

Wybrane własności układów złożonych z dwóch i więcej jednakowych cząstek

- 1) Symetria funkcji falowej i podział cząstek na bozony i fermiony
- 2) Zakaz Pauliego
- 3) Oddziaływania wymienne

Zagadnienie własne dla operatora Hamiltona dla dwóch nieoddziałujących klasycznie cząstek

$$\hat{H}\psi(x_1, x_2) = E\psi(x_1, x_2)$$

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$$

x_1 i x_2 oznaczają zespół współrzędnych przestrzennych oraz zmiennych spinowych m_{s1} , m_{s2} opisujących obie cząstki (m_s określa rzut spinu cząstki na oś OZ).

Można pokazać iż formalnie rozwiązanie zagadnienia własnego można zapisać w postaci

$$\psi_{\alpha\beta}(x_1, x_2) = \psi_{\alpha}(x_1)\psi_{\beta}(x_2)$$

$$E = E_{\alpha} + E_{\beta}$$

gdzie $\hat{H}_1\psi_{\alpha}(x_1) = E_{\alpha}\psi_{\alpha}(x_1)$ $\hat{H}_2\psi_{\beta}(x_2) = E_{\beta}\psi_{\beta}(x_2)$

α oraz β oznacza zespół liczb kwantowych (w tym związanych z operatorem spinu) określających stan 1 i 2 cząstki odpowiednio. Funkcje jednocząstkowe $\psi_{\alpha}(x_1)(\psi_{\beta}(x_2))$ indeksowane przez α (β) stanowią układ funkcji ortonormalnych.

Symetria funkcji falowej układu złożonego z 2 jednakowych cząstek

Funkcja $\psi_{\alpha\beta}(x_1, x_2) = \psi_{\alpha}(x_1)\psi_{\beta}(x_2)$ nie może jednak opisywać dwóch **jednakowych** cząstek gdyż nie spełnia warunku ich **nierozróżnialności**. Określona za pomocą tej funkcji gęstość prawdopodobieństwa jednoczesnego znalezienia jednej z cząstek w punkcie wyznaczonym przez x_1 oraz drugiej cząstki w punkcie wyznaczonym przez x_2

$$|\psi_{\alpha\beta}(x_1, x_2)|^2 = |\psi_{\alpha}(x_1)|^2 |\psi_{\beta}(x_2)|^2$$

w ogólności będzie inna gdy dokonamy zamiany obu cząstek $x_1 \leftrightarrow x_2$.
W celu spełnienia warunku by $|\psi_{\alpha\beta}(x_1, x_2)|^2 = |\psi_{\alpha\beta}(x_2, x_1)|^2$ można funkcje przyjąć w dwóch postaciach

$$\psi_A(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{\alpha}(x_1)\psi_{\beta}(x_2) - \psi_{\alpha}(x_2)\psi_{\beta}(x_1)] \quad \beta \neq \alpha$$

$$\psi_S(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{\alpha}(x_1)\psi_{\beta}(x_2) + \psi_{\alpha}(x_2)\psi_{\beta}(x_1)] \quad \text{gdy} \quad \beta \neq \alpha$$

$$\psi_S(x_1, x_2) = \psi_{\alpha}(x_1)\psi_{\alpha}(x_2) \quad \text{gdy} \quad \beta = \alpha$$

$$\psi_S(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(x_1)\psi_\beta(x_2) + \psi_\alpha(x_2)\psi_\beta(x_1)] \quad \beta \neq \alpha$$

$$\psi_S(x_1, x_2) = \psi_\alpha(x_1)\psi_\alpha(x_2) \quad \text{gdy} \quad \beta = \alpha$$

$$\psi_A(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(x_1)\psi_\beta(x_2) - \psi_\alpha(x_2)\psi_\beta(x_1)] \quad \text{gdy} \quad \beta \neq \alpha$$

Łatwo można sprawdzić iż

$$\psi_S(x_2, x_1) = \psi_S(x_1, x_2) \quad \psi_A(x_2, x_1) = -\psi_A(x_1, x_2)$$

$$\text{a zatem} \quad |\psi_{S(A)}(x_1, x_2)|^2 = |\psi_{S(A)}(x_2, x_1)|^2$$

W stanach określonych powyższymi funkcjami prawdopodobieństwo otrzymania konkretnej wartości w pomiarze dowolnej mierzalnej wielkości fizycznej nie zmienia się przy zamianie cząstek ze sobą.

Funkcjami symetrycznymi $\psi_S(x_2, x_1)$ nie zmieniającymi znaku przy zamianie cząstek opisujemy cząstki zwane bozonami

Funkcjami antysymetrycznymi $\psi_A(x_2, x_1)$ zmieniającymi znak przy zamianie cząstek opisujemy cząstki zwane fermionami

Bozony i fermiony

Bozonami są cząstki, dla których liczba s określająca długość wektora spinu $\hbar\sqrt{s(s+1)}$ przyjmuje wartości całkowite tzn.

$$s=0,1,2,3,\dots$$

Są one opisane funkcją stanu symetryczną względem zamiany cząstek

Przykładem bozonu jest foton, a także jądro złożone z parzystej liczby nukleonów.

Fermionami są cząstki, dla których liczba s określająca długość wektora spinu $\hbar\sqrt{s(s+1)}$ przyjmuje wartości połówkowe tzn $s=\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$

Są one opisane funkcją antysymetryczną względem zamiany cząstek.

Fermionami są m.in. elektron, proton i neutron, a także jądra złożone z nieparzystej liczby nukleonów

Zakaz Pauliego

Dwa fermiony nie mogą znajdować się w tym samym stanie kwantowym (opisanym tym samym zestawem liczb kwantowych).

Warunek ten wynika z postaci funkcji antysymetrycznej

$$\psi_A(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(x_1)\psi_\beta(x_2) - \psi_\alpha(x_2)\psi_\beta(x_1)]$$

Funkcja ta znika tożsamościowo w przypadku gdy $\alpha = \beta$ a zatem nie jest możliwe by dwa fermiony znajdowały się w tym samym stanie kwantowym.

Zakaz Pauliego nie dotyczy bozonów, opisanych funkcjami symetrycznymi, które mogą znaleźć się w tym samym stanie kwantowym.

Postać funkcji stanu dla układu złożonego z N jednakowych fermionów

Można ją zapisać przy pomocy wyznacznika Slatera

$$\psi_A(x_1, x_2, \dots, x_n) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{\alpha_1}(x_1) & \psi_{\alpha_1}(x_2) & \dots & \psi_{\alpha_1}(x_N) \\ \psi_{\alpha_2}(x_1) & \psi_{\alpha_2}(x_2) & \dots & \psi_{\alpha_2}(x_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{\alpha_N}(x_1) & \psi_{\alpha_N}(x_2) & \dots & \psi_{\alpha_N}(x_N) \end{vmatrix}$$

α_j - zestaw liczb kwantowych (w tym także tych związanych ze spinem) opisujący fermion w stanie kwantowym j -tym

x_i - zespół współrzędnych służących do opisu położenia i rzutu spinu i -tego fermionu na oś Oz

Gdy $\alpha_i = \alpha_j$ to wówczas wiersze i -ty i j -ty wyznacznika są jednakowe, a więc cały wyznacznik się zeruje co zapewnia to iż wówczas $\psi_A = 0$

Zamiana kolumn macierzy odpowiada zamianie cząstek i prowadzi do zmiany znaku funkcji falowej.

Podział funkcji stanu układu złożonego z dwóch identycznych fermionów na część zależną od zmiennych przestrzennych i spinowych.

Gdy operator Hamiltona nie zależy jawnie od operatorów związanych ze spinem (zaniedbujemy np. sprzężenie spinowo-orbitalne) to funkcje stanu opisującą stan układu 2 fermionów możemy przedstawić jako iloczyn funkcji zależnej od zmiennych przestrzennych i spinowych.

$$\psi_A(x_1, x_2) = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \chi(m_{s1}, m_{s2})$$

W celu spełnienia warunku antysymetryczności funkcji stanu trzeba przyjąć iż albo

a) Funkcja $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \overset{\text{ozn.}}{=} \psi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ jest antysymetryczna względem przestawienia cząstek czyli $\psi_A(\vec{r}_2, \vec{r}_1) = -\psi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ a funkcja $\chi(m_{s1}, m_{s2}) \overset{\text{ozn.}}{=} \chi_S(m_{s1}, m_{s2})$ jest symetryczna względem przestawienia cząstek $\chi_S(m_{s2}, m_{s1}) = \chi_S(m_{s1}, m_{s2})$

b) Funkcja $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \overset{\text{ozn.}}{=} \psi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ jest symetryczna względem przestawienia

cząstek czyli $\psi_S(\vec{r}_2, \vec{r}_1) = \psi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ a funkcja $\chi(m_{s1}, m_{s2}) \overset{\text{ozn.}}{=} \chi_A(m_{s1}, m_{s2})$

jest antysymetryczna względem przestawienia cząstek $\chi_A(m_{s2}, m_{s1}) = -\chi_A(m_{s1}, m_{s2})$

Postać funkcji zależnej od zmiennych przestrzennych $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ wynika z rozwiązania równania własnego dla operatora Hamiltona zależnego od zmiennych przestrzennych.

Stan singletowy

Gdy opisywanymi cząstkami są fermiony o $s_1=s_2=1/2$ ($m_{s1}=\pm 1/2$, $m_{s2}=\pm 1/2$) (czyli np. elektrony) to wyróżniamy tylko 1 funkcję $\chi_A(m_{s1}, m_{s2})$ zależną od zmiennych spinowych spełniającą warunek antysymetryczności.

$$\chi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\chi_{m_{s1}=\frac{1}{2}, m_{s2}=-\frac{1}{2}} - \chi_{m_{s1}=-\frac{1}{2}, m_{s2}=\frac{1}{2}} \right] \stackrel{\text{ozn.}}{=} \frac{1}{\sqrt{2}} [|+, -\rangle - |-, +\rangle]$$

gdzie $\chi_{m_{s1}, m_{s2}}(m_{s1}, m_{s2}) = \chi_{m_{s1}}(m_{s1}) \chi_{m_{s2}}(m_{s2})$ są funkcjami własnymi operatorów

$\hat{S}_1^2, \hat{S}_{1z}, \hat{S}_2^2, \hat{S}_{2z}$ związanych z pojedynczymi cząstkami spełniającymi

równania własne

$$\hat{S}_1^2 \chi_{m_{s1}, m_{s2}} = \hbar^2 s_1(s_1 + 1) \chi_{m_{s1}, m_{s2}} \quad s_1 = 1/2$$

$$\hat{S}_2^2 \chi_{m_{s1}, m_{s2}} = \hbar^2 s_2(s_2 + 1) \chi_{m_{s1}, m_{s2}} \quad s_2 = 1/2$$

$$\hat{S}_{1z} \chi_{m_{s1}, m_{s2}} = \hbar m_{s1} \chi_{m_{s1}, m_{s2}} \quad m_{s1} = \pm 1/2$$

$$\hat{S}_{2z} \chi_{m_{s1}, m_{s2}} = \hbar m_{s2} \chi_{m_{s1}, m_{s2}} \quad m_{s2} = \pm 1/2$$

Elektrony opisane funkcją $\chi_A(m_{s1}, m_{s2})$ znajdują się w stanie singletowym. W stanie tym nie jest ustalony rzut spinu żadnej z cząstek na oś Oz.

W takim stanie mówimy w uproszczeniu iż spiny obu cząstek są antyrównoległe do siebie, a kwadrat spinu układu jest równy $\hbar^2 s(s+1) = 0$ ($s=s_1-s_2=0$).

Stan trypletowy

Gdy opisywanymi cząstkami są fermiony o $s_1=s_2=1/2$ ($m_{s1}=\pm 1/2$, $m_{s2}=\pm 1/2$) (czyli np. elektrony) to wyróżniamy 3 funkcje zależne od zmiennych spinowych symetryczne względem przestawienia cząstek

$$\chi_{s1} = \chi_{m_{s1}=\frac{1}{2}, m_{s2}=\frac{1}{2}}^{\text{ozn.}} = |+, +\rangle$$

$$\chi_{s2} = \chi_{m_{s1}=-\frac{1}{2}, m_{s2}=-\frac{1}{2}}^{\text{ozn.}} = |-, -\rangle$$

$$\chi_{s3} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\chi_{m_{s1}=\frac{1}{2}, m_{s2}=-\frac{1}{2}} + \chi_{m_{s1}=-\frac{1}{2}, m_{s2}=\frac{1}{2}} \right]^{\text{ozn.}} = \frac{1}{\sqrt{2}} [|+, -\rangle + |-, +\rangle]$$

O cząstkach znajdujących się w stanie w którym $\chi = \chi_{s1}$ lub $\chi = \chi_{s2}$ lub $\chi = \chi_{s3}$ mówimy że znajdują się w stanie trypletowym.

W takim stanie mówimy w uproszczeniu iż spiny obu cząstek są równoległe do siebie, a kwadrat spinu układu jest równy $\hbar^2 s(s+1) = 2\hbar^2$ ($s=s_1+s_2=1$).

Trzy funkcje odpowiadające stanowi trypletowemu różnią się rzutem spinu na oś Oz, które może być równe $-\hbar, 0, \hbar$

Funkcje $\chi_A, \chi_{S1}, \chi_{S2}, \chi_{S3}$ są funkcjami własnymi operatorów kwadratu całkowitego spinu układu cząstek

$$\hat{S}^2 = \hat{\vec{S}}_1 \cdot \hat{\vec{S}}_1 + \hat{\vec{S}}_2 \cdot \hat{\vec{S}}_2 + 2\hat{\vec{S}}_1 \cdot \hat{\vec{S}}_2 = \hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + 2(\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x} + \hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y} + \hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z})$$

gdzie $\hat{\vec{S}} = \hat{\vec{S}}_1 + \hat{\vec{S}}_2$

oraz jego rzutu na oś Oz

$$\hat{S}_z = \hat{S}_{1z} + \hat{S}_{2z}$$

Można pokazać (dodatek) iż

$$\hat{S}^2 \chi_{Si} = \hbar^2 s(s+1) \chi_{Si} = 2\hbar^2 \chi_{Si}$$

$$i=1,2,3; s=s_1+s_2=1$$

$$\hat{S}_z \chi_{S1} = \hbar m_s \chi_{S1} = \hbar \chi_{S1}$$

$$m_s=1$$

$$\chi_{S1} = |+,+\rangle$$

$$\hat{S}_z \chi_{S2} = \hbar m_s \chi_{S2} = -\hbar \chi_{S2}$$

$$m_s=-1$$

$$\chi_{S2} = |-, -\rangle$$

$$\hat{S}_z \chi_{S3} = \hbar m_s \chi_{S3} = 0 \chi_{S3}$$

$$m_s=0$$

$$\chi_{S3} = \frac{1}{\sqrt{2}} [|+,-\rangle + |- ,+\rangle]$$

$$\hat{S}^2 \chi_A = \hbar^2 s(s+1) \chi_A = 0 \chi_A$$

$$s = |s_1 - s_2| = 0$$

$$\chi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} [|+,-\rangle - |- ,+\rangle]$$

$$\hat{S}_z \chi_A = 0 \chi_A = \hbar m_s \chi_A$$

$$m_s=0$$

Gdy operator Hamiltona (nie zależny od operatorów związanych ze spinem) można przedstawić w postaci $\hat{H} = \hat{H}_0 = \hat{H}_1(\vec{r}_1) + \hat{H}_2(\vec{r}_2)$

to funkcję falową **zależną od zmiennych przestrzennych** dwóch fermionów znajdujących się w stanie **singletowym** (w którym spiny cząstek są ustawione antyrównolegle do siebie) można przedstawić w postaci **symetrycznej**

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{\tilde{\alpha}}(\vec{r}_1) \psi_{\tilde{\beta}}(\vec{r}_2) + \psi_{\tilde{\alpha}}(\vec{r}_2) \psi_{\tilde{\beta}}(\vec{r}_1)]$$

gdzie $\hat{H}_1 \psi_{\tilde{\alpha}}(\vec{r}_1) = E_{\tilde{\alpha}} \psi_{\tilde{\alpha}}(\vec{r}_1) \quad \hat{H}_2 \psi_{\tilde{\beta}}(\vec{r}_2) = E_{\tilde{\beta}} \psi_{\tilde{\beta}}(\vec{r}_2)$

zaś funkcję falową **zależną od zmiennych przestrzennych** dwóch fermionów znajdujących się w dowolnym stanie **trypletowym** (w którym spiny cząstek są ustawione równolegle do siebie) można przedstawić w postaci

antysymetrycznej

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{\tilde{\alpha}}(\vec{r}_1) \psi_{\tilde{\beta}}(\vec{r}_2) - \psi_{\tilde{\alpha}}(\vec{r}_2) \psi_{\tilde{\beta}}(\vec{r}_1)]$$

W powyższych wzorach liczby kwantowe $\tilde{\alpha}, \tilde{\beta}$ indeksują tylko część funkcji falowej zależnej od zmiennych przestrzennych w związku z tym jest możliwe znalezienie dwóch fermionów znajdujących się w stanie singletowym opisanym funkcją falową $\psi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ z $\tilde{\alpha} = \tilde{\beta}$ gdyż różnią się one rzutem spinu na oś Oz.

Funkcja falowa zależna od zmiennych przestrzennych identycznych cząstek znajdujących się **w stanie trypletowym**

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{\tilde{\alpha}}(\vec{r}_1) \psi_{\tilde{\beta}}(\vec{r}_2) - \psi_{\tilde{\alpha}}(\vec{r}_2) \psi_{\tilde{\beta}}(\vec{r}_1)]$$

znikałaby w przypadku cząstki znajdowały się w tym samym położeniu

$$\vec{r}_1 = \vec{r}_2 \rightarrow \psi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_1) = 0$$

Funkcja falowa identycznych cząstek znajdujących się **w stanie singletowym**

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{\tilde{\alpha}}(\vec{r}_1) \psi_{\tilde{\beta}}(\vec{r}_2) + \psi_{\tilde{\alpha}}(\vec{r}_2) \psi_{\tilde{\beta}}(\vec{r}_1)]$$

w przypadku gdyby cząstki znajdowały się w tym samym położeniu nie znika

$$\psi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_1) = \frac{2}{\sqrt{2}} \psi_{\tilde{\alpha}}(\vec{r}_1) \psi_{\tilde{\beta}}(\vec{r}_1)$$

Powyższa własność wskazuje na to że iż **w stanie trypletowym cząstki unikają przebywania w odległości bliskiej siebie, zaś w stanie singlowym cząstki preferują pozostawanie w bliskiej odległości od siebie. Oddziaływanie prowadzące do opisywanych efektów zależne od względnego ustawienia spinów obu cząstek nazywamy oddziaływaniem wymiennym.**

Oddziaływanie wymienne- zależność energii układu od konfiguracji spinowej

Założmy iż oba fermiony są elektronami obdarzonymi ładunkiem e .

Potencjał opisujący oddziaływanie elektrostatyczne między nimi można

przyjąć w postaci
$$V = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

gdzie r_{12} – odległość między fermionami

Można łatwo policzyć wartość oczekiwaną operatora Hamiltona $\hat{H} = \hat{H}_0 + V(r)$

czyli operatora $\hat{H}_0 = \hat{H}_1(\vec{r}_1) + \hat{H}_2(\vec{r}_2)$ uzupełnionego o człon opisujący oddziaływanie elektrostatyczne pomiędzy elektronami w stanach własnym operatora $\hat{H}_0$ singletowym i trypletowym wprowadzonych poprzednio.

Wartość ta będąca miarą energii układu jest równa

$$E = E_{\tilde{\alpha}} + E_{\tilde{\beta}} + J - K \text{ w stanie trypletowym}$$

$$\text{ i } E = E_{\tilde{\alpha}} + E_{\tilde{\beta}} + J + K \text{ w stanie singletowym gdy } \alpha \neq \beta$$

gdzie
$$J = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_{R^3} d^3 r_1 \int_{R^3} d^3 r_2 |\psi_{\tilde{\alpha}}(\vec{r}_1)|^2 \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} |\psi_{\tilde{\beta}}(\vec{r}_2)|^2 > 0$$

$$K = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_{R^3} d^3 r_1 \int_{R^3} d^3 r_2 \psi_{\tilde{\alpha}}^*(\vec{r}_1) \psi_{\tilde{\beta}}^*(\vec{r}_2) \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \psi_{\tilde{\beta}}(\vec{r}_1) \psi_{\tilde{\alpha}}(\vec{r}_2) > 0$$

Człon $J = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_{R^3} d^3r_1 \int_{R^3} d^3r_2 |\psi_{\tilde{\alpha}}(\vec{r}_1)|^2 \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} |\psi_{\tilde{\beta}}(\vec{r}_2)|^2$

opisuje energie elektrostatycznego oddziaływania elektronów znajdujących się punktach określonych przez wektory $\vec{r}_1$ i $\vec{r}_2$ uśrednioną po różnych możliwych położeniach tych elektronów opisanymi gęstościami prawdopodobieństwa $|\psi_{\tilde{\alpha}}(\vec{r}_1)|^2$ oraz $|\psi_{\tilde{\beta}}(\vec{r}_2)|^2$

Człon $K = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int d^3r_1 \int d^3r_2 \psi_{\tilde{\alpha}}^*(\vec{r}_1) \psi_{\tilde{\beta}}^*(\vec{r}_2) \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \psi_{\tilde{\beta}}(\vec{r}_1) \psi_{\tilde{\alpha}}(\vec{r}_2)$

opisuje energie wymienną i nie ma prostej interpretacji klasycznej
Różnica energii stanów singletowego i trypletowego jest równa

$$E_{\text{sing}} - E_{\text{tryp}} = 2K$$

Energia układu złożonego wyłącznie z dwóch elektronów jest większa w układzie singletowym niż trypletowym

Oddziaływanie wymienne-zależność energii układu od konfiguracji spinowej

- 1) Oddziaływanie wymienne w układzie złożonym z dwóch identycznych fermionów obdarzonych ładunkiem elektrycznym (np. elektronów) oddziałujących ze sobą elektrostatycznie powoduje uzależnienie energii układu od ustawienia spinów obu fermionów nawet wówczas gdy operator Hamiltona nie zależy od operatorów spinowych. W szczególności np. z tego iż w stanie trypletowym fermiony znajdują się w dalszej odległości od siebie niż w stanie singletowym wynika iż dodatnia średnia energia ich wzajemnego oddziaływania elektrostatycznego jest większa w stanie singletowym niż trypletowym, dlatego energia układu w stanie trypletowym jest niższa niż w stanie singletowym. Dlatego dwa elektrony dążąc do minimalizacji swojej całkowitej energii unikają zajmowania stanów w których ich spiny są antyrównoległe do siebie (gdy nie ma innych zewnętrznych czynników, które energetycznie preferują taki stan). Obserwuje się to w atomach wieloelektronowych
- 2) Oddziaływanie wymienne jest odpowiedzialne za powstawanie wiązań w przypadku znacznej ilości cząsteczek, z tym że istnienie oddziaływań elektrostatycznych pomiędzy elektronami i jądrami może prowadzić do tego iż elektrony tworzące wiązanie znajdują się w stanie singletowym a nie trypletowym, gdyż energia stanu singletowego jest niższa niż trypletowego (sytuacja taka występuje w cząsteczce wodoru).

Przykładowe pytania opisowe

- 1) Sformułować zakaz Pauliego Jakich cząstek dotyczy zakaz Pauliego? Jak można go uzasadnić wykorzystując postać funkcji stanu (falowej) opisującej układ złożony z dwóch (lub wielu) takich cząstek?
- 2) Jaki stan nazywamy singletowym, a jaki trypletowym? Z czym można powiązać oddziaływania wymienne? Czy w obecności tych oddziaływań energia układu złożonego z dwóch elektronów może zależeć od ustawienia spinów tych elektronów. Odpowiedź uzasadnić.

Przykładowe pytania testowe

- 1) Które z poniższych stwierdzeń są stwierdzeniami prawdziwymi?
- a) Kwadrat spinu cząstki będącej fermionem dany jest wzorem $\hbar^2 s(s+1)$, przy czym liczba s może przyjmować tylko wartość zależną od rodzaju cząstki będącą liczbą całkowitą nieujemną $s=0,1,2,3,\dots$
 - b) Kwadrat spinu cząstki będącej fermionem dany jest wzorem $\hbar^2 s(s+1)$, przy czym liczba s może przyjmować tylko wartość zależną od rodzaju cząstki będącą liczbą połówkową dodatnią $s=\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$
 - c) Rzut spinu cząstki będącej fermionem na oś Oz jest zawsze równy $\frac{\hbar}{2}$.
 - d) Elektron jest cząstką będącą fermionem.

Zaznaczyć wszystkie poprawne stwierdzenia.

- 2) Które z poniższych stwierdzeń są stwierdzeniami prawdziwymi?
- a) Funkcja stanu opisująca układ złożony z dwóch jednakowych fermionów zależna od zmiennych przestrzennych i spinowych obu cząstek zmienia znak przy zamianie tych cząstek ze sobą.
 - b) Funkcja stanu opisująca układ złożony z dwóch jednakowych fermionów zależna od zmiennych przestrzennych i spinowych obu cząstek nie zmienia się przy zamianie tych cząstek ze sobą.
 - c) Funkcje stanu opisujące układ złożony z dwóch jednakowych nieoddziałujących ze sobą fermionów można zawsze przedstawić jako iloczyn funkcji opisujących oddzielnie każdy z fermionów.
 - d) Dwa fermiony nie mogą znajdować się w tym samym stanie kwantowym (opisanym jednakową funkcją stanu zależną od zmiennych przestrzennych i spinowych).

Zaznaczyć wszystkie poprawne stwierdzenia.

3) Które z poniższych stwierdzeń są stwierdzeniami prawdziwymi?

- a) Kwadrat spinu cząstki będącej bozonem dany jest wzorem $\hbar^2 s(s+1)$, przy czym liczba s może przyjmować tylko wartość zależną od rodzaju cząstki będącą liczbą całkowitą nieujemną $s=0,1,2,3,\dots$
- b) Kwadrat spinu cząstki będącej bozonem dany jest wzorem $\hbar^2 s(s+1)$, przy czym liczba s może przyjmować tylko wartość zależną od rodzaju cząstki będącą liczbą połówkową dodatnią $s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$
- c) W wyniku pomiaru rzutu spinu bozonu na oś Oz można otrzymać wartość równą 0 .
- d) Elektron jest cząstką będącą bozonem.

Zaznaczyć wszystkie poprawne stwierdzenia.

4) Które z poniższych stwierdzeń są stwierdzeniami prawdziwymi?

- a) Funkcja stanu opisująca układ złożony z dwóch jednakowych bozonów zależna od zmiennych przestrzennych i spinowych obu cząstek zmienia znak przy zamianie tych cząstek ze sobą.
- b) Funkcja stanu opisująca układ złożony z dwóch jednakowych bozonów zależna od zmiennych przestrzennych i spinowych obu cząstek nie zmienia się przy zamianie tych cząstek ze sobą.
- c) Funkcje stanu opisujące układ złożony z dwóch jednakowych nieoddziałujących ze sobą bozonów znajdujących się w różnych stanach kwantowych można zawsze przedstawić jako iloczyn funkcji opisujących oddzielnie każdy z bozonów.
- d) Dwa bozony nie mogą znajdować się w tym samym stanie kwantowym (opisanym jednakową funkcją stanu zależną od zmiennych przestrzennych i spinowych)

Zaznaczyć wszystkie poprawne stwierdzenia.

5) Rozważamy układ złożony z dwóch **jednakowych fermionów, które traktujemy jako cząstki nierozróżnialne**. Operator Hamiltona opisujący układ równy jest sumie operatorów Hamiltona wprowadzonych dla każdego z fermionów $\hat{H} = \hat{H}_1(x_1) + \hat{H}_2(x_2)$, a układ znajduje się w stanie własnym pełnego operatora Hamiltona $\hat{H}$. Znane są funkcje własne $\Psi_\alpha(x_1)$ oraz $\Psi_\beta(x_2)$ operatorów $\hat{H}_1(x_1)$ oraz $\hat{H}_2(x_2)$ zależne od współrzędnych przestrzennych i spinowych odpowiednich fermionów spełniające odpowiednie równania własne

$$\hat{H}_i(x_i)\psi_\alpha(x_i) = E_\alpha\psi_\alpha(x_i) \qquad \hat{H}_i(x_i)\psi_\beta(x_i) = E_\beta\psi_\beta(x_i) \qquad (i=1,2; \alpha \neq \beta)$$

Które z poniższych stwierdzeń są stwierdzeniami prawdziwymi. Zaznaczyć wszystkie poprawne stwierdzenia

a) cząstki te podlegają zakazowi Pauliego

b) funkcje stanu (falową) opisująca układ można zapisać w postaci

$$\Psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_\alpha(x_1)\Psi_\beta(x_2) - \Psi_\beta(x_1)\Psi_\alpha(x_2)]$$

c) funkcje stanu (falową) opisująca układ można zapisać w postaci

$$\Psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_\alpha(x_1)\Psi_\beta(x_2) + \Psi_\beta(x_1)\Psi_\alpha(x_2)]$$

d) funkcje stanu (falową) opisująca układ można zapisać w postaci

$$\Psi(x_1, x_2) = \Psi_\alpha(x_1)\Psi_\beta(x_2)$$

6) Które z poniższych stwierdzeń są stwierdzeniami prawdziwymi? **Zaznaczyć wszystkie poprawne stwierdzenia.**

- a) Oddziaływania wymienne występują tylko między cząstkami wchodzącymi w skład układu, dla którego operator Hamiltona zależy od operatorów związanych ze spinem.
- b) Symetria części zależnej od zmiennych przestrzennych funkcji stanu układu złożonego z dwóch elektronów zależy od symetrii części zależnej od zmiennych spinowych funkcji stanu
- c) Dla dwóch elektronów znajdujących się w stanie trypletowym obserwuje się obniżenie prawdopodobieństwa znalezienia się tych elektronów w pobliżu siebie
- d) Dla dwóch elektronów znajdujących się w stanie singletowym obserwuje się obniżenie prawdopodobieństwa znalezienia się tych elektronów w pobliżu siebie
- e) Oddziaływanie wymienne prowadzi do obniżenia energii układu złożonego wyłącznie z 2 elektronów oddziałujących ze sobą elektrostatycznie gdy elektrony te znajdują się w stanie trypletowym
- f) Oddziaływanie wymienne prowadzi do obniżenia energii układu złożonego wyłącznie z 2 elektronów oddziałujących ze sobą elektrostatycznie gdy elektrony te znajdują się w stanie singletowym.
- g) Część funkcji stanu opisującej układ złożony z dwóch elektronów znajdujących się w stanie trypletowym zależna od zmiennych spinowych elektronów zmienia znak przy zamianie elektronów ze sobą.
- h) W stanie trypletowym kwadrat całkowitego spinu układu złożonego z dwóch elektronów jest równy 0.
- i) W stanie singletowym rzut całkowitego spinu układu złożonego z dwóch elektronów na oś Oz może przyjmować 3 różne wartości.

Dodatki (wyłącznie dla zainteresowanych)

Dodatek Stan singletowy i trypletowy –uzupełnienie

Funkcje zależne od zmiennych spinowych $\chi_A, \chi_{S1}, \chi_{S2}, \chi_{S3}$

opisujące odpowiednio stan singletowy i 3 stany trypletowe są funkcjami własnymi operatorów kwadratu całkowitego spinu układu złożonego z dwóch fermionów o $s=1/2$

$$\hat{S}^2 = \hat{\vec{S}}_1 \cdot \hat{\vec{S}}_1 + \hat{\vec{S}}_2 \cdot \hat{\vec{S}}_2 + 2\hat{\vec{S}}_1 \cdot \hat{\vec{S}}_2 = \hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + 2(\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x} + \hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y} + \hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z})$$

gdzie $\hat{\vec{S}} = \hat{\vec{S}}_1 + \hat{\vec{S}}_2$

oraz jego rzutu na oś Oz

$$\hat{S}_z = \hat{S}_{1z} + \hat{S}_{2z}$$

Można pokazać iż

$$\hat{S}^2 \chi_{Si} = \hbar^2 s(s+1) \chi_{Si} = 2\hbar^2 \chi_{Si}$$

$$i=1,2,3; s=s_1+s_2=1$$

$$\hat{S}_z \chi_{S1} = \hbar m_s \chi_{S1} = \hbar \chi_{S1}$$

$$m_s=1$$

$$\chi_{S1} = |+,+\rangle$$

$$\hat{S}_z \chi_{S2} = \hbar m_s \chi_{S2} = -\hbar \chi_{S2}$$

$$m_s=-1$$

$$\chi_{S2} = |-, -\rangle$$

$$\hat{S}_z \chi_{S3} = \hbar m_s \chi_{S3} = 0 \chi_{S3}$$

$$m_s=0$$

$$\chi_{S3} = \frac{1}{\sqrt{2}} [|+,-\rangle + |-,+\rangle]$$

$$S^2 \chi_A = \hbar^2 s(s+1) \chi_A = 0 \chi_A$$

$$s = |s_1 - s_2| = 0$$

$$\chi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} [|+,-\rangle - |-,+\rangle]$$

$$\hat{S}_z \chi_A = 0 \chi_A = \hbar m_s \chi_A$$

$$m_s=0$$

Szkic dowodu dla zainteresowanych

W dowodzie można wykorzystać reprezentacje macierzową

a) funkcji zależnych od zmiennej spinowej opisujących stany jednocząstkowe w których określony jest kwadrat spinu oraz rzut spinu na oś Oz pojedynczych fermionów o $s_1=s_2=1/2$

$$|+\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad |-\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

b) operatorów kwadratu oraz składowych spinu tych cząstek

$$\hat{S}_j^2 = \frac{3\hbar^2}{4} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\hat{S}_{jx} = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\hat{S}_{jy} = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$$

$$\hat{S}_{jz} = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

a także relacje

$$\hat{S}_j^2 \chi(m_{s1}, m_{s2}) = \hbar^2 s_j (s_j + 1) \chi(m_{s1}, m_{s2}) = \frac{3}{4} \hbar^2 \chi(m_{s1}, m_{s2}) \quad s_j = \frac{1}{2} \quad j=1,2$$

$$\hat{S}_{1z} \chi(m_{s1}, m_{s2}) = \hbar m_{s1} \chi(m_{s1}, m_{s2})$$

$$\hat{S}_{2z} \chi(m_{s1}, m_{s2}) = \hbar m_{s2} \chi(m_{s1}, m_{s2})$$

(oznaczenia $\chi_A = |\chi_A\rangle$ $\chi_{Si} = |\chi_{Si}\rangle$ $i=1,2,3$

$$\chi\left(m_{s1} = \frac{1}{2}, m_{s2} = \frac{1}{2}\right) = |+,+\rangle \quad \chi\left(m_{s1} = -\frac{1}{2}, m_{s2} = -\frac{1}{2}\right) = |-, -\rangle \quad \chi\left(m_{s1} = \frac{1}{2}, m_{s2} = -\frac{1}{2}\right) = |+,-\rangle \quad)$$

$$\hat{S}_z |\chi_{S1}\rangle = \hat{S}_{1z} |+,+\rangle + \hat{S}_{2z} |+,+\rangle = \frac{\hbar}{2} |+,+\rangle + \frac{\hbar}{2} |+,+\rangle = \hbar |+,+\rangle = \hbar |\chi_{S1}\rangle$$

$$\hat{S}_z |\chi_{S2}\rangle = \hat{S}_{1z} |-, -\rangle + \hat{S}_{2z} |-, -\rangle = -\frac{\hbar}{2} |-, -\rangle - \frac{\hbar}{2} |-, -\rangle = -\hbar |-, -\rangle = -\hbar |\chi_{S2}\rangle$$

$$\begin{aligned} \hat{S}_z |\chi_{S3}\rangle &= \hat{S}_{1z} \frac{1}{\sqrt{2}} [|+,-\rangle + |-,+\rangle] + \hat{S}_{2z} \frac{1}{\sqrt{2}} [|+,-\rangle + |-,+\rangle] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{\hbar}{2} |+,-\rangle - \frac{\hbar}{2} |-,+\rangle \right] + \frac{1}{\sqrt{2}} \left[-\frac{\hbar}{2} |+,-\rangle + \frac{\hbar}{2} |-,+\rangle \right] = 0 \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} [|+,-\rangle + |-,+\rangle] = 0 |\chi_{S3}\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{S}_z |\chi_A\rangle &= \hat{S}_{1z} \frac{1}{\sqrt{2}} [|+,-\rangle - |-,+\rangle] + \hat{S}_{2z} \frac{1}{\sqrt{2}} [|+,-\rangle - |-,+\rangle] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{\hbar}{2} |+,-\rangle - \left(-\frac{\hbar}{2}\right) |-,+\rangle \right] + \frac{1}{\sqrt{2}} \left[-\frac{\hbar}{2} |+,-\rangle - \frac{\hbar}{2} |-,+\rangle \right] = 0 \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} [|+,-\rangle - |-,+\rangle] = 0 |\chi_A\rangle \end{aligned}$$

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + 2(\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x} + \hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y} + \hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z})$$

Jest oczywiste iż $\hat{S}_j^2|\chi_{Si}\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\chi_{Si}\rangle \quad \hat{S}_j^2|\chi_A\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\chi_A\rangle \quad (j=1,2;i=1,2,3)$

$$\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}|\chi_{S1}\rangle = \hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}|+,+\rangle = \frac{\hbar}{2} \cdot \frac{\hbar}{2}|+,+\rangle = \frac{\hbar^2}{4}|+,+\rangle = \frac{\hbar^2}{4}|\chi_{S1}\rangle$$

$$\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}|\chi_{S2}\rangle = \hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}|-,-\rangle = \left(-\frac{\hbar}{2}\right) \cdot \left(-\frac{\hbar}{2}\right)|-,-\rangle = \frac{\hbar^2}{4}|-,-\rangle = \frac{\hbar^2}{4}|\chi_{S2}\rangle$$

$$\begin{aligned} \hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}|\chi_{S3}\rangle &= \hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z} \frac{1}{\sqrt{2}} [|+,-\rangle + |- ,+\rangle] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{\hbar}{2} \cdot \left(-\frac{\hbar}{2}\right) |+,-\rangle + \left(-\frac{\hbar}{2}\right) \left(\frac{\hbar}{2}\right) |- ,+\rangle \right] = \left(-\frac{\hbar^2}{4}\right) \frac{1}{\sqrt{2}} [|+,-\rangle + |- ,+\rangle] = -\frac{\hbar^2}{4}|\chi_{S3}\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}|\chi_A\rangle &= \hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z} \frac{1}{\sqrt{2}} [|+,-\rangle - |- ,+\rangle] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{\hbar}{2} \cdot \left(-\frac{\hbar}{2}\right) |+,-\rangle - \left(-\frac{\hbar}{2}\right) \left(\frac{\hbar}{2}\right) |- ,+\rangle \right] = \left(-\frac{\hbar^2}{4}\right) \frac{1}{\sqrt{2}} [|+,-\rangle - |- ,+\rangle] = -\frac{\hbar^2}{4}|\chi_A\rangle \end{aligned}$$

$$\hat{S}_{ix}|+\rangle = \frac{\hbar}{2} \cdot \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2} |-\rangle \quad \hat{S}_{ix}|-\rangle = \frac{\hbar}{2} \cdot \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2} |+\rangle$$

$$\hat{S}_{iy}|+\rangle = \frac{\hbar}{2} \cdot \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 \\ i \end{bmatrix} = \frac{i\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{i\hbar}{2} |-\rangle \quad \hat{S}_{iy}|-\rangle = \frac{\hbar}{2} \cdot \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} -i \\ 0 \end{bmatrix} = -\frac{i\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = -\frac{i\hbar}{2} |+\rangle$$

$$(\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x} + \hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y})|\chi_{S1}\rangle = (\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x} + \hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y})|+,+\rangle = \frac{\hbar}{2} \cdot \frac{\hbar}{2} |-, -\rangle + \left(\frac{i\hbar}{2}\right) \cdot \left(\frac{i\hbar}{2}\right) |-, -\rangle = 0$$

$$(\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x} + \hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y})|\chi_{S2}\rangle = (\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x} + \hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y})|-, -\rangle = \frac{\hbar}{2} \cdot \frac{\hbar}{2} |+, +\rangle + \left(\frac{-i\hbar}{2}\right) \cdot \left(\frac{-i\hbar}{2}\right) |+, +\rangle = 0$$

$$\begin{aligned} (\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x} + \hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y})|\chi_{S3}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} [(\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x} + \hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y})|+,-\rangle + (\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x} + \hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y})|-, +\rangle] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \left[\frac{\hbar}{2} \cdot \frac{\hbar}{2} + \left(\frac{i\hbar}{2}\right) \left(\frac{-i\hbar}{2}\right) \right] |-, +\rangle + \left[\frac{\hbar}{2} \cdot \frac{\hbar}{2} + \left(\frac{-i\hbar}{2}\right) \left(\frac{i\hbar}{2}\right) \right] |+, -\rangle \right\} = \frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{\sqrt{2}} [|-, +\rangle + |+, -\rangle] = \frac{\hbar^2}{2} |\chi_{S3}\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x} + \hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y})|\chi_A\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} [(\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x} + \hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y})|+,-\rangle - (\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x} + \hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y})|-, +\rangle] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \left[\frac{\hbar}{2} \cdot \frac{\hbar}{2} + \left(\frac{i\hbar}{2}\right) \left(\frac{-i\hbar}{2}\right) \right] |-, +\rangle - \left[\frac{\hbar}{2} \cdot \frac{\hbar}{2} + \left(\frac{-i\hbar}{2}\right) \left(\frac{i\hbar}{2}\right) \right] |+, -\rangle \right\} = \frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{\sqrt{2}} [|-, +\rangle - |+, -\rangle] = -\frac{\hbar^2}{2} |\chi_A\rangle \end{aligned}$$

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + 2(\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x} + \hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y} + \hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z})$$

$$\begin{aligned}\hat{S}^2 \chi_{s1} &= \hat{S}_1^2 \chi_{s1} + \hat{S}_2^2 \chi_{s1} + 2(\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x} + \hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y})\chi_{s1} + 2\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}\chi_{s1} = \\ &= \left(\frac{3}{4}\hbar^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 + 0 + 2\frac{\hbar^2}{4} \right) \chi_{s1} = 2\hbar^2 \chi_{s1}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{S}^2 \chi_{s2} &= \hat{S}_1^2 \chi_{s2} + \hat{S}_2^2 \chi_{s2} + 2(\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x} + \hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y})\chi_{s2} + 2\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}\chi_{s2} = \\ &= \left(\frac{3}{4}\hbar^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 + 0 + 2\frac{\hbar^2}{4} \right) \chi_{s2} = 2\hbar^2 \chi_{s2}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{S}^2 \chi_{s3} &= \hat{S}_1^2 \chi_{s3} + \hat{S}_2^2 \chi_{s3} + 2(\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x} + \hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y})\chi_{s3} + 2\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}\chi_{s3} = \\ &= \left(\frac{3}{4}\hbar^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 + 2\frac{\hbar^2}{2} - 2\frac{\hbar^2}{4} \right) \chi_{s3} = 2\hbar^2 \chi_{s3}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{S}^2 \chi_A &= \hat{S}_1^2 \chi_A + \hat{S}_2^2 \chi_A + 2(\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x} + \hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y})\chi_A + 2\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}\chi_A = \\ &= \left(\frac{3}{4}\hbar^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 - 2\frac{\hbar^2}{2} - 2\frac{\hbar^2}{4} \right) \chi_A = 0\chi_A\end{aligned}$$

Stan układu dwóch cząstek- splatanie kwantowe

Przestrzeń Hilberta układu zawierającego N cząstek można traktować jako iloczyn tensorowy podprzestrzeni Hilberta dla każdej z cząstek.

Jeżeli układ złożony z tych cząstek znajduje się w stanie czystym to można go opisać jako wektor z tej przestrzeni.

Mówimy iż układ znajdujący się w stanie czystym znajduje się w stanie splątanym gdy nie jest możliwe przedstawienie wektora jego stanu jako iloczynu tensorowego wektorów opisujących stany każdej z cząstek osobna

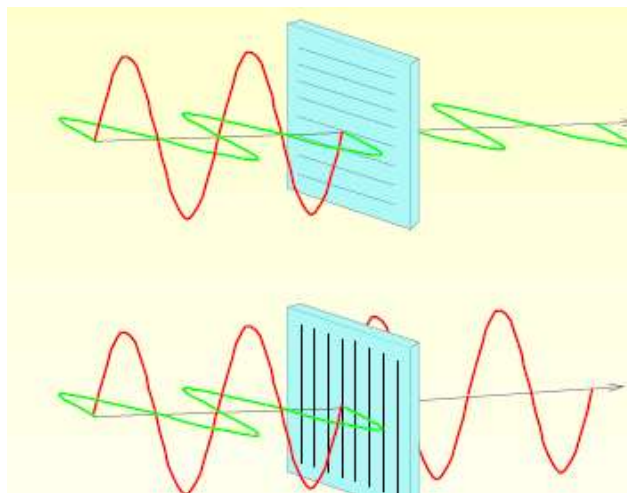
W tym stanie żadna z cząstek nie znajduje się w stanie czystym w przestrzeni Hilberta wprowadzonej do opisu pojedynczej cząstki

Informacja jaką posiadamy o układzie splątanym złożonym z obu cząstek jest większa niż o każdej z nich osobna, przy tym wynik pomiaru wykonany na 1 cząstce zmienia stan kwantowy drugiej natychmiast niezależnie od odległości w jakiej znajdują się te dwie cząstki

Po pomiarze pewnej wielkości fizycznej na pierwszej cząstce wynik pomiaru tej wielkości fizycznej, na drugiej cząstce często staje się w pełni przewidywalny, mimo iż przed pomiarem można go określić tylko w sposób probabilistyczny

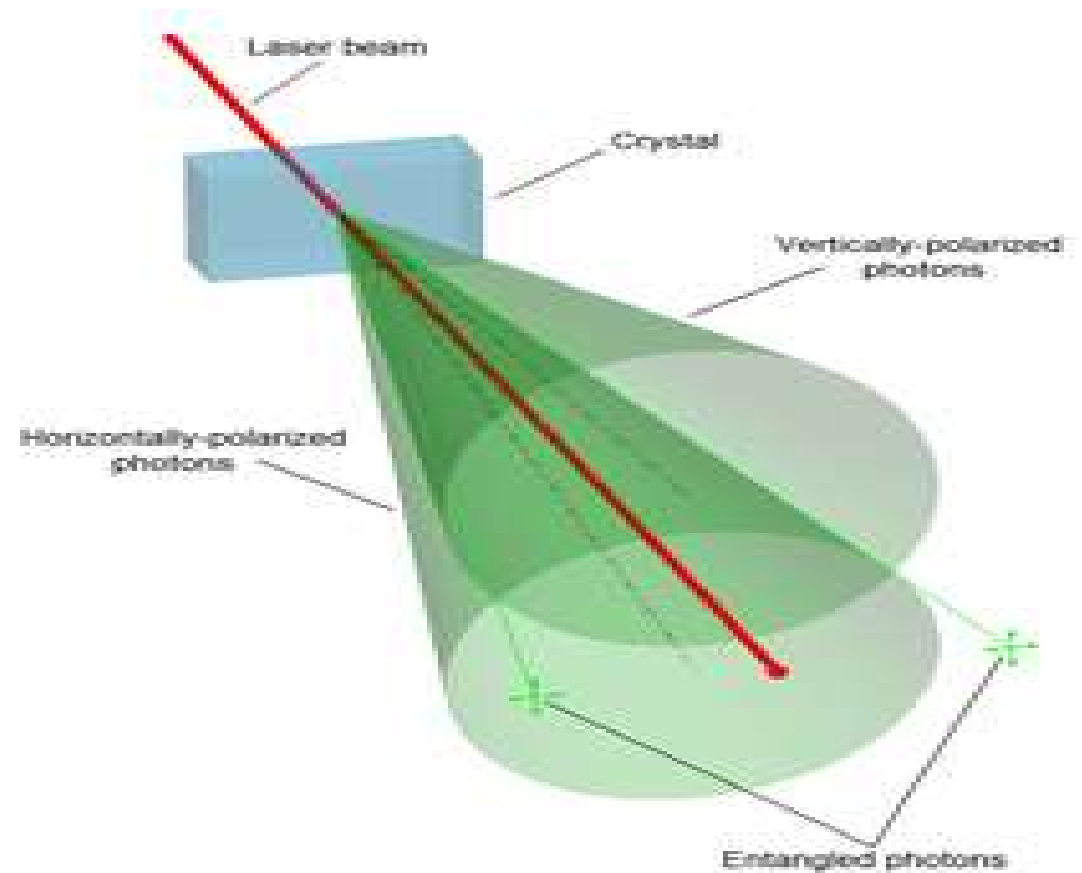
Przykłady układów splątanych

- 1) Układ złożony z dwóch cząstek o ustalonym pędzie całkowitym równym zeru
- 2) Układ złożony z dwóch elektronów (czyli cząstek o spinie opisanym przez liczbę $s=1/2$ o dwóch możliwych rzutach spinu na dowolna oś) należących do dwóch atomów wodoru powstających w wyniku rozpadu cząsteczki wodoru znajdującej się w stanie singletowym.
- 3) Układ złożony z dwóch fotonów o wzajemnie prostopadłych kierunkach polaryzacji.



Wytworzeni układu splątanych fotonów

Splątane fotony mogą powstać np. w wyniku przechodzenia fotonu przez dwójłomny kryształ np. beta boranu. Jeżeli wynik pomiaru wskaże iż polaryzacja jednego z powstałych fotonów jest pozioma to polaryzacja drugiego fotonu jest pionowa (przy ustalonej dowolnie osi polaryzatora określającego oś polaryzacji) przy czym dla pewnych kierunków ruchu fotonów fotony te są splątane tak iż przed przeprowadzeniem pomiaru nie jesteśmy w stanie określić jaki będzie wynik pomiaru polaryzacji pierwszego poddanego badaniom fotonu



Splątanie kwantowe

Gdy cząstka jest w stanie $|1\rangle$ to oznacza iż np. dla elektronu rzut jego spinu na wyróżnioną oś jest równy $\hbar/2$ zaś dla fotonu iż jego polaryzacja jest równoległa do osi wyróżnionej przez polaryzator

Gdy cząstka jest w stanie $|0\rangle$ to oznacza iż np. dla elektronu rzut jego spinu na wyróżnioną oś jest równy $-\hbar/2$ zaś dla fotonu iż jego polaryzacja jest prostopadła do osi wyróżnionej przez polaryzator

Stan opisany wektorem stanu $|\psi_{I,II}^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_I \otimes |1\rangle_{II} - |1\rangle_I \otimes |0\rangle_{II})$

jest singletowym stanem splątanim gdyż nie daje się przedstawić jako iloczyn tensorowy wektorów

$$|\psi_I\rangle = \alpha|0\rangle_I + \beta|1\rangle_{II} \quad |\psi_{II}\rangle = \gamma|0\rangle_{II} + \delta|1\rangle_{II}$$

$$|\psi_{I,II}\rangle = |\psi_I\rangle \otimes |\psi_{II}\rangle = \alpha\gamma|0\rangle_I \otimes |0\rangle_{II} + \alpha\delta|0\rangle_I \otimes |1\rangle_{II} + \beta\gamma|1\rangle_I \otimes |0\rangle_{II} + \beta\delta|1\rangle_I \otimes |1\rangle_{II}$$

$$|\psi_{I,II}\rangle = |\psi_{I,II}^-\rangle \text{ gdy jednocześnie } \alpha\gamma = 0 \quad \beta\delta = 0 \quad \alpha\delta = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad \beta\gamma = -\frac{1}{\sqrt{2}}$$

sprzeczność

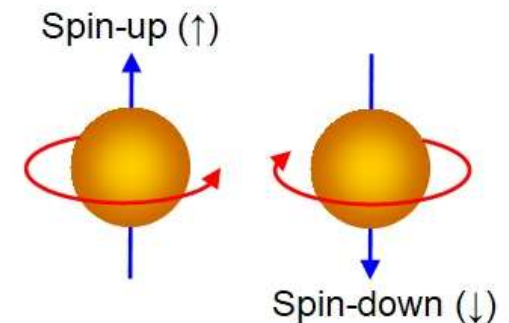
Paradoks EPR (A. Einstein, B. Podolsky, N. Rosen 1935)

Rozważamy układ złożony z dwóch cząstek znajdujących się w stanie splątania kwantowego. W szczególności w tym stanie istnieją wielkości fizyczne dla których nie możemy przewidzieć wyniku pomiaru dla żadnej z cząstek ale pomiar dla jednej cząstki pozwala przewidzieć z pewnością wynik pomiaru dla drugiej cząstki niezależnie od różnicy czasów pomiarów i odległości między cząstkami.

W oryginalnej wersji paradoksu rozważanymi wielkościami były położenie i pęd cząstek, których jednocześnie nie można dla pojedynczej cząstki określić.

Paradoks można prościej opisać analizując wielkości , które mogą przyjmować w przypadku pojedynczej cząstki tylko dwie wartości

Wielkością często rozważaną jest spin cząstki dla której liczba s określająca kwadrat spinu jest równa $\frac{1}{2}$. Cząstka taką może być elektron



W wyniku pomiaru rzutu spinu takiej cząstki na dowolną oś można otrzymać tylko dwie wartości $\hbar / 2$ lub $-\hbar / 2$ (wynik pomiaru w jednostkach $\hbar / 2$ jest równy 1 lub -1)

Nie można jednocześnie wyznaczyć rzutu spinu cząstki na dwie różne osie gdyż pomiar rzutu na jedną oś niweczy naszą informację o rzucie spinu na inną oś.

Jeżeli dwie cząstki o spinie $s=1/2$ znajdują się w splątanym stanie singletowym to

- a) rzut spinu całego układu na dowolnie wybraną oś jest równy zeru
- b) w wyniku pomiaru rzutu spinu jednej cząstki **na dowolną oś** otrzymać możemy dwie wartości z których jedna jest dodatnia a druga ujemna
- c) przeprowadzony po tym pomiarze pomiar rzutu spinu drugiej cząstki na **równoległą oś** jest ściśle zdeterminowany i daje wynik o przeciwnym znaku niż w przypadku pierwszej cząstki, natomiast wyniku pomiaru na inną oś nie można w sposób deterministyczny określić.
- d) odległość pomiędzy cząstkami w momencie wykonywania pomiarów może być tak duża że w czasie który upłynął między pomiarami informacja o wynikach pierwszego pomiaru nie mogła dotrzeć do miejsca przeprowadzenia drugiego pomiaru poruszając się z prędkością mniejszą niż światła. W sensie klasycznym druga cząstka „nie wie” zatem czy i jaki pomiar został przeprowadzony na pierwszej cząstce, a mimo to wynik pomiaru przeprowadzonego na niej jest skorelowany z wynikiem pomiaru przeprowadzonego na pierwszej cząstce

Według koncepcji zgodnej z zasadą **lokalnego realizmu** opartej **na istnieniu lokalnych ukrytych zmiennych** wyjaśnienie opisanej sytuacji jest takie iż rzut spinu drugiej cząstki na dowolną oś jest zdeterminowany już od chwili powstania układu złożonego z tych dwóch cząstek czyli przed dokonaniem pomiaru spinu pierwszej cząstki tylko my nie posiadamy tej informacji gdyż mechanika kwantowa jest teoria niekompletną i dlatego znajomość funkcji falowej która według interpretacji kopenhaskiej zawiera maksymalną informację o układzie kwantowym nie pozwala nam przewidzenie wyników pomiarów dla żadnej cząstki przed dokonaniem pomiaru dla jednej z cząstek, choć wynik pomiaru rzutu spinu na dowolną oś dla każdej cząstki jest od początku deterministycznie ustalony (tylko my nie możemy go przewidzieć bo nie dysponujemy odpowiednią teorią).

Przyjęcie założeń iż pomiar przeprowadzony na jednej cząstce nie zmienia stanu w jakim znajduje się druga cząstka i obie cząstki mają określony rzut spinu na dowolną oś zanim dokonano jego pomiaru (**lokalny realizm**) prowadziłoby do możliwości przypisania pojedynczej cząstce określonych wartości rzutu spinu na różne osie wbrew prawom mechaniki kwantowej

Według teorii kwantowej (zgodnie z interpretacją kopenhaską)

- 1) Cały układ kwantowy złożony z obu cząstek jest jednym układem opisanym wspólną funkcją falową, która zawiera maksymalną informację o układzie kwantowym ale nie pozwala na określenie w sposób deterministyczny wyniku pomiaru rzutu spinu na żadną z osi dla żadnej z cząstek
- 2) W trakcie pomiaru rzutu na określoną oś spinu jednej cząstki następuje zmiana skokowa tej funkcji jednocześnie w całej przestrzeni niezależnie od wielkości obszaru w którym ta funkcja się rozciąga. Po dokonaniu pomiaru nowa funkcja ma taką postać iż można na jej podstawie określić wynik pomiaru przeprowadzonego na drugiej cząstce w sposób jednoznaczny
- 3) Powyższe spostrzeżenie nie stoi w sprzeczności ze szczególną teorią względności gdyż dokonując pomiaru spinu drugiej cząstki obserwator nie może w ten sposób od razu odebrać żadnej informacji od pierwszego obserwatora dokonującego pomiaru spinu pierwszej cząstki a zatem żaden sygnał nie może być przesłany z prędkością większą od światła
- 4) Przed dokonaniem pomiaru rzut spinu na dowolną oś żadnej z cząstek nie jest w ogóle określony (a nie tylko nie jest znany) w związku z czym nie można tych rzutów traktować jako mających ustaloną wartość

Czy można zweryfikować eksperymentalnie która teoria opisu doświadczeń z cząstkami znajdującymi się w splątanym stanie singletowym jest poprawna?

Przewidywanie wyników eksperymentu w teorii negującej istnienie lokalnych ukrytych zmiennych i teorii dopuszczającej istnienie takich zmiennych daje wynik identyczny gdy dokonuje się pomiaru spinu obu cząstek wzdłuż równoległych osi.

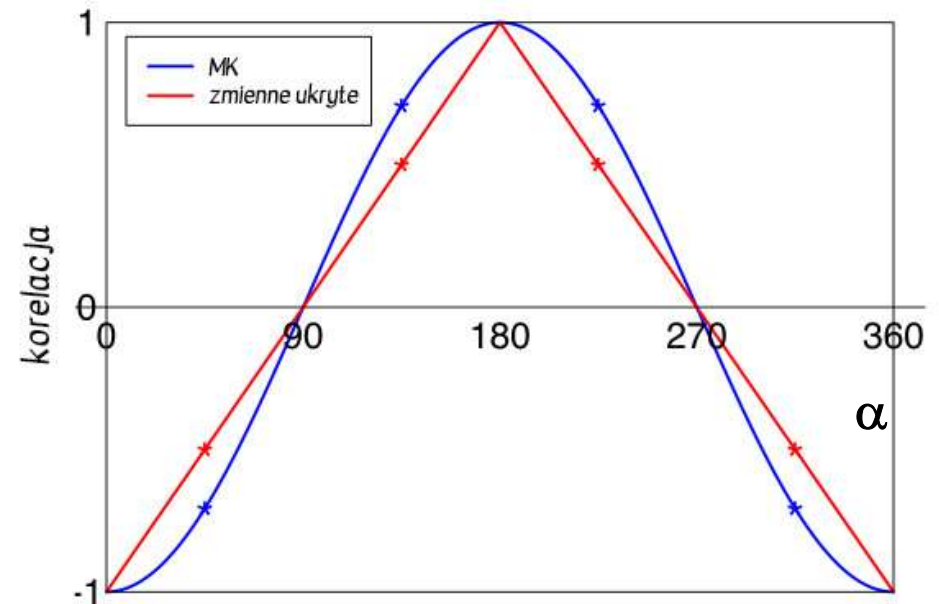
Można pokazać iż obie teorie różnią się przewidywaniami dotyczącymi korelacji wyników pomiarów rzutu spinów obu cząstek na nierównoległe do siebie osie tworzące ze sobą kąt α .

Gdyby istniały ukryte zmienne a nie istniały oddziaływania przenoszone z prędkością większą od światła prowadzące do ich zmiany (czyli zmienne te byłyby lokalne) to istniałyby ograniczenia dotyczące korelacji takich wyników

w oparciu o które można by sformułować nierówności Bella narzucone na średnie wyniki pomiarów iloczynów rzutu spinu splątanych cząstek na różne osie

Łamanie tych ograniczeń czyli łamanie nierówności Bella można zademonstrować w eksperymencie przeprowadzonym dla wielu par identycznych cząstek splątanych na których każdy z obserwatorów dokonuje pomiarów spinu przemienne na jedną z dwu nierównoległych do siebie osi, które nie pokrywają się z osiami wybranymi do pomiaru przez drugiego obserwatora.

Mechanika kwantowa dopuszcza łamanie nierówności Bella. Eksperyment wykazał również łamanie nierówności Bella.



Nierówność Bella

Sformułowana przez Johna Bella w 1964 , zmodyfikowana w 1969 przez J.F. Clausera , M.A. Horne, S.A. Shimony i R.A. Holta w celu umożliwienia jej eksperymentalnej weryfikacji .

Sformułowanie nierówności Bella

Dwie osoby dokonują pomiaru rzutu spinu dwóch cząstek o $s=1/2$ znajdujących się w stanie splątanym singletowym (lub kierunku polaryzacji dwóch splątanych fotonów) wzdłuż dwóch dowolnych nierównoległych (nieprostokątnych) osi. Rzutom spinu (kierunkom polaryzacji) odpowiadają cztery wielkości A, A' w przypadku osoby A i B, B' w przypadku osoby B. W wyniku każdego pomiaru można otrzymać dwa wyniki (rzut spinu dodatni lub ujemny, polaryzacja pionowa lub pozioma), którym przypisujemy wynik równy +1 i -1 odpowiednio. A zatem dozwolone wyniki wszystkich pomiarów oznaczone przez a, a', b, b' mogą przyjmować wartości ze zbioru $\{-1, 1\}$.

Określamy średnie z iloczynów wyników pomiarów wykonanych przez obu obserwatorów na kolejnych parach splątanych cząstek.

Tworzymy nową wielkość fizyczną $C = AB + AB' + A'B' - A'B$

Dozwolone wyniki pomiaru c tej wielkości przy założeniu iż wielkości A, A', B, B' mają dobrze określone wartości a, b, a', b' już przed dokonaniem pomiaru (czyli można każdej wielkości przypisać konkretną choć nie znaną wartość bez konieczności dokonywania pomiarów) można by określić ze wzoru

$$c = ab + ab' + a'b' - a'b = a(b + b') - a'(b - b') = \pm 2$$

$$\text{gdym} \quad |b + b'| = 2 \text{ i } |b - b'| = 0 \quad \text{lub} \quad |b + b'| = 0 \quad \text{i} \quad |b - b'| = 2$$

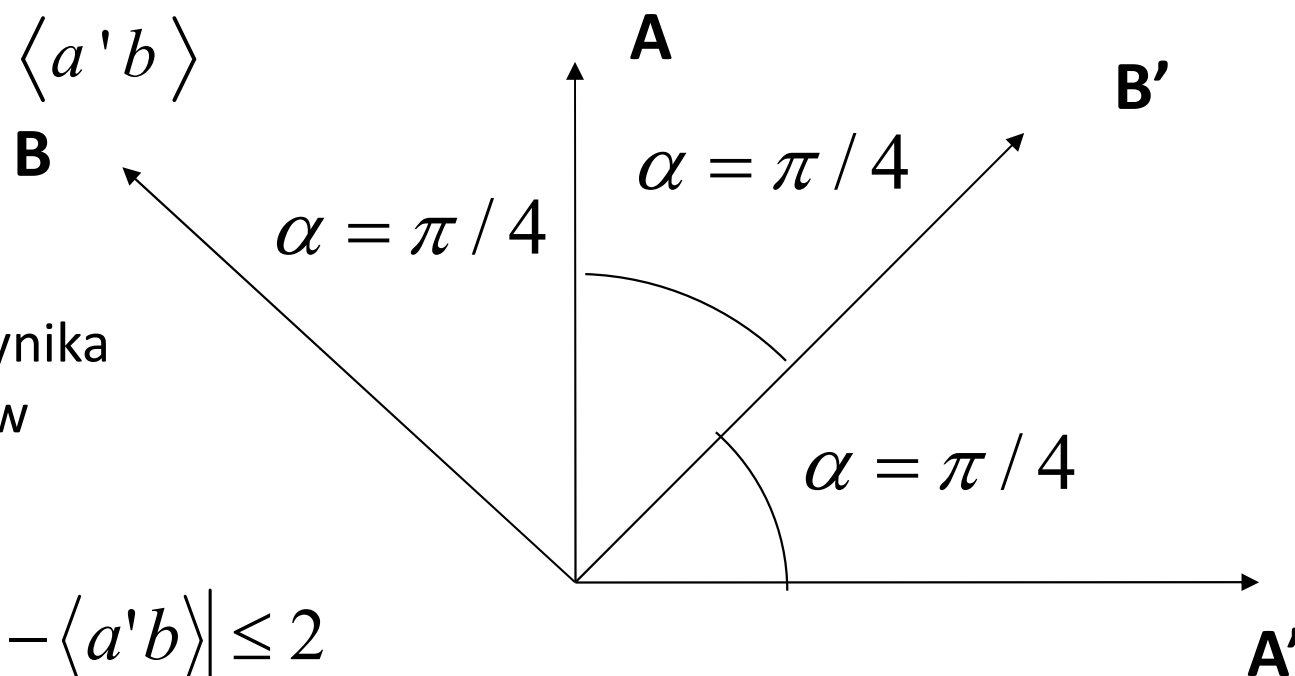
Wartości wielkości C nie można ustalić na podstawie pomiarów dla dwóch cząstek splątanych ale można określić średnie z iloczynów wyników pomiarów wielkości A, B, A', B' wykonanych przez obu obserwatorów na kolejnych parach splątanych cząstkach znajdujących się w tym samym stanie kwantowym przed pomiarami

$$\langle ab \rangle \quad \langle ab' \rangle \quad \langle a'b' \rangle \quad \langle a'b \rangle$$

Znając te średnie można oszacować średnią wartość wielkości C, przy czym z wcześniejszych rozważań wynika ograniczenie na tą wielkość w postaci **nierówności Bella**

gdyż $c = \pm 2$

$$|\langle c \rangle| = |\langle ab \rangle + \langle ab' \rangle + \langle a'b' \rangle - \langle a'b \rangle| \leq 2$$



Według mechaniki kwantowej gdy osie na które rzutujemy spin przeprowadzając pomiary wielkości A i B tworzą ze sobą kąt α to średnia wartość pomiaru iloczynu wielkości AB (wartość oczekiwana) jest równa $\langle AB \rangle = \langle ab \rangle = -\cos(\alpha)$

Można pokazać iż w przypadku gdy A, A', B, B' odpowiadają wielkościom fizycznym reprezentującym rzut spinu na nierównoległe osie tworzące ze sobą kąt $\alpha = \frac{\pi}{4}$ to mamy

$$|\langle C \rangle| = |\langle AB \rangle + \langle AB' \rangle + \langle A'B' \rangle - \langle A'B \rangle| = \left| -\cos\left(\frac{\pi}{4}\right) - \cos\left(\frac{\pi}{4}\right) - \cos\left(\frac{\pi}{4}\right) + \cos\left(3\frac{\pi}{4}\right) \right| = |-2\sqrt{2}| = 2\sqrt{2}$$

Z obliczeń kwantowych, wynika więc iż moduł średniej wartości wielkości fizycznej C może być przy pewnych ustawieniach osi większy od 2 czyli nierówność Bella może być łamana $|\langle c \rangle| > 2$.

Według (interpretacji kopenhaskiej) mechaniki kwantowej rozbieżność tą można tłumaczyć tym iż rzut spinu cząstek na określoną oś przed dokonaniem pomiarów jest nieustalony (wbrew założeniu przyjętemu przy wyznaczeniu c) i nie jest możliwe określenie w początkowym stanie jednocześnie wielkości A, A' (oraz B i B') i dlatego nierówność Bella nie jest prawdziwa.

W inny sposób niespełnienie nierówności Bella podczas pomiaru można by tłumaczyć tym iż podczas pomiaru rzutu spinu jednej cząstki wysyłany jest sygnał do drugiej, który wpływa na wynik pomiaru rzutu spinu drugiej cząstki, który w ogólnym przypadku musi propagować z prędkością większą od prędkości światła.

Testowanie nierówności Bella

Pierwszy raz była testowana z wykorzystaniem fotonów przez S.J. Freedmana i J.F. Clausera w 1972 roku .

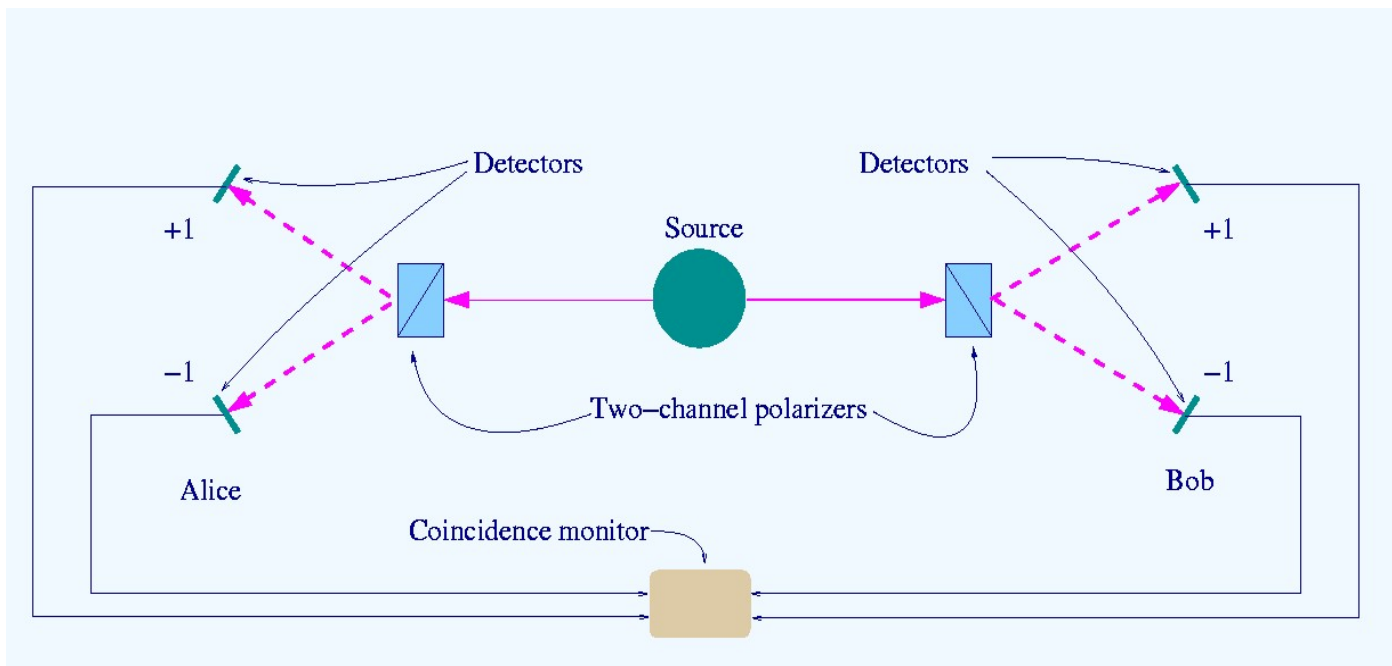
Ulepszone eksperymenty z wykorzystaniem fotonów zostały przeprowadzone m.in. na początku lat osiemdziesiątych XX wieku przez A. Aspecta (zwiększenie odległości między dwiema cząstkami w chwili pomiarów tak iż przekaz sygnału pomiędzy pomiarami musiał by się odbywać z prędkością większą od światła PRL 49 (1982) 1804), przez G. Weihsa i A. Zeilingera w 1998 roku (losowy wybór kierunku osi polaryzatorów, PRL 81 (1998) 5039) oraz w roku 2008 przez Salarta (detekcja cząstek w punktach odległych o 18km od siebie) a także A. Zeilingera (odległość między cząstkami przekraczała 144 km) .

Eksperyment w którym zaobserwowano wszystkie splatane pary cząstek został przeprowadzony z użyciem dodatnio naładowanych jonów berylu znajdujących się w stanie singletowym utworzonym z kombinacji stanu podstawowego i wzbudzonego. przez grupę kierowaną przez D. J. Winelanda w roku 2001 (Nature 409 (2001) 791)

W 1998 Z. Zeilinger ze współpracownikami analizował także stany splatane złożone z 3 fotonów znajdujących się w stanie GHZ, w przypadku których w pewnych sytuacjach w oparciu o mechanikę kwantową można wysnuć pewne przewidywania co do polaryzacji 3 fotonu, które są sprzeczne z przewidywaniami opartymi na lokalnym realizmie.

John F. Clauser, Allan Aspect i Anton Zeilinger uzyskali w 2022 nagrodę Nobla z fizyki

W eksperymentach z udziałem fotonów wielkości A, B, A', B' są związane z pomiarem polaryzacji fal związanych z fotonami 1 i 2 tworzącymi splataną parę fotonów. Pomiar dokonujemy przy pomocy polaryzatora dwukanałowego dla każdego fotonu, który może skierować padające fotony w dwóch różnych kierunkach w zależności od kierunku drgań pola elektrycznego związanego z tym fotonem po przejściu przez polaryzator (może zachodzić w kierunku równoległym lub prostopadłym do osi polaryzacji polaryzatora). Osie polaryzacji każdego polaryzatora możemy kierować w dwóch różnych kierunkach, którym odpowiadają wielkości fizyczne A, A' dla 1 fotonu i B, B' dla 2 fotonu, przy czym osie polaryzatora pierwszego przy pomiarach A i A' nie są do siebie ustawione prostopadle. To samo dotyczy drugiego polaryzatora przy pomiarach B i B' .



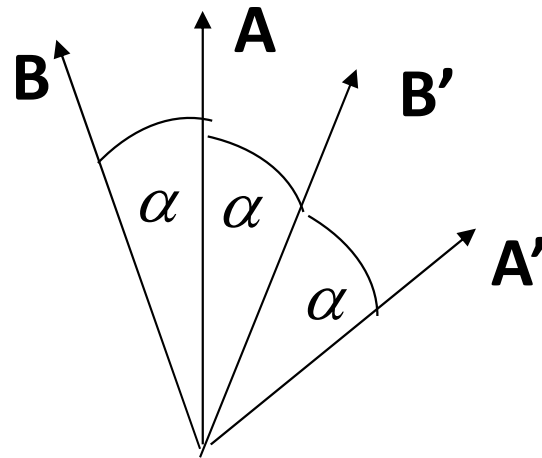
Wartość wielkości A jest równa $+1$ gdy polaryzacja fotonu jest zgodna z osią polaryzacji polaryzatora przy jego ustawieniu odpowiadającemu pomiarowi wielkości A . Gdy jest do niej prostopadła to za wynik pomiaru bierzemy -1 .

Określamy także wartości wielkości $AB, A'B, AB'$ i $A'B'$ równe iloczynom mierzonych wielkości dla obu splatanych fotonów i średnie wartości wielkości $AB, A'B, AB'$ i $A'B'$ wykorzystując w kolejnych pomiarach kolejne pary fotonów pochodzące z tego samego źródła.

Według mechaniki kwantowej średnia wyników pomiaru iloczynu wielkości AB dla dwóch fotonów splatanych z użyciem polaryzatorów których osie tworzą ze sobą kąt α winna być równa $\langle AB \rangle = \langle ab \rangle = -\cos(2\alpha)$

A zatem moduł średniej z wyników pomiarów wielkości $\hat{C} = \hat{A}\hat{B} + \hat{A}\hat{B}' + \hat{A}'\hat{B}' - \hat{A}'\hat{B}$ przy ustaleniu osi polaryzatorów jak na rysunku poniżej winien być równy

$$|\langle C \rangle| = |\langle AB \rangle + \langle AB' \rangle + \langle A'B' \rangle - \langle A'B \rangle| = |-\cos(2\alpha) - \cos(2\alpha) - \cos(2\alpha) + \cos(6\alpha)|$$



Moduł tej wartości średniej jest maksymalny gdy osie polaryzatorów

są ustawione względem siebie pod kątem $\alpha = \frac{\pi}{8}$.

Wówczas

$$|\langle C \rangle| = |\langle AB \rangle + \langle AB' \rangle + \langle A'B' \rangle - \langle A'B \rangle| = \left| -\cos\left(\frac{\pi}{4}\right) - \cos\left(\frac{\pi}{4}\right) - \cos\left(\frac{\pi}{4}\right) + \cos\left(3\frac{\pi}{4}\right) \right| = |-2\sqrt{2}| = 2\sqrt{2}$$

Eksperymenty przeprowadzono tak iż wybór dwóch możliwych osi polaryzacji polaryzatorów dokonywano losowo w takim czasie iż informacja o ustawieniu osi polaryzacji drugiego (pierwszego) polaryzatora nie mogła zostać przesłana do pierwszego(drugiego) fotonu przed pomiarem jego polaryzacji , podobnie jak wynik pomiaru polaryzacji 1 fotonu nie mógł zostać przesłany do polaryzatora 2 przed pomiarem polaryzacji drugiego fotonu z prędkością nie przekraczającą prędkości światła

W eksperymencie G. Weihsa i A. Zellingera z 1998 roku otrzymano eksperymentalnie na podstawie 14700 pomiarów przeprowadzonych w ciągu 10s iż

$$|\langle c \rangle| = |\langle ab \rangle + \langle a'b \rangle + \langle a'b' \rangle - \langle ab' \rangle| = 2,73 > 2$$

Jest to wynik sprzeczny z nierównością Bella zgodnie z którą

$$|\langle c \rangle| = |\langle ab \rangle + \langle ab' \rangle + \langle a'b' \rangle - \langle a'b \rangle| \leq 2$$

Wykorzystanie splątania –teleportacja kwantowa

- Alicja ma cząstkę A opisaną wektorem.

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle_A + \beta|1\rangle_A$$

- Chcemy aby cząstka C znajdującą się u Bronka znalazła się w tym samym stanie
- Dysponujemy stanem splątanym pomocniczej cząstki B znajdującej się u Alicji z cząstką C opisanym np. wektorem stanu

$$|\psi_{BC}^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_B \otimes |1\rangle_C - |1\rangle_B \otimes |0\rangle_C)$$

- Układ złożony z trzech cząstek jest w stanie

$$|\psi\rangle_A \otimes |\psi_{BC}^-\rangle = (\alpha|0\rangle_A + \beta|1\rangle_A) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_B \otimes |1\rangle_C - |1\rangle_B \otimes |0\rangle_C)$$

$$|\psi\rangle_A \otimes |\psi_{BC}^-\rangle = (\alpha|0\rangle_A + \beta|1\rangle_A) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_B \otimes |1\rangle_C - |1\rangle_B \otimes |0\rangle_C)$$

- Otrzymany stan przedstawiamy jako kombinacje stanów tworzących bazę Bella w przestrzeni stanów cząstek A i B

$$|\Phi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_A \otimes |0\rangle_B + |1\rangle_A \otimes |1\rangle_B)$$

$$|\psi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_A \otimes |1\rangle_B + |1\rangle_A \otimes |0\rangle_B)$$

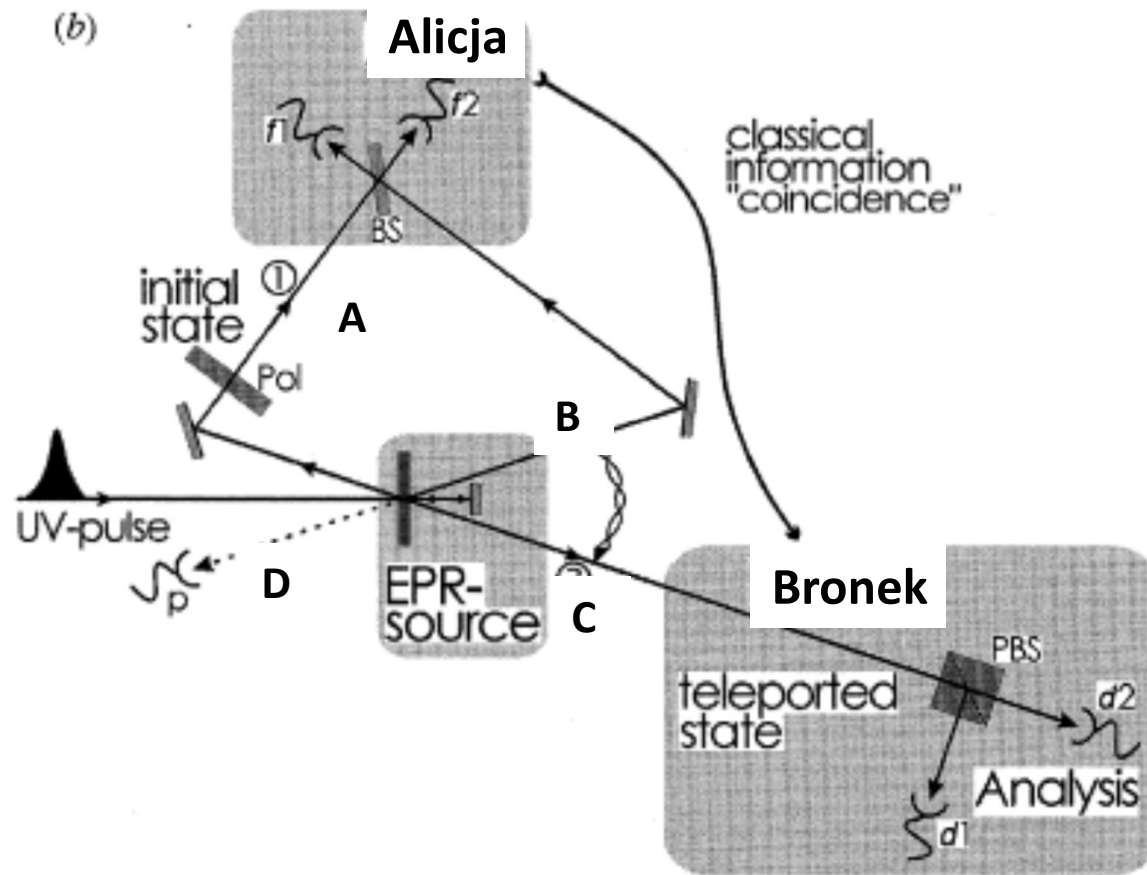
$$|\Phi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_A \otimes |0\rangle_B - |1\rangle_A \otimes |1\rangle_B)$$

$$|\psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_A \otimes |1\rangle_B - |1\rangle_A \otimes |0\rangle_B)$$

- Otrzymujemy $|\psi\rangle_A \otimes |\Phi_{BC}^+\rangle = |\Phi^+\rangle \otimes (\alpha|1\rangle_C - \beta|0\rangle_C) + |\Phi^-\rangle \otimes (\alpha|1\rangle_C + \beta|0\rangle_C) + |\psi^+\rangle \otimes (-\alpha|0\rangle_C + \beta|1\rangle_C) + |\psi^-\rangle \otimes (-\alpha|0\rangle_C - \beta|1\rangle_C)$
- Alicja dokonuje pomiaru w bazie Bella na cząstkach A i B, w wyniku czego otrzymuje informacje w jakim ze stanów Bella znalazły się cząstki A i B po pomiarze. Informację tą przekazuje Bronkowi, który wie w jakim stanie znajduje się cząstka C
- Gdy w wyniku pomiaru Alicji wynikło że cząstki A i B znajdują się w stanie $|\psi^-\rangle$ to cząstka C znajduje się w stanie $-\psi = -(\alpha|0\rangle_C + \beta|1\rangle_C)$ tożsamym ze stanem w jakim w chwili początkowo znajdowała się cząstka A

Teleportacja kwantowa – realizacja eksperymentalna

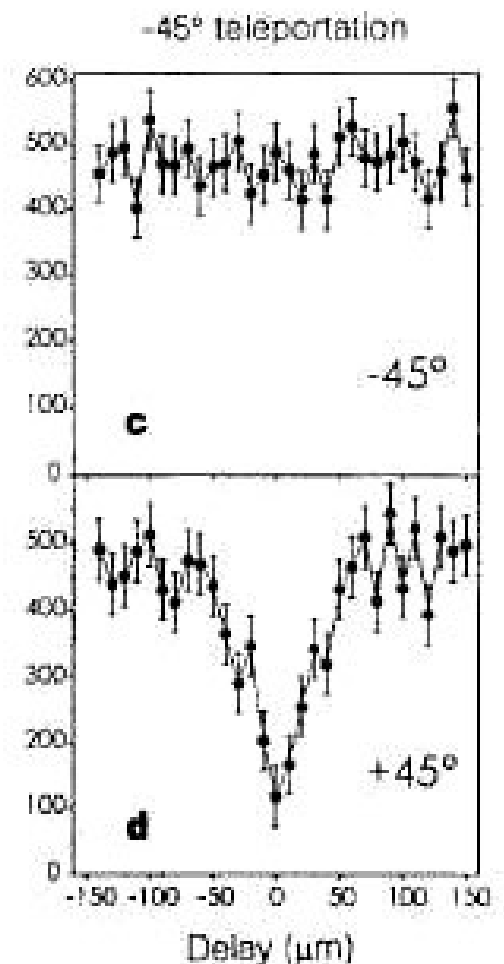
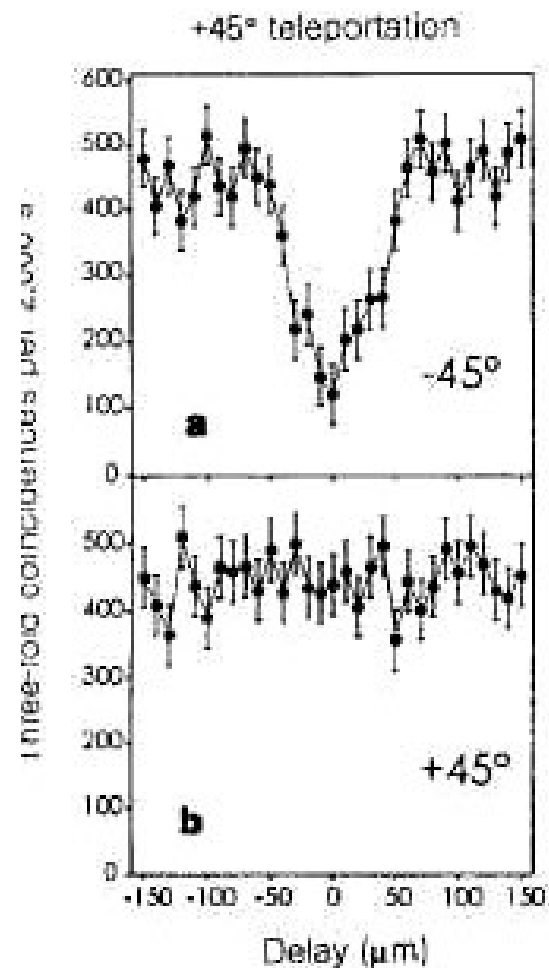
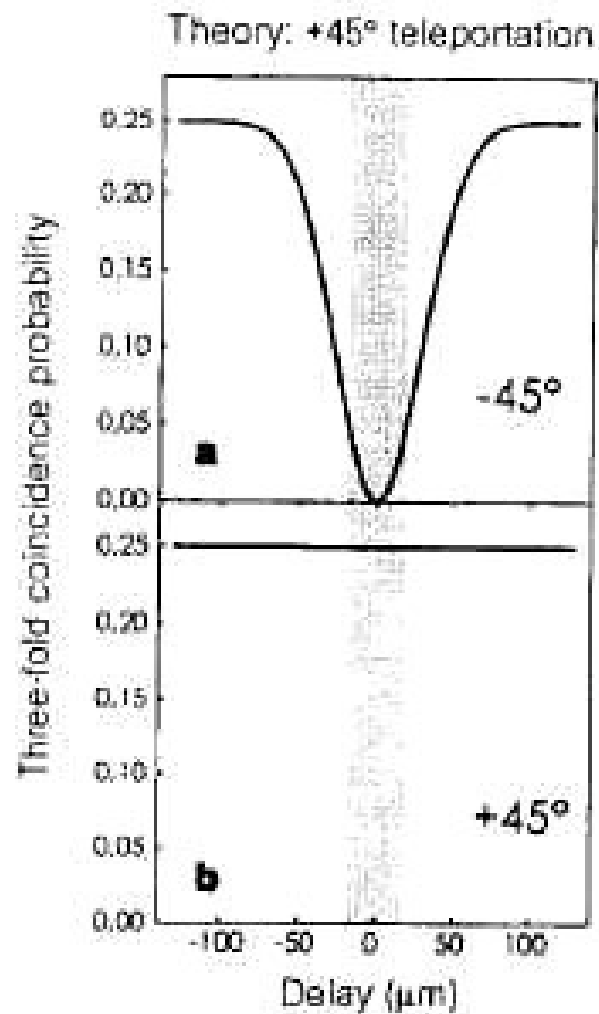
(Zellinger 1999)



Anton Zellinger et al..
Nature 390 (1997) 575

Teleportacja kwantowa –realizacja eksperymentalna z wykorzystaniem fotonów (A. Zeilinger 1999)

- Role cząstek pełnią fotony, przy czym ich stan jest określony poprzez dwa możliwe kierunki polaryzacji.
- Fotony splątane powstają w wyniku przejścia impulsu światła laserowego przez kryształ. Foton B jest kierowany do Alicji a foton C do Bronka.
- Impuls odbity od zwierciadła wywołuje emisję dodatkowego fotonu A, który kierowany jest do Alicji, po przejściu przez polaryzator , który dowolnie ustala jego polaryzację.
- Fotony A i B docierają do Alicji jednocześnie i padają z dwóch stron na zwierciadło przepuszczające oba fotony z prawdopodobieństwem 50% i odbijające je z prawdopodobieństwem 50% . W trakcie przejścia następuje splątanie fotonów A i B.
- Jeżeli fotony docierają do detektorów znajdujących się po obu stronach zwierciadła to znaczy że znalazły się w stanie Bela $|\psi^-\rangle$, a zatem foton C znalazł się w stanie w jakim po przejściu przez polaryzator znajdował się foton A

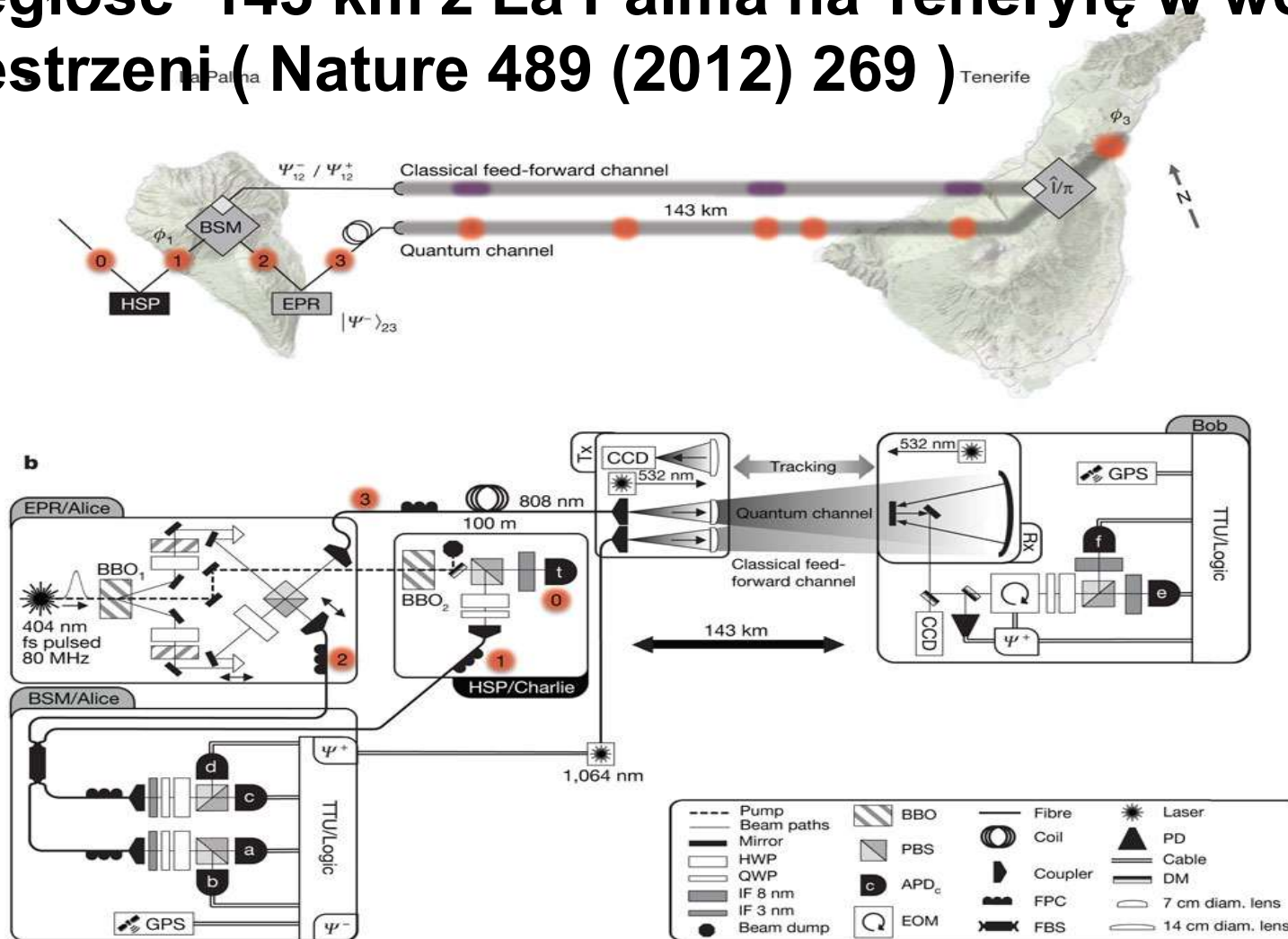


W przypadku gdy fotony typu A docierające do Alicji przechodzą przez polaryzator ustawiony pod kątem 45° to obserwuje się wyraźne obniżenie ilości fotonów typu C docierających w tym samym czasie do Bronka przechodzących przez polaryzator ustawiony pod kątem -45° (prawdopodobieństwo jego detekcji zgodnie z teorią dąży do zera). Oznacza to iż fotony te mają tę samą polaryzację co fotony docierające do Bronka. W przypadku gdy foton A docierający do Alicji nie zostaje splątany z fotonem B to prawdopodobieństwo jednoczesnego pojawienia się fotonów A i B po różnych stronach zwierciadła półprzepuszczalnego i przejścia fotonu C przez polaryzator jest równe 25%

Kwantowa teleportacja - sukcesy

W 2004 przy użyciu opisywanego protokołu i światłowodów dokonano teleportacji stanu polaryzacji fotonu na odległość 600m pod dnem Dunaju w Wiedniu

W 2012 udało się dokonać teleportacji stanu fotonu na odległość 143 km z La Palma na Teneryfę w wolnej przestrzeni (Nature 489 (2012) 269)



Teleportacja kwantowa –inne realizacje eksperymentalne

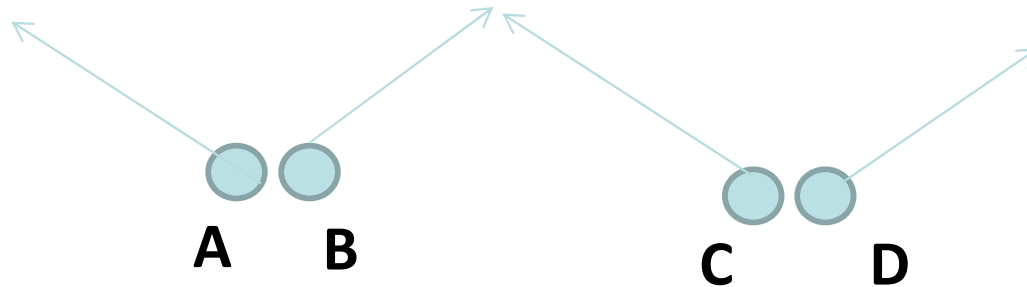
Rainer Blatt z Austrii –realizacja z użyciem jonów wapnia zamkniętych w pułapkach rozmieszczonych w regularnej sieci krystalograficznej o stałej sieci rzędu $5\ \mu m$ (Nature 429 (2004) 734).

Stan dwupoziomowy (qubit) tworzy jon mogący znajdować się w stanie singletowym podstawowym i metastabilnym stanie wzbudzonym o czasie życia rzędu sekundy oraz w stanach będących superpozycją tych stanów o czasie życia rzędu 0,1 s.

Zmianę stanów układu wymusza się przy użyciu wiązek laserowych. Wydajność rzędu 75%

Dawid Wineland z Kolarado –realizacja z użyciem jonów berylu (Nature 429 (2004) 737)

Teleportacja splątania



- 1) Załóżmy iż mamy pary splątanych fotonów A i B oraz C i D
- 2) Dokonujemy splątania fotonów B i C
- 3) W wyniku tego procesu foton D staje się repliką fotonu B na skutek kwantowej teleportacji
- 4) Gdy przed splątaniem fotonów B i C nie zmieniamy stanu fotonu B , to ponieważ foton B był splątany z fotonem A to w momencie splątania fotonów B i C foton D staje się splątany z fotonem A , pomimo iż wcześniej z nim bezpośrednio nigdy nie oddziaływał
- 5) Rodzaj splątania zależy od wyniku pomiaru stanu splątanego fotonów B i C . Brak tej informacji nie pozwala na potwierdzenie splątania
- 6) Pomiar ten można przeprowadzić już po pomiarze polaryzacji fotonów A i D

Kwantowa teleportacja

problemy

- Pomiar stanu Bella jest skomplikowany.
- Dla układu złożonego z 10^7 atomów wymagał by uzyskania 10^8 informacji.
- Stan czysty układu jest nietrwały i podlega silnym wpływom ze strony otoczenia w wyniku czego układ przechodzi do stanu mieszanego

Komputery kwantowe

W komputerze kwantowym operacje są przeprowadzane na tzw. qubitach , które mogą znajdować się w dowolnym stanie będącym superpozycją stanów $|0\rangle$ i $|1\rangle$

Liczba tych qubitów może osiągać obecnie wartości rzędu 100

Układ złożony z N qubitów może znajdować się w stanie będącym superpozycją 2^N stanów. Zaletą komputerów kwantowych jest możliwość jednoczesnego wykonywania operacji na wielu qubitach będących w stanie splątanym (a więc wykonywania jednocześnie operacji na 2^N stanach) , co pozwala przy opracowaniu właściwych algorytmów, do bardzo znaczącego przyspieszenia wykonywania pewnych operacji (np. rozkładu liczby na czynniki pierwsze algorytm Shora), choć wyniki pojedynczych obliczeń mogą zależeć od wykonanego pomiaru.

Istotnym wyzwaniem jest wybór układów pełniących rolę zbioru qubitów, tak by ograniczyć wpływ otoczenia na stan kwantowy układu tych qubitów. Otoczenie zwykle prowadzi do dekoherencji i przejścia układu złożonego z qubitów ze stanu czystego do mieszanego. Problemem może być też praktyczne zaimplementowanie wykonania operacji logicznych na układzie złożonym z tych qubitów

Do stworzenia qubitów próbuje się wykorzystać np.:

a) Fotony mogące znajdować się w stanie będącym superpozycją stanów o prostopadłych polaryzacjach

b) Spiny elektronowe lub jądrowe jonów uwięzionych w pułapkach magnetycznych

c) prąd tunelowy w złączu Josephsona mogący płynąć w przeciwnych kierunkach

d) Układy mogące znajdować się w dwóch wyraźnie rozróżnialnych stanach energetycznych (np. elektrony, ekscytyny na kropce kwantowej, atomy w pułapce optycznej)

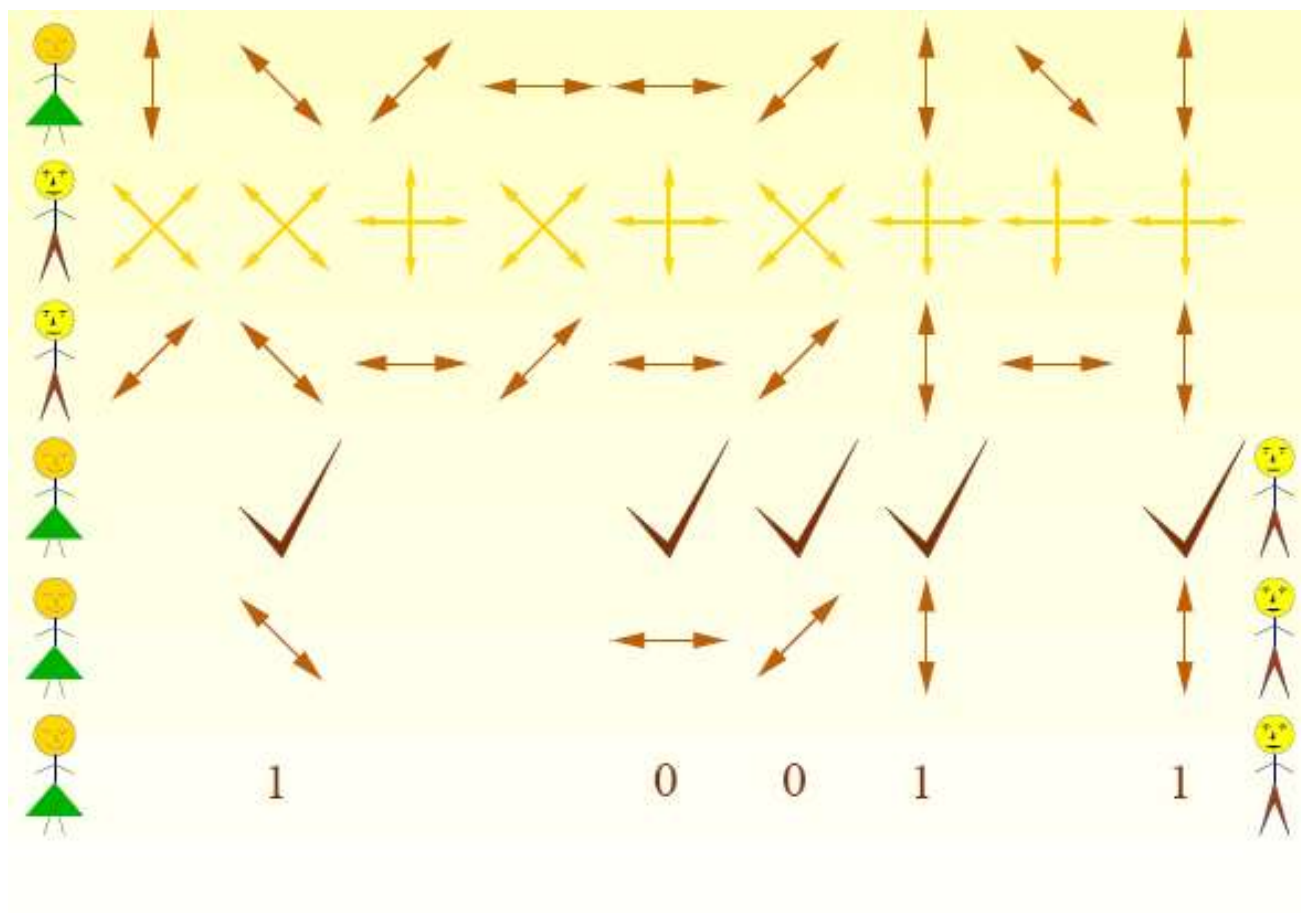
Kryptografia kwantowa

Może służyć do bezpiecznego przesyłania informacji

Algorytm Benneta-Brassarda

Alicja chce przesłać informacje do Boba. W tym celu

- 1) wysyła ciąg fotonów spolaryzowanych. Oś polaryzacji ustala losowo albo pionowo albo wzdłuż osi tworzącej kąt 45° z osią pionową. Przy każdym ustawieniu osi może wysłać foton spolaryzowany w kierunku zgodnym ze zwrotem osi polaryzatora lub w kierunku prostopadłym do tej osi.
- 2) Bob odbiera fotony, przy czym polaryzację mierzy ustawiając losowo oś polaryzatora albo w kierunku pionowym albo w kierunku tworzącym oś 45° z osią pionową. Gdy oś ta ustawi w tym samym kierunku co Alicja to może odkryć polaryzację fotonu właściwie, gdy nie to wynik pomiaru jest przypadkowy.
- 3) Następnie przekazuje on Alicji jawnie kierunki wyboru osi polaryzacji w każdym z pomiarów, a ona wiedząc jakich fotonów polaryzację odczytał prawidłowo, przekazuje mu informacje, które fotony zawierają właściwą informację.
- 4) W celu sprawdzenia czy sygnał nie został podsłuchany przez szpiega Bob wysyła też Alicji wiadomość o polaryzacji nielicznych fotonów, spośród tych których polaryzację winien właściwie odczytać. Alicja wiedząc jakie fotony wysłała może sprawdzić czy polaryzacja fotonów nie uległa zniekształceniu. Powodem zniekształcenia może być próba odczytania polaryzacji fotonu przez szpiega, który ustalił oś polaryzacji polaryzatora w innym kierunku niż Alicja. Po pomiarze przez niego polaryzacji fotonu w ten sposób polaryzacja tego fotonu przesyłanego przez szpiega dalej do Boba może ulec zmianie, co może ustalić Alicja porównując swoje informacje z pomiarami Boba.

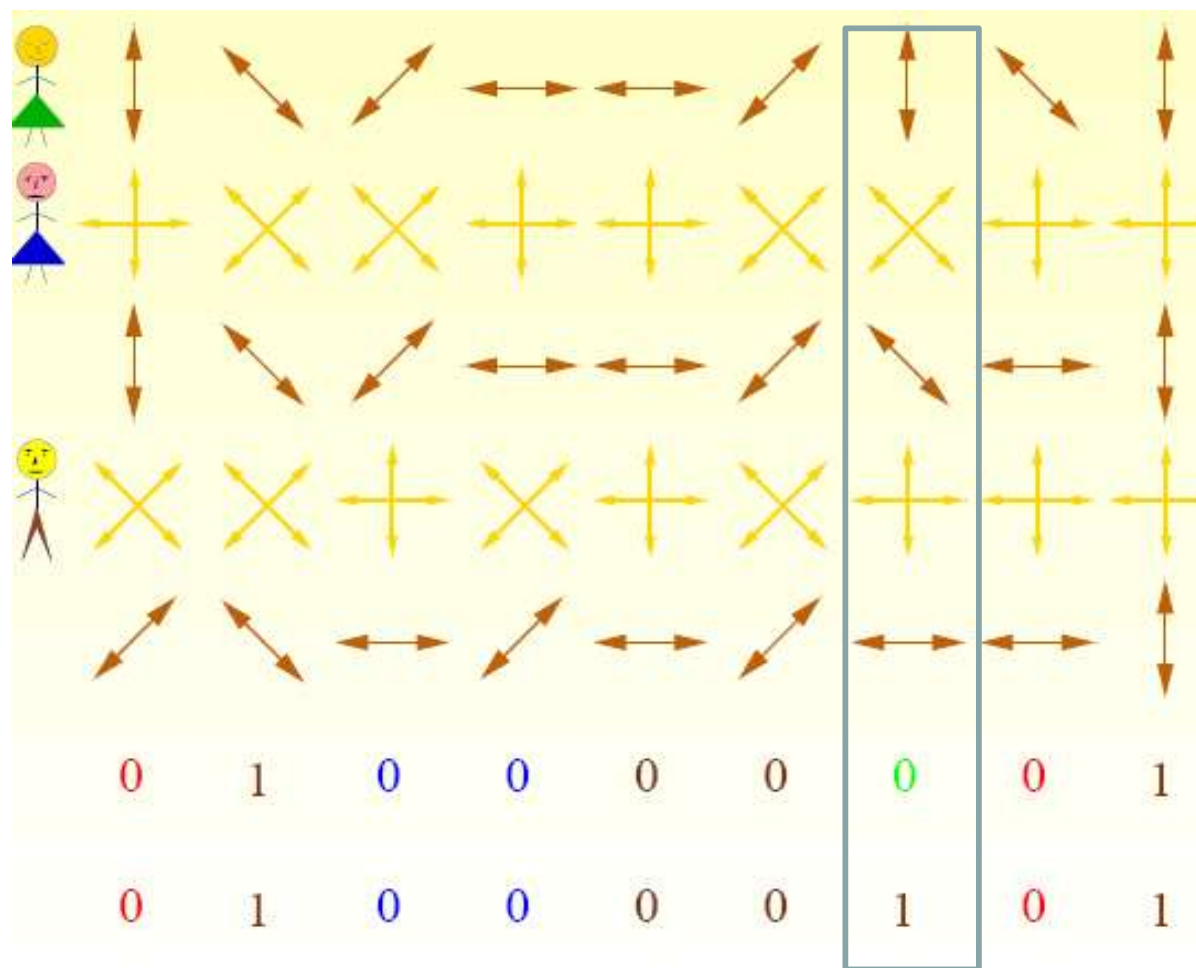


Ryszard Tanaś

Alicja

szpieg

Bob



Ryszard Tanaś

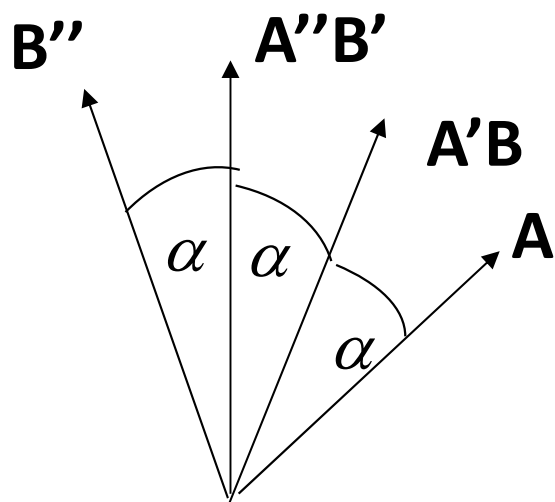
Bit odczytany źle na skutek działalności szpiega

Algorytm Ekerta

Pozwala na wykrycie szpiega bez ujawnienia informacji o polaryzacji części właściwie odczytanych fotonów, wykorzystując własności stanu splątanego

W algorytmie tym wykorzystywane są wytwarzane przez źródło pary splątanych fotonów opisanych funkcją $|\psi_{I,II}^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_I \otimes |1\rangle_{II} - |1\rangle_I \otimes |0\rangle_{II})$ z których jeden trafia do Alicji a drugi do Boba

Alicja i Bob mogą wykonywać pomiary polaryzacji tych fotonów przy trzech osiach polaryzatorów pokazanych na rysunku z kątem $\alpha = \pi/8$ (osie związane z pomiarami A, A', A'' dotyczą Alicji, a B, B', B'' Boba)



- 1) Przed każdym pomiarem kierunek osi polaryzatorów Alicja i Bob ustalają niezależnie w sposób losowy spośród trzech możliwych.
- 2) Po pomiarze polaryzacji przekazują sobie informacje o kierunkach wybranych osi w każdym pomiarze i wybierają do przesłania zakodowanej informacji wyniki tych pomiarów, w których osie ich polaryzatorów były ustawione równoległe do siebie (wówczas polaryzacje obu fotonów są prostopadłe do siebie). Liczba takich wyników jest równa 1/3 wszystkich wyników
- 3) W przypadku pozostałych pomiarów liczą średnie $\langle AB \rangle$, $\langle AB'' \rangle$, $\langle A'B \rangle$, $\langle A'B'' \rangle$ oraz wielkość $\langle C \rangle = \langle AB \rangle + \langle A'B \rangle + \langle A'B'' \rangle - \langle AB'' \rangle$
- 4) Według mechaniki kwantowej dla stanu splątanego $|\langle C \rangle| = 2\sqrt{2}$
- 5) Otrzymanie wartości $|\langle C \rangle|$ mniejszej od 2 świadczy o tym że fotony te nie były opisane funkcją opisującą stan splątany, co może być skutkiem zmiany ich polaryzacji przed pomiarem przez szpiega