

Úvod do kvantové teorie

28. května 2021

Obsah

1	Vznik kvantové mechaniky	2
2	Popis stavů kvantové částice	9
3	Dvoušterbinový experiment	13
4	Mach-Zehnderův interferometr, unitární operátory	20
5	Pozorovatelné veličiny a výsledky měření v kvantové mechanice	28
6	Stern-Gerlachův experiment, měření a nekompatibilita pozorovatelných	34
7	Časový vývoj stavu v kvantové mechanice	41
8	Amoniakový maser	47
9	Hyperjemná struktura vodíku	56
10	Základy kvantových počítačů	64

Kapitola 1

Vznik kvantové mechaniky

Částicová povaha světla

Na konci 19. a začátku 20. století se ukázalo, že elektromagnetické záření se v řadě jevů chová jako tok částic.

Záření absolutně černého tělesa

První z nich bylo záření absolutně černého tělesa. Vztah pro spektrální hustotu energie záření tělesa o teplotě T našel Planck v roce 1900

$$\rho(\nu, T) = \frac{8\pi}{c^3} \frac{h\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}, \quad (1.1)$$

kde $h = 6.62607004 \times 10^{-34} \text{ m}^2 \text{ kg/s}$ je Planckova konstanta (od roku 2019 má tuto fixní hodnotu). Planckův vztah perfektně souhlasí s experimentálními daty, splňuje Wienův posunovací zákon (maximum energie je vyzařováno na vlnové délce λ_{max} , která je nepřímo úměrná teplotě T) i Stefan-Boltzmannův zákon (celková vyzářená energie je úměrná čtvrté mocnině teploty), jejichž platnost lze dokázat z termodynamiky a statistické fyziky. Planckův vztah lze odvodit za předpokladu, že energie harmonického oscilátoru o frekvenci ν může nabývat pouze hodnot E_n , které jsou celočíselným násobkem energie základního kvanta záření $h\nu$ (Planckova kvantová hypotéza)

$$E_n = nh\nu, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (1.2)$$

Fotoefekt

Planckovu kvantovou hypotézu využil Einstein v roce 1905 k vysvětlení fotoelektrického jevu (emise elektronů z kovů vlivem dopadajícího elektromagnetického záření). Předpokládal, že kvanta záření hrají roli ve všech procesech interakce elektromagnetického záření s látkou na atomární úrovni. Fotoelektrický jev pak probíhá tak, že jedno kvantum záření

předá celou svoji energii jednomu elektronu. Kinetická energie vyletujícího elektronu je potom rovna

$$E_K = h\nu - E_{ion}, \quad (1.3)$$

kde E_{ion} je ionizační energie daného kovu. Einsteinovo vysvětlení souhlasilo s experimenty (k fotoefektu dochází až od určité mezní frekvence $\nu_0 = E_{ion}/h$, E_K nezávisí na intenzitě dopadajícího světla), navíc dávala předpověď pro kinetickou energii elektronu - má růst lineárně s frekvencí. To skutečně potvrdily experimenty Roberta Millikena v následujících letech.

Comptonův rozptyl

Compton zkoumal rozptyl rentgenového záření na grafitu (resp. volných elektronech v krystalové mříži grafitu). Experiment prokázal, že kvantum záření (foton) má kromě energie $E = h\nu$ i hybnost velikosti $p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$. Interakci rentgenového záření s grafitem je možné popsat jako srážku dvou částic - elektronu a fotonu (částice s nulovou klidovou hmotností). Z relativistických zákonů zachování energie a hybnosti (zapsaných v laboratorní soustavě, kde je elektron před srážkou v klidu)

$$h\nu_0 + m_e c^2 = h\nu + E, \quad (1.4)$$

$$\vec{p}_{\nu_0} = \vec{p}_\nu + \vec{p}, \quad (1.5)$$

kde E a \vec{p} jsou energie a hybnost odraženého elektronu, ν_0 a \vec{p}_{ν_0} jsou frekvence a hybnost dopadajícího fotonu, a ν a \vec{p}_ν jsou frekvence a hybnost rozptýleného fotonu, lze odvodit vztah pro změnu vlnové délky záření v závislosti na úhlu rozptylu θ

$$\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0 = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos\theta). \quad (1.6)$$

Výsledky Comptonova experimentu perfektně souhlasily s tímto vztahem.

Částicově-vlnový dualismus

Vysvětlením výše uvedených jevů je, že elektromagnetické záření se chová jako tok částic s energií a hybností

$$E = h\nu, \quad p = \frac{h}{\lambda}. \quad (1.7)$$

Současně ale víme, že elektromagnetické záření je vlnění, protože u něj můžeme pozorovat jevy jako jsou interference a difrakce, které nelze vysvětlit částicovým popisem. Podle typu experimentu se tedy u světla projeví buď jeho vlnové vlastnosti, nebo částicové. Tato dvojí povaha se označuje jako částicově-vlnový dualismus.

de Broglieho hypotéza

V roce 1923 vyslovil de Broglie hypotézu, že částicově-vlnový dualismus je obecnou vlastností mikroskopických objektů, a vztahy (1.7) platí i pro hmotné částice. Částici s energií E a hybností \vec{p} přiřadil rovinnou (de Broglieho) vlnu

$$\psi_{\vec{p},E}(\vec{x}, t) = e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{x} - Et)}, \quad (1.8)$$

kde $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ je tzv. redukovaná Planckova konstanta. Podle de Broglieho hypotézy i hmotné částice mají vykazovat vlnové chování. To se skutečně potvrdilo v roce 1927, kdy Davison a Germer objevili difrakci elektronů na krystalu niklu.

Schrödingerova vlnová mechanika

De Broglieho vlna (1.8) by měla být řešením nějaké vlnové rovnice. Tuto rovnici našel Schrödinger v roce 1926. Pro volnou nerelativistickou částici, kdy $E = \frac{p^2}{2M}$, je de Broglieho vlna řešením rovnice

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}. \quad (1.9)$$

Schrödinger ji zobecnil pro částici v potenciálu $V(\vec{x})$ do tvaru

$$\hat{H}\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}, \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta + V(\vec{x}), \quad (1.10)$$

kde \hat{H} označuje hamiltonián částice (operátor celkové energie).

Přestože Schrödinger v tuto dobu neznal význam vlnové funkce $\psi(\vec{x}, t)$ (de Broglieho hypotéza vlnovou funkci nijak neinterpretovala), dosáhl s rovnicí (1.10) řadu úspěchů. Podařilo se mu například najít stacionární řešení pro elektron v atomu vodíku, tj. částici v Coulombickém potenciálu

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (1.11)$$

Stacionární řešení mají tvar

$$\psi(\vec{x}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi_E(\vec{x}), \quad (1.12)$$

kde $\psi_E(\vec{x})$ je řešení tzv. bezčasové Schrödingerovy rovnice

$$\hat{H}\psi_E = E\psi_E. \quad (1.13)$$

Schrödinger zjistil, že pokud naloží na vlnové funkce dodatečnou podmínku tzv. kvadratické integrability

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\vec{x})|^2 d^3x < \infty, \quad (1.14)$$

pak hodnoty E v rovnici (1.13) odpovídají energiím v Bohrovu modelu atomu vodíku, tj.

$$E = E_N = -\frac{R}{N^2}, \quad N = 1, 2, 3, \dots, \quad (1.15)$$

kde $R \approx 13.6\text{eV}$ je Rydbergova energie. Pro jiné hodnoty energií kvadraticky integrovatelná řešení rovnice (1.13) neexistují.

Bornova interpretace vlnové funkce

Řešení Schrödingerovy rovnice jsou komplexní funkce reálných proměnných, nemohou tedy popisovat skutečnou vlnu která se šíří v prostoru kolem nás. Interpretaci vlnové funkce, která se ukázala být správná, navrhl v roce 1926 Born. Vlnová funkce $\psi(\vec{x})$ má význam amplitudy pravděpodobnosti nalezení částice v bodě \vec{x} , tj. $|\psi(\vec{x})|^2$ je úměrná hustotě pravděpodobnosti $w(\vec{x})$ nalezení částice v bodě \vec{x} . Takovýmto způsobem lze snadno interpretovat vlnové funkce, které splňují podmínku kvadratické integrability (1.14), protože pak je hustota pravděpodobnosti rovna

$$w(\vec{x}) = \frac{|\psi(\vec{x})|}{\|\psi\|}, \quad \|\psi\| = \left(\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\vec{x})|^2 d^3x \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (1.16)$$

Princip superpozice

Schrödingerova rovnice je lineární parciální diferenciální rovnice. Máme tedy zaručeno, že pokud $\psi_1(\vec{x}, t)$ a $\psi_2(\vec{x}, t)$ jsou řešení (1.10), pak i jejich libovolná lineární kombinace

$$\psi(\vec{x}, t) = a\psi_1(\vec{x}, t) + b\psi_2(\vec{x}, t), \quad a, b \in \mathbb{C}, \quad (1.17)$$

je také řešením Schrödingerovy rovnice. Navíc, pokud ψ_j jsou kvadraticky integrabilní funkce, pak i ψ je kvadraticky integrabilní. To plyne z tzv. Minkovského nerovnosti

$$\left(\int_{\mathbb{R}^3} |\psi_1(\vec{x}) + \psi_2(\vec{x})|^2 d^3x \right)^{\frac{1}{2}} \leq \left(\int_{\mathbb{R}^3} |\psi_1(\vec{x})|^2 d^3x \right)^{\frac{1}{2}} + \left(\int_{\mathbb{R}^3} |\psi_2(\vec{x})|^2 d^3x \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (1.18)$$

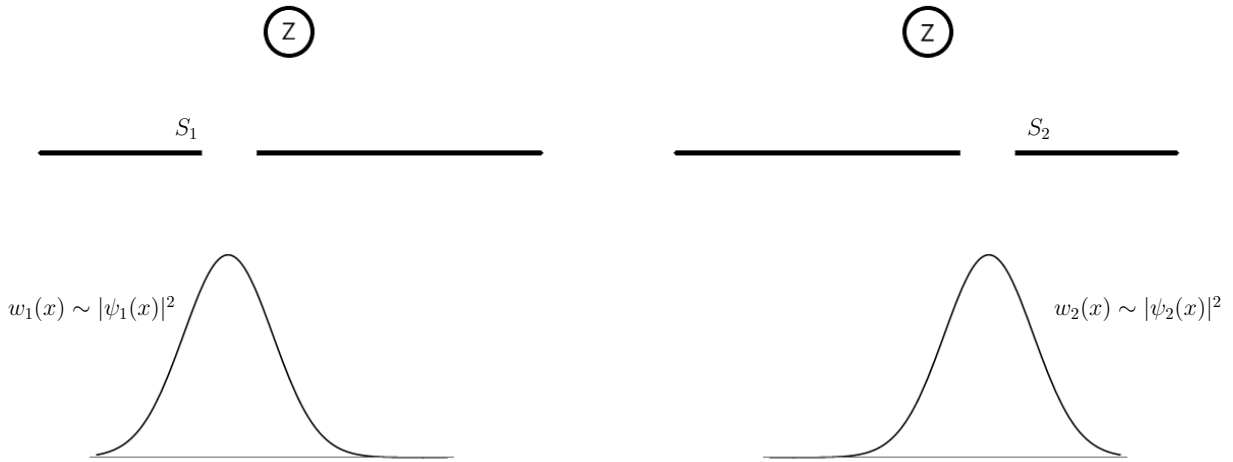
Lze tedy říci, že množina kvadraticky integrabilních funkcí tvoří vektorový prostor. Lineární kombinace kvadraticky integrabilních funkcí je opět kvadraticky integrabilní funkce. Fyzikálně se tento fakt označuje jako princip superpozice.

Dvoušterbinový experiment

Pomocí principu superpozice a Bornovy interpretace lze snadno vysvětlit interferenční jevy, které lze s kvantovými částicemi pozorovat, např. interferenci na dvou šterbinách. Řekněme, že pokud je otevřena jen šterbina S_j , pak je vlnová funkce částice $\psi_j(x)$. V této konfiguraci je hustota pravděpodobnosti $w_j(x)$ dopadu částice do bodu x úměrná $|\psi_j(x)|^2$. Pro ilustraci jsou tyto dvě konfigurace znázorněny na obrázku 1.1.

Pokud jsou ale otevřeny obě šterbiny a nemůžeme říci, kterou z nich částice prošla, je její vlnová funkce rovna superpozici obou možností

$$\psi(x) = \psi_1(x) + \psi_2(x). \quad (1.19)$$



Obrázek 1.1: Pravděpodobnost dopadu částice pokud je otevřena jen jedna štěrбина.

Hustota pravděpodobnosti dopadu částice do bodu x je v tomto případě

$$\begin{aligned}
 w(x) &\sim |\psi(x)|^2 = |\psi_1(x) + \psi_2(x)|^2 = |\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2 + \bar{\psi}_1(x)\psi_2(x) + \psi_1(x)\bar{\psi}_2(x) \\
 &\sim w_1(x) + w_2(x) + \bar{\psi}_1(x)\psi_2(x) + \psi_1(x)\bar{\psi}_2(x).
 \end{aligned}
 \tag{1.20}$$

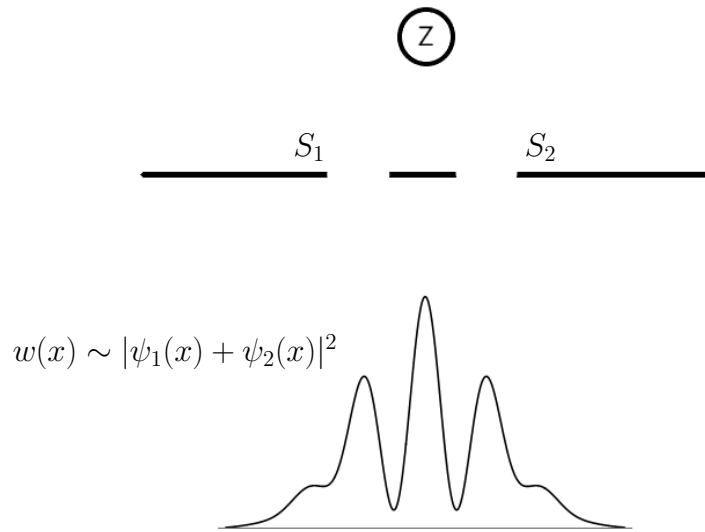
První dva členy odpovídají součtu pravděpodobností dopadu do bodu x v situaci, kdy je otevřena jen jedna štěrбина. Druhé dva členy odpovídají interferenci amplitud pravděpodobnosti, mohou být kladné i záporné - v některých bodech tak dojde ke konstruktivní interferenci a pravděpodobnost dopadu bude větší než součet $w_1(x) + w_2(x)$, v některých bodech naopak dojde k destruktivní interferenci a pravděpodobnost dopadu se zmenší, viz. obrázek 1.2.

Fundamentální roli v kvantové mechanice tedy hrají amplitudy pravděpodobnosti. Pokud neumíme rozlišit, která možnost nastala, musíme sečíst amplitudy pravděpodobnosti všech možností.

Kodaňská interpretace kvantové mechaniky

Základní fyzikální principy kvantové mechaniky formulovali Bohr a Heisenberg v letech 1925-1927 v tzv. Kodaňské interpretaci. Dá se shrnout následujícím způsobem

- Vlnová funkce představuje úplný popis stavu částice, obsahuje všechny informace o částici, které jsou k dispozici
- Vlnová funkce se s časem mění podle Schrödingerovy rovnice, až do okamžiku měření (interakce z laboratorním přístrojem)
- Výsledky měření jsou náhodné (Bornovo pravidlo)



Obrázek 1.2: Pravděpodobnost dopadu částice pokud jsou otevřeny obě štěrbin. Protože nevíme, kterou štěrbinou částice prošla, sčítají se amplitudy pravděpodobnosti a dochází k interferenci.

- Měření způsobí kolaps vlnové funkce – ze superpozice náhodně vybere jednu z možností
- Hodnoty některých pozorovatelných (např. polohy a hybnosti) nelze současně dobře definovat (Heisenbergovy relace neurčitosti)

Matematický popis kvantové mechaniky

Začátkem 30-tých let 20. století von Neumann ukázal, že fyzikální principy formulované Bohrem a Heisenbergem v Kodaňské interpretaci kvantové mechaniky lze matematicky korektně popsat pomocí teorie tzv. Hilbertových prostorů a lineárních operátorů. Hilbertův prostor \mathcal{H} je vektorový prostor se skalárním součinem - formou (\cdot, \cdot) , která dvojici vektorů přiřadí komplexní číslo. Například ve vektorovém prostoru kvadraticky integrabilních funkcí tří proměnných lze zavést skalární součin vztahem

$$(\psi, \phi) = \int_{\mathbb{R}^3} \bar{\psi}(\vec{x})\phi(\vec{x})d^3x. \quad (1.21)$$

Tento Hilbertův prostor se označuje jako $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$. Vlnové funkce, které popisují stavy kvantové částice v \mathbb{R}^3 , jsou nenulové vektory $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$. Pozorovatelným veličinám, jako je poloha, hybnost, nebo energie, odpovídají hermitovské operátory působící na Hilbertově prostoru \mathcal{H} . Příkladem je hamiltonián zavedený v rovnici (1.10), který odpovídá celkové energii kvantové částice v potenciálu $V(\vec{x})$. Možné hodnoty pozorovatelných veličin,

které můžeme experimentálně naměřit, tvoří spektrum příslušného operátoru. Například, možné hodnoty energie E kvantové částice jsou určeny řešením bezčasové Schrödingerovy rovnice (1.13), což je vlastně rovnice na vlastní čísla hamiltoniánu \hat{H} .

Matematický aparát potřebný k práci s Hilbertovými prostory jako je $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$ je ale poměrně komplikovaný, protože takovéto vektorové prostory nemají konečnou dimenzi. V dalším se proto omezíme na jednoduché příklady kvantové mechaniky kde vystačíme s Hilbertovými prostory konečné dimenze, jejichž vlastnosti znáte z přednášek z lineární algebry.

Kapitola 2

Popis stavů kvantové částice

Základní postulát kvantové mechaniky se týká popisu stavů kvantové částice. Říká, že prostor možných stavů kvantové částice je Hilbertův prostor \mathcal{H} , a stavy jsou popsány nenulovými vektory $\psi \in \mathcal{H}$.

Uvedeme zde některé základní definice a vlastnosti Hilbertových prostorů.

Hilbertovy prostory

Hilbertův prostor je vektorový prostor (v kvantové mechanice vždy uvažujeme prostor nad \mathbb{C}) se skalárním součinem, což je forma

$$(\cdot, \cdot) : \mathcal{H} \times \mathcal{H} \mapsto \mathbb{C}. \quad (2.1)$$

Skalární součin je lineární v pravém argumentu

$$(\psi, a\phi + b\chi) = a(\psi, \phi) + b(\psi, \chi), \quad (2.2)$$

antilineární v levém

$$(a\psi + b\phi, \chi) = \bar{a}(\psi, \chi) + \bar{b}(\phi, \chi), \quad (2.3)$$

symetrický

$$(\psi, \phi) = \overline{(\phi, \psi)}, \quad (2.4)$$

a striktně pozitivní

$$(\psi, \psi) = 0 \iff \psi = 0. \quad (2.5)$$

Skalární součin definuje normu vektoru

$$\|\psi\| = \sqrt{(\psi, \psi)}. \quad (2.6)$$

Příkladem Hilbertova prostoru konečné dimenze N je \mathbb{C}^N se standardním skalárním součinem, který je zaveden vztahem

$$(\psi, \phi) = \sum_{i=1}^N \bar{a}_i b_i, \quad \psi = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix}, \quad \phi = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_N \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

Pokud zavedeme hermitovské sdružení vektoru (transpozice + komplexní sdružení)

$$\psi^\dagger = (\bar{a}_1, \bar{a}_2, \dots, \bar{a}_N), \quad (2.8)$$

pak lze skalární součin zapsat jako součin matic (matici rozměru $1 \times N$ násobíme zprava maticí rozměru $N \times 1$, výsledkem je matice 1×1 , tj. 1 komplexní číslo)

$$(\psi, \phi) = \psi^\dagger \phi = (\bar{a}_1, \bar{a}_2, \dots, \bar{a}_N) \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_N \end{pmatrix}. \quad (2.9)$$

Hilbertův prostor musí být navíc úplný, tj. každá cauchyovská posloupnost vektorů musí být konvergentní. Tento požadavek hraje roli pro Hilbertovy prostory nekonečné dimenze (jako je prostor kvadraticky integrabilních funkcí $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$), na konečné dimenzi je automaticky splněn, protože každý Hilbertův prostor dimenze N je izomorfní \mathbb{C}^N a ten je úplný. V dalším se omezíme na Hilbertovy prostory konečné dimenze N .

Důležitou roli v Hilbertových prostorech hraje ortonormální báze. Je to N -tice vektorů $\{\psi_1, \dots, \psi_N\}$, které jsou ortogonální (skalární součin dvojice různých vektorů je roven nule) a normované k jedné. To můžeme kompaktně zapsat pomocí tzv. relací ortogonalit

$$(\psi_i, \psi_j) = \delta_{ij}. \quad (2.10)$$

Výhodou ortonormální báze (oproti běžné bázi tvořené pouze lineárně nezávislými vektory, které ale nejsou ortogonální) je snadný rozvoj vektorů. Koeficienty rozvoje (tzv. Fourierovy koeficienty) jsou určeny pomocí skalárního součinu bazického vektoru a vektoru, který chceme do báze rozepsat. Platí tedy tzv. Fourierův rozvoj

$$\phi = \sum_{i=1}^N (\psi_i, \phi) \psi_i. \quad (2.11)$$

Dále platí tzv. Parsevalova rovnost (zobecnění Pythagorovy věty)

$$\|\phi\|^2 = (\phi, \phi) = \sum_{i=1}^N |(\psi_i, \phi)|^2. \quad (2.12)$$

Diracův bra-ketový formalismus

V kvantové mechanice se často využívá abstraktní zápis vektorů, který vymyslel Dirac. Vektory z \mathcal{H} budeme značit pomocí tzv. ketů, což je symbol $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$. Skalární součin dvojice ketů $|\psi\rangle$ a $|\phi\rangle$ se nazývá braket a zapisuje se ve tvaru $\langle\psi|\phi\rangle$. Ke každému ketu $|\psi\rangle$ můžeme zavést tzv. bra $\langle\psi|$ - prvek duálního prostoru \mathcal{H}^* , tj. lineární funkcionál (zobrazení z \mathcal{H} do \mathbb{C}), pomocí skalárního součinu

$$\langle\psi|(|\phi\rangle) \equiv \langle\psi|\phi\rangle. \quad (2.13)$$

V Hilbertových prostorech platí tzv. Rieszova věta, která říká, že \mathcal{H} a \mathcal{H}^* jsou izomorfní, tj. přiřazení $|\psi\rangle \leftrightarrow \langle\psi|$ je navzájem jednoznačné.

Jako příklad uvažujme \mathbb{C}^N . Označíme vektory standardní ortonormální báze jako kety $|1\rangle, \dots, |N\rangle$, tj.

$$|1\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |2\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \dots, \quad |N\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2.14)$$

Pro vektory platí relace ortogonality

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij}. \quad (2.15)$$

Bra $\langle i|$ můžeme spojit s hermitovským sdružením sloupcových vektorů

$$\langle 1| \equiv (1, 0, \dots, 0), \quad (2.16)$$

$$\langle 2| \equiv (0, 1, \dots, 0), \quad (2.17)$$

\vdots

$$\langle N| \equiv (0, 0, \dots, 1). \quad (2.18)$$

Fourierův rozvoj a Parsevalova rovnost se v braketovém formalismu zapíší ve tvaru

$$|\phi\rangle = \sum_{i=1}^N \langle i|\phi\rangle \psi_i, \quad (2.19)$$

$$\|\phi\|^2 = \langle\phi|\phi\rangle = \sum_{i=1}^N |\langle i|\phi\rangle|^2. \quad (2.20)$$

Pokud kety $|\psi\rangle$ a $|\phi\rangle$ identifikujeme s vektory ψ a ϕ z rovnic (2.7), pak pro jejich koeficienty rozvoje do standardní báze platí

$$a_i = \langle i|\psi\rangle, \quad b_i = \langle i|\phi\rangle. \quad (2.21)$$

Bra $\langle\psi|$ můžeme identifikovat s ψ^\dagger z rovnice (2.8)

Role skalárního součinu v kvantové mechanice

Skalární součin má v kvantové mechanice zásadní význam. Postuluje se, že skalární součin $\langle\psi|\phi\rangle$ je amplituda pravděpodobnosti přechodu částice ze stavu $|\phi\rangle$ do stavu $|\psi\rangle$. Pravděpodobnost přechodu ze stavu $|\phi\rangle$ do stavu $|\psi\rangle$ je tedy

$$W_{\phi \rightarrow \psi} = |\langle\psi|\phi\rangle|^2. \quad (2.22)$$

Tento vztah platí, pokud jsou oba vektory normované k jedné, tj.

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1, \quad \langle \phi | \phi \rangle = 1, \quad (2.23)$$

jinak je potřeba levou stranu (2.22) podělit kvadrátem normy obou vektorů. V dalším budeme vždy předpokládat, že všechny vektory jsou normované k 1. Stavy kvantové částice tedy popisujeme jednotkovými vektory $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$.

Kapitola 3

Dvoušterbinový experiment

V této kapitole si představíme základní koncepty kvantové mechaniky (princip superpozice, interference amplitud pravděpodobnosti) na příkladu dvoušterbinového experimentu. Řekněme, že máme jednofotonový zdroj, tj. v experimentu je vždy maximálně 1 foton. Foton projde soustavou dvou šterbin S_1, S_2 a dopadne na stínítko. Budeme uvažovat diskrétní variantu experimentu (abychom mohli pracovat s Hilbertovým prostorem konečné dimenze), kdy je stínítko tvořeno sadou N detektorů $D_i, i = 1, \dots, N$. Foton může dopadnout vždy jen do jednoho detektoru.

Varianty s jednou šterbinou

Uvažujme nejprve varianty, kdy je otevřená jen jedna ze šterbin $S_j, j = 1, 2$. Označíme počet zaznamenaných fotonů v detektoru D_i jako $n_i^{(j)}, j = 1, 2$. Řekněme, že experiment provedeme celkem s M fotony, tj.

$$M = \sum_{i=1}^N n_i^{(j)}. \quad (3.1)$$

Z četností dopadu můžeme zrekonstruovat pravděpodobnostní rozdělení dopadu fotonu do detektoru D_i (předpokládáme že M je hodně veliké) pokud je otevřena pouze šterbina S_j

$$W_j(i) = \frac{n_i^{(j)}}{M}, \quad j = 1, 2. \quad (3.2)$$

Pro ilustraci jsou tyto dvě situace znázorněny na obrázku 3.1.

Varianta se dvěma šterbinami - interference

Přejdeme nyní k variantě, kdy jsou otevřeny obě šterbiny. Předpokládáme, že experiment je uspořádán tak, že foton může s pravděpodobností 50% projít šterbinou S_1 nebo S_2 , ale

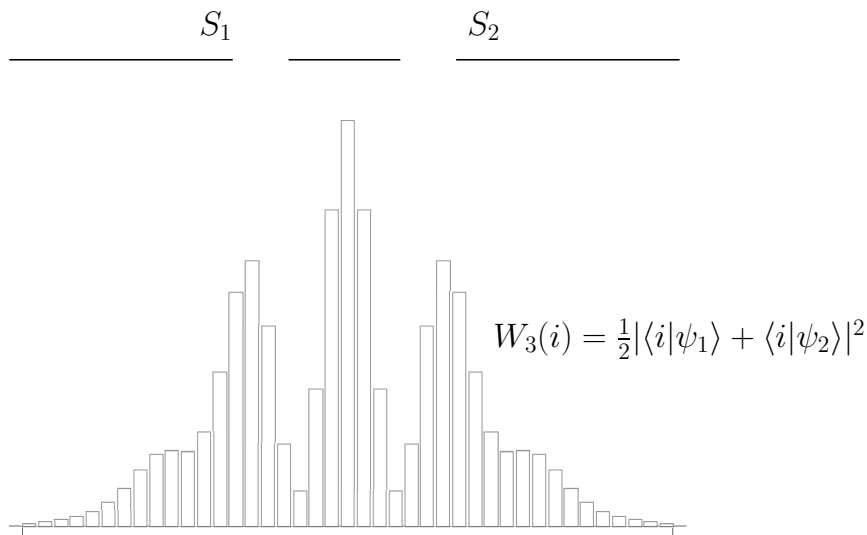


Obrázek 3.1: Experiment s jednou otevřenou štěrbinou.

není možné určit, kterou prošel. Výsledné pravděpodobnostní rozdělení v tomto případě nebude průměr situací se štěrbinami S_1 nebo S_2 (jak by platilo pro klasické částice)

$$W_3(i) \neq \frac{1}{2} (W_1(i) + W_2(i)). \quad (3.3)$$

Pokud totiž není možné určit trajektorii fotonu (tj. kterou ze štěrbin prošel), pak se chová jako vlna, a výsledné pravděpodobnostní rozdělení bude vykazovat interferenci, jako na obrázku 3.2.



Obrázek 3.2: Experiment se dvěma otevřenými štěrbinami. Protože není možné určit trajektorii fotonu, projeví se jeho vlnové vlastnosti. Výsledkem je interferenční obrazec.

Kvantový popis experimentu

Ukážeme si nyní kvantově mechanický popis různých variant experimentu. Označme jako $|i\rangle$ stav, kdy foton směřuje do detektoru D_i (ale ještě do něj nedopadl). Foton v tomto stavu nemůže dopadnout do jiného detektoru, takže kety jsou ortogonální

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij}. \quad (3.4)$$

Podle (2.22) je totiž skalární součin roven amplitudě přechodu ze stavu $|j\rangle$ do stavu $|i\rangle$, tj. amplitudě dopadu fotonu směřujícího do detektoru D_j do detektoru D_i , a tento jev nemůže nastat pokud $i \neq j$. Navíc předpokládáme, že do nějakého z detektorů D_i foton dopadnout musí. Kety $|i\rangle$ tak budou tvořit ortonormální bázi našeho Hilbertova prostoru

$$\mathcal{H}_{DS} = [|1\rangle, \dots, |N\rangle]_{\lambda}. \quad (3.5)$$

Označíme stav fotonu poté co prošel štěrbinou S_j jako $|\psi_j\rangle$. Tyto kety můžeme rozepsat do báze s použitím Fourierova rozvoje (2.19)

$$|\psi_j\rangle = \sum_{i=1}^N \langle i|\psi_j\rangle |i\rangle. \quad (3.6)$$

Skalární součiny $\langle i|\psi_j\rangle$ jsou amplitudy pravděpodobnosti dopadu fotonu do detektoru D_i , pokud je otevřena štěrbina S_j . Pravděpodobnostní rozdělení v prvních dvou variantách je tedy

$$W_j(i) = W_{\psi_j \rightarrow i} = |\langle i|\psi_j\rangle|^2, j = 1, 2. \quad (3.7)$$

Poznamenejme, že všechny kety jsou normované k jedné. Z Parsevalovy rovnosti (2.20) pak plyne

$$\sum_{i=1}^N W_j(i) = \sum_{i=1}^N |\langle i|\psi_j\rangle|^2 = \langle \psi_j|\psi_j\rangle = 1, \quad (3.8)$$

a tedy $W_j(i)$, $j = 1, 2$, jsou skutečně pravděpodobnostní rozdělení.

Uvažujme nyní třetí variantu experimentu, kdy jsou otevřené obě štěrby, ale není možné určit, kterou štěrbinou foton prošel. V takovém případě, je stav fotonu po průchodu systémem štěrbin roven superpozici stavů $|\psi_{1,2}\rangle$

$$|\psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle). \quad (3.9)$$

Faktor $\frac{1}{\sqrt{2}}$ zajišťuje normalizaci stavu $|\psi_3\rangle$. Kety $|\psi_j\rangle$, $j = 1, 2$ jsou ortogonální (pokud foton prošel štěrbinou S_1 , nemohl projít štěrbinou S_2), takže platí

$$\langle \psi_3|\psi_3\rangle = \frac{1}{2} (\langle \psi_1| + \langle \psi_2|) (|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) = \frac{1}{2} (\langle \psi_1|\psi_1\rangle + \langle \psi_2|\psi_2\rangle) = 1. \quad (3.10)$$

Fourierův rozklad ketu $|\psi_3\rangle$ do báze je roven

$$|\psi_3\rangle = \sum_{i=1}^N \langle i|\psi_3\rangle |i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{i=1}^N (\langle i|\psi_1\rangle + \langle i|\psi_2\rangle) |i\rangle, \quad (3.11)$$

tj. pro amplitudy pravděpodobnosti platí

$$\langle i|\psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle i|\psi_1\rangle + \langle i|\psi_2\rangle) \quad (3.12)$$

Pravděpodobnostní rozdělení dopadu fotonů je pak

$$\begin{aligned} W_3(i) &= W_{\psi_3 \rightarrow i} = |\langle i|\psi_3\rangle|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle i|\psi_1\rangle + \langle i|\psi_2\rangle) \right|^2 \\ &= \frac{1}{2} (W_1(i) + W_2(i)) + \frac{1}{2} \left(\langle i|\psi_1\rangle \overline{\langle i|\psi_2\rangle} + \overline{\langle i|\psi_1\rangle} \langle i|\psi_2\rangle \right). \end{aligned} \quad (3.13)$$

První část je průměr pravděpodobnosti dopadů pokud je otevřena jen jedna štěrbin. Druhá část představuje interferenci amplitud pravděpodobnosti, může být kladná i záporná. Někde tak dojde ke konstruktivní interferenci a do detektoru D_i dopadne více fotonů, než je prostý součet dvou možností, někde naopak dojde k destruktivní interferenci a počet dopadů se sníží. Výsledek je podobný jako ve spojitém případě (1.20).

Dvoušterbinový experiment s polarizací

K interferenci dochází pouze pokud není možné určit, kterou šterbinou foton prošel. V takovém případě musíme sčítat amplitudy pravděpodobnosti. Pokud ale je možné určit trajektorii fotonu, interferenční obrazec zmizí a výsledné pravděpodobnostní rozdělení bude průměr situací 1 a 2.

V případě fotonu je možné informaci o trajektorii "zapsat" např. do jeho polarizace. V kvantovém popisu polarizace odpovídají lineární polarizaci v rovině kolmé na směr šíření fotonu dva bazické stavy $|H\rangle$ a $|V\rangle$ (horizontální a vertikální lineární polarizace). Např. pokud se foton šíří ve směru osy z , pak $|H\rangle$ odpovídá lineární polarizaci ve směru osy x , a $|V\rangle$ popisuje lineární polarizaci ve směru osy y . Tyto dva stavy jsou od sebe jednoznačně rozlišitelné (horizontálně polarizovaný foton nemůže mít současně vertikální polarizaci), takže jsou ortogonální

$$\langle H|V\rangle = 0. \quad (3.14)$$

Každý polarizační stav fotonu můžeme zapsat jako lineární kombinaci horizontální a vertikální polarizace, tj. kety $|H\rangle$ a $|V\rangle$ tvoří ortonormální bázi Hilbertova prostoru polarizace fotonu

$$\mathcal{H}_{pol} = [|H\rangle, |V\rangle]_{\lambda}. \quad (3.15)$$

U dvoušterbinového experimentu s polarizací potřebujeme popsat jak prostorový stav fotonu (tj. do jakého detektoru dopadne), tak i jeho polarizační stav. K tomu použijeme

tzv. tenzorový součin vektorových prostorů - celkový Hilbertův prostor bude tenzorový součin \mathcal{H}_{DS} a \mathcal{H}_{pol}

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{DS} \otimes \mathcal{H}_{pol}. \quad (3.16)$$

Tenzorový součin se nejnázne definuje zavedením ortonormální báze v \mathcal{H} , kterou definujeme pomocí vektorů (používají se různé zápisy pro srozumitelnost vztahů)

$$\begin{aligned} |i\rangle \otimes |H\rangle &\equiv |i\rangle|H\rangle \equiv |i, H\rangle, & i = 1, \dots, N, \\ |i\rangle \otimes |V\rangle &\equiv |i\rangle|V\rangle \equiv |i, V\rangle, & i = 1, \dots, N. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Ke každému prostorovému stavu $i = 1, \dots, N$, máme dva polarizační stavy, tj. celkový Hilbertův prostor bude mít dimenzi $2N$, což je součin dimenzí prostorů \mathcal{H}_{DS} a \mathcal{H}_{pol} . Pro vektory (3.17) platí

$$\langle i, \alpha | j, \beta \rangle \equiv \langle i | j \rangle \langle \alpha | \beta \rangle = \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta}, \quad i, j = 1, \dots, N, \quad \alpha, \beta = H, V. \quad (3.18)$$

Řekněme, že náš jednofotonový zdroj produkuje horizontálně polarizované fotony. Pokud se s polarizací v průběhu experimentu nic neděje, bude celkový stav fotonu $|\psi'_3\rangle$ ve třetí variantě (s oběma štěrbinami) popsán ketem $|\psi_3\rangle$ (3.9), ke kterému přidáme horizontální polarizační stav, tj.

$$|\psi'_3\rangle = |\psi_3\rangle|H\rangle. \quad (3.19)$$

Pravděpodobnost dopadu fotonu do detektoru D_i lze napsat jako součet pravděpodobností dopadu horizontálně polarizovaného fotonu a pravděpodobnosti dopadu vertikálně polarizovaného fotonu (horizontální a vertikální polarizace jsou jednoznačně odlišitelné), tj.

$$W'_3(i) = W_{\psi'_3 \rightarrow i, H} + W_{\psi'_3 \rightarrow i, V} = |\langle i, H | \psi'_3 \rangle|^2 + |\langle i, V | \psi'_3 \rangle|^2. \quad (3.20)$$

Protože se s polarizací nic neděje, zůstává stále horizontální, takže druhý člen je roven nule

$$\langle i, V | \psi'_3 \rangle = \langle i | \psi_3 \rangle \underbrace{\langle V | H \rangle}_0 = 0. \quad (3.21)$$

Pravděpodobnostní rozdělení dopadu fotonu $W'_3(i)$ bude stejné jako pokud polarizaci vůbec neuvažujeme (tj. bude mít tvar interferenčního obrazce jako na obrázku 3.2)

$$W'_3(i) = |\langle i, H | \psi'_3 \rangle|^2 = |\langle i | \psi_3 \rangle \underbrace{\langle H | H \rangle}_1|^2 = |\langle i | \psi_3 \rangle|^2 = W_3(i). \quad (3.22)$$

K "zapsání" trajektorie fotonu do jeho polarizace musíme polarizační stav pozměnit, a to různým způsobem pro štěrbinu S_1 a S_2 . Toho lze dosáhnout např. vložení různých čtvrtvlnných destiček před štěrbinu. Čtvrtvlnná destička změnila lineární polarizaci na kruhovou. Uvažujme tedy čtvrtou konfiguraci experimentu, kde před štěrbinu S_1 vložíme destičku, která změnila horizontální polarizaci na levotočivou kruhovou polarizaci, a před štěrbinu S_2 vložíme destičku pootočenou o 90° , která změnila horizontální polarizaci na pravotočivou.

Těmto dvěma polarizačním stavům fotonu přiřadíme kety $|L\rangle$ a $|R\rangle$. Stav s pravotočivou a levotočivou polarizací jsou opět jednoznačně rozlišitelné, tj.

$$\langle R|L\rangle = 0. \quad (3.23)$$

Tvoří jinou ortonormální bázi Hilbertova prostoru polarizace \mathcal{H}_{pol} . Vektory $|R\rangle$ a $|L\rangle$ můžeme rozepsat do báze $\{|H\rangle, |V\rangle\}$ způsobem

$$\begin{aligned} |R\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle - i|V\rangle), \\ |L\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle + i|V\rangle). \end{aligned} \quad (3.24)$$

Snadno se ověří, že kety jsou opravdu ortogonální (nesmíme zapomenout na antilinearitu skalárního součinu v levém argumentu, resp. $\langle R| = \frac{1}{\sqrt{2}}(\langle H| + i\langle V|)$)

$$\langle R|L\rangle = \frac{1}{2}(\langle H| + i\langle V|)(|H\rangle + i|V\rangle) = \frac{1}{2}(\langle H|H\rangle - \langle V|V\rangle) = 0. \quad (3.25)$$

Stav fotonu poté, co projde soustavou štěrbin se čtvrtvlnnými destičkami, je popsán ketem

$$|\psi_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_1\rangle|L\rangle + |\psi_2\rangle|R\rangle), \quad (3.26)$$

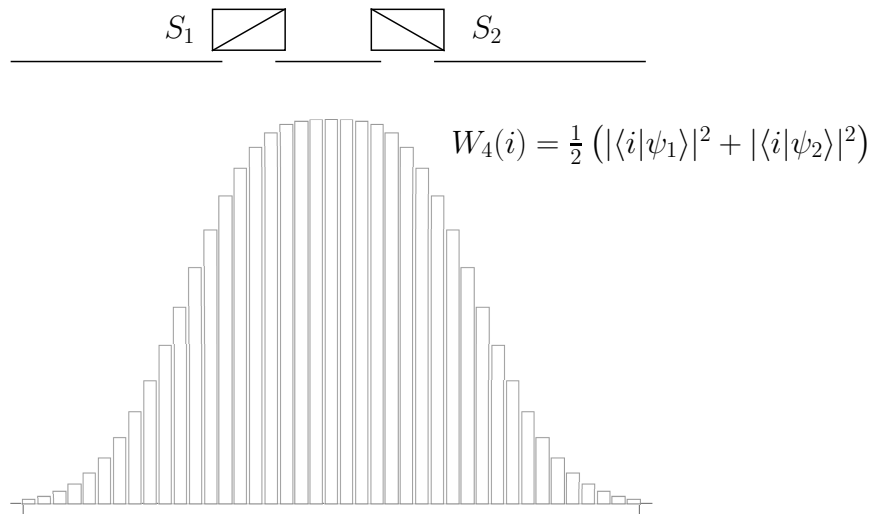
kde $|\psi_{1,2}\rangle$ jsou zapsané v rovnici (3.6). Pravděpodobnost dopadu fotonu do detektoru D_i můžeme rozložit na součet pravděpodobností dopadu fotonu s levotočivou polarizací a dopadu fotonu s pravotočivou polarizací (stejně jako v případě horizontální a vertikální polarizace se jedná o dvě vzájemně se vylučující možnosti, a každý polarizační stav fotonu lze napsat jako lineární kombinaci levotočivé a pravotočivé polarizace). Ve čtvrté konfiguraci experimentu tak dostaneme

$$\begin{aligned} W_4(i) &= W_{\psi_4 \rightarrow i, L} + W_{\psi_4 \rightarrow i, R} = |\langle i, L|\psi_4\rangle|^2 + |\langle i, R|\psi_4\rangle|^2 \\ &= \left| \frac{1}{\sqrt{2}}(\langle i|\psi_1\rangle \underbrace{\langle L|L\rangle}_1 + \langle i|\psi_2\rangle \underbrace{\langle L|R\rangle}_0) \right|^2 + \left| \frac{1}{\sqrt{2}}(\langle i|\psi_1\rangle \underbrace{\langle R|L\rangle}_0 + \langle i|\psi_2\rangle \underbrace{\langle R|R\rangle}_1) \right|^2 \\ &= \frac{1}{2}|\langle i|\psi_1\rangle|^2 + \frac{1}{2}|\langle i|\psi_2\rangle|^2 = W_1(i) + W_2(i). \end{aligned} \quad (3.27)$$

Vidíme, že amplitudy neinterferují, a pravděpodobnostní rozdělení je dáno prostým průměrem možností 1 a 2. Pro ilustraci je znázorněno na obrázku 3.3.

Komplementarita vlnových a částicových vlastností

Viděli jsme, že k interferenci amplitud dojde, pokud není možné určit, kterou štěrbinou foton prošel. V takovém případě se chová jako vlna, musíme sčítat amplitudy pravděpodobnosti různých možností, a výsledkem je interferenční obrazec jako na obrázku 3.2. Pokud



Obrázek 3.3: Experiment se dvěma otevřenými štěrbinami, před které jsou umístěné čtvrtvlnné destičky. Z polarizace fotonu je možné určit jeho trajektorii. V tomto případě se projeví jeho částicové vlastnosti a k interferenci amplitud pravděpodobnosti nedojde. Výsledkem je prostý průměr situací na obrázku 3.1.

je možné rozlišit trajektorie fotonu, chová se jako (klasická) částice. Pak spolu amplitudy neinterferují, a výsledek odpovídá sčítání pravděpodobností, viz. obrázek 3.3.

Vlnové a částicové vlastnosti kvantových objektů jsou tzv. komplementární. Podle typu experimentu se projeví buď vlnové vlastnosti, nebo částicové, nikdy oboje naráz.

Kapitola 4

Mach-Zehnderův interferometr, unitární operátory

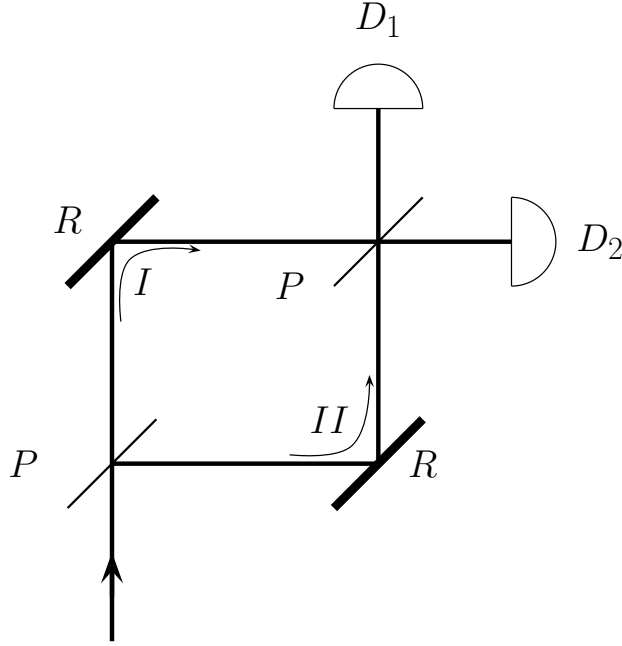
V této kapitole se podíváme na další příklad interferenčního experimentu, tzv. Mach-Zehnderův interferometr. Zároveň si ukážeme, jakým způsobem můžeme popsat působení některých fyzikálních zařízení na stav kvantové částice.

Mach-Zehnderův interferometr

Základní varianta Mach-Zehnderova interferometru je na obrázku 4.1. Jedná se o sestavu složenou ze dvou polopropustných zrcadel, dvou perfektních zrcadel, a dvou detektorů. Optické dráhy v ramenech I a II jsou stejně dlouhé. Popíšme nejprve, jak se v něm chová klasické koherentní světlo. Dopadající vlna se na prvním polopropustném zrcadle rozdělí na dvě s poloviční intenzitou, které se po odrazu znovu spojí na druhém polopropustném zrcadle. Každý odraz na polopropustném nebo perfektním zrcadle způsobí posun vlny o čtvrtinu periody. Vlna, která projde polopropustným zrcadlem se nijak nemění. Obě vlny, které dopadnou do detektoru D_1 , se odrazily dvakrát, takže jejich vzájemný posun je nulový a dochází ke konstruktivní interferenci. U detektoru D_2 ale vlna šířící se ramenem I prodělala pouze jeden odraz, zatímco vlna šířící se ramenem II tři. Jejich vzájemný posun je tedy roven polovině periody. Dochází k destruktivní interferenci a vlny se navzájem vruší. Veškeré světlo dopadne pouze do detektoru D_1 .

Kvantový popis interference jednoho fotonu v interferometru

Uvažujme nyní místo klasického silného koherentního světla zdroj produkující jednotlivé fotony. Výsledek experimentu bude obdobný jako v klasickém případě - všechny fotony dopadnou do detektoru D_1 . Ukážeme si, jak experiment popsat pomocí kvantové mechaniky.



Obrázek 4.1: Základní varianta Mach-Zehnderova interferometru. P jsou polopropustná zrcadla, R perfektní zrcadla, D_1 a D_2 představují jednofotonové detektory.

V tomto případě si vystačíme s Hilbertovým prostorem \mathcal{H} dimenze 2, který má ortonormální bázi tvořenou kety $|\uparrow\rangle$, $|\rightarrow\rangle$. Ty odpovídají směru šíření fotonu "nahoru" a "doprava". Počáteční stav je popsán ketem

$$|\psi_0\rangle = |\uparrow\rangle. \quad (4.1)$$

Vlivem optických prvků (polopropustných nebo perfektních zrcadel) se stav fotonu změní. Odraz změní stav $|\uparrow\rangle$ na $|\rightarrow\rangle$ a naopak, navíc přidá fázi $\pi/2$, tj. příslušný ket se ještě vynásobí faktorem $e^{i\pi/2} = i$ (odpovídá posunu vlny o čtvrtinu periody v klasickém případě). Akce zrcadel na stav fotonu lze popsat operátorem \hat{R} , který působí na bazické stavy následujícím způsobem

$$\begin{aligned} \hat{R}|\uparrow\rangle &= i|\rightarrow\rangle, \\ \hat{R}|\rightarrow\rangle &= i|\uparrow\rangle. \end{aligned} \quad (4.2)$$

V bázi ketů $\{|\uparrow\rangle, |\rightarrow\rangle\}$ je tento operátor reprezentovaný maticí 2×2 . Maticové elementy R_{ij} , $i, j = \uparrow, \rightarrow$, jsou rovny

$$R_{ij} = \langle i|\hat{R}|j\rangle. \quad (4.3)$$

S použitím vztahů (4.2) a ortonormality ketů $|\uparrow\rangle$ a $|\rightarrow\rangle$ nalezneme

$$\begin{aligned} R_{\uparrow\uparrow} &= \langle\uparrow|\hat{R}|\uparrow\rangle = i\langle\uparrow|\rightarrow\rangle = 0, \\ R_{\uparrow\rightarrow} &= \langle\uparrow|\hat{R}|\rightarrow\rangle = i\langle\uparrow|\uparrow\rangle = i, \\ R_{\rightarrow\uparrow} &= \langle\rightarrow|\hat{R}|\uparrow\rangle = i\langle\rightarrow|\rightarrow\rangle = i, \\ R_{\rightarrow\rightarrow} &= \langle\rightarrow|\hat{R}|\rightarrow\rangle = i\langle\rightarrow|\uparrow\rangle = 0. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Matice operátoru \hat{R} je pak rovna

$$R = \begin{pmatrix} \langle \uparrow | \hat{R} | \uparrow \rangle & \langle \uparrow | \hat{R} | \rightarrow \rangle \\ \langle \rightarrow | \hat{R} | \uparrow \rangle & \langle \rightarrow | \hat{R} | \rightarrow \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.5)$$

Snadno se ukáže, že je to unitární operátor, tj. že platí

$$\hat{R}\hat{R}^\dagger = \hat{R}^\dagger\hat{R} = \hat{I}, \quad (4.6)$$

kde \hat{I} je jednotkový operátor. Vztah stačí ověřit pro matice (4.5) (je to matice operátoru v ortonormální bázi, pokud je unitární matice je unitární i operátor). Hermitovské sdružení (komplexní sdružení + transpozice) matice R je

$$R^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.7)$$

Součinem matic pak dostaneme

$$RR^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (4.8)$$

v opačném pořadí je výsledek stejný.

U polopropustného zrcadla foton s pravděpodobností 50% projde (a jeho stav se nezmění), nebo se odrazí (a jeho stav se změní a vynásobí i). Neděje se tak náhodně, stav fotonu bude koherentní superpozicí $|\uparrow\rangle$ a $|\rightarrow\rangle$. Akce polopropustného zrcadla lze popsat pomocí operátoru \hat{P} , který působí na bazické stavy takto

$$\begin{aligned} \hat{P}|\uparrow\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + i|\rightarrow\rangle), \\ \hat{P}|\rightarrow\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(i|\uparrow\rangle + |\rightarrow\rangle). \end{aligned} \quad (4.9)$$

V naší bázi je operátor \hat{P} reprezentován maticí

$$P = \begin{pmatrix} \langle \uparrow | \hat{P} | \uparrow \rangle & \langle \uparrow | \hat{P} | \rightarrow \rangle \\ \langle \rightarrow | \hat{P} | \uparrow \rangle & \langle \rightarrow | \hat{P} | \rightarrow \rangle \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix}. \quad (4.10)$$

Operátor \hat{P} je opět unitární. Matice hermitovsky sdruženého operátoru je

$$P^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ -i & 1 \end{pmatrix}. \quad (4.11)$$

Vynásobením ověříme, že jsou to unitární matice

$$P P^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ -i & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (4.12)$$

výsledek součinu v opačném pořadí je stejný.

Popišme nyní změnu stavu fotonu v průběhu experimentu. Můžeme to chápat jako časový vývoj v diskretních krocích. Stav po průchodu prvním polopropustným zrcadlem dostaneme aplikací operátoru \hat{P} na počáteční stav $|\psi_0\rangle$

$$|\psi_1\rangle = \hat{P}|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + i|\rightarrow\rangle). \quad (4.13)$$

Stav po odrazu na zrcadlech získáme použitím operátoru \hat{R} na stav $|\psi_1\rangle$

$$|\psi_2\rangle = \hat{R}|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(i|\rightarrow\rangle - |\uparrow\rangle). \quad (4.14)$$

Stav po průchodu druhým polopropustným zrcadlem je pak roven

$$\begin{aligned} |\psi_3\rangle &= \hat{P}|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{i}{\sqrt{2}}(i|\uparrow\rangle + |\rightarrow\rangle) - \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + i|\rightarrow\rangle) \right) \\ &= \frac{1}{2}(-|\uparrow\rangle + i|\rightarrow\rangle - |\uparrow\rangle - i|\rightarrow\rangle) = -|\uparrow\rangle. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Pravděpodobnosti dopadu fotonu do detektoru D_1 nebo D_2 jsou identické s pravděpodobnostmi přechodu ze stavu $|\psi_3\rangle$ do stavů $|\uparrow\rangle$ nebo $|\rightarrow\rangle$

$$\begin{aligned} W_1 &= |\langle\uparrow|\psi_3\rangle|^2, \\ W_2 &= |\langle\rightarrow|\psi_3\rangle|^2. \end{aligned} \quad (4.16)$$

V základní variantě Mach-Zehnderova interferometru je foton na výstupu ve stavu $-|\uparrow\rangle$, takže foton s pravděpodobností jedna dopadne do detektoru D_1 . Vývoj stavu fotonu je znázorněn na obrázku 4.2.

Varianta bez interference

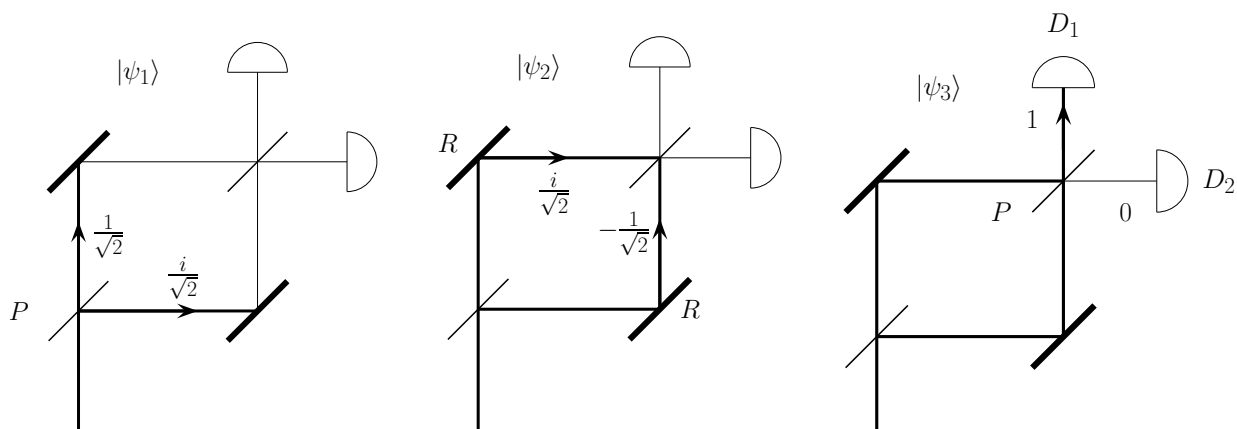
Uvažujme nyní variantu experimentu, kde vynecháme druhé polopropustné zrcadlo jako na obrázku 4.3. V takovém případě amplitudy pravděpodobnosti nemohou interferovat. Stav fotonu na výstupu z upraveného interferometru je

$$|\psi'_3\rangle = |\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(i|\rightarrow\rangle - |\uparrow\rangle). \quad (4.17)$$

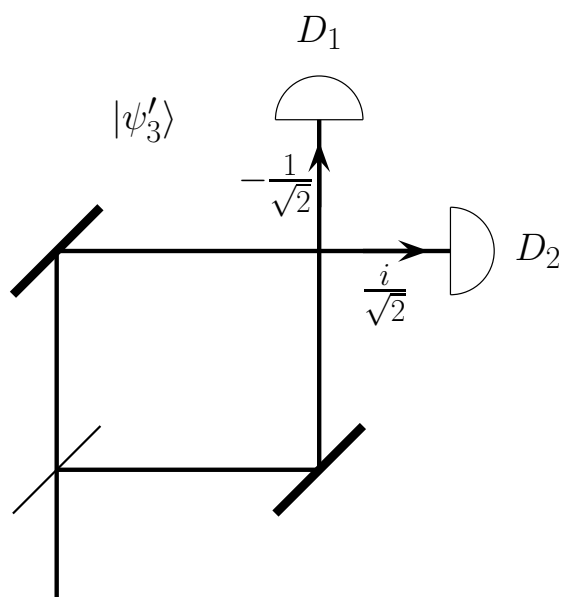
Amplitudy pravděpodobnosti dopadu fotonu do D_1 nebo D_2 jsou rovny

$$\begin{aligned} \langle\uparrow|\psi'_3\rangle &= -\frac{1}{\sqrt{2}}, \\ \langle\rightarrow|\psi'_3\rangle &= \frac{i}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \quad (4.18)$$

Foton tedy s pravděpodobností $W'_{1,2} = \frac{1}{2}$ dopadne do detektoru D_1 nebo D_2 , vždy ale jen do jednoho z nich. Pokud bychom experiment prováděli s opravdovým jednofotonovým zdrojem pak by vždy pouze jeden z detektorů náhodně zaznamenal dopad fotonu.



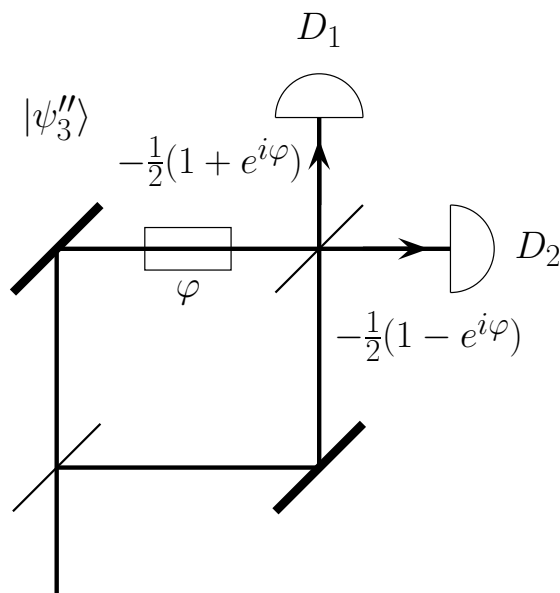
Obrázek 4.2: Vývoj stavu fotonu během průchodu Mach-Zehnderovým interferometrem. U šipek, které znázorňují aktuální "pozici" fotonu, jsou amplitudy příslušných stavů. Díky interferenci amplitud pravděpodobnosti může foton dopadnout pouze do detektoru D_1 .



Obrázek 4.3: Varianta interferometru bez druhého polopropustného zrcadla. V takovém případě nedochází k interferenci amplitud a foton může dopadnout do každého z detektorů s pravděpodobností 50%.

Mach-Zehnderův interferometr s fázovým posunem

Uvažujme ještě jednu variantu Mach-Zehnderova interferometru, kde do prvního ramene vložíme destičku, která způsobí posun fáze stavu o úhel φ , viz. obrázek 4.4. V takovém případě bude pravděpodobnost dopadu do detektoru D_1 nebo D_2 záviset na fázi φ .



Obrázek 4.4: Varianta interferometru s dodatečným fázovým posunem v prvním rameni. Pravděpodobnost dopadu fotonu do detektoru D_1 nebo D_2 závisí na fázi φ podle vztahů (4.24).

Působení destičky na stav fotonu můžeme opět popsat pomocí unitárního operátoru. Označme ho jako \hat{F} , definujeme ho působením na bazické stavy

$$\begin{aligned}\hat{F}|\uparrow\rangle &= |\uparrow\rangle, \\ \hat{F}|\rightarrow\rangle &= e^{i\varphi}|\rightarrow\rangle.\end{aligned}\tag{4.19}$$

Protože destička je v prvním rameni po perfektním zrcadle, působí \hat{F} netriviálně pouze na stav $|\rightarrow\rangle$. Maticová reprezentace operátoru v naší bázi vypadá následovně

$$F = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\varphi} \end{pmatrix}\tag{4.20}$$

Stav fotonu před druhým polopropustným zrcadlem pak je roven

$$|\psi_2''\rangle = \hat{F}|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(ie^{i\varphi}|\rightarrow\rangle - |\uparrow\rangle).\tag{4.21}$$

Průchodem polopropustným zrcadlem se změní na

$$\begin{aligned} |\psi_3''\rangle &= \hat{P}|\psi_2''\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{i}{\sqrt{2}} e^{i\varphi} (i|\uparrow\rangle + |\rightarrow\rangle) - \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + i|\rightarrow\rangle) \right) \\ &= -\frac{1}{2} (1 + e^{i\varphi}) |\uparrow\rangle - \frac{i}{2} (1 - e^{i\varphi}) |\rightarrow\rangle. \end{aligned} \quad (4.22)$$

Amplitudy pravděpodobnosti dopadu fotonu do detektoru D_1 nebo D_2 jsou rovny koeficientům u ketů v superpozici, protože platí

$$\begin{aligned} \langle \uparrow | \psi_3'' \rangle &= -\frac{1}{2} (1 + e^{i\varphi}), \\ \langle \rightarrow | \psi_3'' \rangle &= -\frac{i}{2} (1 - e^{i\varphi}). \end{aligned} \quad (4.23)$$

Pravděpodobnosti dopadu do detektorů pak jsou

$$\begin{aligned} W_1'' &= |\langle \uparrow | \psi_3'' \rangle|^2 = \frac{1}{4} (1 + \cos \varphi) = \cos^2 \frac{\varphi}{2}, \\ W_2'' &= |\langle \rightarrow | \psi_3'' \rangle|^2 = \frac{1}{4} (1 - \cos \varphi) = \sin^2 \frac{\varphi}{2}. \end{aligned} \quad (4.24)$$

Čtvrtvlenné destičky v dvoušterbinovém experimentu

Vraťme se na chvíli k dvoušterbinovému experimentu s polarizací. Působení čtvrtvlenných destiček na polarizační stavy fotonu lze rovněž popsat pomocí unitárních operátorů. Čtvrtvlennou destičku před S_1 , která mění horizontální polarizaci na levotočivou, popíšeme unitárním operátorem \hat{U}_1 . Ten působí na bazické stavy $|H\rangle, |V\rangle$ následujícím způsobem

$$\begin{aligned} \hat{U}_1 |H\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|H\rangle + i|V\rangle) \equiv |L\rangle, \\ \hat{U}_1 |V\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (i|H\rangle + |V\rangle) \equiv |R\rangle. \end{aligned} \quad (4.25)$$

V bázi ketů $\{|H\rangle, |V\rangle\}$ je tento operátor reprezentovaný maticí

$$U_1 = \begin{pmatrix} \langle H | \hat{U}_1 | H \rangle & \langle H | \hat{U}_1 | V \rangle \\ \langle V | \hat{U}_1 | H \rangle & \langle V | \hat{U}_1 | V \rangle \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix}. \quad (4.26)$$

Čtvrtvlenná destička před šterbinou S_2 mění horizontální polarizaci na pravotočivou. Popíšeme jí unitárním operátorem \hat{U}_2 , který je určený působením na bazické kety

$$\begin{aligned} \hat{U}_2 |H\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|H\rangle - i|V\rangle) \equiv |R\rangle, \\ \hat{U}_2 |V\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (-i|H\rangle + |V\rangle) \equiv -i|L\rangle. \end{aligned} \quad (4.27)$$

V bázi $\{|H\rangle, |V\rangle\}$ tomuto operátoru odpovídá matice

$$U_2 = \begin{pmatrix} \langle H|\hat{U}_2|H\rangle & \langle H|\hat{U}_2|V\rangle \\ \langle V|\hat{U}_2|H\rangle & \langle V|\hat{U}_2|V\rangle \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ -i & 1 \end{pmatrix}. \quad (4.28)$$

Operátory $\hat{U}_{1,2}$ jsou unitární, protože pro jejich matice platí

$$U_1 \equiv P, \quad U_2 \equiv \hat{P}^\dagger, \quad (4.29)$$

a o matici P jsme už ukázali, že je unitární.

Kapitola 5

Pozorovatelné veličiny a výsledky měření v kvantové mechanice

V této kapitole si probereme, jak popsat pozorovatelné veličiny v kvantové mechanice a jaké jsou možné výsledky měření. Obecné principy budeme ilustrovat na příkladu spinu elektronu.

Matematický popis pozorovatelných veličin v kvantové mechanice

Kvantová mechanika postuluje, že pozorovatelným veličinám jsou přiřazeny hermitovské operátory na příslušném Hilbertově prostoru \mathcal{H} . Definujme nejprve sdružený operátor k operátoru \hat{A} - je to lineární operátor \hat{A}^\dagger , pro který platí

$$\left(\psi, \hat{A}\phi\right) = \left(\hat{A}^\dagger\psi, \phi\right), \quad \forall \psi, \phi \in \mathcal{H}. \quad (5.1)$$

Operátor \hat{A} je hermitovský, pokud je roven svému sdruženému operátoru, tj.

$$\hat{A} = \hat{A}^\dagger. \quad (5.2)$$

V Diracově braketovém zápisu ($\langle\psi|\hat{A}|\phi\rangle$) je v případě hermitovského operátoru \hat{A} jedno, zda působí doprava na $|\phi\rangle$ nebo doleva na $\langle\psi|$. Matice hermitovského operátoru \hat{A} v ortonormální bázi $\{|j\rangle, j = 1, \dots, N\}$

$$A = (A_{ij}) = \left(\langle i|\hat{A}|j\rangle\right), \quad (5.3)$$

je hermitovská, tj. je rovna svému hermitovskému sdružení (transpozice + komplexní sdružení)

$$A^\dagger = (\overline{A_{ji}}) = \left(\overline{\langle j|\hat{A}|i\rangle}\right) = \left(\langle i|\hat{A}|j\rangle\right) = A. \quad (5.4)$$

V kvantové mechanice se dále postulují, že možné výsledky měření pozorovatelné \hat{A} tvoří spektrum tohoto operátoru $\sigma(\hat{A})$. Na Hilbertových prostorech konečné dimenze N je spektrum rovno množině vlastních čísel

$$\sigma(\hat{A}) = \{a_m, m = 1, \dots, N\}, \quad (5.5)$$

což jsou taková čísla, pro která existují netriviální řešení rovnice

$$\hat{A}|\psi_m\rangle = a_m|\psi_m\rangle, \quad |\psi_m\rangle \neq 0. \quad (5.6)$$

Ket $|\psi_m\rangle$ je potom vlastní vektor operátoru \hat{A} . Pro jednoduchost budeme předpokládat, že \hat{A} má prosté spektrum, tj. všechna vlastní čísla jsou různá (mají násobnost 1). Vlastní čísla operátoru jsou shodná s vlastními čísly matice operátoru v libovolné bázi. Ty můžeme najít jako kořeny charakteristického polynomu

$$\det(A - \lambda I) = 0. \quad (5.7)$$

Lze ukázat, že hermitovské operátory mají pouze reálná vlastní čísla (proto je můžeme použít k popisu pozorovatelných veličin, výsledky měření jsou samozřejmě reálné hodnoty). Vlastní vektory hermitovského operátoru tvoří ortonormální bázi v \mathcal{H} , tj.

$$\begin{aligned} \langle \psi_m | \psi_n \rangle &= \delta_{mn}, \\ |\psi\rangle &= \sum_{m=1}^N \langle \psi_m | \psi \rangle |\psi_m\rangle \quad \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}. \end{aligned} \quad (5.8)$$

Matice operátoru v bázi jeho vlastních vektorů je diagonální, na diagonále jsou příslušná vlastní čísla

$$A = \left(\langle \psi_m | \hat{A} | \psi_n \rangle \right) = (a_m \delta_{mn}) = \begin{pmatrix} a_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_2 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & \ddots & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & a_N \end{pmatrix}. \quad (5.9)$$

Pravděpodobnost výsledku měření

Je-li $|\psi_m\rangle$ vlastní vektor \hat{A} (5.6), řekneme, že v tomto stavu má částice hodnotu pozorovatelné \hat{A} rovné vlastnímu číslu a_m (často se také říká, že pozorovatelná \hat{A} má ve stavu $|\psi_m\rangle$ ostrou hodnotu). Co když ale máme částici ve stavu $|\psi\rangle$, který není vlastní vektor \hat{A} ? V takovém případě hodnota \hat{A} není jednoznačně daná. Pokud ji chceme určit, musíme provést měření, které náhodně vybere jedno z možných vlastních čísel a_m . Kvantová mechanika dokáže pouze předpovědět pravděpodobnost, že hodnotu a_m naměříme. Víme, že skalární součin $\langle \psi_m | \psi \rangle$ má fyzikální význam amplitudy pravděpodobnosti přechodu ze stavu $|\psi\rangle$ do stavu $|\psi_m\rangle$, ve kterém má pozorovatelná \hat{A} hodnotu a_m . Pravděpodobnost naměření hodnoty a_m ve stavu $|\psi\rangle$ je tedy

$$W_{\psi, a_m} = W_{\psi \rightarrow \psi_m} = |\langle \psi_m | \psi \rangle|^2. \quad (5.10)$$

Z Parsevalovy rovnosti

$$\|\psi\|^2 = 1 = \sum_{m=1}^N |\langle \psi_m | \psi \rangle|^2 = \sum_{m=1}^N W_{\psi, a_m}, \quad (5.11)$$

vidíme, že W_{ψ, a_m} opravdu tvoří pravděpodobnostní rozdělení.

Spin elektronu

Jako první pozorovatelnou veličinu si probereme spin elektronu (respektive složky spinu). Z různých pokusů (např. Stern-Gerlachova experimentu, který si podrobně probereme v příští kapitole) se zjistilo, že elektron má vnitřní moment hybnosti, spin, o hodnotě $1/2$ (v jednotkách \hbar). Spin elektronu je čistě kvantová vlastnost, která nemá analogii v klasické mechanice. Má dva jednoznačně odlišitelné stavy, odpovídající jeho kladné a záporné projekci do pevně (ale libovolně) zvolené osy. Spin elektronu je tedy popsán vektorem ze stavového prostoru $\mathcal{H} \simeq \mathbb{C}^2$.

Uvažujme nejprve projekci spinu do osy z . Označme stavy, které odpovídají kladné a záporné projekci spinu do osy z jako $|z, +\rangle$ a $|z, -\rangle$. Tyto vektory tvoří ortonormální bázi našeho Hilbertova prostoru

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= [|z, +\rangle, |z, -\rangle]_{\lambda} \simeq \mathbb{C}^2, \\ \langle z, + | z, - \rangle &= 0. \end{aligned} \quad (5.12)$$

Kety $|z, \pm\rangle$ jsou vlastní vektory operátoru projekce spinu do osy z , \hat{S}_z . Platí tedy vztahy

$$\begin{aligned} \hat{S}_z |z, +\rangle &= +\frac{\hbar}{2} |z, +\rangle, \\ \hat{S}_z |z, -\rangle &= -\frac{\hbar}{2} |z, -\rangle. \end{aligned} \quad (5.13)$$

Operátor projekce spinu do osy z je v této bázi reprezentován (hermitovskou) maticí

$$S_z = \begin{pmatrix} \langle z, + | \hat{S}_z | z, + \rangle & \langle z, + | \hat{S}_z | z, - \rangle \\ \langle z, - | \hat{S}_z | z, + \rangle & \langle z, - | \hat{S}_z | z, - \rangle \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (5.14)$$

V dalším textu budeme pracovat v této bázi, a kety $|z, \pm\rangle$ spojíme se standardní bazí \mathbb{C}^2

$$|z, +\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |z, -\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (5.15)$$

Řekněme, že částice je ve stavu

$$|\psi\rangle = a|z, +\rangle + b|z, -\rangle \equiv \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, \quad |a|^2 + |b|^2 = 1. \quad (5.16)$$

Při měření projekce spinu do osy z pak kladnou nebo zápornou hodnotu nalezneme s pravděpodobnostmi

$$\begin{aligned} W_{\psi, z+} &= |\langle z, +|\psi\rangle|^2 = |a|^2, \\ W_{\psi, z-} &= |\langle z, -|\psi\rangle|^2 = |b|^2 \end{aligned} \quad (5.17)$$

Projekci spinu elektronu můžeme měřit i do jiného směru, např. x nebo y . Opět lze naměřit jen kladnou nebo zápornou hodnotu. Tak můžeme definovat stavy $|x, \pm\rangle$, $|y, \pm\rangle$, které jsou vlastní vektory operátorů projekce spinu do osy x , resp. osy y , tj. platí

$$\hat{S}_x|x, \pm\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}|x, \pm\rangle, \quad \hat{S}_y|y, \pm\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}|y, \pm\rangle, \quad (5.18)$$

Jedná se o jiné dvojice možných ortonormálních bázevých vektorů \mathcal{H} . V bázi $|z, \pm\rangle$ lze ukázat, že operátory \hat{S}_x , \hat{S}_y jsou popsány maticemi

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.19)$$

Tento tvar lze odvodit z toho, že spin je (vnitřní) moment hybnosti. V hamiltonově formulaci klasické mechaniky se dá ukázat, že pro Poissonovy závorky složek momentu hybnosti platí vztahy

$$\{l_i, l_j\} = \sum_m \left(\frac{\partial l_i}{\partial x_m} \frac{\partial l_j}{\partial p_m} - \frac{\partial l_i}{\partial p_m} \frac{\partial l_j}{\partial x_m} \right) = \varepsilon_{ijk} l_k. \quad (5.20)$$

V kvantové mechanice roli Poissonovy závorky přebírá komutátor operátorů, resp.

$$\{A, B\} \longrightarrow -\frac{i}{\hbar} [\hat{A}, \hat{B}] = -\frac{i}{\hbar} (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) \quad (5.21)$$

Analogií vztahů (5.20) pro složky operátoru spinu jsou komutační relace

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = \hat{S}_i\hat{S}_j - \hat{S}_j\hat{S}_i = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{S}_k. \quad (5.22)$$

Snadno se lze přesvědčit, že pro matice operátorů spinu (5.14), (5.19) tyto komutační relace skutečně platí. Matice složek operátoru spinu se často zapisují ve tvaru $S_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i$, kde σ_i jsou Pauliho matice

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (5.23)$$

Snadno se ukáže, že vlastní čísla všech tří Pauliho matic jsou $\lambda = \pm 1$, takže vlastní čísla S_i jsou $\pm\frac{\hbar}{2}$. Stejný výsledek dostaneme pro projekci spinu do libovolného směru daného jednotkovým vektorem \vec{n} . Operátor projekce spinu do směru \vec{n} je roven

$$\hat{S}_{\vec{n}} = \vec{n} \cdot \hat{\vec{S}} = n_i \hat{S}_i. \quad (5.24)$$

Matice operátoru $\hat{S}_{\vec{n}}$ ve standardní bázi (5.15) je rovna

$$S_{\vec{n}} = \frac{\hbar}{2} \vec{n} \cdot \vec{\sigma} = \frac{\hbar}{2} n_i \sigma_i = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} n_3 & n_1 - in_2 \\ n_1 + in_2 & -n_3 \end{pmatrix}. \quad (5.25)$$

Stačí tedy najít vlastní čísla matice $\vec{n} \cdot \vec{\sigma}$. Charakteristický polynom této matice je

$$\begin{aligned} \det(\vec{n} \cdot \vec{\sigma} - \lambda I) &= \det \begin{pmatrix} n_3 - \lambda & n_1 - in_2 \\ n_1 + in_2 & -n_3 - \lambda \end{pmatrix} \\ &= -(n_3 - \lambda)(n_3 + \lambda) - (n_1 - in_2)(n_1 + in_2) \\ &= \lambda^2 - (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) = \lambda^2 - 1. \end{aligned} \quad (5.26)$$

Jeho kořeny jsou ± 1 , takže vlastní čísla $\hat{S}_{\vec{n}}$ jsou $\pm \frac{\hbar}{2}$. Projekce spinu elektronu do libovolné osy tedy může být pouze kladná nebo záporná.

Spin v homogenním magnetickém poli

Se spinem se pojí vlastní magnetický moment. V případě elektronu se dá ukázat, že operátor vlastního magnetického momentu je roven

$$\hat{\vec{\mu}} = -\frac{2\mu_B}{\hbar} \hat{S}, \quad \text{resp.} \quad \hat{\mu}_i = -\frac{2\mu_B}{\hbar} \hat{S}_i, \quad (5.27)$$

kde μ_B je Bohrov magneton

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} \doteq 9.274 \cdot 10^{-24} \text{ J} \cdot \text{T}^{-1}. \quad (5.28)$$

Připomeňme, že klasická částice s magnetickým momentem $\vec{\mu}$ ve vnějším magnetickém poli s indukcí \vec{B} má energii $-\vec{\mu} \cdot \vec{B}$. V kvantovém případě tomu odpovídá operátor energie - hamiltonián

$$\hat{H} = -\hat{\vec{\mu}} \cdot \vec{B} = \frac{2\mu_B}{\hbar} \hat{S} \cdot \vec{B}. \quad (5.29)$$

Vlastní čísla hamiltoniánu představují možné hodnoty energie částice, které lze naměřit. Energie elektronu v magnetickém poli tedy závisí na jeho spinu, resp. projekci spinu na směr magnetického pole. Řekněme, že magnetické pole je homogenní a míří ve směru osy z , tj. $\vec{B} = (0, 0, B)$. Hamiltonián (5.29) je pak ve standardní bázi (5.15) reprezentován diagonální maticí

$$H = \frac{2\mu_B}{\hbar} BS_z = \mu_B B \sigma_3 = \begin{pmatrix} \mu_B B & 0 \\ 0 & -\mu_B B \end{pmatrix}. \quad (5.30)$$

Rovnou tedy vidíme, že možné hodnoty energie elektronu v magnetickém poli $\vec{B} = (0, 0, B)$ jsou

$$E_{\pm} = \pm \mu_B B. \quad (5.31)$$

Vlastní vektory hamiltoniánu se shodují s vlastními vektory \hat{S}_z . Ve stavu $|z, +\rangle$ má elektron energii E_+ , ve stavu $|z, -\rangle$ má energii E_- . Pokud je spin elektronu ve stavu (5.16), pak energii E_+ naměříme s pravděpodobností $W_{\psi, E_+} = |a|^2$, energii E_- s pravděpodobností $W_{\psi, E_-} = |a|^2$

Možné hodnoty energie elektronu nezávisí na směru magnetického pole, protože hamiltonián (5.29) lze zapsat ve tvaru

$$\hat{H} = \frac{2\mu_B}{\hbar} B \hat{S}_{\vec{b}}, \quad (5.32)$$

kde $B = \|\vec{B}\|$ a \vec{b} je jednotkový vektor ve směru \vec{B} , tj. $\vec{b} = \frac{\vec{B}}{B}$. O vlastních číslech $\hat{S}_{\vec{b}}$ víme, že jsou $\pm \frac{\hbar}{2}$, takže pro možné hodnoty energie elektronu v magnetickém poli vždy platí (5.31).

Kapitola 6

Stern-Gerlachův experiment, měření a nekompatibilita pozorovatelných

V této kapitole si představíme Stern-Gerlachův experiment, který hrál zásadní roli v objevu spinu elektronu. Podíváme se na to, jak se mění stav spinu po měření. Na závěr si ukážeme, že některé pozorovatelné v kvantové mechanice nejsou kompatibilní a není možné jim současně přiřadit ostré hodnoty.

Stern-Gerlachův experiment

Ve Stern-Gerlachově experimentu proud atomů stříbra v základním stavu (jeden valenční elektron ve slupce 5s) prochází silným nehomogenním magnetickým polem $\vec{B}(\vec{x})$. Částice jsou urychlovány ve směru gradientu projekce svého magnetického momentu $\vec{\mu}$ na směr magnetického pole

$$\vec{F}(\vec{x}) = \vec{\nabla} \cdot (\vec{\mu} \cdot \vec{B}(\vec{x})).$$

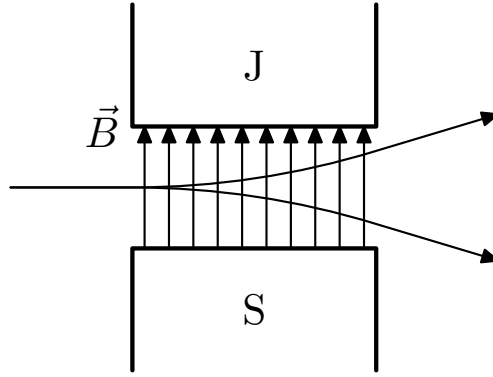
Základní stav atomu stříbra je sféricky symetrický - valenční elektron je ve slupce 5s, která má sférickou symetrii. Atom by neměl mít žádný magnetický moment, takže by na magnetické pole neměl nijak reagovat. Pozorování ale ukazuje, že proud atomů se rozdělí na dva. Roli tu hraje vlastní magnetický moment valenčního elektronu, který je úměrný jeho spinu (5.27). Tímto způsobem byl spin elektronu objeven.

Je-li \vec{B} nehomogenní ve směru osy z , Stern-Gerlachův přístroj rozdělí proud na dva podle projekce spinu do této osy. Jednotlivým vzniklým paprskům přiřadíme dva bazické stavy $|z, +\rangle$, $|z, -\rangle$, které spojíme se standardní bází \mathbb{C}^2 (5.14). $|z, \pm\rangle$ jsou vlastní vektory operátoru projekce spinu do osy z

$$\hat{S}_z |z, \pm\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} |z, \pm\rangle. \quad (6.1)$$

\hat{S}_z je v této bází reprezentován diagonální maticí

$$S_z = \begin{pmatrix} \langle z, + | \hat{S}_z | z, + \rangle & \langle z, + | \hat{S}_z | z, - \rangle \\ \langle z, - | \hat{S}_z | z, + \rangle & \langle z, - | \hat{S}_z | z, - \rangle \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (6.2)$$



Obrázek 6.1: Schéma Stern-Gerlachova experimentu. Silným nehomogenním magnetickým polem prochází proud atomů stříbra v základním stavu. Proud atomů se rozdělí na dva podle projekce spinu valenčního elektronu na magnetické pole.

Stern-Gerlachův přístroj jako filtr

Stern-Gerlachův experiment můžeme použít jako filtr. Zablokujeme-li jeden z proudů, například spodní, ponecháme jen částice s vhodnou projekcí spinu do osy z . Filtrování můžeme popsat maticí

$$\hat{F}_{z,+} = |z, +\rangle\langle z, +| = \begin{pmatrix} 1 & \\ & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (6.3)$$

která představuje ortogonální projektor na podprostor daný vektorem $|z, +\rangle$.

$$\Leftrightarrow \hat{F}_{z,+} = |z, +\rangle\langle z, +| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (6.4)$$

$$\Leftrightarrow \hat{F}_{z,-} = |z, -\rangle\langle z, -| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

Magnet můžeme orientovat i ve směru jiných os, například x nebo y . Proud atomů se také rozdělí na dva, ovšem podle projekce spinu do těchto nových os. Tak můžeme definovat stavy $|x, \pm\rangle$, $|y, \pm\rangle$:

$$\hat{S}_x|x, \pm\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}|x, \pm\rangle, \quad \hat{S}_y|y, \pm\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}|y, \pm\rangle, \quad (6.5)$$

Jedná se o jiné dvojice možných ortonormálních bázových vektorů \mathcal{H} . Jak jsme argumentovali v předchozí kapitole, v bázi $\{|z, \pm\rangle\}$ jsou operátory \hat{S}_x, \hat{S}_y popsány maticemi

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.6)$$

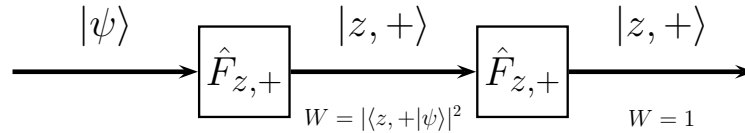
Vlastní vektory těchto matic určují koeficienty vektorů $|x, \pm\rangle$, resp. $|y, \pm\rangle$, v bázi $\{|z, \pm\rangle\}$:

$$S_x \begin{cases} \lambda = +\frac{\hbar}{2}: & |x, +\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|z, +\rangle + |z, -\rangle), \\ \lambda = -\frac{\hbar}{2}: & |x, -\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|z, +\rangle - |z, -\rangle), \end{cases} \quad (6.7)$$

$$S_y \begin{cases} \lambda = +\frac{\hbar}{2}: & |y, +\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|z, +\rangle + i|z, -\rangle), \\ \lambda = -\frac{\hbar}{2}: & |y, -\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|z, +\rangle - i|z, -\rangle). \end{cases}$$

Odsud můžeme podobně jako dříve sestavit filtry $\hat{F}_{x,\pm}$ a $\hat{F}_{y,\pm}$, propouštějící jen $|x, +\rangle$, $|x, -\rangle$, $|y, +\rangle$ nebo $|y, -\rangle$. Podívejme se na posloupnost více filtrů za sebou.

Dva stejné filtry po sobě



Obrázek 6.2: Stav spinu po průchodu dvěma stejnými filtry. První filtr je možné chápat jako přípravu stavu $|z, +\rangle$, částice jím projde s pravděpodobností $|\langle z, +|\psi\rangle|^2$. Druhý identický filtr stav spinu nezmění, částice jím projde s jistotou.

Uvažujme počáteční stav $|\psi\rangle$ procházející dvakrát po sobě filtrem $\hat{F}_{z,+}$ jako na obrázku 6.2. Po průchodu prvním se stav změní projekcí na

$$\hat{F}_{z,+}|\psi\rangle = |z, +\rangle\langle z, +|\psi\rangle = \langle z, +|\psi\rangle|z, +\rangle. \quad (6.8)$$

Fyzikálně se jedná o stav $|z, +\rangle$, číselný násobek je amplituda pravděpodobnosti úspěšného průchodu filtrem. Obecněji můžeme každý stav rozepsat jako lineární kombinaci

$$|\psi\rangle = \alpha|z, +\rangle + \beta|z, -\rangle = \langle z, +|\psi\rangle|z, +\rangle + \langle z, -|\psi\rangle|z, -\rangle, \quad (6.9)$$

kde brakety $\langle z, +|\psi\rangle$ a $\langle z, -|\psi\rangle$ vystupují jako Fourierovy koeficienty při rozkladu do ortogonální báze. Při měření spinu dávají amplitudy pravděpodobnosti naměření výsledků $+$, $-$, odpovídající pravděpodobnostem

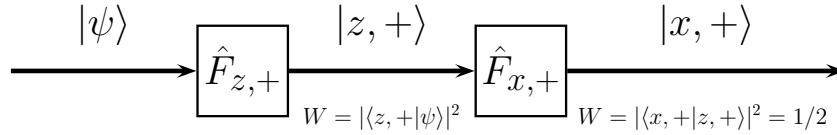
$$\begin{aligned} |\langle z, +|\psi\rangle|^2, & \quad \text{že stav projde filtrem } \hat{F}_{z,+}, \\ |\langle z, -|\psi\rangle|^2, & \quad \text{že stav projde filtrem } \hat{F}_{z,-}. \end{aligned} \quad (6.10)$$

Měření spinu v ose z přitom změní stav částice na $|z, +\rangle$, resp. $|z, -\rangle$.

Druhý identický filtr tento stav dále již nezmění, protože $\hat{F}_{z,+}|z, +\rangle = |z, +\rangle$. To také přímo plyne ze skutečnosti, že

$$\hat{F}_{z,+}\hat{F}_{z,+} = |z, +\rangle \underbrace{\langle z, +|z, +\rangle}_1 \langle z, +| = |z, +\rangle \langle z, +| = \hat{F}_{z,+}. \quad (6.11)$$

Různé filtry



Obrázek 6.3: Stav spinu po průchodu dvěma různými filtry. První propustí jen částice s kladnou projekcí spinu do osy z , druhý jen částice s kladnou projekcí spinu do osy x . Druhým filtrem projde jen polovina částic.

Nyní po průchodu filtrem $\hat{F}_{z,+}$ použijeme $\hat{F}_{x,+}$ jako na obrázku 6.3. Po prvním filtru je stav elektronu $|z, +\rangle$ a na něj pustíme $\hat{F}_{x,+}$:

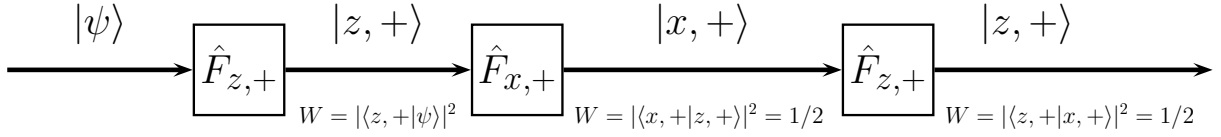
$$\hat{F}_{x,+}|z, +\rangle = |x, +\rangle \underbrace{\langle x, +|z, +\rangle}_{1/\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} |x, +\rangle. \quad (6.12)$$

Z amplitudy pravděpodobnosti $1/\sqrt{2}$ můžeme určit, že pouze 50 % částic filtrem $\hat{F}_{x,+}$ projde. Stav těch, které projdou, bude

$$|x, +\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|z, +\rangle + |z, -\rangle). \quad (6.13)$$

Dva stejné filtry s jiným vloženým mezi nimi

Uvažujme nakonec situaci, kdy po $\hat{F}_{z,+}$ následuje $\hat{F}_{x,+}$ a opět $\hat{F}_{z,+}$, jako na obrázku 6.4. Oproti minulému příkladu tedy ještě na konec přidáme druhý $\hat{F}_{z,+}$. Víme, že prvním filtrem



Obrázek 6.4: Filtr $\hat{F}_{x,+}$ vložený mezi dva filtry $\hat{F}_{z,+}$. Posledním filtrem projde jen polovina částic, které do něj vstupují.

projdou částice s pravděpodobností $|\langle z, + | \psi \rangle|^2$ a druhým 50 % ze zbylých. Třetí filtr bude působit na stav $|x, +\rangle$, tedy

$$\hat{F}_{z,+}|x, +\rangle = |z, +\rangle \langle z, + | x, + \rangle = \underbrace{\langle z, + | x, + \rangle}_{1/\sqrt{2}} |z, +\rangle \quad (6.14)$$

a opět 50 % částic neprojde. Tedy přestože jsme dříve již určili projekci spinu do osy z jako $+\hbar/2$, druhé měření v ose x „smaže“ tuto předchozí informaci a stav po něm již nebude vlastním vektorem S_z , ale S_x . To ilustruje, jak v kvantové mechanice měření nezvratně mění stav systému.

Měření v kvantové mechanice

Uvažujme pozorovatelnou \hat{A} , která má prosté spektrum, tj. vlastní čísla a_m mají násobnost 1. Označme příslušné vlastní vektory jako $|\psi_m\rangle$

$$\hat{A}|\psi_m\rangle = a_m|\psi_m\rangle. \quad (6.15)$$

Vliv měření pozorovatelné \hat{A} na stav kvantové částice před měřením $|\psi\rangle$ můžeme formulovat následujícím principem: po měření s výsledkem a_m je stav částice popsán příslušným vlastním vektorem $|\psi_m\rangle$. Pravděpodobnost, že hodnotu a_m na částici ve stavu $|\psi\rangle$ naměříme, je rovna pravděpodobnosti přechodu mezi stavy $|\psi\rangle$ a $|\psi_m\rangle$, tj.

$$W_{\psi, a_m} = W_{\psi \rightarrow \psi_m} = |\langle \psi_m | \psi \rangle|^2. \quad (6.16)$$

V klasické (deterministické) mechanice se o měření v podstatě nemluví. Platí totiž, že hodnoty všech pozorovatelných jsou v každém stavu částice jednoznačně určené - např. v Hamiltonově formulaci je stav částice popsán bodem z fázového prostoru (x, p) , pozorovatelné veličiny jsou pak funkce na fázovém prostoru $f(x, p)$. Měření prostě odhalí hodnotu pozorovatelné, která je ale objektivně daná i bez něj. V makroskopickém světě lze předpokládat, že vliv měření na částici je zanedbatelný. Stav částice se tedy nijak nemění.

V kvantové mechanice tomu tak není. Ve stavu ψ , který není vlastní vektor pozorovatelné \hat{A} , její hodnota není jednoznačně určená - může nabývat různých hodnot a_m , podle toho, které pravděpodobnosti (6.16) jsou nenulové. Kvantový stav určuje, jaké hodnoty můžeme naměřit a s jakou pravděpodobností. Měření náhodně vybere jednu z nich. Stav po měření musíme aktualizovat - při výsledku a_m je popsán příslušným vlastním vektorem $|\psi_m\rangle$.

Kompatibilita pozorovatelných

Vraťme se ke spinu elektronu. Viděli jsme, že měření projekci spinu do osy x smazalo předchozí výsledek měření projekce spinu do osy z . Pozorovatelné \hat{S}_x a \hat{S}_z nemohou mít současně ostré hodnoty - nejsou kompatibilní. Pokud například naměříme hodnotu $S_z = +\hbar/2$, řekneme, že stav je $|z, +\rangle$. To ale znamená, že hodnotu S_x neznáme (může být $+\hbar/2$ nebo $-\hbar/2$ s pravděpodobnostmi 50 : 50). Totéž ovšem platí pro S_z , jestliže naměříme S_x . Úplně stejným způsobem to platí i pro dvojice S_x, S_y , nebo S_z, S_y .

V předchozí kapitole jsme si říkali, že matice S_x a S_z (6.6) lze odvodit tak, že operátory splňují komutační relace

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = \hat{S}_i \hat{S}_j - \hat{S}_j \hat{S}_i = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{S}_k, \quad (6.17)$$

kteří jsou kvantovou analogií Poissonových závorek pro moment hybnosti. Operátory složek spinu tedy nekomutují, záleží na pořadí, v jakém je složíme. Lze ukázat, že pokud dva operátory nekomutují, pak nemají společné vlastní vektory. V případě spinu tedy neexistuje stav ψ , který by byl např. současně vlastní vektor \hat{S}_x a \hat{S}_z . V tomto smyslu nelze projekce spinu do různých os měřit současně - neexistuje stav, ve kterém by tyto nekompatibilní pozorovatelné měli současně ostré hodnoty.

Existence nekompatibilních pozorovatelných má pro kvantovou mechaniku dalekosáhlé důsledky. Nejznámějším jsou Heisenbergovy relace neurčitosti, které říkají, že součin středních kvadratických odchylek polohy a hybnosti v každém stavu kvantové částice musí být větší nebo roven $\frac{\hbar}{2}$

$$\Delta_{\psi} x \Delta_{\psi} p \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (6.18)$$

Jsou přímým důsledkem toho, že operátory polohy a hybnosti kvantové částice nejsou kompatibilní.

Pozorovatelné, jejichž operátory komutují

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0, \quad (6.19)$$

jsou kompatibilní. Lze ukázat, že mají společné vlastní vektory $|m, n\rangle$ (indexům m, n se často říká kvantová čísla), pro které platí

$$\begin{aligned} \hat{A}|m, n\rangle &= a_m |m, n\rangle, \\ \hat{B}|m, n\rangle &= b_n |m, n\rangle. \end{aligned} \quad (6.20)$$

V těchto stavech mají obě pozorovatelné ostré hodnoty. Pokud naměříme hodnotu \hat{A} rovnu a_m , a poté hodnotu \hat{B} rovnu b_n , pak stav částice bude popsán společným vlastním vektorem $|m, n\rangle$. Opakovaná měření už nezmění hodnotu \hat{A} ani \hat{B} - vždy naměříme tytéž hodnoty a_m a b_n . Navíc nezávisí na pořadí měření, tj. jestli nejprve měříme \hat{A} a pak \hat{B} , nebo naopak. V tomto smyslu lze kompatibilní pozorovatelné měřit současně.

Kompatibilní pozorovatelné hrají důležitou roli v případě, kdy pozorovatelné mají degenerovaná spektra, tj. vlastní čísla mají násobnost větší než jedna. V takovém případě

potřebujeme měřit více kompatibilních pozorovatelných, abychom určili stav částice jednoznačně. Příkladem může být elektron v atomu vodíku, kde nestačí k určení stavu měřit energii, protože vlastní hodnoty hamiltoniánu jsou degenerované. Musíme měřit další pozorovatelné. Lze ukázat, že kompatibilní s hamiltoniánem jsou kvadrát momentu hybnosti a jeho třetí složka. Vázané stavy elektronu v atomu vodíku jsou určeny trojicí kvantových čísel N, l, m , která postupně určují hodnotu energie, kvadrátu momentu hybnosti, a hodnotu projekce momentu hybnosti do osy z .

Kapitola 7

Časový vývoj stavu v kvantové mechanice

Vývoj stavu kvantové částice s časem je určený Schrödingerovou rovnicí

$$\hat{H}|\psi\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle. \quad (7.1)$$

Budeme zde předpokládat, že hamiltonián \hat{H} nezávisí na čase. Pokud známe stav částice v nějakém čase t_0 , pak rovnice (7.1) určuje jednoznačně stav částice pro $t > t_0$, až do okamžiku měření. Ukážeme si, jakým způsobem se dá Schrödingerova rovnice vyřešit. Obecné principy budeme ilustrovat na příkladu spinu v homogenním magnetickém poli.

Stacionární stavy

Pro vlastní vektory hamiltoniánu je jednoduché nalézt řešení Schrödingerovy rovnice. Řekněme, že v čase $t_0 = 0$ platí

$$|\psi(t_0 = 0)\rangle = |n\rangle, \quad (7.2)$$

kde $|n\rangle$ je vlastní vektor hamiltoniánu s vlastním číslem E_n

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle. \quad (7.3)$$

Dosazením do (7.1) dostaneme rovnici

$$E_n|n\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|n\rangle, \quad (7.4)$$

jejímž řešením je

$$|n(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_nt}|n\rangle. \quad (7.5)$$

Vidíme, že stavový vektor se pouze vynásobí fázovým faktorem $e^{-\frac{i}{\hbar}E_nt}$. V každém čase $t > 0$ $|n(t)\rangle$ leží ve stejném jednorozměrném podprostoru jako původní $|n\rangle$. Je to tedy stále vlastní vektor hamiltoniánu se stejným vlastním číslem

$$\hat{H}|n(t)\rangle = E_n|n(t)\rangle. \quad (7.6)$$

Vlastní vektory hamiltoniánu se tedy s časem de facto nemění. Pravděpodobnosti přechodu z $|n(t)\rangle$ do libovolného stavu $|\phi\rangle$ (a tím pádem i pravděpodobnosti všech možných výsledků měření) jsou na čase nezávislé, protože ve vztahu (2.22) je absolutní hodnota a fázový faktor $e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$ má velikost jedna, tj.

$$W_{n(t)\rightarrow\phi} = |\langle\phi|n(t)\rangle|^2 = \left|e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\langle\phi|n\rangle\right|^2 = |\langle\phi|n\rangle|^2. \quad (7.7)$$

Z tohoto důvodu se vlastním vektorům hamiltoniánu říká stacionární stavy.

Poznamenejme, že kety $|\psi\rangle$ a $e^{i\alpha}|\psi\rangle$, kde α je reálné číslo, odpovídají stejnému fyzikálnímu stavu. α je tzv. globální fáze, která nemá žádný fyzikální význam.

Řešení Schrödingerovy rovnice pomocí stacionárních stavů

Stacionárních stavů lze využít pro řešení Schrödingerovy rovnice s libovolnou počáteční podmínkou $|\psi(t=0)\rangle = |\psi\rangle$. Vlastní vektory hamiltoniánu $|n\rangle$, $n = 1, \dots, N$, totiž tvoří ortonormální bázi Hilbertova prostoru \mathcal{H} . Libovolný vektor můžeme do této báze rozepsat pomocí Fourierova rozvoje

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^N \langle n|\psi\rangle |n\rangle. \quad (7.8)$$

Schrödingerova rovnice (7.1) je lineární, takže víme, že lineární kombinace řešení je opět řešení. Stav částice v čase $t > 0$ tak bude popsán vektorem

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=1}^N \langle n|\psi\rangle |n(t)\rangle = \sum_{n=1}^N \langle n|\psi\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} |n\rangle. \quad (7.9)$$

Pokud tedy známe vlastní čísla a vlastní vektory hamiltoniánu, je Schrödingerova rovnice vyřešena.

Stav (7.9) už není stacionární, protože každý člen lineární kombinace osciluje s jinou frekvencí $\omega_n = E_n/\hbar$. Pravděpodobnost přechodu do stavu $|\phi\rangle$ pak je obecně závislá na čase

$$W_{\psi(t)\rightarrow\phi} = |\langle\phi|\psi(t)\rangle|^2 = \left|\sum_{n=1}^N e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \langle n|\psi\rangle \langle\phi|n\rangle\right|^2. \quad (7.10)$$

Důležitou vlastností časového vývoje popsaného Schrödingerovou rovnicí (7.1) je, že zachovává normu vektoru. To je vidět z Parsevalovy rovnosti

$$\begin{aligned} \|\psi(t)\|^2 &= \langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \langle n|\psi\rangle e^{\frac{i}{\hbar}E_m t} \overline{\langle m|\psi\rangle} \underbrace{\langle m|n\rangle}_{\delta_{mn}} \\ &= \sum_{n=1}^N |\langle n|\psi\rangle|^2 = \langle\psi|\psi\rangle = \|\psi\|^2. \end{aligned} \quad (7.11)$$

Zachování normy vektoru zaručuje, že (7.10) má v každém čase $t \geq 0$ význam pravděpodobnosti přechodu do stavu $|\phi\rangle$.

Časový vývoj spinu v homogenním magnetickém poli

Základní vlastnosti spinu elektronu v homogenním magnetickém poli \vec{B} jsme si ukázali v kapitole 5. Hamiltonián spinu má tvar

$$\hat{H} = \frac{2\mu_B}{\hbar} \hat{S} \cdot \vec{B}. \quad (7.12)$$

Magnetické pole ve směru osy z

Pokud zvolíme osu z ve směru magnetického pole, tj. $\vec{B} = (0, 0, B)$, pak je matice hamiltoniánu ve standardní bázi (tvořené vlastními vektory \hat{S}_3) rovna

$$H = \frac{2\mu_B}{\hbar} B S_3 = \mu_B B \sigma_3 = \begin{pmatrix} \mu_B B & 0 \\ 0 & -\mu_B B \end{pmatrix}. \quad (7.13)$$

Vlastní čísla hamiltoniánu jsou tedy $E_{\pm} = \pm\mu_B B$. Vlastní vektory \hat{H} jsou shodné s vlastními vektory projekce spinu do osy z

$$\hat{H}|z, \pm\rangle = E_{\pm}|z, \pm\rangle, \quad |z, +\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |z, -\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (7.14)$$

Kety $|z, \pm\rangle$ jsou stacionární stavy.

Uvažujme nyní počáteční podmínku pro Schrödingerovu rovnici

$$|\psi(t=0)\rangle = |x, +\rangle, \quad (7.15)$$

tj. spin má v čase $t = 0$ kladnou projekci do osy x . Rozklad tohoto stavu do vlastních vektorů \hat{S}_3 jsme našli ve vztahu (6.6)

$$|x, +\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|z, +\rangle + |z, -\rangle) \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (7.16)$$

Stav spinu v čase $t > 0$ pak bude popsán vektorem

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-\frac{i}{\hbar}E_+t}|z, +\rangle + e^{-\frac{i}{\hbar}E_-t}|z, -\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-\frac{i}{\hbar}\mu_B B t}|z, +\rangle + e^{\frac{i}{\hbar}\mu_B B t}|z, -\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}e^{\frac{i}{\hbar}\mu_B B t}(e^{-2\frac{i}{\hbar}\mu_B B t}|z, +\rangle + |z, -\rangle) \equiv \frac{e^{\frac{i}{\hbar}\mu_B B t}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-2\frac{i}{\hbar}\mu_B B t} \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (7.17)$$

Toto už není stacionární stav, protože např. pravděpodobnosti naměření kladné nebo záporné projekce spinu do osy x na čase závisí

$$\begin{aligned} W_{\psi(t),x+} &= |\langle x, +|\psi(t)\rangle|^2 = \left| \frac{1}{2} \left(e^{-2\frac{i}{\hbar}\mu_B B t} + 1 \right) \right|^2 = \frac{1}{4} \left(1 + e^{-2\frac{i}{\hbar}\mu_B B t} + e^{2\frac{i}{\hbar}\mu_B B t} + 1 \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(1 + \cos \left(\frac{2\mu_B B t}{\hbar} \right) \right), \\ W_{\psi(t),x-} &= 1 - W_{\psi(t),x+} = \frac{1}{2} \left(1 - \cos \left(\frac{2\mu_B B t}{\hbar} \right) \right). \end{aligned} \quad (7.18)$$

Precese spinu v magnetickém poli

Můžeme určit, do jakého směru má spin kladnou projekci v čase t . K tomu nejprve nalezneme vlastní vektory operátory projekce spinu do směru \vec{n} (5.24)

$$\hat{S}_{\vec{n}} = \vec{n} \cdot \vec{S}. \quad (7.19)$$

Jednotkový vektor zapíšeme pomocí prostorových úhlů θ, φ

$$\vec{n} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta). \quad (7.20)$$

Matice operátoru (7.19) ve standardní bázi má pak tvar

$$S_{\vec{n}} = \frac{\hbar}{2} \vec{n} \cdot \vec{\sigma} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix}. \quad (7.21)$$

Vlastní čísla této matice jsou $\pm \frac{\hbar}{2}$, jak jsme ukázali v kapitole 5. Vlastní vektor odpovídající kladné projekci spinu do směru \vec{n} je

$$|\vec{n}, +\rangle \equiv \mathcal{N} \begin{pmatrix} \sin \theta e^{-i\varphi} \\ 1 - \cos \theta \end{pmatrix}, \quad (7.22)$$

kde \mathcal{N} je normalizační faktor (aby platilo $\langle \vec{n}, + | \vec{n}, + \rangle = 1$). Ten je roven

$$\mathcal{N} = \frac{1}{\sqrt{\sin^2 \theta + (1 - \cos \theta)^2}} = \frac{1}{\sqrt{2(1 - \cos \theta)}}. \quad (7.23)$$

Použijeme-li vztahy pro sinus a cosinus dvojnásobného úhlu

$$\begin{aligned} \sin \theta &= 2 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2}, \\ \cos \theta &= \cos^2 \frac{\theta}{2} - \sin^2 \frac{\theta}{2}, \end{aligned} \quad (7.24)$$

pak lze vlastní vektor $\hat{S}_{\vec{n}}$ s vlastním číslem $\frac{\hbar}{2}$ upravit do tvaru

$$|\vec{n}, +\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi} \\ \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \equiv \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi} |z, +\rangle + \sin \frac{\theta}{2} |z, -\rangle. \quad (7.25)$$

Porovnáním s (7.17) (globální fázi $e^{i\mu_B B t}$ není nutné uvažovat) nalezneme

$$\theta = \frac{\pi}{2}, \quad \varphi = \frac{2\mu_B B}{\hbar} t. \quad (7.26)$$

Pro stav spinu v čase t (7.17) tedy platí

$$|\psi(t)\rangle = |\vec{n}(t), +\rangle, \quad (7.27)$$

tj. odpovídá kladné projekci do směru $\vec{n}(t)$

$$\vec{n}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\cos \left(\frac{2\mu_B B}{\hbar} t \right), \sin \left(\frac{2\mu_B B}{\hbar} t \right), 0 \right). \quad (7.28)$$

Časový vývoj si tedy lze představit jako precesi spinu v rovině xy úhlovou rychlostí $\frac{2\mu_B B}{\hbar}$ okolo magnetického pole \vec{B} , tj. osy z .

Magnetické pole v libovolném směru

Uvažujme nyní libovolné homogenní magnetické pole, tj. $\vec{B} = (B_1, B_2, B_3)$. Matice hamiltoniánu (7.12) je ve standardní bázi rovna

$$H = \mu_B B \vec{b} \cdot \vec{\sigma} = \mu_B \begin{pmatrix} b_3 & b_1 - ib_2 \\ b_1 - ib_2 & -b_3 \end{pmatrix}, \quad (7.29)$$

kde jsme zavedli jednotkový vektor ve směru magnetického pole $\vec{b} = \frac{1}{B}\vec{B}$, a B je velikost vektoru \vec{B} . Schrödingerovu rovnici s tímto hamiltoniánem bychom opět mohli řešit nalezením stacionárních stavů. Jeden z nich už ostatně máme - vektor $|\vec{n}, +\rangle$ (7.25) pro $\vec{n} = \vec{b}$, odpovídá energii $E_+ = \mu_B B$. Ukážeme si ještě jiný způsob řešení.

Pro hamiltonián nezávislý na čase lze Schrödingerovu rovnici (7.1) zintegrovat a řešení napsat ve tvaru

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\psi(0)\rangle \equiv \hat{U}(t)|\psi(0)\rangle. \quad (7.30)$$

Tímto vztahem definujeme tzv. evoluční operátor $\hat{U}(t)$, který změní stav v čase $t = 0$ $|\psi(0)\rangle$ na stav v čase t $|\psi(t)\rangle$. Pokud tedy najdeme evoluční operátor, máme Schrödingerovu rovnici vyřešenou pro libovolný počáteční stav.

Určíme matici evolučního operátoru pro spin v magnetickém poli ve standardní bázi. Je rovna exponenciále matice hamiltoniánu (7.29), kterou zavedeme pomocí Taylorova rozvoje

$$U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\mu_B B t \vec{b} \cdot \vec{\sigma}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}\mu_B B t \right)^n (\vec{b} \cdot \vec{\sigma})^n. \quad (7.31)$$

Mocniny matice $\vec{b} \cdot \vec{\sigma}$ lze elegantně spočítat s využitím algebraických vlastností Pauliho matic. Snadno se ukáže, že pro součin dvou Pauliho matic platí vztah

$$\sigma_i \sigma_j = I \delta_{ij} + i \varepsilon_{ijk} \sigma_k. \quad (7.32)$$

Odsud plyne

$$(\vec{b} \cdot \vec{\sigma})^2 = b_i \sigma_i b_j \sigma_j = b_i b_j \delta_{ij} I + i b_i b_j \varepsilon_{ijk} \sigma_k = I, \quad (7.33)$$

protože $b^2 = 1$ a $b_i b_j$ je symetrický tenzor, zatímco ε_{ijk} je antisymetrický. Pro sudé a liché mocniny matice $\vec{b} \cdot \vec{\sigma}$ tak dostaneme

$$\begin{aligned} (\vec{b} \cdot \vec{\sigma})^{2n} &= I \\ (\vec{b} \cdot \vec{\sigma})^{2n+1} &= \vec{b} \cdot \vec{\sigma}. \end{aligned} \quad (7.34)$$

Sumu v (7.31) rozdělíme na sudé a liché členy

$$U(t) = \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} \left(\frac{\mu_B B t}{\hbar} \right)^{2n} \right] I - i \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} \left(\frac{\mu_B B t}{\hbar} \right)^{2n+1} \right] \vec{b} \cdot \vec{\sigma}. \quad (7.35)$$

Řady jsou Taylorův rozvoj cosinu a sinu, takže pro evoluční operátor spinu v magnetickém poli najdeme

$$\begin{aligned} U(t) &= \cos\left(\frac{\mu_B B}{\hbar}t\right) I - i \sin\left(\frac{\mu_B B}{\hbar}t\right) \vec{b} \cdot \vec{\sigma} \\ &= \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\mu_B B}{\hbar}t\right) - ib_3 \sin\left(\frac{\mu_B B}{\hbar}t\right) & i(b_1 - ib_2) \sin\left(\frac{\mu_B B}{\hbar}t\right) \\ i(b_1 + ib_2) \sin\left(\frac{\mu_B B}{\hbar}t\right) & \cos\left(\frac{\mu_B B}{\hbar}t\right) + ib_3 \sin\left(\frac{\mu_B B}{\hbar}t\right) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (7.36)$$

Pokud např. v čase $t = 0$ má spin kladnou projekci do osy z

$$|\phi(0)\rangle = |z, +\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (7.37)$$

pak stav v čase t bude

$$|\phi(t)\rangle = U(t)|\phi(0)\rangle = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\mu_B B}{\hbar}t\right) - ib_3 \sin\left(\frac{\mu_B B}{\hbar}t\right) \\ i(b_1 + ib_2) \sin\left(\frac{\mu_B B}{\hbar}t\right) \end{pmatrix}. \quad (7.38)$$

Pravděpodobnost naměření kladné nebo záporné projekce spinu do osy z je v čase t rovna

$$\begin{aligned} W_{\psi(t), z+} &= \cos^2\left(\frac{\mu_B B}{\hbar}t\right) + b_3^2 \sin^2\left(\frac{\mu_B B}{\hbar}t\right), \\ W_{\psi(t), z-} &= (b_1^2 + b_2^2) \sin^2\left(\frac{\mu_B B}{\hbar}t\right). \end{aligned} \quad (7.39)$$

V případě, že magnetické pole míří ve směru osy z , se evoluční operátor (7.36) zjednoduší na

$$U(t) = \cos\left(\frac{\mu_B B}{\hbar}t\right) I - i \sin\left(\frac{\mu_B B}{\hbar}t\right) \sigma_3 = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\mu_B B}{\hbar}t} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\mu_B B}{\hbar}t} \end{pmatrix}. \quad (7.40)$$

Matice hamiltoniánu (7.13) je v tomto případě diagonální, takže jeho exponenciála je opět diagonální matice, kde na diagonále jsou exponenciály vlastních čísel $E_{\pm} = \pm\mu_B B$. Pro počáteční podmínku (7.36) dostaneme časový vývoj

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\mu_B B}{\hbar}t} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\mu_B B}{\hbar}t} \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\mu_B B}{\hbar}t} \\ e^{i\frac{\mu_B B}{\hbar}t} \end{pmatrix}, \quad (7.41)$$

což odpovídá dříve nalezenému výsledku (7.17).

Kapitola 8

Amoniakový maser

Maser je zkratka pro "Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation". Jedná se kvantový generátor využívající stimulovanou emisi pro zesílení koherentního elektromagnetického záření v mikrovlnné oblasti. Funguje na podobných fyzikálních principech jako dnes mnohem známější lasery, které generují koherentní záření typicky ve viditelném spektru (ale existují i infračervené, ultrafialové a další lasery, termín laser dnes označuje souhrnně všechny generátory koherentního záření s vlnovou délkou kratší než jsou mikrovlny). První maser založený na vlastnostech molekuly amoniaku sestavili v roce 1953 Townes, Gordon a Zeiger. Ukážeme si jednoduchý model tohoto přístroje.

Molekula amoniaku jako dvouhladinový systém

Molekula amoniaku NH_3 se skládá ze tří vodíků a jednoho dusíku. Lze si jí představit jako čtyřstěn - rovnostranný trojúhelník s atomy vodíku ve vrcholech, nad kterým je atom dusíku. Z mikroskopického pohledu se jedná komplikovaný systém, který má mnoho stupňů volnosti (translační, rotační, vibrační, elektronové hladiny atd.). Pro vysvětlení základních principů maseru ale stačí vzít v úvahu dva kvantové stavy molekuly amoniaku - vzhledem k fixní rovině tvořené atomy vodíku může být atom dusíku buď nahoře, nebo dole (přesněji řečeno ve směru nebo proti směru momentu hybnosti molekuly). Označme tyto kvantové stavy symbolicky jako $|\uparrow\rangle$ a $|\downarrow\rangle$, budou tvořit ortonormální bázi našeho Hilbertova prostoru

$$\mathcal{H} = [|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle]_{\chi} \simeq \mathbb{C}^2, \quad \langle\uparrow|\downarrow\rangle = 0. \quad (8.1)$$

Z klasického pohledu jsou tyto stavy ekvivalentní - atomy vodíku vytváří potenciálovou bariéru, kterou atom dusíku nemůže projít. Stavům odpovídají stabilní konfigurace se stejnou energií E_0 , kterou můžeme bez újmy na obecnosti položit rovnou nule (v nerelativistické fyzice je energie určena až na aditivní konstantu). V kvantové mechanice ale atom dusíku může bariérou s nějakou pravděpodobností projít, a stavy $|\uparrow\rangle$ a $|\downarrow\rangle$ nejsou stacionární, tj. nejsou to vlastní vektory hamiltoniánu \hat{H} . Matice hamiltoniánu \hat{H}_0 v této bázi tedy nebude diagonální, tj.

$$\langle\downarrow|\hat{H}_0|\uparrow\rangle = \overline{\langle\uparrow|\hat{H}|\downarrow\rangle} \neq 0. \quad (8.2)$$

Zvolíme ji ve tvaru

$$H_0 = \begin{pmatrix} 0 & -\Delta \\ -\Delta & 0 \end{pmatrix}, \quad (8.3)$$

což odpovídá volbě $E_0 = 0$ a $\langle \downarrow | \hat{H} | \uparrow \rangle = \langle \uparrow | \hat{H} | \downarrow \rangle = -\Delta$. Matice Hamiltoniánu je násobek první Pauliho matice

$$H_0 = -\Delta \sigma_1. \quad (8.4)$$

Víme tedy, že možné hodnoty energie jsou

$$E_g = -\Delta, \quad E_e = \Delta \quad (8.5)$$

a příslušné vlastní stavy jsou

$$\begin{aligned} |g\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \\ |e\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (8.6)$$

tj. platí vztahy

$$\hat{H}_0 |g\rangle = -\Delta |g\rangle, \quad \hat{H}_0 |e\rangle = \Delta |e\rangle. \quad (8.7)$$

Kety $|g\rangle$ a $|e\rangle$ označují základní (ground state) a excitovaný (excited state) stav molekuly. Rozdíl energií excitovaného a základního stavu

$$\Delta E = E_e - E_g = 2\Delta \quad (8.8)$$

má v případě molekuly amoniaku experimentální hodnotu $\approx 1 \times 10^{-4} \text{eV}$. Při přechodu z excitovaného do základního stavu dojde k vyzáření fotonu s touto energií, což odpovídá frekvenci

$$\nu = \frac{2\Delta}{h} \approx 24 \text{ GHz}, \quad (8.9)$$

a vlnové délce $\lambda \approx 1.15 \text{cm}$.

Časový vývoj volné molekuly

Uvažujme počáteční stav molekuly, kdy je dusík nahoře, tj.

$$|\psi(0)\rangle = |\uparrow\rangle. \quad (8.10)$$

Tento stav můžeme rozložit do báze vlastních vektorů hamiltoniánu způsobem

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|g\rangle + |e\rangle). \quad (8.11)$$

Stav molekuly v čase t je potom

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{\frac{i}{\hbar}\Delta t} |g\rangle + e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta t} |e\rangle \right). \quad (8.12)$$

Určíme, jak se s časem mění pravděpodobnost, že je dusík nahoře nebo dole. Můžeme postupovat například tak, že stav (8.12) zapíšeme v bázi $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \frac{1}{2} \left(e^{\frac{i}{\hbar}\Delta t} (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) + e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta t} (|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle) \right) \\ &= \cos\left(\frac{\Delta t}{\hbar}\right) |\uparrow\rangle + i \sin\left(\frac{\Delta t}{\hbar}\right) |\downarrow\rangle. \end{aligned} \quad (8.13)$$

Pravděpodobnosti jsou potom

$$\begin{aligned} P_{\uparrow}(t) &= |\langle\uparrow|\psi(t)\rangle|^2 = \cos^2\left(\frac{\Delta t}{\hbar}\right), \\ P_{\downarrow}(t) &= |\langle\downarrow|\psi(t)\rangle|^2 = \sin^2\left(\frac{\Delta t}{\hbar}\right). \end{aligned} \quad (8.14)$$

Je vidět, že v tomto přiblížení je chování volné molekuly amoniaku analogické jako pro spin $\frac{1}{2}$ v homogenním magnetickém poli. Konkrétně, bazické stavy $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ jsou analogií stavů spinu s kladnou nebo zápornou projekcí do osy z a hamiltonián (8.4) odpovídá magnetickému poli ve směru osy x .

Molekula v homogenním elektrickém poli

Uvažujme nyní molekulu amoniaku v homogenním elektrostatickém poli $\vec{\mathcal{E}}$. Začněme s klasickou představou. Elektrony jsou blíže dusíku, takže molekula má dipólový moment \vec{d} který míří dolů, pokud je dusík nahoře, a naopak. Energie dipólu v elektrickém poli je

$$E = -\vec{d} \cdot \vec{\mathcal{E}}. \quad (8.15)$$

Přejdeme ke kvantovému popisu. Uvažujme elektrické pole ve směru z -ové osy $\vec{\mathcal{E}} = (0, 0, \mathcal{E})$, kde rovina vodíku molekuly amoniaku odpovídá rovině xy . Ve stavu $|\uparrow\rangle$ se energie molekuly vlivem elektrického pole zvýší o $d\mathcal{E}$, kde d je velikost dipólového momentu. Ve stavu $|\downarrow\rangle$ se o stejné množství energie sníží. Hamiltonián molekuly v elektrickém poli pak můžeme zapsat ve tvaru

$$H = H_0 + d\mathcal{E}\sigma_3 = -\Delta\sigma_1 + d\mathcal{E}\sigma_3 = \begin{pmatrix} d\mathcal{E} & -\Delta \\ -\Delta & -d\mathcal{E} \end{pmatrix}. \quad (8.16)$$

Vlastní čísla této matice jsou

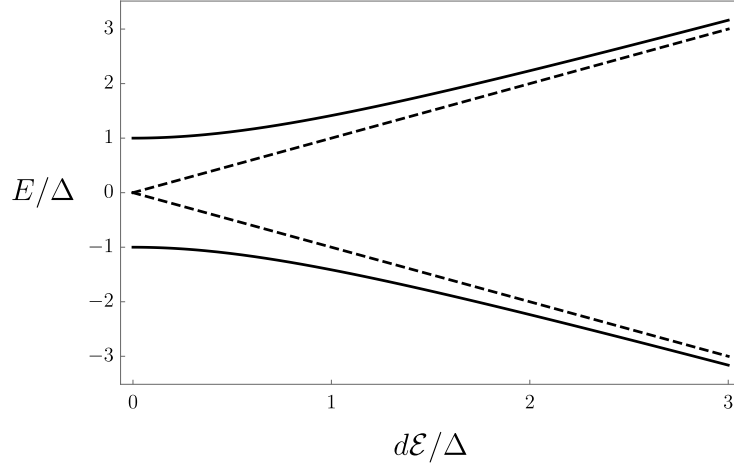
$$\begin{aligned} E_g(\mathcal{E}) &= -\sqrt{d^2\mathcal{E}^2 + \Delta^2}, \\ E_e(\mathcal{E}) &= \sqrt{d^2\mathcal{E}^2 + \Delta^2}. \end{aligned} \quad (8.17)$$

Energie základního a excitovaného stavu tedy závisí na intenzitě elektrického pole. Pro slabé pole $d\mathcal{E} \ll \Delta$ je závislost přibližně kvadratická

$$\begin{aligned} E_g(\mathcal{E}) &\simeq -\Delta - \frac{d^2\mathcal{E}^2}{2\Delta}, \\ E_e(\mathcal{E}) &\simeq \Delta + \frac{d^2\mathcal{E}^2}{2\Delta}. \end{aligned} \quad (8.18)$$

Naopak pro silné pole $d\mathcal{E} \gg \Delta$ je závislost zhruba lineární (viz. obrázek 8.1)

$$\begin{aligned} E_g(\mathcal{E}) &\simeq -d\mathcal{E}, \\ E_e(\mathcal{E}) &\simeq d\mathcal{E}. \end{aligned} \quad (8.19)$$



Obrázek 8.1: Energie excitovaného a základního stavu molekuly amoniaku v homogenním elektrostatickém poli \mathcal{E} (8.17). Pro slabé pole je závislost na \mathcal{E} kvadratická (8.18), v silném poli lineární (8.19).

Na \mathcal{E} závisí samozřejmě i vlastní stavy hamiltoniánu (8.16). Základní a excitovaný stav v elektrickém poli mají tvar

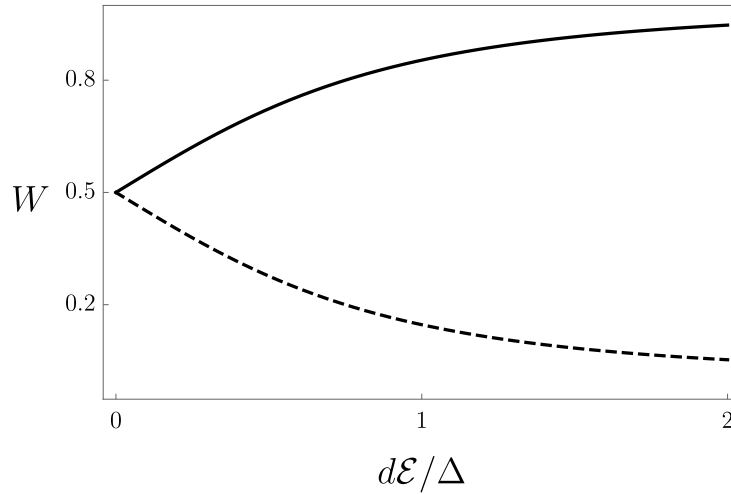
$$\begin{aligned} |g(\mathcal{E})\rangle &= \frac{1}{\sqrt{\Delta^2 + (d\mathcal{E} + \sqrt{d^2\mathcal{E}^2 + \Delta^2})^2}} \left(\Delta |\uparrow\rangle + (d\mathcal{E} + \sqrt{d^2\mathcal{E}^2 + \Delta^2}) |\downarrow\rangle \right), \\ |e(\mathcal{E})\rangle &= \frac{1}{\sqrt{\Delta^2 + (d\mathcal{E} - \sqrt{d^2\mathcal{E}^2 + \Delta^2})^2}} \left(\Delta |\uparrow\rangle + (d\mathcal{E} - \sqrt{d^2\mathcal{E}^2 + \Delta^2}) |\downarrow\rangle \right). \end{aligned} \quad (8.20)$$

Je vidět, že pro $\mathcal{E} \rightarrow 0$ tyto stavy přejdou v (8.6). Naopak, pro silné elektrické pole se blíží

$$\begin{aligned} |g(\mathcal{E})\rangle &\rightarrow |\downarrow\rangle, \\ |e(\mathcal{E})\rangle &\rightarrow |\uparrow\rangle. \end{aligned} \quad (8.21)$$

Ze vztahů (8.20) snadno určíme pravděpodobnosti nalezení atomu dusíku nahoře nebo dole ve stavech $|e(\mathcal{E})\rangle$ a $|g(\mathcal{E})\rangle$

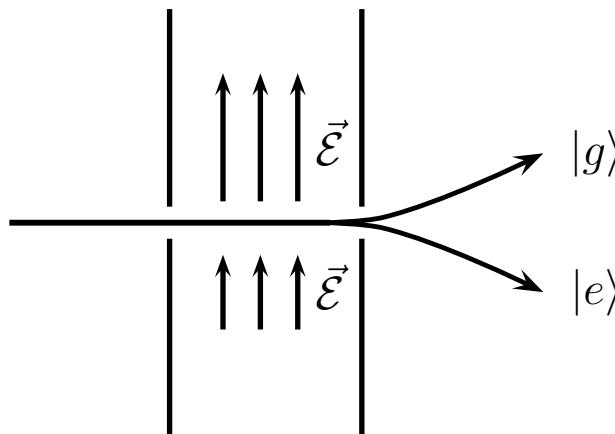
$$\begin{aligned} W_{e,\uparrow} &= |\langle \uparrow | e(\mathcal{E}) \rangle|^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{d\mathcal{E}}{\sqrt{d^2\mathcal{E}^2 + \Delta^2}} \right) = W_{g,\downarrow}, \\ W_{e,\downarrow} &= |\langle \downarrow | e(\mathcal{E}) \rangle|^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{d\mathcal{E}}{\sqrt{d^2\mathcal{E}^2 + \Delta^2}} \right) = W_{g,\uparrow}. \end{aligned} \quad (8.22)$$



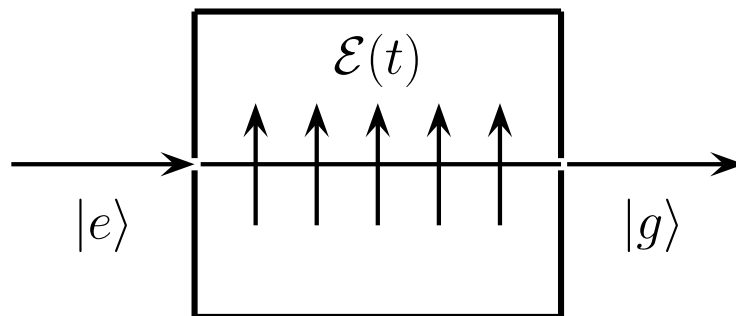
Obrázek 8.2: Pravděpodobnost (8.22), že v excitovaném stavu $|e(\mathcal{E})\rangle$ je dusík nahoře (plná čára) nebo dole (čárkovaná čára) v závislosti na poměru $\frac{d\mathcal{E}}{\Delta}$. Pro základní stav $|g(\mathcal{E})\rangle$ jsou pravděpodobnosti prohozené.

Pro ilustraci jsou pravděpodobnosti jako funkce $\frac{d\mathcal{E}}{\Delta}$ znázorněny na obrázku 8.2 .

Závislost energie kvantových stavů amoniaku na elektrickém poli lze využít k rozdělení proudu molekul na dva podle toho, zda je v základním nebo excitovaném stavu, viz. obrázek 8.3. Princip je podobný jako u Stern-Gerlachova přístroje. Proud molekul necháme proletět nehomogenním elektrickým polem s gradientem ve směru osy z . Molekuly v základním stavu jsou urychleny ve směru gradientu pole, molekuly v excitovaném stavu proti směru. Nehomogenní elektrické pole lze tedy využít jako filtr, např. k přípravě molekul v excitovaném stavu.



Obrázek 8.3: Analogie Stern-Gerlachova přístroje pro molekuly amoniaku. Vlivem nehomogenního elektrického pole se oddělí molekuly v základním a excitovaném stavu.



Obrázek 8.4: Schéma amoniakového maseru. Do rezonantní dutiny vstupují molekuly v excitovaném stavu. Vlivem stimulované emise vyzáří do dutiny foton s energií 2Δ a dutinu opustí v základním stavu. Tím dojde k zesílení pole v dutině.

Amoniakový maser

Schéma amoniakového maseru je na obrázku 8.4. Základem je rezonantní dutina vyladěná na frekvenci přechodu mezi excitovaným a základním stavem (8.9). Na jednom konci do dutiny vstupují molekuly v excitovaném stavu, které připravíme filtrováním pomocí nehomogenního elektrického pole. Naším cílem je, aby molekuly opustily dutinu na druhém konci v základním stavu. Molekula pak předá elektromagnetickému poli uvnitř dutiny energii 2Δ a tím dojde k zesílení pole. Jak uvidíme, tohoto jevu lze dosáhnout tím, že v dutině vytvoříme slabé rezonantní časově závislé elektrické pole

$$\mathcal{E}(t) = 2\mathcal{E}_0 \cos(\omega t) = \mathcal{E}_0(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}), \quad (8.23)$$

kde $\omega = 2\pi\nu = \frac{2\Delta}{\hbar}$ je úhlová frekvence fotonu vyzářeného při přechodu z excitovaného do základního stavu molekuly amoniaku. Hamiltonián molekuly v dutině je pak závislý na čase

$$H(t) = H_0 + d\mathcal{E}(t)\sigma_3 = \begin{pmatrix} d\mathcal{E}(t) & -\Delta \\ -\Delta & -d\mathcal{E}(t) \end{pmatrix}. \quad (8.24)$$

V případě časově závislého hamiltoniánu jsou jeho vlastní vektory parametricky závislé na čase. Nejedná se tedy o stacionární stavy. Vlivem časově závislého hamiltoniánu může dojít s velkou pravděpodobností k přechodu z excitovaného do základního stavu, pokud vhodně zvolíme dobu T , kterou molekula v dutině stráví.

Při řešení Schrödingerovy rovnice s časově závislým hamiltoniánem (8.24)

$$\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle, \quad (8.25)$$

je vhodné pracovat v bázi vlastních vektorů hamiltoniánu volné molekuly amoniaku \hat{H}_0 tvořené vektory $|e\rangle$ a $|g\rangle$. Určíme nejprve matici $\hat{H}(t)$ v této bázi. S použitím (8.6) postupně

nalezneme maticové elementy

$$\begin{aligned}
\langle e|\hat{H}(t)|e\rangle &= \frac{1}{2}(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle)\hat{H}(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle) \\
&= \frac{1}{2}\left(\langle\uparrow|\hat{H}(t)|\uparrow\rangle - \langle\uparrow|\hat{H}(t)|\downarrow\rangle - \langle\downarrow|\hat{H}(t)|\uparrow\rangle + \langle\downarrow|\hat{H}(t)|\downarrow\rangle\right) \\
&= \frac{1}{2}(d\mathcal{E}(t) - (-\Delta) - (-\Delta) + (-d\mathcal{E}(t))) = \Delta,
\end{aligned} \tag{8.26}$$

$$\begin{aligned}
\langle g|\hat{H}(t)|g\rangle &= \frac{1}{2}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)\hat{H}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \\
&= \frac{1}{2}\left(\langle\uparrow|\hat{H}(t)|\uparrow\rangle + \langle\uparrow|\hat{H}(t)|\downarrow\rangle + \langle\downarrow|\hat{H}(t)|\uparrow\rangle + \langle\downarrow|\hat{H}(t)|\downarrow\rangle\right) \\
&= \frac{1}{2}(d\mathcal{E}(t) + (-\Delta) + (-\Delta) + (-d\mathcal{E}(t))) = -\Delta,
\end{aligned} \tag{8.27}$$

$$\begin{aligned}
\langle e|\hat{H}(t)|g\rangle &= \frac{1}{2}(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle)\hat{H}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \\
&= \frac{1}{2}\left(\langle\uparrow|\hat{H}(t)|\uparrow\rangle + \langle\uparrow|\hat{H}(t)|\downarrow\rangle - \langle\downarrow|\hat{H}(t)|\uparrow\rangle - \langle\downarrow|\hat{H}(t)|\downarrow\rangle\right) \\
&= \frac{1}{2}(d\mathcal{E}(t) + (-\Delta) - (-\Delta) - (-d\mathcal{E}(t))) = d\mathcal{E}(t) = \langle g|\hat{H}(t)|e\rangle.
\end{aligned} \tag{8.28}$$

V bázi $\{|e\rangle, |g\rangle\}$ má tedy matice hamiltoniánu $\hat{H}(t)$ tvar

$$H(t) = \begin{pmatrix} \Delta & d\mathcal{E}(t) \\ d\mathcal{E}(t) & -\Delta \end{pmatrix}. \tag{8.29}$$

Označíme koeficienty vektoru $|\psi(t)\rangle$ v této bázi jako $C_e(t)$ a $C_g(t)$, tj.

$$|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} C_e(t) \\ C_g(t) \end{pmatrix}. \tag{8.30}$$

Schrödingerova rovnice (8.25) je potom

$$\begin{pmatrix} \Delta & d\mathcal{E}(t) \\ d\mathcal{E}(t) & -\Delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_e(t) \\ C_g(t) \end{pmatrix} = i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} C_e(t) \\ C_g(t) \end{pmatrix}. \tag{8.31}$$

Pokud by v dutině žádné pole nebylo ($\mathcal{E}_0 = 0$), pak by řešením rovnice (8.31) bylo

$$\begin{pmatrix} C_e(t) \\ C_g(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\Delta t}{\hbar}} D_e \\ e^{i\frac{\Delta t}{\hbar}} D_g \end{pmatrix}, \tag{8.32}$$

kde D_e a D_g představují počáteční podmínku v čase $t = 0$. Pro $d\mathcal{E}_0$ nenulové budeme hledat řešení rovnice (8.31) ve tvaru (8.32), kde D_e a D_g budou funkce času. Dosazením do (8.31)

dostaneme

$$\begin{aligned}\Delta e^{-i\frac{\Delta t}{\hbar}} D_e(t) + d\mathcal{E}(t)e^{i\frac{\Delta t}{\hbar}} D_g(t) &= i\hbar \frac{d}{dt} \left(e^{-i\frac{\Delta t}{\hbar}} D_e(t) \right) = \Delta e^{-i\frac{\Delta t}{\hbar}} D_e(t) + e^{-i\frac{\Delta t}{\hbar}} i\hbar \dot{D}_e(t), \\ d\mathcal{E}(t)e^{-i\frac{\Delta t}{\hbar}} D_e(t) - \Delta e^{i\frac{\Delta t}{\hbar}} D_g(t) &= i\hbar \frac{d}{dt} \left(e^{i\frac{\Delta t}{\hbar}} D_g(t) \right) = -\Delta e^{i\frac{\Delta t}{\hbar}} D_g(t) + e^{i\frac{\Delta t}{\hbar}} i\hbar \dot{D}_g(t).\end{aligned}\tag{8.33}$$

Odsud nalezneme diferenciální rovnice pro $d_e(t)$ a $d_g(t)$ (využijeme toho, že $\omega = \frac{2\Delta}{\hbar}$ a dosadíme za $\mathcal{E}(t)$ z (8.23))

$$\begin{aligned}i\hbar \dot{D}_e(t) &= d\mathcal{E}(t)e^{i\omega t} D_g(t) = d\mathcal{E}_0 (1 + e^{2i\omega t}) D_g(t), \\ i\hbar \dot{D}_g(t) &= d\mathcal{E}(t)e^{-i\omega t} D_e(t) = d\mathcal{E}_0 (1 + e^{-2i\omega t}) D_e(t).\end{aligned}\tag{8.34}$$

V dalším budeme uvažovat $d\mathcal{E}_0 \ll \Delta$. D_e a D_g se pak s časem mění velmi pomalu v porovnání s členy $e^{\pm 2i\omega t}$, které rapidně oscilují. Na délce jedné periody oscilací $e^{\pm 2i\omega t}$ můžeme D_e a D_g považovat za konstantní a exponenciály nahradit jejich časovou střední hodnotou přes periodu, která je nulová. V tomto přiblížení dostaneme rovnice pro D_e a D_g s konstantními koeficienty

$$\begin{aligned}i\hbar \dot{D}_e(t) &= d\mathcal{E}_0 D_g(t), \\ i\hbar \dot{D}_g(t) &= d\mathcal{E}_0 D_e(t).\end{aligned}\tag{8.35}$$

První rovnici zderivujeme podle času a dosadíme ze druhé

$$\ddot{D}_e(t) = - \left(\frac{d\mathcal{E}_0}{\hbar} \right)^2 D_e(t).\tag{8.36}$$

Řešení této rovnice je lineární kombinace $\cos\left(\frac{d\mathcal{E}_0}{\hbar}t\right)$ a $\sin\left(\frac{d\mathcal{E}_0}{\hbar}t\right)$. Pro počáteční podmínku $D_e(0) = 1$, $D_g(0) = 0$, tj. když molekula vstupuje do dutiny v excitovaném stavu

$$|\psi(0)\rangle = |e\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},\tag{8.37}$$

dostaneme řešení

$$\begin{aligned}D_e(t) &= \cos\left(\frac{d\mathcal{E}_0}{\hbar}t\right), \\ D_g(t) &= -i \sin\left(\frac{d\mathcal{E}_0}{\hbar}t\right).\end{aligned}\tag{8.38}$$

Pravděpodobnost nalezení molekuly v excitovaném nebo základním stavu po čase t je dána kvadrátem absolutní hodnoty těchto amplitud

$$\begin{aligned}W_e(t) &= |\langle e|\psi(t)\rangle|^2 = |D_e(t)|^2 = \cos^2\left(\frac{d\mathcal{E}_0}{\hbar}t\right), \\ W_g(t) &= |\langle g|\psi(t)\rangle|^2 = |D_g(t)|^2 = \sin^2\left(\frac{d\mathcal{E}_0}{\hbar}t\right).\end{aligned}\tag{8.39}$$

Vlivem časově závislého elektrického pole $\mathcal{E}(t)$ tedy dochází k periodickým přechodům mezi excitovaným a základním stavem molekuly amoniaku. Vidíme, že pro

$$t = T_n = \frac{(2n+1)\pi\hbar}{2d\mathcal{E}_0}, \quad n \in \mathbb{N}, \quad (8.40)$$

je $W_e(T) = 0$ a $W_g(T) = 1$. Pokud tedy dutinu zkonstruujeme tak, že v ní molekula stráví čas T_n , pak ji s jistotou opustí v základním stavu. Každá molekula tak v dutině vyzáří foton s energií 2Δ a tím zesílí pole v dutině (zjednodušeně řečeno, zvětší se \mathcal{E}_0). Tomuto procesu se říká stimulovaná emise (je způsobená stimulujícím polem $\mathcal{E}(t)$; na rozdíl od spontánní emise, ke které dochází bez přítomnosti $\mathcal{E}(t)$ v důsledku kvantování elektromagnetického pole v dutině).

Zesílené pole v dutině je koherentní, protože všechny fotony se vyzáří do módu původního stimulujícího pole (mají stejnou fázi a frekvenci). Masery (a stejně tak i lasery) umožňují nejlepší možné zesílení elektromagnetické vlny dovolené relacemi neurčitosti, které lze v tomto případě formulovat ve tvaru

$$\Delta n \Delta \phi \geq \frac{1}{2}, \quad (8.41)$$

kde Δn je neurčitost (střední kvadratická odchylka) v počtu fotonů v poli a $\Delta \phi$ je neurčitost ve fázi vlny. Pro koherentní pole platí $\Delta n = \sqrt{\langle n \rangle}$, kde $\langle n \rangle$ je střední počet fotonů v poli, což je typicky velmi velké číslo. Při saturaci relací neurčitosti pro $\Delta \phi$ platí

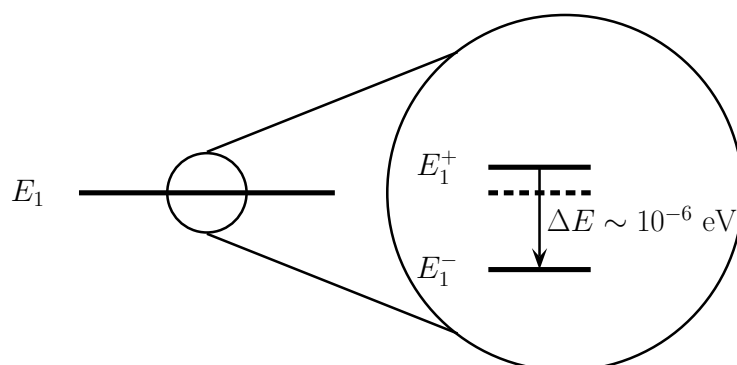
$$\Delta \phi = \frac{1}{2\sqrt{\langle n \rangle}} \ll 1. \quad (8.42)$$

Maser tak umožňuje generovat mikrovlnné záření s extrémně dobrou fázovou stabilitou.

Kapitola 9

Hyperjemná struktura vodíku

Schrödinger ukázal, že energie elektronu v atomu vodíku může nabývat pouze hodnot $E_N = -\frac{R}{N^2}$, $N = 1, 2, \dots$, kde $R \doteq -13,6$ eV je Rydbergova energie. Elektron v atomu vodíku má tedy základní stav s energií $E_1 = -R$. Při bližším zkoumání se ale ukazuje, že se jedná o dvě velmi blízké hladiny, které jsou vzdálené řádově o 10^{-6} eV, viz. obrázek 9.1. Tato tzv. hyperjemná struktura je způsobená interakcí spinu elektronu a spinu protonu. Poznamenejme, že spektrum vodíku má i tzv. jemnou strukturu, způsobenou relativistickými efekty, která se projevuje rozštěpením hladiny E_N na několik blízkých hladin vzdálených řádově o 10^{-4} eV.



Obrázek 9.1: Schéma hyperjemné struktury základního stavu vodíku.

Ukážeme si, jakým způsobem můžeme popsat hyperjemnou strukturu základního stavu vodíku. Dále se podíváme na to, co se děje s hyperjemnou strukturou pod vlivem homogenního magnetického pole.

Spinové stavy elektronu a protonu

Elektron i proton mají spin $\frac{1}{2}$. Budeme pracovat v nějaké pevně zvolené kartézské soustavě. Standardní báze Hilbertových prostorů spinu elektronu a protonu vytvoříme ze stavů s kladnou a zápornou projekcí spinu do osy z . Bazické stavy spinu elektronu označíme jako

$|\pm_e\rangle$, tvoří ortonormální bázi Hilbertova prostoru spinu elektronu \mathcal{H}_e

$$\mathcal{H}_e = [|+_e\rangle, |-_e\rangle]_\lambda, \quad \langle +_e | -_e \rangle = 0. \quad (9.1)$$

Podobně označíme stavy s kladnou a zápornou projekcí spinu protonu do osy z jako $|\pm_p\rangle$. Ty tvoří ortonormální bázi Hilbertova prostoru spinu protonu \mathcal{H}_p

$$\mathcal{H}_p = [|+_p\rangle, |-_p\rangle]_\lambda, \quad \langle +_p | -_p \rangle = 0. \quad (9.2)$$

Bázi Hilbertova prostoru \mathcal{H} složeného systému spinu elektronu a protonu vytvoříme ze stavů $|\pm_e\rangle$ a $|\pm_p\rangle$. Ortonormální bázi budou tvořit 4 stavy

$$\mathcal{H} = [|+_e, +_p\rangle, |+_e, -_p\rangle, |-_e, +_p\rangle, |-_e, -_p\rangle]. \quad (9.3)$$

Z matematického pohledu je Hilbertův prostor složeného systému roven tenzorovému součinu Hilbertových prostorů složek, tj.

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_e \otimes \mathcal{H}_p. \quad (9.4)$$

Bázi (9.3) spojíme se standardní bází \mathcal{H} , tj.

$$\begin{aligned} |+_e, +_p\rangle &\equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, & |+_e, -_p\rangle &\equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ |-_e, +_p\rangle &\equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, & |-_e, -_p\rangle &\equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (9.5)$$

V dalším budeme pracovat vždy v této bází.

Operátory spinu elektronu a protonu

Podívejme se na to, jakým způsobem popsat operátory složek spinu elektronu a protonu v Hilbertově prostoru složeného systému \mathcal{H} , resp. jaké jsou matice těchto operátorů ve standardní bází (9.5). Začneme se složkami spinu elektronu, které označíme jako $\hat{S}_i^{(e)}$. Tyto operátory působí netriviálním způsobem jen na spinové stavy elektronu, na stavu spinu protonu vůbec nezáleží. Pro projekci do osy z platí

$$\hat{S}_z^{(e)} |+_e, \pm_p\rangle = \frac{\hbar}{2} |+_e, \pm_p\rangle, \quad \hat{S}_z^{(e)} |-_e, \pm_p\rangle = -\frac{\hbar}{2} |-_e, \pm_p\rangle. \quad (9.6)$$

Matice operátoru projekce spinu elektronu do osy z je tedy

$$S_z^{(e)} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (9.7)$$

Operátory projekce spinu elektronu do os x a y působí na bazické stavy následovně (viz. matice (5.19))

$$\begin{aligned}\hat{S}_x^{(e)}|+e, \pm_p\rangle &= \frac{\hbar}{2}|-e, \pm_p\rangle, & \hat{S}_x^{(e)}|-e, \pm_p\rangle &= \frac{\hbar}{2}|+e, \pm_p\rangle, \\ \hat{S}_y^{(e)}|+e, \pm_p\rangle &= i\frac{\hbar}{2}|-e, \pm_p\rangle, & \hat{S}_y^{(e)}|-e, \pm_p\rangle &= -i\frac{\hbar}{2}|+e, \pm_p\rangle.\end{aligned}\quad (9.8)$$

Matice těchto operátorů v bázi (9.5) jsou rovny

$$S_x^{(e)} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_y^{(e)} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (9.9)$$

Analogickým způsobem sestrojíme matice operátorů složek spinu protonu $\hat{S}_i^{(p)}$. Ty působí netriviálně pouze na stavy protonu, na stavu spinu elektronu nezávisí. Pro třetí složku platí

$$\hat{S}_z^{(p)}|\pm_e, +_p\rangle = \frac{\hbar}{2}|\pm_e, +_p\rangle, \quad \hat{S}_z^{(p)}|\pm_e, -_p\rangle = -\frac{\hbar}{2}|\pm_e, -_p\rangle. \quad (9.10)$$

Matice operátoru projekce spinu protonu do osy z je tedy

$$S_z^{(p)} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (9.11)$$

Pro operátory x -ové a y -ové složky platí

$$\begin{aligned}\hat{S}_x^{(p)}|\pm_e, +_p\rangle &= \frac{\hbar}{2}|\pm_e, -_p\rangle, & \hat{S}_x^{(p)}|\pm_e, -_p\rangle &= \frac{\hbar}{2}|\pm_e, +_p\rangle, \\ \hat{S}_y^{(p)}|\pm_e, +_p\rangle &= i\frac{\hbar}{2}|\pm_e, -_p\rangle, & \hat{S}_y^{(p)}|\pm_e, -_p\rangle &= -i\frac{\hbar}{2}|\pm_e, +_p\rangle.\end{aligned}\quad (9.12)$$

Matice operátorů projekce spinu protonu do těchto os jsou potom rovny

$$S_x^{(p)} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_y^{(p)} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix}. \quad (9.13)$$

Interakce spinu elektronu a protonu

Víme, že se spinem se pojí vlastní magnetický moment částice. Spiny protonu a elektronu tak spolu navzájem interagují podobně jako dva klasické magnety. Energie interakce dvou klasických magnetů s magnetickými momenty $\vec{\mu}_1$ a $\vec{\mu}_2$ bude úměrná $\vec{\mu}_1 \cdot \vec{\mu}_2$. V kvantovém

případě dostaneme analogickým způsobem operátor energie - hamiltonián. Označíme operátory vlastních magnetických momentů elektronu a protonu jako $\hat{\vec{\mu}}^{(e)}$ a $\hat{\vec{\mu}}^{(p)}$. Hamiltonián interakce spinu elektronu a protonu je potom roven

$$\hat{H}_0 = \tilde{A} \hat{\vec{\mu}}^{(e)} \cdot \hat{\vec{\mu}}^{(p)}, \quad (9.14)$$

kde \tilde{A} je nějaká konstanta. Vlastní magnetický moment elektronu je (viz. (5.27))

$$\hat{\vec{\mu}}^{(e)} = -\frac{2\mu_B}{\hbar} \hat{S}^{(e)} \equiv \frac{2\mu_e}{\hbar} \hat{S}^{(e)}, \quad (9.15)$$

kde μ_B je Bohrov magneton

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} \doteq 9.274 \cdot 10^{-24} \text{ J} \cdot \text{T}^{-1}. \quad (9.16)$$

Pro vlastní magnetický moment protonu platí

$$\hat{\vec{\mu}}^{(p)} = g_p \frac{\mu_N}{\hbar} \hat{S}^{(p)} \equiv \frac{2\mu_p}{\hbar} \hat{S}^{(p)}, \quad (9.17)$$

kde μ_N je jaderný magneton

$$\mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p} \doteq 5.051 \cdot 10^{-27} \text{ J} \cdot \text{T}^{-1}, \quad (9.18)$$

a $g_p \doteq 5.586$ je tzv. g -faktor protonu (souvisí s vnitřní strukturou protonu, který na rozdíl od elektronu není bodovou částicí). Magnetický moment protonu μ_p má opačné znaménko než elektronu μ_e , a je v porovnání s ním mnohem menší

$$\left| \frac{\mu_p}{\mu_e} \right| = \frac{g_p m_e}{2 m_p} \doteq 1.5 \cdot 10^{-3}. \quad (9.19)$$

Dosazením za vlastní magnetické momenty do (9.14) zapíšeme hamiltonián pomocí operátorů spinu elektronu a protonu

$$\hat{H}_0 = \frac{4\mu_e\mu_p}{\hbar^2} \tilde{A} \hat{S}^{(e)} \cdot \hat{S}^{(p)} = \frac{4\mu_e\mu_p}{\hbar^2} \tilde{A} \left(\hat{S}_x^{(e)} \hat{S}_x^{(p)} + \hat{S}_y^{(e)} \hat{S}_y^{(p)} + \hat{S}_z^{(e)} \hat{S}_z^{(p)} \right). \quad (9.20)$$

Určíme matici hamiltoniánu v bázi (9.5). Nejprve nalezneme matice operátorů $\hat{S}_i^{(e)} \hat{S}_i^{(p)}$. S použitím matic operátorů složek spinu protonu a elektronu (9.7), (9.9), (9.11) a (9.13)

dostaneme

$$\begin{aligned}
S_x^{(e)} S_x^{(p)} &= \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\
S_y^{(e)} S_y^{(p)} &= \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\
S_z^{(e)} S_z^{(p)} &= \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{9.21}$$

Pro matici hamiltoniánu (9.20) pak nalezneme

$$H_0 = \begin{pmatrix} A & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -A & 2A & 0 \\ 0 & 2A & -A & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A \end{pmatrix}, \tag{9.22}$$

kde jsme označili $A = \mu_e \mu_p \tilde{A}$.

Hyperjemná struktura základního stavu

Určíme vlastní čísla a vlastní vektory matice hamiltoniánu (9.22). Vlastní čísla jsou rovna

$$E_+ = A, \quad E_- = -3A, \tag{9.23}$$

přičemž hodnota E_+ je trojnásobně degenerovaná. Vlastní vektor $|\psi^-\rangle$ příslušný k hodnotě E_- je

$$|\psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+e, -p\rangle - |-e, +p\rangle). \tag{9.24}$$

V podprostoru s vlastní hodnotou E_+ lze zvolit ortonormální bázi například takto

$$\begin{aligned}
|\psi_1^+\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = |+e, +p\rangle, & |\psi_2^+\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |-e, -p\rangle, \\
|\psi_3^+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+e, -p\rangle + |-e, +p\rangle).
\end{aligned} \tag{9.25}$$

V důsledku interakce spinu elektronu a protonu je tedy základní hladina vodíku s energií $E_1 = -R \doteq -13.6$ eV rozdělena na dvě hladiny (viz. obrázek 9.2)

$$\begin{aligned} E_1^+ &= E_1 + E_+ = R + A, \\ E_1^- &= E_1 + E_- = R - 3A. \end{aligned} \quad (9.26)$$

Konstantu A je možné určit experimentálně. Při přeskoku elektronu z hladiny E_1^+ na hladinu E_1^- dojde k vyzáření fotonu s energií

$$h\nu = \Delta E = 4A, \quad (9.27)$$

tj. frekvence fotonu je

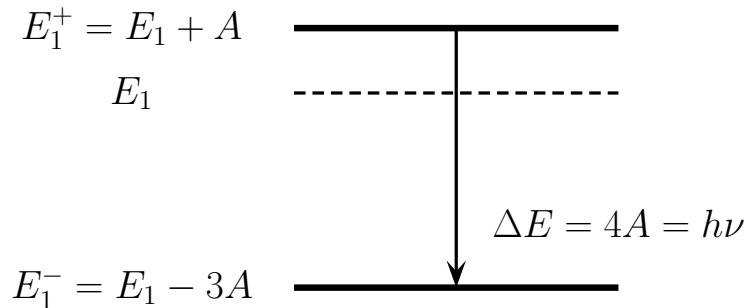
$$\nu = \frac{4A}{h}. \quad (9.28)$$

Z měření spektra vodíku plyne, že přeskoku mezi hladinami hyperjemné struktury odpovídá mikrovlnné záření o frekvenci a vlnové délce

$$\nu \doteq 1420 \text{ MHz}, \quad \lambda \doteq 21 \text{ cm}. \quad (9.29)$$

Energie vyzářeného fotonu je tedy zhruba

$$\Delta E = 4A \doteq 5.9 \cdot 10^{-6} \text{ eV}. \quad (9.30)$$



Obrázek 9.2: Hyperjemná struktura základního stavu vodíku. Vlivem interakce spinu elektronu a protonu se jedná o dvě blízké hladiny s energiemi $E_1^+ = E_1 + A$ a $E_1^- = E_1 - 3A$. Při přeskoku mezi hladinami dojde k vyzáření fotonu s energií $h\nu = \Delta E = 4A$.

Tato 21-cm spektrální linie vodíku hraje důležitou roli v radioastronomii. Mikrovlnné záření na této vlnové délce je vyzařováno a absorbováno atomárním vodíkem v oblacích plynu v galaxiích. Z intenzity záření je možné odhadnout množství atomárního vodíku. Z posunutí spektrální linie vlivem Dopplerova jevu lze určit pohyb plynu v galaxii.

Zeemanův jev

Na závěr této kapitoly si ukážeme, co se stane s hyperjemnou strukturou, pokud atom vodíku bude v homogenním magnetickém poli \vec{B} . Energie spinů elektronu a protonu závisí na jeho projekci na magnetické pole, viz. (5.29). Hamiltonián spinů v magnetickém poli (bez jejich vzájemné interakce) bude

$$\hat{H}_1 = -\hat{\vec{\mu}}^{(e)} \cdot \vec{B} - \hat{\vec{\mu}}^{(p)} \cdot \vec{B}. \quad (9.31)$$

Bez újmy na obecnosti zvolíme magnetické pole ve směru osy z . Hamiltonián (9.31) je potom

$$\hat{H}_1 = -\frac{2\mu_e}{\hbar} B \hat{S}_z^{(e)} - \frac{2\mu_p}{\hbar} B \hat{S}_z^{(p)}. \quad (9.32)$$

Ve standardní bázi (9.5) je reprezentován diagonální maticí

$$H_1 = B \begin{pmatrix} -(\mu_e + \mu_p) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -(\mu_e - \mu_p) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mu_e - \mu_p & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mu_e + \mu_p \end{pmatrix}. \quad (9.33)$$

Víme, že magnetický moment elektronu je záporný, protonu kladný, a platí $|\mu_e| \gg \mu_p$. Označíme si

$$\mu = -(\mu_e + \mu_p), \quad \mu' = -(\mu_e - \mu_p), \quad (9.34)$$

pak $\mu \simeq \mu' > 0$. Matice \hat{H}_1 je potom

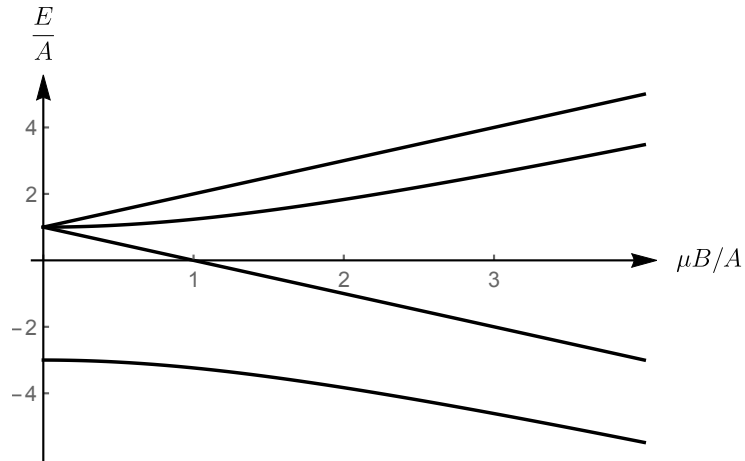
$$H_1 = B \begin{pmatrix} \mu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mu' & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\mu' & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\mu \end{pmatrix}. \quad (9.35)$$

Matice celkového hamiltoniánu $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$ má pak tvar

$$H = H_0 + H_1 = \begin{pmatrix} A + \mu B & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -A + \mu' B & 2A & 0 \\ 0 & 2A & -A - \mu' B & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A - \mu B \end{pmatrix}. \quad (9.36)$$

Její vlastní čísla jsou

$$\begin{aligned} E_I &= A + \mu B, \\ E_{II} &= A - \mu B, \\ E_{III} &= A \left(-1 + 2\sqrt{1 + \frac{\mu'^2 B^2}{4A^2}} \right), \\ E_{IV} &= -A \left(1 + 2\sqrt{1 + \frac{\mu'^2 B^2}{4A^2}} \right). \end{aligned} \quad (9.37)$$



Obrázek 9.3: Závislost energií hladin jemné struktury na vnějším magnetickém poli.

Energie tedy závisí na intenzitě vnějšího magnetického pole a pro $B \neq 0$ dostáváme 4 různé energetické hladiny. Degenerovaná hladina E_+ se rozdělí na tři hladiny E_I , E_{II} a E_{III} - magnetické pole tzv. sejme degeneraci. Rozštěpení degenerovaných energetických hladin vlivem homogenního magnetického pole se nazývá Zeemanův jev.

Pro ilustraci jsou na obrázku 9.3 znázorněny $\frac{E_i}{A}$ jako funkce $\frac{\mu B}{A}$. Je vidět, že pro silná magnetická pole závisí všechny hladiny na B lineárně (pro E_I a E_{II} to samozřejmě platí vždy)

$$\begin{aligned} E_{III} &\simeq -A + \mu' B, \\ E_{IV} &\simeq -A - \mu' B, \quad \mu' B \gg A. \end{aligned} \quad (9.38)$$

Naopak pro slabá magnetická pole $\mu' B \ll A$ jsou tyto dvě hladiny téměř konstantní

$$\begin{aligned} E_{III} &\simeq A, \\ E_{IV} &\simeq -3A, \quad \mu' B \ll A. \end{aligned} \quad (9.39)$$

Kapitola 10

Základy kvantových počítačů

V této kapitole si ukážeme základy toho, jak by se daly využít kvantové systémy pro zpracování informace, a čím se mohou lišit od klasického přístupu. Představíme si základní model kvantového počítače založený na kvantovém registru a kvantových branách. Všechny kroky je možné si prakticky vyzkoušet na kvantovém počítači IBM-Q, který je po registraci dostupný na <https://quantum-computing.ibm.com/>.

Qubit

Klasické digitální počítače používají k zápisu informace binární soustavu. Základní jednotkou informace je bit, který má hodnotu 0 nebo 1. Kvantovou analogií je qubit, což je nějaký kvantový systém, který má dva rozlišitelné bazické stavy, které označíme $|0\rangle$ a $|1\rangle$ (tvoří tzv. výpočetní bázi) a přiřadíme jim hodnoty 0 a 1. Hilbertův prostor jednoho qubitu je tedy

$$\mathcal{H} = [|0\rangle, |1\rangle]_{\lambda} \simeq \mathbb{C}^2. \quad (10.1)$$

Qubit můžeme prakticky realizovat např. pomocí spinu- $\frac{1}{2}$, polarizace fotonu, dvou elektronových hladin v atomu, dvou kvantových stavů supravodivého obvodu, atd.

Základní rozdíl mezi bitem a qubitem je ten, že zatímco bit může být pouze v jednom ze dvou stavů s hodnotou 0 nebo 1, qubit může být v libovolné superpozici bazických stavů

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle, \quad \alpha, \beta \in \mathbb{C}, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1. \quad (10.2)$$

Neznamená to ale, že by hodnota qubitu mohla nabývat jakýchkoli hodnot mezi 0 a 1 (jako např. u analogového počítače). Hodnota qubitu v tomto stavu superpozice totiž není určena. Pokud ji chceme určit, musíme provést měření ve výpočetní bázi. Víme, že α a β jsou amplitudy pravděpodobnosti přechodů z $|\psi\rangle$ do bazických stavů $|0\rangle$ a $|1\rangle$, kterým jsme přiřadili hodnoty 0 a 1. S pravděpodobností $|\alpha|^2$ tedy naměříme hodnotu qubitu rovnou 0 a s pravděpodobností $|\beta|^2$ naměříme hodnotu 1. Hodnota qubitu je tedy binární, stejně jako u klasického digitálního počítače. Je tu ale jeden další rozdíl - po měření se stav qubitu změní ze superpozice $|\psi\rangle$ na $|0\rangle$ nebo $|1\rangle$, podle toho, jakou hodnotu naměříme. Naproti tomu, hodnotu klasického bitu můžeme určit bez toho, aniž bychom ho jakkoli ovlivnili.

Kvantový registr

K výpočtu samozřejmě nestačí jeden bit nebo qubit, používáme jich více - pak tvoří tzv. registr. Kvantový registr n qubitů má bazické stavy tvaru $|i_1 i_2 \dots i_n\rangle$, kde $i_j = 0, 1$. Hilbertův prostor registru je

$$\mathcal{H}_n = \underbrace{\mathcal{H} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}}_{n \times} \simeq \mathbb{C}^{2^n}. \quad (10.3)$$

Má tedy 2^n bazických stavů - jeho dimenze roste exponenciálně s počtem qubitů. Obecný stav kvantového registru je superpozice

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1, i_2, \dots, i_n=0}^1 \alpha_{i_1 i_2 \dots i_n} |i_1 i_2 \dots i_n\rangle. \quad (10.4)$$

K popisu stavu kvantového registru tedy potřebujeme 2^n komplexních čísel $\alpha_{i_1 i_2 \dots i_n}$, které udávají amplitudy pravděpodobnosti jednotlivých výsledků měření hodnoty registru. Stav klasického registru je naproti tomu určen n bity. Tento exponenciální nárůst v počtu parametrů představuje na jednu stranu problém, když chceme kvantový systém simulovat na klasickém počítači. Pokud se nemůžeme omezit na nějaký malý podprostor v \mathcal{H}_n , zvládneme simulovat jen malý počet qubitů, pak nám dojde operační paměť. Pro představu - v roce 2020 nejvýkonnější superpočítač světa SUMMIT má zhruba 10 PB (PetaByte, 1PB= 10^{16} bytů) operační paměti. To jen tak tak stačí k zapsání všech amplitud pravděpodobnosti pro stav registru kvantového počítače Sycamore od Google - ten má 53 qubitů, tj. dimenze Hilbertova prostoru je

$$\dim \mathcal{H}_n = 2^{53} \simeq 10^{16}. \quad (10.5)$$

Při double-precision (hodnota přesná na 15 platných číslic) potřebujeme 64 bitů (8 bytů) na jednu amplitudu, tj. celkem $8 \cdot 10^{16}$ B = 8 PB operační paměti. K zápisu stavu kvantového registru se 60 qubity už bychom potřebovali zhruba 800 PB operační paměti. Je tedy vidět, že simulovat kvantové systémy na klasickém počítači je velmi náročné. Naopak, pokud bychom dokázali nějaký kvantový systém perfektně ovládat, můžeme využít jeho kontrolovaný časový vývoj pro simulaci jiných kvantových systémů. Navíc se ukázalo, kvantové počítače dokáží některé řešit některé úlohy podstatně efektivněji, než počítače klasické. Dvě jednoduché úlohy (Deutschův a Deutsch-Jozsovův algoritmus) si později ukážeme.

Kvantové brány

Podobně jako klasické počítače provádí kvantové počítače jisté manipulace s qubity podle zadaného algoritmu. Základní operace - tzv. kvantové brány - lze chápat jako časový vývoj v diskretních krocích (podobně jako v Mach-Zehnderově interferometru v kapitole 4) a jsou reprezentovány pomocí unitárních operátorů. Kvantové brány mohou pracovat s jedním, dvěma nebo více qubity. V praxi lze většinou vystačit s jedno- a dvou-qubitovými branami.

Jedno-qubitové brány, se kterými budeme pracovat, jsou \hat{X} , \hat{Y} , \hat{Z} a \hat{H} . Jsou definovány působením na bazické stavy qubitu

$$\begin{aligned}\hat{X}|0\rangle &= |1\rangle, & \hat{X}|1\rangle &= |0\rangle, \\ \hat{Y}|0\rangle &= -i|1\rangle, & \hat{Y}|1\rangle &= i|0\rangle, \\ \hat{Z}|0\rangle &= |0\rangle, & \hat{Z}|1\rangle &= -|1\rangle, \\ \hat{H}|0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle), & \hat{H}|1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle),\end{aligned}\tag{10.6}$$

resp. je můžeme zapsat pomocí matic ve standardní bázi

$$\begin{aligned}X &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, & Y &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \\ Z &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, & H &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}.\end{aligned}\tag{10.7}$$

Brány \hat{X} , \hat{Y} , \hat{Z} jsou ve standardní bázi reprezentovány Pauliho maticemi. \hat{X} je obdoba klasické NOT operace (ze stavu $|0\rangle$ udělá $|1\rangle$ a naopak), \hat{Y} navíc bazickým stavům přidá fázi. \hat{Z} nemění první bazický stav, u druhého se změní fáze o π . \hat{H} je tzv. Hadamardova brána, z bazických stavů připraví jejich rovnoměrné superpozice (velikosti amplitud u $|0\rangle$ a $|1\rangle$ jsou stejné).

Pro ilustraci jsou na obrázku 10.1 vlevo snímky z editoru IBM-Q Circuit composer pro \hat{X} a \hat{H} bránu. Vpravo jsou pak výsledky měření hodnoty qubitu.

Z dvou-qubitových bran využijeme tzv. CNOT (kontrolovaná NOT operace). V ní funguje první qubit jako kontrolní, stav druhého qubitu se změní z $|0\rangle$ na $|1\rangle$ a naopak, pokud má první qubit hodnotu 1. Této transformaci odpovídá operátor $\widehat{\text{CNOT}}$ definovaný vztahy

$$\begin{aligned}\widehat{\text{CNOT}}|00\rangle &= |00\rangle, & \widehat{\text{CNOT}}|01\rangle &= |01\rangle, \\ \widehat{\text{CNOT}}|10\rangle &= |11\rangle, & \widehat{\text{CNOT}}|11\rangle &= |10\rangle,\end{aligned}\tag{10.8}$$

resp. ve standardní bázi matice

$$\text{CNOT} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.\tag{10.9}$$

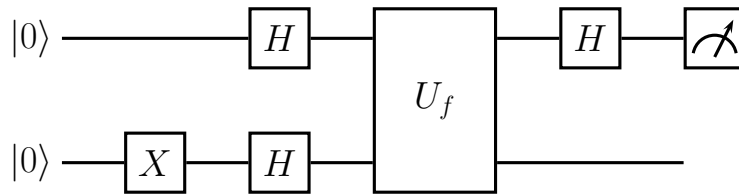
Detailnější popis kvantových bran, které je schopný realizovat kvantový počítač IBM-Q, je zde <https://quantum-computing.ibm.com/docs/circ-comp/q-gates>.

Kvantový výpočet

Základní schéma výpočtu na kvantovém počítači lze rozdělit do tří kroků. Na začátku výpočtu je kvantový registr ve stavu $|00\dots 0\rangle$. Na registr pak aplikujeme kvantové brány



Obrázek 10.1: Snímky z editoru IBM-Q Circuit composer pro X a Hadamardovu bránu. Vpravo jsou pak pravděpodobnosti výsledků měření. U Hadamardovy brány by pravděpodobnosti naměření hodnoty 0 i 1 měly být stejné (0,5). V simulaci to takto přesně nevychází - to je způsobeno jednak nedokonalostmi ve skutečné fyzikální realizaci kvantového počítače IBM-Q, jednak omezeným počtem pokusů (1024), ze kterého jsou pravděpodobnosti rekonstruovány.



Obrázek 10.2: Schéma Deutschova algoritmu. Pokud je hodnota prvního qubitu 0, je funkce f konstantní. Pro hodnotu 1 je f vyvážená.

podle zadaného algoritmu. Nakonec provedeme měření ve výpočetní bázi a určíme hodnotu registru.

Schopnost kvantových počítačů pracovat se superpozicemi vypadá na první pohled jako skvělý nástroj jak urychlit výpočet - můžeme si připravit registr v superpozici všech bazických stavů, spustit algoritmus, a kvantový počítač nám spočítá najednou výsledek pro všechny hodnoty vstupu. Tak jednoduché to ale není - abychom totiž určili hodnotu registru na konci výpočtu, musíme provést měření. To náhodně vybere jednu z možností (která např. odpovídá výsledku výpočtu pro jednu hodnotu vstupních dat), a ostatní členy superpozice jsou navždy ztraceny. Tímto postupem tedy žádnou výhodu oproti klasickému počítači nezískáme. Musíme najít nějaký trik, který nám umožní princip superpozice využít k urychlení výpočtu. Jednou z možností, kterou si ukážeme na příkladech Deutschova a Deutsch-Jozsova algoritmu, je interference amplitud pravděpodobnosti.

Deutschův algoritmus

Představme si následující jednoduchý problém - máme neznámou funkci f (realizované pomocí nějakého oracle), které jednomu bitu přiřadí jeden bit. Takové funkce jsou 4

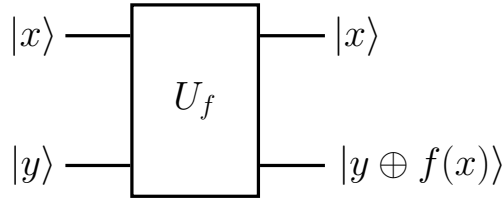
$$\begin{aligned} f_a(0) &= 0, & f_a(1) &= 0, & f_b(0) &= 1, & f_b(1) &= 1, \\ f_c(0) &= 0, & f_c(1) &= 1, & f_d(0) &= 1, & f_d(1) &= 0. \end{aligned} \quad (10.10)$$

První dvě (f_a a f_b) jsou konstantní, druhé dvě (f_c a f_d) jsou vyvážená. Máme rozhodnout, která z těchto dvou možností platí, tj. jestli neznámá funkce je konstantní, nebo vyvážená. Je zřejmé, že klasicky musíme oracle použít dvakrát - jako vstup musíme vložit 0 a 1 abychom určili $f(0)$ a $f(1)$, a tyto hodnoty pak porovnáme. David Deutsch ukázal, že na kvantovém počítači by stačilo oracle použít jednou.

Schéma Deutschova algoritmu je na obrázku 10.2. Používá dva qubity. Kvantovou verzi oracle reprezentuje operátor \hat{U}_f , který působí na bazické stavy následujícím způsobem

$$\hat{U}_f|x\rangle|y\rangle = |x\rangle|y \oplus f(x)\rangle, \quad x, y = 0, 1 \quad (10.11)$$

kde \oplus představuje sčítání modulo 2 (zbytek po celočíselném dělení $y + f(x)$ dvěma). Je to v jistém smyslu obdoba CNOT - první qubit je kontrolní, hodnota druhého se změní podle uvedeného vztahu. Schéma kvantového oracle je na obrázku 10.3.



Obrázek 10.3: Schéma kvantového oracle \hat{U}_f .

Ukážeme si nyní, že o typu funkce f lze jednoznačně rozhodnout na základě hodnoty prvního qubitu na konci algoritmu - pokud má hodnotu 0, je f konstantní, v opačném případě je f vyvážená. Projdeme postupně jednotlivé brány použité v Deutschově algoritmu a jejich vliv na počáteční stav registru $|\psi_0\rangle = |0\rangle|0\rangle$. Brána \hat{X} změní stav druhého qubitu na $|1\rangle$, tj.

$$|\psi_1\rangle = |0\rangle|1\rangle. \quad (10.12)$$

Následně na oba qubity aplikujeme Hadamardovu bránu a dostaneme stav

$$\begin{aligned} |\psi_2\rangle &= (\hat{H} \otimes \hat{H}) |\psi_1\rangle = (\hat{H}|0\rangle) \otimes (\hat{H}|1\rangle) = \frac{1}{2} (|0\rangle + |1\rangle) (|0\rangle - |1\rangle) \\ &= \frac{1}{2} (|0\rangle (|0\rangle - |1\rangle) + |1\rangle (|0\rangle - |1\rangle)). \end{aligned} \quad (10.13)$$

Oracle pak tento stav změní na

$$\begin{aligned} |\psi_3\rangle &= \hat{U}_f |\psi_2\rangle = \frac{1}{2} (|0\rangle (|0 \oplus f(0)\rangle - |1 \oplus f(0)\rangle) + |1\rangle (|0 \oplus f(1)\rangle - |1 \oplus f(1)\rangle)) \\ &= \frac{1}{2} (|0\rangle (|f(0)\rangle - |1 \oplus f(0)\rangle) + |1\rangle (|f(1)\rangle - |1 \oplus f(1)\rangle)). \end{aligned} \quad (10.14)$$

Probereme nyní postupně všechny 4 varianty funkcí f (10.10). Pro f_a je stav roven

$$|\psi_{3a}\rangle = \frac{1}{2} (|0\rangle (|0\rangle - |1\rangle) + |1\rangle (|0\rangle - |1\rangle)) = \frac{1}{2} (|0\rangle + |1\rangle) (|0\rangle - |1\rangle). \quad (10.15)$$

Pro f_b dostaneme

$$|\psi_{3b}\rangle = \frac{1}{2} (|0\rangle (|1\rangle - |0\rangle) + |1\rangle (|1\rangle - |0\rangle)) = \frac{1}{2} (-|0\rangle - |1\rangle) (|0\rangle - |1\rangle). \quad (10.16)$$

Pro f_c platí

$$|\psi_{3c}\rangle = \frac{1}{2} (|0\rangle (|0\rangle - |1\rangle) + |1\rangle (|1\rangle - |0\rangle)) = \frac{1}{2} (|0\rangle - |1\rangle) (|0\rangle - |1\rangle). \quad (10.17)$$

A konečně pro f_d nalezneme

$$|\psi_{3d}\rangle = \frac{1}{2} (|0\rangle (|1\rangle - |0\rangle) + |1\rangle (|0\rangle - |1\rangle)) = \frac{1}{2} (-|0\rangle + |1\rangle) (|0\rangle - |1\rangle). \quad (10.18)$$

Ve všech čtyřech případech můžeme stav zapsat jako

$$|\psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \underbrace{((-1)^{f(0)}|0\rangle + (-1)^{f(1)}|1\rangle)}_{|\psi'_3\rangle} \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle - |1\rangle). \quad (10.19)$$

Druhý qubit dále není důležitý. Na první qubit ještě aplikujeme Hadamardovu bránu a tím ho dostaneme do stavu

$$|\psi_4\rangle = \hat{H}|\psi'_3\rangle = \frac{1}{2} [((-1)^{f(0)} + (-1)^{f(1)})|0\rangle + ((-1)^{f(0)} - (-1)^{f(1)})|1\rangle].$$

Podívejme se nyní na pravděpodobnost, že hodnota qubitu je 0

$$W_0 = \left| \frac{1}{2} ((-1)^{f(0)} + (-1)^{f(1)}) \right|^2. \quad (10.20)$$

Vidíme, že závisí na interferenci amplitud $\frac{1}{2}(-1)^{f(x)}$. Pokud je funkce f konstantní, pak mají amplitudy stejnou fázi, interferují konstruktivně a pravděpodobnost je rovna jedné

$$W_0^{(k)} = 1. \quad (10.21)$$

Pokud je tedy f konstantní, pak s jistotou naměříme hodnotu qubitu rovnou 0. Naopak, pokud je f vyvážená, pak je jedna amplituda kladná a druhá záporná, dochází tedy k destruktivní interferenci a pravděpodobnost naměření hodnoty 0 je nulová

$$W_0^{(v)} = 0. \quad (10.22)$$

U jednoho qubitu máme pouze dva možné výsledky měření, takže u vyvážené funkce s jistotou naměříme hodnotu qubitu rovnou 1. Měřením hodnoty prvního qubitu po jedné iteraci (jednom použití oracle) jsme tedy skutečně schopni jednoznačně rozlišit, zda je funkce f konstantní nebo ne.

Pro ilustraci jsou na obrázku 10.4 snímky z editoru IBM-Q Circuit composer pro Deutschův algoritmus. Nahoře je konstantní funkce $f(x) = 0$, operátor oracle \hat{U}_f je v tomto případě identita. Dole uvažujeme vyváženou funkci $f(x) = x$, kdy operátor oracle je \widehat{CNOT} .

Deutsch-Jozsův algoritmus

Ušetřit jednu iteraci oracle není zase až takový zázrak. Původní Deutschův problém je ale možné rozšířit tak, že kvantový počítač dosáhne exponenciálního urychlení oproti klasickému. Uvažujme nyní funkci f , která n bitům přiřadí jeden bit

$$f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}. \quad (10.23)$$

V dalším identifikujeme celé číslo $x \in \{0, 1, \dots, 2^n - 1\}$ s jeho binárním rozvojem

$$x \equiv x_{n-1}x_{n-2} \dots x_1x_0, \quad x_i \in \{0, 1\}. \quad (10.24)$$



Obrázek 10.4: Nahoře je Deutschův algoritmus pro případ konstantní funkce $f(x) = 0$. Dole je realizace Deutschova algoritmu pro vyváženou funkci $f(x) = x$.

O funkci f předem víme, že platí jedna ze dvou možností - buď je konstantní, nebo vyvážená (pro polovinu vstupů má hodnotu 0, pro druhou polovinu 1). Máme opět rozhodnout, která z těchto možností platí. V klasickém deterministickém algoritmu musíme vyčíslit f pro polovinu vstupů plus jeden, abychom měli jistotu, že rozhodneme správně. Potřebujeme tedy $2^{n-1} + 1$ iterací oracle, který vyhodnocuje funkci f . Deutsch a Jozsa ukázali, že na kvantovém počítači stačí pouze jedna iterace.

Schéma Deutsch-Jozsova algoritmu je na obrázku 10.5. Pracuje s $n+1$ qubity. Kvantový oracle funguje analogicky jako v předchozím případě

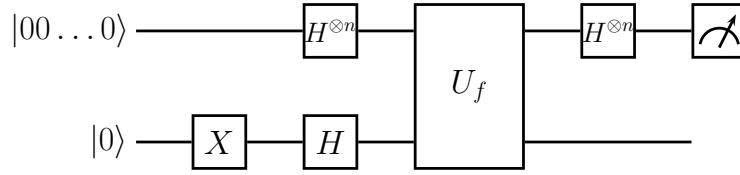
$$\hat{U}_f|x\rangle|y\rangle = |x\rangle|y \oplus f(x)\rangle, \quad x \in \{0, 1, \dots, 2^n - 1\}, \quad y \in \{0, 1\}, \quad (10.25)$$

tj. prvních n qubitů je kontrolních, hodnota posledního se změní podle předepsaného vztahu.

Ukážeme, že podle hodnoty prvních n qubitů na konci Deutsch-Jozsova algoritmu je možné rozhodnout, jestli je f konstantní nebo vyvážená funkce. Opět projdeme postupně všechny brány a jejich vliv na stav registru, jehož počáteční stav je $|\psi_0\rangle = |00 \dots 0\rangle \otimes |0\rangle$. První je brána \hat{X} na posledním qubitu, která změní jeho hodnotu na 1

$$|\psi_1\rangle = |00 \dots 0\rangle \otimes |1\rangle. \quad (10.26)$$

Následně na všechny qubity aplikujeme Hadamardovu bránu a dostaneme stav, který lze



Obrázek 10.5: Schéma Deutsch-Jozsova algoritmu. Pokud naměříme hodnotu všech qubitů rovnou 0, je funkce f konstantní. Pokud má alespoň jeden z nich hodnotu 1 je funkce f vyvážená.

po úpravách zapsat ve tvaru

$$\begin{aligned}
 |\psi_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \underbrace{(|0\rangle + |1\rangle) \dots (|0\rangle + |1\rangle)}_{n \times} \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle - |1\rangle) \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2^{n+1}}} \sum_{x=0}^{2^n-1} |x\rangle \otimes (|0\rangle - |1\rangle). \tag{10.27}
 \end{aligned}$$

Prvních n qubitů je tedy v rovnoměrné superpozici všech bazických stavů výpočetní báze. Oracle tento stav změní na

$$|\psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^{n+1}}} \sum_{x=0}^{2^n-1} |x\rangle \otimes (|f(x)\rangle - |1 \oplus f(x)\rangle). \tag{10.28}$$

Stejně jako u Deutschova algoritmu je možné ukázat, že pro všechny funkce f lze tento stav přepsat do tvaru

$$|\psi_3\rangle = \underbrace{\left(\frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x=0}^{2^n-1} (-1)^{f(x)} |x\rangle \right)}_{|\psi'_3\rangle} \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle - |1\rangle). \tag{10.29}$$

Stav posledního qubitů dále není podstatný. Na prvních n qubitů aplikujeme Hadamardovu bránu (opět na každý z nich). Její působení na stavy výpočetní báze lze zapsat kompaktně ve tvaru

$$\hat{H}|y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + (-1)^y |1\rangle), \quad y \in \{0, 1\}. \tag{10.30}$$

Odtud se dá snadno ukázat, že n Hadamardových bran působí na qubity ve stavu $|x\rangle$ následujícím způsobem

$$\begin{aligned}
 \hat{H}^{\otimes n}|x\rangle &= \hat{H}|x_{n-1}\rangle \otimes \dots \otimes \hat{H}|x_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + (-1)^{x_{n-1}} |1\rangle) \otimes \dots \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + (-1)^{x_0} |1\rangle) \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{y=0}^{2^n-1} (-1)^{x \cdot y} |y\rangle, \tag{10.31}
 \end{aligned}$$

kde

$$x \cdot y = \sum_{i=0}^{n-1} x_i y_i. \quad (10.32)$$

Na konci algoritmu je tedy stav prvních n qubitů roven

$$\begin{aligned} |\psi_4\rangle &= \hat{H}^{\otimes n} |\psi_3'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x=0}^{2^n-1} (-1)^{f(x)} \left(\frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{y=0}^{2^n-1} (-1)^{x \cdot y} |y\rangle \right) \\ &= \frac{1}{2^n} \sum_{y=0}^{2^n-1} \left(\sum_{x=0}^{2^n-1} (-1)^{f(x)+x \cdot y} \right) |y\rangle. \end{aligned} \quad (10.33)$$

Podívejme se nyní na pravděpodobnost, že všechny qubity mají hodnotu 0, tj. pravděpodobnost přechodu ze stavu $|\psi_4\rangle$ do stavu $|00 \dots 0\rangle \equiv |y = 0\rangle$

$$W_0 = |\langle 00 \dots 0 | \psi_4 \rangle|^2 = \left| \frac{1}{2^n} \sum_{x=0}^{2^n-1} (-1)^{f(x)} \right|^2. \quad (10.34)$$

Pravděpodobnost W_0 závisí na interferenci amplitud $\frac{1}{2^n} (-1)^{f(x)}$. Pokud je funkce f konstantní, pak mají všechny amplitudy stejnou fázi, interferují konstruktivně a pravděpodobnost je rovna jedné

$$W_0^{(k)} = 1. \quad (10.35)$$

Pokud je tedy f konstantní, pak s jistotou naměříme hodnotu všech qubitů rovnou 0. Naopak, pokud je f vyvážená, pak je polovina amplitud kladná a polovina záporná, dochází k destruktivní interferenci a

$$W_0^{(v)} = 0. \quad (10.36)$$

Pro vyváženou funkci f qubity nemohou být ve stavu $|00 \dots 0\rangle$, takže alespoň u jednoho z nich naměříme hodnotu 1.

Po jedné iteraci jsme tedy schopni jednoznačně rozhodnout, jestli je funkce f konstantní nebo vyvážená. Deutsch-Jozsův algoritmus tak snížil počet použití oracle exponenciálně oproti klasickému postupu. Měli bychom poznamenat, že toto exponenciální urychlení platí jen ve srovnání s klasickým deterministickým algoritmem. Pokud budeme uvažovat pravděpodobnostní algoritmus, kdy správný výsledek dostaneme s pravděpodobností $1 - \varepsilon$, pak počet iterací bude záviset na naší toleranci k chybě ε , ale ne na počtu bitů n . Nicméně je vidět, že kvantové počítače dokáží tuto úlohu vyřešit efektivněji. Další rozvoj myšlenek Deutsche a Jozsy pak vedl ke kvantovým algoritmům, které nabízí exponenciální urychlení oproti všem známým klasickým algoritmům. Asi nejznámější je Shorův algoritmus, který teoreticky na kvantovém počítači umožňuje najít efektivně rozklad na prvočísla. Jeho realizace pro velká čísla, kde by to mělo praktické využití např. pro prolomení šifer typu RSA, je ale mimo dosah současných kvantových počítačů.