

# Vybrané kapitoly z kvantovej fyziky

pre IA082

Mário Ziman\*

26. septembra 2012

## 1 Úvod

Cielom týchto prednášok je poskytnúť študentovi informatiky akýsi obraz o zákonoch a princípoch fungovania tej časti sveta, ktorú popisujeme pomocou kvantovej fyziky. Vo väčšine prípadov ide o systémy tých najmenších rozmerov, t.j. o mikrosvet, ktorý nie sme schopní pozorovať priamo svojimi zmyslami a informácie o ňom získavame iba sprostredkované. Pre vás budem týmto sprostredkovateľom ja :-). Na rozdiel od predošlých rokov by tieto prednášky mali byť oveľa jednoduchšie a budem sa snažiť vyhýbať detailom matematického formalizmu kvantovej fyziky. Napriek tomu na niektorých miestach (klonovanie, teleportácia, atď.) bude v istej forme táto matematika potrebná.

Po absolvovaní týchto prednášok by ste mali ľahšie prijať abstraktný formalizmus tzv. *kvantovej teórie informácie*, ktorá je sama osebe náplňou iných kurzov. K absolvovaniu týchto prednášok nebudete potrebovať príliš vysokú matematiku. Skôr sa budem spoliehať na nejaké spomienky z fyziky, ktorú ste mali na stredných školách. To jest pojmy ako energia, sila, hybnosť, rýchlosť, Newtonove zákony a elektromagnetické vlnenie by vám mali byť známe.

Na úvod sa pokúsím popísať, ako asi vyzerala fyzika tesne pred vznikom kvantovej fyziky, resp. aké javy si vynútili jej príchod na scénu. V ďalších štyroch prednáškach si na príkladoch rozoberieme základné princípy, ktoré robia kvantovú teóriu výnimočnou:

- Vzťahy neurčitosti, ktoré nám hovoria, že ak poznáme polohu častice, tak nepoznáme jej rýchlosť a naopak. Všeobecnejšia verzia tohoto princípu stojí v pozadí kvantovej distribúcie šifrovacieho kľúča.
- Princíp superpozície, ktorý v kvantovom počítaní poznáme pod názvom kvantový paralelizmus. Tento princíp vyzerá ako ďalšie obmedzenie, ale v skutočnosti je tým hlavným rozdielom medzi kvantovým a klasickým svetom.
- Schrödingerova rovnica, ktorá určuje akým spôsobom sa kvantový systém vyvíja. Je analógom Newtonových pohybových zákonov.

Potom sa budeme venovať špecifickým príkladom, ako je atóm vodíka (prvý veľký úspech kvantovej fyziky), spin elektrónu, EPR paradox, Bellove nerovnosti. V záverečných prednáškach sa budeme venovať niektorým aspektom kvantovej fyziky pri spracovaní informácie (klonovanie, teleportácia, ...).

### 1.1 Klasická fyzika

Kvantová fyzika vstúpila na scénu v počiatkoch 20. storočia. Všetky poznatky tej doby boli vysvetliteľné pomocou zákonitostí mechaniky, elektromagnetizmu a termodynamiky. Vývoj systému a podstatná časť fyziky znamenala riešenie nasledovných rovnic:

- Isaac Newton (mechanika, štatistická fyzika, termodynamika)

$$m \frac{d^2}{dt^2} \vec{r} = \vec{F}(\vec{r}, \vec{v}, t) \quad (1)$$

---

\*Preklepy a gramatické chyby v týchto poznámkach upravil X.Kolár (úspešný absolvent prednášok v roku 2009 tuším), za čo mu patrí moja veľká vďaka. mZ

- James Clark Maxwell (elektrina, magnetizmus, optika)

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E}(\vec{r}, t) = \frac{1}{\epsilon} q(\vec{r}, t) \quad \vec{\nabla} \cdot \vec{B}(\vec{r}, t) = 0 \quad (2)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E}(\vec{r}, t) = -\frac{\partial}{\partial t} \vec{B}(\vec{r}, t) \quad \vec{\nabla} \times \vec{B}(\vec{r}, t) = \mu\epsilon \frac{\partial}{\partial t} E(\vec{r}, t) - \mu\vec{j}(\vec{r}, t) \quad (3)$$

kde  $\vec{E}$ ,  $\vec{B}$  popisujú elektrické a magnetické pole,  $\vec{F}$  je vektor sily pôsobiaci na teleso s hmotnosťou  $m$ . Veličiny  $q$ ,  $\vec{j}$  popisujú rozloženie elektrického náboja a elektrického prúdu.  $\vec{\nabla}$  je vektorom parciálnych derivácií, t.j.  $\vec{\nabla} = (\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z})$ . Netreba sa však obávať, že takéto rovnice budeme používať na týchto prednáškach. Ide iba o mierne zjednodušenú ilustráciu „jednoduchosti“ fyziky.

## 1.2 Problémy

**Žiarenie čierneho telesa.** Z hodín stredoškolskej fyziky by sme mali vedieť, že zahriate telesá vyžarujú istú energiu vo forme tzv. tepelného žiarenia. Táto závislosť je popísaná vzťahom  $I = \sigma T^4$ , kde  $\sigma$  je nejaká konštanta, ktorej detaily nepotrebujeme vedieť. Použitím klasickej predstavy sveta popísaného uvedenými rovnicami pridáme však k rozporu, pretože tieto rovnice nám dávajú dosť absurdnú predpoveď  $I = \infty$ , t.j. vyžiarená energia by mala byť nekonečná. Zjavný rozpor s pozorovanou realitou. Max Planck postuloval, že svetlo sa vyžaruje iba v istých kvantách energie, tzv. fotónoch. Tento *ad hoc* predpoklad napodiv viedol k úplne správne mu vzťahu a konštantu  $\sigma$  vyjadril pomocou základných fyzikálnych konštánt (Planckova konštanta, Boltzmanova konštanta, rýchlosť svetla, atď.).

**Stabilita hmoty.** Experimenty nás priviedli k predstave, že atóm je zložený z malého kladne nabitého jadra a okolo poletujúcich záporne nabitých elektrónov. Vznikla celkom prirodzená predstava tzv. planetárneho modelu atómu, napriek tomu však túto najmenšiu „slnecnú sústavu“ ešte nikdy nikto nepozoroval. Maxwellove rovnice predpovedajú, že akákoľvek nabitá častica pohybujúca sa so zrýchlením nutne musí vyžarovať elektromagnetické vlny, t.j. strácať svoju kinetickú energiu na úkor energie elektromagnetického poľa. Elektrón obiehajúci ako planéta okolo kladne nabitého jadra podľa tejto teórie stratí svoju energiu za  $10^{-19}$  s, čo je doba, za ktorú by mal spadnúť do jadra. To by ale znamenalo, že atómy vôbec nie sú stabilné a hmota okolo nás by mala veľmi rýchlo skolabovať. Tento problém vyriešil Niels Bohr, ktorý použil iné *ad hoc* princípy, ktoré si povieme neskôr, keď si budeme vysvetľovať atóm vodíka.

**Fotoelektrický jav.** Osvetľujeme katódu svetlom, resp. elektromagnetickým vlnením. Atómy katódy po prijatí energie vo forme svetla dokážu uvoľniť niektoré svoje elektróny, ktoré automaticky prelietajú pod vplyvom elektrického poľa na opačnú stranu. A my sme schopní namerať istý prúd. To, čo je na tomto jave záhadné, je tá skutočnosť, že veľkosť tohoto prúdu nezávisí ani tak od intenzity osvetľovania, ako skôr od frekvencie použitého svetla. Existuje istá prahová frekvencia, pod ktorou nenameriame žiaden prúd, nech použijeme akokoľvek intenzívny zdroj svetla. Atóm si takéto frekvencie akosi vôbec nevšima. Prečo je tomu tak? Klasická fyzika na túto otázku nemá žiadnu odpoveď. Podľa nej by to tak jednoducho byť nemalo. Použitím Planckovej idey fotónu tento paradox vysvetlil Albert Einstein a oficiálne za tento počín dostal Nobelovu cenu.

**Spektrum atómu vodíka.** Ak osvietime bielym svetlom, t.j. zmesou svetla všetkých frekvencií, zhluk atómov nejakého prvku, tak časť tohoto svetla je atómami zachytená (absorbovaná) a časť svetla prenikne ďalej. Ak prejdené svetlo rozložíme pomocou hranola, tak vďaka závislosti lomu svetla od jeho frekvencie, dokážeme svetlo rozložiť. . .

## 1.3 Polarizácia svetla

Svetlo je veľmi zvláštnym fyzikálnym objektom, ktorý je síce čisto kvantovým systémom, ale napriek tomu existuje veľmi dobrý efektívny popis v rámci teórie elektromagnetizmu. V tejto teórii používame vektor intenzity elektrického poľa a vektor intenzity magnetického poľa, ktoré sú spolu zviazané Maxwellovými rovnicami a vytvárajú tzv. elektromagnetické pole. Špeciálnym prípadom riešenia týchto rovníc je tzv. elektromagnetické vlnenie, ktorého špeciálnym prípadom je aj svetlo. Z pohľadu tejto teórie je svetlo elektromagnetickým vlnením, t.j. je charakterizované

frekvenciou  $f$ , resp. vlnovou dĺžkou  $\lambda$ . Okrem toho ešte môže mať rôznu polarizáciu. Keďže svetlo je vlnením vektora elektrického poľa, tak v závislosti od toho, akým spôsobom tento vektor kmitá (stále s rovnakou frekvenciou), hovoríme o rôznych polarizáciách svetla.

Frekvenciu svetla by sme mali ako tak rozumieť, ale čo je to tá polarizácia? Kde sa s ňou stretávame? Naše oko nie je citlivé na polarizáciu, avšak existujú zvieratá, ktoré takúto schopnosť majú. My na to používame rôzne pomocné zariadenia, ako napr. polarizátor. Polarizátor je na prvý pohľad kus priesvitnej hmoty, ktorý je iba čiastočne priehľadný, t.j. nie všetko svetlo prepustí a na prvý pohľad pôsobí ako každý svetelný filter. Zaujímavé to začne byť, ak sa budeme hrať s dvoma polarizátormi. Logicky, ak prvým polarizátorom prejde polovica pôvodného svetla, tak druhým by mala prejsť opäť iba polovica svetla zo svetla, ktoré na tento druhý polarizátor dopadlo, t.j. štvrtina pôvodného svetla. My však pozorujeme, že intenzita svetla, ktoré prenikne cez obidva polarizátory, závisí na ich vzájomnom pootočení. A navyše, v hraničných prípadoch druhým polarizátorom prejde *i*) všetko svetlo, ktoré dopadlo, ale aj *ii*) žiadne svetlo.

Označme si  $I_0$  intenzitu svetla pred prvým polarizátorom,  $I_1$  intenzitu svetla za prvým polarizátorom, a  $I_2$  intenzitu svetla za druhým polarizátorom. Svetlo zo slnka alebo žiaroviek je polarizované úplne náhodne a hovoríme, že je nepolarizované. V praxi to znamená, že nech použijeme akýkoľvek polarizátor a natočíme ho ľubovoľne, tak intenzita svetla  $I_1$ , ktoré týmto polarizátorom prejde je stále rovnaká. Meraniami by sme prišli ku vzťahu  $I_1 = I_0/2$ . Tento vzťah si vysvetlíme až v niektorej z ďalších prednášok. Svetlo za polarizátorom je však už polarizované a preto  $I_2$  už na nastavení druhého polarizátora závisí.

Polarizáciu svetla si predstavujeme ako akési kmitanie vektora elektrického poľa. Pre tzv. *lineárne polarizované svetlo* tento vektor kmitá v nejakej rovine kolmej na smer šírenia sa svetla. Význačné smery sa zvyknú označovať ako vertikálne a horizontálne polarizované svetlo. Podobne potom označujeme aj príslušne nastavené lineárne polarizátory. Ak je prvý polarizátor  $V$  a druhý  $H$ , tak  $I_2 = 0$ , t.j. ak sú dva polarizátory navzájom kolmé, tak nimi žiadne svetlo neprechádza. Niekedy sa zvykne hovoriť, že polarizátory sú navzájom skrížené. Lineárne polarizátory vieme charakterizovať pomocou smeru natočenia, t.j. napríklad pomocou uhla vzhľadom k vertikálnemu smeru. Tento uhol môže mať hodnoty  $0^\circ \leq \alpha \leq 180^\circ$ . Ak je prvý polarizátor vertikálny, tak intenzita  $I_2$  je funkciou uhla  $\alpha$  a  $I_1$ . Aj keď klasická teória elektromagnetizmu predpovedá správny vzťah  $I_2 = I_1 \cos^2 \alpha$ , tak prideme k problému, ak zoberieme do úvahy, že nám na polarizátor dopadá iba jediný fotón. Ako sa polarizátor správa v takomto prípade? Rozdelí nám fotón nejakým spôsobom na dve časti? Experiment nám hovorí, že nie. Fotón je ako celok častica, t.j. buď prejde, alebo neprejde. Na základe čoho sa polarizátor rozhoduje?

To niečo je kvantová fyzika. Rozhodovanie je úplne náhodné, a jediné, čím sa polarizátor riadi, je dodržanie pravdepodobností, ktoré sú určené kvantovou fyzikou. Tieto pravdepodobnosti musia byť v zhode s klasickou predpoveďou pre intenzity, o ktorých sme si povedali, že sú správne. Intenzita svetla je úmerná jeho energii. Energia fotónu je  $E = hf$ , kde  $f$  je frekvencia fotónu (svetla) a  $h$  je Planckova konštanta. Ak pošleme smerom k polarizátoru  $N_0$  fotónov, tak celková energia, ktorú nesú, je  $E_0 = Nhf$ . Za prvý polarizátor sa dostane  $N_1$  fotónov a za druhý  $N_2$  fotónov, t.j. máme energie  $E_1 = N_1hf$  a  $E_2 = N_2hf$ . Podľa klasického vzťahu by malo platiť  $E_2 = E_1 \cos^2 \alpha$ . Pomer  $N_2/N_1$  definuje pravdepodobnosť  $p_\alpha$ , že fotón prenikne cez druhý polarizátor natočený o uhol  $\alpha$ . Ak si všetky tieto fakty zhrnieme, tak dostávame

$$p_\alpha = \frac{N_2}{N_1} = \frac{E_2}{E_1} = \cos^2 \alpha. \quad (4)$$

Tento vzťah je pravdepodobnosť toho, že lineárne polarizovaný fotón prejde polarizátorom. Kvantová fyzika nás učí, že nič viac ako túto pravdepodobnosť sa už nedozvieme. Nevieme povedať, kedy fotón prejde a kedy nie. Iba pravdepodobnosti. Navyše nejde o akúsi našu nevedomosť, ako je to v prípade hádzania mincou. Ak pre mincu dokážeme presne povedať akou silou ju vyhadzujeme a akú jej dáme prvotnú rotáciu, tak celý jej pohyb je presne určený, a my by sme v princípe vedeli povedať, aký bude výsledok každého jedného hodu mincou. Pre fotón prechádzajúci polarizátorom nič takéto neexistuje. Náhodnosť tohoto procesu je kvantovému svetlu vlastná.

Ponaučenie: kvantová fyzika nám poskytuje iba pravdepodobnosti, že istý jav nastane. Preto pravdepodobnosti a štatistika sú základnou formou popisu kvantového sveta.

### 1.3.1 Polarizácia okolo nás

- Odras od vodnej hladiny.
- Fotografovanie.

- 3D kino IMAX.

## 2 Princíp superpozície

### 2.1 Jednoštrbinový experiment

Pomôcky: zdroj častíc  $Z$ , bariéra s jedným úzkym otvorom (štrbinou) a tienidlo/detektory. Predpokladáme, že veľkosť štrbiny  $h$  je oveľa menšia ako vzdialenosť medzi štrbinou a tienidlom  $L$ , t.j.  $h \ll L$ . Po prechode častíc bariérou sa väčšina z nich zachytí na bariére, ale istá časť z nich prenikne cez štrbinu aj za bariéru. Na okrajoch štrbiny príde k ohybu dráhy častíc, a preto pozorujeme častice na tienidle mierne rozptýlené okolo istej strednej hodnoty. Úloha je zistiť, ako sú dopadajúce častice rozptýlené.

Celú situáciu si môžeme trochu prehnane predstaviť ako deravý múr zložený z futbalistov a zdroj  $Z$  ako futbalistu kopajúceho priamy kop. Namiesto jedného pokusu mu však dáme pokusov viac a predpokladáme, že kope loptu smerom k múru, presnejšie, snaží sa o využitie medzery v múre (chýbajúci hráč). Vy ste v úlohe brankára, a pýtate sa, kde sa máte postaviť, aby ste kopnutú loptu chytili. Samozrejme, najlepšie je postaviť sa tam, kde dopadne najviac lôpt, t.j. kde je pravdepodobnosť dopadu najväčšia. Pravdepodobnosť  $P_I(x)$  nám hovorí, s akou pravdepodobnosťou lopta dopadne do bodu  $x$  v bránke. Ak si stred brány označíme ako  $x = 0$ , tak najväčšia pravdepodobnosť je práve pre tento bod  $P_I(x = 0)$ , a preto je prirodzené postaviť sa do stredu brány.

### 2.2 Dvojštrbinový experiment

Situácia taká istá ako predtým, len miesto jedného hráča chýbajú hráči dvaja, t.j. máme dve štrbiny miesto jednej. Úloha je tá istá: zistiť pravdepodobnosť  $P_{I+II}(x)$ , kde I a II sme použili na označenie štrbín.

Použijeme teraz nasledovnú úvahu. Vystrelená častica určite prejde jednou z dvoch štrbín. Keďže vždy máme v priestore medzi zdrojom a detektorom iba jediná časticu, tak nedochádza k nejakým zrážkam, resp. vzájomnému ovplyvňovaniu medzi časticami. Rozdelme si dopadajúce častice do dvoch skupín a dostaneme  $N_I$  častíc, ktoré prešli štrbinou I a  $N_{II}$  častíc, ktoré prešli štrbinou II. Také isté počty  $N_I, N_{II}$  osobitne, by sme dostali, ak by sme striedavo jednu zo štrbín uzavreli, t.j. vykonali jednoštrbinový experiment. Z takéhoto chápania dvojštrbinového experimentu nutne vyplýva, že

$$P_{I+II} = qP_I + (1 - q)P_{II},$$

kde  $q = N_I/(N_I + N_{II})$ . Pre jednoduchosť predpokladajme, že máme  $q = 1/2$ .

Ten istý výsledok dostaneme aj použitím mierne iného pohľadu. Udalosť zaznamenania častice v mieste  $x$  je zloženou udalosťou udalostí  $[I \rightarrow x] \cup [II \rightarrow x]$ , ktoré vyjadrujú pôvod dopadajúcej častice, t.j. buď prešla štrbinou I, alebo štrbinou II. Tieto dva javy sú nezávislé, a preto

$$P_{I+II}(x) = P([I \rightarrow x] \cup [II \rightarrow x]) = P([I \rightarrow x]) + P([II \rightarrow x]).$$

Použili sme známy vzťah pre pravdepodobnosti  $P(A \cup B) = P(A) + P(B) - P(A \cap B)$  dvoch udalostí  $A, B$ .

Napriek našej presvedčivej analýze je však realita úplne iná. Pre „kvantové“ lopty takýto jednoduchý súčet pravdepodobností nepozorujeme, t.j.

$$P_{I+II} \neq qP_I + (1 - q)P_{II}.$$

Prvý dôvod nás napadne, ak sa pozrieme na tento vzťah skrze udalosti. Vo všeobecnom vzťahu navyše vystupuje ešte člen  $P(A \cap B)$ , ktorý popisuje závislosť dvojice udalostí. Je prirodzené pokúsiť sa interpretovať tento rozdiel  $\Delta P = P_{I+II} - (qP_I + (1 - q)P_{II})$  ako člen zodpovedajúci „prieniku“ udalostí  $P([I \rightarrow x] \cap [II \rightarrow x])$ , t.j. existujúcej vzájomnej závislosti medzi prechodom cez štrbiny.

Čiastočne je na tomto porovnaní kus pravdy, ale ani zďaleka to nie je pravda celá, pretože z definície pravdepodobnosti  $P(A \cap B) \geq 0$ , avšak v experimente pozorujeme aj také miesta, v ktorých  $\Delta P < 0$ . Musíme pripustiť, že s pravdepodobnosťami sa deje niečo zvláštne, a naša predchádzajúca úvaha musí niekde obsahovať závažnú trhlínu. O výslednej pravdepodobnostnej distribúcii  $P_{I+II}(x)$  hovoríme, že vyjadruje interferenciu a člen  $\Delta P$  nazývame interferenčným členom. V prípade, ak je tento člen pozitívny, hovoríme o deštruktívnej interferencii, pretože  $P_{I+II} < P_I + P_{II}$ . V opačnom prípade hovoríme o pozitívnej interferencii, pretože platí  $P_{I+II} > P_I + P_{II}$ .

V oboch prípadoch vzniká interferencia, resp. interferenčný člen, ako prejav princípu superpozície kvantových stavov. Vlastnosti, ktorá robí kvantovú fyziku kvantovou fyzikou. Tento princíp je tým základným prejavom kvantovosti a v podstate všetky vlastnosti a zvláštnosti kvantového sveta sú dôsledkom tohoto princípu. Tento princíp

je veľmi ťažké sformulovať úplne korektne na tejto úrovni. Na druhej strane je však až triviálne jednoduchý a my si ho sformulujeme možno ešte v tejto časti, alebo niekedy nabadúce.

### 2.3 Amplitúdy pravdepodobností

Riešenie ako skladať jednoštrbinové experimenty na viacštrbinové je založené na pojme amplitúd pravdepodobností  $\psi(x)$ , t.j. akýchsi komplexných odmocnín z pravdepodobnosti  $P(x)$ ,  $\psi(x) \approx \sqrt{P(x)}$ . Tieto amplitúdy sú zobrazenia (funkcie), ktoré  $x \mapsto \psi(x) \in \mathbb{C}$ . Pravdepodobnosti sú potom dané ako  $P(x) = \psi(x)\psi(x)^* = |\psi(x)|^2$ . Tieto amplitúdy majú v kvantovej fyzike špeciálne značenie:  $|\psi(x)\rangle$  a  $|\psi(x)|^2 = \langle\psi(x)|\psi(x)\rangle$ . Neskôr uvidíme, že takéto značenie je vcelku výhodné.

Dvojštrbinový experiment teraz vieme vyjadriť pomocou jednoštrbinových tak, že namiesto sčítavania pravdepodobností sčítame ich amplitúdy, t.j.

$$|\psi_{I+II}(x)\rangle = \sqrt{q}|\psi_I(x)\rangle + \sqrt{1-q}|\psi_{II}(x)\rangle.$$

Ak teraz vyjadríme  $P_{I+II}$ , tak dostaneme

$$P_{I+II} = \langle\psi_{I+II}|\psi_{I+II}\rangle = q|\psi_I|^2 + (1-q)|\psi_{II}|^2 + \sqrt{q(1-q)}[\langle\psi_I|\psi_{II}\rangle + \langle\psi_{II}|\psi_I\rangle]$$

kde sme pre jednoduchosť vynechali závislosť výrazov na polohe  $x$ . Interferenčná časť  $I = \sqrt{q(1-q)}[\langle\psi_I|\psi_{II}\rangle + \langle\psi_{II}|\psi_I\rangle]$  má význam definovaný vzťahom  $\langle\psi_I|\psi_{II}\rangle = \psi_I^*\psi_{II}$  a platí  $I = \sqrt{q(1-q)}\text{Re}[\psi_I^*\psi_{II}]$ . Tento výraz môže byť rovnako kladný, ako aj záporný, a preto nemá interpretáciu akejsi pravdepodobnosti.

### 2.4 Vzťahy neurčitosti a kvantový paralelizmus

Ďalšou zo zvláštnych vlastností dvojštrbinového experimentu je dôsledok pokusu o zaznamenanie štrbiny, ktorou častica preletela. Akonáhle zistíme, čo i len čiastočnú informáciu o štrbine, t.j. o udalosti  $[I \rightarrow x]$ , tak interferenčný člen sa vytráca. Ak sa dozvieme presne, ktorou štrbinou častica letela, tak sa interferencia vytratí úplne a platí  $P_{I+II} = qP_I + (1-q)P_{II}$ , t.j. „klasické“ sčítavanie pravdepodobností. Informácia o trajektórii (ceste ktorú častica prešla) sa vylučuje s prejavom interferencie. Vzťahy neurčitosti majú priamy súvis s touto vlastnosťou. Viac a presnejšie si o vzťahoch neurčitosti povieme v ďalšej prednáške.

Celá finta dvojštrbinového experimentu je v tom, že sa snažíme vyjadrovať jeho výsledky v reči výsledkov získaných pri experimentoch jednoštrbinových. To, čo zisťujeme je, že pri dvojštrbinovom experimente s kvantovými systémami takáto redukcia nie je možná. Ak nameriame pravdepodobnosť  $P_{I+II}(x)$ , tak nemáme absolútne žiadnu informáciu o pravdepodobnostiach  $P_I, P_{II}$ . Neznamená to však nedokonalosť nášho popisu, ale principiálne nie je žiaden dôvod, prečo by sme takúto informáciu mali mať. S klasickými objektami je táto redukcia možná, pretože vždy vieme hovoriť o trajektórii častice. Trajektória častice však v kvantovom svete nemá takmer žiaden zmysel. S tým súvisia práve vzťahy neurčitosti. V kvantovej fyzike nenarazíme na prípad, v ktorom by sme vedeli s istotou povedať súčasne aj rýchlosť, aj polohu častice úplne bez chyby, t.j. presne, resp. s nulovou disperziou (smerodajnou odchýlkou). Ale o tom až nabadúce.

Záver je taký, že dvojštrbinový experiment a dva jednoštrbinové experimenty sú v kvantovom prípade dva úplne odlišné experimenty. V klasickej fyzike medzi týmito dvoma experimentami nie je žiaden rozdiel a pri dvojštrbinovom vieme vždy povedať aj výsledky jednoštrbinových experimentov.

Táto ilustrácia rozdielu medzi klasickým a kvantovým svetom nám poskytuje priestor na veľmi delikátnu otázku: kde je rozdiel medzi klasickým a kvantovým? Ako veľké častice neinterferujú, t.j. sú klasické? V tomto zmysle sa robia experimenty s rôznymi časticami s cieľom namerať interferenciu ako prejav ich kvantovej podstaty. Popredným lídrom v tejto oblasti je skupina prof. Antona Zeilingera, presnejšie povedané Markusa Arndta z Viedne. Prvý dvojštrbinový experiment bol samozrejme uskutočnený so svetlom, t.j. s fotónmi. Potom prišli na rad elektróny a iné elementárne častice. Cieľom experimentátorov vo Viedni je nechať interferovať makromolekuly, pokiaľ možno živé. Takýto výsledok by, keď už nie priamo pozmenil naše chápanie úlohy kvantovej fyziky pre život ako taký, tak prinajmenšom by nás donútil nevylučovať kvantové efekty a priori z hry. V posledných desiatich rokoch sa podarilo pozorovať interferenciu fullerénov (molekuly  $C_{60}, C_{70}$ , t.j. kvantové lopty). Pred troma rokmi sa podarilo donútiť interferovať molekuly porfínu, ktorý tvorí súčasť hemoglobínu. Fyzici z Viedne veria, že žiadna hranica medzi klasickým a kvantovým neexistuje. Iba my nie sme natoľko zruční, aby sme kvantovosť dokázali detekovať. Budúcnosť ukáže, či je tento názor správny, alebo nie.

Dvojštrbinový experiment je aj grafickým znázornením tzv. kvantového paralelizmu. Riešenie „dvojštrbinového paradoxu“, t.j. otázky „kadiaľ častica vlastne letela?“ totiž znie, že častica prešla oboma štrbinami súčasne. Toto tvrdenie sa v skutočnosti nedá vyvrátiť, ale ani potvrdiť. Ide však o veľmi dobrú názornú predstavu. Kvantový paralelizmus nie je nič iné ako iný názov pre kvantovú superpozíciu. Toto pomenovanie ale výstižnejšie popisuje uplatnenie princípov kvantovej fyziky pri kvantovom počítaní. Výhodou kvantových počítačov by malo byť, že dokážu preskúmať súčasne množstvo vstupov (alternatív), t.j. idú všetkými cestami súčasne a otestujú naraz množstvo možností. Táto téma však nie je náplňou tohoto kurzu a mala by byť diskutovaná na úplne iných prednáškach.

### 3 Vzťahy neurčitosti

Prototypom vzťahu neurčitosti je kvantovomechanický vzťah medzi polohou a hybnosťou častice, ktorý poprvýkrát sformuloval Werner Heisenberg ešte v počiatkoch kvantovej teórie. Je viacero verzií, čo vlastne tento vzťah znamená a hovorí. Niektorí hovoria o princípe, ale v skutočnosti ide o dôsledok matematického aparátu kvantovej fyziky, t.j. keď už máme sformulovanú kvantovú fyziku, tak automaticky platia nejaké vzťahy neurčitosti. Takže, čo vlastne ten vzťah neurčitosti je? Pokúsime sa to vysvetliť.

Asi najčastejší omyl je, že pre kvantové systémy nevieme súčasne zmerať polohu a hybnosť, resp. rýchlosť. Takéto tvrdenie je zlé z toho pohľadu, že nikto nám nemôže zabrániť zmerať aj polohu, a aj hybnosť. Povieme si, o čom presne vzťahy neurčitosti hovoria.

Pod označením meranie dvoch veličín  $A$  a  $B$  rozumieme spravidla dve experimentálne situácie:

- Merania vykonáme postupne za sebou na každej jednej častici. V takomto prípade máme experiment charakterizovaný spoločnou pravdepodobnosťou  $p(a, b|A \rightarrow B) = p(a)p(b|a)$ . Môže to znieť paradoxne, ale celková pravdepodobnosť závisí na poradí v akom merania robíme. Toto je pôvodná myšlienka Wernera Heisenberga podľa ktorého je pomenovaný Heisenbergov princíp neurčitosti. Tento princíp má priamy súvis s náhodnou zmenou stavu, t.j. charakteristik systému, pri kvantovom meraní.
- Na každej častici vykonáme vždy iba jedno z meraní. Merania sú nezávislé a máme dve pravdepodobnosti  $p(a)$  a  $p(b)$ . Aj v takomto prípade je namieste hovoriť o princípe neurčitosti a dokonca oveľa častejšie sa pod princípom neurčitosti má na mysli práve táto experimentálna situácia.

#### 3.1 Pravdepodobnosti

Vzťahy neurčitosti sú iným dôsledkom akejsi „vlastnej“ kvantovej náhodnosti, resp. štatistickosti. Zdefinujme si veličiny:

- Stredná hodnota merania:  $\langle A \rangle_\rho = \sum_j a_j p_\rho(a_j)$
- Disperzia:  $\sigma_\rho^2(A) = \langle (A - \langle A \rangle_\rho)^2 \rangle_\rho = \sum_j (a_j - \langle A \rangle_\rho)^2 p_\rho(a_j)$   
Tento výraz si môžeme upraviť nasledovne  $\sigma^2(A) = \sum_j (a - \langle A \rangle)^2 p_j = \sum_j p_j [a^2 - 2a\langle A \rangle + \langle A \rangle^2] = \langle A^2 \rangle - 2\langle A \rangle \langle A \rangle + \langle A \rangle^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$ . Kvôli jednoduchosťi sme vynechali implicitnú závislosť pravdepodobností ako aj stredných hodnôt na stave  $\rho$ .

Zvyčajná interpretácia je taká, že výsledok merania je stredná hodnota a nepresnosť je charakterizovaná disperziou. Neskôr si povieme akým spôsobom sa dajú stredné hodnoty predpovedať v rámci kvantovej fyziky. Nateraz nás však nezaujíma teória, ale máme dočinenia iba s experimentálnou realitou, resp. s pravdepodobnosťami, ktoré meriavame.

Ak sa hovorí o vzťahoch neurčitosti, tak vo väčšine učebníc sa táto diskusia končí napísaním nerovnosti

$$\sigma(A)\sigma(B) \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle|,$$

kde na pravej strane vystupuje stredná hodnota špeciálneho merania, ktoré označujeme ako  $[A, B] = AB - BA$  a nazývame ho komutátorom meraní  $A$  a  $B$ . K presnej definícii sa ešte vrátíme. Pre nás je dôležité, že pre hybnosť a polohu, t.j.  $A = X$ ,  $B = P$ , dostávame známy vzťah

$$\sigma(X)\sigma(P) \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Význam tohoto vzťahu je nasledovný. Ak je disperzia pre meranie polohy nulová (vieme presne určiť polohu častice), tak disperzia hybnosti musí byť nekonečná, aby sme dosiahli nenulovú ľavú stranu, t.j. ak  $\sigma(X) = 0$ , tak  $\sigma(P) = \infty$ . A toto je presne jeden z významov kvantovej neurčitosti:

*Neeexistuje tzv. bezdisperzný kvantový stav, t.j. taký, pre ktorý  $\sigma(A) = 0$  pre všetky merania  $A$ .*

Inými slovami: vždy existuje meranie, pri ktorom nevieme výsledok predpovedať s určitostou, ale iba pravdepodobnostne. Vzťah neurčitosti teda vyjadruje, že pravdepodobnosti sa v kvantovej fyzike nezbavíme, presnejšie nie sme schopní sa týchto pravdepodobností zbaviť, a náš popis s nimi musí počítať. Alternatívne, ak uvážime konkrétne dve veličiny  $A$  a  $B$ , tak hovoríme, že ich nevieme súčasne presne zmerať.

Odvođenje horeuvedeného vzťahu však pochádza z predpokladu, že robíme experiment typu **B** a určite neplatí v situácii **A**. V skutočnosti v situácii, keď merania vykonávame postupne za sebou, resp. naraz na tej istej častici, hore uvedený vzťah úplne stráca platnosť. Za istých podmienok platí podobný vzťah, ale bez faktora  $1/2$  na pravej strane, t.j.  $\sigma(A)\sigma(B) \geq \langle [A, B] \rangle$ . Ako sme však povedali, toto platí iba za istých podmienok a pre špeciálne prevedenie merania príslušných veličín  $A$  a  $B$ . Hovoriť o vzťahu neurčitosti v reči disperzií a mať pritom na mysli experiment typu **A** je nesprávne. Jednoduchým argumentom je, že ak merame  $A$  a  $B$  za sebou, tak meranie  $B$  je vždy ovplyvnené výsledkami merania  $A$ , ktoré mení stav systému. Inými slovami výraz  $\sigma(B)$  v relácii neurčitosti sa vzťahuje k inému stavu, ako  $\sigma(A)$ .

### 3.2 Zmena stavu pri meraní

Už niekoľkokrát sme si povedali, že meranie kvantového systému mení jeho stav dopredu nepredvídateľným spôsobom. V istom zmysle je táto vlastnosť vyjadrením vzťahu neurčitosti. Otázka teda znie, akým spôsobom sa stav pri meraní mení. Meranie si predstavíme, ako zariadenie, ktoré má jeden vstup (počiatočný stav  $|\psi\rangle$ ) a dva výstupy (konečný stav  $|\phi_a\rangle$  a výsledok merania  $a$ ). Otázka je, či  $\phi_a = \phi_a(\psi)$ , t.j. či výsledný stav systému závisí okrem výsledku merania aj na vstupnom stave  $|\psi\rangle$ . Využijeme nasledovný experimentálny fakt: ak zmeriame dvakrát bezprostredne za sebou tú istú veličinu, tak dostaneme vždy úplne rovnaké výsledky. To znamená, že po zmeraní je častica popísaná stavom, ktorý sa pri meraní nijako nemení. Dôležitý poznatok je, že takéto stavy vôbec existujú a platí pre ne  $\langle A \rangle_{\phi_a} = a$  a  $\sigma_{\phi_a}(A) = 0$ . Inými slovami, po nameraní výsledku  $a$  sa systém nachádza v takom stave, v ktorom  $p_{\phi_a}(a) = 1$ . A tento fakt má platiť pre všetky vstupné stavy  $|\psi\rangle$ . Otázkou je, koľko existuje stavov  $\omega$  s takouto vlastnosťou, t.j.  $p_\omega(A = a) = 1$ . Momentálne ešte nemáme nástroj, ktorý by nám pomohol na túto otázku odpovedať korektne, ale zhruba môžeme povedať, že takýto stav je iba jeden. Ak je to pravda, tak potom výsledný stav nezávisí od vstupného stavu. Výnimkou sú iba tzv. degenerované veličiny/merania, pre ktoré je možných stavov viac, ale závislosť na vstupnom stave nie je nejak tragická. Môžeme urobiť záver, že pri výsledku  $a$  sa stav skokovo zmení na stav  $|\phi_a\rangle$  a táto zmena nezávisí od počiatočného stavu.

Príkladom merania je aj polarizátor a horeuvedená zmena stavu pri meraní plne zodpovedá tomu, čo sme si o polarizácii fotónu povedali. Ak postavíme za seba dva rovnako natočené polarizátory, tak fotón buď prejde oboma polarizátormi, alebo neprejde vôbec, t.j. možnosť, že by sa zastavil až na druhom polarizátore, ak už tým prvým prešiel, je nulová.

Ak si to zosumarizujeme, tak meranie je vlastne určené sadou možných výsledkov  $\{a_1, \dots, a_d\}$  a prislúchajúcich výsledných stavov  $\{|\phi_1\rangle, \dots, |\phi_d\rangle\}$ .

### 3.3 Kvantová teória – prvé náznaky

Úlohou teórie je priradiť stavom a meraniam nejaké matematické objekty, ktorých vlastnosti spĺňajú odpozorované vlastnosti ako interferencia, neurčitosť a iné. Jedna z možností na popísanie vlastností stavov a meraní je začať s tzv. Hilbertovým priestorom. Hilbertov priestor je komplexný vektorový priestor, v ktorom existuje skalárny súčin. Stavý sú objekty z takéhoto priestoru, skalárny súčin zohľadňuje vlastnosti kvantových pravdepodobností a dimenzia priestoru zodpovedá maximálnemu počtu rôznych výsledkov meraní (pre polarizáciu  $d = 2$ , ale pre časticu v dvojstrbinovom experimente  $d = \infty$ ). Meranie fyzikálnych veličín popisujeme tzv. hermitovskými operátormi. Prvky Hilbertovho priestoru (stavy) si môžeme predstaviť ako stĺpček komplexných čísiel. Hermitovské operátory sú potom matice, pre ktoré  $A_{jk} = A_{kj}^*$ . K tomu sa ešte vrátíme. Teraz si ukážeme dva príklady.

Začali sme túto časť tým najznámejším príkladom kvantovej neurčitosti, a síce vzťahom neurčitosti medzi polohou a hybnosťou. Pri dvojstrbinovom experimente sme si hovorili, že namiesto pravdepodobnosti výskytu

častice v danom bode priestoru je výhodnejšie používať tzv. amplitúdy pravdepodobnosti. V tomto prípade tieto amplitúdy (komplexné odmocniny z pravdepodobnosti) tvoria tzv. vlnovú funkciu  $\psi(x)$ , ktorá plne popisuje stav kvantového systému  $|\psi\rangle$ . S trochou fantázie vieme funkciu interpretovať ako nekonečný a spojitý stĺpček, t.j. vektor. V skutočnosti priestor funkcií tvorí Hilbertov priestor so skalárnym súčinom definovaným ako integrál

$$\langle\psi|\phi\rangle = \int \psi^*(x)\phi(x)dx .$$

Povedali sme si, že pravdepodobnosť (presnejšie hustota pravdepodobnosti)  $p(x) = |\psi(x)|^2 = \psi^*(x)\psi(x)$ . Pre strednú hodnotu polohy teda dostávame

$$\langle X \rangle = \int dx xp(x) = \int dx \psi^*(x)x\psi(x) = \langle\psi|X|\psi\rangle$$

Pomocou poslednej rovnosti, ktorá má iba formálny zmysel, môžeme nadefinovať, ako vyzerá operátor polohy. Súčasne vidíme, ako bude asi vyzerá kvantový výraz pre strednú hodnotu fyzikálnej veličiny  $A$  pre časticu v stave  $|\psi\rangle$ . Špecifikácia stavov, meraní a aj pravdepodobností patrí k postulátom kvantovej fyziky. My sme si práve naznačili, že operátor polohy pôsobí ako operátor násobenia, t.j.

$$X\psi(x) = x\psi(x) .$$

Ako vyzerá operátor hybnosti? Nájdenie reprezentácie fyzikálnych veličín ako hermitovských operátorov je jednou z centrálnych úloh kvantovej teórie a ide o úlohu veľmi ťažkú. Jedna možnosť ako zistiť pôsobenie operátora hybnosti na vlnovú funkciu je použiť vzťahy neurčitosti. Malo by platiť, že  $[X, P] = i\hbar I$ , t.j. hľadáme taký operátor  $P$ , aby platilo

$$(XP - PX)\psi(x) = x(P\psi(x)) - P(x\psi(x)) = i\hbar\psi(x) .$$

Vedieť, že ak  $P(x\psi(x)) = x(P(\psi(x))) + P(x)\psi(x)$ , tak dostávame podmienku  $-P(x)\psi(x) = i\hbar\psi(x)$ . Prvá rovnosť nám hovorí, ako operátor hybnosti pôsobí na súčine dvoch funkcií. Zo skúsenosti vieme, že takto presne pôsobí derivácia, ktorá je lineárnou operáciou na funkciách. Ak uvažíme, že  $P = k\frac{d}{dx}$ , tak horeuvedená podmienka fixuje konštantu  $k = -i\hbar$ . Touto úvahou sme našli nejaký lineárny operátor, ktorý spĺňa všetko, čo je treba. Dá sa ukázať, že je jediný, t.j. operátor hybnosti je deriváciou

$$P\psi(x) = -i\hbar\frac{d}{dx}\psi(x) .$$

Polarizácia je druhý kvantový systém, s ktorým sme sa stretli. Tento je oveľa jednoduchší. Pri každom meraní pomocou polarizátora máme iba dva výsledky: buď fotón prejde a je zaregistrovaný detektorom, alebo fotón neprejde. Príslušný Hilbertov priestor je preto iba dvojrozmerný. Všeobecný stav je

$$|\psi\rangle = \alpha|H\rangle + \beta|V\rangle$$

kde  $|H\rangle$  je horizontálne a  $|V\rangle$  je vertikálna polarizácia. Lineárne polarizovaný fotón v smere určenom uhlom  $\varphi$  je potom  $|\varphi\rangle = \cos\varphi|H\rangle + \sin\varphi|V\rangle$ . Pravdepodobnosť, že takýto fotón prejde horizontálnym polarizátorom je potom  $p(H) = |\langle\varphi|H\rangle|^2 = \cos^2\varphi$ , pretože sme využili  $\langle H|V\rangle = 0$ . Tento výsledok je samozrejme zhodný s predpoveďou klasickej teórie elektromagnetizmu. Opäť zopakujeme podstatný rozdiel. V klasickej teórii popisujeme svetlo ako vlnu, ktorá sa skladá z množstva fotónov, ale z pohľadu kvantovej teórie popisujeme polarizáciu individuálnych fotónov, ktoré v klasickej teórii neexistujú. Ako popisujeme polarizátor? Ak uvažíme, že výsledky sú: „prešlo 0 fotónov“ a „prešiel 1 fotón“, t.j. sú očíslované ako 0 a 1. Ak chceme spočítať strednú hodnotu horizontálneho polarizátora, tak dostaneme  $\langle P_H \rangle = 0 \cdot p(0) + 1 \cdot p(1) = p(1) = p(H) = |\langle\psi|H\rangle|^2$ . Ak si posledný výraz trochu rozpíšeme  $|\langle\psi|H\rangle|^2 = \langle\psi|H\rangle\langle H|\psi\rangle = \langle\psi|P_H|\psi\rangle$ , tak dostaneme tvar operátora, ktorý popisuje meranie polarizátorom. Dá sa povedať, že  $P_H = 1 \cdot |H\rangle\langle H| + 0 \cdot |V\rangle\langle V| = |H\rangle\langle H|$ .

**Poznámka na záver:** Napriek tomu, že my sme si popísali vzťahy neurčitosti ako vlastnosť, ktorú pozorujeme pri meraní typu **B**, Heisenberg mal bezpochyby pôvodne na mysli práve situáciu **A**, pretože hovoril o tom, ako meranie veličiny  $A$  ovplyvňuje meranie  $B$ , a naopak. Hovoril o vzťahu medzi nepresnosťou v meraní  $A$  a narušením výsledkov merania  $B$ . Nám však stačí vzťah neurčitosti, ktorý sme si popísali. Zvyšok patrí do tzv. teórie kvantového merania, ktorá je však tematicky mimo týchto prednášok.



## 4 Kvantový stav

Kľúčovým pojmom kvantovej fyziky je zmena spôsobu popisu sveta okolo nás. Namiesto toho aby sme povedali, že máme časticu s takou a takou energiou, polohou a rýchlosťou, kvantová fyzika používa pojem kvantového stavu. Kvantový stav je úplne abstraktná vec, z ktorej vieme zistiť všetko, čo sa o danom systéme dá. Navyše ide o nutnosť, t.j. zavedenie konceptu stavu nám umožnilo začať sa o kvantovom svete vôbec vyjadrovať.

Na poslednej prednáške sme si naznačili ako sa povie kvantový stav a aj meranie v jazyku matematiky. Dnes si to zopakujeme a v podstate nadefinujeme, čo bude stav, meranie, atď. Takisto si povieme, čo to je superpozícia a ako odvodiť minulotýždňové vzťahy neurčitosti.

### 4.1 Formálna štruktúra

stav	$ \psi\rangle$	normovaný prvok v Hilbertovom priestore $\mathcal{H}$
pravdepodobnosti	$ \langle\psi \phi\rangle ^2$	skalárny súčin
fyzikálna veličina	$A = A^\dagger$	hermitovský operátor $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$
stredná hodnota	$\langle A \rangle_\psi = \langle \psi   A   \psi \rangle$	$\langle A \rangle_\psi = \sum_n a_n p(a_n)$
exp. výsledky	$A \phi_n\rangle = a_n \phi_n\rangle$	vlastné hodnoty $A$
stav po meraní	$ \phi_n\rangle$	vlastný stav operátora $A$
pravdepodobnosť výsledku	$p(a_n) =  \langle\phi_n \psi\rangle ^2$	$ \psi\rangle = \sum_n c_n \phi_n\rangle$ , $c_n = \langle\phi_n \psi\rangle$ je amplitúda pravdepodobnosti

### 4.2 Vlastnosti

**Nejednoznačnosť stavu.** Aby suma pravdepodobností bola normovaná,  $\sum_n p(a_n) = 1$ , tak  $\|\psi\| = \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle} = 1$ , t.j. uvažujeme iba normované vektory ako stavy. Zo vzťahu pre pravdepodobnosti výsledkov  $p(a_n)$  vidno, že pre stavy  $|\psi\rangle$  a  $|\psi'\rangle = e^{i\varphi}|\psi\rangle$  sú tieto pravdepodobnosti stále rovnaké pre akékoľvek meranie. Výsledok týchto podmienok je, že stavy sú prvku tzv. komplexného projektívneho priestoru  $CP^d$ , ktorý je izomorfný Hilbertovmu priestoru bez nulového vektora vyfaktorizovaný vzhľadom k triede ekvivalencie  $|\psi\rangle \sim |\psi'\rangle \Leftrightarrow |\psi'\rangle = k|\psi\rangle$ .

**Princíp superpozície.** Ak  $|\phi_1\rangle$  a  $|\phi_2\rangle$  popisujú kvantové stavy, tak potom aj  $|\psi\rangle = \alpha|\phi_1\rangle + \beta|\phi_2\rangle$  je kvantový stav. Hovoríme, že  $|\psi\rangle$  je superpozíciou stavov  $|\phi_1\rangle$  a  $|\phi_2\rangle$ . Ako vidíme, superpozícia nie je nič iné ako linearita Hilbertovho priestoru, t.j. ako lineárna kombinácia. Pre stredné hodnoty potom platí:

$$\langle\psi|A|\psi\rangle = |\alpha|^2\langle\phi_1|A|\phi_1\rangle + |\beta|^2\langle\phi_2|A|\phi_2\rangle + \alpha^*\beta\langle\phi_1|A|\phi_2\rangle + \alpha\beta^*\langle\phi_2|A|\phi_1\rangle,$$

t.j.

$$\langle A \rangle_\psi = |\alpha|^2\langle A \rangle_{\phi_1} + |\beta|^2\langle A \rangle_{\phi_2} + I,$$

kde  $I = 2\text{Re}\{\alpha^*\beta\langle\phi_1|A|\phi_2\rangle\}$  je interferenčný člen. V špeciálnom prípade, ak  $\langle\phi_1|\phi_2\rangle = 0$ , t.j. tieto dva stavy sú ortogonálne, tak  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ , t.j. tieto koeficienty majú význam pravdepodobností, čím dostávame situáciu podobnú v dvojstrbinovom experimente, kde takáto vlastnosť platí. Ak  $|\phi_1\rangle$ ,  $|\phi_2\rangle$  sú vlastné stavy  $A$ , tak potom pri tomto meraní nepozorujeme žiadnu interferenciu  $I = 0$ . Poučenie je také, že interferenciu treba hľadať. Keďže sme vo vektorovom priestore, tak každý stav je superpozíciou nejakých iných stavov, a teda každý má potenciál vykazovať interferenciu. Treba len vybrať správne meranie  $A$ , resp. správnu superpozíciu  $|\psi\rangle = \sum_k c_k|\phi_k\rangle$ . Záver je taký, že každý stav je superpozíciou nejakých iných.

**Vzťah neurčitosti.** Nerobil som na prednáške, ale tu je odvodenie...

**Úplná informácia.** Kvantový stav reprezentuje maximálnu informáciu, akú vieme o kvantovom systéme získať, ak neuvažujeme dynamiku, o ktorej bude reč nabadúce. Ak vieme stav, tak všetko ostatné je už iba vecou výpočtu, resp. vieme to predpovedať. Toto je všeobecná vlastnosť stavu v akejkoľvek teórii. Stav reprezentuje maximálny stav našich vedomostí o systéme. Neexistuje spôsob ako vedieť o kvantovom systéme viac ako jeho stav a každý stav obsahuje rovnaké množstvo informácie.

### 4.3 Množina stavov a zmiešavanie

Prirodzenou je otázka, či prvky Hilbertovho systému popisujú všetky možné kvantové stavy. Odpoveď je záporná. Situácia, ktorú v kvantovej fyzike popisujeme, je nasledovná. Rozlišujeme medzi dvoma typmi zariadení:

**Preparátor.** Toto zariadenie produkuje kvantové systémy a v podstate kvantový stav je charakteristikou tohoto zariadenia. Hovoríme, že preparátor pripravuje častice v stave  $x$ .

**Meracie zariadenie.** Ide o merací prístroj, t.j. zariadenie, ktoré nám ponúka výsledky, ktoré interpretujeme ako hodnoty nejakých fyzikálnych charakteristík (veličín) daného systému. Pomocou týchto výsledkov sa dozvedáme niečo o samotnom kvantovom stave, t.j. o preparátore. V skutočnosti ale táto interpretácia v reči fyzikálnych veličín nie je na istej úrovni potrebná a o meraní môžeme hovoriť ako o zariadení, ktoré rozlišuje medzi  $N$  výstupmi, ktoré sú špecifikované stavmi. Tieto stavy tvoria bázu Hilbertovho priestoru, t.j. akýkoľvek vektor vieme vyjadriť ako superpozíciu týchto stavov.

Ak máme dva preparátory  $P_1$  a  $P_2$ , tak môžeme postaviť taký preparátor  $P$ , ktorý náhodne s istými pravdepodobnosťami  $q_1$  a  $q_2$  ( $q_1 + q_2 = 1$ ) strieda obidva. Stav, ktorý takto pripravíme, je zmesou

$$\varrho \leftrightarrow \{(q_1, |\phi_1\rangle), (q_2, |\phi_2\rangle)\}.$$

Stredná hodnota nejakého operátora  $A$  pre takýto preparátor je daná vzťahom

$$\langle A \rangle_\varrho = q_1 \langle A \rangle_{\phi_1} + q_2 \langle A \rangle_{\phi_2} = q_1 \phi_1 |A| \phi_1 + q_2 \phi_2 |A| \phi_2.$$

Stredná hodnota je daná takýmto výrazom práve preto, že ide o zmiešavanie dvoch preparátorov.

V Hilbertovom priestore platí, že ortonormálna báza, t.j.  $\langle e_j | e_k \rangle = \delta_{jk}$  spĺňa aj nasledovnú identitu  $I = \sum_j |e_j\rangle \langle e_j|$ , t.j. ide o jednotkový operátor na priestore  $\mathcal{H}$ . Podme rátať

$$\langle \phi | I A I | \phi \rangle = \langle \phi | I A I | \phi \rangle = \sum_{j,k} \langle \phi | e_j \rangle \langle e_j | A | e_k \rangle \langle e_k | \phi \rangle = \sum_{j,k} \langle e_j | A | e_k \rangle \langle e_k | \phi \rangle \langle \phi | e_j \rangle = \sum_{j,k} A_{jk} [P_\phi]_{kj} = \text{Tr} A P_\phi = \langle A \rangle_\phi$$

kde sme použili  $P_\phi = |\phi\rangle \langle \phi|$  a operáciu stopy, ktorá je definovaná  $\text{Tr} A = \sum_j \langle e_j | A | e_j \rangle$ . Keďže stav je plne určený strednými hodnotami všetkých meraní, tak namiesto normovaného vektora môžeme stavy reprezentovať aj ako jednorozmerné projektory  $P_\phi$ , ktoré budeme skrátene označovať  $\phi = |\phi\rangle \langle \phi|$ . Základné vlastnosti operácie stopy sú *linearita* ( $\text{Tr}[A + \lambda B] = \text{Tr} A + \lambda \text{Tr} B$ ) a *cyklickosť* ( $\text{Tr} AB = \text{Tr} BA$ ). Vďaka linearite vieme napísať

$$q_1 \langle A \rangle_{\phi_1} + q_2 \langle A \rangle_{\phi_2} = q_1 \text{Tr} A \phi_1 + q_2 \text{Tr} A \phi_2 = \text{Tr} A [q_1 \phi_1 + q_2 \phi_2] \equiv \text{Tr} A \varrho.$$

Inými slovami, stav zmiešaného preparátora vieme vyjadriť pomocou operátora  $\varrho = q_1 \phi_1 + q_2 \phi_2$ .

Tento operátor nazývame matica hustoty a má nasledovné vlastnosti:

**Pozitivita.** T.j.  $\langle \psi | \varrho | \psi \rangle \geq 0$ . Táto vlastnosť je dôsledkom pozitívnosti pravdepodobností pre jednotlivé merania.

Pravdepodobnosť namerať výsledok  $a_n$  je daná vzťahom  $p(a_n) = \text{Tr} \phi_n \varrho = \langle \phi_n | \varrho | \phi_n \rangle$ . Odtiaľ dostávame, že  $\langle \psi | \varrho | \psi \rangle \geq 0$  pre všetky  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ .

**Normovanosť.** T.j.  $\text{Tr} \varrho = 1$ . Toto je dôsledkom toho, aby platilo  $\sum_j p(a_j) = 1$  pre akékoľvek meranie.

Dostali sme teda, že množinu stavov je potrebné rozšíriť, a nová množina stavov je:

$$\mathcal{S}(\mathcal{H}) = \{\varrho \in \mathcal{L}(\mathcal{H}) : \varrho \geq 0, \text{Tr} \varrho = 1\}$$

Stredná hodnota operátora  $A$  je definovaná ako  $\langle A \rangle_\varrho = \text{Tr} A \varrho$ . Vidíme, že merania a stavy sú popisované veľmi podobnými objektami, alebo trochu presnejšie, stavy sú podmnožinou množiny meraní. Prvky  $\mathcal{S}(\mathcal{H})$  nazývame matice hustoty.

Často prichádza ku chybe, že sa zamieňa pojem zmiešavania a pojem superpozície. Presne o tomto je mimochodom aj dvojštrbinový experiment. Ak nepozorujeme interferenciu, tak ide o zmes, inak ide o superpozíciu. Pre porovnanie majme superpozíciu  $|\psi\rangle = \sqrt{p}|\phi_1\rangle + \sqrt{1-p}|\phi_2\rangle$  a zmes  $\varrho = p\phi_1 + (1-p)\phi_2$ . Dostávame

$$\langle A \rangle_\psi = p \langle A \rangle_{\phi_1} + (1-p) \langle A \rangle_{\phi_2} + I \quad \langle A \rangle_\varrho = p \langle A \rangle_{\phi_1} + (1-p) \langle A \rangle_{\phi_2}$$

### 4.3.1 Rozklady matice hustoty

Začali sme tým, že matica hustoty je zjednodušený zápis stavu preparátora, ktorý vznikol zmiešaním dvoch rôznych preparátorov. Uvažujme príklad s polarizáciami. Majme dva preparátory, ktoré sú zmiešaním preparátorov pripravujúcich polarizácie rôznych smerov. Napríklad  $\varrho_1 \leftrightarrow \{(0.5, |H\rangle), (0.5, |V\rangle)\}$  a  $\varrho_2 \leftrightarrow \{(0.5, |P\rangle), (0.5, |L\rangle)\}$ , kde  $P = \frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle + i|V\rangle)$  je pravotočivá polarizácia a  $L = \frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle - i|V\rangle)$  je ľavotočivá polarizácia. Ak si spočítame príslušné matice hustoty, tak zistíme, že sú úplne rovnaké, a síce  $\varrho_1 = \varrho_2 = \frac{1}{2}I$ . To znamená, že meraniami nevieme tieto dva preparátory odlíšiť. Sme nútení prijať záver, že pre jednu maticu hustoty existuje dokonca nekonečne veľa rôznych rozkladov, t.j. zmiešavania preparátorov.

Preparátor, ktorý pripravuje stav  $\varrho$  však nemusí byť nutne nejaké zloženie dvoch preparátorov. Napríklad taká žiarovka. Hovoríme, že produkuje svetlo najrôznejších polarizácií, t.j. celkový stav je  $\varrho_z = \int d\psi |\psi\rangle\langle\psi|$ , ale toto nie je nič iné ako  $\frac{1}{2}I$ , t.j. úplná zmes. Tento istý stav vznikne aj zmiešaním horizontálne a vertikálne polarizovaného svetla s rovnakými pravdepodobnosťami. A neexistuje experiment, ktorý by rozlíšil, ktorý prípad skutočne nastal. Summa summarum, nemôžeme povedať, že žiarovka produkuje svetlo polarizované v najrôznejších smeroch, alebo či je to iba zmes dvoch preparátorov. Úplná zmes je taký stav, ktorý dáva pre každé meranie konštantnú distribúciu výsledkov.

Zmiešavanie zavádza do hry konvexné kombinácie, t.j.  $\mathcal{S}(\mathcal{H})$  je konvexná množina. To nám umožní zodpovedať ďalšiu otázku. Rozšírili sme množinu stavov ako prvkov z Hilbertovho priestoru na matice hustoty. Použili sme pritom zmiešavanie preparátorov zodpovedajúcich prvkom Hilbertovho priestoru. Čo sa stane ako sa pozrieme na zmiešavanie preparátorov matic hustoty? Nič. Zmiešavanie matic hustoty je ich konvexná kombinácia a vždy dostaneme iba stav, ktorý je popísaný maticou hustoty. Vyzerá to a záver je taký, že matice hustoty tvoria úplný priestor kvantových stavov.

Napriek tomu, že sme začali s predstavou o zmiešavaní, tak nie každý preparátor, ktorý produkuje maticu hustoty, je nutne iba zmiešaním iných preparátorov.

## 4.4 Merania a ich zmiešavanie

Podobne ako sme zmiešavali preparátory, môžeme zmiešavať aj meracie zariadenia, t.j. akosi náhodne striedame prístroje, ktorými daný objekt premeriavame. Podobne ako predtým, takéto meranie je popísané ako  $M \leftrightarrow \{(q_1, A_1), \dots, (q_N, A_N)\}$ . Potom stredná hodnota v stave  $\varrho$  sa rovná

$$\langle M \rangle_{\varrho} = \sum_j q_j \langle A_j \rangle_{\varrho} = [\text{Tr} \varrho (\sum_j q_j a_{jk} \phi_{jk})] = \sum_j a_{jk} \text{Tr} \varrho F_{jk},$$

kde sme označili  $A_j |\phi_{jk}\rangle = a_{jk} |\phi_{jk}\rangle$  a  $F_{jk} = q_j \phi_{jk}$ . Ako záver máme, že meranie je dané množinou výsledkov a prislúchajúcej množiny operátorov, t.j.  $M = \{\mu, F_{\mu}\}$ , kde  $\mu$  sme použili na indexáciu rôznych výsledkov. Niektoré z výsledkov sa automaticky spájajú (ak predstavujú to isté číslo), ale môžu sa zlúčiť aj umelo. Namerané hodnoty nie sú to podstatné a pri meraniach ide skôr o tie pravdepodobnosti.

Najvšeobecnejšie merania sú špecifikované sadou pozitívnych operátorov  $F_{\mu} \geq 0$ , ktorých suma je rovná jednotkovému operátoru, t.j.  $\sum_{\mu} F_{\mu} = I$ . Tieto merania sa zvyknú nazývať ako POVM merania, z anglického „positive operators valued measure“.

## 4.5 Čisté a zmiešané stavy

Hlavným bodom tejto prednášky je špecifikácia množiny stavov  $\mathcal{S}(\mathcal{H})$ . Už sme spomenuli, že táto množina je konvexná, t.j. ak  $\varrho_1, \dots, \varrho_N \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ , tak potom aj  $\sum_j q_j \varrho_j \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$  pre všetky  $q_1, \dots, q_N \geq 0$  a  $\sum_j q_j = 1$ . Našu debatu o stavoch sme začali s tým, že stavy sú prvky Hilbertovho priestoru a pomocou zmiešavania sme túto množinu rozšírili na matice hustoty. Tieto stavy z Hilbertovho priestoru sú však stále výnimočné a každý jeden je extrémnym bodom.

Extrémny bod je, ľudovo povedané, taký stav, ktorý sa nedá napísať ako konvexná kombinácia ostatných stavov. Matematicky to znamená implikáciu  $\varrho = \lambda \varrho_1 + (1 - \lambda) \varrho_2 \Rightarrow \varrho_1 = \varrho_2 = \varrho$ . Ak táto implikácia platí, tak  $\varrho$  je extrémny. Tieto body sa zvyknú nazývať aj čisté stavy. Extrémne body sú jednorozmerné projektory, z ktorých každý zodpovedá nejakému prvku z Hilbertovho priestoru. Ostatné stavy sa nazývajú zmiešané.

Na charakterizáciu stavov okrem tohoto základného delenia používame ja nejaké tie funkcionály. Dva najviac používané sú

**Čistota.**  $P(\varrho) = \text{Tr}\varrho^2$ . Platí, že  $P(\varrho) = 1$  iba pre čisté stavy.

**Entropia.**  $S(\varrho) = -\text{Tr}\varrho \log \varrho$ . Tu platí, že  $S(\varrho) = 0$  pre čisté stavy. Maximum je dosiahnuté pre úplne zmiešaný stav, pre ktorý  $S(\frac{1}{d}I) = \log d$ . Entropiu počítame tak, že operátor  $\varrho$  zdiagonalizujeme, t.j.  $\varrho = \sum_j \lambda_j \psi_j$ , a potom spočítame  $S = -\sum_j \lambda_j \log \lambda_j$ . Takýmto spôsobom sa inak počíta akákoľvek funkcia definovaná na stavoch, t.j. zdiagonalizovať a potom zrátať na diagonále obyčajnú číselnú funkciu. Keďže existuje dosť veľké množstvo rôznych entropií, tak táto sa nazýva von Neumannova a ako vidno aj z definície, tak úzko súvisí so Shannonovou entropiou  $H(p_1, \dots, p_d) = -\sum_j p_j \log p_j$ . Môžete skúsiť ukázať, že

$$S(\varrho) = \min_{A=\sum_k a_k |\phi_k\rangle\langle\phi_k|} -\sum_k p(a_k) \log p(a_k) \quad p(a_k) = \text{Tr}\varrho\phi_k = \langle\phi_k|A|\phi_k\rangle,$$

kde minimum je cez všetky merania  $A$ .

Tieto dve charakteristiky sa zvyknú používať najmä na charakterizáciu miery zmiešanosti stavu, ale vyskytujú sa aj v mnohých iných fyzikálnych, alebo informatických súvislostiach.

## 5 Schrödingerova rovnica

Začnime opäť podobnou tabuľkou ako v minulej časti, no už poučení tým, že množina stavov, aj meraní je väčšia ako sme mali predtým.

množina stavov	$\mathcal{S}(\mathcal{H}) = \{\varrho : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}, \varrho \geq 0, \text{Tr}\varrho = 1\}$
množina meraní	$\mathcal{M} = \{M \leftrightarrow \{F_\mu\}, F_\mu : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}, F_\mu \geq 0, \sum_\mu F_\mu = I\}$
pravdepodobnosti	$p(\mu) = \text{Tr}\varrho F_\mu$
čisté stavy	$\varrho = \varrho^2 \Leftrightarrow P(\varrho) = \text{Tr}\varrho^2 = 1 \Leftrightarrow S(\varrho) = 0$ , t.j. $\varrho = P_\psi \equiv \psi =  \psi\rangle\langle\psi $
zmiešané stavy	$\varrho = \sum_j p_j \varrho_j = \sum_k q_k \psi_k$ , rozklad je nejednoznačný, ale všetky sú neodlíšiteľné
fyzikálne veličiny	$A = \sum_k a_k \psi_k \leftrightarrow \{\psi_k\}$ , t.j. $A = A^\dagger \Leftrightarrow \langle\psi A\phi\rangle = \langle A\psi \phi\rangle$

### 5.1 Čas a časový vývoj

Otázka, čo je to čas, je ťažká a veľmi zabída do filozofie. Pre nás je čas akýsi parameter, ktorý nám umožňuje formulovať tzv. dynamiku. Dôležitým faktom je, že z pohľadu kvantovej fyziky je čas iba takýto parameter a neexistuje nejaké kvantové meracie zariadenie, ktoré by čas meralo podobne ako polohu, alebo hybnosť. Presnejšie neexistuje operátor času  $T$ . Alebo ešte inak: čas nie je charakteristikou stavu, ale môžeme hovoriť o časovom vývoji stavu. V tejto časti si povieme podľa akých pravidiel sa kvantový stav môže meniť, resp. mení v čase. Nepôjde o akési odvodenie, ale skôr o náznak prečo práve takto. Ono v skutočnosti je časový vývoj ďalším z postulátov kvantovej fyziky.

Z matematického pohľadu je prirodzené, aby bol časový vývoj popísaný akýmisi transformáciami definovanými na množine stavov, t.j.  $\varrho_0 \mapsto \varrho_t = \mathcal{T}_t[\varrho_0]$ . Tieto transformácie pre každé  $t$  musia spĺňať:

**Uzavretosť.**  $\mathcal{T}_t : \mathcal{S}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathcal{S}(\mathcal{H})$ , t.j.  $\mathcal{T}_t$  je pozitívna operácia ( $\varrho_t \geq 0$ ) a zachováva stopu  $\text{Tr}\varrho_t = \text{Tr}\varrho_0 = 1$ .

**Linearita.**  $\mathcal{T}_t[\sum_j \lambda_j \varrho_j] = \sum_j \lambda_j \mathcal{T}_t[\varrho_j]$ . Linearita je dôsledkom zmiešavania a nejednoznačnosti konvexného rozkladu matice hustoty. Alternatívne sa môžeme na to pozrieť z pohľadu zmiešavania preparátorov, pretože pozorovanie časovej zmeny sa líši od experimentu merania iba tým, že pred vykonaním merania chvíľku počkáme, t.j. medzi preparátorom a meraním uplynie nejaký čas  $t$ .

**Úplná pozitivita.** Táto vlastnosť je jednou z najťažšie argumentovateľných v intuitívnej rovine. Zhruba povedané ide o nasledovné. Predstavme si, že náš systém je súčasťou nejakého väčšieho celku (pre jednoduchosť povedzme, že ide o dva systémy), ale vieme jeho časový vývoj popísať bez konkretizovania vlastností iného systému. Ešte sme si nepovedali, ako vyzerá kvantová fyzika takýchto zložených systémov, ale k tomu sa neskôr dostaneme a nateraz to ešte nie je potrebné. Povieme si iba, že dva systémy môžu byť vo veľmi zvláštnych stavoch. Dokonca takých, že keď sa aj vyvíjajú nezávisle podľa vývoja spĺňajúceho prvé dva body, tak

celkový stav nemusí byť korektný kvantový stav oboch systémov. A takéto niečo je neprípustné a znamená to, že pozitivita transformácie  $\mathcal{T}_t$  nie je dostatočnou podmienkou. Musíme ju prítvrdiť a požadovať úplnú pozitivitu, ktorá zaručuje, že aj stav zloženého systému bude vždy dobrým kvantovým stavom.

## 5.2 Vývoj uzavretého systému.

Vo fyzike rozlišujeme dva základné typy systémov: otvorené a uzavreté. Uzavretý systém je istou idealizáciou reality, ktorá nám hovorí, že systém „nekomunikuje“ so svojim okolím, t.j. nevymieňa si energiu, častice, a iné. To, čo je zaujímavé pre takýto systém je, že jeho časový vývoj je obrátiteľný. Inak povedané existuje inverzná transformácia  $\mathcal{T}_t^{-1}$ . Obraz celej množiny stavov pri transformácii  $\mathcal{T}_t$  je nejaká podmnožina  $\mathcal{S}_{\mathcal{T}} \subset \mathcal{S}(\mathcal{H})$ . Obrátenie tejto transformácie aplikované na túto podmnožinu nám dá celú množinu stavov. Avšak my musíme aplikovať túto inverznú transformáciu na celú množinu stavov, čím sa však nutne dostaneme mimo množiny stavov, t.j.  $\mathcal{S}(\mathcal{H}) \subset \mathcal{T}_t^{-1}[\mathcal{S}(\mathcal{H})]$ . A toto je samozrejme neprípustné, pretože dostávame nefyzikálne stavy, alebo presnejšie objekty, ktoré žiadnym stavom nezodpovedajú. Záver je taký, že transformácia  $\mathcal{T}_t$  musí byť bijekciou, t.j.  $\mathcal{T}_t : \mathcal{S}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathcal{S} \equiv \mathcal{S}(\mathcal{H})$ .

Podme sa pozrieť, kam sa môžu transformovať čisté stavy. Začnime nasledovným pozorovaním. Predpokladajme, že máme invertibilnú transformáciu, ktorá nejaký zmiešaný stav zobrazí na čistý stav, t.j.  $\mathcal{T}_t[\rho] = \mathcal{T}[\lambda\phi_1 + (1 - \lambda)\phi_2] = \psi$ . Z linearity transformácie a čistoty stavov  $\phi_1, \phi_2$  dostávame, že nutne  $\mathcal{T}_t[\phi_1] = \mathcal{T}_t[\phi_2] = \psi$ , pretože  $\psi$  nevieme napísať ako konvexnú kombináciu iných stavov. Toto však nie je v žiadnom prípade bijektívne, resp. obrátiteľné zobrazenie, pretože vzor  $\psi$  je aj  $\phi_1$ , aj  $\phi_2$ , ale aj ich ľubovoľná konvexná kombinácia (napr.  $\rho$ ). Dôležitý poznatok je, že pre obrátiteľné transformácie sa čisté stavy zobrazujú na čisté stavy, t.j. tieto transformácie sa dajú sformulovať v reči vektorov v Hilbertových priestoroch, t.j. ako bijektívne transformácie  $U_t : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ .

Uvážme teraz princíp superpozície, ktorý nám hovorí, že každý stav  $|\psi\rangle$  vieme napísať ako lineárnu kombináciu, t.j.  $|\psi\rangle = \sum_n c_n |\phi_n\rangle = \sum_k c'_k |\phi'_k\rangle$ . Použitím tohoto princípu opäť dostávame, že transformácia  $U_t$  je lineárna, tentokrát však ako transformácia na Hilbertovom priestore. My sme túto linearitu transformácie  $U_t$  použili v dvojštrbinovom experimente, v ktorom prichádza k vývoju medzi štrbinami a tienidlom (detektormi). Na štrbine nám vzniká superpozícia  $|\psi_{I+II}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_I\rangle + |\psi_{II}\rangle)$ , ktorá sa vyvinie do stavu  $|\psi_{I+II}(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_I(t)\rangle + |\psi_{II}(t)\rangle)$  a práve túto superpozíciu nameriavame, pretože pre počiatočnú superpozíciu by sme žiadnu interferenciu nepozorovali, t.j. vývoj je pri tomto experimente dôležitý.

O transformácii  $U$  vieme, že je lineárna a obrátiteľná. Vieme povedať ešte niečo viac? Fyzikálna podmienka sa týka energie, a síce energia uzavretého systému sa nemení. Čo je to ale energia? Každý z nás má vytvorený koncept energie, t.j. máme nejakú predstavu. Bohužiaľ ide o ten typ predstáv, ktorý nám neumožňuje povedať, čo to energia je. Problém je, že poznáme tak veľa rôznych druhov energií: kinetická, potenciálna, tepelná, elektrická, magnetická, jadrová, atď. Energia je zvláštnou fyzikálnou veličinou, pretože je typická pre každý systém. V tomto je úplne odlišná od polohy, momentu hybnosti a rýchlosti, ktoré sú pre každý systém definované rovnako. Energia v podstate definuje systém a umožňuje nám určovať rôzne typy objektov. Energia sa vyznačuje jednou veľmi peknou vlastnosťou, a síce, že sa zachováva. Ako fyzikálny princíp, ktorý použijeme pri špecifikácii vývoja je zákon zachovania energie.

Čo je energia v kvantovej fyzike? Povedali sme si, že fyzikálne veličiny sú reprezentované hermitovskými operátormi, čiže pôjde o nejaký hermitovský operátor. V podstate môže byť ľubovoľný, aj keď pre konkrétny systém je tento operátor energie samozrejme jedinečný. Označme si ho písmenom  $H$ .

Čo je zákon zachovania energie v kvantovej fyzike? Máme prinajmenšom dve možnosti: *i*) zachováva sa stredná hodnota  $\langle H \rangle_{\rho_t} = \text{konšt.}$  alebo *ii*) zachováva sa celá distribúcia pre meranie energie, t.j.  $p_{\rho_t}(E) = p_{\rho_0}(E)$ . My budeme uvažovať tú silnejšiu podmienku, t.j. zachovanie celých distribúcií, a nielen stredných hodnôt. Označme si ako  $|\phi_n\rangle$  vlastné stavy operátora energie  $H$ , t.j.  $H|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle$ , kde  $E_n$  sú možné výsledky merania energie. Vidno, že ak je počiatočný stav  $|\psi_0\rangle = |\phi_n\rangle$ , tak tento stav sa pri vývoji nemení, t.j. tento operátor je vlastným stavom aj operátora  $U_t$ , resp.

$$U_t|\phi_n\rangle = e^{i\alpha_n(t)}|\phi_n\rangle \quad \alpha_n(t) \in [-\infty, \infty].$$

Hore uvedená rovnosť však už plne charakterizuje typ operátora  $U_t$ . Operátory, pre ktoré platí  $UU^\dagger = U^\dagger U = I$  sa nazývajú *unitárne* a platí pre ne, že  $U = \sum_k e^{i\alpha_k} |\phi_k\rangle\langle\phi_k|$ , t.j. vlastné hodnoty majú tvar komplexných odmocnín z jednotky. Výsledkom našich úvah je, že časový vývoj uzavretého systému je popísaný unitárnymi operátormi  $U_t$ . Tieto operátory majú vzťah k operátoru energie, a síce majú tie isté vlastné vektory. Potom pre akýkoľvek počiatočný stav  $|\psi\rangle$  je pravdepodobnostná distribúcia energii nemenná, t.j.  $p(E_n, t) = |\langle\phi_n|\psi_t\rangle|^2 = |\langle\phi_n|\psi_0\rangle|^2 =$

$p(E_n, t = 0)$ . Naviac unitárne operátory zachovávajú skalárny súčin, t.j.  $\langle \psi | \phi \rangle = \langle \psi' | \phi' \rangle$ , kde  $|\psi'\rangle = U|\psi\rangle$ ,  $|\phi'\rangle = U|\phi\rangle$ .

Časový vývoj uzavretého systému je popísaný unitárnymi operátormi  $U_t : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ .

### 5.3 Schrödingerova rovnica

Prišli sme na to, že vývoj je popísaný unitárnymi operáciami, presnejšie povedané jednoparametrickou množinou takýchto operácií. Otázkou zostáva, či ľubovoľná takáto množina popisuje vývoj. Odpoveď je samozrejme záporná, pretože sme si povedali, že vývoj zachováva energiu a ukázali sme si, že je veľmi úzky vzťah medzi operátorom  $U_t$  a operátorom energie  $H$ , pretože majú tie isté vlastné stavy  $|\phi_n\rangle$ . Predstavme si, že systém sa vyvinul z počiatočného stavu do stavu  $|\psi_t\rangle = U_t|\psi_0\rangle$ . Kludne môžeme považovať  $|\psi_t\rangle$  za počiatočný stav ďalšieho vývoja a nechať systém vyvíjať sa ešte čas  $s$ , t.j.  $|\psi_{t+s}\rangle = U_s|\psi_t\rangle = U_s U_t|\psi_0\rangle$ , ale súčasne môžeme povedať, že vývoj je daný operátorom  $U_{t+s}$ , t.j.  $|\psi_{t+s}\rangle = U_{t+s}|\psi_0\rangle$ . Porovnaním dostaneme jeden veľmi dôležitý vzťah, a síce vývoj by mal spĺňať podmienku

$$U_{t+s} = U_s U_t.$$

Inverzný operátor  $U_t^{-1} = U_{-t}$  má vlastne význam spätného časového vývoja. Naviac vždy by malo platiť, že  $\lim_{t \rightarrow 0} U_t|\psi_0\rangle = |\psi_0\rangle$ , t.j.  $U_{t=0} = I$ . Všetky tieto podmienky dohromady znamenajú, že množina  $\{U_t\}_t$  tvorí tzv. jednoparametrickú grupu, t.j. platia vlastnosti *i*) uzavretosť voči grupovej operácii, t.j.  $U_{t+s} = U_t U_s$ , *ii*) existuje inverzný prvok  $U_t^{-1} = U_{-t}$  a *iii*) množina obsahuje jednotkový operátor  $U_{t=0} = I$ .

Vo fyzike máme vo zvyku formulovať časový vývoj pomocou diferenciálnych rovníc. Predstavme si, že máme časový vývoj  $|\psi_t\rangle$ . Aká diferenciálna rovnica ho určuje? Urobme časovú deriváciu

$$\frac{d}{dt}|\psi_t\rangle = \lim_{dt \rightarrow 0} \frac{|\psi_{t+dt}\rangle - |\psi_t\rangle}{dt} = \lim_{dt \rightarrow 0} \frac{(U_{dt} - I)|\psi_t\rangle}{dt} = L|\psi_t\rangle$$

kde sme použili, že rozdiel  $U_{dt} - I$  vieme zapísať ako  $Ldt$ , kde  $L$  je nejaký lineárny operátor. Inými slovami to znamená, že infinitezimálne malá časová zmena sa dá vyjadriť nasledovne

$$|\psi_{t+dt}\rangle = |\psi_t\rangle + L|\psi_t\rangle dt.$$

Dostávame teda diferenciálnu rovnicu

$$\frac{d|\psi_t\rangle}{dt} = L|\psi_t\rangle,$$

ktorá popisuje a definuje časový vývoj. Formálnym riešením tejto rovnice je

$$|\psi_t\rangle = e^{Lt}|\psi_0\rangle \quad \text{kde} \quad e^{Lt} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (Lt)^n = I + Lt + \frac{1}{2}L^2t^2 + \dots$$

My vieme, že operátor  $e^{Lt}$  musí byť unitárny operátor  $U_t$ , t.j.

$$U_t U_t^\dagger = e^{Lt} (e^{Lt})^\dagger = e^{Lt} e^{L^\dagger t} = e^{t(L+L^\dagger)} = I.$$

Ďalej vieme, že  $e^X = I$  iba ak  $X = 0$ . Aby teda platila posledná rovnosť pre všetky časy  $t$ , tak

$$L + L^\dagger = 0 \quad \Rightarrow \quad L = -L^\dagger,$$

čo znamená, že operátor  $L$  je antihermitovský. Našťastie existuje veľmi jednoduchý prepis medzi hermitovskými a antihermitovskými operátormi. Ak  $L$  je antihermitovský, tak  $\tilde{L} = iL$  je hermitovský operátor, pretože  $\tilde{L}^\dagger = (iL)^\dagger = -iL^\dagger = iL = \tilde{L}$ .

Opäť zvolme ako počiatočný stav vlastný stav operátora energie  $|\phi_n\rangle$ . Vieme, že

$$U_t|\phi_n\rangle = e^{Lt}|\phi_n\rangle = e^{i\alpha_n t}|\phi_n\rangle.$$

Zákon zachovania energie nám teda hovorí, že operátory  $L$  a  $H$  majú tie isté vlastné stavy  $|\phi_n\rangle$ . Jediný rozdiel je vo vlastných hodnotách.

To aký operátor zvolíť za  $L$  je postulátom, ktorý nám určuje dynamiku. Ukazuje sa, že správnou je voľba

$$L \rightarrow -i\frac{1}{\hbar}H,$$

kde  $H$  je operátor energie, ktorý trochu všeobecnejšie nazývame Hamiltoniánom systému. Ak si všetko dáme dohromady, tak dostávame Schrödingerovu rovnicu:

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi_t\rangle = H|\psi_t\rangle.$$

Zopakujme si stručne, čo sme použili pri odvodení tejto rovnice:

1. Obrátiteľnosť vývoja uzavretého systému.
2. Konvexnosť priestoru stavov.
3. Princíp superpozície pre čisté stavy.
4. Zachovanie energie.

## 5.4 Konštrukcia Hamiltoniánu

Toto je všeobecne ťažká úloha a neexistuje žiaden univerzálny návod. Istým štandardom je nasledovná procedúra, ktorá, sa nazýva prvé kvantovanie. Napíšeme si klasický Hamiltonián, ktorý popisuje klasický analóg toho, čo ideme popisovať. Analogičnosť je veľmi diskutovateľná vlastnosť, ale zhruba znamená, že predpokladáme rovnaké potenciálne energie, rovnaké symetrie systému, a podobne.

Klasický hamiltonián je funkciou polohy  $q$  a hybnosti  $p$ , t.j.  $h = h(q, p)$ . Prvé kvantovanie použije tú istú funkčnú závislosť ibaže nahradí premenné  $q$  a  $p$  operátormi  $X$  a  $P$ , t.j.

$$q \rightarrow X : X\psi(x) = x\psi(x) \quad p \rightarrow P : P\psi(x) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi(x).$$

Týmto dostávame z klasického hamiltoniánu hamiltonián kvantový, ktorý už je operátorom na Hilbertovom priestore komplexných funkcií, tzv. amplitúd pravdepodobnosti výskytu. Avšak to, či tento Hamiltonián zodpovedá realite je potrebné otestovať v experimentoch a iba tie môžu potvrdiť správnosť nášho modelu, resp. Hamiltoniánu.

## 6 Model atómu vodíka

Typickou úlohou kvantovej fyziky je riešenie tzv. stacionárnej Schrödingerovej rovnice

$$H|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle,$$

t.j. úlohy na nájdenie vlastných stavov Hamiltoniánu  $|\phi_n\rangle$ , ktoré sa zvyknú nazývať stacionárne stavy. Riešenie celej Schrödingerovej rovnice je už potom priamočiare, pretože

$$|\psi_t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|\psi_0\rangle = \sum_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}|\phi_n\rangle\langle\phi_n|\psi_0\rangle = \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar}|\phi_n\rangle$$

kde  $c_n = \langle\phi_n|\psi_0\rangle$  sú amplitúdy počiatočného stavu  $|\psi_0\rangle = \sum_n c_n|\phi_n\rangle$ . Ako vidno, riešenie zachováva absolútnu hodnotu amplitúd  $|c_n|$  a ovplyvňuje iba vzájomné fázy. Energia sama určuje, nakoľko sa tieto fázy menia.

### 6.1 Von Neumannova rovnica a vývoj fyzikálnych veličín

Schrödingerova rovnica je pravidlom, ktoré nám hovorí ako sa vyvíjajú čisté stavy. Ako sú však týmto vývojom ovplyvnené zmiešané stavy, t.j. ako vyzerá  $\rho_t = \mathcal{U}_t[\rho_0]$ ? Najprv si rozanalyzujeme, ako sa vlastne matica hustoty

mení pri unitárnej operácii. Vieme, že každý stav sa dá napísať ako konvexná suma čistých stavov  $\varrho = \sum_j p_j \psi_j$ . Čistý stav sa mení na čistý stav

$$\psi = |\psi\rangle\langle\psi| \rightarrow \psi' = |\psi'\rangle\langle\psi'| = U|\psi\rangle\langle\psi|U^\dagger \equiv \mathcal{U}[\psi].$$

Priamym zovšeobecnením a využitím linearity transformácie  $\mathcal{U}$  dostaneme tvar unitárnej operácie v reči transformácií na množine stavov  $\mathcal{S}(\mathcal{H})$

$$\varrho \rightarrow \varrho' = U\varrho U^\dagger.$$

Odvodme si rovnicu, ktorá sa zvykne nazývať aj riadiacou rovnicou, pretože určuje časový vývoj. Poďme spočítať časovú deriváciu časového vývoja  $\varrho_t$

$$\begin{aligned} \frac{d\varrho_t}{dt} &= \lim_{dt \rightarrow 0} \frac{\varrho_{t+dt} - \varrho_t}{dt} = \lim_{dt \rightarrow 0} \frac{1}{dt} \{e^{-iHdt} \varrho_t e^{iHdt} - \varrho_t\} \\ &= \lim_{dt \rightarrow 0} \frac{1}{dt} \{(I - iHdt + \dots) \varrho_t (I + iHdt + \dots) - \varrho_t\} \\ &= \lim_{dt \rightarrow 0} \frac{1}{dt} \{\varrho_t + i(H\varrho_t - \varrho_t H)dt + dt^2 \dots - \varrho_t\} \\ &= i[H, \varrho_t] + \lim_{dt \rightarrow 0} dt \dots \end{aligned}$$

Výsledkom je tzv. von Neumannova rovnica, ktorá popisuje Schrödingerovský vývoj matíc hustoty

$$\frac{d\varrho_t}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H, \varrho_t].$$

Pod zmenou fyzikálnych veličín máme na mysli spôsob, akým sa menia operátory v čase. Istý návodom je časová zmena stredných hodnôt, t.j.

$$\langle A \rangle_{\varrho_t} = \text{Tr} A \varrho_t = \text{Tr} A U_t \varrho_0 U_{-t} = \text{Tr} U_{-t} A U_t \varrho_0 = \langle U_{-t} A U_t \rangle_{\varrho_0} \equiv \langle A_t \rangle_{\varrho_0}.$$

Pre zmenu operátora v čase sme dostali vzťah

$$A_t = U_{-t} A_0 U_t.$$

Vidíme, že sa operátory vyvíjajú späť v čase, t.j. presne opačne ako stavy. Podobne ako v prípade operátorov hustoty riadiaca rovnica pre vývoj fyzikálnych veličín je daná rovnicou

$$\frac{dA_t}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H, A_t],$$

t.j. presne opačne v čase, pretože ak  $U_t$  je riešením von Neumannovej rovnice, tak  $U_{-t}$  je riešením hore uvedenej rovnice pre operátory.

Zákon zachovania fyzikálnej veličiny je ekvivalentný faktu, že operátor komutuje s hamiltoniánom, t.j.  $[H, A] = 0$ . Ak dosadíme do týchto rovníc napríklad polohu/hybnosť a uvážime, že hamiltonián je  $H = \frac{1}{2m} P^2 + V(X)$  (t.j. potenciálna energia nezávisí od polohy), tak potom dostaneme, že  $[H, X] = \frac{1}{m} P$  a  $[H, P] = -\frac{\partial}{\partial x} V(x)$ , čo je definíciou operátora sily. Rovnice pre stredné hodnoty potom vyzerajú ako zovšeobecnenia klasických rovníc pre definíciu rýchlosti  $\dot{x} = \frac{1}{m} p$  a druhý Newtonov zákon sily  $\dot{p} = F = -\frac{\partial}{\partial x} V$ .

## 6.2 Štruktúra hmoty

Prvé zmienky o úvahách o štruktúre hmoty pochádzajú od starovekých Grékov, ktorí rozlišovali medzi štyrmi základnými elementami: voda, vzduch, zem a oheň. Demokritos predpokladal, že hmota sa skladá z akýchsi základných častíc, ktoré nazval atómy a medzi atómami je prázdno. Atómy sú viac už nedeliteľné častice. Týmto položil základy atomizmu, ktorého sa potom chopili chemici 17. storočia a Mendelejev zavŕšil snaženie, keď systematizoval a usporiadal atómy do prehľadnej tabuľky, na základe periodicky sa opakujúcich chemických vlastností. Rôznych atómov sa však zdalo byť akosi veľa. Dnes ich máme asi 114. Možno vznikli špekulácie o tom, či majú atómy akúsi vnútornú štruktúru, ktorá by nám umožnila pochopiť vlastnosti jednotlivých prvkov na hlbšej úrovni. Tieto úvahy však zostali iba v rovine špekulácií až do roku 1878, kedy sa J. J. Thomson dostal dovnútra atómu a objavil elektrón.



Otázka, či má atóm vnútornú štruktúru, dostala jasnú a pozitívnu odpoveď: áno, vyletujú z neho predsa elektróny, t.j. musia byť niekde vo vnútri. Začali sa rodiť predstavy o podobe atómu. Jedna z nich dostala meno *pudingový model*, pretože predpokladala, že atóm sa skladá z elektrónov, ktoré nejako existujú v kladne nabitých hmote, podobne ako hrozička v pudingu. Tomuto modelu povedali nie experimenty E. Ruherforda. Ten vo svojich experimentoch ukázal, že kladný náboj je v atóme koncentrovaný do malého objemu, ktorý je o niekoľko rádov menší ako je rozmer celého atómu. Vznikla myšlienka atómového kladne nabitého jadra, ktorej logickým záverom bol *planetárny model*. V tomto modeli hrali elektróny úlohu planét obiehajúcich okolo Slnka, t.j. jadra. Úlohu gravitačnej sily zohráva sila elektrická, ktorá vyjadruje presne rovnaký typ sily. Obidve klesajú úmerne štvorcovo vzdialenosti medzi objektami na ktoré pôsobia. Bohužiaľ, táto predstava je v rozpore s teóriou elektromagnetizmu, ktorá bola v tej dobe tou najúspešnejšou teóriou s množstvom aplikácií. Podľa tejto teórie nabitá častica, ktorá sa pohybuje so zrýchlením nutne stráca energiu vo forme žiarenia, t.j. žiari. Elektrón pohybujúci sa po kružnici má dostredivé zrýchlenie, t.j. musí vyžarovať. Nebol by to veľký problém, keby elektrón touto cestou stratil svoju energiu za veľmi dlhý čas, ale opak je pravdou. Jednoduchý výpočet ukazuje, že za  $10^{-19}$  sekundy by sa mal elektrón v atóme vodíka zrútiť do jadra. A toto už je problém, ktorý sa nedá jednoducho prehliadnúť.

S „riešením“ pre atóm vodíka prišiel Niels Bohr, ktorý mal dosť odvahy na to, aby postuloval veľmi netypické princípy:

1. Elektróny sa pohybujú po kružniciach okolo jadra, ale nevyžarujú.
2. Nie všetky kružnice (orbity) sú povolené. Tie správne energie sú dané... (nie je potrebné vedieť)
3. Atóm vyžaruje, alebo pohlcuje svetlo iba v prípade, ak preskakuje medzi týmito orbitami, t.j. mení svoj pohybový stav, svoju obežnú dráhu.

Ako vidno, išlo o radikálne postuláty, ktoré nerešpektovali existujúcu fyziku, ba priam jej odporovali. Bolo jasné, že tieto postuláty nemajú veľkú šancu na úspech, napriek tomu, že poslúžili úplne presne k vysvetleniu spektra atómu vodíka. Ich použitie, prípadne rozšírenie pre väčšie atómy nebolo jasné a ani nebolo urobené.

Kvantovanie energie atómu vodíka bol nielen dôsledok Bohrových postulátov, ale aj experimentálny fakt, ktorý vysvetľoval čiarové spektrum vodíka, t.j. vlastnosť, že vodíkový atóm reaguje iba na svetlo určitých frekvencií. Erwin Schrödinger zrejme postrehol, že podobné kvantovanie máme aj pri riešení vlnových rovníc, ktoré sa dajú riešiť pomocou nájdenia systému vlastných funkcií a vlastných čísiel. Naviac prišiel nato, ako k podobnej rovnici prísť a napísal svoju slávnu Schrödingerovu rovnicu. Táto rovnica je kvantovou verziou klasického planetárneho modelu, t.j. elektrónu obiehajúceho okolo kladne nabitého protónu, t.j. klasický hamiltonián pre časticu v centrálnej symetrickom poli  $h(p, q) = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r}$ , kde  $e^2$  je nejaká konštanta.

Kvantový Hamiltonián tohoto problému dostaneme, ak nahradíme  $q, p$  príslušnými operátormi polohy a hybnosti. Celá úloha je sféricky symetrická preto, bude lepšie popisovať celý problém v sférických súradniciach, t.j.  $[x, y, z] \rightarrow [r, \theta, \phi] = [\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \arccos(z/r), \arctan(y/x)]$ , alebo inverzné transformácie  $x = r \sin \theta \cos \phi, y = r \sin \theta \sin \phi, z = r \cos \theta$ . v týchto súradniciach je potenciálna časť energie jednoducho vyjadriteľná, pretože  $V = V(r)$ . Problém je s kinetickým členom, resp. s jeho tvarom vo sférických súradniciach.

Operátor Hamiltoniánu pre atóm vodíka je

$$H_{\text{vodík}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) - \frac{e^2}{r}$$

Prepis operátorov do sférických súradníc vyzerá nasledovne

$$\frac{\partial}{\partial x} \psi(r, \theta, \phi) = \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} + \frac{\partial \phi}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial \phi}.$$

plus pre ostatné premenné  $y, z$ . Zdlhávým výpočtom nakoniec pridáme k výsledku pre kinetickú časť

$$H_{\text{kin}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right].$$

Tento výraz vieme prepísať pomocou operátora celkového momentu hybnosti  $L$

$$H_{\text{kin}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{2mr^2} L^2.$$

Platí, že hamiltonián komutuje jednak s operátorom kvadrátu momentu hybnosti  $L^2$  a jednak s operátorom priemetu momentu hybnosti do akéhokoľvek smeru. Pre jednoduchosť vyberme priemet do osi  $z$ , t.j.  $L_z$ . Máme nasledovné komutačné vzťahy

$$[H, L^2] = 0 \quad [H, L_z] = 0 \quad [L_z, L^2] = 0,$$

čo znamená, že všetky tieto operátory majú tie isté vlastné stavy, presnejšie je možné vybrať spoločný systém vlastných funkcií. Samotný hamiltonián je vysoko degenerovaný, takže operátory  $L_z$  a  $L^2$  nám pomôžu pri jednoznačnej identifikácii vlastných stavov. Ukazuje sa, že tieto tri operátory tvoria tzv. úplnú množinu komutujúcich operátorov, t.j. určením vlastných hodnôt energie, momentu hybnosti a priemetu do osi  $z$  vieme jednoznačne určiť jediný vlastný stav, t.j. táto trojica hodnôt už nie je degenerovaná.

Moment hybnosti je mechanická veličina definovaná nasledovne  $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ . V kvantovej fyzike teda máme operátor

$$\vec{L} = -i\hbar\vec{r} \otimes \text{nábla} = -i\hbar \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y}, z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z}, x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

Veľkosť momentu hybnosti je definovaná ako  $L = \sqrt{L_x^2 + L_y^2 + L_z^2}$ .

Stacionárna Schrödingerova rovnica, ktorú ideme riešiť, má tvar

$$\left[ T_r + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r) \right] \psi(r, \theta, \phi) = E \psi(r, \theta, \phi).$$

Ak zoberieme do úvahy, že funkcia  $\psi$  je vlastnou funkciou operátora momentu hybnosti, t.j. platí  $L^2\psi = \hbar^2 l(l+1)\psi$ , tak dostávame rovnicu

$$\left[ T_r + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] \psi(r, \theta, \phi) = E \psi(r, \theta, \phi),$$

v ktorej už vystupuje iba jediná premenná  $r$ . Teraz použijeme ansatz<sup>1</sup>  $\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$ , kde  $Y_{lm}$  sú spoločné vlastné funkcie operátora  $L^2$  (tento operátor pôsobí na časť  $R(r)$  triviálne) a aj operátora  $L_z$ , t.j.  $L_z Y_{lm} = \hbar m Y_{lm}$ . Po takejto úprave dostaneme horeuvedenú rovnicu v tvare

$$\left[ T_r + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] R(r) = ER(r).$$

Táto rovnica obsahuje celú informáciu o spektre energie, t.j. možných hodnotách energie atómu vodíka. Riešením tejto rovnice sú vlastné hodnoty

$$E_n = -\frac{e^2 m}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -13.6 \text{eV} \frac{1}{n^2},$$

a vlastné funkcie sú indexované dvoma indexmi  $R_{nl}(r)$ , kde  $n = 1, 2, 3, \dots$  nazývame hlavné kvantové číslo, a  $l = 0, 1, \dots, n-1$  je vedľajšie kvantové číslo, ktoré vypovedá o celkovom momente hybnosti. Index  $m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$  (nemýliť si s hmotnosťou vystupujúcou v Schrödingerovej rovnici a aj výraze pre energiu) sa nazýva magnetické kvantové číslo. Prečo magnetické si povieme v ďalšej prednáške.

Riešením stacionárnej Schrödingerovej je

$$H_{\text{vodík}} \psi_{nlm} = E_n \psi_{nlm}, \quad \psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi), \quad E_n = -13.6 \text{eV} / n^2$$

Degenerácia energetickej hladiny je daná vzťahom  $\text{deg}(E_n) = n^2$ , t.j. existuje  $n^2$  dimenzionálny podpriestor stavov, ktoré majú rovnakú energiu. Líšia sa iba hodnotami momentu hybnosti a priemetu do smeru  $z$ . Toto riešenie poskytlo presné hodnoty možných energií atómu vodíka, a teda aj spektra. Spektrum je tvorené iba frekvenciami, pre ktoré platí

$$\omega_{mn} = \frac{1}{\hbar} (|E_n - E_m|) = \frac{-13.6 \text{eV}}{\hbar} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right).$$

Presne tieto frekvencie boli pozorované v spektre vodíka.

<sup>1</sup>Wikipédia: In physics and mathematics, an *ansatz* is an educated guess that is verified later by its results.

## 7 Spin

V minulej časti sme si ukázali, čo v sebe obsahuje úloha vyriešiť atóm vodíka. Úloha je to v podstate jednoduchá: zostaviť Hamiltonián a nájsť vlastné stavy a hodnoty. V tejto časti budeme ešte narábať s atómom vodíka a povieme si, čo je to spin elektrónu. Pojem spinu nám v závere umožní vrátiť sa od nekonečnorozmerného Hilbertovho priestoru späť ku konečnorozmernému. Táto časť bude preto ešte technicky náročná. Cieľom nie je naučiť sa matematické detaily výpočtov, ale skôr iba pochopiť základné idey, na ktorých je založené naše chápanie sveta atómov a elementárnych častíc.

Zhrňme si, čo sme vlastne s atómom vodíka urobili. Vyšli sme z klasickej predstavy, že atóm vodíka je v podstate elektrón obiehajúci okolo kladne nabitého jadra. V klasickej hamiltoniáne takejto situácie sme nahradili súradnice a hybnosti príslušnými operátormi polohy a hybnosti. Zistili sme, že operátor Hamiltoniánu atómu vodíka je vysoko degenerovaný. Možné hodnoty energie sú  $E_n = -13.6\text{eV}/n^2$  (pre  $n = 1, 2, \dots$ ). Tieto čísla presne sedia s pozorovaniami spektra atómu vodíka, t.j. rozdiely týchto energií presne zodpovedajú frekvenciám pohlcovaných, alebo emitovaných fotónov. Degenerovanosť znamená, že existuje viacero vlastných stavov s tou istou energiou, napr.  $E_n$ . V skutočnosti je týchto stavov nekonečne veľa, pretože ak máme dva vlastné stavy  $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle$ , pre ktoré  $H|\phi_1\rangle = \lambda|\phi_1\rangle$  a  $H|\phi_2\rangle = \lambda|\phi_2\rangle$ , tak potom aj ľubovoľná superpozícia týchto stavov  $|\phi\rangle = a|\phi_1\rangle + b|\phi_2\rangle$  je vlastným stavom, t.j.

$$H|\phi\rangle = H(a|\phi_1\rangle + b|\phi_2\rangle) = aH|\phi_1\rangle + bH|\phi_2\rangle = \lambda(a|\phi_1\rangle + b|\phi_2\rangle) = \lambda|\phi\rangle.$$

Hovoríme, že vlastná hodnota je  $k$ -násobne degenerovaná, alebo že  $k$  je stupeň degenerácie, ak vlastné stavy prislúchajúce tejto vlastnej hodnote tvoria  $k$ -rozmerný lineárny priestor, t.j. iba  $k$  z nich je lineárne nezávislých. V prípade atómu vodíka je stupeň degenerácie závislý na hodnote energie  $E_n$  a platí  $k = n^2$ .

Vlastné stavy v podpriestoroch prislúchajúcich k tej istej energii sme vybrali pomocou vlastných hodnôt operátorov celkového momentu hybnosti a priemetu momentu hybnosti do smeru  $z$ . Vlastné stavy preto charakterizujeme tromi číslami  $nlm$  a platí

$$\begin{aligned} H|\psi_{nlm}\rangle &= E_n|\psi_{nlm}\rangle & n &= 1, 2, \dots \\ L^2|\psi_{nlm}\rangle &= \hbar^2 l(l+1)|\psi_{nlm}\rangle & l &= 0, 1, \dots, n-1 \\ L_z|\psi_{nlm}\rangle &= \hbar m|\psi_{nlm}\rangle & m &= 0, \pm 1, \dots, \pm l \end{aligned}$$

Stavy  $|\psi_{nlm}\rangle$  sú tzv. vlnové funkcie  $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$ , kde  $(r, \theta, \varphi)$  sú sférické súradnice. Je zvykom vykresľovať pravdepodobnosť (resp. hustotu pravdepodobnosti) výskytu elektrónu v atóme vodíka pre rôzne stavy, t.j.  $p = |\psi_{nlm}|^2 = |R_{nl}(r)|^2 \cdot |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2$ . Prvá časť tohoto súčinu nám hovorí o vzdialenosti elektrónu od stredu, kým druhá nám hovorí o uhlovom rozdelení elektrónu. Práve toto uhlové rozdelenie sa zvykne vykresľovať. V prípade ak  $m = 0$ , tak  $|Y_{l,m=0}|^2$  je sféricky symetrické, t.j. elektrón sa vyskytuje vo všetkých uhloch s rovnakou pravdepodobnosťou. V iných prípadoch však už výskyt elektrónu vykazuje istú smerovosť. Podrobnejšiu diskusiu, resp. obrázky pre rôzne stavy ešte pridám.

### 7.1 Častica v elektromagnetickom poli

Na strednej škole sme sa učili, že na nabitú časticu pôsobí Lorentzova sila

$$\vec{F}_{\text{Lorentz}} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}),$$

kde  $\vec{E}$  a  $\vec{B}$  popisujú intenzity elektrického a magnetického poľa. Hamiltonova funkcia (hamiltonián)  $h = h(\vec{r}, \vec{p})$  častice je zvolená takým spôsobom, aby sústava rovníc (tzv. Hamiltonove rovnice)

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{\partial h(\vec{r}, \vec{p})}{\partial \vec{p}} \quad \frac{d\vec{p}}{dt} = -\frac{\partial h(\vec{r}, \vec{p})}{\partial \vec{r}}$$

bola ekvivalentná Newtonovej rovnici

$$m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = \vec{F}_{\text{Lorentz}}.$$

V klasickej fyzike sa ukazuje, že namiesto vektorov  $\vec{E}, \vec{B}$  je výhodnejšie pracovať s tzv. elektromagnetickými potenciálmi  $\vec{A}, U$ , pre ktoré platí  $\vec{E} = -\vec{\nabla}U - \partial\vec{A}/\partial t$  a  $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ , kde  $\vec{\nabla} = (\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z})$ . V reči týchto potenciálov

vieme napísať aj hamiltonián v tvare

$$h = \frac{1}{2m}(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{r}))^2 + eU(\vec{r})$$

kde  $e$  je náboj elektrónu a  $c$  je rýchlosť svetla vo vákuu. Po prekvantovaní, t.j.  $\vec{A}[\psi(\vec{r})] = \vec{A}(\vec{r})\psi(\vec{r})$  a  $\vec{P}[\psi(\vec{r})] = -i\hbar\vec{\nabla}\psi(\vec{r})$ , dostaneme operátor zodpovedajúci kvantovému Hamiltoniánu pre nabitú časticu v elektromagnetickom poli

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 - \frac{i\hbar e}{2mc}\vec{\nabla} \cdot \vec{A} - \frac{i\hbar e}{2mc}\vec{A} \cdot \vec{\nabla} - \frac{e^2}{2mc^2}\vec{A}^2 + U(r).$$

## 7.2 Atóm vodíka v konštantnom magnetickom poli

V atóme vodíka je elektrické pole budené kladne nabitým jadrom a tvoriace potenciál  $U = U(r) = -k/r^2$ . Uvažujme navyše magnetické pole nasmerované v smere osi  $z$ , t.j.  $\vec{B} = (0, 0, B)$ . Takejto voľbe zodpovedá elektromagnetický potenciál  $\vec{A} = (-\frac{1}{2}By, \frac{1}{2}Bx, 0)$ . Dosadíme takéto polia do Hamiltoniánu a dostaneme

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 - \frac{i\hbar e}{2mc}B\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) + \frac{e^2}{8mc^2}B^2(x^2 + y^2) + U(r) = H_0 - \frac{i\hbar e}{2mc}B\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) + \frac{e^2}{8mc^2}B^2(x^2 + y^2)$$

kde sme označili ako  $H_0$  Hamiltonián atómu vodíka, ktorý sme mali, ak sme nemali zapnuté vonkajšie magnetické pole. Posledný člen v tomto Hamiltoniáne zanedbáme, pretože uvažujeme iba malé magnetické polia a tento člen je veľmi malý oproti ostatným. Striktne vzaté to nie je vôbec kóšer, čo sa týka vlastných stavov. Nás však budú zaujímať iba vlastné energie, t.j. kladieme otázku: ako sa zmení energia atómu vodíka, ak ho vložíme do magnetického poľa? A pri takejto forme otázky je toto priblíženie veľmi dobré. V predposlednom člene rozoznáme operátor priemetu momentu hybnosti do osi  $z$ , t.j.  $L_z = -i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x})$ . Ak uvážime obidva tieto fakty, tak môžeme napísať

$$H = H_0 + \frac{eB}{2mc}L_z.$$

Vypočítať vlastné hodnoty energie takéhoto Hamiltoniánu však nie je zložité, pretože vieme, že  $[H_0, L_z] = 0$ . Aplikovaním celého Hamiltoniánu na vlastný stav  $|\psi_{nlm}\rangle$  dostaneme

$$H|\psi_{nlm}\rangle = H_0|\psi_{nlm}\rangle + \frac{eB}{2\mu c}L_z|\psi_{nlm}\rangle = (E_n + \frac{eB\hbar m}{2\mu L})|\psi_{nlm}\rangle$$

kde sme použili vlastnosti operátorov  $H_0, L_z$  a hmotnosť sme si označili ako  $\mu \equiv m$ , pretože písmenko  $m$  je obsadené magnetickým kvantovým číslom. Zistili sme, že vlastné hodnoty energie okrem od hlavného kvantového čísla  $n$  závisia už aj od veľkosti priemetu momentu hybnosti do smeru daného magnetickým polom, t.j.  $E_{nm} = -13.6 \text{ eV}/n^2 + (eB/2\mu c)m$ .

Tento výsledok znamená, že spektrum vodíka v magnetickom poli je vo všeobecnosti iné ako spektrum vodíka bez magnetického poľa. Tento efekt je známy ako Zeemanov jav. Pozorujeme, že namiesto jednej energetickej hladiny, je zrazu energetických hladín viac. Pre  $n = 1$  máme stále iba jednu hladinu, ale napríklad už pre  $n = 2$  máme až tri hladiny namiesto jednej. Degenerovanosť atómu vodíka v magnetickom poli je teda oveľa menšia. Odborne hovoríme o tzv. štiepení energetických hladín, v tomto prípade v dôsledku existencie vonkajšieho magnetického poľa.

## 7.3 Spin

Experimenty s magnetickými poliami však ukázali aj trochu iné štiepenie a pozoroval sa tzv. anomálny Zeemanov jav. Pozorovalo sa štiepenie aj energetickej hladiny pre  $n = 1$ . Presnejšie, pozorovalo sa, že každá jedna hladina sa „symetricky“ rozpadla na dve ďalšie. Pri anomálnom Zeemanovom jave máme energie

$$E = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2} + \frac{e\hbar B}{2\mu c}(m \pm 1)$$

Akým spôsobom vysvetlí tento fakt?

Vieme, že vlastné stavy  $|\psi_{nlm}\rangle$  sú navzájom ortogonálne a navyiac tvoria úplnú bázu celého Hilbertovho priestoru (Lebegovskyy integrovateľných) funkcií, t.j. každý stav sa dá vyjadriť ako superpozícia stavov  $|\psi_{nlm}\rangle$ . Pri štiepení nám však vznikajú dve nové hladiny pre každú jednu pôvodnú. Stav zodpovedajúce týmto hladinám však musia byť (a aj sú) navzájom ortogonálne. My ale už v našom Hilbertovom priestore nemáme miesto pre nové ortogonálne stavy. Musíme preto Hilbertov priestor atómu vodíka (elektrónu) rozšíriť. Anomálny Zeemanov jav nám hovorí, že počet stavov sa zdvojnásobuje, keďže každá z hladín sa štiepi na dve nové. Formálne si takýto nový priestor zapíšeme ako  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_0 = \mathcal{H}_0 \otimes \mathbf{C}^2$ , kde  $\mathcal{H}_0$  označuje pôvodný Hilbertov priestor.

V ďalšej časti si povieme, ako správne popisovať zložený kvantový systém, t.j. napríklad systém zložený z dvoch častíc. Teraz si iba povieme, že tým správnym pravidlom je tenzorový súčin pôvodných Hilbertovych priestorov, t.j. ak máme dva systémy s  $\mathcal{H}_A$  a  $\mathcal{H}_B$ , tak výsledný systém je popísaný objektami (stavy, merania, dynamika) vybudovanými na priestore  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ . Na základe tejto analógie vidíme, že elektrón akoby obsahoval ešte akýsi dvojrozmerný podsystem popísaný Hilbertovým priestorom  $\mathbf{C}^2$ . A tento vnútorný rozmer sa nazýva spinom. Nie je to nič výnimočné a každá častica má akýsi spin. Jediný rozdiel je v dimenzii, t.j. pre rôzne častice je dimenzia vnútorného Hilbertovho priestoru rôzna. Spin častice je jednou z jej základných charakteristík podobne ako náboj, alebo hmotnosť.

To, že spin úzko súvisí s momentom hybnosti nám naznačuje aj samotný anomálny Zeemanov jav, keďže tento efekt štiepenia hladín súvisí s momentom hybnosti ako takým. Z tohoto pohľadu je spin častice akýmsi vnútorným, resp. vlastným momentom hybnosti. Niekedy sa zvykne interpretovať ako akási rotácia samotnej častice, akoby okolo vlastnej osi. Takáto predstava nie je úplne zlá, ale fyzikálne má mnoho nedostatkov. Akákoľvek snaha chápať spin častice ako mechanickú vlastnosť, resp. ako kvantový analóg nejakej klasickej vlastnosti, vedie ku viacerým otázkam. Spin je skutočne čisto kvantovou vlastnosťou častice a nepodobá sa na nič, s čím by sme sa stretli v klasickej fyzike.

Áká je veľkosť spinu, t.j. vlastného momentu hybnosti? To, čo je zaujímavé je, že spin akejkoľvek častice je buď poločíselný, alebo celočíselný násobok Planckovej konštanty. Pozrime sa aká je jeho veľkosť pre elektrón. Operátor spinu je lineárnym operátorom na dvojrozmernom Hilbertovom priestore, t.j. ide o maticu  $2 \times 2$ .

Veľkosť spinu elektrónu bola určená na základe niekoľkých experimentov a platí, že priemet spinu do ľubovoľnej osi je  $\pm\hbar/2$ . Nepôjdeme do detailov jednotlivých experimentov, ale prijmeme tento údaj ako fakt. Podobne sme prijali aj vedomosť o náboji elektrónu, alebo jeho hmotnosti. Súvislosť momentu hybnosti a spinu znamená, že pre operátory spinu by mali platiť podobné vzťahy ako pre moment hybnosti. Výsledky anomálneho Zeemanovho efektu, ktoré sme tu popísali totižto nezávisia od smeru magnetického poľa. Akýkoľvek smer zvolíme, štiepenie je vždy také isté. Spin sa v tomto správa presne tak isto ako „normálny“ moment hybnosti. Operátory momentu hybnosti sú plne určené svojimi komutačnými vzťahmi, t.j.

$$\begin{aligned} L_x L_y - L_y L_x &= i\hbar L_z \\ L_y L_z - L_z L_y &= -i\hbar L_x & \Leftrightarrow & [L_i, L_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} L_k \\ L_x L_z - L_z L_x &= i\hbar L_y \end{aligned}$$

kde  $\varepsilon_{ijk}$  je úplne antisymetrický tenzor, t.j. nulový ak aspoň dva indexy majú rovnaké hodnoty, a inak  $\varepsilon_{123} = \varepsilon_{312} = \varepsilon_{231} = 1$ ,  $\varepsilon_{213} = \varepsilon_{321} = \varepsilon_{132} = -1$ . Táto analógia nám nielen pomôže nájsť operátory spinu, ale aj jeho veľkosť.

Naším cieľom je nájsť také  $2 \times 2$  matice, ktoré spĺňajú horeuvedené komutačné vzťahy. Vieme, že operátor priemetu spinu do ľubovoľnej osi  $S_j$  má vlastné hodnoty  $\pm w$ , t.j. platí  $S_j^2 = w^2 I$ . Zvolíme ako bázu Hilbertovho priestoru vlastné stavy operátora  $S_z$ , t.j.

$$S_z = \begin{pmatrix} w & 0 \\ 0 & -w \end{pmatrix}.$$

Počítajme komutátor  $S_z$  a ľubovoľného z operátorov  $S_x, S_y$  zapísaného vo všeobecnom tvare využijúc  $S_j = S_j^\dagger$  a  $\text{Tr} S_j = 0$

$$\begin{pmatrix} w & 0 \\ 0 & -w \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ b^* & -a \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} a & b \\ b^* & -a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w & 0 \\ 0 & -w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} wa & wb \\ -wb^* & wa \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} wa & -wb \\ wb^* & wa \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 2wb \\ -2wb^* & 0 \end{pmatrix}$$

Posledná rovnosť nám hovorí, že

$$i\hbar S_x = \begin{pmatrix} 0 & 2wb \\ -2wb^* & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow S_x = \frac{2w}{i\hbar} \begin{pmatrix} 0 & b \\ -b^* & 0 \end{pmatrix}$$

a podobne aj  $S_y$ . Kedže má platiť  $S_x^2 = w^2 I$ , tak dostaneme

$$S_x^2 = \frac{4w^2}{\hbar^2} \begin{pmatrix} |b|^2 & 0 \\ 0 & |b|^2 \end{pmatrix} = w^2 I$$

kde posledná rovnosť platí vtedy a len vtedy, ak  $4w^2|b|^2/\hbar^2 = w^2$ , t.j.  $|b| = \hbar/2$ . Môžeme teda napísať

$$S_x = -iw \begin{pmatrix} 0 & e^{i\alpha} \\ -e^{-i\alpha} & 0 \end{pmatrix} \quad S_y = -iw \begin{pmatrix} 0 & e^{i\beta} \\ -e^{-i\beta} & 0 \end{pmatrix}.$$

Teraz spočítajme komutátor  $[S_x, S_y] = i\hbar S_z$

$$S_x S_y - S_y S_x = 2iw^2 \begin{pmatrix} \sin(\alpha - \beta) & 0 \\ 0 & -\sin(\alpha - \beta) \end{pmatrix} = i\hbar w \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = i\hbar S_z$$

Aby platila posledná rovnosť, tak nutne  $w = \hbar/2$  a  $\alpha - \beta = \pi/2$ . Štandardná voľba operátorov spinu je

$$S_x = \begin{pmatrix} 0 & \hbar/2 \\ \hbar/2 & 0 \end{pmatrix} \quad S_y = \begin{pmatrix} 0 & -i\hbar/2 \\ i\hbar/2 & 0 \end{pmatrix} \quad S_z = \begin{pmatrix} \hbar/2 & 0 \\ 0 & -\hbar/2 \end{pmatrix}$$

Spinové operátory vieme zapísať pomocou tzv. Pauliho matíc  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  pomocou vzťahu  $S_j = \frac{\hbar}{2}\sigma_j$  for  $j = x, y, z$ .  
Celkový čistý stav elektrónu teda vieme popísať ako súčin

$$|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix},$$

čo je najvšeobecnejším objektom celého Hilbertovho priestoru, t.j. v podstate ide o dve vlnové funkcie zodpovedajúce dvom rôznym komponentám spinu. Vráťme sa späť k atómu vodíka. Hamiltonián atómu vodíka v konštantnom magnetickom poli v smere osi  $z$  aj so spinom vyzerá nasledovne

$$H = \left( H_0 + \frac{eB}{2\mu c} L_z \right) I + \frac{eB\hbar}{2\mu c} \sigma_z = \begin{pmatrix} H_0 & 0 \\ 0 & H_0 \end{pmatrix} + \frac{eB}{2\mu c} \begin{pmatrix} L_z + \hbar & 0 \\ 0 & L_z - \hbar \end{pmatrix}.$$

Vlastné stavy sú potom indexované štvoricou indexov  $n, l, m, s$ , kde  $s = \pm \frac{1}{2}$  sú hodnoty spinu, konkrétne

$$|\psi_{nlm, s=+1/2}\rangle = \begin{pmatrix} \psi_{nlm}(\vec{r}) \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{a} \quad |\psi_{nlm, s=-1/2}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_{nlm}(\vec{r}) \end{pmatrix}$$

s energiami

$$E_{nlms} = \frac{-13.6\text{eV}}{n^2} + \frac{eB}{2\mu c} (m + 2s).$$

## 7.4 Stern-Gerlachov experiment

Tento experiment meria spin častíc tak, že zisťuje ako sa vychylujú v nehomogénnom magneticnom poli...

## 7.5 Kvantová fyzika spinu – kvantový bit

V istom zmysle je spin elektrónu úplne nezávislým kvantovým objektom a vieme k nemu individuálne pristupovať. Ak nachvíľu zabudneme na priestorové vlastnosti elektrónu, tak môžeme elektrón brať iba ako dvojrozmerný priestor, ktorý zodpovedá jeho spinu. Dvojrozmerný Hilbertov priestor popisuje ten najmenší možný kvantový objekt.

Stavy takéhoto systému sú matice hustoty, t.j.  $2 \times 2$  matice, ktoré sú pozitívne a majú jednotkovú stopu. Pre všeobecnú maticu  $A$  sú vlastné hodnoty dané vzťahom

$$\lambda_{\pm} = \frac{1}{2}(\text{Tr}A \pm \sqrt{[\text{Tr}A]^2 - 4\det A}).$$

Pre stavy teda dostávame podmienku

$$0 \leq \lambda_{\pm} = \frac{1}{2}[1 \pm \sqrt{1 - 4\det \varrho}] \leq 1,$$

t.j.  $0 \leq 1 - 4\det \varrho \leq 1$ , alebo

$$0 \leq \det \varrho \leq 1/4.$$

Ak napíšeme stav v tvare

$$\varrho = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1+z) & \frac{1}{2}(x-iy) \\ \frac{1}{2}(x+iy) & \frac{1}{2}(1-z) \end{pmatrix},$$

tak dostávame podmienku  $0 \leq x^2 + y^2 + z^2 \leq 1$  a stav vieme zapísať pomocou Pauliho matíc nasledovne

$$\varrho = \frac{1}{2}(I + \vec{r} \cdot \vec{\sigma})$$

t.j. stavy tvoria guľu s jednotkovým polomerom. Táto guľa sa zvykne nazývať Blochova sféra. Najvšeobecnejší čistý stav je daný podmienkou  $\text{Tr} \varrho^2 = 1$ . Trochu si pocvičíme a zistíme si, ktoré stavy (body Blochovej sféry) sú čisté. Využijeme veľmi užitočnú identitu

$$\sigma_j \sigma_k = \delta_{jk} I + i \varepsilon_{jkl} \sigma_l.$$

Počítajme

$$1 = \text{Tr} \varrho^2 = \frac{1}{4} \text{Tr}[(I + \vec{r} \cdot \vec{\sigma})(I + \vec{r} \cdot \vec{\sigma})] = \frac{1}{4}(\text{Tr} I + \text{Tr}(\vec{r} \cdot \vec{\sigma})(\vec{r} \cdot \vec{\sigma})) = \frac{1}{4}(1 + |\vec{r}|^2) \text{Tr} I,$$

čo je splnené iba ak  $|\vec{r}|^2 = 1$ , t.j. norma Blochovho vektora  $\vec{r}$  je jednotková. Výsledkom teda je, že čisté stavy nám úplne zaplňajú hranicu (povrch) Blochovej sféry.

## 8 EPR paradox

Kvantová fyzika, ktorú sme si doteraz popisovali bola kvantová fyzika jedného systému, resp. jedinej častice. Ako však vyzerá priestor stavov, meraní a dynamika systému zloženého z viacerých častíc? Prináša tento popis niečo nové, alebo ide iba o v istom zmysle triviálny popis zložených systémov pomocou popisovania jednotlivých pod-systémov? V tejto časti sa pre jednoduchosť pozrieme na systémy dva a aby sme to mali ešte jednoduchšie, tak pri počítaní budeme predpokladať, že systémy sú iba dvojrozmerné, t.j. máme akoby dva spiny  $1/2$ , alebo dva polarizované fotóny.

### 8.1 Tenzorový súčin

Základom konštrukcie kvantového popisu je pre nás Hilbertov priestor. Ak systému priradíme jeho Hilbertov priestor, tak poznáme viacmenej všetko. Hamiltonián nám potom ešte pomôže vyšpecifikovať konkrétny časový vývoj. Otázka teda znie, že ak máme dva systémy popísané Hilbertovými priestormi  $\mathcal{H}_A$  a  $\mathcal{H}_B$ , tak ako skonštruovať ich spoločný Hilbertov priestor  $\mathcal{H}_{AB}$ ? Akonáhle budeme mať tento priestor, tak kvantová fyzika nám hovorí ako vyzerajú stavy (matice hustoty), ako vyzerajú merania (hermitovské operátory) a aj aká je dynamika (unitárne operátory).

Skúsme zodpovedať otázku, aká je dimenzia Hilbertovho priestoru  $\mathcal{H}_{AB}$ , t.j.  $d_{AB} = \dim \mathcal{H}_{AB}$ . Označme  $d_A = \dim \mathcal{H}_A$  a  $d_B = \dim \mathcal{H}_B$ . Nech  $|e_a\rangle$  sú vektory ortonormálnej bázy priestoru  $\mathcal{H}_A$  a  $|f_\alpha\rangle$  sú vektory ortonormálnej bázy  $\mathcal{H}_B$ . Dva ortogonálne stavy fyzikálne zodpovedajú tomu, že tieto stavy vieme odlišiť jediným meraním. Celá ortonormálna báza vlastne definuje meranie, ktoré perfektne odlišuje medzi týmito stavmi, t.j. pomocou jediného merania viem povedať, ktorý zo stavov bázy mám. Povedzme, že tieto bázy sú definované meraniami  $M_A = \sum_a a |e_a\rangle \langle e_a|$  a  $M_B = \sum_\alpha \alpha |f_\alpha\rangle \langle f_\alpha|$ . Ak teda vykonávame tieto merania na dvoch systémoch, tak spolu

máme  $d_A \times d_B$  rôznych výsledkov, ktoré musia zodpovedať takému istému počtu ortogonálnych stavov. Zistili sme teda, že prinajmenšom  $d_{AB} \geq d_A d_B$ . V prípade, že  $d_{AB} = d_A d_B$ , tak potom bázové stavy nového Hilbertovho priestoru sú dvojice  $|e_a, f_\alpha\rangle$ .

Ukazuje sa, že konzistentným spôsobom sa dá na zavedenie Hilbertovho priestoru  $\mathcal{H}_{AB}$  použiť operácia tenzorového súčinu Hilbertových priestorov,  $\mathcal{H}_{AB} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ . V tomto prípade  $d_{AB} = d_A d_B$ . Okrem špecifikovania rozmeru je ešte potrebné nadefinovať ako v takejto konštrukcii vyzerá skalárny súčin. Definuje sa prirodzene pomocou existujúcich skalárnych súčinov na podsystemoch  $\mathcal{H}_A$  a  $\mathcal{H}_B$ , t.j.

$$\langle \psi_A, \phi_B | \psi'_A, \phi'_B \rangle = \langle \psi_A | \psi'_A \rangle \langle \phi_B | \phi'_B \rangle$$

Všeobecný čistý stav je z definície prvkom Hilbertovho priestoru  $\mathcal{H}_{AB}$  a dá sa vyjadriť v báze nasledovne

$$|\Psi_{AB}\rangle = \sum_{a,\alpha} c_{a\alpha} |e_a\rangle \otimes |f_\alpha\rangle.$$

Budeme používať značenie  $|\psi_A, \phi_B\rangle \equiv |\psi_A\rangle \otimes |\phi_B\rangle \equiv |\psi\rangle|\phi\rangle \equiv |\psi\phi\rangle$ . Tenzorový súčin by nemalo byť nič nové, ale ak áno, tak detaily sa dajú pozrieť v ľubovolnej knižke z kvantovej mechaniky, prípadne na webe. To, čo je podstatné sme si povedali. Dostali sme sa k odpovedi na otázku: ako popisujeme zložený systém? Odpoveď: používame konštrukciu tenzorového súčinu z pôvodných Hilbertových priestorov. V ďalšom sa pozrieme, čo všetko v takomto novom priestore môžeme nájsť. Zameriame sa výlučne na stavy zloženého systému. Merania, ako aj dynamika zloženého systému je predmetom pokročilejšieho kurzu kvantovej teórie.

## 8.2 Stav zloženého systému

Stavy sú definované ako matice hustoty  $\Omega$ , t.j. pozitívne operátory  $\Omega$  na priestore  $\mathcal{H}_{AB}$  s jednotkovou stopou ( $\text{Tr}\Omega = \sum_{a,\alpha} \langle e_a f_\alpha | \Omega | e_a f_\alpha \rangle = 1$ ). Zameriame sa iba na čisté stavy a ich vlastnosti. Základnou je otázka, či každý čistý stav je tenzorovým súčinom čistých stavov, alebo nie. Inými slovami platí vždy, že  $|\Omega_{AB}\rangle = |\psi_A\rangle \otimes |\phi_B\rangle$ ? Všeobecne vieme (vďaka princípu superpozície) napísať čistý tvar dvoch spinov v tvare

$$|\Omega_{AB}\rangle = x|00\rangle + y|01\rangle + z|10\rangle + q|11\rangle,$$

kde sme bázové stavy  $\mathcal{H}_A, \mathcal{H}_B$  označili  $|0\rangle, |1\rangle$ . Všeobecné čisté stavy jednotlivých spinov sú  $|\psi_A\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$  a  $|\phi_B\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ . Porovnaním stavu  $|\psi\rangle \otimes |\phi\rangle$  a  $|\Omega$  dostaneme sústavu rovníc

$$x = a\alpha \quad y = a\beta \quad z = b\alpha \quad q = b\beta.$$

Vieme pre ľubovoľné  $x, y, z, q$  vždy vybrať nejaké  $a, b, \alpha, \beta$ ? Skúsme prípad, keď  $x, y, z$  sú nenulové a  $q = 0$ . Z toho vidíme, že alebo  $b = 0$ , alebo  $\beta = 0$ . V takomto prípade však nutne  $a$  a  $y$ , alebo  $z$  je nulové. To znamená, že horeuvedená sústava nemá riešenie vždy. Stav  $|\Omega_{AB}\rangle$ , ktorý má práve tri nenulové koeficienty nevieme napísať ako tenzorový súčin dvoch čistých stavov  $|\psi_A\rangle, |\phi_B\rangle$ . Existujú teda stavy, pre ktoré  $|\Omega_{AB}\rangle \neq |\psi_A\rangle \otimes |\phi_B\rangle$ . Aké majú takéto stavy vlastnosti, resp. akej fyzikálnej situácii zodpovedajú, čo za fyziku popisujú? Ako máme takýmto stavom vôbec rozumieť? Mohlo by sa kludne stať, že takéto stavy sa jednoducho zakážu, pretože sa v prírode nevyskytujú. Sme v situácii, že napriek tomu, že vieme o tom, že máme dve častice, tak nevieme hovoriť o týchto časticách jednotlivo, pretože poznáme iba celkový stav. Preto je namieste otázka, či vôbec vieme hovoriť o jednej z častíc bez toho, aby sme vedeli niečo o existencii tej druhej častice. Preto je namieste otázka: vieme hovoriť o stave každého spinu oddelene? Ak nie, tak ako potom ďalej? Ak áno, tak akými matematickými objektami sa popisujú tieto stavy, resp. aké majú vlastnosti a ako sa s nimi narába?

Našťastie nejde o žiadnu krízu a nie je treba hľadať zdôvodnenia, prečo takéto stavy neexistujú, t.j. prečo by mal byť princíp superpozície pre stavy dvoch fyzikálnych systémov akosi obmedzený. Ako sami uvidíme, tak odpoveď je naopak jednou z veľmi šťastných náhod. Šťastná preto, lebo neprináša žiadnu novinku do matematického popisu kvantovej fyziky. Pozrime sa ako by sa dali popísať vlastnosti jednotlivých podsystemov, t.j. ako určiť ich stavy. Okrem priestoru stavov nám tenzorový súčin umožňuje pracovať aj so samozdruženými operátormi na Hilbertovom priestore  $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ . Keďže máme dva systémy, tak v princípe máme k dispozícii až tri typy meracích prístrojov (fyzikálnych veličín): merania na systéme  $A$ , merania na systéme  $B$  a spoločné merania na oboch systémoch. Merania výlučne iba na systéme  $A$  majú tvar  $M = M_A \otimes I_B$ , kde  $M_A$  popisuje merací prístroj na systéme  $A$ . Táto



vlastnosť je zrejماً jednak z interpretácie vlastných hodnôt operátora ako hodnôt, ktoré v experimente pozorujeme, a jednak zo stredných hodnôt, t.j. pre  $|\Omega_{AB}\rangle = |\psi_A\rangle \otimes |\phi_B\rangle$  platí

$$\langle M \rangle_{\Omega_{AB}} = \langle M_A \rangle_{\psi_A} \langle I \rangle_{\phi_B} = \langle M_A \rangle_{\psi_A}. \quad (5)$$

Ako príklad sme použili stav, v ktorom je zrejماً, čo tieto typy meraní znamenajú. Učene hovoríme o lokálnych, alebo globálnych meraniach, t.j. takých, ktoré nevieme napísať ako  $M_A \otimes I_B$ . Globálne merania nám pomáhajú zistiť globálne vlastnosti stavu celého systému.

Zrátajme strednú hodnotu merania  $M$  vo všeobecnom čistom stave  $|\Omega_{AB}\rangle$ , t.j.

$$\begin{aligned} \langle M \rangle_{\Omega_{AB}} &= \langle \Omega | M_A \otimes I_B | \Omega \rangle = \text{Tr}[\Omega(M_A \otimes I_B)] \quad (6) \\ &= \sum_{jk} \langle j, k | \Omega(M_A \otimes I_B) | j, k \rangle = \sum_j \langle j_A | \left[ \sum_k \langle k_B | \Omega(M_A \otimes I_B) | k_B \rangle \right] | j_A \rangle \\ &= \sum_j \langle j_A | \left[ \sum_k \langle k_B | \sum_{m,n,r,s} \Omega_{mn,rs} |m\rangle_A \langle n| \otimes |r\rangle_B \langle s| (M_A \otimes I_B) |k_B\rangle \right] | j_A \rangle \\ &= \sum_{m,n,r,s} \sum_{j,k} \Omega_{mn,rs} \langle j | m \rangle \langle k | r \rangle \langle n | M_A | j \rangle \langle s | k \rangle \\ &= \sum_j \langle j | \left[ \sum_{k,m,n,r,s} \Omega_{mn,rs} \delta_{rk} \delta_{ks} |m\rangle \langle n| \right] M_A | j \rangle \\ &= \sum_j \langle j | \left[ \sum_{k,m,n} \Omega_{mn,kk} |m\rangle \langle n| \right] M_A | j \rangle = \text{Tr}_A[\omega M_A] \quad (7) \end{aligned}$$

kde sme definovali operátor  $\omega = \sum_{k,m,n} \Omega_{mn,kk} |m\rangle \langle n|$  pôsobiaci iba na podsysteme  $A$ . Tento operátor vieme získať zo stavu  $|\Omega_{AB}\rangle$  pomocou tzv. operácie čiastočnej stopy, t.j.  $\omega = \text{Tr}_B \Omega_{AB} = \sum_k \langle k | \Omega_{AB} | k \rangle$ , ktorej výsledkom je operátor na systéme  $A$ . Uvedený výpočet ukazuje, že samotný operátor  $\omega$  nijako nezávisí od výberu merania na podsysteme  $A$ . Navyše samotné  $\omega$  nám umožňuje určiť strednú hodnotu, ako aj pravdepodobnostnú distribúciu výsledkov ľubovoľného lokálneho merania na systéme  $A$ . Pravdepodobnosť výsledku  $k$  je určená pomocou operátora  $F_k \otimes I$  ako  $\text{Tr}[\Omega_{AB} F_k \otimes I] = \text{Tr}_A \omega F_k$ . Túto rovnosť dokážeme úplne presne rovnakým výpočtom ako v prípade strednej hodnoty pre operátor merania  $M = M_A \otimes I$ . Týmto operátor  $\omega = \text{Tr}_B \Omega_{AB}$  spĺňa základné a vlastne jediné kritérium na to, aby sme ho mohli považovať za stav podsystemu.

Konceptuálne operátor  $\omega$  popisuje úplne nový typ stavu, t.j. nejde ani o stav čistý, ani o stav, ktorý vznikol zmiešavaním. Pozrime sa teda, čo je  $\omega$  za operátor, resp. aké má vlastnosti. Zatiaľ sme predpokladali, že stav celého systému  $\Omega_{AB}$  je čistým stavom, t.j. pre komponenty platí  $\Omega_{mn,rs} = a_{mr}^* a_{ns}$ . V skutočnosti však celkový stav môže byť zmiešaný a všetko čo sme zatiaľ povedali platí. Stačí si uvedomiť, že zmiešaný stav je vždy súčtom stavov čistých a operácia čiastočnej stopy je konvexne lineárnou operáciou. Vyšetříme vlastnosti operátora  $\omega$  za predpokladu, že  $\Omega_{AB}$  je čistý, a potom uvidíme, či zmiešané stavy dávajú kvalitatívne odlišný výsledok, alebo nie. Po vykonaní čiastočnej stopy, dostávame, že  $\omega = \sum_{m,n,r} a_{mr}^* a_{nr} |m\rangle \langle n|$ . Z tohoto zápisu je hneď vidno, že operátor je hermitovský, t.j.  $\omega_{mn} = \omega_{nm}^*$ . Pre  $|\psi\rangle = \sum_j \alpha_j |j\rangle$  dostávame  $\langle \psi | \omega | \psi \rangle = \sum_{m,n,r} \alpha_m^* a_{mr}^* a_{nr} \alpha_n$ . Ak nadefinujeme komplexný vektor  $\vec{v}$  s koeficientami  $\vec{v}_r = \sum_m \alpha_m a_{mr}$ , tak  $\langle \psi | \omega | \psi \rangle = \vec{v} \cdot \vec{v} \geq 0$ . Táto nerovnosť platí pre ľubovoľné  $|\psi\rangle$ , t.j. operátor  $\omega$  je pozitívny. Priamym výpočtom overíme poslednú vlastnosť  $\text{Tr}_A \omega = \text{Tr}_A \text{Tr}_B \Omega_{AB} = \text{Tr} \Omega_{AB} = 1$ . Ak si to zhrnieme, tak operátor  $\omega$  je pozitívny operátor s jednotkovou stopou, t.j. ide o operátor, ktorý sme používali na popis všeobecného stavu aj doteraz. Taký istý záver platí aj v prípade, ak je celkový stav  $\Omega_{AB}$  zmiešaný, pretože  $\text{Tr}_B \sum_k p_k \Omega_{AB}^k = \sum_k p_k \text{Tr}_B \Omega_{AB}^k = \sum_k p_k \omega_k$ .

Otázkou ešte zostáva, či ľubovoľnú maticu hustoty  $\omega$  môžeme chápať ako stav podsystemu pre vhodne zvolený celkový stav  $\Omega_{AB}$ . Ukazuje sa, že tento stav vždy existuje a navyše vždy existuje aj čistý stav  $|\Omega_{AB}\rangle$ , pre ktorý  $\text{Tr}_B |\Omega_{AB}\rangle \langle \Omega_{AB}| = \omega$ . Stav  $|\Omega_{AB}\rangle$  nazývame *purifikáciou* stavu  $\omega$ . Všeobecnú maticu hustoty vieme jednoznačne vyjadriť v báze jej vlastných vektorov nasledovne  $\omega = \sum_j \lambda_j |\phi_j\rangle \langle \phi_j|$ . Zvoľme ľubovoľnú bázu  $|\chi_k\rangle$  systému  $\mathcal{H}_B$  s dimenziou  $d = \dim[\text{span}\{|\phi_j\rangle\}]$ . Potom stav  $|\Omega_{AB}\rangle = \sum_j \sqrt{\lambda_j} |\phi_j\rangle \otimes |\chi_j\rangle$  je purifikáciou stavu podsystemu  $\omega$ , t.j.

$\omega = \text{Tr}_B |\Omega_{AB}\rangle \langle \Omega_{AB}|$ . Z tejto konštrukcie vidno, že purifikácia nie je jednoznačná, pretože môžeme bázu systému  $\mathcal{H}_B$  zvoliť úplne ľubovoľne.

Ponaučenie: matice hustoty popisujú dve konceptuálne odlišné, ale fyzikálne neodlíšiteľné situácie: *i*) zmiešavanie stavov, *ii*) redukovaný stav podsystemu, tzv. *elementárna zmes*.

### 8.3 Princíp nerozlíšiteľnosti častíc

Elementárne častice (elektróny, protóny, neutrína, atď.) sú navzájom identické, t.j. majú úplne rovnaké charakteristiky ako pokojová hmotnosť, elektrický náboj a iné. Vôbec ničím sa nelíšia. V klasickej fyzike v istom priblížení tiež môžeme hovoriť o identických objektoch (autá tej istej značky, závažia tej istej hmotnosti, ...). Napriek zdanlivej podobnosti týchto situácií, v prípade častíc a prípade klasických identických objektov sú diametrálne odlišné. A tá odlišnosť je ďalším nezávislým princípom kvantovej fyziky s názvom princíp nerozlíšiteľnosti.

Tento princíp je nezávislým, ale predsa len sa istá príčina takéhoto princípu dá vidieť už pomocou známych pravidiel kvantového sveta. Klasickým objektom vieme priradiť ich identitu, t.j. vieme ich v istom časovom okamihu pomenovať a potom v ľubovoľnom inom čase ich vieme znova identifikovať pomocou priradených mien, na základe ich minulosti. Vieme, že ak máme dve úplne rovnaké autá (jedno pôvodne idúce z mesta A do mesta B a druhé naopak), a nenastane prípad, že by sme principiálne nevedeli povedať, ktoré auto prišlo, do ktorého mesta. Vždy sa to dá na základe ich minulosti vystopovať. Pre dva rovnaké kvantové objekty to však už také zrejme nie je. Ako už niekoľkokrát, problémom je opäť neexistencia pojmu trajektórie kvantovej častice. Klasická trajektória je informáciou, ktorá nám umožňuje pôvod áut vystopovať. Trajektória potrebuje presné zadanie polohy a hybnosti súčasne, avšak princíp neurčitosti nám hovorí, že kvantový stav s takýmito vlastnosťami neexistuje.

Teraz si predstavme, aký je dôsledok tohoto faktu pre dva identické kvantové objekty. Pri meraní vlastnosti jediného systému nevieme, na ktorom sme meranie uskutočnili. Nevieme napríklad povedať, či ide o časticu, ktorú sme zmerali aj predtým, alebo nie. Podobne aj Hamiltonián systému musí byť taký, že nevníma identitu jednotlivých častíc. K matematickému vyjadreniu princípu nerozlíšiteľnosti nám slúži tzv. operátor zámény častíc  $P$ , ktorý pôsobí nasledovne  $P|\Omega_{AB}\rangle = |\Omega_{BA}\rangle$ . Dvojitá zámena stav nemení, t.j.  $P^2 = I$ , a teda  $P$  má dve vlastné hodnoty, a sice  $\pm 1$ . Vlastné stavy sú dvojakého druhu, alebo zodpovedajú symetrickým, alebo antisymetrickým stavom (voči zámene). Uvedené dva fakty pre merania a dynamiku vieme pomocou operátora zapísať ako nasledovné podmienky  $[P, M] = 0$  a  $[P, H] = 0$ , t.j. merania, podobne ako aj hamiltonián komutujú s operátorom zámény. Znamená to, že meranie merajúce vlastnosť jedného objektu má tvar  $M = \frac{1}{2}[M_A \otimes I + I \otimes M_A]$ . Merania typu  $M = M_A \otimes I$  sú zakázané, pretože v sebe obsahujú znalosť o identite častice, na ktorej sa meranie uskutočňuje. Vývoj, ktorý komutuje s operátorom zámény nemení vlastnú hodnotu operátora zámény, t.j. operátor zámény je integrálom pohybu, resp. je zachovávacou sa veličinou. Preto symetrické stavy zostávajú symetrickými a podobne antisymetrické. Symetrickosť, resp. antisymetrickosť, je dôležitou charakteristikou elementárnych častíc. Premiešanie týchto vlastností samozrejme nie je možné, pretože dynamika plne rešpektuje operátor zámény.

Záver je taký, že systém zložený z dvoch identických častíc nie je iba jednoduchým tenzorovým súčinom Hilbertových priestorov popisujúcich jednotlivé častice, t.j.  $\mathcal{H}_{AB} \neq \mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$ . Častice sú popísané buď symetrickou časťou Hilbertovho priestoru, alebo antisymetrickou časťou. Konkrétny výber súvisí so spinom častice. Spin, ako sme si povedali, je akýmsi vnútorným stupňom voľnosti (priestorom) každej častice. Vnútorný rozmer môže tvoriť ľubovoľne rozmerný Hilbertov priestor. Častice s párnorozmernými Hilbertovými priestormi spinu sú popísané antisymetrickými stavmi. Častice s nepárnou dimenziou symetrickými stavmi. Vo fyzike má operátor spinu buď celočíselné, alebo poločíselné hodnoty. Vždy je však rozdiel medzi týmito hodnotami spinu rovnaký, t.j. celočíselné hodnoty sú vždy  $0, \pm 1, \pm 2, \dots$ , naproti tomu poločíselné spiny majú hodnoty  $\pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{5}{2}, \dots$ . Rôznym hodnotám prislúchajú navzájom ortogonálne stavy, t.j. dimenzia pre celočíselný spin je nepárnorozmerná a pre poločíselný spin je párnorozmerná. Častice s celočíselným spinom nazývame bozóny (fotóny, gluóny, mezóny, W bozóny, atď.) a častice s poločíselným spinom nazývame fermióny (elektróny, protóny, neutróny, quarky, neutrína, atď.).

Dôsledkom antisymetrickosti je vlastnosť známa ako Pauliho vylučovací princíp. Antisymetria totižto znamená, že fermióny nemôžu byť súčasne v tom istom čistom stave. Takýto stav je totiž nutne symetrický. Princíp nerozlíšiteľnosti má aj mnoho iných dôležitých a zaujímavých dôsledkov, ktoré však patria do pokročilejších kurzov a z pohľadu kvantovej teórie informácie nemajú veľký význam. Ak popisujeme stavy pomocou matíc hustoty, tak sa nám rozdiel medzi symetrickým a antisymetrickým trochu stráca a platí, že matica hustoty je vždy symetrická. K určovaniu symetrickosti stavu  $\Omega$  nám slúži stredná hodnota operátora zámény, t.j.  $\text{Tr} P\Omega$ . Princíp nerozlíšiteľnosti v podstate znamená, že nemá veľký zmysel jednotlivá častica, ale skôr hovoríme o jednočasticových, dvoječasticových, atď. vlastnostiach častíc.

Ako príklad symetrického Hilbertovho priestoru si uvedme hypotetický príklad dvoch častíc, ktoré majú iba dva ortogonálne stavy. Hilbertov priestor  $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$  je teda štvorrozmerný. Symetrické stavy sú tvorené bázou  $|00\rangle$ ,  $|11\rangle$  a  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle)$ , t.j.  $\dim \mathcal{H}_{\text{sym}} = 3$ . Antisymetrický podpriestor je preto triviálny, t.j. jednorozmerný a reprezentovaný stavom  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle)$ . Ide samozrejme o fikciu, pretože ak celkový priestor častice je iba dvojrozmerný, tak ide o fermióny, t.j. mali by byť popísané antisymetrickým stavom, ktorý je však úplne triviálny a predstavuje fyziku nemenného objektu, ktorý nie je až tak zaujímavý. Našťastie podobne ako má každá častica spin, tak každá má aj priestorové stupne voľnosti, ktoré samy osebe tvoria nekonečne rozmerný Hilbertov priestor. Pri aplikovaní princípu nerozlíšiteľnosti treba brať do úvahy celkový Hilbertov priestor častice a symetrizovať, resp. antisymetrizovať v celom priestore. Preto napríklad spinové stupne voľnosti dvoch fermiónov môžu byť v ľubovoľnom stave z Hilbertovho priestoru  $\mathcal{H}_s \otimes \mathcal{H}_s$  ( $\dim \mathcal{H}_s = 2$ ), či už symetrickom, antisymetrickom, alebo aj bez možnosti určenia symetrickosti. Celková antisymetrizácia je potom zabezpečená priestorovými zložkami popisu celkového stavu, t.j. vlnová funkcia  $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  je antisymetrická pri zámene  $\vec{r}_1 \leftrightarrow \vec{r}_2$ .

## 8.4 Einstein-Podolsky-Rosen paradox

EPR paradox je myšlienkový experiment, v ktorom trojica autorov uvádza prípad, ktorý podľa nich znamená, že kvantová fyzika nie je úplná, t.j. nie je „vnútorne“ konzistentná. Nekonzistentnosť kvantovej teórie je založená pridaním dvoch predpokladov (lokálnosť a reálnosť), ktoré by podľa autorov mali byť splnené akoukoľvek fyzikálnou teóriou. Nejde teda v skutočnosti o vnútornú nekonzistentnosť kvantovej teórie, ale o nekonzistentnosť teórie s vlastnosťami lokálnosti a reálnosti. EPR paradox predstavuje veľmi poučné cvičenie, ktoré testuje naše chápanie kvantového sveta. Odhaľuje jednu z dôležitých vlastností kvantovej fyziky, ktorú dnes označujeme menom *kvantové previazanie*. Tento pojem zaviedol nikto iný ako Erwin Schrödinger, ale skutočne prenikol do povedomia odbornej verejnosti až vďaka kvantovej teórii informácie.

**Lokálnosť.** Žiadna lokálna operácia (meranie, interakcia, dynamika) neovplyvňuje okamžité fyzikálne charakteristiky druhého systému, t.j. žiadne „tajomné“ ovplyvňovanie systému na diaľku nie je možné.

**Reálnosť.** Ak vieme s určitou predpovedať konkrétny výsledok experimentu, tak existuje tzv. *element reality*, ktorý zodpovedá tomuto výsledku ešte pred meraním. Inými slovami, ak viem s určitou predpovedať výsledok, tak častica sa musí nachádzať vo vlastnom stave prislúchajúcom tejto vlastnej hodnote.

Podme k samotnému paradoxu. Majme dva spiny v tzv. EPR stave  $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_A \downarrow_B\rangle - |\downarrow_A \uparrow_B\rangle)$ . Obidva spiny sú priestorovo veľmi vzdialené, napr. niekoľko svetelných rokov. Predstavme si, že uskutočňujeme merania na spine  $A$ . Podľa projekčného postulátu prichádza aktom merania k tzv. kolapsu stavu, t.j. stav sa skokovo zmení. Ak meriame spin v smere osi  $z$  a nameriame, že spinu  $A$  smeruje nahor, tak automaticky vieme, že celkový stav je  $|\uparrow_A \downarrow_B\rangle$ , a teda vieme povedať ako dopadne meranie spinu v smere osi  $z$  na mieste  $B$ . Dostaneme presne opačný výsledok, t.j. spin smerujúci dolu. Taká istá perfektná antikorelácia platí nech si smery volíme akokoľvek, t.j. v oboch miestach meriame v smere  $x$ ,  $y$ , alebo hocíjakom inom smere. Inými slovami, ak nameriame, že spin  $A$  je  $\uparrow_{\vec{r}}$  v smere  $\vec{r}$ , tak spin  $B$  je  $\downarrow$  v tom istom smere  $\vec{r}$ , t.j. je v stave  $|\downarrow_{\vec{r}}\rangle_B$ . Naopak, ak je spin  $A$  smerom dolu v nejakom smere, tak spin  $B$  smeruje nahor v tom istom smere. Toto nám hovorí kvantová teória.

Teraz aplikujme podmienku reálnosti. Po meraní v smere osi  $z$  na systéme  $A$  poznáme s určitou stav systému  $B$ , resp. vieme presne ako dopadne meranie v smere  $z$  na systéme  $B$ . Preto nám podmienka reálnosti diktuje, že nutne existuje element reality ešte pred meraním na systéme  $B$ . Navyiac, keďže platí aj podmienka lokálnosti, tak tento element reality existoval ešte aj pred meraním na systéme  $A$ . Toto meranie nijakým spôsobom nemôže ovplyvniť vlastnosti systému  $B$ . Zatiaľ nemáme žiaden rozpor medzi kvantovou teóriou a oboma podmienkami. Aj keď z pohľadu kvantovej fyziky nevieme spomenuté tvrdenia potvrdiť, tak nie sú v rozpore s kvantovou teóriou. Problém nastáva, ak si uvedomíme, že si môžeme zvoliť úplne ľubovoľné meranie na systéme  $A$ , t.j. meranie v ľubovoľnom smere, napr. v smere osi  $x$ . Pri takejto voľbe prideme pomocou tých istých argumentov k záveru, že nutne existuje element reality aj pre meranie v tomto smere. Dostávame teda, že pre spin  $B$  existujú dva elementy reality: výsledok pre meranie v smere  $z$  a výsledok pre meranie v smere  $x$ . Takéto niečo je však v kvantovej teórii neprípustné, pretože to naruša princíp neurčitosti, ktorý nám hovorí, že spin môže mať presne určenú hodnotu nanajvýš v jednom smere, resp. že neexistuje taký stav, ktorý by mal presne určené hodnoty v dvoch smeroch. Dokonca môžeme vo voľbe smeru pokračovať ďalej, čím prideme k tomu, že spin  $B$  by mal mať elementy reality vo všetkých smeroch. Tu narážame, podobne ako Einstein, Podolsky a Rosen na paradox, ktorý je obsahom nekonzistentnosti kvantovej teórie z podmienkami lokálnosti a reálnosti.

Einstein od počiatku cítil neistú pôdu pod nohami kvôli náhodnosti vyskytujúcej sa v kvantovej fyzike (vraj o tom svedčí jeho výrok: „Boh nehra kocky“). EPR paradox mu umožnil dať veľmi silný argument podporujúci vnútorný rozpor teórie. Veril, že musí existovať teória, ktorá by podivné správanie kvantových systémov vysvetlila v duchu podmienok reálnosti a lokálnosti, t.j. vedela by predpovedať konkrétne výsledky a nie iba pravdepodobnosti. Vznikla myšlienka tzv. *teórie so skrytými parametrami*, ktorých neznalosť je možno principiálna, ale ich prípadná znalosť by nám presne vedela predpovedať jednotlivé výsledky. Pozorovaná náhodnosť kvantovej fyziky je iba dôsledkom toho, že nevieme skryté premenné kontrolovať a stavy, ktoré pripravujeme vykazujú pravdepodobnostnú distribúciu na skrytých parametroch, podobne ako v klasickej štatistickej fyzike, kde „skryté parametre“ sú polohy a hybnosti všetkých častíc. EPR paradox ukázal fyzikom jednak nedostatky, ale jednak skryté možnosti kvantových systémov. Existencia, resp. neexistencia stále zostávala otvorenou otázkou. Poznamenajme, že aj prípadná potencionalna existencia teórie s lokálnymi skrytými parametrami neznamená zánik kvantovej teórie ako ju poznáme, pretože táto teória ponúka rámec, ktorý pri popise experimentálnej reality veľmi dobre funguje a dokážeme pomocou neho predpovedať merateľné výsledky, aj keď iba vo forme pravdepodobností. Skryté parametre totižto možno principiálne spoznať nemôžeme, a preto nám táto teória nedáva lepšie možnosti predpovedí, ako sú tie pravdepodobnostné.

Konečné riešenie bolo nájdené bezmála 30 rokov po publikovaní EPR paradoxu poprvýkrát v *New York Times*. Tento fakt svedčí o tom, že Einstein sa stal legendou už počas jeho života. O riešení problému existencie teórie s lokálnymi skrytými parametrami si povieme na ďalšej prednáške.

## 9 Bellove nerovnosti a kvantové previazanie

Začneme schematickým zhrnutím toho, čo sme diskutovali na minulej prednáške:

- Popis viacerých častíc  $\leftrightarrow$  Tenzorový súčin  
Dôsledok: redukovaný stav podsystemu = matica hustoty. Tento fakt zaručuje, že meranie na systéme  $B$  nemení stav systému  $A$ . Vďaka tomu nie je možné ani skokovú zmenu stavu popísanú projekčným postulátom využiť k okamžitému prenosu informácie.
- Princíp nerozlíšiteľnosti  $\leftrightarrow$  Fermióny a bozóny.
- EPR paradox: lokálnosť + reálnosť je v spore s kvantovou teóriou  
Kvantová teória je neúplná teória.
- Teória so skrytými parametrami  $\Rightarrow$  deterministické predpovede výsledkov meraní, žiadne vzťahy neurčitosti  
Pozorovaná náhodnosť je iba dôsledkom neúplnej vedomosti o skrytých parametroch  $\lambda$ . Stav popisujeme ako pravdepodobnostnú distribúciu  $p(\lambda)$ .

### 9.1 Bellove nerovnosti

Elegantný test na overenie existencie teórie skrytých premenných ponúkol *John Bell* v 60-tych rokoch 20. storočia, ktorý našiel pomerne jednoduchý vzťah, ktorý musí byť splnený akoukoľvek teóriou so skrytými parametrami.

V hre, ktorú John Bell rozohral, vystupujú dvaja hráči, každý s dvoma meraniami, každé s dvoma rôznymi výsledkami, ktoré si označíme ako  $\pm 1$ . Trochu konkrétnejšie máme merania  $A, A', B, B'$  s dvojhodnotovými výsledkami označenými ako  $a, a', b, b' = \pm 1$ . Skrytý parameter  $\lambda$  určuje výsledok každého z týchto meraní, t.j.  $a, a', b, b'$  funkcionálne závisia od  $\lambda$ . Vždy však platí identita

$$(a + a')b + (a - a')b' = \pm 2. \tag{8}$$

Experiment vyzerá tak, že sa vygenerujú dva systémy, z ktorých jeden sa pošle na miesto  $A$  a druhý na miesto  $B$ . V týchto miestach si každý z experimentátorov zvolí jedno z meraní ( $A, A'$  pre experimentátora v mieste  $A$  a  $B, B'$  pre experimentátora v mieste  $B$ ) a zapíše si nameraný výsledok, t.j.  $+1$  alebo  $-1$ . Každý z nich si vytvorí tabuľku nameraných hodnôt spolu s príslušnou voľbou merania. Keď sa stretnú, tak spoločne vyhodnotia svoje dáta s tým, že určia stredné hodnoty meraní pre všetky kombinácie, t.j.  $\langle A \otimes B \rangle, \langle A \otimes B' \rangle, \langle A' \otimes B \rangle, \langle A' \otimes B' \rangle$ , kde  $\langle X \otimes Y \rangle = \frac{1}{N_{XY}} \sum_{j=1}^{N_{XY}} x_j y_j$ ,  $N_{XY}$  je celkový počet voľby merania  $X, Y$ , a  $x_j, y_j = \pm 1$  sú konkrétne namerané

výsledky v  $j$ tom meraní. Ak si označíme  $N_{XY}(x, y)$  celkový počet výsledkov  $x, y$  ( $x, y = \pm 1$ ) pri nastavení  $X, Y$  ( $X \in \{A, A'\}$ ,  $Y \in \{B, B'\}$ ), tak pomer  $N_{XY}(x, y)/N_{XY}$  predstavuje pravdepodobnosť  $p_{XY}(x, y)$  namerať dvojicu  $x, y$  pri voľbe meraní  $X, Y$ . Strednú hodnotu potom vieme napísať nasledovne

$$\langle X \otimes Y \rangle = \sum_{x=\pm 1, y=\pm 1} xy p_{XY}(x, y) = p_{XY}(1, 1) + p_{XY}(-1, -1) - p_{XY}(1, -1) - p_{XY}(-1, 1). \quad (9)$$

Pravdepodobnosti  $p_{XY}(x, y)$  sú určené pomocou distribúcie skrytých parametrov  $\pi(\lambda)$ , t.j.

Strednú hodnotu vieme zapísať pomocou distribúcie skrytých parametrov  $\pi(\lambda)$

$$\langle X \otimes Y \rangle = \sum_{\lambda} \pi(\lambda) x(\lambda) y(\lambda), \quad (10)$$

kde funkcie  $x(\lambda), y(\lambda)$  vyjadrujú deterministické predpovede výsledkov za predpokladu, že vieme hodnotu  $\lambda$ . Nadefinujeme pravdepodobnosti  $p_X(x, \lambda)$ , ktoré vyjadrujú pravdepodobnosť toho, že hodnota skrytého parametra je  $\lambda$  a my nameriame výsledok  $x$ . Keďže závislosť  $x(\lambda)$  je deterministická, tak  $p(x, \lambda) = 0$  vždy okrem prípadu  $x(\lambda) = x$ . Pomocou takto nadefinovanej distribúcie vieme napísať

$$\langle X \otimes Y \rangle = \sum_{x, y=\pm 1} \sum_{\lambda} xy \pi(\lambda) p(x, \lambda) p(y, \lambda), \quad (11)$$

t.j.  $p_{XY}(x, y) = \sum_{\lambda} \pi(\lambda) p(x, \lambda) p(y, \lambda)$ .

Už máme všetko potrebné, aby sme vedeli napísať Bellove nerovnosti. Počítajme

$$\begin{aligned} |\langle \mathcal{B} \rangle| &= |\langle A \otimes B \rangle + \langle A' \otimes B \rangle + \langle A \otimes B' \rangle - \langle A' \otimes B' \rangle| \\ &= \left| \sum_{\lambda} \pi(\lambda) \left[ \sum_{a, b} ab p_{\lambda}(a) p_{\lambda}(b) + \sum_{a', b} a' b p_{\lambda}(a') p_{\lambda}(b) + \sum_{a, b'} ab' p_{\lambda}(a) p_{\lambda}(b') - \sum_{a', b'} a' b' p_{\lambda}(a') p_{\lambda}(b') \right] \right| \\ &= \left| \sum_{\lambda} \pi(\lambda) \sum_{a, a', b, b'} p_{\lambda}(a) p_{\lambda}(a') p_{\lambda}(b) p_{\lambda}(b') [(a + a')b + (a - a')b'] \right| \\ &\leq \sum_{\lambda} \pi(\lambda) \sum_{a, a', b, b'} p_{\lambda}(a) p_{\lambda}(a') p_{\lambda}(b) p_{\lambda}(b') |(a + a')b + (a - a')b'| \\ &\leq 2 \sum_{\lambda} \pi(\lambda) \sum_{a, a', b, b'} p_{\lambda}(a) p_{\lambda}(a') p_{\lambda}(b) p_{\lambda}(b') \\ &\leq 2. \end{aligned} \quad (12)$$

Pri odvodení sme použili fakt, že  $p(a, a', b, b') = \sum_{\lambda} \pi(\lambda) p_{\lambda}(a) p_{\lambda}(a') p_{\lambda}(b) p_{\lambda}(b')$  je spoločnou pravdepodobnostnou distribúciou hovoriacou o pravdepodobnosti toho, že pri meraní nameriame výsledky  $a, a', b, b'$ . Platí, že  $p_{AB}(a, b) = \sum_{a', b'} p(a, a', b, b') = \sum_{\lambda} \pi(\lambda) p_{\lambda}(a) p_{\lambda}(b)$  a podobne aj pre ostatné pravdepodobnosti  $p_{XY}(x, y)$ .

Bellova nerovnosť je jednoduchou nerovnosťou pre stredné hodnoty meraní na oboch systémoch. Tieto stredné hodnoty  $\langle X \otimes Y \rangle$  vyjadrujú v tomto prípade aj veľkosť korelácií medzi meraniami  $X$  a  $Y$ . Presná funkcia na meranie tzv. lineárnej korelácie medzi dvoma náhodnými premennými  $X, Y$  je  $C(X, Y) = \langle X \otimes Y \rangle - \langle X \rangle \langle Y \rangle$ . My predpokladáme, že pre naše distribúcie platí  $\langle X \rangle = \langle Y \rangle = 0$ . Vďaka tomu sa Bellove nerovnosti interpretujú ako vzťahy medzi koreláciami, a teda Bellove nerovnosti istým spôsobom merajú korelácie. Zo štatistického pohľadu (podľa mňa) je táto interpretácia nesprávna. Bellove nerovnosti v žiadnom zmysle nemerajú korelácie. Vyjadrujú istú veľmi štatistickú závislosť medzi veličinami, ktorá sa nedá vyjadriť pomocou skrytých parametrov.

Pravdepodobnosti, ktoré sa vyskytujú v klasickom svete majú tú vlastnosť, že Bellove nerovnosti sú vždy splnené, pretože lokálnosť a reálnosť sú v súlade s klasickou fyzikou. Ako je to však v kvantovom svete, ktorý ako sme si povedali, je v rozpore s týmito dvoma pravidlami? Sú Bellove nerovnosti skutočne narušené? Ak áno, tak potom sen o deterministickosti sveta, t.j. potenciálnej existencii skrytých parametrov, nie je platný.

## 9.2 Kvantová fyzika: narušenie Bellových nerovností

V kvantovej teórii Bellove nerovnosti vždy neplatia. Existujú také stavy systému dvoch častíc, pre ktoré sú Bellove nerovnosti narušené. Okrem tohoto teoretického záveru nám Bellove nerovnosti ponúkajú aj priamy test ako túto predpoveď experimentálne overiť.

Začnime tzv. faktorizovanými stavmi dvoch systémov, t.j.  $\Omega_{AB} = \varrho_A \otimes \varrho_B$ . V takomto prípade nie sú medzi systémami vôbec žiadne korelácie, t.j.  $\langle A \otimes B \rangle_{\varrho \otimes \varrho_B} = (\text{Tr}_A A \varrho_A)(\text{Tr}_B B \varrho_B) = \langle A \rangle_{\varrho_A} \langle B \rangle_{\varrho_B}$ . Vďaka tomu vidno, že platí

$$\begin{aligned} |\langle \mathcal{B} \rangle_{\varrho_A \otimes \varrho_B}| &= |(\langle A \rangle_{\varrho_A} + \langle A' \rangle_{\varrho_A}) \langle B \rangle_{\varrho_B} + (\langle A \rangle_{\varrho_A} - \langle A' \rangle_{\varrho_A}) \langle B' \rangle_{\varrho_B}| \\ &\leq \max\{|\langle B \rangle_{\varrho_B}|, |\langle B' \rangle_{\varrho_B}|\} |\langle A \rangle_{\varrho_A} + \langle A' \rangle_{\varrho_A} + \langle A \rangle_{\varrho_A} - \langle A' \rangle_{\varrho_A}| \\ &\leq 2 |\langle A \rangle_{\varrho_A}| \max\{|\langle B \rangle_{\varrho_B}|, |\langle B' \rangle_{\varrho_B}|\} \\ &\leq 2, \end{aligned}$$

kde sme využili fakt, že merania sú dvojhodnotové ( $a, a', b, b' = \pm 1$ ) a  $|\langle A \rangle_{\varrho_A}| \leq 1$ ,  $|\langle A' \rangle_{\varrho_A}| \leq 1$ ,  $|\langle B \rangle_{\varrho_B}| \leq 1$ ,  $|\langle B' \rangle_{\varrho_B}| \leq 1$ . Tieto stavy teda Bellove nerovnosti nenarušajú. Podobná nerovnosť platí aj pre zmesi takýchto stavov, t.j. pre stavy typu  $\Omega_{AB} = \sum_j p_j \varrho_A^j \otimes \varrho_B^j$ , pretože platí

$$\begin{aligned} |\langle \mathcal{B} \rangle_{\Omega_{AB}}| &= \left| \sum_j p_j \langle \mathcal{B} \rangle_{\varrho_A^j \otimes \varrho_B^j} \right| \\ &\leq \sum_j p_j |\langle \mathcal{B} \rangle_{\varrho_A^j \otimes \varrho_B^j}| \\ &\leq 2 \sum_j p_j = 2. \end{aligned}$$

Nie všetky kvantové stavy sa však dajú takýmto spôsobom zapísať. Čisté stavy sú z definície také, ktoré sa nedajú napísať ako konvexná kombinácia, t.j.  $|\psi\rangle\langle\psi| \neq \sum_j p_j \varrho_j$  pre žiadne stavy  $\varrho_j$  nerovnajúce sa  $|\psi\rangle\langle\psi|$ . Preto ak  $|\Omega_{AB}\rangle \neq |\psi_A\rangle \otimes |\phi_B\rangle$ , tak na základe horeuvedených výpočtov nevieme povedať, či Bellove nerovnosti platia, alebo nie. Zoberme si teda stav  $|\Psi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle)$ , ktorý sme použili pri vysvetľovaní EPR paradoxu, t.j. ktorý vieme, že odporuje podmienkam lokálnosti a reálnosti. Narúša aj Bellove nerovnosti, alebo nie? Mal by, pretože Bellove nerovnosti sú platné, ak existujú skryté premenné, ktoré však vždy spĺňajú lokálny realizmus.

Meracie zariadenia používané v Bellovych nerovnostiach, t.j. s dvoma navzájom opačnými hodnotami  $\pm 1$  sú typu  $A = \vec{a} \cdot \vec{\sigma}$  pre  $|\vec{a}| = 1$  (podobne pre  $A', B, B' \leftrightarrow \vec{a}', \vec{b}, \vec{b}'$ ), t.j.  $A = a_z(|0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|) + (a_x - ia_y)|0\rangle\langle 1| + (a_x + ia_y)|1\rangle\langle 0|$ . Pri výpočtoch sa nám budú hodiť nasledovné vzťahy

$$\langle 0|A|0\rangle = a_z \quad \langle 1|A|1\rangle = -a_z \quad \langle 0|A|1\rangle = a_x - ia_y \quad \langle 1|A|0\rangle = a_x + ia_y \quad . \quad (13)$$

Teraz môžeme spočítať strednú hodnotu

$$\begin{aligned} |\langle A \otimes B \rangle_{\Psi_+}| &= \langle \Psi_+ | A \otimes B | \Psi_+ \rangle \\ &= \frac{1}{2} [\langle 01 | A \otimes B | 01 \rangle + \langle 10 | A \otimes B | 10 \rangle + \langle 01 | A \otimes B | 10 \rangle + \langle 10 | A \otimes B | 01 \rangle] \\ &= \frac{1}{2} [-a_z b_z - a_z b_z - (a_x - ia_y)(b_x + ib_y) - (a_x + ia_y)(b_x - ib_y)] \\ &= \frac{1}{2} [-2a_z b_z - 2a_x b_x - 2a_y b_y] \\ &= -\vec{a} \cdot \vec{b} = -\cos \varphi_{ab}, \end{aligned}$$

kde  $\varphi_{ab}$  je uhol medzi jednotkovými vektormi  $\vec{a}$  a  $\vec{b}$ . Pomocou tejto rovnosti dostávame pre Bellovu nerovnosť

$$|\langle \mathcal{B} \rangle_{\Psi_+}| = |-\cos \varphi_{ab} - \cos \varphi_{a'b} - \cos \varphi_{ab} + \cos \varphi_{a'b'}|. \quad (14)$$

Vyberme štyri vektory tak, aby  $\varphi_{ab} = \varphi_{a'b} = \varphi_{b'a} = \varphi$  a teda  $\varphi_{a'b'} = 3\varphi$ . Ak zvolíme  $\varphi = 45^\circ$ , t.j.  $\cos \varphi = \frac{\sqrt{2}}{2}$  a  $\cos 3\varphi = -\frac{\sqrt{2}}{2}$ , tak dostávame

$$|\langle \mathcal{B} \rangle_{\Psi_+}| = \left| -\frac{\sqrt{2}}{2} - \frac{\sqrt{2}}{2} - \frac{\sqrt{2}}{2} - \frac{\sqrt{2}}{2} \right| = 2\sqrt{2} \not\leq 2, \quad (15)$$

t.j. explicitne vidíme, že Bellova nerovnosť nie je splnená.

Jedinou úlohou je teraz experimentálne verifikovať toto narušenie, t.j. potrebujeme dokázať, že takéto stavy skutočne existujú. Bolo urobených už mnoho testov Bellových nerovností a všeobecne sa považuje narušenie Bellových nerovností za experimentálne overené. Napriek tomu stále existujú pochybnosti, ktoré je potrebné odstrániť. V podstate sú problémy dva:

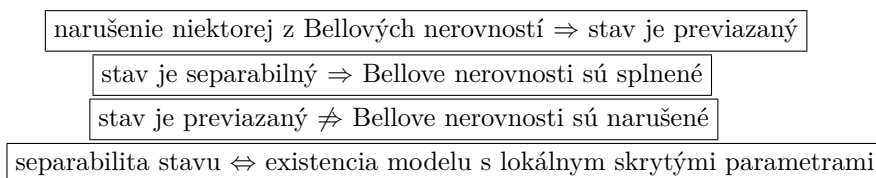
1. problém vylúčenia kauzality, t.j. overovať nerovnosti pre systémy dostatočne vzdialené, aby sa dala vylúčiť akýkoľvek (v podstate magický) spôsob komunikácie svetelnou rýchlosťou. V praxi to znamená, že experimenty  $A, A'$  a  $B, B'$  sa uskutočňujú v priestorupodobných oblastiach časopriestoru.
2. problém perfektných detektorov, t.j. každý detektor (merací prístroj) nepracuje ideálne a nemá 100% úspešnosť. K vyriešeniu prvého problému je ideálne použiť fotóny, ktoré sa ľahko rozširujú na veľké vzdialenosti, avšak naše súčasné detektory majú veľmi slabú úspešnosť na úrovni iba niekoľkých percent. Naopak, v prípade ak používame objekty, ktoré vieme detekovať prakticky perfektne (napríklad ióny, atómy), tak s týmito máme problém ich rozširovať na väčšie vzdialenosti bez toho, aby si zachovali požadované vlastnosti, t.j. zostali v pôvodnom čistom stave. Narušenie Bellových nerovností sa pozoruje, stále však nie je vylúčená možnosť zatiaľ neznámeho pôsobenia na diaľku. Konečné potvrdenie je preto ešte stále otázkou.

Pomocou skrytých parametrov rozdeľujeme množinu kvantových stavov na dve podmnožiny:

**Separabilné stavy.** Stav je separabilný, ak pre neho existuje teória so skrytými parametrami, čo znamená, že ho vieme zapísať ako konvexnú kombináciu faktorizovaných stavov, t.j.  $\Omega_{AB} = \sum_j p_j \varrho_j^A \otimes \varrho_j^B$ .

**Previazané stavy.** Previazané stavy sú všetky tie, ktoré nie sú separabilné, t.j. nevieme ich napísať ako štatistickú zmes faktorizovaných stavov.

Teória kvantového previazania je dnes dosť širokou oblasťou a my v žiadnom prípade nemáme priestor na dostatočnú diskusiu tejto problematiky. Dôležité je poznamenať, že existuje veľa rôznych Bellových nerovností. Nenarušenie Bellových nerovností znamená platnosť lokálneho realizmu, ale neznamená pre daný stav automaticky existenciu modelu so skrytými parametrami. Platia nasledovné tvrdenia



Základným problémom teórie kvantového previazania je identifikácia, resp. detekcia kvantového previazania, jednak experimentálne, ale aj teoreticky, t.j. určiť na papieri, či stav je separabilný, alebo nie. Ide o veľmi zložitý problém. Na detekciu sa dajú použiť tzv. *svedkovia previazania*, t.j. operátory  $W$ , pre ktoré platí

$$\varrho \text{ je separabilný} \Rightarrow \text{Tr} \varrho W \leq 0. \tag{16}$$

Platí, že stav  $\varrho$  je previazaný ak aspoň pre jeden takýto operátor je jeho stredná hodnota pozitívna, t.j.  $\text{Tr} \varrho W > 0$ . Bellove nerovnosti sú v podstate špeciálnymi prípadmi svedkov previazania.  $\mathcal{B}$  je operátor, ktorý spĺňa  $\text{Tr} \varrho \mathcal{B} \leq 0$  pre všetky separabilné stavy  $\varrho$ . Dôležitým poznatkom je, že neexistuje žiadny univerzálny svedok previazania  $W$ , ktorý by nám mohol poslúžiť na detekciu úplne všetkých previazaných stavov. Preto je snaha nájsť nejakú funkciu (mieru kvantového previazania), ktorá by nám mohla poslúžiť k detekcii. Problém kvantifikovania previazania je však mimo týchto prednášok.

## 10 Základy kvantovej teórie informácie

Kvantová teória informácie je dnes dosť obsiahlou oblasťou. My sa zameriame na niektoré základné výsledky, ktoré boli v tejto oblasti dosiahnuté a ktoré poukazujú na rozdiely medzi teóriou informácie používajúcou klasické bity a kvantové bity. K pojmu kvantový bit sa hneď dostaneme, ale najprv sa pokúsime vytvoriť si obraz o tom, čo to vlastne je kvantová informácia. Asi prvou otázkou je, či to, o čom tu teraz ideme hovoriť, nazvať *Teória kvantovej*

*informácie*, alebo skôr *Kvantová teória informácie*. Ja som skôr za ten druhý názov, v ktorom sa nevyskytuje priamo slovné spojenie kvantová informácia. Malo by ísť o rozšírenie teórie informácie, a nie samotného pojmu informácie ako takého. Kvantová informácia nie je žiadnym novým konceptom informácie, skôr iba vyjadruje istú veľmi špecifickú formu/reprezentáciu informácie. Napriek výhradám voči termínu „kvantová informácia“ tento výraz budeme používať, ale vysvetlíme, čo presne myslíme a čo sa pod tým aj zvyčajne myslí. Kvantová informácia je synonymom pojmu kvantový stav, ktorý reprezentuje našu maximálnu informáciu, ktorú o kvantovom systéme môžeme mať. Narábanie s kvantovou informáciou je potom nič iné ako manipulácia kvantového stavu. Ešte raz:

$$\boxed{\text{kvantová informácia} = \text{kvantový stav}}$$

## 10.1 Kvantový bit

Základným stavebným kameňom kvantovej teórie informácie je jeden kvantový bit. Opäť nejde o rozšírenie abstraktného pojmu jeden bit informácie. Budeme rozlišovať nasledovné pojmy: bit informácie, klasický bit a kvantový bit. Posledné dva bity sú fyzikálne objekty, resp. systémy, ktoré môžu byť použité na prenos, resp. uchovanie maximálneho jedného bitu informácie. Toto je definičná vlastnosť obidvoch objektov, ktoré predstavujú tie najjednoduchšie fyzikálne objekty v príslušnej teórii.

Najjednoduchší kvantový objekt je popísaný dvojrozmerným Hilbertovým priestorom, t.j. napr. spin, alebo polarizácia. O kvantovej fyzike jedného spinu sme si už čo-to povedali. Z matematického pohľadu nie je medzi spinom, polarizáciou, alebo ľubovoľným iným dvojrozmerným systémom žiaden rozdiel. Hovorili sme si, že stavy spinu tvoria tzv. Blochovu sféru, t.j. stavy sa dajú jednoznačne identifikovať s trojrozmernými vektormi s veľkosťou menšou ako 1, t.j.  $\rho \leftrightarrow \vec{r}, |\vec{r}| \leq 1$ . Stavy klasického bitu sú pravdepodobnostné distribúcie dvoch hodnôt: nuly a jednotky, t.j. tieto stavy tvoria úsečku, ktorá v Blochovej sfére spája severný a južný pól.

## 10.2 Operácia NOT

## 10.3 Kvantové klonovanie

## 10.4 Kvantová teleportácia

## 10.5 Kvantové superhusté kódovanie

## 10.6 Vernamova šifra, teleportácia a husté kódovanie

TO BE CONTINUED ...