

Hodnoty pozorovatelných veličin

Z vysloveného postulátu o měření lze odvodit několik dalších skutečností dobře známých z kvantové mechaniky, občas ovšem s upozorněními na předpoklady.

Střední hodnota

Nechť $A \in \mathcal{L}_{sa}(\mathcal{H})$. Pro každý stav $\psi \in \mathcal{H}$ a každou množinu $M \in \mathcal{B}^1$ lze mluvit o pravděpodobnosti naměření hodnoty A v M , ale ne pro každý stav toto pravděpodobnostní rozdělení toto pravděpodobnostní rozdělení má střední hodnotu dobře definovanou (představme si například stav

$$\psi = \sum_{n=1}^{\infty} n^{-1} \varphi_n \quad (1)$$

pro LHO s energetickou bází $(\varphi_n)_{n \in \mathbb{N}}$: norma ψ je konečná, ale pokus o určení střední hodnoty energie vede na řadu $\sum_{n \in \mathbb{N}} n |(\varphi_n, \psi)|^2 = \sum_{n \in \mathbb{N}} 1/n$, která diverguje).

Věnujme se nejprve střední hodnotě A v čistém stavu E_ψ . Nechť a značí odpovídající náhodnou veličinu. Pro $\Delta \in \mathcal{B}^1$ je pravděpodobnost

$$P(a \in \Delta) = \text{Tr}(E_A(\Delta)E_\psi) = (\psi, E_A(\Delta)\psi), \quad (2)$$

což ale není nic jiného, než $\mu_\psi^{(A)}(\Delta)$. Číselná míra $\mu_\psi^{(A)}$ získaná ze spektrální míry A pro jednotkový vektor ψ má tedy přímočarý význam pravděpodobnostní míry výsledků měření pozorovatelné A ve stavu E_ψ . Střední hodnotu potom můžeme počítat podle vzorce

$$\langle A \rangle_\psi = \int_{\mathbb{R}} \lambda d\mu_\psi^{(A)}(\lambda) = \left(\psi, \int_{\mathbb{R}} \lambda dE_A(\lambda) \psi \right) = (\psi, A\psi) \quad (3)$$

a je evidentní, že pro $\psi \in D(A)$ se jedná o konečné číslo a pro $\psi \notin D(A)$ není výraz definován.

Pro smíšený stav roli (2) přejímá výraz $\mu_W^{(A)}(\Delta) = \text{Tr}(E_A(\Delta)W)$ a střední hodnotu pak můžeme opět psát jako integrál λ s touto číselnou mírou

$$\langle A \rangle_W = \int_{\mathbb{R}} \lambda d\mu_W^{(A)}(\lambda), \quad (4)$$

který může a nemusí konvergovat. Můžeme se ptát, za jakých předpokladů lze integrál a λ „vnořit“ dovnitř stopy a pravou stranu hledat jako $\text{Tr}(AW)$. Evidentně samotná smysluplnost takového zápisu je podmíněna tím, aby AW byl jaderný operátor. Toto je zaručeno, pokud A je omezený, ale i pro neomezený operátor se může stát, že jeho složení s jaderným operátorem padne do $\mathcal{J}_1(\mathcal{H})$.

Pokud tento předpoklad ustanovíme, vyplývá z něj

- A je definovaný na celém $\text{Ran } W$,
- pro každý rozklad W do čistých stavů jako $W = \sum_n \mu_n E_{\varphi_n}$ tedy všechna φ_n patří do $D(A)$,
- hodnoty $\langle A \rangle_{\varphi_n} = (\varphi_n, A\varphi_n)$ jsou tedy konečné a $\text{Tr}(AW)$ je jejich váženým průměrem s vahami μ_n .

Podmínka $AW \in \mathcal{J}_1(\mathcal{H})$ je tedy postačující pro to, aby výraz (4) byl dobře definovaný a byl roven stopě AW . Není však nutná – lze najít kombinace A, W , pro které (4) konverguje, ačkoli AW jaderný není.

Poznámka: Pro neomezený A nezaručuje $AW \in \mathcal{J}_1(\mathcal{H})$, že by také WA byl jaderný. Dokonce se ani nejedná o spojitý operátor, protože jeho definiční obor je $D(A) \neq \mathcal{H}$. Díky samosdruženosti A a W a omezenosti W ale platí $(WA)^* = A^*W^* = AW$ a tedy do $\mathcal{J}_1(\mathcal{H})$ patří *uzávěr* operátoru WA , protože

$$\overline{WA} = (WA)^{**} = (AW)^* \quad (5)$$

a protože prostor \mathcal{J}_1 je vůči $*$ uzavřený. Stopa tohoto operátoru se se stopou AW shoduje.

Neurčitost měření

Střední kvadratickou odchylku pozorovatelné veličiny A definujeme tradičně,

$$(\Delta A)_W := \sqrt{\langle A^2 \rangle_W - \langle A \rangle_W^2}, \quad (6)$$

její konečnost zaručí postačující podmínka $AW, A^2W \in \mathcal{F}_1(\mathcal{H})$. Výraz na pravé straně lze psát několika ekvivalentními způsoby, z nichž vyzdvihneme

$$(\Delta A)_W^2 = \int_{\mathbb{R}} (\lambda - \langle A \rangle_W)^2 d\mu_W^{(A)}(\lambda), \quad (7)$$

protože nevyžaduje konstruovat vedle spektrální míry A ještě E_{A^2} .

Jestliže pro dvě pozorovatelné A_1, A_2 doplníme k těmto předpokladům ještě $A_1A_2W, A_2A_1W \in \mathcal{F}_1(\mathcal{H})$, lze psát **relaci neurčitosti** ve tvaru

$$(\Delta A_1)_W(\Delta A_2)_W \geq \frac{1}{2} |\text{Tr}((A_1A_2 - A_2A_1)W)| \quad (8)$$

a dokázat naprosto identicky jako v kvantové mechanice.

Poznámka: Operátor $A_1A_2 - A_2A_1$, vystupující v (8) na místě pozorovatelné, nemá vlastnosti pozorovatelné veličiny. Nemusí vůbec být *hustě definovaný*: pro $(A_1A_2 - A_2A_1)W \in \mathcal{F}_1$ stačí, aby jeho definiční obor pokrýval celé $\text{Ran } W$ (které například má netriviální kodimenzi, pokud $\sigma_p(W) \ni 0$). Pokud je, dosáhneme sice *symetrického* operátoru, doplníme-li prefaktor i , ale ne nutně samosdruženého. Příklad 16/2 v B–E–H ukazuje jednoduchou volbu A_1, A_2 , pro kterou $i(A_1A_2 - A_2A_1)$ má nestejně indexy defektu a neumožňuje tak ani samosdružené rozšíření.

Příklad: Pro komutující operátory A_1, A_2 je $i(A_1A_2 - A_2A_1)$ zúžením nulového operátoru na $D(A_1A_2) \cap D(A_2A_1)$. Pro operátory Q a P na \mathbb{R} je $i(PQ - QP)$ zúžením jednotkového operátoru na $D(PQ) \cap D(QP)$ a v případě, že jsou splněny předpoklady $PW, QW, P^2W, Q^2W, PQW, QPW \in \mathcal{F}_1(L^2(\mathbb{R}))$ (z nichž některé jsou závislé), pak platí $(\Delta P)_W(\Delta Q)_W \geq 1/2$. Snadno ale najdeme příklady, kdy splněny nejsou – jedná se pak zpravidla o situace, kdy jedna nebo obě odchylky nejsou dobře definované.

Ke znalostem z kvantové mechaniky doplníme jen jednu zajímavou poučku, která by se metodami z fyziky dokazovala dosti nesnadno, ale s projektorovou mírou je přímočará.

Věta (přesnost dosažitelná měřením.). Pro každé $\lambda \in \sigma(A)$ a každé $\varepsilon > 0$ existuje čistý stav E_ψ takový, že

$$|\langle A \rangle_\psi - \lambda| \leq \varepsilon, \quad (\Delta A)_\psi \leq 2\varepsilon. \quad (9)$$

Důkaz. Nutnou a postačující podmínkou pro $\lambda \in \sigma(A)$ je, že $E_A(U_\varepsilon(\lambda))$ je nenulový projektor pro každé $\varepsilon > 0$. Pro dané ε tedy označíme tento projektor E a zvolíme libovolný jednotkový vektor $\psi \in \text{Ran } E$. Protože $E\psi = \psi$, platí

$$\mu_\psi^{(A)}(\Delta) = (\psi, E_A(\Delta)\psi) = (\psi, E_A(\Delta)E_A(U_\varepsilon(\lambda))\psi) = (\psi, E_A(\Delta \cap U_\varepsilon(\lambda))\psi) = \mu_\psi^{(A)}(\Delta \cap U_\varepsilon(\lambda)) \quad (10)$$

a tedy míra $\mu_\psi^{(A)}$ je soustředěna na $U_\varepsilon(\lambda)$. Pro střední hodnotu A potom

$$\langle A \rangle_\psi = \int_{\mathbb{R}} x d\mu_\psi^{(A)}(x) = \int_{U_\varepsilon(\lambda)} x d\mu_\psi^{(A)}(x), \quad (11)$$

ale funkce, kterou středujeme, je po posledním kroku omezená na interval $(\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon)$ a střední hodnota tedy rovněž tak. Pro rozptyl veličiny A využijeme rovnici (7),

$$(\Delta A)_W^2 = \dots = \int_{\lambda - \varepsilon}^{\lambda + \varepsilon} (x - \langle A \rangle_\psi)^2 d\mu_\psi^{(A)}(x) \quad (12)$$

a skutečnost, že pro $x \in (\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon)$ je $0 \leq (x - \langle A \rangle_\psi)^2 \leq (2\varepsilon)^2$. □

Kanonické komutační relace

Komutační relace mezi polohou a hybností se nazývá kanonická. Viděli jsme ale již v příkladu výše, že **není** oprávněné psát

$$QP - PQ = iI, \quad Q_j P_k - P_k Q_j = i\delta_{jk}I, \quad (13)$$

operátor na levé straně, ač hustě definovaný (do jeho definičního oboru spadá Schwartzův prostor), je pouze zúžením jednotkového operátoru. Může být tedy žádoucí vyjádřit skutečnost, že „komutují na jednotku“, způsobem, který na omezení definičních oborů nenarazí.

Viděli jsme na kapitole o komutaci samosdružených operátorů, že otázku komutativity A_1, A_2 lze převést několika způsoby na otázku komutativity omezených operátorů. Počítat funkcionální realizaci rezolventy, arkustangenty nebo Cayleyho obrazu operátoru hybnosti není žádná příjemná vyhlídka, ale připomeňme poslední zmíněnou ekvivalentní formulaci:

$$A_1, A_2 \text{ komutují} \iff \text{komutují } e^{itA_1}, e^{isA_2} \text{ pro všechna } s, t \in \mathbb{R}. \quad (14)$$

Porovnání součinů takovýchto exponenciál v obou pořadích nám tedy o dvou operátorech může říci, „jak moc“ nekomutují, a tak nahradit roli rozdílu součinu operátorů. Exponenciálu itP jsme viděli spočítanou na nedávném cvičení a exponenciála isQ je jednoduchý operátor násobení funkcí, použít tedy tyto dva je snadné. Rozepsáním působení obou unitárních operátorů na vektor a porovnáním jejich složení v obou pořadích dostáváme **Weylovy relace**. Pro $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$:

$$\exp(itP)\exp(isQ) = e^{ist}\exp(isQ)\exp(itP). \quad (15)$$

V případě prostoru $L^2(\mathbb{R}^n)$ musíme exponenciály operátoru nahradit

$$U(t) = \exp\left(i \sum_{k=1}^n t_k P_k\right), \quad V(s) = \exp\left(i \sum_{k=1}^n s_k Q_k\right), \quad (16)$$

na něž lze pohlížet jako na funkce komutujících operátorů P_k , resp. Q_k , a Weylovy relace v tomto případě znějí

$$U(t)V(s) = e^{it \cdot s} V(s)U(t). \quad (17)$$

Jednou z výhod tohoto postupu je, že zachytí některé patologické situace. Uvažujme operátory Q a P na prostoru $\mathcal{H} = L^2((0, 2\pi))$, z toho P s periodickou okrajovou podmínkou. Operátor $i(PQ - QP)$ je definován na prostoru

$$\begin{aligned} D(PQ - QP) &= \{\psi \in D(Q) \mid Q\psi \in D(P)\} \cap \{\psi \in D(P) \mid P\psi \in D(Q)\} \\ &= \{\psi \in \mathcal{H} \mid \psi, x\psi \text{ absolutně spojitě}, \psi' \in \mathcal{H}, (x\psi)' \in \mathcal{H}, \psi(0) = \psi(2\pi), 0\psi(0) = 2\pi\psi(2\pi)\} \\ &= \{\psi \in H^1((0, 2\pi)) \mid x\psi' \in \mathcal{H}, \psi(0) = \psi(2\pi) = 0\}. \end{aligned} \quad (18)$$

Na tomto oboru platí

$$\forall \psi \in D(PQ - QP): QP\psi - PQ\psi = i\psi \quad (19)$$

a dokonce se jedná o hustý podprostor \mathcal{H} , přeci však operátory polohy a hybnosti na kružnici Heisenbergovu relaci nespĺňují. Konkrétně operátor

$$P: \{\psi \in H^1((0, 2\pi)) \mid \psi(0) = \psi(2\pi)\} \rightarrow \mathcal{H}: \psi(x) \mapsto -i\psi'(x) \quad (20)$$

má čistě bodové spektrum a pro libovolný jeho vlastní vektor φ je $(\Delta P)_\varphi = 0$. Operátor Q na tomto \mathcal{H} je omezený a tedy $(\Delta Q)_\varphi < \infty$. Levá strana relace neurčitosti je tedy pro tento stav nula a porušuje nerovnost $\geq \|\varphi\|/2$. Problém nastává v tom, že všechny tyto protipříklady spadají přesně mimo $D(PQ - QP)$.

Zajímavá je otázka, jestli nějaká jiná dvojice (či $2n$ -tice) operátorů může splňovat (15), resp. (16), které můžeme považovat za cestu od Hamiltonovské mechaniky ke kanonické kvantizaci (opravující nedostatky intuitivnější (13)). Ukazuje se, že ano, ale volnost není tolik velká. Věta M. Stone a J. von Neumanna z roku 1931 ukazuje, že každá taková $2n$ -tice operátorů je buď přímo unitárně ekvivalentní $(P_k)_{k=1}^n, (Q_k)_{k=1}^n$, nebo lze redukovat systémem projektorů (E_α) takovým způsobem, že každý z podprostorů \mathcal{H}_α je izomorfní $L^2(\mathbb{R}^n)$ a části operátorů v \mathcal{H}_α jsou již unitárně ekvivalentní běžným složkám polohy a hybnosti, přes izomorfismy závislé na α .

Jinými slovy, pokud k Weylovým relacím přidáme požadavek ireducibility, pak až na izomorfismus jsou stavový prostor $L^2(\mathbb{R}^n)$ a operátory P_k, Q_k na něm, předepsané našim známým způsobem, jediným řešením. Nazývají se pak tzv. Schrödingerovou reprezentací kanonických komutačních relací.