Ortvay Rudolf verseny megoldások

2018/27. Feladat

Tekintsünk egy, a z-tengely körül forgó pontszerű részecskét. Keressünk egy olyan ψ kvantumállapotot, melyre a perdület z-komponensének szórása $\Delta L_z < \hbar/4\pi$! Tekintettel a φ azimutszög és az L_z perdületkomponens közötti határozatlansági relációra - nem találjuk furcsának az ilyen állapotok létezését?

(Fejős Gergely)

Szerkesztette: Gombkötő Ákos.
A versenyre beküldött megoldások közül felhasználásra került:
Gombkötő Ákos beküldött megoldása
A megoldást ellenőrizte: Fejős Gergely

A probléma motivációja

A feladat a látszólagos paradoxonok azon családjába tartozik, amely a kvantummechanikában használt fogalmak pontos matematikai hátterének ismeretében oldható fel.
A határozatlansági relációt igen sokszor

$$\Delta L_z \Delta\varphi \geq \frac{\hbar}{2} \tag{1}$$

alakban láthatjuk felírva. Hogy ez nem lehet igaz, arra intuitívan könnyű ellenpéldát találni: mivel φ bizonytalansága nem lehet nagyobb 2π-nél, a feladatban is megnevezett $\Delta L_z < \hbar/4\pi$ állapotok sértik a fenti bizonytalansági relációt.

Ilyen állapotot nem különösebben nehéz találni, triviálisan ilyenek az L_z operátor sajátállapotai.
Ennek fényében logikusan következik, hogy a fentiek közül legalább egy állítás (a bizonytalansági reláció, vagy a szögbizonytalanság korlátossága, esetleg az impulzusmomentum sajátállapotok létezése) nem igaz. Mint az alábbiakban kiderül, a bizonytalansági reláció fenti alakja nem fog teljesülni.

A fázisoperátor heurisztikus kezelése

A klasszikus mechanikában a polárkoordináta és az erre merőleges impulzusmomentum-komponens kanonikusan konjugált mennyiségek. A kvantumelméletben a fizikai mennyiségekhez hermitikus operátorokat rendelünk.

Kissé precízebben: $A : \mathcal{D_A} \to \mathcal{H}$ sűrűn értelmezett, lineáris, önadjungált operátornak feleltetjük meg, ahol az "adjungált" definíciója külön adott, és általában nem esik egybe a véges dimenziós lineáris algebrában tanultakkal, a $\mathcal{D_A}$ sűrű halmazt pedig közvetve a Stone-tétel definiálja, ugyanakkor a gyakorlatban sokszor a Schwartz-térre szorítkozunk.

Mielőtt a probléma precíz tárgyalását megadjuk, hasznos a szokásos naív lépéseken vázlatosan átfutni.
A kvantummechanika könyvek többségében szerepel a nemkommutáló operátorokra vonatkozó bizonytalansági reláció levezetése:

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2}|\langle[A,B]\rangle|. \tag{2}$$

Gömbi, vagy henger koordináta-rendszert felvéve, $L_z = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial\varphi}$, és a polárszög $\tilde{\varphi}$ operátorát ezzel a koordinátázással naívan $\tilde{\varphi}\psi(\varphi) \to \psi(\varphi)\varphi$ összefüggés definiálja.

Ebből következik, hogy $[L_z, \varphi] = -i\hbar\mathbf{1}$. Ebből, a fentiekkel együtt már következik 1. Kérdés, hogy ebben a heuresztikus levezetésben hol követtünk el hibát.

A fázisoperátor problémája

Valamelyest jól ismert probléma, hogy a fázis kielégítő leírása a kvantumelmélet korai szakaszától nem volt megoldott.

Az 1950-es évekre, a mézerek és lézerek feltalálása után ez még jelentősebb lett. A nehézséget az okozza, hogy φ vagy többértékű, vagy nem folytonos. Emiatt a szokásos megközelítés az volt, hogy φ közvetlen definiálása helyett a periodikus és folytonos $\sin\varphi$ és $\cos\varphi$ függvényeket definiálták és használták. A fázis és szög-operátorok első kielégítő leírása az 1980-as években jelent meg, a Pegg-Barnett formalizmus keretén belül [2-3].

A fázis/szög-operátor definiálása többféle megközelítéssel is lehetséges [4]. A legfőbb szempontok az operátor megkonstruálása során:

-A mérhető értékek halmaza, vagyis a spektrum a $[0, 2\pi)]$ intervallumot fedi le.

-A szám/impulzusmomentum sajátállapotok esetén a szögmérés eredménye legyen teljesen véletlnszerű.

-A szám/impulzusmomentum operátorok fázis/szög-eltolásokat generálnak, és fordítva.

Az egyik gyakran használt lehetőség a Susskind-Glogower operátor, ennek a problémája hogy a sajátállapotaira nem teljesül teljességi/ortogonalitási összefüggés.

A fázis-operátor megfelelő definiálásában újabban is történnek jelentős lépések, lásd [6].

Ez alapján látható, hogy magának a $\tilde{\varphi}$ operátornak a definíciója sem magától értetődő, ebből eredően maga a feladat is külön-külön elvégzendő lenne minden egyes definíció esetén. Ezt természetesen nem fogjuk megtenni.

A naív szögoperátor bizonytalansági relációja

A továbbiakban [7] alapján tárgyaljuk a problémát. Az intuitíven is látható, hogy φ-val való szorzás az L^2 tér sűrű részhalmazán értelmezhető, illetve ez a művelet önadjungált:

$$\langle g, \varphi f \rangle = \langle \varphi g, f \rangle \qquad \forall f, g \in \mathcal{D}_\varphi .$$

Az L_z operátorra pedig az önadjungáltság a következő feltételt adja:

$$\int_0^{2\pi} \Big(g^* L_z f - (L_z g)^* f \Big) d\varphi = -i\hbar\big(g^*(2\pi) f(2\pi) - g^*(0) f(0)\big) = 0 \qquad \forall f \in \mathcal{D}_{L_z} . \tag{3}$$

Ez az L_z operátor értelmezési tartományára való megszorítást jelent:

$$\mathcal{D}_{L_z} = \{ f \in \mathcal{H} \ \mid \ f' \in \mathcal{H} \ \vee \ f(0) = f(2\pi) \}.$$

Nem lényeges, de megjegyezzük, hogy (itt nem részletezett lépéseken keresztül) a kommutátor értelmezési tartománya:

$$\mathcal{D}_{[L_z, \varphi]} = \{ f \in \mathcal{H} \ \mid \ f' \in \mathcal{H} \ \vee \ f(0) = f(2\pi) = 0 \}.$$

Írjuk fel a határozatlansági reláció általános alakját, a következő jelölésekkel:

$$\langle A \rangle_\psi \equiv \langle \psi, A\psi \rangle \qquad ; \qquad (\Delta_\psi A)^2 \equiv |(A - \langle A \rangle_\psi \mathbf{1})\psi|^2$$

$$\Delta_\psi A \ \Delta_\psi B \geq \frac{1}{2} |\langle \psi, i[A, B]\psi \rangle| \underbrace{=\!=\!=\!=\!=}_{\text{önadjungáltságból}} \frac{1}{2} |i\langle A\psi, B\psi \rangle - i\langle B\psi, A\psi \rangle| . \tag{4}$$

A határozatlansági reláció mindkét oldalának értelmezési tartománya ilyen alakban $\mathcal{D}_A \cap \mathcal{D}_B$.
Legyen most $A = L_z$, és $B = \tilde{\varphi}$. Ekkor az értelmezési tartomány $\mathcal{D}_{L_z} \cap \mathcal{D}_\varphi = \mathcal{D}_{L_z}$. A határozatlansági reláció, a belső szorzatok kifejtésével:

$$\Delta_\psi L_z \; \Delta_\psi \varphi \geq \frac{1}{2} |i\langle L_z \psi, \tilde{\varphi}\psi \rangle - i\langle \tilde{\varphi}\psi, L_z \psi\rangle| = \frac{\hbar}{2} \left| \int_0^{2\pi} \underbrace{-\frac{\partial \psi^*}{\partial \varphi} \varphi \psi - \varphi \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial \varphi}}_{-\varphi \frac{\partial \psi^* \psi}{\partial \varphi}} d\varphi \right| =$$

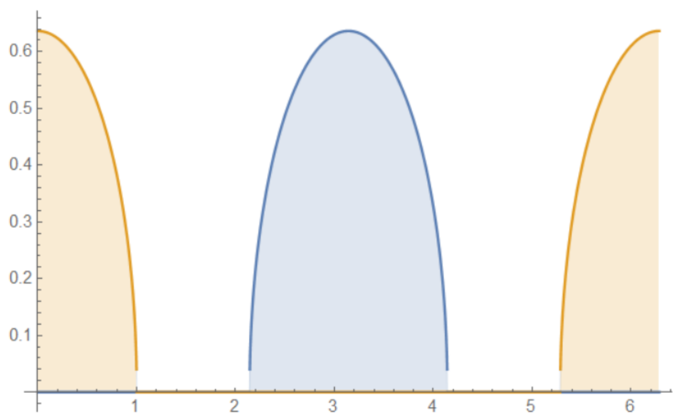
$$= \frac{\hbar}{2} \left| \int_0^{2\pi} \psi^* \psi d\varphi - \Big[\varphi \psi^* \psi \Big]_0^{2\pi} \right| = \frac{\hbar}{2} \big| 1 - 2\pi |\psi(2\pi)|^2 \big|. \tag{5}$$

Nem lepődhetünk meg azon, hogy a bizonytalanságok szorzata elvben tetszőlegesen kicsi lehet. Az impulzusmomentum sajátállapotai esetén ez éppen nulla lesz.

Akkor hol a probléma?

A fenti naív fázisoperátor, bár matematikailag szabatosan vizsgálható, fizikai számolásokhoz csak fenntartásokkal használható. Ez könnyen belátható, ha például a szög/fázis várható értékét vagy szórását szeretnénk kiszámolni adott hullámfüggvény esetén.

A várható érték például π, a szórás pedig nagy lehet, ha a hullámfüggvény jól lokalizált a $0; 2\pi$ átmenet környékén. Ezt formálisan úgy mondhatjuk, hogy ezek a mennyiségek nem transzformálódnak megfelelően a koordinátarendszer forgatására.
Végső soron ez az oka annak, hogy a naív "kanonikusan kvantált szög"-től eltérő mennyiségeket használnak.



1. ábra. Azonos alakú, eltolt szögeloszlások. Naív számolás szerint $\langle\phi_1\rangle = \langle\phi_2\rangle = \pi$, $\Delta\phi_1 \approx 0.5$, $\Delta\phi_2 \approx 2.7$.

A probléma eredete azonban nem kvantummechanikai, hiszen klasszikus fáziseloszlások esetén is fennállnak ugyanezek a problémák a várható értékre és szórásra. A statisztikai eloszlások megfelelő kezeléséhez újra kell definiálni a statisztikai momentumokat, figyelembe véve az értelmezési tartomány periodicitását. Ehhez két megközelítést foglalunk össze röviden:

I. Vezessük be a $\cos\phi$, $\sin\phi$ operátorokat. A részletek mellőzésével közöljük az alábbi határozatlansági relációkat:

$$\Delta_\psi L_z \; \Delta_\psi \sin\varphi \geq \frac{\hbar}{2} \left| \int_0^{2\pi} -\sin\varphi \frac{\partial \psi^* \psi}{\partial \varphi} d\varphi \right| = \frac{\hbar}{2} \left| \int_0^{2\pi} \cos\varphi \psi^* \psi d\varphi \right| = \frac{\hbar}{2} |\langle \cos\varphi \rangle|, \tag{6}$$

$$\Delta_\psi L_z \; \Delta_\psi \cos\varphi \geq \frac{\hbar}{2} \left| \int_0^{2\pi} -\cos\varphi \frac{\partial \psi^* \psi}{\partial \varphi} d\varphi \right| = \frac{\hbar}{2} \left| \int_0^{2\pi} -\sin\varphi \psi^* \psi d\varphi \right| = \frac{\hbar}{2} |\langle -\sin\varphi \rangle|. \tag{7}$$

A szög várható értékét ezen operátorokkal fejezhetjük ki:

$$\langle\varphi\rangle = \mathrm{atan}\Big(\langle\sin\varphi\rangle, \langle\cos\varphi\rangle\Big). \tag{8}$$

Szórás jellegű mennyiség definiálására is többféle lehetőség van. Az egyik a cirkuláris variancia:

$$\mathrm{Var}(\varphi) \equiv 1 - \sqrt{\langle\sin\varphi\rangle^2 + \langle\cos\varphi\rangle^2}. \qquad\qquad (\in [0,1]) \tag{9}$$

Ha a fenti képen látható két eloszlás esetében kifejezzük a szög-bizonytalanság mértékét, $2\pi\mathrm{Var}(\varphi) \approx 0.75$.

Egy másik lehetőség a cirkuláris standard eltérés:

$$\mathrm{S}(\varphi) \equiv \sqrt{\ln\big(1/(\langle\sin\varphi\rangle^2 + \langle\cos\varphi\rangle^2)\big)}. \qquad\qquad (\in [0,\infty]) \tag{10}$$

Kiértékelve, a cirkuláris standard eltérésre $S(\varphi) \approx 0.5$ értéket kapunk, ami jó egyezést mutat $\Delta\Phi_1$-el, de független a koordinátarendszer megválasztásától. A fenti kifejezések tehát jól transzformálódnak.

II. Egy másik megközelítés, melyben nem támaszkodunk a trigonometrikus operátorokra az, ha bevezetjük paraméterként a φ_0 változót, és a négyzetes eltérést ehhez (mint paraméterhez) mérve fejezzük ki, majd ennek minimumát keressük meg.

A szög értelmezési tartományát $[\varphi_0 - \pi, \varphi_0 + \pi]$ intervallumra kell megszorítanunk. A szög várható értéke ebben az esetben azonos lesz a minimumhoz tartozó φ_0 értékkel.

$$\Big\{ \langle\varphi\rangle_m \equiv \varphi_0 \;\Big|\; \langle(\varphi - \varphi_0)^2\rangle_m = \min_{\varphi_0}\langle(\varphi - \varphi_0)^2\rangle \Big\} \tag{11}$$

A szórást a $\Delta_m\varphi \equiv \min_{\varphi_0}\langle(\varphi - \varphi_0)^2\rangle$ mennyiség jellemzi. Ezzel a definícióval, –nem részletezve a lépéseket– a következő határozatlansági reláció állítható fel:

$$\Delta L_z \, \Delta\varphi_m \geq \frac{\hbar}{2} C\big(1 - \frac{3\Delta\varphi_m}{\pi^2}\big). \tag{12}$$

ahol C valamilyen véges, valós szám. Ennek az egyik intuitív aspektusa az, hogy az egyenletes eloszlásra is értelmezhető, akkor $\Delta\varphi_m = \pi^2/3$, a határozatlansági reláció mindkét oldala pedig nulla.

Hivatkozások:

[1] Frederic P. Schuller: Lectures on Quantum Theory
[2] Stephen M. Barnett, John A. Vaccaro: The Quantum Phase Operator
[3] Pekka Lahti, Juha-Pekka Pellonpää: The Pegg-Barnett formalism and covariant phase observables
[4] J. Pierre Gazeau, F. Hugon Szafrani: Three paths toward the quantum angle operator
[5] H.A. Kastrup: Quantization of the canonically conjugate pair angle and orbital angular momentum
[6] Varró Sándor: Regular phase operator and SU(1,1) coherent states of the harmonic oscillator
[7] Francois Gieres: Mathematical surprises and Dirac's formalism in quantum mechanics
[8] Michael Martin Nieto: Quantum phase ans quantum phase operators: Some Physics and Some History
[9] https://en.wikipedia.org/wiki/Directional_statistics