c_0(q)| = \left( \frac{\lambda^2}{\pi \hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{\lambda^2 q^2}{2\hbar}}. \quad (5.49)$$

Znamená to teda, že pre amplitúdu  $\langle n|q \rangle$  nakoniec nájdeme explicitný výraz

$$c_n(q) = \langle n|q \rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left( \frac{\lambda^2}{\pi \hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{\lambda^2 q^2}{2\hbar} + i\varphi_q} H_n \left( \frac{\lambda}{\sqrt{\hbar}} q \right), \quad (5.50)$$

kde  $\varphi_q$  je fáza normovacej konštanty, t.j. globálna fáza stavu, ktorú nemúsime špecifikovať. Analogicky, pre amplitúdu  $d_n(p)$  nájdeme

$$d_n(p) = \langle n|p \rangle = \frac{(i)^n}{\sqrt{2^n n!}} \left( \frac{1}{\lambda^2 \pi \hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{p^2}{2\lambda^2 \hbar} + i\varphi_p} H_n \left( \frac{1}{\lambda\sqrt{\hbar}} p \right) \quad (5.51)$$

kde, tak isto ako v prechádzajúcom vyraze,  $\varphi_p$  je fáza normovacej konštanty, t.j. globálna fáza stavu, ktorú nemúsime špecifikovať.

Teraz, keď sme odviedli amplitúdy  $c_n(q)$  a  $d_n(p)$  vypočítame ako vyzerá skalárny súčin  $\langle p|q \rangle$ , inými slovami, hľadáme reprezentáciu vlastného stavu operátora hybnosti v báze vlastných stavov operátora polohy (resp. naopak):

$$\begin{aligned} \langle q|p \rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} \langle q|n \rangle \langle n|p \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n^*(q) d_n(p) \\ &= c_0^*(q) d_0(p) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i)^n}{2^n n!} H_n \left( \frac{\lambda}{\sqrt{\hbar}} q \right) H_n \left( \frac{1}{\lambda\sqrt{\hbar}} p \right). \end{aligned} \quad (5.52)$$

Pre Hermitove polynómy platí vzťah

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i)^n}{2^n n!} H_n(\xi) H_n(\eta) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{\frac{\xi^2 + \eta^2}{2} + i\xi\eta}, \quad (5.53)$$

s použitím ktorého pre pravú časť rovnice (5.52) dostaneme vzťah

$$\langle q|p \rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} e^{i\frac{qp}{\hbar}} \cdot e^{i(\varphi_p - \varphi_q)}. \quad (5.54)$$

Tento vzťah samozrejme už poznáme z kapitoly 2, kde sme ho však odviedli úplne iným spôsobom. Našli sme teda reprezentáciu vlastných vektorov hybnosti v reprezentácii vlastných vektorov operátora polohy. Vidíme, že v tejto reprezentácii sa stavy s presne definovanou hodnotou hybnosti vyjadrujú ako jednorozmerné rovinné vlny.

Z predchádzajúcich vzťahov ľahko nájdeme reprezentáciu operátorov  $\hat{q}$  a  $\hat{p}$  v báze vektorov  $|n\rangle$ . Konkrétne,

$$\begin{aligned} \hat{q} &= \hat{\mathbf{1}} \cdot \hat{q} \cdot \hat{\mathbf{1}} = \sum_{n,m=0}^{\infty} \langle n|\hat{q}|m \rangle |m\rangle \langle n|; \\ \hat{p} &= \hat{\mathbf{1}} \cdot \hat{p} \cdot \hat{\mathbf{1}} = \sum_{n,m=0}^{\infty} \langle n|\hat{p}|m \rangle |m\rangle \langle n|, \end{aligned} \quad (5.55)$$

kde maticové elementy sú určené vzťahmi (5.31).

Popri tejto reprezentácii nájdeme ešte reprezentáciu operátora  $\hat{p}$  v báze vlastných vektorov operátora  $\hat{q}$ . Inými slovami nájdeme maticové elementy  $\langle q|\hat{p}|q'\rangle$

$$\begin{aligned}\langle q|\hat{p}|q'\rangle &= \sum_{m,n=0}^{\infty} \langle q|n\rangle \langle n|\hat{p}|m\rangle \langle m|q'\rangle \\ &= c_0^*(q)c_0(q) \frac{\lambda\sqrt{\hbar}}{2} \sum_{n=0}^{\infty} i \left[ H_{n+1} \left( \frac{\lambda}{\sqrt{\hbar}}q \right) - 2nH_{n-1} \left( \frac{\lambda}{\sqrt{\hbar}}q \right) \right] \frac{H_n \left( \frac{\lambda}{\sqrt{\hbar}}q' \right)}{2^n n!}.\end{aligned}\quad (5.56)$$

Ak spočítame sumu v pravej časti rovnice (5.56) nájdeme

$$\begin{aligned}\langle q|\hat{p}|q'\rangle &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial q} [\delta(q-q') e^{i(\varphi_{q'} - \varphi_q)}] \\ &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial q} \delta(q-q') - \hbar \delta(q-q') \frac{\partial \varphi_q}{\partial q}.\end{aligned}\quad (5.57)$$

#### Poznámka <sup>4</sup>

Spomeňme si, že v kapitole 2. sme odvodili trochu odlišný výraz pre maticový element  $\langle q|\hat{p}|q'\rangle$ . Pointa je v tom, že v tejto kapitole sme explicitne uchovávali výraz pre globálnu fázovú  $\varphi_q$  a  $\varphi_{q'}$ . Tieto fázy v konečnom dôsledku nie sú dôležité, pretože stavové vektory sú vo všeobecnosti definované s presnosťou do globálnej fázy, t.j. s presnosťou do transformácií

$$|q\rangle \longrightarrow |q\rangle e^{i\varphi_q}; \quad |p\rangle \longrightarrow |p\rangle e^{i\varphi_p}.\quad (5.58)$$

Zo vzťahu (5.57) však vyplýva, že transformácie (5.58) menia výraz pre reprezentáciu operátora hybnosti v  $q$ -reprezentácii, t.j. pridávajú k nemu člen  $-\hbar \delta(q-q') \frac{\partial \varphi_q}{\partial q}$ . Tento fakt môžeme interpretovať ako zmenu operátora hybnosti pri transformáciách (5.58), t.j.

$$\hat{p} \longrightarrow \hat{p} - \hbar \frac{\partial \varphi_q(\hat{q})}{\partial \hat{q}},\quad (5.59)$$

kde  $\varphi_q(\hat{q})$  je ľubovoľná (reálna) funkcia operátora polohy  $\hat{q}$ . Znamená to teda, že v  $q$ -reprezentácii, t.j. pri explicitnej definícii operátor  $\hat{q}$  sa operátor  $\hat{p}$  prostredníctvom komutačného vzťahu (5.1) nedefinuje jednoznačne, ale iba s presnosťou do transformácie (5.59). Toto je vcelku pochopiteľné, pretože operátor  $\hbar \frac{\partial \varphi_q(\hat{q})}{\partial \hat{q}}$  komutuje s operátorom polohy  $\hat{q}$ .

V ďalšom však budeme predpokladať konkrétny tvar operátora  $\hat{p}$  v  $q$ -reprezentácii ako i skalárny súčin  $\langle q|p\rangle$ :

$$\begin{aligned}\langle q|p\rangle &= \frac{1}{2\pi\hbar} e^{i\frac{pq}{\hbar}}; \\ \langle q|\hat{p}|q'\rangle &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial q} \delta(q-q').\end{aligned}\quad (5.60)$$

Tento tvar vieme vždy dosiahnuť vhodným výberom kalibračnej transformácie (pozri poznámku pod čiarou<sup>4</sup>).

<sup>4</sup> Táto poznámka ma priamy vzťah k existencii kalibračných transformácií prvého druhu v kvantovej mechanike. Myslím si však, že nie je cieľom našich prednášok vnikať do detailov týchto transformácií. Chcem iba aby ste si zapamätali toto kľúčové slovo v kontexte špecifických transformácií, ktoré neprivádzajú k priamo pozorovateľným efektom.

## 5.2 Kvantový harmonický oscilátor

Predtým ako sa budeme venovať kvantovému harmonickému oscilátoru spomenieme si na základné vlastnosti klasického harmonického oscilátora - asi najjednoduchšieho netriviálneho fyzikálneho modelu vôbec, ktorý, napríklad, sa hodí na popis dynamiky fyzikálneho kyvadla v gravitačnom poli zeme, materiálneho bodu na pružine s nulovou hmotnosťou, ale na popis jedného módu elektromagnetickej vlny. Klasickému harmonickému oscilátoru sa budeme venovať predovšetkým preto, že potom s pomocou princípu korešpondencie budeme mať akú-takú intuitívnu predstavu o tom, ako má vyzeráť kvantový oscilátor.

### 5.2.1 Klasický harmonický oscilátor

Začneme teda z definície Hamiltoniánu klasického harmonického oscilátora. Hamiltonovu funkciu zapíšeme v termínoch kanonických premenných - polohy ( $q$ ) a hybnosti ( $p$ ):

$$H(q,p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{kq^2}{2},\quad (5.61)$$

kde  $m$  je hmotnosť oscilátora a  $k$  je, povedzme, konštanta charakterizujúca harmonický potenciál, v ktorom sa nachádza častica.

Dynamika nášho harmonického oscilátora je určená **Hamiltonovými** rovnicami pre kanonické premenné  $q$  a  $p$

$$\frac{d}{dt}q = \frac{\partial H}{\partial p}; \quad \frac{d}{dt}p = -\frac{\partial H}{\partial q}.\quad (5.62)$$

Na to aby sme mohli určiť dynamiku oscilátora, potrebujeme ešte poznať počítocné ( $t=0$ ) hodnoty polohy ( $q(t=0)=q_0$ ) a hybnosti ( $p(t=0)=p_0$ ) oscilátora.

Z rovníc (5.62) pre Hamiltonián (5.61) dostaneme systém lineárnych diferenciálnych rovníc

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}q &= \frac{1}{m}p; \\ \frac{d}{dt}p &= -kq,\end{aligned}\quad (5.63)$$

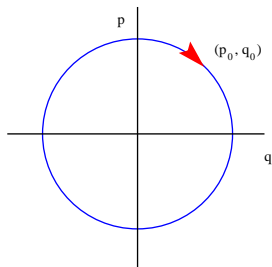
ktoré sú ekvivalentné diferenciálnej rovnici druhého rádu

$$\frac{d^2}{dt^2}q + \omega^2 q = 0,\quad (5.64)$$

kde  $\omega^2 = k/m$ , s počiatocnými podmienkami  $q(t=0)=q_0$  a  $\frac{d}{dt}q(t=0)=\frac{1}{m}p_0$ . V tomto prípade má riešenie rovnice (5.64) jednoduchý tvar, odkiaľ následne dostaneme riešenie Hamiltonových rovníc pre harmonický oscilátor

$$\begin{aligned}q(t) &= q_0 \cos \omega t + \frac{p_0}{\sqrt{km}} \sin \omega t; \\ p(t) &= p_0 \cos \omega t - q_0 \sqrt{km} \sin \omega t.\end{aligned}\quad (5.65)$$

Teraz zavedieme pojem fázového priestoru jednorozmerného fyzikálneho systému. Takýto fázový priestor je dvojrozmerný - jedna jeho súradnica korešponduje polohe  $q$  a druhá hybnosti  $p$  fyzikálneho systému. Bod fázového priestoru je určený súradnicami ( $q,p$ ) a korešponduje



Obrázok 5.1: Trajektória harmonického oscilátora vo fázovom priestore. Počiatočný stav oscilátora je reprezentovaný bodom so súradnicami  $(q_0, p_0)$  a časový vývoj oscilátora je reprezentovaný pohybom bodu v smere hodinových ručičiek po kružnici so stredom v počiatku fázového priestoru a prechádzajúcej bodom  $(q_0, p_0)$ .

stavu jednorozmerného systému s danou polohou a hybnosťou. Ak vidíme z rovníc (5.65) dynamika harmonického oscilátora s danými počiatočnými podmienkami korešponduje vo fázovom priestore pohybu po kružnici so stredom v počiatku fázového priestoru - vid' obrázok 5.1.

Vzhľadom na to, že Hamiltonián nezávisí explicitne od času, náš systém, je konzervatívny, t.j. energia sa zachováva. Pričom energia je rovná Hamiltoniánu. Ľahko sa o tomto presvedčíme ak dosadíme riešenia (5.65) do rovnice (5.61), t.j.

$$H = \frac{p^2(t)}{2m} + \frac{kq^2(t)}{2} = \frac{p_0^2}{2m} + \frac{kq_0^2}{2} = \text{const.} \quad (5.66)$$

Ak teraz zavedieme nové súradnice pomocou lineárnych transformácií

$$\begin{aligned} q &= \frac{1}{\sqrt{2\omega m}}(\alpha + \alpha^*); \\ p &= \frac{1}{i} \frac{\sqrt{k}}{\sqrt{2\omega}}(\alpha - \alpha^*) \end{aligned} \quad (5.67)$$

potom z Hamiltonových rovníc (5.63) dostaneme pre premenné  $\alpha(t)$  a  $\alpha^*(t)$  rovnice

$$\begin{aligned} \frac{d\alpha}{dt} &= -i\omega\alpha; \\ \frac{d\alpha^*}{dt} &= i\omega\alpha^*, \end{aligned} \quad (5.68)$$

ktoré spolu s počiatočnými podmienkami  $\alpha(t=0) = \alpha_0$  a  $\alpha^*(t=0) = \alpha_0^*$  majú riešenie

$$\alpha(t) = \alpha_0 e^{-i\omega t}; \quad \alpha^*(t) = \alpha_0^* e^{i\omega t}. \quad (5.69)$$

Teraz môžeme zapísať Hamiltonovu funkciu (5.61) v termínoch premenných (5.69). Výsledkom takejto substitúcie je výraz

$$H = \omega\alpha^*(t)\alpha(t) = \omega\alpha_0^*\alpha_0 = \text{const.} \quad (5.70)$$

### 5.2.2 Klasický fázový priestor

Doteraz sme reprezentovali stav klasického harmonického oscilátora ako bod vo fázovom priestore  $(q, p)$ , pričom časový vývoj súradníc bodu popisujúceho dynamiku harmonického oscilátora je daný riešeniami (5.65) Hamiltonových rovníc. Ak vo fázovom priestore zavedieme rozdelenie hustoty pravdepodobnosti  $P(q, p)$ , také, že výraz  $P(q, p) d\Omega(q, p)$  určuje pravdepodobnosť toho, že harmonický oscilátor sa nachádza v "bode"  $(q, p)$  o "ploche"  $d\Omega(q, p)$  (preto je  $P(q, p)$  hustotou pravdepodobnosti a nie pravdepodobnosťou). Invariantnú mieru vo fázovom priestore  $(q, p)$  definujeme ako

$$d\Omega(q, p) = \frac{dp dq}{2\pi A}, \quad (5.71)$$

kde  $A$  je konštata s fyzikálnym rozmerom účinku, ktorá zabezpečuje, že miera je bezrozmerná. Táto konštata definuje veľkosť elementárneho "binu" vo fázovom priestore a môže byť ľubovoľne malá. Hustota pravdepodobnosti  $P(q, p)$  je vo všetkých bodoch fázového priestoru *nezáporná* a platí pre ňu normovacia podmienka

$$\int d\Omega(q, p) P(q, p) = 1. \quad (5.72)$$

S pomocou hustoty pravdepodobnosti  $P(q, p)$  môžeme potom nachádzať stredné hodnoty fyzikálnych veličín asociovaných s našim fyzikálnym systémom. Napríklad, pre strednú hodnotu polohy  $\bar{q}$  máme vzťah

$$\bar{q} = \int d\Omega(q, p) q P(q, p), \quad (5.73)$$

alebo všeobecnejšie, pre strednú hodnotu funkcie  $F(q, p)$  polohy a hybnosti nájdeme

$$\overline{F(q, p)} = \int d\Omega(q, p) F(q, p) P(q, p), \quad (5.74)$$

V prípade harmonického oscilátora, dynamika ktorého je určená riešeniami (5.65) možme hustotu pravdepodobnosti  $P(q, p)$  zapísať ako

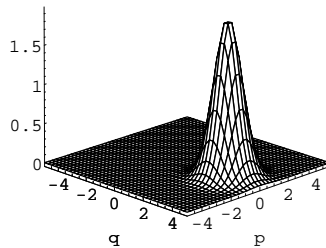
$$P(q, p; t) = 2\pi A \delta(q - q(t)) \delta(p - p(t)). \quad (5.75)$$

Vieme si však predstaviť i situáciu, že poloha a hybnosť klasického harmonického oscilátora nie sú presne určené (napríklad, vďaka fluktuáciám podmienenými vplyvom okolia). V tomto prípade,  $P(q, p)$  nie je lokalizovaná v jednom bode fázového priestoru, ale je "rozmazaná". Napríklad si môžeme predstaviť gaussovské rozdelenie hustoty pravdepodobnosti

$$P(q, p) = \frac{1}{\sigma_q \sigma_p} \exp \left[ -\frac{1}{2A} \frac{[q - q(t)]^2}{\sigma_q^2} - \frac{1}{2A} \frac{[p - p(t)]^2}{\sigma_p^2} \right], \quad (5.76)$$

Táto funkcia (pozri obr. 5.2) je v celom fázovom priestore *nezáporná* a je vďaka vlastnosti integrálov gaussových funkcií

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta_x}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp \left[ -\frac{[x - y]^2}{2\Delta_x} \right] = 1 \quad (5.77)$$



Obrázok 5.2: Gaussovské pravdepodobnostné rozdelenie  $P(q, p)$  definované vzťahom (5.76). Jednotky vo fázovom priestore sú zvolené tak, že  $A = 1$ ,  $\sigma_q^2 = \sigma_p^2 = 1/2$ , a v daný moment  $q(t) = 2$  a  $p(t) = 0$ .

normovaná na jednotku. V tomto prípade pre stredné hodnoty polohy  $\bar{q}$  a hybnosti  $\bar{p}$  nájdeme s pomocou vzťahu (5.74) a integrálu

$$\int_{-\infty}^{\infty} (ax^2 + 2bx + c) e^{-sx^2 - tx} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{4} s^{-5/2} [4cs^2 - 4stb + a(t^2 + 2s)] e^{\frac{t^2}{4s}} \quad (5.78)$$

vzťahy

$$\bar{q}(t) = q(t); \quad \bar{p}(t) = p(t). \quad (5.79)$$

Vidíme teda, že stredné hodnoty polohy a hybnosti sú v prípade pravdepodobnostného rozdelenia (5.76) také isté ako v prípade ideálneho harmonického oscilátora. Rozdiel je však vo momentoch vyšších rádov. Definujme druhý moment pravdepodobnostného rozdelenia  $f(x)$  ako

$$\Delta_x^2 := \overline{(x - \bar{x})^2} = \overline{x^2} - \bar{x}^2. \quad (5.80)$$

Potom pre druhé momenty polohy  $\Delta_q$  a hybnosti  $\Delta_p$  harmonického oscilátora nájdeme

$$\begin{aligned} \Delta_q &= \sqrt{A} \sigma_q; \\ \Delta_p &= \sqrt{A} \sigma_p. \end{aligned} \quad (5.81)$$

Tieto momenty vyjadrujú neurčitost' polohy a hybnosti harmonického oscilátora charakterizovaného pravdepodobnostným rozdelením (5.76), t.j. určujú "šírku" tohoto rozdelenia. Ich súčin definuje celkovú neurčitost' pravdepodobnostného rozdelenia (5.76) v jednotkách "binov"  $A$  fázového priestoru:

$$\Delta_q \Delta_p = A \sigma_q \sigma_p. \quad (5.82)$$

Poloha a hybnosť klasického harmonického oscilátora môže byť v princípe kontrolovaná a taktiež nameraná s absolútnou (v princípe) presnosťou, čo korešponduje súčasnej limite  $\sigma_q \rightarrow 0$  a  $\sigma_p \rightarrow 0$ . Pozrime sa teda, ako sa v tomto prípade správa pravdepodobnostné rozdelenie (hustota pravdepodobnosti) (5.76). Spomenieme si na vzťah

$$\lim_{\Delta_x \rightarrow 0} \exp \left[ -\frac{[x - y]^2}{2\Delta_x} \right] = \sqrt{2\pi\Delta_x} \delta(x - y), \quad (5.83)$$

pomocou ktorého dokážeme,

$$\lim_{\sigma_q, \sigma_p \rightarrow 0} \frac{1}{\sigma_q \sigma_p} \exp \left[ -\frac{1}{2A} \frac{[q - q(t)]^2}{\sigma_q^2} - \frac{1}{2A} \frac{[p - p(t)]^2}{\sigma_p^2} \right] = 2\pi A \delta(q - q(t)) \delta(p - p(t)). \quad (5.84)$$

Ako vidíme v tejto limite dostávame z rozdelenia (5.76) rozdelenie, ktoré presne určuje polohu harmonického oscilátora. Je pochopiteľné, že teraz je súčin neurčitostí (5.82) rovný nule.

### 5.3 Kvantový harmonický oscilátor

Hamiltonián klasického harmonického oscilátora je určený funkciou (5.61). Na základe princípu korešpondencie definuje Hamiltonov operátor  $\hat{H}$  kvantového harmonického oscilátora ako

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{k\hat{q}^2}{2} = \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{q}^2}{2}, \quad (5.85)$$

kde  $\omega^2 = k/m$ . Našou prvou úlohou bude nájsť vlastné vektory tohoto operátora, t.j. budeme riešiť rovnicu

$$\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle. \quad (5.86)$$

Spomenieme si, že na začiatku tejto kapitoly sme vzťahom (5.2) definovali kreačné a anihilačné operátory  $\hat{a}^\dagger$  a  $\hat{a}$ . Teraz s pomocou rovnice (5.2) vyjadríme operátory polohy a hybnosti ako

$$\begin{aligned} \hat{q} &= \frac{1}{\lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger); \\ \hat{p} &= \frac{\lambda}{i} \sqrt{\frac{\hbar}{2}} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger). \end{aligned} \quad (5.87)$$

Po dosadení týchto výrazov do Hamiltonovho operátora (5.85) dostaneme tento v tvare

$$\hat{H} = \frac{\hbar}{2} \left[ [(\hat{a})^2 + (\hat{a}^\dagger)^2] \left( \frac{m\omega^2}{2\lambda^2} - \frac{\lambda^2}{2m} \right) + (\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}) \left( \frac{m\omega^2}{2\lambda^2} + \frac{\lambda^2}{2m} \right) \right] \quad (5.88)$$

Ak si teraz zvolíme

$$\lambda = \sqrt{m\omega}, \quad (5.89)$$

potom môžeme Hamiltonov operátor prepísať v tvare

$$\hat{H} = \hbar\omega \frac{(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a})}{2} = \hbar\omega \left( \hat{n} + \frac{1}{2} \right), \quad (5.90)$$

kde sme využili komutačný vzťah (5.3) a definíciu operátora počtu excitácií  $\hat{n} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$ . Znamená to teda, že Hamiltonov operátor harmonického oscilátora je proporcionálny operátoru počtu excitácií  $\hat{n}$ . No a týmto sme de facto našu prvú úlohu už vyriešili, pretože vieme, že stavové vektory  $|n\rangle$  sú vlastnými vektormi operátora  $\hat{n}$ . Vidíme, že vlastné hodnoty Hamiltonovho operátora, t.j. operátora energie, harmonického oscilátora sú diskrétné a ekvidistantné, t.j.

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right); \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (5.91)$$



Ak využijeme terminológiu kreačných a anihilačných operátorov, potom môžeme povedať, že pri prechode z hladiny  $|n\rangle$  na hladinu  $|m\rangle$  ( $n > m$ ) sa "vyžiari"  $n - m$  kvánt energie  $\hbar\omega$  (táto terminológia začne mať zmysel, keď budeme študovať zložitejší model, v ktorom bude kvantový harmonický oscilátor interagovať s iným kvantovým systémom). Podstatné je však to, že spektrum energie kvantového harmonického oscilátora nie je spojité, ale je *diskrétné*.

Vlnová funkcia  $\psi_n(q) = \langle q|n\rangle$  stavového vektoru v  $q$ -reprezentácii už poznáme - stačí ak sa pozrieme na rovnicu (5.50)

$$\psi_n(q) = \langle q|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{\lambda^2}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{\lambda^2 q^2}{2\hbar} - i\varphi_n} H_n\left(\frac{\lambda}{\sqrt{\hbar}}q\right), \quad (5.92)$$

a analogicky v  $p$ -reprezentácii - pozri rovnicu (5.51)

$$\psi_n(p) = \langle p|n\rangle = \frac{(-i)^n}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{1}{\lambda^2 \pi \hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{p^2}{2\lambda^2 \hbar} - i\varphi_p} H_n\left(\frac{1}{\lambda\sqrt{\hbar}}p\right) \quad (5.93)$$

pričom si musíme pamätať, že konštanta  $\lambda$  je určená vzťahom (5.89).

## 5.4 Kvantový fázový priestor

Veľmi výnimočnými stavmi kvantového harmonického oscilátora sú takzvané *koherentné* stavy  $|\alpha\rangle$ . Tieto stavy sú vlastnými stavmi anihilačného operátora s vlastnou hodnotou  $\alpha$ , t.j.

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle. \quad (5.94)$$

Keďže  $\hat{a}$  nie je Hermitov operátor,  $\alpha$  je vo všeobecnosti komplexné číslo. Tie stavy môžu byť generované z vákuu  $|0\rangle$  t.j. stavu s nulovým počtom excitácií [ $\hat{a}|0\rangle = 0$ ] pôsobením naň Glauberovým posúvacím operátorom  $\hat{D}(\alpha)$

$$\hat{D}(\alpha) \equiv \exp[\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a}]; \quad |\alpha\rangle = \hat{D}(\alpha)|0\rangle. \quad (5.95)$$

Ako sme už hovorili, fázový priestor je parametrický priestor vlastných hodnôt Hermitových operátorov  $\hat{q}$  a  $\hat{p}$ . Je to nekonečne veľká rovina s Euklidovou metriku parametrizovaná reálnymi parametrami  $q$  a  $p$ . Ekvivalentným fázovým priestorom je komplexná rovina, body ktorej sú komplexné čísla  $\alpha$

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\lambda q + i\lambda^{-1}p). \quad (5.96)$$

Invariantne miery vo fázových priestoroch  $(q, p)$  a  $(\text{Re}(\alpha), \text{Im}(\alpha))$  sú definované ako

$$\frac{1}{\pi}d^2\alpha = \frac{1}{\pi}d[\text{Re}(\alpha)]d[\text{Im}(\alpha)] = \frac{1}{2\pi\hbar}dqdp. \quad (5.97)$$

Tak ako v klasickej mechanike, tak aj v kvantovej mechanike môžeme opisovať fyzikálne systémy pomocou pravdepodobnostných rozdelení vo fázových priestoroch. Konkrétne, predpokladajme, že náš kvantový systém (napr. harmonický oscilátor) je v stave popísanom operátorom hustoty  $\hat{\rho}$  (ďalej budeme analyzovať predovšetkým čisté stavy, pre ktoré  $\hat{\rho} = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ ). S každým operátorom hustoty  $\hat{\rho}$  potom môžeme asociovať Wignerovu funkciu  $W_{\hat{\rho}}(\xi)$ , ktorá opisuje hustotu kvazi-pravdepodobnosti vo fázovom priestore (tieto slová nadobudnú konkrétny zmysel neskôr v tejto kapitole).

Wignerova funkcia je definovaná cez charakteristickú funkciu  $C_{\hat{\rho}}^{(W)}(\eta)$  Weylovo (symetricky) usporiadaných momentov kreačných a anihilačných operátorov  $\hat{a}$  a  $\hat{a}^\dagger$

$$W_{\hat{\rho}}(\xi) = \frac{1}{\pi} \int C_{\hat{\rho}}^{(W)}(\eta) \exp(\xi\eta^* - \xi^*\eta) d^2\eta. \quad (5.98)$$

Charakteristická funkcia  $C_{\hat{\rho}}^{(W)}(\eta)$  je jednoznačne určená operátorom hustoty  $\hat{\rho}$

$$C_{\hat{\rho}}^{(W)}(\eta) \equiv \text{Tr}[\hat{\rho}\hat{D}(\eta)], \quad (5.99)$$

kde  $\hat{D}(\eta)$  je Glauberov posúvacíoperátor vyjadrený vzťahom Eq.(5.95). Pomocou charakteristickej funkcie  $C_{\hat{\rho}}^{(W)}(\eta)$  môžeme určiť stredné hodnoty  $\langle\{(\hat{a}^\dagger)^m \hat{a}^n\}\rangle$  Weylovo-usporiadaných súčinov kreačných a anihilačných operátorov podľa vzťahu

$$\langle\{(\hat{a}^\dagger)^m \hat{a}^n\}\rangle = \frac{\partial^{(m+n)}}{\partial\eta^m \partial(-\eta^*)^n} C_{\hat{\rho}}^{(W)}(\eta) \Big|_{\eta=0}. \quad (5.100)$$

Takéto stredné hodnoty sa dajú určiť pomocou Wignerovej funkcie

$$\text{Tr}[\{(\hat{a}^\dagger)^m \hat{a}^n\}\hat{\rho}] = \frac{1}{\pi} \int d^2\xi (\xi^*)^m \xi^n W_{\hat{\rho}}(\xi). \quad (5.101)$$

Napríklad, stredná hodnota symetricky usporiadaného (Weylovo) súčinu  $\langle\{\hat{a}^\dagger \hat{a}^2\}\rangle$  sa dá spočítať ako

$$\langle\{\hat{a}^\dagger \hat{a}^2\}\rangle = \frac{1}{3} \langle \hat{a}^\dagger \hat{a}^2 + \hat{a} \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a}^2 \hat{a}^\dagger \rangle = \frac{1}{\pi} \int d^2\xi |\xi|^2 \xi W_{\hat{\rho}}(\xi). \quad (5.102)$$

### Poznámka

Neskôr v týchto prednáškach ešte budem hovoriť o centrálnych momentoch (kumulantoch) systémových operátorov  $\hat{a}$  a  $\hat{a}^\dagger$ . Tieto budeme označovať ako  $\langle\dots\rangle^{(c)}$  a v ďalšom budeme uvažovať symetricky usporiadané momenty definované ako

$$\langle\{(\hat{a}^\dagger)^m \hat{a}^n\}\rangle^{(c)} \equiv \langle\{(\hat{a}^\dagger - \langle\hat{a}^\dagger\rangle)^m (\hat{a} - \langle\hat{a}\rangle)^n\}\rangle. \quad (5.103)$$

Z tejto definície je zrejmé, že centrálné momenty rádu  $k$  ( $k = m + n$ ) môžu byť určené cez momenty nižších rádo. Tieto kumulanty sú väčšinou definované cez charakteristickú funkciu  $C_{\hat{\rho}}^{(W)}(\eta)$  (pozri rovnicu (5.99))

$$\langle\{(\hat{a}^\dagger)^m \hat{a}^n\}\rangle^{(c)} = \frac{\partial^{(m+n)}}{\partial\eta^m \partial(-\eta^*)^n} \ln C_{\hat{\rho}}^{(W)}(\eta) \Big|_{\eta=0}, \quad (5.104)$$

Pôvodne bola Wignerova funkcia zavedená vo forme odlišnej od (5.98). Konkrétne, Wignerova funkcia bola definovaná ako Fourierova transformácia operátora hustoty v báze vlastných vektorov  $|q\rangle$  operátora polohy

$$W_{\hat{\rho}}(q, p) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \langle q - \zeta/2 | \hat{\rho} | q + \zeta/2 \rangle e^{i p \zeta / \hbar}. \quad (5.105)$$

V prípade čistých stavov  $\hat{\rho} = |\Psi\rangle\langle\Psi|$  je potom Wignerova funkcia definovaná ako

$$W_{\hat{\rho}}(q, p) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \psi(q - \zeta/2) \psi^*(q + \zeta/2) e^{i p \zeta / \hbar}, \quad (5.106)$$

kde  $\psi(q) \equiv \langle q | \Psi \rangle$ . Priamou kontrolou sa dá overiť, že definície (5.98) a (5.105) Wignerovej funkcie sú identické pokiaľ parametre  $\zeta$  a  $\zeta^*$  majú následovný vzťah k súradniciam  $q$  and  $p$  fázového priestoru

$$\zeta = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} (\lambda q + i\lambda^{-1}p); \quad \zeta^* = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} (\lambda q - i\lambda^{-1}p), \quad (5.107)$$

t.j.,

$$W_{\hat{\rho}}(q, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int C_{\hat{\rho}}^{(W)}(q', p') \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(qp' - pq')\right] dq' dp', \quad (5.108)$$

kde je charakteristická funkcia  $C_{\hat{\rho}}^{(W)}(q, p)$  definovaná vzťahom

$$C_{\hat{\rho}}^{(W)}(q, p) = \text{Tr} \left[ \hat{\rho} \hat{D}(q, p) \right]. \quad (5.109)$$

Posúvací operátor  $\hat{D}(\hat{q}, \hat{p})$  môžeme reprezentovať ako

$$\hat{D}(q, p) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\hat{q}p - p\hat{q})\right]. \quad (5.110)$$

Symetricky usporiadané kumulanty operátorov  $\hat{q}$  and  $\hat{p}$  sa potom dajú určiť zo vzťahu

$$\langle\langle \{\hat{p}^m \hat{q}^n\} \rangle\rangle = \hbar^{m+n} \frac{\partial^{(m+n)}}{\partial(-iq)^m \partial(ip)^n} \ln C_{\hat{\rho}}^{(W)}(q, p) \Big|_{q,p=0}, \quad (5.111)$$

Wignerova funkcia sa interpretuje ako hustota kvazi-pravdepodobnostného rozdelenia najst' kvantový systém v bode fázového priestoru  $(q, p)$ . S pomocou Wignerovej funkcie  $W_{\hat{\rho}}(q, p)$  určíme pravdepodobnostné rozdelenia  $w_{\hat{\rho}}(q)$  a  $w_{\hat{\rho}}(p)$  ako marginálne integrály cez konjugované premenné (v ďalšom budeme predpokladať, že  $\lambda = 1$ )

$$w_{\hat{\rho}}(q) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp W_{\hat{\rho}}(q, p) = \sqrt{2\pi\hbar} \langle q | \hat{\rho} | q \rangle \geq 0 \quad (5.112)$$

kde  $|q\rangle$  je vlastným stavom operátoru polohy  $\hat{q}$ . Takéto marginálne pravdepodobnostné rozdelenie je normované na jednotku, t.j.

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dq w_{\hat{\rho}}(q) = 1. \quad (5.113)$$

## 5.5 Stavy kvantového harmonického oscilatora

Kvantový harmonický oscilátor sa môže nachádzať v mnohých stavoch, ktoré môžeme rozdeliť do niekoľkých kategórií. V tejto časti našich prednášok sa budeme zaoberať niekoľkými fyzikálne veľmi zaujímavými triedami stavov kvantového harmonického oscilatora.

### 5.5.1 Fockove stavy

Vlastné stavy  $|n\rangle$  operátora počtu excitácií  $\hat{n} = \hat{a}^\dagger \hat{a} = [\frac{1}{2\hbar}(\hat{q}^2 + \hat{p}^2) - \frac{1}{2}]$  sa nazývajú Fockovými stavmi. Z predchádzajúcej diskusie vieme, že tieto stavy sú ortonormálne (t.j.,  $\langle n | n' \rangle = \delta_{n, n'}$ ) a že tvoria úplnú bázu (t.j.,  $\sum_n |n\rangle\langle n| = \hat{1}$ ). Fockov stav  $|n\rangle$  je generovaný z vákuua  $|0\rangle$  (t.j. vlastného stavu operátora  $\hat{n}$  s nulovou vlastnou hodnotou) mnohonásobným pôsobením kreačného operátora

$$|n\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle. \quad (5.114)$$

Wignerova funkcia Fockovho stavu  $|n\rangle$  v  $\xi$ -parametrizovanom fázovom priestore má tvar

$$W_{|n\rangle}(\xi) = 2(-1)^n \exp(-2|\xi|^2) \mathcal{L}_n(4|\xi|^2), \quad (5.115)$$

kde  $\mathcal{L}_n(x)$  je Laguerreov polynóm  $n$ -tého rádu. V  $(q, p)$ -parametrizovanom fázovom priestore má táto Wignerova funkcia tvar

$$W_{|n\rangle}(q, p) = 2(-1)^n \exp\left(-\frac{q^2 + p^2}{\hbar}\right) \mathcal{L}_n\left(2\frac{q^2 + p^2}{\hbar}\right). \quad (5.116)$$

Tieto Wignerove funkcie sú ne-Gaussove a majú v niektorých častiach fázového priestoru záporné hodnoty. Tieto sú indikáciou "neklasickeho" charakteru Fockových stavov (k tejto otázke "neklasičnosti" sa vrátíme neskôr). Z rovnice Eq.(5.116) ľahko nájdeme výrazy pre niekoľko prvých operátorov polohy a hybnosti

$$\begin{aligned} \langle \hat{q} \rangle &= \langle \hat{p} \rangle = 0; \\ \langle \hat{q}^2 \rangle &= \langle \hat{p}^2 \rangle = \frac{\hbar}{2}(2n + 1); \\ \langle \hat{q}^4 \rangle &= \langle \hat{p}^4 \rangle = \frac{\hbar^2}{4}(6n^2 + 6n + 3) = \frac{3}{2} \frac{\langle \hat{q}^2 \rangle^2 + \langle \hat{p}^2 \rangle^2}{2} + \frac{3}{8} \hbar^2; \\ \langle \hat{q}^2 \hat{p}^2 \rangle &= \langle \hat{p}^2 \hat{q}^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4}(2n^2 + 2n - 1) = \frac{1}{2} \frac{\langle \hat{q}^2 \rangle^2 + \langle \hat{p}^2 \rangle^2}{2} - \frac{3}{8} \hbar^2, \end{aligned} \quad (5.117)$$

ktoré jasne indikujú ne-Gaussovský charakter Wignerovej funkcie (5.116). Táto Wignerova funkcia je charakterizovaná nekonečným počtom nezávislých momentov operátory polohy a hybnosti. Na obrázku 5.3 sú ukázané Wignerove funkcie prvých troch Fockových stavov. Vidíme, že iba vákuový stav  $|0\rangle$  má nezápornú Wignerovu funkciu, ktorá má Gaussovský tvar. Z rovnice (5.117) nájdeme pre druhé momenty operátorov  $\hat{q}$  a  $\hat{p}$  výrazy

$$\Delta \hat{q}^2 = \Delta \hat{p}^2 = \hbar(2n + 1)/2, \quad (5.118)$$

odkiaľ nachádzame, že

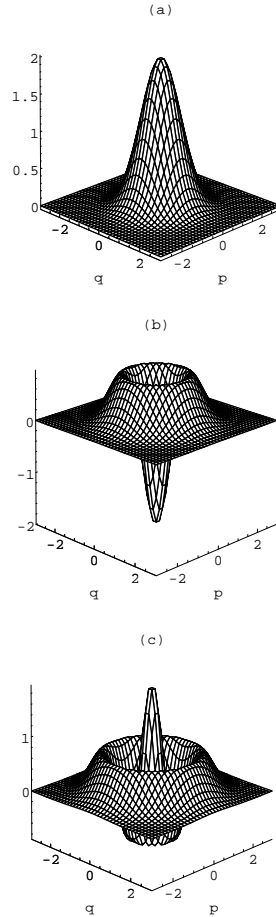
$$\Delta \hat{q} \cdot \Delta \hat{p} = \hbar(2n + 1)/2, \quad (5.119)$$

t.j. iba Fockov stav  $|0\rangle$  (t.j. vákuum) je stavom s minimálnou neurčitou. V tomto konkrétnom prípade variácie  $\Delta \hat{q} = \Delta \hat{p} = \sqrt{\hbar}/\sqrt{2}$  sú navzájom rovnaké (spomeňme si, že sme zvolili jednotky také, že  $\lambda = 1$ ). Ich súčin minimalizuje reláciu neurčitosti. Týmto je teda vákuový stav kvantového harmonického oscilatora výnimočný. Pre všetky ďalšie Fockove stavy je neurčitosť priamo proporcionálna počtu excitácií.

Nakoniec ešte spočítame momenty operátora počtu častíc  $\hat{n}$  vo Fockovom stave  $|n\rangle$

$$\langle \hat{n}^k \rangle = n^k, \quad (5.120)$$

Z tohto vzťahu vidíme, že momenty vyšších rádoov operátora  $\hat{n}$  sa dajú vyjadriť cez moment prvého rádu.



Obrázok 5.3: Wignerove funkcie prvých troch Fockových stavov:  $|0\rangle$  je na obrázku (a), zatiaľ čo  $|1\rangle$  a  $|2\rangle$  sú na obrázkoch (b) a (c). Tieto dve Wignerove funkcie nadobúdajú záporné hodnoty čo je indikátorom neklasických vlastností Fockových stavov.

### 5.5.2 Koherentné stavy

Koherentné stavy kvantového harmonického oscilátora hrajú centrálnu úlohu v kvantovej optike. Formálne môžu byť opísané ako stavy, ktoré vznikajú pôsobením klasického oscilátora na kvantový harmonický oscilátor, ktorý je na počiatku interakcie pripravený vo vákuovom stave. Ak interakčný Hamiltonián v interakčnom obraze reprezentujeme ako

$$\hat{H}_I = (\varepsilon \hat{a}^\dagger + \varepsilon^* \hat{a}). \quad (5.121)$$

potom korešpondujúci evolučný operátor  $\hat{U}(t) = \exp(-it\hat{H}_I/\hbar)$  je ekvivalentný posúvaciemu operátoru (5.95) s  $\alpha = -it\varepsilon$ . Pôsobením operátoru (5.121) sa z vákua generuje koherentný stav  $|\alpha\rangle$

$$|\alpha\rangle = \hat{D}(\alpha)|0\rangle, \quad (5.122)$$

Využitím komutačné vlastnosti kreačných a anihilačných operátorov môžeme ľahko ukázať, že koherentné stavy sú vlastnými stavmi anihilačného operátora  $\hat{a}$ , t.j.  $|\alpha\rangle$

V báze Fockových stavov  $|n\rangle$  má koherentný stav následovný rozklad

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-|\alpha|^2/2} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (5.123)$$

Znamená to, že pravdepodobnosť nájsť v koherentnom stave  $|\alpha\rangle$   $n$ -excitácií je daná vzťahom

$$P_n = |\langle n|\alpha\rangle|^2 = e^{-|\alpha|^2} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!}, \quad (5.124)$$

Inými slovami, excitácie v koherentnom stave majú Poissonove rozdelenie, pre ktoré platí, že  $\Delta \hat{n}^2 = |\alpha|^2 = \bar{n}$ . Odchod rozdelenia počtu excitácií od Poissonovho rozdelenia môžeme kvantifikovať tzv. Mandelovým  $Q$ -parametrom

$$Q = \frac{\langle (\Delta \hat{n})^2 \rangle - \langle \hat{n} \rangle}{\langle \hat{n} \rangle}. \quad (5.125)$$

Vidíme, že pre koherentný stav,  $Q = 0$ . Rozdelenie sa nazýva sub-(super-)Poissonovým ak  $Q < 0$  ( $Q > 0$ ).

Wignerova funkcia koherentného stavu v  $\xi$ -parametrizovanom fázovom priestore je Gaussovou funkciou (pozri Fig. 5.4)

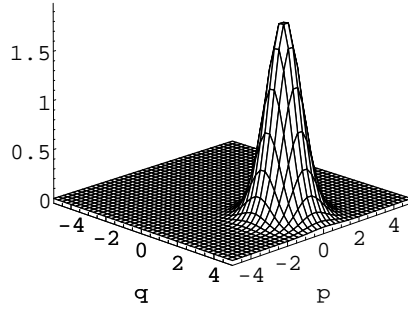
$$W_{|\alpha\rangle}(\xi) = 2 \exp(-2|\xi - \alpha|^2); \quad \alpha = \alpha_x + i\alpha_y, \quad (5.126)$$

zatiaľ čo v  $(q, p)$ -parametrizovanom fázovom priestore máme pre koherentný stav

$$W_{|\alpha\rangle}(q, p) = \frac{1}{\sigma_q \sigma_p} \exp \left[ -\frac{1}{2\hbar} \frac{(q - \bar{q})^2}{\sigma_q^2} - \frac{1}{2\hbar} \frac{(p - \bar{p})^2}{\sigma_p^2} \right], \quad (5.127)$$

kde  $\bar{q} = \sqrt{2\hbar}\alpha_x$ ;  $\bar{p} = \sqrt{2\hbar}\alpha_y$  a

$$\sigma_q^2 = \sigma_p^2 = \frac{1}{2}. \quad (5.128)$$



Obrázok 5.4: Wignerova funkcia koherentného stavu (5.127) so strednou hodnotou operátora polohy  $\bar{q} = 2$  a hybnosti  $\bar{p} = 0$ .

Stredný počet excitácií v koherentnom stave je  $\bar{n} = |\alpha|^2$  a pre variácie v polohe a hybnosti harmonického oscilátora pripraveného v tomto stave nájdeme

$$\langle \alpha | (\Delta \hat{q})^2 | \alpha \rangle = \hbar \sigma_q^2, \quad \langle \alpha | (\Delta \hat{p})^2 | \alpha \rangle = \hbar \sigma_p^2. \quad (5.129)$$

Teraz vidíme, že koherentné stavy patria do triedy stavov s minimálnou neurčitou, pre ktoré platí

$$\langle (\Delta \hat{q})^2 \rangle \langle (\Delta \hat{p})^2 \rangle = \hbar^2 \sigma_q^2 \sigma_p^2 = \frac{\hbar^2}{4}. \quad (5.130)$$

Vidíme tiež, že kvantovo-štatistické vlastnosti koherentných stav sú jednoznačne určené strednou hodnotou operátorou polohy a hybnosti a ich variáciami.

Koherentné stavy majú tú vlastnosť, že

$$\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d^2 \alpha |\alpha\rangle \langle \alpha| = \hat{1} \quad (5.131)$$

Znamená to, že by mohli tvoriť bázu v Hilbertovom priestore harmonického oscilátora. Problémom však je, že nie sú vzájomne ortogonálne, t.j.

$$\langle \beta | \alpha \rangle = \exp\left(-\frac{|\alpha|^2 + |\beta|^2}{2} + \alpha \beta^*\right), \quad (5.132)$$

resp.

$$|\langle \beta | \alpha \rangle|^2 = \exp(-|\alpha - \beta|^2). \quad (5.133)$$

Tieto stavy sú ortogonálne iba v limite  $|\alpha - \beta| \rightarrow \infty$ .

Pozrime sa ďalej na časový vývoj harmonického oscilátora, ktorý sa na počiatku vývoja nachádza v koherentnom stave opísanom Wignerovou funkciou (5.127). Ak vyriešime Schrödingerovu rovnicu s Hamiltoniánom (5.85) a s korešpondujúcimi počiatočnými podmienkami nájdeme, že Wignerova funkcia takéhoto harmonického oscilátora v čase  $t$  má tvar

$$W_{|\alpha\rangle}(q, p; t) = \frac{1}{\sigma_q \sigma_p} \exp\left[-\frac{1}{2\hbar} \frac{(q - q(t))^2}{\sigma_q^2} - \frac{1}{2\hbar} \frac{(p - p(t))^2}{\sigma_p^2}\right], \quad (5.134)$$

kde

$$\begin{aligned} q(t) &= \bar{q} \cos \omega t + \bar{p} \sin \omega t; \\ p(t) &= \bar{p} \cos \omega t - \bar{q} \sin \omega t. \end{aligned} \quad (5.135)$$

Ak sa teraz pozrieme na dynamiku klasického harmonického oscilátora [pozri riešenie (5.65)] zistíme, že v istom zmysle sa kvantový harmonický oscilátor mení v čase tak isto ako klasický oscilátor s Gaussovým rozdelením hustoty pravdepodobnosti (5.76). Je tu však jeden zásadný rozdiel - v prípade klasického harmonického oscilátora parametre  $\sigma_q$  a  $\sigma_p$  môžu byť ľubovoľne malé, v prípade kvantového harmonického oscilátora pripraveného na počiatku v koherentnom stave vždy platí  $\sigma_q \sigma_p = 1/2$ . Napriek tomu, koherentné stavy sú stavy s vlastnosťami najbližšími klasickým stavom - ich neurčitost' je minimálna a dynamika sa najviac podobá klasickej dynamike.

### 5.5.3 Stlačené stavy

Pred chvíľou sme uvažovali koherentné stavy s minimálnou neurčitou, pre ktoré v daných jednotkách  $\sigma_q = \sigma_p = 1/\sqrt{2}$ . Môžeme si teraz dať otázku, ako vyzerajú stavy s minimálnou neurčitou, pre ktoré majú fluktuácie v  $q$  a v  $p$  sú rôzne. Je zrejme, že v tomto prípade jedna z variácií môže byť menšia ako  $1/\sqrt{2}$  na úkor nárastu neurčitosti v druhej (kanonicky združenej) premennej. Takéto stavy harmonického oscilátora sa nazývajú *stlačenými stavmi*. Takéto stavy sa môžu generovať v parametrických procesoch, v ktorých *súčasne* vznikajú či zanikajú dve excitácie. Takéto procesy sú v interakčnej reprezentácii opísané Hamiltoniánom

$$\hat{H}_I = [\epsilon(\hat{a}^\dagger)^2 + \epsilon^* \hat{a}^2]. \quad (5.136)$$

Tomuto Hamiltoniánu korešponduje evolučný operátor  $\hat{U}(t) = \exp(-i\hat{H}t/\hbar)$ , ktorý môžeme prepísať v tvare "stlačacieho" operátora

$$\hat{S}(\xi) = \exp\left[\xi \frac{(\hat{a}^\dagger)^2}{2} - \xi^* \frac{\hat{a}^2}{2}\right], \quad (5.137)$$

s  $\xi = r \exp(i\phi)$ . Práve parameter  $\xi = -iet/\hbar$  určuje veľkosť stlačenia kvantových fluktuácií. Ak sa harmonický oscilátor v počiatku časového vývoja nachádza vo vákuovom stave, potom pod vplyvom stlačacieho operátora dostaneme stav

$$|\xi\rangle = \hat{S}(\xi)|0\rangle, \quad (5.138)$$

ktorý sa nazýva *stlačeným vákuom*.

Ak zoberieme do úvahy, že operátory  $\hat{K}_- = \hat{a}^2/2$  a  $\hat{K}_+ = (\hat{a}^\dagger)^2/2$  spolu s operátorom  $\hat{K}_0 = (\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1/2)/2$  tvoria špecifickú bozónovú reprezentáciu  $SU(1, 1)$  Lieovej algebry, potom môžeme použiť tzv.  $SU(1, 1)$  rozpletaciu teorému<sup>5</sup> odkiaľ pre stlačený stav (5.138) dostaneme výraz vo Fockovej báze

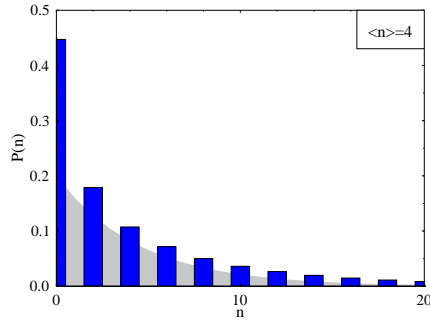
$$|\xi\rangle = \frac{1}{\sqrt{\cosh r}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{[(2n)!]^{1/2}}{2^n n!} [e^{i\phi} \tanh r]^n |2n\rangle. \quad (5.143)$$

<sup>5</sup> $SU(1, 1)$  Lieova algebra pozostáva z troch generátorov  $\hat{K}_0$ ,  $\hat{K}_+$  a  $\hat{K}_-$ , pre ktoré platia komutačné vzťahy

$$[\hat{K}_0, \hat{K}_\pm] = \pm \hat{K}_\pm \quad ; \quad [\hat{K}_-, \hat{K}_+] = 2\hat{K}_0. \quad (5.139)$$

Rozpletacia teoréma pre  $SU(1, 1)$  Lieovu algebru hovorí, o tom, že operátor  $\hat{S}(\alpha)$

$$\hat{S}(\alpha) = \exp(\alpha \hat{K}_+ - \alpha^* \hat{K}_-) \quad (5.140)$$



Obrázok 5.5: Rozdelenie počtu excitácií stlačeného vákuua (5.143) so stredným počtom excitácií  $\bar{n} = 4$  je vyznačené v tvare stĺpcou. Vytieňovaná plocha korešponduje termálnemu rozdeleniu harmonického oscilátora s rovnakým počtom excitácií. Ako ukážeme neskôr, oscilácie v rozdelení počtu excitácií sa dajú interpretovať ako dôsledok interferencie vo fázovom priestore.

Vidíme teda, že stlačený stav je superpozíciou iba párnych Fockových stavov, čo je vcelku pochopiteľné, pretože tento stav je generovaný procesom, v ktorom simultánne vznikajú alebo zanikajú dve kvantá energie harmonického oscilátora. Rozdelenie počtu excitácií v stave (5.143) je určité vzťahom

$$\begin{aligned} P_{2n} &= \frac{1}{\cosh r} \frac{(2n)!}{(n!)^2 2^{2n}} (\tanh r)^{2n} = \frac{1}{\sqrt{1+\bar{n}}} \frac{(2n)!}{(n!)^2 2^{2n}} \left( \frac{\bar{n}}{1+\bar{n}} \right)^n; \\ P_{2n+1} &= 0 \end{aligned} \quad (5.144)$$

kde  $\bar{n} = \sinh^2 r$  je stredný počet excitácií v stave (5.138). Toto oscilujúce rozdelenie počtu excitácií vidíme na obrázku 5.5.

Variácia v rozdelení počtu excitácií (5.144) je daná vzťahom  $(\Delta \hat{n})^2 = 2\bar{n}(\bar{n} + 1)$  odkiaľ vidíme, že sa rovná dvojnásobku variácie rozdelenia počtu excitácie oscilátora v termálnom stave (pre tú istú hodnotu stredného počtu excitácií). Pričom oscilátor v termálnom stave je opísaný operátorom hustoty

$$\hat{\rho} = \frac{1}{1+\bar{n}} \sum_{n=0}^{\infty} \left( \frac{\bar{n}}{1+\bar{n}} \right)^n |n\rangle\langle n|. \quad (5.145)$$

a stredný počet excitácií v tomto stave je determinovaný teplotou, pri ktorej sa nachádza oscilátor (**doplňte**).

sa dá vyjadriť v "rozplatenom" tvare

$$\hat{S}(\alpha) = \exp(\xi \hat{K}_+) \exp(\Gamma \hat{K}_0) \exp(-\xi^* \hat{K}_-), \quad (5.141)$$

kde  $\alpha = -\frac{1}{2}\theta \exp(-i\phi)$ ;  $\xi = -\tanh(\theta/2) \exp(-i\phi)$  a  $\Gamma = \ln(1 - |\xi|^2)$ , pričom pre parametre  $\theta$ ,  $\phi$  and  $|\xi|$  platí

$$\theta \in (-\infty, \infty) \quad ; \quad \phi \in (0, 2\pi) \quad ; \quad |\xi| \in (0, 1). \quad (5.142)$$

Stlačený stav  $|\xi\rangle$  definovaný rovnicou (5.137) je vlastným stavom operátora  $\hat{b}$  s nulovou vlastnou hodnotou (t.j.  $\hat{b}|\xi\rangle = 0$ ), ktorý môžeme dostať z operátorov  $\hat{a}$  a  $\hat{a}^\dagger$  pomocou Bogoljubovej transformácie

$$\begin{aligned} \hat{b} &= \hat{S}(\xi) \hat{a} \hat{S}^\dagger(\xi) = \hat{a} \cosh r - \hat{a}^\dagger e^{i\phi} \sinh r; \\ \hat{b}^\dagger &= \hat{S}(\xi) \hat{a}^\dagger \hat{S}^\dagger(\xi) = \hat{a}^\dagger \cosh r - \hat{a} e^{-i\phi} \sinh r. \end{aligned} \quad (5.146)$$

Znamená to teda, že základný (vákuový) vlastný stav transformovaného oscilátora  $b$  sa rovná stlačenému stavu pôvodného oscilátora reprezentovaného operátormi  $\hat{a}$  a  $\hat{a}^\dagger$ .

Tak ako v prípade koherentných stavov, i stlačené stavy nie sú navzájom ortogonálne. Skalárny súčin dvoch stlačených stavov  $|\xi\rangle$  a  $|\xi'\rangle$  je

$$\langle \xi' | \xi \rangle = \frac{1}{\{\cosh r \cosh r' - \exp[i(\phi - \phi')]\sinh r \sinh r'\}^{1/2}}. \quad (5.147)$$

Wignerova funkcia stlačeného vákuua s fázou stlačenia rovnou nule<sup>6</sup> má Gaussov tvar (pozri obrázok 5.6)

$$W(q, p) = \frac{1}{\sigma_q \sigma_p} \exp \left[ -\frac{1}{2\hbar} \frac{q^2}{\sigma_q^2} - \frac{1}{2\hbar} \frac{p^2}{\sigma_p^2} \right] \quad (5.148)$$

resp. v  $\xi$ -parametrizovanom fázovom priestore

$$W(\xi) = 2 \exp \left[ -\frac{\text{Re}(\xi)^2}{\sigma_q^2} - \frac{\text{Im}(\xi)^2}{\sigma_p^2} \right] \quad (5.149)$$

Odtiaľto vidíme, že stlačené vákuuum je jednoznačne určené dvoma parametrami  $\sigma_q$  and  $\sigma_p$  a uhlom pootočenia  $\phi$ .

S použitím Wignerovej funkcie ľahko nájdeme stredné hodnoty operátorov polohy a momentu harmonického oscilátora v stlačenom stave - tieto sú nulové. Pre stredné momenty (variácie) týchto operátorov nájdeme

$$(\Delta \hat{q})^2 = \hbar \sigma_q^2 = \frac{\hbar}{2} e^{2r}; \quad (\Delta \hat{p})^2 = \hbar \sigma_p^2 = \frac{\hbar}{2} e^{-2r}. \quad (5.150)$$

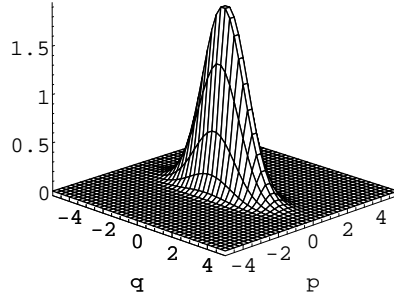
Znamená to, že pre zvolenú fázovú stlačenia ( $\phi$ ) a  $r > 0$  sú fluktuácie v hybnosti oscilátora v stlačenom stave redukované na úkor nárastu fluktuácií v polohe tohoto oscilátora. Pričom súčin týchto neurčitostí je daný vzťahom  $(\Delta \hat{q})^2 (\Delta \hat{p})^2 = \hbar^2/4$  čo znamená, že stlačené vákuuum je stav s minimálnou neurčitost'ou.

V tejto súvislosti môžeme poznamenať, že "nekonečne stlačené vákuuum je vlastným stavom operátora  $\hat{q}$ , resp.  $\hat{p}$ , v závislosti od uhlu stlačenia.

Ďalej poznamenáme že pôsobením stlačacieho operátora  $\hat{S}(\xi)$  následne pôsobením posúvacieho operátora  $\hat{D}(\alpha)$  na vákuový stav  $|0\rangle$  môžeme vygenerovať celú triedu Gaussových stavov, tzv. posunutých stlačených stavov<sup>7</sup>  $|\alpha; \xi\rangle = \hat{D}(\alpha) \hat{S}(\xi) |0\rangle$ , ktoré sú charakterizované nenulovými

<sup>6</sup>Na tomto mieste poznamenáme, že stlačené vákuuum charakterizované komplexným parametrom stlačenia  $\xi = r e^{i\phi}$  môže byť získané zo stlačeného vákuua charakterizovaného reálnym parametrom  $\xi = r$  (i.e.  $\phi = 0$ ) pomocou operátora rotácie  $\hat{R}(\phi) = \exp \left[ i \frac{\phi}{2} \hat{a}^\dagger \hat{a} \right]$ , t.j.  $|r e^{i\phi}\rangle = \hat{R}(\phi) |r\rangle$ .

<sup>7</sup>Tu treba poznamenať, že operátory  $\hat{D}(\alpha)$  a  $\hat{S}(\xi)$  navzájom nekomutujú. Znamená to teda, že stavy  $\hat{D}(\alpha) \hat{S}(\xi) |0\rangle$  and  $\hat{S}(\xi) \hat{D}(\alpha) |0\rangle$  sa navzájom nerovnajú, ale sú vo vzťahu  $\hat{S}(\xi) \hat{D}(\alpha) |0\rangle = \hat{D}(\alpha \cosh r + \alpha^* e^{i\phi} \sinh r) \hat{S}(\xi) |0\rangle$



Obrázok 5.6: Na obrázku je zobrazená Wignerova funkcia stlačeného vákuu určeného rovnicou (5.143). V danom prípade predpokladáme, že redukované sú fluktuácie v hybnosti kvantového oscilátora, t.j. v označení (5.150) je parameter  $r$  kladný, čo znamená, že  $\sigma_p < 1/\sqrt{2}$ .

strednými hodnotami operátora  $\hat{a}$ , t.j.  $\langle \alpha; \xi | \hat{a} | \alpha; \xi \rangle = \alpha$ . Na druhej strane, variácie operátorov polohy a hybnosti sa nemenia pri pôsobení posúvacieho operátora. Wignerova funkcia posunutého stlačeného vákuu sa dá získať jednoduchou kanonickou transformáciou z Wignerovej funkcie stlačeného vákuu zámennou premenných. K transformáciám, ktoré zachovávajú tvar Wignerových funkcií sa ešte vrátíme v našich prednáškach.

Stredný počet excitácií posunutého stlačeného vákuu má tvar  $\langle \hat{n} \rangle = \sinh^2 r + |\alpha|^2$ , je to teda suma stredných excitácií koherentného stavu  $|\alpha\rangle$  a stlačeného vákuu  $|\xi\rangle$ . Rozdelenie počtu excitácií v posunutom stlačenom stave má opäť oscilačný charakter, avšak na rozdiel od stlačeného vákuu,  $P_{2n+1} \neq 0$ . Navyiac, pre špecifické hodnoty posunutia a stlačenia tento stav môže mať sub-Poissonovu štatistiku (spomeňme si, že stlačené vákuum má super-Poissonovu štatistiku). Variácia v rozdelení počtu excitácií pre posunutú stlačené vákuum má tvar

$$(\Delta \hat{n})^2 = |\alpha|^2 [e^{-2r} \sin^2(\theta - \phi/2) + e^{2r} \cos^2(\theta - \phi/2)] + 2 \sinh^2 r \cosh^2 r, \quad (5.151)$$

kde  $\theta$  je fázou posunutia  $\alpha = |\alpha|e^{i\theta}$ . Ak pre túto fázu platí  $\theta - \phi/2 = \pi/2$ , potom pre veľké hodnoty  $|\alpha|$  z rovnice Eq.(5.151) nájdeme

$$(\Delta \hat{n})^2 \simeq |\alpha|^2 e^{-2r}, \quad (5.152)$$

odkiaľ priamo vidíme sub-Poissonov charakter rozdelenia počtu excitácií posunutého stlačeného vákuu. Navyiac z rovnice Eq.(5.152) vyplýva, že redukcia fluktuácií v polohe či hybnosti sa dá asociovať s redukciou fluktuácií v počte excitácií.

### 5.5.4 Dvojmódové stlačené vákuum

Doteraz sme analyzovali jeden jednorozmerný harmonický oscilátor, ktorý je najjednoduchším kvantovo-mechanickým systémom. Teraz sa pozrieme na situáciu kedy máme dva takéto oscilátory, ktoré navzájom interagujú. Budeme predpokladať veľmi jednoduchú interakciu kedy pod vplyvom vonkajšieho klasického poľa oba oscilátory sa *súčasne* excitujú či deexcitujú. Ak dva oscilátory opisujeme operátormi  $\hat{a}$ ,  $\hat{a}^\dagger$  a  $\hat{b}$ ,  $\hat{b}^\dagger$ , potom takýto korelovaný proces kreácie a

anihilácie excitácií je opísaný interakčným Hamiltoniánom  $\hat{H} = \lambda \hat{a}^\dagger \hat{b}^\dagger + \lambda^* \hat{a} \hat{b}$ , ktorému korešponduje evolučný operátor, ktorý môžeme prepísať v tvare dvojmódového stlačiacieho operátora

$$\hat{S}_{ab}(\eta) = \exp \left[ \eta \hat{a}^\dagger \hat{b}^\dagger - \eta^* \hat{a} \hat{b} \right]. \quad (5.153)$$

kde operátory  $\hat{K}_- = \hat{a} \hat{b}$  a  $\hat{K}_+ = \hat{a}^\dagger \hat{b}^\dagger$  spolu s operátorom  $\hat{K}_0 = (\hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{b}^\dagger \hat{b})/2$  tvoria ďalšiu bozónovú reprezentáciu  $SU(1, 1)$  Lieovej algebry (s Bargmannovým indexom  $k = 1/2$ ). Dvojmódové stlačené vákuum je definované pôsobením operátora (5.153) na vákuové stavy oscilátorov  $a$  a  $b$ , t.j.

$$|\eta\rangle_{ab} = \hat{S}_{ab}(\eta)|0\rangle_a|0\rangle_b, \quad (5.154)$$

kde  $\eta = r e^{i\phi}$ . Ak opäť použijeme rozpletaciu teorému pre  $SU(1, 1)$  Lieovej algebry [pozri rovnicu (5.141)] môžeme prepísať stav (5.154) vo Fockovej báze dvoch oscilátorov

$$|\eta\rangle_{ab} = \frac{1}{\cosh r} \sum_{n=0}^{\infty} e^{in\phi} [\tanh r]^n |n\rangle_a |n\rangle_b. \quad (5.155)$$

Vidíme teda, že tento stav je superpozíciou Fockových stavov s rovnakým počtom excitácií oboch oscilátorov. Takýto stav je silne korelovaný a nedá sa zapísať vo faktorizovanom tvare. Inými slovami, dva oscilátory sú kvantovo-mechanicky spletené (entangleované). Problému kvantového prepletenia sa budeme podrobne venovať neskôr, teraz chcem iba ukázať, že operátor hustoty každého z oscilátorov má tvar a:

$$\hat{\rho}_a = \text{Tr}_b |\eta\rangle_{ab} \langle \eta| = \frac{1}{\cosh^2 r} \sum_{n=0}^{\infty} [\tanh r]^{2n} |n\rangle_a \langle n| = \frac{1}{1 + \bar{n}} \sum_{n=0}^{\infty} \left( \frac{\bar{n}}{1 + \bar{n}} \right)^n |n\rangle_a \langle n|, \quad (5.156)$$

kde sme využili fakt, že stredný počet excitácií  $\bar{n}$  in každého z dvoch oscilátorov nachádzajúcich sa v dvojmódovom stlačenom stave má tvar  $\bar{n} = \sinh^2 r$ . S využitím tejto parametrizácie môžeme prepísať výraz pre dvojmódové stlačené vákuum Eq. (5.155) v tvare

$$|\eta\rangle_{ab} = \frac{1}{\sqrt{1 + \bar{n}}} \sum_{n=0}^{\infty} \left( \frac{\bar{n}}{1 + \bar{n}} \right)^{n/2} e^{i\phi n} |n\rangle_a |n\rangle_b. \quad (5.157)$$

Zo štruktúry generátorov dvojmódového stlačeného stavu sa dá určiť, že tento stav sa nedá reprezentovať vo faktorizovanom tvare ako súčin čistých stavov dvoch oscilátorov. Inými slovami operátor  $\hat{S}_{ab}(\eta)$  sa nedá reprezentovať ako súčin dvoch operátorov pôsobiacich iba na oscilátor  $a$  a oscilátor  $b$ . Na druhej strane môžeme reprezentovať tento dvojmódový stlačiaci operátor ako súčin jedno-módových (pôsobiacich iba na jeden oscilátor) operátorov pôsobiacich na transformované oscilátory  $c$  and  $d$

$$\hat{c} = \frac{\hat{a} + \hat{b}}{\sqrt{2}}; \quad \hat{d} = \frac{\hat{b} - \hat{a}}{\sqrt{2}}. \quad (5.158)$$

Ak teraz prepíšeme operátor  $\hat{S}_{ab}(\eta)$  pomocou  $\hat{c}$  and  $\hat{d}$  dostaneme

$$\hat{S}_{ab}(\eta) = \hat{S}_c(\eta) \hat{S}_d(-\eta), \quad (5.159)$$

kde  $\hat{S}_c(\eta)$  and  $\hat{S}_d(-\eta)$  sú stlačacie operátory pôsobiace na oscilátory  $c$  a  $d$ . Vidíme teda, že stlačenie oscilátorov  $c$  a  $d$  je dôsledkom korelácií medzi oscilátormi  $a$  a  $b$ . Tieto korelácie majú za následok redukcii fluktuácií rozdielu operátorov  $\hat{n}_a$  a  $\hat{n}_b$ , t.j.  $[\Delta(\hat{n}_a - \hat{n}_b)]^2 = (\Delta\hat{n}_a)^2 + (\Delta\hat{n}_b)^2 - 2\langle(\hat{n}_a\hat{n}_b) - \langle\hat{n}_a\rangle\langle\hat{n}_b\rangle\rangle = 0$ .

Dvoj-módový stlačený stav dvoch oscilátorov sa dá zovšeobecniť na prípad kontinuálneho počtu oscilátorov. V tomto prípade stlačiaci operátor má tvar

$$\hat{S}[\eta(\omega)] = \exp\left\{\frac{1}{2}\int_0^{2\Omega} d\omega [\eta(\omega)\hat{b}^\dagger(\omega)\hat{b}^\dagger(2\Omega - \omega) - \eta^*(\omega)\hat{b}(\omega)\hat{b}(2\Omega - \omega)]\right\}, \quad (5.160)$$

kde stav  $\prod_\omega |0\rangle_\omega$  reprezentuje vákuum kontinua oscilátorov. Parameter stlačenia  $\eta$  v tomto prípade má tvar  $\eta(\omega) = r(\omega)e^{i\phi(\omega)}$  a bozónové operátory  $\hat{b}(\omega)$  a  $\hat{b}^\dagger(\omega)$  spĺňajú komutačné vzťahy  $[\hat{b}(\omega), \hat{b}^\dagger(\omega')] = \delta(\omega - \omega')\hat{1}$ .

Operátor (5.160) je prirodzeným zovšeobením dvoj-módového operátora stlačenia (5.153), a jeho pôsobenie koreluje oscilátory frekvencie ktorých sú  $\Omega \pm \delta$ . Takýto nekonečne veľký súbor oscilátorov sa často nazýva i stlačeným rezervoárom. Tento je charakterizovaný korelačnými funkciami

$$\begin{aligned} \langle\hat{b}^\dagger(\omega)\hat{b}(\omega')\rangle &= \sinh^2 r(\omega)\delta(\omega - \omega'); \\ \langle\hat{b}(\omega)\hat{b}(\omega')\rangle &= e^{i\phi(\omega)} \sinh r(\omega) \cosh r(\omega)\delta(\omega + \omega' - 2\Omega). \end{aligned} \quad (5.161)$$

## 5.6 Kvantová interferencia vo fázovom priestore

### 5.6.1 Superpozícia Fockových stavov

Aby sme získali "intuitívnu" predstavu o kvantovej interferencii budeme sa najprv venovať superpozíciám Fockových stavov. Vyšetříme najprv superpozíciu dvoch Fockových stavov  $|n\rangle$  a  $|m\rangle$  (nech  $n < m$ ):

$$|\psi\rangle = C_n|n\rangle + C_m|m\rangle, \quad (5.162)$$

kde komplexné amplitúdy spĺňajú normalizačnú podmienku  $|C_n|^2 + |C_m|^2 = 1$ , a relatívna fáza medzi  $C_n$  and  $C_m$  je  $\zeta$ , t.j.  $C_n^*C_m = |C_n||C_m|\exp(i\zeta)$ .

Wignerovu funkciu stavu (5.162) môžeme reprezentovať ako sumu Wignerovej funkcie štatistickej zmesi  $W^M(\xi)$  a Wignerovej funkcie popisujúcej kvantovú interferenciu  $W^I(\xi)$ :

$$W(\xi) = W^M(\xi) + W^I(\xi). \quad (5.163)$$

Funkcia  $W^M(\xi)$  korešponduje operátoru hustoty štatistickej zmesi  $\hat{\rho} = |C_n|^2|n\rangle\langle n| + |C_m|^2|m\rangle\langle m|$ , a môže sa zapísať ako

$$W^M(\xi) = |C_n|^2W_{|n\rangle}(\xi) + |C_m|^2W_{|m\rangle}(\xi), \quad (5.164)$$

kde  $W_{|n\rangle}(\xi)$  je Wignerova funkcia Fockovho stavu  $|n\rangle$  [pozri rovnicu (5.115)]. Interferenčná časť Wignerovej funkcie má tvar

$$W^I(\xi) = C_n^*C_mW_{|n\rangle\langle m|}(\xi) + C_m^*C_nW_{|m\rangle\langle n|}(\xi), \quad (5.165)$$

s

$$W_{|n\rangle\langle m|}(\xi) = 2(-1)^n \left(\frac{n!}{m!}\right)^{1/2} (2\xi^*)^{m-n} \exp(-2|\xi|^2)\mathcal{L}_n^{(m-n)}(4|\xi|^2), \quad (5.166)$$

kde  $\mathcal{L}_n^{(m-n)}(x)$  je Laguerrov polynóm. Interferenčná časť  $W^I(\xi)$  sa dá tiež prepísať ako

$$\begin{aligned} W^I(\xi) &= 4|C_n||C_m|(-1)^n \left(\frac{n!}{m!}\right)^{1/2} (2|\xi|)^{m-n} \exp(-2|\xi|^2) \\ &\times \mathcal{L}_n^{(m-n)}(4|\xi|^2) \cos[\zeta - \varphi(m-n)], \end{aligned} \quad (5.167)$$

kde  $\varphi$  je fáza komplexnej amplitúdy  $\xi$ . Z rovnice (5.167) vidíme, že interferenčný člen závisí od rozdielu fáz  $\Phi = \zeta - \varphi(m-n)$ . Kvantová interferencia medzi Fockovými stavmi je príčinou toho, že stredné hodnoty anihilačného a kreačného operátora nadobúdajú v superpozičnom stave nenulové hodnoty

$$\langle\psi|\hat{a}^k|\psi\rangle = \frac{1}{\pi} \int d^2\xi \xi^k W(\xi) = \sqrt{\frac{m!}{n!}} C_n^* C_m \delta_{n+k,m}. \quad (5.168)$$

Pozrieme sa teraz na fluktuácie polohy a hybnosti kvantového harmonického oscilátora, ktorý je v superpozičnom stave (5.162). Pre variácie operátorov polohy a hybnosti v tomto stave nájdeme

$$\begin{aligned} \langle(\Delta\hat{q})^2\rangle &= \frac{\hbar}{2} + \hbar \left[ |C_n|^2 n + |C_m|^2 m + \delta_{n+2,m} |C_n||C_m| \sqrt{m(m-1)} \cos \zeta \right. \\ &\quad \left. - 2\delta_{n+1,m} |C_n|^2 |C_m|^2 m \cos^2 \zeta \right]; \\ \langle(\Delta\hat{p})^2\rangle &= \frac{\hbar}{2} + \hbar \left[ |C_n|^2 n + |C_m|^2 m - \delta_{n+2,m} |C_n||C_m| \sqrt{m(m-1)} \cos \zeta \right. \\ &\quad \left. - 2\delta_{n+1,m} |C_n|^2 |C_m|^2 m \sin^2 \zeta \right]. \end{aligned} \quad (5.169)$$

odkiaľ priamo vidíme, že (5.162) nie je stavom s minimálnou neurčitost'ou. Napriek tomu, pre  $n = m - 1$  or  $n = m - 2$ , môžeme pozorovať stlačenie fluktuácií pod úroveň kvantového šumu. Konkrétne, predkladajme, že  $n = 0$  and  $m = 1$ . Ak budeme ďalej uvažovať  $\cos^2 \zeta = 0$ , potom nájdeme  $\langle(\Delta\hat{q})^2\rangle \geq \hbar/2$  pre všetky hodnoty  $|C_1|$ , zatiaľ čo fluktuácie  $\langle(\Delta\hat{p})^2\rangle$  pre niektoré hodnoty  $|C_1|$  môžu byť redukované pod hodnotu  $\hbar/2$ .

Na druhej strane, ak  $\cos^2 \zeta = 1$ , potom fluktuácie  $\langle(\Delta\hat{q})^2\rangle$  sú stlačené. Z rovnice (5.169) vidíme, že stlačenie fluktuácií  $\langle(\Delta\hat{q})^2\rangle$  môžeme pozorovať ak  $|C_1| < 1/\sqrt{2}$ , pričom maximálna redukcia fluktuácií  $\langle(\Delta\hat{q})^2\rangle = 3\hbar/8$  je pozorovateľná pre  $|C_1|=1/2$ .

Z výrazu (5.169) pre variáciu operátorov  $\hat{q}$  a  $\hat{p}$  vidíme, že i superpozícia vákua a stavu s dvoma excitáciami, t.j.  $|\psi\rangle = C_0|0\rangle + C_2|2\rangle$ , vykazuje stlačenie kvantových fluktuácií.

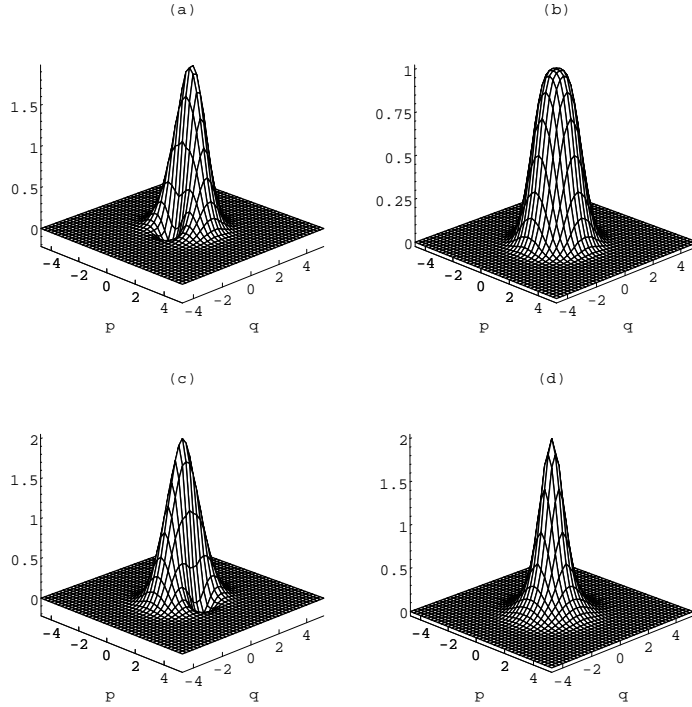
Na obrázku 5.7 sú Wignerove funkcie superpozičných stavov vákua s s Fockovými stavmi s jednou a dvoma excitáciami.

Ďalej sa v krátkosti budeme venovať tomu, ako vďaka kvantovej interferencii medzi Fockovými stavmi vzniká koherentný stav. Koherentný stav  $|\alpha\rangle$  sa dá vyjadriť ako superpozícia Fockových stavov pomocou vzťahu (5.123), kde  $\alpha = |\alpha|\exp(i\vartheta)$ . Wignerovu funkciu  $W_{|\alpha\rangle}(\xi)$  koherentného stavu môžeme reprezentovať cez Wignerove funkcie Fockových stavov  $W_{|n\rangle}(\xi)$  [pozri (5.115)] a interferenčné členy  $W_{|n\rangle\langle m|}(\xi)$  definované vzťahom (5.166):

$$W(\xi, \alpha) = W_{|\alpha\rangle}^M(\xi) + W_{|\alpha\rangle}^I(\xi), \quad (5.170)$$

kde

$$W_{|\alpha\rangle}^M(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} |C_n|^2 W_{|n\rangle}(\xi) \quad (5.171)$$



Obrázok 5.7: Na obrázku (a) je Wignerova funkcia superpozičného stavu  $|\psi\rangle = C_0|0\rangle + C_1|1\rangle$  s  $|C_1| = 1/2$  a  $\zeta = 0$ . Pre porovnanie na obrázku (b) je Wignerova funkcia korešpondujúcej štatistickej zmesi vákua a stavu s jednou excitáciou. Porovnaním vidíme, že Wignerova funkcia superpozičného stavu je “stlačená”. Na obrázku (c) je Wignerova funkcia superpozičného stavu  $|\psi\rangle = C_0|0\rangle + C_2|2\rangle$  s  $|C_2| = 0.303$  a  $\zeta = 0$ . Na obrázku (d) je Wignerova funkcia korešpondujúcej štatistickej zmesi. Wignerove funkcie (b) a (d) popisujúce zmesi sú rotačne invariantné (t.j. fázovo nezávislé). Na druhej strane Wignerove funkcie čistých superpozičných stavov sú fázovo závislé.

a

$$W_{|\alpha\rangle}^I(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m>n}^{\infty} [C_n^* C_m W_{|n\rangle\langle m|}(\xi) + C_m^* C_n W_{|m\rangle\langle n|}(\xi)]. \quad (5.172)$$

S využitím explicitných výrazov pre funkcie  $W_{|n\rangle}(\xi)$  a  $W_{|n\rangle\langle m|}(\xi)$  nájdeme pre Wignerovu funkciu zmesi (5.171) výraz

$$W_{|\alpha\rangle}^M(\xi) = 2 \exp(-2|\alpha|^2 - 2|\xi|^2) J_0(4i|\alpha||\xi|), \quad (5.173)$$

kde  $J_0(z)$  je Besselova funkcia. Ak zoberieme do úvahy, že

$$J_0(4i|\alpha||\xi|) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(4|\alpha|^2|\xi|^2)^n}{(n!)^2}, \quad (5.174)$$

potom vidíme, že funkcia  $W_{|\alpha\rangle}^M(\xi)$  je nezáporná. Táto funkcia korešponduje operátoru hustoty

$$\hat{\rho} = \sum_{n=0}^{\infty} |C_n|^2 |n\rangle\langle n| = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta |\alpha\rangle\langle\alpha| \quad (5.175)$$

ktorý sa dramaticky odlišuje od operátoru hustoty koherentného stavu  $|\alpha\rangle$ . Tento stav sa nazýva fázovo-ustrednený koherentný stav.

Pre interferenčnú časť  $W_{|\alpha\rangle}^I(\xi)$  danú rovnicou (5.172) nájdeme

$$W_{|\alpha\rangle}^I(\xi) = 4 \exp(-2|\alpha|^2 - 2|\xi|^2) \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\cos(\chi m)}{i^m} J_m(4i|\alpha||\xi|), \quad (5.176)$$

kde  $\chi = \vartheta - \varphi$ . Z rovnice (5.176) vidíme, že interferenčný člen je opäť fázovo-závislý. Táto fázová závislosť je vyjadrená i v tom, že integrál tejto Wignerovej funkcie cez celý fázový priestor je rovný nule:

$$\frac{1}{\pi} \int d^2\xi W_{|\alpha\rangle}^I(\xi) = 0, \quad (5.177)$$

pričom pre štatistickú zmes máme

$$\frac{1}{\pi} \int d^2\xi W_{|\alpha\rangle}^M(\xi) = 1. \quad (5.178)$$

Ak teraz využijeme vzťah pre Besselove funkcie

$$J_0(iz) + 2 \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\cos(\chi m)}{i^m} J_m(iz) = \exp[z \cos \chi], \quad (5.179)$$

potom súčet  $W_{|\alpha\rangle}^I$  a  $W_{|\alpha\rangle}^M$  nám dá Wignerovu funkciu koherentného stavu [pozri Eq.(5.126)].

Fockove stavy sú stavy s výrazne neklasickými vlastnosťami o čom svedčí fakt, že ich Wignerove funkcie nadobúdajú záporné hodnoty. V tomto zmysle, nie je prekvapujúce, že kvantová interferencia medzi týmito stavmi vedie k ďalším neklasickým efektom (stlačenie kvantových fluktuácií). Ďalej sa budeme zaoberať kvantovou interferenciou medzi koherentnými stavmi, t.j. stavmi, ktoré by sa dali identifikovať ako najklasickšie spomedzi kvantových stavov. Táto interpretácia je v duchu Schrödingerovho ponímania koherentných stavov ako kvantovej reprezentácie klasických bodov fázového priestoru.

Uvidíme, že interferencia medzi týmito stavmi (opísaná ako nediagonálne elementy v báze koherentných stavov) privádza k neklasickým efektom, ako je stlačenie kvantových fluktuácií či sub-Poissonova štatistika rozdelenia excitácií.



### 5.6.2 Superpozície koherentných stavov

Uvažujme dva typické príklady kvantovej superpozície koherentných stavov  $|\alpha\rangle$  a  $|\alpha\rangle$ :

$$|\alpha_e\rangle = N_e^{1/2} (|\alpha\rangle + |-\alpha\rangle); \quad N_e^{-1} = 2 [1 + \exp(-2|\alpha|^2)], \quad (5.180)$$

a

$$|\alpha_o\rangle = N_o^{1/2} (|\alpha\rangle - |-\alpha\rangle); \quad N_o^{-1} = 2 [1 - \exp(-2|\alpha|^2)], \quad (5.181)$$

ktoré sa odlišujú "iba" fázou amplitúd, ktorá je v druhom prípade zmenená o  $\pi$ . Prvý z týchto superpozičných stavov sa v literatúre nazýva *párny* koherentný stav a druhý zo stavov sa nazýva *nepárny koherentný stav*. Táto terminológia sa používa preto, lebo párny (nepárny) koherentný stav je vo Fockovej báze reprezentovaný superpozíciou Fockových stavov s párnym (nepárnym) počtom excitácií. Oba tieto stavy sú vlastnými stavmi operátora  $\hat{a}^2$ .

Wignerove funkcie párneho (5.180) a nepárneho (5.181) koherentného stavu sa dajú vyjadriť v tvare (ďalej pre jednoduchosť budeme predpokladať, že  $\alpha$  je reálne):

$$W_{|\alpha_e\rangle}(q, p) = N_e [W_{|\alpha\rangle}(q, p) + W_{|-\alpha\rangle}(q, p) + W_{int}(q, p)]; \quad (5.182)$$

a

$$W_{|\alpha_o\rangle}(q, p) = N_o [W_{|\alpha\rangle}(q, p) + W_{|-\alpha\rangle}(q, p) - W_{int}(q, p)], \quad (5.183)$$

kde Wignerove funkcie  $W_{|\pm\alpha\rangle}(q, p)$  koherentných stavov  $|\pm\alpha\rangle$  sú určené vzt'ahom (5.127). Interferenčná časť Wignerových funkcií (5.181) a (5.182) má tvar

$$W_{int}(q, p) = \frac{2}{\sigma_q \sigma_p} \exp \left[ -\frac{\bar{q}^2}{2\hbar\sigma_q^2} - \frac{p^2}{2\hbar\sigma_p^2} \right] \cos \left( \frac{\bar{q}p}{\hbar\sigma_q\sigma_p} \right), \quad (5.184)$$

kde  $\bar{q} = \sqrt{2\hbar}\alpha$  ( $\alpha$  je reálne) a variácie  $\sigma_q^2$  a  $\sigma_p^2$  sú určené vzt'ahom (5.129). Z rovníc (5.182)-(5.183) vyplýva, že párne a nepárne koherentné stavy sa navzájom odlišujú "iba" znamienkom pri interferenčnej časti. Práve však rozdiel vo fáze pri interferenčnom člene je zdrojom dramaticky odlišných neklasických vlastností týchto superpozičných stavov. Na obrázku 5.8 sú prezentované Wignerove funkcie párneho a nepárneho koherentného stavu ako i stavu, ktorý je štatistickou zmesou dvoch koherentných stavov. Táto štatistická zmes je popísaná operátorom hustoty

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} |\alpha\rangle\langle\alpha| + \frac{1}{2} |-\alpha\rangle\langle-\alpha|. \quad (5.185)$$

Z obrázku 5.8 jasne vidíme, že Wignerova funkcia stavu (5.185) je všade pozitívna, zatiaľ čo Wignerove funkcie párneho a nepárneho koherentných stavov nadobúdajú i záporné hodnoty.

S pomocou Wignerovej funkcie (5.182) spočítame stredné hodnoty momentov operátorov polohy a hybnosti  $\hat{q}$  a  $\hat{p}$ . Stredné hodnoty prvých momentov týchto operátorov sú nulové, t.j.  $\langle\hat{q}\rangle = \langle\hat{p}\rangle = 0$ , zatiaľ čo pre vyššie momenty nájdeme

$$\begin{aligned} \langle\hat{q}^2\rangle &= \frac{\hbar}{2} (1 + 8N_e\alpha^2); \\ \langle\hat{p}^2\rangle &= \frac{\hbar}{2} (1 - 8N_e\alpha^2 e^{-2\alpha^2}); \\ \langle\hat{q}^4\rangle &= \frac{3\hbar^2}{4} \left[ 1 + 16N_e\alpha^2 \left( 1 + \frac{2}{3}\alpha^2 \right) \right]; \\ \langle\hat{p}^4\rangle &= \frac{3\hbar^2}{4} \left[ 1 - 16N_e\alpha^2 e^{-2\alpha^2} \left( 1 - \frac{2}{3}\alpha^2 \right) \right]. \end{aligned} \quad (5.186)$$

Z rovníc (5.186) vyplýva, že párny koherentný stav vykazuje stlačenie kvantových fluktuácií operátora  $\hat{p}$ . Znamená to teda, že špecifická kvantová interferencia typická pre párny koherentný stav je zdrojom stlačenia kvantových fluktuácií operátora hybnosti. Súčasne však táto interferencia spôsobuje super-Poissonove rozdelenie excitácií v tomto stave. Aby sme sa o tomto presvedčili vypočítame rozdelenie počtu excitácií v párnom koherentnom stave, pre ktoré nájdeme

$$\begin{aligned} P_{2n} &= \frac{2 \exp(-\alpha^2)}{1 + \exp(-2\alpha^2)} \frac{\alpha^{4n}}{(2n)!}; \\ P_{2n+1} &= 0. \end{aligned} \quad (5.187)$$

Oscilácie rozdelenia počtu excitácií  $P_n$  (5.187) sú veľmi podobné osciláciám v prípade stlačených stavov (a ako sa presvedčíme neskôr, majú de facto rovnaký pôvod - kvantovú interferenciu). Stredný počet excitácií v párnom koherentnom stave je  $\bar{n} = \alpha^2 \tanh \alpha^2$  a pre Mandelov  $Q$  parameter nájdeme

$$Q = \frac{4\alpha^2 \exp(-2\alpha^2)}{1 - \exp(-4\alpha^2)} > 0, \quad (5.188)$$

Z jeho pozitívnosti pre všetky hodnoty  $\alpha^2$  vyplýva, že párny koherentný stav má super-Poissonovu štatistiku rozdelenia excitácií.

Na druhej strane nepárne koherentné stavy sa odlišujú od párných tým, že kvantová interferencia privádza k redukcii fluktuácií v určení počtu excitácií (t.j. sub-Poissonovej štatistiky). Pre rozdelenie počtu excitácií v nepárnych koherentných stavoch nájdeme výraz

$$\begin{aligned} P_{2n+1} &= \frac{2 \exp(-\alpha^2)}{1 - \exp(-2\alpha^2)} \frac{\alpha^{4n+2}}{n!}; \\ P_{2n} &= 0. \end{aligned} \quad (5.189)$$

Potom ľahko nájdeme stredný počet excitácií v tých stavoch  $\bar{n} = \alpha^2 \coth \alpha^2$  a pre Mandelov  $Q$  parameter nájdeme

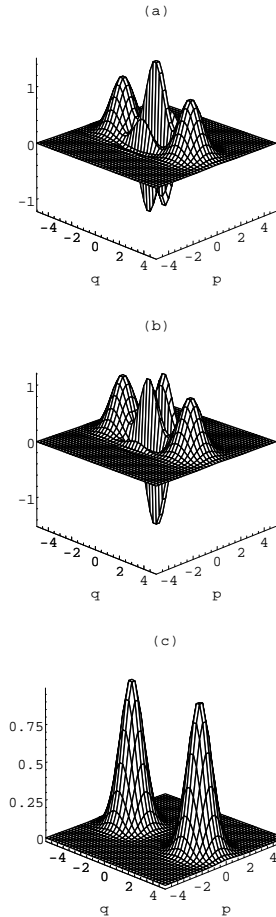
$$Q = -\frac{4\alpha^2 \exp(-2\alpha^2)}{1 - \exp(-4\alpha^2)} < 0, \quad (5.190)$$

odkiaľ je zrejmé, že nepárny koherentný stav má sub-Poissonian štatistiku (poznáme, že tento neklasický jav je najlepšie pozorovateľný pri malých hodnotách stredného počtu excitácií  $\bar{n}$ , t.j. pri  $\alpha^2 \rightarrow 0$ ). Práve v tejto limite (t.j. keď  $\bar{n} \rightarrow 1$ ) dostaneme  $Q \rightarrow -1$ . Je to pochopiteľné, pretože v tejto limite sa nepárny koherentný stav rovná Fockovmu stavu [1].

### 5.6.3 Jedno-rozmerné kontinuálne superpozície koherentných stavov

V predchádzajúcej časti sme si povedali, že párny koherentný stav má redukované kvantové fluktuácie v určení hybnosti. Dá sa ukázať, že miera stlačenia týchto fluktuácií sa ešte zväčší ak k pôvodným dvom koherentným stavom  $|\alpha\rangle$  a  $|-\alpha\rangle$  pridáme ešte ďalší pár koherentných stavov  $|\beta\rangle$  a  $|-\beta\rangle$  (predpokladajme pre jednoduchosť, že  $\beta$  a  $\alpha$  sú reálne)

$$|\Psi\rangle = A^{1/2} [p_\alpha (|\alpha\rangle + |-\alpha\rangle) + p_\beta (|\beta\rangle + |-\beta\rangle)], \quad (5.191)$$



Obrázok 5.8: Wignerove funkcie párneho (a) a nepárneho (b) koherentného stavu. Pre porovnanie je prezentovaná i Wignerova funkcia pre štatistickú zmes dvoch koherentných stavov (c). Amplitúdy koherentných stavov  $|\alpha\rangle$  a  $|-\alpha\rangle$  sú reálne a  $\alpha = 2$ .

kde  $p_{\alpha,\beta}$  sú nejaké číselné parametre a  $A$  je normalizačnou konštantou. Pre vhodne zvolené hodnoty  $\alpha$  a  $\beta$  stav (5.191) vykazuje silné stlačenie kvantových fluktuácií (silnejšie ako v prípade párneho koherentného stavu). Ak budeme teda pokračovať v pridávaní koherentných stavov do superpozície (5.191) môžeme zvyšovať maximálny stupeň stlačenia. V princípe môžeme prejsť do kontinuálnej limity, a definovať jednorozmernú superpozíciu koherentných stavov na priamke vo fázovom priestore

$$|\xi\rangle = C_F \int_{-\infty}^{\infty} F(\alpha, \xi) d\alpha |\alpha\rangle; \quad (5.192)$$

kde  $\alpha$  je reálny parameter a

$$C_F^{-2} = \int \int_{-\infty}^{\infty} F(\alpha, \xi) F(\alpha', \xi) \exp[-(\alpha - \alpha')^2/2] d\alpha d\alpha'. \quad (5.193)$$

Ak vhodne zvolíme pravdepodobnostné rozdelenie  $F(\alpha, \xi)$ , potom superpozičný stav (5.192) vykazuje veľký stupeň stlačenia, ktorý pre daný stredný počet excitácií môžeme maximalizovať ak zvolíme  $F(\alpha, \xi)$  ako Gaussovú funkciu

$$F(\alpha, \xi) = \exp\left[-\frac{(1-\xi)}{2\xi}\alpha^2\right], \quad (5.194)$$

v tomto prípade stav (5.192) je identický stlačenému vákuu, t.j.

$$|\xi\rangle = C_F \int_{-\infty}^{\infty} F(\alpha, \xi) \hat{D}(\alpha) |0\rangle d\alpha = \hat{S}(\xi) |0\rangle, \quad (5.195)$$

kde  $\hat{S}(\xi)$  je operátor stlačenia a  $\hat{S}(\xi)|0\rangle$  je stlačené vákuum.

Na druhej strane nepárny koherentný stav vykazuje sub-Poissonovu štatistiku. Ukazuje sa, že môžeme zostrojiť superpozíciu koherentných stavov  $|\alpha|e^{-i\varphi}\rangle$  s rovnakou amplitúdou  $|\alpha|$  a vhodne zvolenými fázami, tak, že miera sub-Poissonovej štatistiky sa ešte prehĺbi. V kontinuálnej limite môžeme nájsť superpozíciu koherentných stavov na kruhu vo fázovom priestore, ktorá sa rovná Fockovmu stavu (stavu s maximálnou sub-Poissonovou štatistikou), t.j.

$$|n\rangle = A_n(r) \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi e^{-in\varphi} |r e^{i\varphi}\rangle, \quad \alpha = r e^{i\varphi} \quad (5.196)$$

kde  $A_n(r)$  je normovacia konštanta

$$A_n(r) = \frac{\sqrt{n!} r^{-n}}{2\pi} e^{r^2/2}. \quad (5.197)$$

Inými slovami - jednorozmerná kontinuálna superpozícia koherentných stavov na kruhu s vhodne zvolenými fázami je identická Fockovmu stavu  $|n\rangle$ .

# Kvantová teória prenosu informácie

April 18, 2000

## 1 Úvod

Vznik *teórie informácie* sa datuje od roku 1948, kedy Shannon matematicky zadefinoval pojmy informácie, informačného zdroja a komunikačného kanála. S informáciou môžeme v podstate robiť dve základné operácie, a sice môžeme ju meniť (transformovať), alebo ju prenášať, či už v čase (uchovávať v pamäti), alebo v priestore (komunikácia). Na základe tohoto môžeme teóriu informácie rozdeliť na oblasť, ktorá sa zaoberá počítaním (transformovaním informácie) a oblasť zaoberajúcu sa prenosom. Práve o prenose budeme v ďalšom hovoriť. Najprv musíme zodpovedať dve otázky:

- prečo fyzika vstupuje do teórie informácie
- čo je to informácia a koľko informácie je v “niečom” obsiahnutej

Všetky manipulácie s informáciou sa uskutočňujú na zariadeniach, ktoré pracujú na fyzikálnych princípoch. Pôvod tohoto faktu je v tom, že samotná informácia je “zakódovaná” do stavov fyzikálnych systémov, resp. do výsledku nejakého merania. Napríklad môžeme logickú nulu reprezentovať červenou guľičkou a jednotku modrou guľičkou. Pozorovaním farby guľičky získame výsledok modrá alebo červená. Z tohto výsledku vieme, čo nám chcel niekto povedať, t.j. či nula alebo jedna. Tento výsledok budeme ďalej nazývať *javom* a pýtame sa práve na množstvo informácie obsiahnutej v tomto výsledku, resp. v meraní. V nasledujúcich riadkoch sa pokúsime motivovať zavedenie pojmu informácie a jeho fyzikálny obsah.

O čom vlastne hovoríme, keď hovoríme o informácii? Našu otázku, koľko informácie obsahuje nejaký jav, musíme spresniť. Napríklad iný informačný obsah má DNA pre chémiu a iný pre biológiu. Musíme sa preto pýtať na kontext, o ktorom má informácia hovoriť. To znamená, že sa pýtame na množstvo informácie v nejakom jave o nejakom inom jave, napr. koľko nám hovorí určitá časť DNA o pohlaví diéťat'a. Daný jav je vždy spojený s nejakým systémom a s nejakým pozorovaním na tomto systéme. Naša otázka na množstvo informácie je potom otázkou, koľko nám výsledok jedného pozorovania hovorí o výsledku iného pozorovania. Z praxe (fyziky) vieme, že výsledky merania sú vo všeobecnosti náhodnými javmi. Ak náš pojem javu stotožníme s pojmom javu, ako sa vyskytuje v teórii pravdepodobnosti, tak získame pravdepodobnostné rozdelenie na množine všetkých javov, ktoré môžeme stotožniť s pojmom pozorovanie. To znamená, že sa zaujímate o množstvo informácie, ktorú obsahuje jedna pravdepodobnostná distribúcia (opisujúca pozorovanie) o inej.

## 2 Teória informácie

### 2.1 Pojem informácie

Z predchádzajúceho vidíme, že pojem informácie súvisí s pravdepodobnostnými distribúciami definovanými na danom systéme. Začneme zadefinovaním pojmu f-divergencie. Motiváciou k zavedeniu pojmu f-divergencie je problém kvantitatívneho posúdenia podobnosti dvoch pravdepodobnostných modelov toho istého reálneho systému. Pri pevnom  $\mathbf{X}$  ide o rozlíšiteľnosť hustôt pravdepodobností, alebo im príslušných pravdepodobností.

**Definícia:** *f-divergenciu* budeme označovať  $D_f(P_1, P_2)$  a definovať pre ľubovoľnú *konvexnú* funkciu  $f$ , t.j.  $f(z)$  je spojitá a ku každému  $z_0$  existuje  $\lambda(z_0)$  také, že platí  $f(z) \geq f(z_0) + \lambda(z_0)(z - z_0)$  pre  $z \neq z_0$ , definovanú na  $(0, \infty)$ , ktorá je navyše *striktne konvexná* v bode  $z = 1$ , t.j.  $f(z) > f(1) + \lambda(z - 1)$  pre  $z \neq 1$ , výrazom

$$D_f(P_1, P_2) = \sum_{x \in \mathbf{X}} p_2(x) f\left(\frac{p_1(x)}{p_2(x)}\right). \quad (1)$$

Za maximálne divergentné (nepodobné) je prirodzené považovať také modely, v ktorých sú pravdepodobnosti  $P_1$  a  $P_2$  *ortogonálne*, t.j. existujú disjunktné podmnožiny  $E, F \subset \mathbf{X}$ , pre ktoré platí  $P_1(E) = 1$  a  $P_2(F) = 1$ .

Ak zadefinujeme funkciu  $\tilde{f}(z) = f(z) - f(1)$ , tak pre  $f$  je konvexnú a striktne konvexnú v  $z = 1$  tieto vlastnosti má aj  $\tilde{f}$ , pričom  $\tilde{f}(1) = 0$ . Teda môžeme bez narušenia všeobecnosti definície f-divergencie predpokladať, že  $f(1) = 0$ .

Pre f-divergenciu platia tieto nerovnosti

$$0 \leq D_f(P_1, P_2) \leq f(0) + \lim_{z \rightarrow \infty} \frac{f(z)}{z}$$

kde ľavá rovnosť platí, ak  $P_1 = P_2$ , lebo vtedy  $\frac{p_1}{p_2} = 1$  a  $f(1) = 0$ . Pravá rovnosť, ak (v prípade  $f(0) + \lim_{z \rightarrow \infty} \frac{f(z)}{z} < \infty$  práve vtedy, keď) sú navzájom ortogonálne. Uvedieme si niekoľko príkladov f-divergencií:

- **I-divergencia:**  $f(z) = z \log(z)$  a analytické vyjadrenie

$$I(P_1, P_2) = \sum_{x \in \mathbf{X}} p_1(x) \log \frac{p_1(x)}{p_2(x)}$$

- **$\beta$ -divergencia:**  $f(z) = |z^\beta - 1|^{1/\beta}$  pre  $\beta \in (0, 1)$ , ktorá sa pre  $\beta=2$  nazýva *Hellingerova vzdialenosť* a má nasledovné analytické vyjadrenie

$$D_{1/2} = 2(1 - \sum_{x \in \mathbf{X}} (p_1(x)p_2(x))^{1/2})$$

- **$\alpha$ -divergencia:**  $f(z) = \text{sign}(\alpha - 1)(z^\alpha - 1)$  pre  $\alpha \in (0, \infty)$
- **$\chi$ -divergencia:**  $f(z) = |z - 1|^\alpha$ , ktorá sa pre  $\alpha = 1$  nazýva *totálnou variáciou* a má tvar

$$\chi^1(p_1, p_2) = \sum_{x \in \mathbf{X}} |p_1(x) - p_2(x)|$$

f-divergencia nám hovorí nakoľko sa dve pravdepodobnostné distribúcie podobajú, resp. sú rozlíšiteľné. Pri informácii nám však ide o niečo iné. Je zrejme, že dve distribúcie musia byť navzájom závislé, aby obsahovali nejakú informáciu jedna o druhej. Ide nám teda vlastne o miery tejto závislosti, ktoré budeme nazývať f-informácie. Uvažujme teraz, že  $P_{\xi\eta}$  je výberová pravdepodobnosť dvoch náhodných veličín  $\xi, \eta$ , t.j. máme  $p_{\xi\eta}$  na výberovom priestore  $X \times Y$ , kde  $X, Y$  sú výberové priestory jednotlivých veličín. Zadefinujme marginálne pravdepodobnosti

$$p_\xi(x) := \sum_{y \in Y} p_{\xi\eta}(x, y)$$

$$p_\eta(y) := \sum_{x \in X} p_{\xi\eta}(x, y).$$

V prípade, že niektorý z výberových priestorov z  $X, Y$  je spojitý, t.j. interval z  $\mathbf{R}$ , tak príslušné sumy prejdú na integrály podľa pravidla  $\sum_{x \in X} \rightarrow \int_X dx$ . Pravdepodobnosť  $P_{\xi\eta}$  bude hrať úlohu  $P_1$  v predošlom a úlohu  $P_2$  bude hrať  $P_{\xi} \times P_{\eta}$ , t.j. máme určené všetky objekty, ktoré vystupujú v definícii f-divergencie a teda f-divergencia nám určuje mieru nezávislosti dvoch náhodných veličín, lebo pre nezávislé veličiny platí  $p_{\xi\eta}(x, y) = p_{\xi}(x)p_{\eta}(y)$  a teda  $D_f(P_{\xi\eta}, P_{\xi} \times P_{\eta}) = 0$ .

**Definícia:** f-informáciou vo veličine  $\eta$  o veličine  $\xi$  nazveme funkciu definovanú nasledovne

$$I_f(\xi, \eta) := D_f(P_{\xi\eta}, P_{\xi} \times P_{\eta}) \quad (2)$$

Tento vzťah vyjadruje intuitívne chápanie: čím väčšia je štatistická väzba medzi  $\xi$  a  $\eta$ , tým viacej informácie musí niesť  $\eta$  o  $\xi$  a aj naopak, pričom platí

$$I_f(\xi, \eta) = I_f(\eta, \xi).$$

Ku každej f-divergencii je priamo z definície priradená f-informácia. My si uvedieme iba Shannonovu informáciu, ktorá prislúcha l-divergencii:

$$I(\xi, \eta) = \sum_{x \in X} \sum_{y \in Y} p_{\xi\eta}(x, y) \log \frac{p_{\xi\eta}(x, y)}{p_{\xi}(x)p_{\eta}(y)} \quad (3)$$

Každú  $I(\xi, \eta)$  môžeme chápať ako mieru množstva informácie, ktoré získame o realizácii  $\xi$ , ak pozorujeme realizáciu  $\eta$  za predpokladu, že obidve tieto realizácie boli získané pri náhodnom pokuse, ktorý sa riadi pravdepodobnosťou  $P_{\xi\eta}$  na  $X \times Y$ . Všimnime si, že nehovoríme o konkrétnych realizáciách  $\xi$  alebo  $\eta$ . Takže ide o globálnu mieru informácie, ktorá ale nič nehovorí o tom, že ak pri realizácii  $\eta$  nameriame konkrétne  $y \in Y$ , tak koľko informácie mám o nejakom konkrétnom  $x \in X$ .

**Definícia:** f-informáciou v realizácii  $\eta = y$  o realizácii  $\xi = x$  nazveme funkciu

$$I_f(x, y) = \frac{p_{\xi}(x)p_{\eta}(y)}{p_{\xi\eta}(x, y)} f \left( \frac{p_{\xi\eta}(x, y)}{p_{\xi}(x)p_{\eta}(y)} \right).$$

Táto funkcia síce môže byť záporná, ale je nulová, ak sú javy  $\xi = x$  a  $\eta = y$  nezávislé, t.j. platí  $p_{\xi}(x)p_{\eta}(y) = p_{\xi\eta}(x, y)$ . Pre  $I_f(\xi, \eta)$  potom platí

$$I_f(\xi, \eta) = \sum_{x \in X} \sum_{y \in Y} I_f(x, y) p_{\xi\eta}(x, y)$$

## 2.2 Entropia a informácia

Iné odvodenie Shannonovej informácie vychádza z pojmu entropie. Vo fyzike sa skôr ako pojem informácie zaviedol pojem neurčitosti (alebo neznalosti) fyzikálneho systému. Miera tejto neurčitosti sa nazýva entropiou. Vyjadruje vlastne informáciu, ktorá nám o systéme chýba, a ktorej dôsledkom je pravdepodobnostný opis takéhoto systému. Pod pravdepodobnostným opisom fyzikálneho systému rozumieme, že vieme určiť pravdepodobnostné rozdelenia výsledkov všetkých meraní. Tejto požiadavke vyhovuje pojem stavu fyzikálneho systému. Tu opäť vidno vstup fyziky do teórie informácie.

Pre meranie vieme predpovedať iba pravdepodobnosti výsledkov, t.j. poznáme pravdepodobnostnú distribúciu výsledkov. Vieme, že pri  $n$  opakovaných meraniach na rovnako pripravených  $n$  systémoch, pre  $n$  dostatočne veľké, očakávame  $n_i = np_i$  výsledkov typu  $i$ . Počet rôznych možností ako konkrétne vyzerajú jednotlivé výsledky pri  $n$  meraniach je  $n!/(n_1!n_2! \dots)$ . Pre  $n \rightarrow \infty$  a s použitím Stirlingovho vzorca dostávame

$$\log \frac{n!}{n_1!n_2! \dots} = n \log n - n - \sum_i (n_i \log n_i - n_i) = -n \sum_i p_i \log p_i.$$

Výraz

$$S := - \sum_{i=1}^N p_i \log p_i \quad (4)$$

nazývame entropiou pravdepodobnostnej distribúcie  $\{p_1 \dots p_N\}$ . Táto kvantita vyjadruje mieru našej nevedomosti pre dané meranie a daný stav systému. Nezávisí od počtu  $n$  uskutočnených meraní. Dopredu nevieme aký výsledok konkrétne nameriame a pri  $n$  meraniach je počet rôznych možných postupností výsledkov rovný  $2^{-nS}$ . Čím viacej rôznych postupností existuje, tým viac o systéme nevieme (alebo zanedbávame v prípade klasickej teórie).

Ak pravdepodobnostná distribúcia  $p_i = 1/N$  pre všetky  $i = 1, \dots, N$ , tak sa entropia rovná  $\log N$  a je maximálna.

Pre ľubovoľnú distribúciu vieme teda určiť jej entropiu. Ak uvážime, že vieme podmienenú hustotu pravdepodobnosti veličiny  $A$ , ak bola realizovaná hodnota  $b$  veličiny  $B$ , t.j.  $p_{a|b}(x|y)$ , tak entropiu tejto distribúcie  $A$  nazývame relatívna entropia, a označujeme ju  $S(A|B)$ . Ak poznáme pravdepodobnosť  $p_{ab}$ , tak podmienenú pravdepodobnosť definujeme

$$p_{a|b}(x, y) = \frac{p_{ab}(x, y)}{p_b(y)}, \quad (5)$$

ak  $p_b(y) \neq 0$ . Inak je podmienená pravdepodobnosť ľubovoľná. Teda pre relatívnu entropiu platí

$$S(A|B) = - \sum_{x \in X} \sum_{y \in Y} p_b(y) p_{a|b}(x, y) \log p_{a|b}(x, y).$$

Pri interpretácii entropie ako miery neznalosti o systéme opísanom pravdepodobnostnou distribúciou prideme k záveru, že

$$(neznalosť A) - (neznalosť A pri znalosti B) = (informácia v B o A)$$

$$I(A, B) = S(A) - S(A|B).$$

Poznamenajme, že predchádzajúce vzťahy sú myslené v priemere cez všetky informácie javov  $y$  o javoch  $x$ . Po dosadení do posledného vzťahu dostávame

$$I(A|B) = \sum_x \sum_y -p_a(x) \log p_a(x) + p_b(y) p_{a|b}(x, y) \log p_{a|b}(x, y).$$

Teraz opätovne použijeme definičný vzťah (5),  $p_a(x) = \sum_y p_{ab}(x, y)$  dostaneme

$$I(A|B) = \sum_x \sum_y p_{ab}(x, y) (-\log p_a(x) + \log \frac{p_{ab}(x, y)}{p_b(y)})$$

$$I(A|B) = \sum_x \sum_y p_{ab}(x, y) \log \left( \frac{p_{ab}(x, y)}{p_b(y)p_a(x)} \right),$$

čo je to isté ako v (3).

Ďalej rozšírime pojem entropie pre kvantové systémy. V kvantovej teórii sú pravdepodobnosti výsledkov merania  $A = \sum_a a E_a$  určené vzťahom

$$Pr(a) = Tr(E_a \rho)$$

a teda sú jednoznačne dané maticou hustoty. Maximálna hodnota entropie zodpovedá maximálnej zmesi. Opačným prípadom je prípad vlastného stavu pozorovateľnej, kedy je entropia nulová. Vtedy existuje meranie, ktoré tento čistý stav jednoznačne určuje.

Zadefinujeme entropiu prípravy stavu, ako najnižšiu hodnotu (4) pre všetky ortogonálne merania. Optimálnym meraním, ktoré minimalizuje  $S$  je meranie vo vlastných stavoch operátora matice hustoty, pre ktoré

$$S = - \sum_{\mu} \lambda_{\mu} \log \lambda_{\mu},$$

kde  $\lambda_{\mu}$  sú vlastné hodnoty tohto operátora. Matica hustoty opisujúca systém má v báze vlastných vektorov tvar

$$\varrho = \sum_{\mu} \lambda_{\mu} |\phi_{\mu}\rangle \langle \phi_{\mu}|.$$

Iné meranie je opísané množinou ortogonálnych projektorov  $\{|\psi_1\rangle \langle \psi_1|, \dots, |\psi_N\rangle \langle \psi_N|\}$ . Ak robíme stopu v báze vlastných stavov matice hustoty, tak dostávame pre jednotlivé výsledky meraní  $a_i$  pre  $i = 1, \dots, N$

$$Pr(a_i) = \sum_{\mu} \lambda_{\mu} |\langle \psi_i | \phi_{\mu} \rangle|^2 = \sum_{\mu} \lambda_{\mu} p_{\mu i}.$$

Našou úlohou je porovnať entropiu pre meranie v báze vlastných stavov matice hustoty  $S = S(\lambda_{\mu})$  a entropiu pre ľubovoľné iné ortogonálne meranie  $S = S(\sum_{\mu} \lambda_{\mu} p_{\mu i})$ .

Počítajme rozdiel

$$\begin{aligned} S(\sum_{\mu} \lambda_{\mu} p_{\mu i}) - S(\lambda_{\mu}) &= \sum_{\mu} \lambda_{\mu} \log \lambda_{\mu} - \sum_i \sum_{\mu} \lambda_{\mu} p_{\mu i} \log (\sum_{\mu} \lambda_{\mu} p_{\mu i}) = \\ &= \sum_{\mu} \lambda_{\mu} (\log \lambda_{\mu} - \sum_i p_{\mu i} \log (Pr(a_i))) = \sum_{\mu, i} \lambda_{\mu} p_{\mu i} \log (\lambda_{\mu} / Pr(a_i)), \end{aligned}$$

kde sme využili, že vďaka ortogonálnosti merania platí  $\sum_i p_{\mu i} = 1$ . Ďalej platí  $\log x \geq 1 - x^{-1}$  a

$$S(Pr(a_i)) - S(\lambda_{\mu}) \geq \sum_{\mu, i} \lambda_{\mu} p_{\mu i} (1 - Pr(a_i) / \lambda_{\mu}) = 0.$$

Vidno teda, že meranie v báze vlastných stavov matice hustoty je optimálne v zmysle, že entropia pravdepodobnostnej distribúcie výsledkov je pri ňom najnižšia. Entropia prípravy, alebo entropia stavu  $\varrho$ , je teda

$$S = -Tr(\varrho \log \varrho). \quad (6)$$

Relatívnou entropiou  $S(\sigma || \varrho)$  nazývame nasledujúci výraz

$$S(\sigma || \varrho) = Tr(\varrho (\log \varrho - \log \sigma)),$$

kde  $\varrho$  a  $\sigma$  sú dva stavy toho istého systému.

Uvedieme niektoré matematické vlastnosti entropie:

1. Invariantnosť pri unitárnej transformácii  $S(U \varrho U^+) = S(\varrho)$ .
2. Subaditívnosť

$$S(\varrho_{AB}) \leq S(\varrho_A) + S(\varrho_B),$$

kde  $\varrho_A = Tr_B(\varrho_{AB})$  a  $\varrho_B = Tr_A(\varrho_{AB})$ . Rovnosť nastáva v prípade, akk  $\varrho_{AB} = \varrho_A \otimes \varrho_B$ . Táto nerovnosť nám hovorí, že časť informácie je v koreláciách medzi systémami.

3. Araki-Liebova nerovnosť (trojuholníková nerovnosť)

$$S(\varrho_{AB}) \geq |S(\varrho_A) - S(\varrho_B)|.$$

4. Silná subaditívnosť

$$S(\varrho_{ABC}) + S(\varrho_B) \leq S(\varrho_{AB}) + S(\varrho_{BC}).$$

### 3 Základné pojmy teórie prenosu informácie

Teraz prejdeme k opisu prenosu informácie. Informácia bude daná *správou*, ktorú tvorí postupnosť ľubovoľných znakov z nejakej fixnej množiny, v ktorých je informácia obsiahnutá. Znak budeme nazývať *písmenom* a množinu písmen *abecedou*. Správa bude teda usporiadanou množinou písmen z abecedy. Pri prenose správy prichádza k jej skresleniu, lebo fyzikálne je každé prenášané písmeno správy stotožnené so stavom systému, ktorý je počas prenosu v interakcii s prostredím. Vplyvy prostredia nazývame spoločným názvom *šum*. Tento šum práve charakterizuje prenosové zariadenie, ktoré nazývame *komunikačným kanálom*. Z dôvodu existencie šumu je prirodzenou snahou prenášať iba podstatnú informáciu, t.j. informáciu potrebnú pre vlastné rozhodovanie prijímateľa. Napríklad namiesto správy  $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_N)$  nám stačí poslať hodnotu nejakej funkcie  $T(\mathbf{x})$  na množine správ, pretože táto je podstatná pre prijímateľa, aj keď je nepochybne v celej správe informácie viac.

Celá situácia prenosu informácie sa dá opísať nasledovne: Zo zdroja informácie získame správu v abecede  $\mathbf{X}$  zdroja. Keďže všeobecne nemusí platiť, že abeceda zdroja je zhodná so vstupnou abecedou komunikačného kanála  $\mathbf{A}$ , a teda musíme prepísať správu z jednej abecedy do druhej. Tento prepis voláme *kódovanie*<sup>1</sup>. Podobná situácia nastáva aj na konci komunikačného kanála, kde musíme prepísať výstupnú správu z výstupnej abecedy  $\mathbf{B}$  do abecedy prijímateľa  $\mathbf{Y}$ , čo nazývame *dekódovaním*.

Teraz matematicky popíšeme komunikačný kanál.

**Definícia:** Komunikačný kanál  $\mathbf{K}$  definujeme, pre  $M = 1, 2, \dots$ , ako postupnosť trojíc  $(\mathbf{A}^M, p^M(\cdot | \cdot), \mathbf{B}^M)$ , kde  $\mathbf{A}$  je vstupná abeceda a  $\mathbf{B}$  je výstupná abeceda komunikačného kanála.  $\{p^M(\cdot | \mathbf{a}) : \mathbf{a} \in \mathbf{A}^M\}$  je rodina pravdepodobnostných hustôt na množine  $\mathbf{B}^M$  výstupných správ, pričom sa o nich predpokladá konzistentnosť v nasledovnom zmysle

$$p^M(b_1, \dots, b_M | a_1, \dots, a_M) = \sum_{b_{M+1} \in \mathbf{B}} p^{M+1}(b_1, \dots, b_{M+1} | a_1, \dots, a_{M+1})$$

pre všetky  $\mathbf{a} \in \mathbf{A}^{M+1}$ ,  $\mathbf{b} \in \mathbf{B}^M$ .

V našej definícii predpokladáme, že počet písmen  $M$  v správe sa pri prenose nemení. Komunikačný kanál opisuje v jazyku teórie pravdepodobnosti, ako sa vstupná správa  $\mathbf{a}$  transformuje na výstupnú správu  $\mathbf{b}$ . Táto transformácia je deterministická iba v prípade, ak  $p^M(\mathbf{b} | \mathbf{a}) = 1$  pre niektorú  $\mathbf{b} = \mathbf{b}(\mathbf{a}) \in \mathbf{B}^M$ . Všeobecne ide o stochastickú transformáciu opísanú hustotou pravdepodobnosti  $p^M(\cdot | \mathbf{a})$  na  $\mathbf{B}^M$ . Samotné  $p^M(\mathbf{b} | \mathbf{a})$  určuje pravdepodobnosť, že pri výstupnej správe  $\mathbf{b}$  bola na vstupe správa  $\mathbf{a}$ .

Podmienka konzistencie spája hustoty pravdepodobností, ktoré definujú komunikačný kanál, pri prenosoch správ rôznych dĺžok. Ak by bola pravdepodobnosť naľavo väčšia, tak pri poslaní správy o jedno písmeno dlhšej by bola istá pravdepodobnosť, že na konci prenosu bude jedno písmeno chýbať. Naopak si predstavme, že sa nezaujímame o posledné písmeno správy. Pri opačnej nerovnosti by sme potom s väčšou pravdepodobnosťou určili o písmeno kratšiu správu, ako pri prenose iba tejto samotnej (kratšej) správy. Je rozumné takéto prenosy nepovažovať za prenosy cez komunikačný kanál.

Komunikačný kanál nazývame *bezpečným*, akk na výstupnej abecede  $\mathbf{B}$  existuje rodina hustôt pravdepodobností  $\{p(\cdot | a) : a \in \mathbf{A}\}$ , pre ktorú

$$p^M(\mathbf{b} | \mathbf{a}) = \prod_{i=1}^M p(b_i | a_i) \quad M = 1, 2, \dots$$

<sup>1</sup>To znamená, že kódujeme nielen, keď chceme správu utajiť.

Uvedená podmienka konzistencie je potom splnená a každý bezpamät'ový kanál je určený trojicou  $(\mathbf{A}, p(\cdot|\cdot), \mathbf{B})$ . Bepamät'ovosť komunikačného kanála je v tom, že poslanie písmena neovplyvňuje jeho pôsobenie na neskoršie poslané písmená, t.j. nepamätá si, čo už preniesol. Alebo v reči pravdepodobnosti posielania písmen cez komunikačný kanál sú nezávislé javy a teda spoločná pravdepodobnosť javu (celej správy) sa rovná súčinu jednotlivých javov (písmen), čo je štatistickým vyjadrením nezávislosti. Takýto komunikačný kanál môžeme opísať maticou  $p(j|i)$ , kde  $j = 1, \dots, m$  a  $i = 1, \dots, n$ , kde  $n$  je počet písmen v abecede  $\mathbf{A}$  a  $m$  je počet písmen v abecede  $\mathbf{B}$ .

Ak na vstup príde správa  $\mathbf{a}$ , tak výstupná správa je náhodný vektor s výberovým priestorom  $(\mathbf{B}^M, p^M(\cdot|\mathbf{a}))$ . Akákoľvek hustota  $\pi^M$  na množine vstupných správ  $\mathbf{A}^M$  definuje náhodnú vstupnú správu s výberovým priestorom  $(\mathbf{A}^M, p_\alpha^M(\mathbf{a}) = \pi^M(\mathbf{a}))$ . Na výstupe komunikačného kanála pozorujeme náhodné správy  $\mathbf{b} \in \mathbf{B}^M$  s pravdepodobnosťou  $p_\beta^M(\mathbf{b}) = \sum_{\mathbf{a} \in \mathbf{A}^M} p^M(\mathbf{b}|\mathbf{a})\pi^M(\mathbf{a})$ . Pravdepodobnosť, že na vstupe je správa  $\mathbf{a}$  a na výstupe je správa  $\mathbf{b}$  je  $p_{\alpha\beta}^M(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = p^M(\mathbf{b}|\mathbf{a})\pi^M(\mathbf{a})$ . Teraz sa môžeme sa zaujímať o Shannonovu informáciu (3) o správach  $\alpha \in \mathbf{A}^M$ , ak na výstupe pozorujeme správy  $\beta \in \mathbf{B}^M$ . Dosadením príslušných pravdepodobnostných distribúcií do (3) dostaneme pre Shannonovu informáciu

$$I(\alpha, \beta) = \sum_{\mathbf{a} \in \mathbf{A}^M} \sum_{\mathbf{b} \in \mathbf{B}^M} p^M(\mathbf{b}|\mathbf{a})\pi^M(\mathbf{a}) \log \frac{p^M(\mathbf{b}|\mathbf{a})}{p_\beta^M(\mathbf{b})}. \quad (7)$$

Treba poznamenať, že ide o globálnu mieru informácie, t.j. nič nám nehovorí o tom koľko informácie máme o konkrétnej vstupnej správe  $\mathbf{a}$ , ak na výstupe máme konkrétnu správu  $\mathbf{b}$ . Informácia je pre fixnú dĺžku správy  $M$  jednoznačne určená komunikačným kanálom (t.j.  $p^M(\mathbf{b}|\mathbf{a})$ ) a vstupnou hustotou  $\pi^M$ .

Kódovanie sa uskutočňuje pomocou zariadenia, ktoré nazývame *kóder* a dekódujeme pomocou *dekodéra*. Kóder, príslušajúci zdroju informácie s abecedou  $\mathbf{X}$ , komunikačnému kanálu a dĺžke správ  $M$ , je definovaný ako zobrazenie  $\kappa: \mathbf{X}^N \rightarrow \mathbf{A}^M$ . Naopak dekodér je zobrazenie  $\delta: \mathbf{B}^M \rightarrow \mathbf{A}^M$  a závisí iba od komunikačného kanála a dĺžky správy. Zdroj informácie (odosielateľ) generuje správu  $\mathbf{x} \in (\mathbf{X}^N, p^N)$ , ktorú kóder zakóduje do vstupnej správy  $\mathbf{a} = \kappa(\mathbf{x}) \in \mathbf{A}^M$  a spolu definujú vstupnú hustotu pravdepodobnosti  $\pi^M(\cdot) = p^N(\kappa^{-1}(\cdot))$  na  $\mathbf{A}^M$ . Dekodér  $\delta$  na základe výstupnej správy  $\mathbf{b}$  určí vstupnú správu  $\mathbf{a}' = \delta(\mathbf{b}) \in \mathbf{A}^M$ . Adresát ale správe  $\mathbf{a}'$  nerozumie, lebo nepozná kód, a tak sa mu musí dodať správa  $\mathbf{x}' = \kappa^{-1}(\mathbf{a}') \in \mathbf{X}^N$ , čo znamená, že úplný dekodér je zobrazenie  $\kappa^{-1}\delta: \mathbf{B}^M \rightarrow \mathbf{X}^N$ . Pravdepodobnosť chyby, t.j.  $\mathbf{x}' \neq \mathbf{x}$ , je rovná pravdepodobnosť, že na výstupe je nesprávne určené  $\mathbf{a}'$ , t.j.  $\mathbf{a}' \neq \mathbf{a}$ .<sup>2</sup>

## 4 Kapacita

V tejto časti zavedieme pojem kapacity komunikačného kanála. Malo by ísť o číselnú charakteristiku, ktorá určuje množstvo informácie prenesené poslaním jedného písmena daným komunikačným kanálom. Vieme, že informácia závisí od komunikačného kanála, dĺžky správy  $M$  a hustoty pravdepodobnosti  $\pi^M$  definovanej na vstupných správach, ktorá je určená kódovaním (vid' koniec predchádzajúcej časti). Keďže my chceme kvantitu, ktorá závisí iba od komunikačného kanála, tak *kapacitu* zdefinujeme nasledovne

$$C = \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{M} \sup_{\pi^M} I(\alpha_1, \dots, \alpha_M, \beta_1, \dots, \beta_M). \quad (8)$$

V tomto vzorci najprv robíme suprium cez kódovania pri fixnej dĺžke správ  $M$  a potom limitu  $M$  idúce do nekonečna. Vyberáme teda najlepšie kódovanie v zmysle množstva prenesenej informácie.

<sup>2</sup>Toto platí iba ak  $\kappa$  je prosté zobrazenie, lebo inak  $\kappa^{-1}$  nie je jednoznačne definované.

To znamená najmenšiu pravdepodobnosť chyby pri takomto prenose, lebo vtedy výstupná správa obsahuje v priemere najviac informácie o vstupnej správe pri fixovanom  $M$ . Predelenie informácie dĺžkou správy vyjadruje potom priemerné množstvo informácie pripadajúcej na jedno prenesené písmeno správy.

Uvažujme teraz, že  $\pi^M(\mathbf{a}) = \pi(a_1) \dots \pi(a_M)$ , kde  $\pi$  je hustota pravdepodobnosti na abecede  $\mathbf{A}$ . Ďalej nech kanál je bezpamät'ový, t.j.  $p^M(\mathbf{b}|\mathbf{a}) = \prod_{i=1}^M p(b_i|a_i)$ . Potom  $(\alpha_1, \beta_1), \dots, (\alpha_M, \beta_M)$  sú vzájomne nezávislé dvojice náhodných veličín so spoločným výberovým priestorom  $(\mathbf{A} \times \mathbf{B}, \pi(\cdot)p(\cdot|\cdot))$ . Informácia (7) prejde na sumu informácií cez všetky dvojice náhodných veličín, pričom v tomto prípade ide o dvojice rovnakých veličín, t.j. v sume sú všetky členy rovnaké, takže

$$I(\alpha, \beta) = MI(\alpha_1, \beta_1).$$

Ak toto dosadíme do (8), tak dostaneme

$$C = \sup_{\pi} I(\alpha_1, \beta_1) = \sup_{\pi} \sum_{a \in \mathbf{A}} \sum_{b \in \mathbf{B}} \pi(a)p(b|a) \log \frac{p(b|a)}{p_{\beta_1}(b)}, \quad (9)$$

kde

$$p_{\beta_1}(b) = \sum_{a \in \mathbf{A}} p(b|a)\pi(a).$$

Kapacita bezpamät'ového komunikačného kanála spĺňa nerovnosť

$$0 \leq C \leq \log N,$$

kde  $N$  je počet písmen vo vstupnej abecede. Rovnosť na ľavej strane nastáva, ak sú všetky hustoty  $p(\cdot|a)$ ,  $a \in \mathbf{A}$  rovnaké, t.j.  $\alpha_1, \beta_1$  sú nezávislé pri ľubovoľnej vstupnej hustote  $\pi$ . Rovnosť na pravej strane nastáva, ak  $p(b|a) = \delta_{ab}$ , t.j. keď výstupné písmeno jednoznačne určuje písmeno na vstupe.

Nezodpovedanou otázkou zostal výber základu v logaritme, ktorý súvisí s výberom jednotiek informácie. Štandardný výber je logaritmus so základom dva a jednotkou informácie je potom bit. Výber tejto jednotky súvisí s používaním dvojprvkovej (binárnej) abecedy v praxi. Jedným bitom informácie budeme nazývať maximálnu kapacitu ideálneho bezpamät'ového komunikačného kanála, ktorý pri prenose používa binárnu abecedu, t.j.  $\mathbf{A} = \mathbf{B} = \{0, 1\}$ . V takomto prípade  $p(i|j) = \delta_{ij}$  a kapacita je  $\log_2 2$ . My chceme povedať, že takýto komunikačný kanál má kapacitu rovnú jednej, t.j.  $\log_2 2 = 1$ , čo platí ak základ logaritmu je práve dva.

## 5 Kvantová teória informácie

Hlavný rozdiel medzi klasickou a kvantovou teóriou je v štruktúre stavov klasických a kvantových systémov. Tento rozdiel sa prenáša aj do teórie informácie, lebo vieme, že vo fyzike stav určuje pravdepodobnostné distribúcie výsledkov všetkých meraní, t.j. objekty s ktorými teória informácie pracuje. Môžeme povedať, že informácia je ukrytá v stavoch fyzikálneho systému a získavame ju vhodným meraním. Nie je to tak dávno, čo vznikla tzv. *kvantová teória informácie*, v ktorej je informácia práve v stavoch kvantového systému. Prínos kvantovej teórie v teórii informácie je v zlepšení a zefektívnení niektorých manipulácií s informáciou. Napríklad v oblasti komunikácie ide o bezpečnejší prenos informácie. Kvantová teória ponúka niekoľko možností bezpečnejšieho prenosu informácie ako klasická teória.

V klasickej teórii sa písmeno kóduje do stavu klasického fyzikálneho systému, ale tento fakt nie je pri vykladaní samotnej teórie informácie v klasickom ponímaní nejak významný. Všetky javy, ktoré s týmto faktom súvisia sú zahrnuté pod pojem šum a týkajú sa iba samotného prenosu.

Situácia sa zmení, ak písmená zakódujeme do stavov kvantového systému. Vtedy vstúpi do hry kvantová teória, v ktorej stavy nemusia byť úplne rozlíšiteľné. To znamená, že kým v klasickom prípade je abeceda zadaná počtom písmen, tak v kvantovom prípade treba konkretizovať aj jednotlivé stavy prislúchajúce písmenám. Dôvod tejto rozdielnosti je v štruktúre stavov klasickej a kvantovej teórie. V kvantovej teórii existuje možnosť superpozície stavov. Táto vlastnosť nemá klasický analóg. Jej dôsledkom je, že v klasickej teórii sa dá zmes zapísať jednoznačne ako konvexný súčet čistých stavov, kdežto v kvantovej teórii je takýchto zápisov nekonečne veľa. Súbor kvantových stavov je úplne rozlíšiteľný, ak je ortogonálny, lebo vtedy existuje meranie, ktoré medzi týmito stavmi jednoznačne rozlišuje. Ortogonálna abeceda je teda ekvivalentná klasickej.

Ako príklad si uveďme binárnu abecedu, zloženú v klasickej teórii z písmen 0 a 1. V kvantovej teórii označme tieto písmená  $|0\rangle$  a  $|1\rangle$ , ktoré reprezentujú dvojrozmerný Hilbertov priestor. Objekty z dvojrozmerného Hilbertovho priestoru nazývame v kvantovej teórii informácie *qubity*. Už samotný názov naznačuje, že ide o kvantový analóg klasických bitov, čo sú písmená z binárnej abecedy. Prenosom jedného z nich prenesieme maximálne práve jeden bit informácie.

Prepis z abecedy zdroja  $Z$  do vstupnej abecedy komunikačného kanála, ktorej písmená sú reprezentované stavmi, nazývame kódovaním. V kvantovej teórii tomuto prepisu zodpovedá procedúra *prípravy stavu*, ktorý prenáša písmeno v ňom zakódované. Kódovanie spolu so zdrojom informácie určuje pravdepodobnostnú distribúciu  $\pi_k$  na týchto kvantových stavoch  $\varrho_k$ . Túto distribúciu budeme ďalej nazývať kódovaním, lebo pre daný informačný zdroj je ním jednoznačne určená. Ak máme  $d$ -rozmernú abecedu, tak Hilbertov priestor  $H$ , do stavov ktorého kódujeme, bude tiež  $d$ -rozmerný.

Kvantový komunikačný kanál sa od klasického líši tým, že prenáša písmená zakódované v stavoch kvantového systému a nie klasického systému. Počas prenosu sa takýto stav vyvíja podľa zákonov kvantovej teórie. Evolúcia v nej je opísaná superoperátorom

$$\varrho_k \rightarrow \mathcal{S}(\varrho_k) = \sum_{\mu} A_{\mu} \varrho_k A_{\mu}^{\dagger}.$$

V prípade, ak je superoperátor unitárny, t.j. superoperátor obsahuje v Krausovej reprezentácii iba jeden operátor  $A$ , tak takýto kvantový komunikačný kanál budeme nazývať *ideálny*. Ideálny komunikačný kanál zachováva štruktúru vstupných stavov v zmysle ich skalárneho súčinu a vzájomnej rozlíšiteľnosti, čo je v zhode s klasickým prípadom, kde pod ideálnym komunikačným kanálom rozumieme taký komunikačný kanál, ktorý písmenu výstupnej abecedy, priradí jednoznačne písmeno z abecedy vstupnej, t.j. je bezšumový.

Výstupnú abecedu kvantového komunikačného kanála tvoria stavy  $W_k = \mathcal{S}(\varrho_k)$  a analógom dekódovania je meranie na výstupných stavoch, ktoré je v kvantovej teórii opísané POVM, t.j. pozitívnymi operátormi  $X_j$ , pre ktoré  $\sum_j X_j = \mathbf{1}_H$ . Pravdepodobnosť jednotlivých výsledkov POVM merania na stave  $\varrho$  je určená vzťahom

$$Pr(j) = Tr(\varrho X_j).$$

Teraz sa pozrime na množstvo klasickej informácie (7) meranej v bitoch prenesenej takýmto kvantovým kanálom. Podmienená pravdepodobnosť, ktorá definuje komunikačný kanál, je v tomto prípade

$$p(k|j) = Tr(W_k X_j),$$

takže informácia prenesená kvantovým komunikačným kanálom  $\mathcal{S}$  v prípade kódovania  $\pi_k$  a dekódovania  $X_j$  je

$$I_1(\pi, X) = \sum_{k,j} \pi_k Tr(W_k X_j) \log \left( \frac{Tr(W_k X_j)}{\sum_k \pi_k Tr(W_k X_j)} \right). \quad (10)$$

Táto kvantita určuje priemerné množstvo klasických bitov prenesených poslaním jedného písmena.

Pozrime sa na prenos správy zlozenej z  $n$  písmen. V takomto prípade máme Hilbertov priestor  $H^{\otimes n} = H \otimes \dots \otimes H$ . V stavoch tohoto systému

$$\varrho_{\vec{k}} = \varrho_{k_1} \otimes \dots \otimes \varrho_{k_n}$$

sú zakódované správy  $\vec{k} = (k_1, \dots, k_n)$ , kde  $k_j \in Z$  a  $\varrho_{k_j}$  sú stavy priradené písmenám z abecedy zdroja  $Z$ , t.j. tvoria vstupnú abecedu kvantového komunikačného kanála. Správy  $\vec{k}$  môžeme chápať ako prvky abecedy  $Z^n$ , t.j. písmená, na ktorých opäť máme zafinovanú pravdepodobnostnú distribúciu (kódovanie)

$$\pi_{\vec{k}} = \prod_{l=1}^n \pi_{k_l}.$$

Prenos celej správy  $\vec{k}$  je opísaný superoperátorom na celom priestore  $H^{\otimes n}$ . Ak tento superoperátor spĺňa

$$\mathcal{S}(\varrho_{k_1} \otimes \dots \otimes \varrho_{k_n}) = \mathcal{S}(\varrho_{k_1}) \otimes \dots \otimes \mathcal{S}(\varrho_{k_n}),$$

tak, analogicky s klasickým komunikačným kanálom, takýto kvantový komunikačný kanál nazveme *bezpečný*. Znamená to, že stav na konci prenosu nebude v entanglovanom stave, t.j. komunikačný kanál skutočne pôsobí na každé písmeno zvlášť (t.j. lokálne).

Dekódovanie v tomto prípade je určené POVM meraním na celom priestore  $H^{\otimes n}$ . Takéto meranie môže byť vo všeobecnosti optimálnejšie v zmysle lepšieho určenia správy  $\vec{k}$  z tohto globálneho merania, než osobitnými meraniami na každom písmene správy.

Informácia pri prenose správy dĺžky  $n$  je daná vzťahom analogickým ako (10)

$$I_n(\pi, X) = \sum_{\vec{k}, \vec{l}} \pi_{\vec{k}} Tr(W_{\vec{k}} X_{\vec{l}}) \log \left( \frac{Tr(W_{\vec{k}} X_{\vec{l}})}{\sum_{\vec{q}} \pi_{\vec{q}} Tr(W_{\vec{q}} X_{\vec{l}})} \right), \quad (11)$$

kde  $\pi_{\vec{k}}$  je kódovanie na vstupných správach a  $X$  označuje POVM meranie na výstupných stavoch  $W_{\vec{k}}$  kvantového komunikačného kanála. Tieto stavy predstavujú správy zložené z  $n$  písmen, a ak  $\dim Z = d$ , tak sú stavmi z  $d^n$ -rozmerného Hilbertovho priestoru.

## 5.1 Definícia kapacity

Kapacitu kvantového komunikačného kanála zafinujeme podobne ako v klasickej teórii (8) ako stredný počet prenesených bitov na jedno prenesené písmeno. V podstate ide opäť o stredovanie prenesenej informácie cez dĺžky správ. Teda

$$C = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sup_{\pi, X} I_n(\pi, X), \quad (12)$$

kde  $I_n$  je množstvo prenesenej informácie pri posielaní správy dĺžky  $n$  (11). Suprémum je robené cez všetky možné POVM merania a všetky možné kódovania.

Počítať kapacitu priamo z tejto definície je dosť zložité. Preto si uvedieme jednoduchší vzťah

$$C = \max_{\pi} \left[ S \left( \sum \pi_k W_k \right) - \sum \pi_k S(W_k) \right], \quad (13)$$

kde stavy  $W_k$  tvoria výstupnú abecedu.

V tomto vzťahu už vôbec netreba uvažovať POVM merania na výstupných stavoch. Samotný dôkaz ekvivalencie týchto dvoch vyjadrení pre kapacitu kvantového komunikačného kanála bol podaný A.S.Holevom. Dovedy bol tento výraz uvádzaný iba ako horné ohraničenie pre kapacitu. Holevo dokázal aj opačnú nerovnosť.

Dôkaz opačnej nerovnosti je založený na tzv. *kódovacej teóreme*. Táto teória hovorí, že pravdepodobnosť chyby pri prenose cez komunikačný kanál klesá s počtom  $n$  prenesených písmen ako  $2^{-nC+\delta}$ , kde  $C$  je práve kapacita komunikačného kanála definovaná cez Shannonovu informáciu. Holevo ukázal, že pre bezpomät'ový komunikačný kanál vzťah (13) spĺňa túto teóremu.

Niektorí autori berú (13) za definíčný vzťah pre kapacitu. My budeme v ďalšom tiež pracovať s týmto vyjadrením pre kapacitu kvantového komunikačného kanála.

## 5.2 Prípád všeobecnej binárnej abecedy

Teraz spočítame kapacitu ideálneho kvantového komunikačného kanála pre ľubovoľnú binárnu abecedu. Vieme, že všeobecný stav dvojdimenzionálneho Hilbertovho priestoru sa dá zapísať v nasledovnom tvare

$$\varrho(\vec{m}) = \frac{1}{2}(\mathbf{1} + \vec{m} \cdot \vec{\sigma}).$$

Binárna abeceda bude teda jednoznačne určená dvomi vektormi  $\vec{m}$ ,  $\vec{n}$ , ktorých norma nie je väčšia ako jedna. Kapacita (13) potom bude rovná

$$C = \max_{\pi_1} [S(\varrho) - \pi_1 S(\varrho(\vec{m})) - \pi_2 S(\varrho(\vec{n}))],$$

kde  $\pi_2 = 1 - \pi_1$  a  $\varrho = \pi_1 \varrho(\vec{m}) + \pi_2 \varrho(\vec{n})$ .

Vlastné hodnoty matice hustoty  $\varrho(\vec{m})$  sú  $\lambda_{\pm} = (1 \pm |\vec{m}|)/2$  a entropia takéhoto stavu je potom

$$S(|\vec{m}|) = 1 - \frac{1}{2}[(1 + |\vec{m}|) \log(1 + |\vec{m}|) + (1 - |\vec{m}|) \log(1 - |\vec{m}|)], \quad (14)$$

kde sme pre jednoduchosť zápisu  $S(\varrho(\vec{m}))$  označili ako  $S(|\vec{m}|)$ . Ďalej prepíšeme maticu hustoty  $\varrho$  do tvaru

$$\begin{aligned} \varrho &= \pi_1 \varrho(\vec{m}) + \pi_2 \varrho(\vec{n}) = \pi_1 \frac{1}{2}(\mathbf{1} + \vec{m} \cdot \vec{\sigma}) + \pi_2 \frac{1}{2}(\mathbf{1} + \vec{n} \cdot \vec{\sigma}) = \\ &= \frac{1}{2}(\mathbf{1} + (\pi_1 \vec{m} + \pi_2 \vec{n}) \cdot \vec{\sigma}), \end{aligned}$$

odkiaľ vidno vektor, ktorý nám stav  $\varrho$  určuje.

V novom označení môžeme teraz kapacitu prepísať ako

$$C = \max_{\pi_1} [S(|\pi_1 \vec{m} + \pi_2 \vec{n}|) - \pi_1 S(|\vec{m}|) - \pi_2 S(|\vec{n}|)]. \quad (15)$$

Ostáva už iba určiť optimálne kódovanie, t.j. optimálnu hodnotu  $\pi_1$ . Zderivovaním (15) podľa  $\pi_1$  dostaneme

$$\frac{\partial C}{\partial \pi_1} = S(|\vec{n}|) - S(|\vec{m}|) - \frac{1}{2} \left\{ \frac{\pi(m^2 + n^2 - 2mn \cos \phi) + mn \cos \phi - n^2}{|\pi \vec{m} + (1 - \pi) \vec{n}|} \log \frac{1 + |\pi \vec{m} + (1 - \pi) \vec{n}|}{1 - |\pi \vec{m} + (1 - \pi) \vec{n}|} \right\},$$

kde sme položili  $\pi_1 = \pi$ ,  $|\vec{m}| = m$ ,  $|\vec{n}| = n$  a  $\phi$  je uhol, ktorý zvierajú vektory  $\vec{m}$  a  $\vec{n}$ . Pre konkrétne dva stavy určené vektormi  $\vec{m}$  a  $\vec{n}$  by sme vedeli optimálne kódovanie  $\pi$  nájsť. Vo všeobecnosti to však určiť nevieme, lebo ide o transcendentnú rovnicu.

## 5.3 Špeciálne binárne abecedy

Uvažujme, že Alica pripravuje stavy vstupnej abecedy unitárnymi operáciami pôsobiacimi na nejaký fixný stav, t.j. stavy, ktoré vstupujú do komunikačného kanála majú rovnakú entropiu. Keďže je entropia, v prípade stavov z dvojrozmerného Hilbertovho priestoru, určená jednoznačne veľkosťou

vektora, ktorý tento stav zadáva, tak pre takto generované písmená  $|\vec{m}| = |\vec{n}| = m$ . Ak si uvedomíme, že v tomto prípade platí

$$|\pi \vec{m} + (1 - \pi) \vec{n}| = m \sqrt{1 + 2(1 - \cos \phi)(\pi^2 - \pi)},$$

tak podmienka extrémnej kapacity, t.j.  $\frac{\partial C}{\partial \pi} = 0$ , prejde na rovnicu

$$-\frac{1}{2} \frac{m(2\pi - 1)(1 - \cos \phi)}{\sqrt{1 + 2(1 - \cos \phi)(\pi^2 - \pi)}} \log \frac{1 + m \sqrt{1 + 2(1 - \cos \phi)(\pi^2 - \pi)}}{1 - m \sqrt{1 + 2(1 - \cos \phi)(\pi^2 - \pi)}} = 0,$$

čo nastáva v prípade<sup>3</sup>, ak  $\pi = 1/2$ . Ak  $m = 0$ , tak kapacita je nulová, lebo v tomto prípade je abeceda tvorená úplnou zmesou, t.j. iba jedným písmenom. V prípade  $\cos \phi = 1$  to znamená, že uhol medzi vektormi je nulový, t.j. ide o tie isté vektory, a teda aj stavy, ktoré určujú, sú rovnaké. Pre kapacitu opäť platí  $C = 0$ .

Kapacita sa dá v tomto prípade ( $|\vec{m}| = |\vec{n}| = m$ ) s uvážením  $\pi = 1/2$  vyjadriť nasledovne

$$C = S(m \sqrt{(1 + \cos \phi)/2}) - S(m). \quad (16)$$

Pre konkrétne  $m$  je kapacita iba funkciou uhlu  $\phi$  medzi vektormi určujúcimi stavy. Minimálna hodnota kapacity je pre uhol  $\phi = 0$ , kedy  $C = S(m) - S(m) = 0$ . Maximum kapacity nadobúda pre hodnotu uhla  $\phi = 180^\circ$ , kedy je  $\cos \phi = -1$ , t.j.

$$C = S(0) - S(m) = \log 2 - S(m) = 1 - S(m),$$

kde  $S(m)$  je dané vzt'ahom (14).

Ak položíme  $|\alpha|^2 = (1 + m)/2$  a  $|\beta|^2 = (1 - m)/2$ , tak vstupná abeceda je tvorená stavmi, ktoré majú vo vhodnej báze tvar

$$\begin{aligned} W_1 &= |\alpha|^2 |0\rangle\langle 0| + |\beta|^2 |1\rangle\langle 1| \\ W_2 &= |\beta|^2 |0\rangle\langle 0| + |\alpha|^2 |1\rangle\langle 1| \end{aligned} \quad (17)$$

Kapacita pri takejto voľbe abecedy je potom

$$C = 1 + |\alpha|^2 \log |\alpha|^2 + |\beta|^2 \log |\beta|^2. \quad (18)$$

V limite pre čisté stavy ( $m = 1$ , t.j.  $\alpha = 1$ ) abecedu tvoria ortogonálne stavy a  $C = 1$ .

## 5.4 Pauliho kvantový komunikačný kanál

Začnime definíciou Pauliho kvantového komunikačného kanála na vstupný stav  $\varrho_k$

$$\varrho_k \rightarrow \varrho'_k = (1 - p) \varrho_k + p_x \sigma_x \varrho_k \sigma_x + p_y \sigma_y \varrho_k \sigma_y + p_z \sigma_z \varrho_k \sigma_z, \quad (19)$$

kde  $p = p_x + p_y + p_z$ .

Najprv si ukážme, že tento komunikačný kanál je skutočne superoperátorom. Zo zápisu (19) ľahko vidno štyri operátory vystupujúce v Krausovej reprezentácii, a síce  $\sqrt{1-p} \mathbf{1}, \sqrt{p_x} \sigma_x, \sqrt{p_y} \sigma_y, \sqrt{p_z} \sigma_z$ . Využitím  $\sigma_l^\dagger \sigma_l = \sigma_l^2 = \mathbf{1}$  pre  $l = x, y, z$ , overíme Krausovu normalizačnú podmienku, t.j.

$$\sum_{\mu} A_{\mu}^{\dagger} A_{\mu} = (1 - p + p_x + p_y + p_z) \mathbf{1} = \mathbf{1}.$$

<sup>3</sup>v prípade, že je pod odmocninou nula, tak síce dostávame  $\log 1 = 0$ , ale táto odmocnina nám vystupuje aj v menovateli pred logaritmom



Vidno teda, že Pauliho kanál je superoperátorom.

Pôsobenia jednotlivých Krausových operátorov, t.j.  $\sigma$ -matic, interpretujeme ako chyby, ktoré počas prenosu nastávajú.

- **otočenie bitu**

$$\sigma_x : \begin{array}{l} |0\rangle \rightarrow |1\rangle \\ |1\rangle \rightarrow |0\rangle \end{array}$$

- **zmena fázy**

$$\sigma_z : \begin{array}{l} |0\rangle \rightarrow |0\rangle \\ |1\rangle \rightarrow -|1\rangle \end{array}$$

- **kombinácia obidvoch**

$$\sigma_y : \begin{array}{l} |0\rangle \rightarrow i|1\rangle \\ |1\rangle \rightarrow -i|0\rangle \end{array}$$

Jeho pôsobenie na vstupný stav v tvare

$$\varrho(\vec{m}) = \frac{1}{2}(\mathbf{1} + \vec{m} \cdot \vec{\sigma})$$

vyzerá nasledovne

$$\begin{aligned} \varrho' &= (1-p) \frac{1}{2}(\mathbf{1} + \vec{m} \cdot \vec{\sigma}) + \sum_{\mu} p_{\mu} \sigma_{\mu} \frac{1}{2}(\mathbf{1} + \vec{m} \cdot \vec{\sigma}) \sigma_{\mu} = \\ &= \frac{1}{2}(\mathbf{1} + \vec{m}' \cdot \vec{\sigma}), \end{aligned}$$

kde

$$\vec{m}' = ((1 - 2(p_y + p_z))m_x, (1 - 2(p_x + p_z))m_y, (1 - 2(p_x + p_y))m_z) \quad (20)$$

Vidno, že pre  $p_x = p_y = p_z = 1/4$ , dostávame pre ľubovoľný vstupný stav na konci komunikačného kanála úplnú zmes  $\frac{1}{2}\mathbf{1}$ , čo znamená, že nemáme žiadnu šancu určiť stav na vstupe, a teda neprenesieme v tomto prípade žiadnu informáciu. V prípade, že  $p_x = p_y = p_z = p/3 = q$ , takýto komunikačný kanál nazývame *depolarizačný* a  $\vec{m}' = (1 - 4q)\vec{m}$ .

Pri výpočte kapacity môžeme použiť výsledky z predchádzajúcej časti. Ak na vstupe máme dva stavy určené vektormi  $\vec{m}, \vec{n}$ , tak na výstupe Pauliho kanála máme stavy  $\vec{m}', \vec{n}'$  určené rovnicou (20). Ak Alica kóduje unitárnymi operáciami, t.j. generuje stavy s rovnakou entropiou, tak stavy na konci vo všeobecnosti už rovnakú entropiu (14) mať nemusia. Práve iba v prípade depolarizačného kanála bude entropia stavov na výstupe rovnaká, aj keď menšia ako na začiatku. Kapacitu Pauliho kanála v takomto prípade máme určenú vzťahom (16).

## 6 Entanglovanie a prenos informácie

### 6.1 EPR paradox

Ak sa systém skladá z podsystemov (*zložený systém*),  $H = H_1 \otimes \dots \otimes H_d$ , a jeho stav  $\varrho_H$  sa dá zapísať ako váhovaný kartézsky súčin stavov jednotlivých podsystemov, t.j.

$$\varrho_H = \sum_k p_k \varrho_{H_1}^k \otimes \dots \otimes \varrho_{H_d}^k,$$

tak tento stav  $\varrho_H$  nazývame *separabilný*. Povieme, že stav je *entanglovaný*, ak nie je separabilný. *Lokálnym unitárnym operátorom* nazveme unitárny operátor pôsobiaci iba na jednom z podsystemov celého systému, a ktorý sa na ostatných podsystemoch chová ako jednotkový operátor. Takýto unitárny operátor nijako nemení stavy na ostatných podsystemoch. Analogicky *lokálnym meraním*

nazveme meranie uskutočnené iba na jednom podsysteme, ktoré matematicky opisujeme samozdrúženým operátorom, ktorý sa na ostatných podsystemoch správa ako jednotkový operátor.

Entanglované stavy sa asi dostali po prvýkrát do pozornosti vďaka EPR<sup>4</sup> paradoxu. Uvažujme dvojtasticový systém v entanglovanom stave

$$|\phi^+\rangle_{AB} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle),$$

kde každý zo systémov A,B je dvojtavový. Stavy na jednotlivých podsystemoch sú v prípade uvažovaného stavu matice hustoty  $\frac{1}{2}\mathbf{1}$ , čo sú *maximálne zmesi* v zmysle, že pre každé ortogonálne meranie na podsysteme sú všetky výsledky rovnako váhované, lebo

$$Tr(\varrho \mathbf{E}_a) = \frac{1}{2}Tr(\mathbf{E}_a) = \frac{1}{2}.$$

Takýto čistý stav, pre ktorý platí, že stavy podsystemov sú maximálne zmesi, nazývame *maximálne entanglovaný*.

Nech z nejakého miesta C sa entanglované častice v stave  $|\psi\rangle$  pošlú jedna (systém A) na miesto A a druhá (systém B) na miesto B ( $\neq A$ ). V týchto miestach nech prebieha meranie. Výsledky merania  $\sigma_x$  na A a na B budú úplne korelované, t.j. ak A nameria spin hore, tak aj B nameria spin hore (ak meria spin v tom istom smere). Teda A môže s určitosťou predpovedať výsledok tohto merania na B bez merania na tomto systéme. A tu vznikol EPR paradox.

Zmeraním spinu pozdĺž osi z určíme hodnotu spinu aj na B, podobne aj pre meranie v nejakom inom smere, napr. x, určíme hodnotu spinu B aj v tomto smere. Podľa Einsteina, ak vieme predikovať s určitosťou hodnotu fyzikálnej veličiny bez narušenia systému, tak existuje *element fyzikálnej reality*, ktorý zodpovedá tejto hodnote, t.j. systém je v stave, ktorý má túto hodnotu. Vlastnosť znalosti stavu systému B po meraní na A podľa EPR narušá princíp *Einsteinovej lokálnosti*, t.j. hypotézy, že pre dva priestorovo separované systémy akcia robená na A nemôže okamžite meniť opis systému B. V našom prípade by potom mal mať systém B dopredu určené všetky hodnoty všetkých možných meraní priemetov spinu, čo v kvantovej teórii nie je možné. Toto viedlo EPR k tomu, že opis systému vlnovou funkciou nie je úplný, lebo úplná teória by podľa EPR mala spĺňať Einsteinovu lokálnosť. EPR navrhli existenciu parametrov systému, ktoré my síce zatiaľ nepoznáme a nevieme určiť, ale ktorých znalosť by nám jednoznačne a deterministicky určovala výsledky meraní, ako sme zvyknutí v klasickej mechanike. Takúto teóriu, ktorá by už vyhovovala Einsteinovej lokálnosti, nazývame teóriou so *skrytými parametrami*.

Otázkou zostala existencia teórie so skrytými parametrami, ktorá by bola lokálna a reprodukovala by výsledky kvantovej teórie, ak by sme vedeli aspoň pravdepodobnostnú distribúciu týchto parametrov (aj keď pri presnej znalosti hodnôt parametrov by určovala presne každý výsledok merania, t.j. bola by teóriou deterministickou).

Odpoveď našiel až Bell, ktorý zostrojil triedu teórií so skrytými lokálnymi parametrami (teda klasickú teóriu) a odvodil tzv. Bellove nerovnosti, ktoré by mala každá takáto teória spĺňať. Tieto nerovnosti vôbec nepotrebujú existenciu kvantovej teórie a dajú sa merať experimentálne. Práve experiment v istých prípadoch potvrdzuje narušenie týchto nerovností a toto narušenie je v zhode s predpoveďami kvantovej teórie. Dá sa ukázať, že vďaka Gleasonovmu teorému, ktorý platí pre dimenzie väčšie alebo rovné trom, takéto teórie so skrytými parametrami neopisujú všetky javy kvantovej mechaniky, lebo existujú stavy systémov, ktoré narušajú Bellove nerovnosti. Experiment teda vyvrátil Einsteinovu hypotézu o lokálnom opise prírody. Poznamenajme, že pre dimenziu rovnú dvom je takáto teória so skrytými parametrami možná.

<sup>4</sup>Einstein-Podolsky-Rosen

## 6.2 Miery entanglovania

Dva systémy v entanglovanom stave nemusia byť navzájom rovnako silne korelované. Uvažujme teraz trochu všeobecnejší stav

$$|\psi\rangle_{AB} = \alpha|00\rangle + \beta|11\rangle,$$

ktorý je entanglovaný, ak  $\alpha \neq 0$  alebo  $\beta \neq 0$ . Ak pôjdeme s  $\alpha \rightarrow 0$  alebo  $\alpha \rightarrow 1$ , tak entanglovaný stav prechádza na stav separabilný. Matice hustoty na systéme A a B sú opäť rovnaké

$$\varrho_A = \varrho_B = |\alpha|^2|0\rangle\langle 0| + |\beta|^2|1\rangle\langle 1|,$$

a teda  $|\psi\rangle_{AB}$  nie je, ak  $\alpha \neq \beta$ , maximálne entanglovaný. Existuje nejaký rozdiel medzi takýmto stavom a stavom maximálne entanglovaným?

Tento rozdiel by malo byť vidieť v situáciach, kde je entanglovanie podstatné, ako napríklad pri Bellových nerovnostiach, kvantovej teleportácii, alebo pri hustom kvantovom kódovaní (viď nasledujúce časti). Vo všeobecnosti nie všetky entanglované stavy narušajú Bellove nerovnosti, t.j. táto vlastnosť nie je dobrým kritériom pri určovaní množstva entanglovania. Niektoré entanglované stavy totiž nie sú v zmysle narušenia Bellových nerovností odlišiteľné od separabilných, ktoré nikdy tieto nerovnosti nenarušajú.

Vychádzajúc z kvantovej teleportácie, pri ktorej separabilné stavy nemôžu byť použité, V.Vedral a M.B.Plenio zdefinovali mieru entanglovania ako reálnu funkciu na množine stavov  $\mathbf{S}$ , pre ktorú platí

**E1.**  $E(\sigma) = 0$  ak  $\sigma \in \mathbf{S}$  je separabilný stav.

**E2.**  $E(\sigma) = E(U_A \otimes U_B \sigma U_A^\dagger \otimes U_B^\dagger)$ , t.j. lokálne unitárne transformácie nechávajú mieru  $E(\sigma)$  invariantnú.

**E3.** Entanglovanie nemôže narastať pri procedúre zloženej z lokálneho zovšeobecného merania (POVM), z výmeny informácie o meraní cez klasický komunikačný kanál a z vhodnej lokálnej unitárnej operácie. Procedúra je spolu opísaná operátormi  $V_k = A_k \otimes B_k$ , pre ktoré  $\sum_k V_k^\dagger V_k = \mathbf{1}$ . Podmienka nenarastania množstva entanglovania má tvar

$$\sum_k \text{Tr}(\sigma_k) E(\sigma_k / \text{Tr}(\sigma_k)) \leq E(\sigma),$$

kde  $\sigma_k = V_k \sigma V_k^\dagger$ .

**E4.** Pre dva páry entanglovaných častíc v stavoch  $\sigma_1$  a  $\sigma_2$  platí

$$E(\sigma_1 \otimes \sigma_2) = E(\sigma_1) + E(\sigma_2).$$

Uved'me konkrétne príklady niektorých mier entanglovania:

- **entropia entanglovania**

$$E_v(|\psi\rangle_{AB} \langle \psi|) = S(\text{Tr}_A(|\psi\rangle_{AB} \langle \psi|)) = S(\text{Tr}_B(|\psi\rangle_{AB} \langle \psi|))$$

Táto miera je vhodná pre čisté stavy dvojzložkových systémov. Pre zmesi by aj v separabilnom prípade bola táto miera nulová, čo je v spore s podmienkou **E1**. Niektorí autori požadujú od miery entanglovania, aby v limite pre čisté stavy prechádzala na entropiu entanglovania. Príklady, ktoré si uvedieme túto vlastnosť spĺňajú.

- **relatívna entropia entanglovania**

$$E_R(\sigma) = \min_{\varrho \in D} S(\sigma || \varrho)$$

kde  $D$  je množina všetkých neentanglovaných stavov.

- **entanglovanie formovania**

$$E_f(\varrho_{AB}) = \min_k \sum_k p_k E_v(|\psi_k\rangle_{AB} \langle \psi_k|),$$

kde minimum berieme cez všetky rozklady  $\varrho_{AB}$  na čisté stavy, t.j.  $\varrho_{AB} = \sum_k p_k |\psi_k\rangle_{AB} \langle \psi_k|$ .

Stále je otvorenou otázkou nájsť "dobrú" mieru entanglovania, ktorá by bola mierou aj pre zmesi, a súčasne by bola aj ľahko spočítateľná. Je otázne, či taká miera vôbec existuje.

## 6.3 Kvantové superhusté kódovanie

Kvantové husté kódovanie je príkladom využitia zvláštností kvantovej teórie. Využijeme informáciu skrytú v kvantových koreláciach medzi vzdialenými systémami, t.j. existenciu entanglovaných stavov, na prenos klasickej informácie.

Informáciu sa pokúsime prenášať nasledovnou procedúrou. Nech Alica a Bob<sup>5</sup> sú spojení kvantovým komunikačným kanálom a zdieľajú spolu dve dvojhladinové častice (qubity). Alica aplikuje na svoj qubit jednu zo štyroch ľubovoľných, ale fixných transformácií a takto pripravený qubit pošle kvantovým komunikačným kanálom Bobovi. Výberom transformácie Alica určuje posielané písmeno. Bob prijme qubit poslaný od Alici a prevedie meranie na obidvoch zdieľaných qubitoch. Z výsledku merania sa Bob pokúša určiť poslané písmeno. Túto procedúru nazývame *hustým kódovaním*.

V prípade, ak Bob robí merania iba na prijatom qubite, tak vieme, že maximum prenesenej informácie je jeden bit. Otázkou je ako sa zmení množstvo prenesenej informácie jedným qubitom, ak Alica a Bob využijú fakt, že qubit poslaný od Alici môže byť v entanglovanom stave s qubitom Bobovým. Hilbertov priestor dvoch qubitov je štvorrozmerný, t.j. abeceda môže byť tvorená štyrmi ortogonálnymi stavmi a prenesená informácia má v takomto prípade maximum  $\log_2 4 = 2$  bity. Otázkou je, či Alica môže lokálnymi unitárnymi operáciami na svojom qubite pripraviť štyri ortogonálne stavy, ktoré by tvorili výstupnú abecedu.

Prípad, ak zdieľaný stav je ľubovoľný, je predmetom tejto diplomovej práce. Teraz si uvedieme špeciálny prípad stavu

$$|\psi\rangle_{AB} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_A \otimes |0\rangle_B + |1\rangle_A \otimes |1\rangle_B),$$

ktorý je maximálne entanglovaný. Budeme predpokladať, že kvantový komunikačný kanál je triviálny, t.j. nijako nepôsobí na vstupné stavy. Uvedieme príklad voľby Aliciných lokálnych unitárnych operácií:

$$\mathbf{1}_A \text{ (nulová rotácia), t.j. } \phi^+ \rightarrow \phi^+$$

$$\sigma_1 \text{ (180° rotácie okolo x), t.j. } \phi^+ \rightarrow \psi^+$$

$$\sigma_2 \text{ (180° rotácie okolo y), t.j. } \phi^+ \rightarrow \psi^-$$

$$\sigma_3 \text{ (180° rotácie okolo z), t.j. } \phi^+ \rightarrow \phi^-,$$

kde

$$|\phi^\pm\rangle_{AC} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle \pm |11\rangle)$$

$$|\psi^\pm\rangle_{AC} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle \pm |10\rangle), \quad (21)$$

tvoria ortonormálny systém, a teda bázu spoločného Hilbertovho priestoru. To znamená, že existuje ortogonálne meranie (*Bellove meranie*), ktoré úplne rozlišuje medzi týmito stavmi, ktoré tvoria ortogonálnu abecedu. Bob prevedením Bellovho merania získa úplnú informáciu o poslanom písmene, t.j. dva bity informácie.

Môžeme povedať, že poslaním jedného qubitu sa preniesli dva bity klasickej informácie. Samozrejme, že v skutočnosti sme zamlčali počiatočné rozposlanie entanglovaných qubitov z nejakého zdroja, jeden Alici a druhý Bobovi. Takže qubity v skutočnosti spolu prejdú dvakrát vzdialenosť

<sup>5</sup>standartní experimentátori v kvantovej teórii informácie

medzi Alicou a Bobom. Napríklad môže byť zdrojom Alica a posielat' priamo dva entanglované qubity, pričom iba na jednom urobila dané lokálne operácie.

Môže to byť aj tak, že Alica a Bob boli v minulosti spolu a vtedy previazali svoje qubity, čo znamená, že qubity sa neprenášali žiadnym komunikačným kanálom. A práve o takomto prípade hovoríme, t.j. keď sa rozposlanie qubitov nedialo prostredníctvom nášho kvantového komunikačného kanála, a v tomto zmysle hovoríme, že poslaním jedného qubitu cez komunikačný kanál prenášame dva bity klasickej informácie.

Alica a Bob sa v tomto prípade vôbec nemusia obávať odpočúvania. Qubit posielený komunikačným kanálom sa totiž pri každej voľbe písmena nachádza v maximálnej zmesi  $\frac{1}{2}\mathbf{1}$ . Potencionálny narušiteľ by meraním na tomto qubite nezistil nič o prenášanom písmene. Môžeme povedať, že Bobov qubit slúži ako kľúč k získaniu informácie. Opísaný príklad sa zvykne nazývať aj *superhustým kódovaním*.

## 6.4 Kvantová teleportácia

Ide o spôsob ako preniesť kvantový stav pomocou prenosu klasickej informácie a lokálnymi operáciami.

Nech Alica má stav

$$|\psi\rangle_C = a|0\rangle_C + b|1\rangle_C,$$

ktorý chce poslať Bobovi, ale sú od seba vzdialený a Alica môže poslať iba klasickú informáciu. Nech ale obidvaja zdieľajú maximálne entanglovaný stav dvoch qubitov  $|\phi^+\rangle_{AB}$ . Alica spojí stav  $|\psi\rangle_C$  s jej časťou entanglovaného stavu a na tejto dvojici qubitov spraví *Bellove meranie*, ktorého výsledkom sú Bellove stavy (21). Informáciu o výsledku svojho merania pošle cez klasický komunikačný kanál Bobovi (ide o prenos dvoch bitov informácie), ktorý podľa prijatej správy urobí na svojom qubite z entanglovaného páru unitárne operácie podľa nasledujúceho pravidla

$$|\phi^+\rangle_{AC} \rightarrow \mathbf{1}_B$$

$$|\psi^+\rangle_{AC} \rightarrow \sigma_1^{(B)}$$

$$|\psi^-\rangle_{AC} \rightarrow \sigma_2^{(B)}$$

$$|\phi^-\rangle_{AC} \rightarrow \sigma_3^{(B)}$$

a dostane u seba stav  $|\psi\rangle$ . Táto procedúra sa nazýva kvantová teleportácia. Zdanlivo je to v rozpore z no-cloning teorémom, ale Alica meraním svoj stav, ktorý teleportuje Bobovi, zničí.

Ukážme si ako to funguje. Rozpíšme si počiatočný stav nášho celkovo trojčasticového systému, kde systém teleportovaného stavu označíme písmenom C

$$\begin{aligned} |\psi\rangle_C \otimes |\phi^+\rangle_{AB} &= (a|0\rangle_C + b|1\rangle_C) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)_{AB} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a|000\rangle + a|011\rangle + b|100\rangle + b|111\rangle)_{CAB} = \\ &= \frac{1}{2}a\{(|\phi^+\rangle + |\phi^-\rangle)_{AC}|0\rangle_B + (|\psi^+\rangle + |\psi^-\rangle)_{AC}|1\rangle_B\} + \frac{1}{2}b\{(|\phi^+\rangle - |\phi^-\rangle)_{AC}|1\rangle_B + (|\psi^+\rangle - |\psi^-\rangle)_{AC}|0\rangle_B\} = \\ &= \frac{1}{2}\{|\phi^+\rangle_{AC}(a|0\rangle_B + b|1\rangle_B) + |\psi^+\rangle_{AC}(a|1\rangle_B + b|0\rangle_B) + |\phi^-\rangle_{AC}(a|1\rangle_B - b|0\rangle_B) + |\psi^-\rangle_{AC}(a|0\rangle_B - b|1\rangle_B)\} = \\ &= \frac{1}{2}|\phi^+\rangle_{AC}|\psi\rangle_B + \frac{1}{2}|\psi^+\rangle_{AC}\sigma_1|\psi\rangle_B + \frac{1}{2}|\psi^-\rangle_{AC}(-i\sigma_2)|\psi\rangle_B + \frac{1}{2}|\phi^-\rangle_{AC}\sigma_3|\psi\rangle_B, \end{aligned}$$

odkiaľ vidno dôvod voľby Bobových operácií v závislosti od prijatej správy od Alice, resp. Alicinho výsledku merania.

Čo by sa stalo v prípade, že by Alica a Bob nezdieľali úplne entanglovaný stav, alebo by zdieľali separabilný stav?

V prípade separabilného stavu by sme touto procedúrou nijako neovplyvnili stav systému B, a teda by k žiadnej teleportácii prísť nemohlo. Vlastne všetky tri systémy A,B,C by boli separabilné a aj po urobení Bellovho merania na A+C, by A+C a B zostali separované.

## 6.5 EPR distribúcia kľúča

Predstavme si, že chceme poslať nejakú správu z miesta odosielateľ'a A na miesto príjemcu B a nechceme, aby niekto mohol túto správu (okrem príjemcu) prečítať. Matematicky je dokázané, že najbezpečnejšie kódovanie je pomocou kľúča, ktorý je rovnako dlhý ako posielená správa. Predstavme si správu a aj kľúč reprezentované ret'azcom bitov. Posielenú správu s týmto kľúčom bitovo sčítame a výsledný ret'azec pošleme komunikačným kanálom. Prijímateľ, ktorý samozrejme vlastní kľúč, tiež bitovo sčíta prijatú správu s týmto kľúčom a získa tak pôvodnú správu. Problémom je bezpečné rozposlanie kľúča z miesta A na miesto B. Kvantová teória ponúka možnosť využitia existencie entanglovaných stavov k tzv. *EPR distribúcii kľúča*.

Odosielateľ a príjemca obdržia dvojhľadínové častice (napr. fotóny), ktoré sú v úplne entanglovanom stave. Potom nech obidvaja robia na nich merania polarizácií do dvoch rôznych smerov. Výsledkom takýchto meraní je hodnota polarizácie, t.j.  $\pm 1$ . Častice sú v stave, že merania na A a B sú v prípade, ak obaja merajú v tom istom smere, úplne korelované. Potom si nejakým verejným komunikačným spojením (napr. telefónom) vymenia informáciu o smeroch, do ktorých merania postupne volili. Poznamenajme, že si nevymenia výsledky svojich meraní. Ak zvolili obaja rovnaký smer, tak ich výsledky sú rovnaké. Ak nie, tak tieto výsledky zahadzujú. Zostávajúce výsledky tvoria postupnosť núl (výsledok  $-1$ ) a jednotiek ( $1$ ), t.j. tvoria prenesený kľúč.

## 7 Husté kódovanie pre nemaximálne entanglované stavy

### 7.1 Ideálny komunikačný kanál

#### 7.1.1 Čisté stavy

Z príkladu superhustého kódovania vieme, že situácia sa trochu skomplikuje v prípade, ak qubit vstupujúci do kvantového komunikačného kanála je v entanglovanom stave so systémom prijímateľa. Komunikačným kanálom sa prenáša iba jeden qubit, ktorý je z dvojrozmerného kvantového systému, ale vstupná aj výstupná abeceda sú štvorrozmerné Hilbertove priestory. Vstupnú abecedu tvoria Alicine lokálne unitárne transformácie pomocou ktorých kóduje. Na výstupe Bob robí meranie (dekóduje) na svojom a prijatom qubite od Alici. Bob vlastne využíva svoj qubit ako kľúč k rozšifrovaniu správy. Doteraz prenášal komunikačný kanál každé písmeno zvlášť. V tomto prípade akoby prenášal jedným písmenom písmená dve. Komunikačný kanál v tomto prípade uvažujeme v nasledovnom tvare

$$BINARY\ CHANNEL \otimes NOTHING.$$

Teraz sa pozrieme na prípadne úplne entanglovaných čistých stavov, t.j. nesuperhustého kódovania. Zo Schmidtovej dekompozície vyplýva, že čistý stav dvojzložkového systému, ktorého podsystemy sú dvojdimenzionálne Hilbertove priestory, sa dá zapísať v nasledovnom tvare

$$|\psi_0\rangle_{AB} = \alpha|0\rangle_A \otimes |\phi_0\rangle_B + \beta|1\rangle_A \otimes |\phi_1\rangle_B,$$

kde  $\langle\phi_1|\phi_0\rangle = 0$  a  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ . Pre jednoduchosť budeme v ďalejšom označovať

$$|0\rangle_B = |\phi_0\rangle_B$$

$$|1\rangle_B = |\phi_1\rangle_B$$

Otázkou je optimálna voľba Aliciných operácií. Využijeme znalosť riešenia pre prípad superhustého kódovania. Ide o limitu  $|\alpha| = |\beta|$ , ktorú budeme nazývať *Bellovou limitou*. V tejto limite sú vygenerované stavy (písmená abecedy) navzájom ortogonálne. Aké lokálne unitárne transformácie spĺňajú túto limitu? Poznamenajme, že hľadáme lokálne unitárne transformácie, ktoré nezávisia na vstupnom stave  $|\psi\rangle$ . V nasledujúcom budeme túto úlohu riešiť.

Všeobecná lokálna unitárna transformácia na dvojdimenzionálnom priestore je vyjadrená maticou zo štvorparametrickej grupy  $U(2)$  a má tvar

$$U_k = e^{i\alpha_k} (\cos \psi_k \mathbf{1} + i \sin \psi_k (\vec{n}_k \cdot \vec{\sigma})), \quad (22)$$

kde  $\vec{n}_k = (\sin \theta_k \cos \phi_k, \sin \theta_k \sin \phi_k, \cos \theta_k)$  je jednotkový vektor okolo ktorého rotujeme o uhol  $\psi_k$ <sup>6</sup>.

Úlohou je nájsť štyri lokálne unitárne transformácie  $U_k \otimes \mathbf{1}$ , ktorými zo stavu  $|\psi_0\rangle$  dostaneme štyri stavy  $|\psi_k\rangle = U_k \otimes \mathbf{1} |\psi_0\rangle$ , pre ktoré platí

$$\begin{aligned} |\langle \psi_k | \psi_j \rangle|^2 &= \\ &= |\langle \psi_0 | U_k^\dagger U_j | \psi_0 \rangle|^2 = |\alpha|^2 \langle 0 | U_k^\dagger U_j | 0 \rangle + |\beta|^2 \langle 1 | U_k^\dagger U_j | 1 \rangle|^2 = \\ &= |\alpha|^2 (W_{kj})_{00} + |\beta|^2 (W_{kj})_{11}|^2, \end{aligned} \quad (23)$$

kde

$$W_{kj} = U_k^\dagger U_j,$$

čo pri neuvažovaní fázového faktoru  $e^{i\alpha_k}$  v (22) dáva

$$W_{kj} = \mathbf{1} (\cos \psi_k \cos \psi_j + \vec{n}_k \cdot \vec{n}_j \sin \psi_k \sin \psi_j) + i \vec{\sigma} \cdot (\sin \psi_k \sin \psi_j (\vec{n}_k \times \vec{n}_j) - \sin \psi_k \cos \psi_j \vec{n}_k + \sin \psi_j \cos \psi_k \vec{n}_j),$$

kde sme využili vzťah

$$\sigma_k \sigma_j = \delta_{kj} \mathbf{1} + i \varepsilon_{kjl} \sigma_l.$$

Z (23) vidno, že nám stačia iba diagonálne elementy  $W_{kj}$  a teda sa zo  $\sigma$ -matic uplatní iba  $\sigma_3$ , lebo iba tá má nenulové diagonálne elementy. Takisto nám stačí vedieť len z-ové zložky vektorov  $\vec{n}_k$ ,  $\vec{n}_j$ ,  $(\vec{n}_k \times \vec{n}_j)_z$ .

Pri označení

$$\begin{aligned} a_{kj} &= \cos \psi_k \cos \psi_j + \vec{n}_k \cdot \vec{n}_j \sin \psi_k \sin \psi_j \\ b_{kj} &= \sin \psi_k \sin \psi_j (\vec{n}_k \times \vec{n}_j)_z - \sin \psi_k \cos \psi_j (\vec{n}_k)_z + \sin \psi_j \cos \psi_k (\vec{n}_j)_z, \end{aligned}$$

kde

$$\begin{aligned} \vec{n}_k \vec{n}_j &= \cos \theta_k \cos \theta_j + \sin \theta_k \sin \theta_j \cos(\phi_j - \phi_k) \\ (\vec{n}_k \times \vec{n}_j)_z &= \sin \theta_k \sin \theta_j \sin(\phi_j - \phi_k), \end{aligned}$$

platí

$$\begin{aligned} (W_{kj})_{00} &= a_{kj} + ib_{kj} \\ (W_{kj})_{11} &= a_{kj} - ib_{kj}. \end{aligned}$$

Potom z (23) dostaneme

$$|\alpha|^2 (a_{kj} + ib_{kj}) + |\beta|^2 (a_{kj} - ib_{kj})^2 = (a_{kj} - ib_{kj}) (|\alpha|^2 - |\beta|^2) (a_{kj} + ib_{kj}) (|\alpha|^2 - |\beta|^2)$$

t.j.

$$|\langle \psi_k | \psi_j \rangle|^2 = a_{kj}^2 + b_{kj}^2 (|\alpha|^2 - |\beta|^2)^2. \quad (24)$$

<sup>6</sup> $\psi$  označujeme aj stav, aj uhol, ale z kontextu by malo byť vždy jasné, o ktorý význam ide

Jednu z transformácií vyberieme ako triviálnu, t.j.  $U_0 = \mathbf{1}_A$ . Dosadením do (24) dostaneme vzťah medzi pôvodným stavom a stavmi získanými operáciami pre  $k = 1, 2, 3$

$$|\langle \psi_0 | \psi_k \rangle|^2 = \cos^2 \psi_k + \sin^2 \psi_k \cos^2 \theta_k (|\alpha|^2 - |\beta|^2)^2. \quad (25)$$

Využijeme Bellovu limitu, v ktorej sú tieto rovnice nulové. Nutne musí platiť

$$\cos^2 \psi_k = 0$$

$$a_{kj} = 0$$

t.j.  $\psi_k = \pm \frac{\pi}{2}$  odkiaľ vyplýva, že  $|\sin \psi_k| = 1$ . Ak toto dosadíme do  $a_{kj}$ , tak nutne  $\vec{n}_k \cdot \vec{n}_j = 0$ , t.j. smery, okolo ktorých rotujeme o uhol  $\psi_k = \pm \frac{\pi}{2}$ , sú na seba kolmé. Zhrňme si podmienky, ktoré musia byť splnené, ak platí limita Bellových stavov

$$\psi_k = \pm \frac{\pi}{2} \quad (26)$$

$$\vec{n}_k \cdot \vec{n}_j = \delta_{kj}. \quad (27)$$

Našli sme teda lokálne unitárne transformácie  $\{\mathbf{1}_A, \vec{n}_k \cdot \vec{\sigma}\}$ , kde  $k=1,2,3$  a  $n_k$  tvoria ortonormálnu bázu reálneho trojrozmerného priestoru. Tieto transformácie majú jednu zaujímavú vlastnosť. Pri pôsobení týmito transformáciami na niektorý stav  $|\psi_k\rangle$  pre  $k=1,2,3$ , dostaneme

$$\vec{n}_j \cdot \vec{\sigma} |\psi_k\rangle = (\vec{n}_j \cdot \vec{\sigma}) (\vec{n}_k \cdot \vec{\sigma}) |\psi_0\rangle = \delta_{jk} \mathbf{1} + i (\vec{n}_j \times \vec{n}_k) \cdot \vec{\sigma} |\psi_0\rangle$$

nejaký iný stav z abecedy. To znamená, že naša abeceda  $|\psi_k\rangle$  je invariantná vzhľadom k týmto transformáciám. Triviálna transformácia samozrejme stav nemení, a teda, až na fázový faktor, sú naše stavy navzájom spojené týmito štyrmi transformáciami.

Keďže tieto transformácie sú unitárne, tak po ich aplikácii na  $\psi_0$  dostávame štyri čisté stavy. Pri počítaní kapacity (13) pre takéto stavy opäť stačí spočítať entropiu zmesi týchto stavov s rovnakou váhou  $\pi_k = 1/4$ , t.j. maticu hustoty

$$\varrho = \frac{1}{4} \sum_k \varrho_i = \frac{1}{4} \sum_k U_k \otimes \mathbf{1} |\psi_0\rangle \langle \psi_0 | U_k^\dagger \otimes \mathbf{1}, \quad (28)$$

kde

$$\begin{aligned} U_k &= \vec{n}_k \cdot \vec{\sigma} \text{ pre } k = 1, 2, 3 \\ U_0 &= \mathbf{1}. \end{aligned} \quad (29)$$

Matica hustoty, ktorej entropiu treba spočítať má tvar

$$\frac{1}{4} \begin{pmatrix} |\alpha|^2 (1 + \sum_k n_k^x n_k^x) & |\alpha|^2 \sum_k n_k^x (n_k^x - in_k^y) & \alpha \beta^* \sum_k n_k^x (n_k^x + in_k^y) & \alpha \beta^* (1 - \sum_k n_k^x n_k^x) \\ |\alpha|^2 \sum_k n_k^x (n_k^x + in_k^y) & |\alpha|^2 \sum_k (n_k^y n_k^y + n_k^x n_k^x) & \alpha \beta^* \sum_k (n_k^x + in_k^y) (n_k^x + in_k^y) & \alpha \beta^* \sum_k n_k^x (n_k^x - in_k^y) \\ \alpha^* \beta \sum_k n_k^x (n_k^x - in_k^y) & \alpha^* \beta \sum_k (n_k^x - in_k^y) (n_k^x - in_k^y) & |\beta|^2 \sum_k (n_k^y n_k^y + n_k^x n_k^x) & |\beta|^2 \sum_k n_k^x (n_k^x + in_k^y) \\ \alpha^* \beta (1 - \sum_k n_k^x n_k^x) & \alpha^* \beta \sum_k n_k^x (n_k^x + n_k^y) & |\beta|^2 \sum_k n_k^x (n_k^x - in_k^y) & |\beta|^2 (1 + \sum_k n_k^x n_k^x) \end{pmatrix}$$

kde  $n_k^j$  je j-ta komponenta vektora  $n_k$ . Tieto vektory tvoria úplný ortonormálny systém, t.j. platí aj podmienka úplnosti

$$\sum_k n_k^j n_k^l = \delta^{jl},$$

kde  $j, l = x, y, z$ . Po dosadení tejto vlastnosti do matice dostaneme diagonálnu maticu

$$\varrho = \begin{pmatrix} \frac{|\alpha|^2}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{|\alpha|^2}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{|\beta|^2}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{|\beta|^2}{2} \end{pmatrix} \quad (30)$$

z ktorej pre kapacitu kvantového komunikačného kanála dostávame

$$C = 1 - |\alpha|^2 \log |\alpha|^2 - |\beta|^2 \log |\beta|^2 = 1 - S(\varrho_A), \quad (31)$$

kde  $\varrho_A = \text{Tr}_B(|\psi_0\rangle\langle\psi_0|)$ . Dostali sme teda celú triedu transformácií určujúcich vstupné abecedy, pre ktoré je kapacita ideálneho kvantového komunikačného kanála rovnaká. Poznamenajme, že naše transformácie dávajú stavy, ktoré rozkladajú tú istú maticu hustoty s tou istou váhou pre každý stav.

Vlastnosť, že transformácie (29) dávajú vektory, medzi ktorými sa môžeme pohybovať iba pomocou týchto transformácií, sa týka úplne všetkých stavov (aj matic hustoty). Pôsobením transformácií  $U_j$  na stavoch  $\varrho_k = U_k \varrho_0 U_k^\dagger$  dostávame opäť iba stav z tejto množiny, t.j. táto množina je vzhľadom k týmto transformáciám invariantná. Takúto množinu môžeme priradiť ľubovoľnému stavu  $\varrho_0$ . Pôvod tejto vlastnosti je v platnosti vzťahu  $U_k U_j = i \varepsilon_{ikj} U_l$ , ktorý nemá nič spoločné s nejakým konkrétnym stavom.

Na záver tejto kapitoly ešte uvedieme dva špeciálne prípady štvorice transformácií. Uvidíme, že štruktúra abecied stavov získaných po aplikovaní týchto transformácií na stav  $|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha|00\rangle + \beta|11\rangle)$  je rôzna. Jedna abeceda bude generovaná  $\sigma$ -maticami definovanými vzhľadom k báze  $\{|0\rangle_A, |1\rangle_A\}$ . Druhá skupina transformácií je zvolená tak, aby vo vzťahoch (24) a (25) bolo minimum, ktoré bude naviac rovnaké. To znamená, že hľadáme transformácie, ktoré dávajú navzájom rovnako vzdialenú štvoricu stavov.

Štruktúra stavov pre prípad  $|\phi_0\rangle = |\psi_0\rangle$ ,  $|\phi_k\rangle = \sigma_k \otimes \mathbf{1}|\psi_0\rangle$  platí

$$|\langle\phi_k|\phi_j\rangle|^2 = \begin{cases} 1 & \text{ak } k = j \\ \Delta^2 & \text{ak } k, j = 01, 10, 23, 32 \\ 0 & \text{inak} \end{cases} \quad (32)$$

A v prípade minimálnych vzdialeností sú hľadané lokálne transformácie určené vektormi

$$\begin{aligned} \vec{n}_1 &= \left(\sqrt{\frac{2}{3}}, 0, \sqrt{\frac{1}{3}}\right) \\ \vec{n}_2 &= \left(-\sqrt{\frac{1}{6}}, \frac{\sqrt{2}}{2}, \sqrt{\frac{1}{3}}\right) \\ \vec{n}_3 &= \left(\sqrt{\frac{1}{6}}, \frac{\sqrt{2}}{2}, -\sqrt{\frac{1}{3}}\right). \end{aligned} \quad (33)$$

a platí

$$|\langle\psi_k|\psi_j\rangle|^2 = \begin{cases} 1 & \text{ak } k = j \\ \frac{1}{3}\Delta^2 & \text{ak } k \neq j, \end{cases} \quad (34)$$

kde  $|\psi_k\rangle = \vec{n}_k \cdot \vec{\sigma} \otimes \mathbf{1}|\psi_0\rangle$  a  $\Delta = ||\alpha|^2 - |\beta|^2|$ .

### 7.1.2 Zmesi

Pokúsme sa zovšeobecniť výsledky aj na zmesi. Opäť vyjdeme z jedného stavu  $\varrho_0$ , na ktorý Alice pôsobí štyrmi unitárnymi operáciami a generuje tak štyri písmená abecedy. Každú zmes vieme vyjadriť ako konvexnú kombináciu čistých ortogonálnych stavov, t.j. v diagonálnom tvare

$$\varrho_0 = \sum_{k=1}^4 \lambda_k |\psi_k^0\rangle\langle\psi_k^0|. \quad (35)$$

Každý čistý stav  $|\psi_k^0\rangle$  dvojzložkového systému vieme vyjadriť v Schmidtovej báze (Schmidtovej dekompozícii). Otázkou je, či pre navzájom kolmé vektory existuje tá istá Schmidtova báza. Vyjadrieme jeden z vektorov v Schmidtovej báze

$$|\psi_1^0\rangle = \alpha|0\rangle_A|0\rangle_B + \beta|1\rangle_A|1\rangle_B.$$

Teraz sa pozrime, ako by mali vyzerat' zvyšné vektory v tejto Schmidtovej báze. Schmidtova dekompozícia je unitárna transformácia, a teda aj v Schmidtovej báze musia byť všetky vektory navzájom kolmé, t.j. jeden z nich (označme ho indexom  $k = 2$ ) musí mať tvar

$$|\psi_2^0\rangle = \beta^*|0\rangle_A|0\rangle_B - \alpha^*|1\rangle_A|1\rangle_B$$

a zvyšné dva

$$\begin{aligned} |\psi_3^0\rangle &= \gamma|0\rangle_A|1\rangle_B + \delta|1\rangle_A|0\rangle_B \\ |\psi_4^0\rangle &= \delta^*|0\rangle_A|1\rangle_B - \gamma^*|1\rangle_A|0\rangle_B. \end{aligned}$$

Vidno, že každý z nich je zapísaný v Schmidtovej dekompozícii v tej istej báze, čo sme chceli.

Teraz na takto zapísanú zmes použijeme lokálne unitárne transformácie  $U_j = \vec{n}_j \cdot \vec{\sigma} \otimes \mathbf{1}$ , čím dostaneme štyri stavy  $\varrho_j = U_j \varrho_0 U_j^\dagger$ . Na výpočet kapacity pre takto získanú abecedu využijeme znalosti z predošlej časti tejto kapitoly. Zrátať najskôr  $S(\varrho_j)$ . Keďže naše transformácie sú unitárne, tak entropia všetkých je rovnaká a druhý člen v (13) je rovný

$$S(\varrho_0) = - \sum_k \lambda_k \log \lambda_k.$$

V ďalšom spočítame entropiu stavu

$$\varrho = \frac{1}{4} \sum_{j=0}^3 U_j \varrho_0 U_j^\dagger = \frac{1}{4} \sum_{j=0}^3 U_j \left( \sum_{k=1}^4 \lambda_k |\psi_k^0\rangle\langle\psi_k^0| \right) U_j^\dagger,$$

čo vďaka linearite  $U_j$  môžeme prepísať na

$$\varrho = \sum_{k=1}^4 \lambda_k \frac{1}{4} \sum_{j=0}^3 U_j |\psi_k^0\rangle\langle\psi_k^0| U_j^\dagger.$$

Výraz

$$\frac{1}{4} \sum_{j=0}^3 U_j |\psi_k^0\rangle\langle\psi_k^0| U_j^\dagger$$

je pre každé  $k = 1, 2, 3, 4$ , zhodný s (28). Práve teraz využijeme, že zápis našich stavov je v Schmidtovej báze, lebo to bola podmienka, z ktorej sme vychádzali pri výpočtoch ďalej. Poznamenajme, že táto podmienka nijako neobmedzuje triedu stavov, ktoré môžeme uvažovať, lebo pre každý čistý stav existuje zápis v Schmidtovej báze. Výsledkom z predošlej časti tejto kapitoly je fakt, že celý

takýto výraz je diagonálny v Schmidtovej báze a ak k tomu pridáme, že pre všetky  $k = 1, 2, 3, 4$  sú v tej istej Schmidtovej báze, tak pridáme k tomu, že celé  $\rho$  je diagonálne v jednej báze, a teda nie ja problém spočítať entropiu takéhoto stavu. Matica  $\rho$  má tvar

$$\rho = \frac{1}{2}(|\alpha|^2\lambda_1 + |\beta|^2\lambda_2 + |\gamma|^2\lambda_3 + |\delta|^2\lambda_4)(|00\rangle\langle 00| + |10\rangle\langle 10|) + \frac{1}{2}(|\alpha|^2\lambda_2 + |\beta|^2\lambda_1 + |\gamma|^2\lambda_4 + |\delta|^2\lambda_3)(|01\rangle\langle 01| + |11\rangle\langle 11|).$$

Ostáva už iba určiť  $\alpha, \beta, \gamma, \delta$  pre nejaké konkrétne  $\rho_0$ , pričom platí  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = |\gamma|^2 + |\delta|^2 = 1$ . Pre takúto abecedu je kapacita ideálneho kvantového komunikačného kanála

$$C = \sum_k \lambda_k \log \lambda_k + 1 - x \log x - y \log y, \quad (36)$$

kde

$$\begin{aligned} x &= |\alpha|^2(\lambda_1 - \lambda_2) + |\gamma|^2(\lambda_3 - \lambda_4) + \lambda_2 + \lambda_4 \\ y &= |\alpha|^2(\lambda_2 - \lambda_1) + |\gamma|^2(\lambda_4 - \lambda_3) + \lambda_1 + \lambda_3. \end{aligned} \quad (37)$$

Ak si uvedomíme, že platí

$$\rho_A = \text{Tr}_B(\rho_{AB}) = \begin{pmatrix} x & 0 \\ 0 & y \end{pmatrix},$$

tak kapacitu môžeme vyjadriť nasledovným vzťahom

$$C = 1 + S(\rho_A) - S(\rho_{AB}). \quad (38)$$

Všimnime si niektoré špeciálne prípady. Ak  $\lambda_k = 1/4$ , tak kapacita  $C = 0$ , čo je pochopiteľné, lebo v tomto prípade stav  $\rho_0$  a tým aj všetky ostatné písmená abecedy sú úplnými zmesami. Uvážme prípad čistého stavu, t.j. napríklad pre  $\lambda_1 = 1$  a ostatné  $\lambda_k = 0$  pre  $k = 2, 3, 4$ . V tomto prípade dostaneme vzťah zhodný so vzťahom (31), lebo prvý člen z rovnice vypadne,  $x = |\alpha|^2$  a  $y = |\beta|^2$ .

## 7.2 Špeciálna abeceda, alebo šumový komunikačný kanál

Uvažujme počiatočný stav v špeciálnom tvare

$$\tilde{\rho}_0 = s|\psi_0\rangle\langle\psi_0| + \frac{1-s}{4}\mathbf{1}.$$

Aplikujme na tento stav naše štyri transformácie  $U_k$ . Dostaneme  $\tilde{\rho}_k = s|\psi_k\rangle\langle\psi_k| + \frac{1-s}{4}\mathbf{1}$ , kde  $|\psi_k\rangle = U_k|\psi_0\rangle$ . Zrátajme kapacitu ideálneho kvantového komunikačného kanála pre abecedu tvorenú stavmi  $\tilde{\rho}_i$ .

$$C = S(\tilde{\rho}) - \frac{1}{4} \sum_k S(\tilde{\rho}_k),$$

kde

$$\tilde{\rho} = \frac{1}{4} \sum_k \tilde{\rho}_k = s\rho + \frac{1-s}{4}\mathbf{1}$$

je diagonálna matica ( $\rho$  je matica hustoty (30)). Pri počítaní  $S(\tilde{\rho}_k)$  zvolme ortonormálnu bázu  $\{\psi_k, \phi_1, \phi_2, \phi_3\}$ , v ktorej je matica  $\rho_k$  diagonálna, t.j. keďže ide o čistý stav, má vlastnú hodnotu rovnú jednej, ( $\mathbf{1}$  je v každej báze diagonálna). Dostávame diagonálnu maticu hustoty

$$\tilde{\rho}_k = \begin{pmatrix} \frac{3s+1}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1-s}{4} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-s}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1-s}{4} \end{pmatrix}$$

ktorá je pre všetky  $k = 0, 1, 2, 3$  rovnaká, aj keď pre rôzne  $k$  je vyjadrená v rôznych ortonormálnych bázach. Matice, z ktorých počítame entropiu máme v diagonálnej forme. Teda dostávame pre kapacitu

$$C = -\frac{s(2|\alpha|^2-1)+1}{2} \log \left( \frac{s(2|\alpha|^2-1)+1}{4} \right) - \frac{s(2|\beta|^2-1)+1}{2} \log \left( \frac{s(2|\beta|^2-1)+1}{4} \right) + \frac{3s+1}{4} \log \left( \frac{3s+1}{4} \right) + \frac{3(1-s)}{4} \log \left( \frac{1-s}{4} \right)$$

Graf tejto funkcie je zobrazený na obrázku 1. Výsledok môžeme jednoducho overiť, ak položíme  $s = 1$ , tak dostávame výsledok zhodný s (31). Naopak pre  $s = 0$ , čo je prípad abecedy zloženej z jedného písmena (úplnej zmesi), bude kapacita nulová. Pre isté hodnoty  $s$  a  $\alpha$  je stav  $\tilde{\rho}_0$  separabilný.

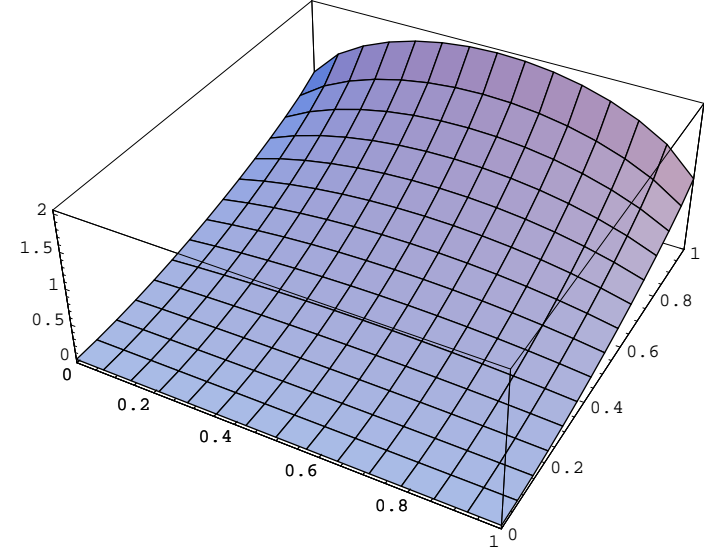


Figure 1: Graf kapacity kvantového komunikačného kanála so vstupnou abecedou generovanou stavom  $\tilde{\rho}_0 = s|\psi_0\rangle\langle\psi_0| + \frac{1-s}{4}\mathbf{1}$  v závislosti od parametrov  $|\alpha|^2$  a  $s$ .

Na určenie kritických hodnôt, pri ktorých sa z entanglovaného stavu stáva separabilný, použijeme metódu čiastočne transponovanej matice. Ak čiastočne transponovaná matica hustoty je pozitívne semidefinitná, t.j.  $\rho^{partial T} \geq 0$ , tak stav opísaný maticou hustoty pre dvojqubitový systém je separabilný. Poznamenajme, že toto tvrdenie vyjadruje nutnú a postačujúcu podmienku separability iba pre 2x2 a 2x3 systémy a neplatí pre ľubovoľné zložené systémy, kedy vyjadruje iba nutnú podmienku, t.j. existujú v takýchto systémoch aj entanglované stavy s pozitívne semidefinitnou čiastočne transponovanou maticou. Čiastočne transponovanú maticu  $\rho^{partial T}$  definujeme na dvojzložkovom systéme, kde báza v A je určená latinskými písmenami  $|k\rangle$  a báza v B gréckymi písmenami  $|\mu\rangle$ . Matica hustoty je  $\rho_{kj,\mu\nu}$  a

$$\rho_{kj,\mu\nu}^{partial T} = \rho_{k\nu,j\mu}$$

je potom čiastočne transponovaná matica cez systém B. V našom prípade

$$\tilde{\varrho}_0^{partial T} = \begin{pmatrix} \frac{s(4|\alpha|^2-1)+1}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1-s}{4} & s\alpha\beta^* & 0 \\ 0 & s\alpha^*\beta & \frac{1-s}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{s(3-4|\alpha|^2)+1}{4} \end{pmatrix}$$

Vlastné hodnoty tejto matice sú

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \frac{s(4|\alpha|^2-1)+1}{4} \geq 0 \\ \lambda_2 &= \frac{s(3-4|\alpha|^2)+1}{4} \geq 0 \\ \lambda_3 &= \frac{1-s+4s|\alpha||\beta|}{4} \geq 0 \\ \lambda_4 &= \frac{1-s-4s|\alpha||\beta|}{4} \geq 0 \end{aligned}$$

kde iba posledná vlastná hodnota je menšia ako nula (t.j. stav je entanglovaný) práve vtedy, ak

$$s > \frac{1}{1+4|\alpha||\beta|} \quad (39)$$

V prípade rovnosti nastáva prechod medzi separabilnými a neseparabilnými stavmi. Pozrime sa ako vyzerá kapacita kvantového komunikačného kanála práve v prípade rovnosti. Pre jednoduchosť zápisu položíme  $|\alpha| = \alpha$  a  $|\beta| = \beta$  a pre kapacitu dostaneme

$$C = \frac{1}{1+4\alpha\beta} \{2\alpha\beta \log(1+4\alpha\beta) - (\alpha^2+2\alpha\beta) \log(\alpha^2+2\alpha\beta) - (\beta^2+2\alpha\beta) \log(\beta^2+2\alpha\beta) + (1+\alpha\beta) \log(1+\alpha\beta) + \alpha\beta \log \alpha\beta\}.$$

Minimum nastáva v prípade Bellových stavov, kedy  $C = \frac{1}{2} \log \frac{4}{3}$ . Toto nie je až také prekvapujúce, ak si uvedomíme, že v tomto prípade je šum, t.j. výraz  $1-s$ , maximálny. Maximum nastáva v prípade  $\alpha = 1$ , kedy  $s = 1$  a  $C = 1$ , čo je v zhode s očakávaním, lebo v tomto prípade ide o ideálny komunikačný kanál pre čistý separabilný stav. Abeceda je tvorená z dvojíc rovnakých stavov, pričom tieto dvojice sú navzájom ortogonálne. Teda abeceda je v skutočnosti binárna ortogonálna, pre ktorú je kapacita  $C = 1$ .

Poznamenajme, že rovnicu

$$|\psi_k\rangle\langle\psi_k| = \varrho_k \rightarrow \tilde{\varrho}_k$$

môžeme chápať aj ako pôsobenie kvantového komunikačného kanála na vstupné stavy  $|\psi_k\rangle\langle\psi_k|$ . Takýto kvantový komunikačný kanál budeme nazývať *šumový*.

### 7.3 Pauliho komunikačný kanál

V tejto časti bude Alica Pauliho komunikačným kanálom posielat' qubit entanglovaný s Bobovým qubitom. Pôsobenie na stav  $\varrho_1^{AB}$  vyzerá nasledovne

$$\varrho_k \rightarrow \varrho'_k = (1-p)\varrho_k + p_x\sigma_x \otimes \mathbf{1}_B \varrho_k \sigma_x \otimes \mathbf{1}_B + p_y\sigma_y \otimes \mathbf{1}_B \varrho_k \sigma_y \otimes \mathbf{1}_B + p_z\sigma_z \otimes \mathbf{1}_B \varrho_k \sigma_z \otimes \mathbf{1}_B, \quad (40)$$

kde používame označenia z (19) a

$$\varrho_k = U_k \varrho_0 U_k^\dagger,$$

kde  $U_k$  sú štyri Alicine transformácie (29), pomocou ktorých kóduje.

Opäť pre  $p_k = q$  takýto kanál nazývame depolarizačný.

K určeniu kapacity treba (13) spočítať pre stavy  $\varrho'_k$ , t.j. pre výstupné stavy. Pôsobenie jednotlivých Krausových operátorov vyzerá nasledovne

$$\sigma_\mu \varrho_k \sigma_\mu = (n_k^\mu)^2 \varrho_0 + i n_k^\mu [(n_\mu^\nu \times \vec{n}_k) \vec{\sigma}, \varrho_0] + ((n_\mu^\nu \times \vec{n}_k) \vec{\sigma}) \varrho_0 ((n_\mu^\nu \times \vec{n}_k) \vec{\sigma})$$

kde  $\vec{n}_\mu$  je jednotkový vektor, ktorý má na  $\mu$ -tom mieste jednotku. Pre jednoduchosť zápisu vynecháme tenzorový súčin s jednotkovým operátorom na systéme B.

Výstupný stav bude sčítaním cez stavy získané pôsobením jednotlivých Krausových operátorov, t.j.

$$\varrho'_k = (1-p) \sum_{\mu,\nu=1}^3 \sigma_\mu \varrho_0 \sigma_\nu n_k^\mu n_k^\nu + \sum_{\mu=1}^3 p_\mu \{ (n_k^\mu)^2 \varrho_0 + i n_k^\mu [(n_\mu^\nu \times \vec{n}_k) \vec{\sigma}, \varrho_0] + ((n_\mu^\nu \times \vec{n}_k) \vec{\sigma}) \varrho_0 ((n_\mu^\nu \times \vec{n}_k) \vec{\sigma}) \}.$$

Chceme spočítať maticu hustoty

$$\varrho = \frac{1}{4} \sum_k \varrho'_k.$$

Nič nás samozrejme neopravňuje k voľbe kódovania  $\pi_k = 1/4$ , ale ani numericky nie je úloha ľahko zvládnuteľná kvôli veľkému počtu parametrov. Naš výsledok bude prinajhoršom dolným ohraničením pre kapacitu. Po využití úplnosti systému vektorov  $\vec{n}_k$  dostaneme

$$\varrho = \frac{1}{4} [(1-p)(\varrho_0 + \sum_\mu \sigma_\mu \varrho_0 \sigma_\mu) + \sum_\mu p_\mu (\varrho_0 + \sum_{\nu \neq \mu} \sigma_\nu \varrho_0 \sigma_\nu)],$$

čo je nezávislé od voľby Aliciných transformácií určených trojicou navzájom kolmých jednotkových vektorov.

Kapacita

$$C = S(\varrho) - S\left(\frac{1}{4} \sum_k \varrho'_k\right)$$

však už pre ľubovoľný kanál nemusí byť vôbec rovnaká pre rôzne voľby Aliciných transformácií. Aj keď zdanlivo nevystupujú v prvom výraze, tak v druhom určite vystupujú. Práve je otázkou, pri ktorých Pauliho komunikačných kanáloch je kapacita rovnaká pri rôznych voľbách Aliciných transformácií.

Pozrime sa, čo dostaneme pre kapacitu v prípade depolarizačného komunikačného kanála, t.j.  $p_\mu = q$ . V prípade binárnej abecedy mali výstupné stavy stále rovnakú entropiu. Predpokladajme dve rôzne abecedy určené voľbou Aliciných transformácií. Zvoľme lokálne unitárne transformácie, ktoré dávajú navzájom rovnako vzdialené stavy (34) a transformácie, ktoré sú určené  $\sigma$ -maticami (32). Tieto transformácie aplikujeme na stav  $|\psi_0\rangle = \alpha|00\rangle + \beta|11\rangle$ , čím získaváme vstupné stavy komunikačného kanála. Numericky sme spočítali vlastné hodnoty matíc hustoty vystupujúcich vo výraze pre kapacitu, t.j. opisujúcich výstupné stavy, ktoré vyšli v obidvoch prípadoch rovnaké, a síce

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= 2q|\alpha|^2 \\ \lambda_2 &= 2q|\beta|^2 \\ \lambda_3 &= \frac{1}{2}(1-2q + \sqrt{(1-2q)^2 - 16q|\alpha|^2|\beta|^2(1-3q)}) \\ \lambda_4 &= \frac{1}{2}(1-2q - \sqrt{(1-2q)^2 - 16q|\alpha|^2|\beta|^2(1-3q)}). \end{aligned} \quad (41)$$

To znamená, že aj entropia týchto výstupných stavov je rovnaká.

Ďalej platí

$$\varrho = \frac{1}{4} (\varrho_0 + \sum_\mu \sigma_\mu \varrho_0 \sigma_\mu),$$

čo je vlastne stav (30). Kapacita  $C = S(\varrho) - S(\varrho'_k)$  je potom tiež rovnaká pri obidvoch abecedách. Po dosadení dostávame

$$C = 1 - (|\alpha|^2 \log |\alpha|^2 + |\beta|^2 \log |\beta|^2) + \sum_k \lambda_k \log \lambda_k. \quad (42)$$

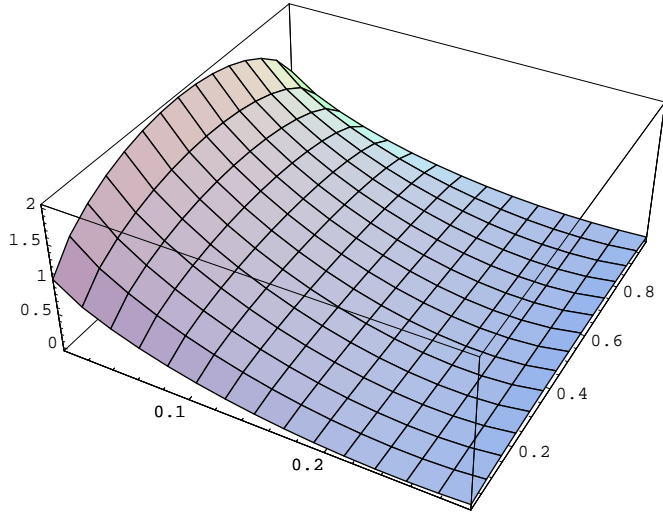


Figure 2: Závislosť kapacity depolarizačného kvantového komunikačného kanála od parametra  $q$ , ktorý charakterizuje tento komunikačný kanál, a od  $|\alpha|^2$ .

Graf tejto funkcie je na obrázku 2, kde vidno, že pre  $q = 0$  dostávame kapacitu ideálneho komunikačného kanála pre čisté entanglované stavy (31).

K takémuto výsledku môžeme prísť aj inou úvahou, pri ktorej využijeme vzťah (36) odvodený pre ideálny komunikačný kanál. Vyjdeme z poznatku, že entropia vystupujúcich stavov je rovnaká. Teraz si stačí uvedomiť, že aj v prípade ideálneho komunikačného kanála sme počítali výraz pre kapacitu na množine stavov s rovnakou entropiou, ktoré sčítané s váhou  $\pi_k = 1/4$  dávajú stav (30). Porovnaním zistíme, že výraz (42) je špeciálnym prípadom vzťahu (36).

## 8 Husté kódovanie a miery entanglovania

Pokúsime sa zaviesť mieru entanglovania. Pri jej zavedení sa pokúsime využiť jav zväčšenia kapacity binárneho kanála, ak sa používa tzv. husté kódovanie.

Niektor posielajú qubity Alici a Bobovi. Tieto qubity tvoria spolu štvorrozmerný Hilbertov priestor a všeobecne sú opísané maticou hustoty  $\varrho_{AB}$ . Alice svojimi lokálnymi transformáciami pripravuje písmená abecedy, ktoré sa prenášajú komunikačným kanálom. Na druhej strane čaká Bob a každý prichádzajúci qubit spojí so svojim qubitom a na tomto páre qubitov robí meranie s cieľom zistiť posielaný stav. Kapacita je kvantita, ktorá hovorí ako najúspešnejšie môže rozoznať Alicinu správu. Takýto prenos nazývame hustým kódovaním.

Predpokladajme, že máme stav  $\varrho_{AB}$ , ktorý zdieľajú Alice a Bob. V tomto prípade vieme určiť kapacitu ideálneho komunikačného kanála. Budeme ju označovať  $C_{A \rightarrow B}^{cent}$ , kde  $A \rightarrow B$  označuje smer posielania správy. Podľa (38) platí

$$C_{A \rightarrow B}^{cent} = 1 + S(\varrho_A) - S(\varrho_{AB}).$$

Za povšimnutie stojí fakt, že kapacita závisí od toho, či posielajú Alice alebo Bob. Dôvod je v tom, že vo všeobecnosti  $\varrho_A \neq \varrho_B$ . Vidno to aj z vyjadrení pre  $x$  a  $y$  (37), v ktorých stačí zameniť  $\lambda_3$  za  $\lambda_4$  a dostávame  $x', y'$ , ktoré tvoria diagonálne prvky  $\varrho_B$ . Kapacita teda pre niektoré zmesi, ktoré Alice a Bob zdieľajú môže spĺňať nerovnosť

$$C_{A \rightarrow B}^{cent} \neq C_{B \rightarrow A}^{cent}.$$

Pre čisté stavy platí v tomto vzťahu vždy rovnosť, lebo každý čistý stav vieme zapísať v Schmidtovej dekompozícii.

Pri čistom binárnom prenose Alice pripravuje stavy iba dva a Bob odhaduje poslaný qubit iba meraniami na ňom samotnom. Alice pripravuje stavy s rovnakou entropiou. Uvažujme iba ideálny komunikačný kanál a vieme, že v tomto prípade je (17) abecedou, ktorá maximalizuje komunikačný kanál, ak jeden zo stavov máme zadaný. Túto kapacitu budeme označovať  $C_{A \rightarrow B}^{bin}$ . Platí

$$C_{A \rightarrow B}^{bin} = 1 - S(\varrho_A).$$

Problém je ako porovnať tieto dva druhy prenosu, alebo aký stav priradiť Alici (Bobovi) pri binárnom prenose, ak máme daný stav  $\varrho_{AB}$ , ktorého miera entanglovania nás zaujíma.

Predpokladajme, že medzi systémami nie je žiadna klasická korelácia. Stav, ktorý príde k Alici (Bobovi), je potom  $\varrho_A(\varrho_B)$ . Tento stav môžu použiť, buď na husté kódovanie, alebo na prenos binárny. Keďže sme vylúčili možnosť klasickej korelácie, tak všetka korelácia medzi systémami je kvantová, t.j. entanglovanie. Rozdiel kapacít medzi hustým a binárnym prenosom by mohol číselne vyjadrovať množstvo entanglovania (označme  $E$ ) v stave  $\varrho_{AB}$ . Treba vziať do úvahy fakt, že kapacita v hustom prípade závisí od odosielateľa. Zadefinujeme

$$E(\varrho_{AB}) = \frac{1}{2}(C_{A \rightarrow B}^{cent} + C_{B \rightarrow A}^{cent} - C_{A \rightarrow B}^{bin} - C_{B \rightarrow A}^{bin})$$

Po dosadení dostávame vzťah, ktorý vyzerá veľmi jednoducho

$$E = S(\varrho_A) + S(\varrho_B) - S(\varrho_{AB}).$$

Je to vlastne iba veľmi známa vlastnosť entropie známa ako subaditívnosť (viď časť Entropia). Je známe, že  $E$  vyjadruje mieru korelácie medzi podsystémami. My sme ju dostali ako rozdiel kapacít ideálneho binárneho kanála pri hustom a obyčajnom kódovaní. Vidno, že  $E = 0$ , ak  $\varrho_{AB} = \varrho_A \otimes \varrho_B$ , t.j. sú separabilné, ale aj klasicky nekorelované. Existujú separabilné stavy, pre ktoré by  $E \neq 0$ .

Pre čisté stavy  $E = 2S(\varrho_{A(B)})$ , čo je známa miera na čistých stavoch.

Problém je, ak klasický stav je aj klasicky korelovaný. Skúsme sa pozrieť na separabilitu ľubovoľného stavu  $\varrho_{AB}$  metódou čiastočne transponovanej matice. Každý stav môžeme zapísať v spektrálnom tvare (35)

$$\varrho_0 = \sum_{k=1}^4 \lambda_k |\psi_k^0\rangle \langle \psi_k^0|.$$

Zapísaný v Schmidtovej báze je určený parametrami  $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \lambda_k$  pre  $k = 1, 2, 3, 4$ , z ktorých je päť nezávislých. Po transponovaní cez systém B má tvar

$$\varrho_{AB}^{\tau_B} = \begin{pmatrix} \lambda_1 |\alpha|^2 + \lambda_2 |\beta|^2 & 0 & 0 & \gamma \delta (\lambda_3 - \lambda_4) \\ 0 & \lambda_3 |\delta|^2 + \lambda_4 |\gamma|^2 & \alpha \beta (\lambda_1 - \lambda_2) & 0 \\ 0 & \alpha \beta (\lambda_1 - \lambda_2) & \lambda_4 |\delta|^2 + \lambda_3 |\gamma|^2 & 0 \\ \gamma \delta (\lambda_3 - \lambda_4) & 0 & 0 & \lambda_2 |\alpha|^2 + \lambda_1 |\beta|^2 \end{pmatrix}. \quad (43)$$



Pre vlastné hodnoty takejto matice platí

$$\begin{aligned}\kappa_1 &= \frac{1}{2}(\lambda_1 + \lambda_2 - \sqrt{P}) \\ \kappa_2 &= \frac{1}{2}(\lambda_1 + \lambda_2 + \sqrt{P}) \\ \kappa_3 &= \frac{1}{2}(\lambda_3 + \lambda_4 - \sqrt{Q}) \\ \kappa_4 &= \frac{1}{2}(\lambda_3 + \lambda_4 + \sqrt{Q}),\end{aligned}\tag{44}$$

kde

$$\begin{aligned}P &= 4|\gamma|^2|\delta|^2(\lambda_3 - \lambda_4)^2 + (\lambda_1 - \lambda_2)^2(1 - 4|\alpha|^2|\beta|^2) \\ Q &= 4|\alpha|^2|\beta|^2(\lambda_1 - \lambda_2)^2 + (\lambda_3 - \lambda_4)^2(1 - 4|\gamma|^2|\delta|^2).\end{aligned}$$

Ak niektoré vlastné čísla sú záporné, tak potom tento stav je neseparabilný, V našom prípade sú  $\kappa_2, \kappa_4$  vždy kladné. Podmienky, za ktorých sú zvyšné dve vlastné hodnoty kladné sú

$$\begin{aligned}(1 - 4|\alpha|^2|\beta|^2) &\leq \frac{(\lambda_1 + \lambda_2)^2 - 4|\gamma|^2|\delta|^2(\lambda_3 - \lambda_4)^2}{(\lambda_1 - \lambda_2)^2} \\ (1 - 4|\gamma|^2|\delta|^2) &\leq \frac{(\lambda_3 + \lambda_4)^2 - 4|\alpha|^2|\beta|^2(\lambda_1 - \lambda_2)^2}{(\lambda_3 - \lambda_4)^2}.\end{aligned}$$

Pre konkrétne zadaný stav by sme teda vedeli určiť, kedy je separabilný a kedy je entanglovaný. Stále však nevieme vyjadriť množstvo entanglovania. Hlavným problémom pri určovaní miery entanglovania sú zmesi, ktoré môžu obsahovať aj klasické korelácie systémov. Nie je známa operácia, ktorá by oddelila klasickú koreláciu od entanglovania. Urobením čiastočnej stopy ignorujeme všetky korelácie. Čiastočnou transpozíciou rozlíšime “iba” medzi separabilnými a entanglovanými stavmi.

Ak by sme chceli, aby naše  $E$  pre separabilné stavy  $\varrho_{AB} = \sum_k p_k \varrho_A^k \otimes \varrho_B^k$  dávalo nulu, tak môžeme zdefinovať

$$E(\varrho_{AB}) = \min_{\text{rozklady}} \frac{1}{2} \left[ \sum_k p_k (S(\varrho_A^k) + S(\varrho_B^k)) - \sum_k p_k S(\varrho_{AB}^k) \right],$$

čo by mohla byť miera entanglovania. Podmienky **E1, E2, E4** sú splnené. Problém je s podmienkou **E3**. Každý rozklad separabilnej zmesi vieme previesť na rozklad do čistých stavov, čo automaticky znamená, že  $E = 0$ . Stačí sa nám teda v definícii obmedziť iba na rozklady do čistých stavov. Potom v druhý výraz bude vždy nulový. Ak počítame entropiu pre redukované stavy čistého stavu celého systému, tak vďaka Schmidtovej dekompozícii vieme, že entropie stavov podsystémov sú vždy rovnaké. A teda dostávame identický výraz pre  $E$  s výrazom pre “entanglovanie formovania” definovaným vzťahom

$$E_f(\varrho_{AB}) = \min_j \sum_j p_j E_v(|\psi_j\rangle_{AB} \langle \psi_j|).$$

Na záver este poznamenajme, že pôvodnou snahou bolo zaviesť mieru, ktorá by sa dala jednoducho aj spočítať. Táto “miera” túto vlastnosť nespĺňa.