

5 Postulaty mechaniki kwantowej

Możemy teraz sformułować postulaty mechaniki kwantowej.

POSTULAT 1.

Stan układu fizycznego w danej chwili t wyznaczony jest przez wektor stanu $|\psi(t)\rangle$ w przestrzeni Hilberta \mathcal{H} . Przypomnijmy, że przestrzeń Hilberta jest liniową przestrzenią wektorową nad (w tym wypadku) ciałem liczb zespolonych, w której zdefiniowany jest iloczyn skalarny $\langle\varphi(t)|\psi(t)\rangle$. Dzięki temu możemy w przestrzeni Hilberta wprowadzić normę: stany fizyczne opisywane są przez normowalne wektory stanu: $\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle < \infty$. Dodatkowo przestrzeń Hilberta jest przestrzenią kompletną.

Zauważmy, że z liniowości przestrzeni Hilberta wynika zasada superpozycji stanów.

Dla cząstki poruszającej się w potencjale możemy wybrać *reprezentację*, w której stany są funkcjami zespolonymi położenia i czasu i spełniają warunek całkowalności w kwadracie

$$\int d^3\vec{r} |\psi(\vec{r}, t)|^2 < \infty.$$

Interpretacja: $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ jest prawdopodobieństwem znalezienia cząstki w punkcie \vec{r} w chwili t .

POSTULAT 2

Każdej mierzalnej wielkości fizycznej (obserwabli) odpowiada operator hermitowski \hat{Q} , którego unormowane wektory własne $|q_i\rangle$ tworzą bazę w \mathcal{H} . W reprezentacji położeniowej operatory położenia i pędu przyjmują postać:

$$\hat{x} = x, \quad \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \text{i.t.d.}$$

Pozostałe operatory konstruujemy zamieniając w wielkościach klasycznych położenia i pędy na odpowiadające im operatoray. Warto zwrócić uwagę, że aby zdefiniować \hat{p} wprowadziliśmy stałą wymiarową \hbar .

POSTULAT 3

Jeżeli układ znajduje się w stanie $|\psi(t)\rangle$, to pomiar obserwabli odpowiadającej operatorowi \hat{Q} daje jedną z jego wartości własnych q_i z prawdopodobieństwem $|\langle q_i | \psi(t) \rangle|^2$. W wyniku pomiaru stan zmienia się w stan własny $|q_i\rangle$. Zjawisko to nosi czasem nazwę kolapsu funkcji falowej. Jest jeden z najbardziej kontrowersyjnych postulatów, który budził sprzeciw np. Einsteina.

Zauważmy, że dla operatora położenia zachodzi

$$\langle \vec{r} | \psi(t) \rangle = \psi(\vec{r}, t).$$

POSTULAT 4

Ewolucja czasowa stanu fizycznego dana jest przez równanie Schroedingera:

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

gdzie \hat{H} jest hamiltonianem kwantowym skonstruowanym wg zasad postulatu 2. Postulat ten można zastąpić poprzez opis ewolucji w języku całek po trajektoriach.

6 Reprezentacje położeniowa i pędowa

6.1 Reprezentacja położeniowa

W poprzednim rozdziale znaleźliśmy jawną postać operatora \hat{H} w przedstawieniu położeniowym. Co to znaczy? W przedstawieniu położeniowym

$$\hat{x} |x\rangle = x |x\rangle. \quad (6.1)$$

Stany własne $|x\rangle$ tworzą układ zupełny

$$\hat{I} = \int dx |x\rangle \langle x|, \quad \langle x'|x\rangle = \delta(x-x'). \quad (6.2)$$

Rozkład dowolnego stanu

$$|\psi\rangle = \int dx |x\rangle \langle x|\psi\rangle = \int dx |x\rangle \psi(x). \quad (6.3)$$

Iloczyn skalarny

$$\langle \varphi|\psi\rangle = \int dx dx' \langle \varphi|x'\rangle \langle x'|x\rangle \langle x|\psi\rangle = \int dx \varphi^*(x) \psi(x). \quad (6.4)$$

Wzięliśmy równanie

$$\hat{H} |\psi\rangle$$

i pomnożyliśmy go przez $\langle x|$ wstawiając równocześnie operator jednostkowy $\int dx' |x'\rangle \langle x'|$

$$\langle x|\hat{H}|\psi\rangle = \int dx' \langle x|\hat{H}|x'\rangle \langle x'|\psi\rangle = \hat{H}_x \psi(x), \quad (6.5)$$

co oznacza, że

$$\langle x|\hat{H}|x'\rangle = \delta(x-x') \hat{H}_x. \quad (6.6)$$

Tutaj \hat{H}_x jest operatorem Hamiltona w przedstawieniu położeniowym (na ogół nie piszemy indeksu x), w którym to przedstawieniu \hat{H} jest diagonalny. Operator pędu

$$\langle x|\hat{p}|\psi\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x). \quad (6.7)$$

Wstawmy jedynekę

$$\langle x | \hat{p} | \psi \rangle = \int dx' \langle x | \hat{p} | x' \rangle \langle x' | \psi \rangle = \int dx' \langle x | \hat{p} | x' \rangle \psi(x'). \quad (6.8)$$

Porównując z poprzednim równaniem

$$\langle x | \hat{p} | x' \rangle = -i\hbar \delta(x - x') \frac{\partial}{\partial x'} \quad (6.9)$$

6.2 Przedstawienie pędowe

W przedstawieniu położeniowym funkcja własna operatora pedu

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} u_p(x) = p u_p(x) \Rightarrow u_p(x) = A e^{ipx/\hbar}. \quad (6.10)$$

W notacji Diraca

$$u_p(x) = \langle x | p \rangle \quad (6.11)$$

Norma

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx u_{p'}^*(x) u_p(x) = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{i(p-p')x/\hbar} = 2\pi\hbar |A|^2 \delta(p - p') \quad (6.12)$$

Stąd (wybieramy rzeczywistą fazę)

$$A = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}. \quad (6.13)$$

Podobnie

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dp u_p^*(x') u_p(x) = \delta(x - x'). \quad (6.14)$$

Zmiana bazy

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \int dx |x\rangle \psi(x) = \int dx \int dp' |p'\rangle \langle p' | x \rangle \psi(x) \\ &= \int dp' |p'\rangle \int dx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ip'x/\hbar} \psi(x). \end{aligned} \quad (6.15)$$

Pomnóżmy przez $\langle p |$:

$$\langle p | \psi \rangle = \psi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx e^{-ipx/\hbar} \psi(x). \quad (6.16)$$

Przejdźcie od przedstawienia położeniowego do przedstawienia pędowego: transformata Fouriera. I na odwrót:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp e^{ipx/\hbar} \psi(p). \quad (6.17)$$

Jak wygląda operator położenia w reprezentacji pędowej:

$$\begin{aligned}
\langle p | \hat{x} | \psi \rangle &= \int dx' dx dp' \langle p | x' \rangle \underbrace{\langle x' | \hat{x} | x \rangle}_{=x\delta(x-x')} \langle x | p' \rangle \langle p' | \psi \rangle \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dx dp' e^{-ipx/\hbar} x e^{ip'x/\hbar} \langle p' | \psi \rangle \\
&= \int dp' \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \delta(p' - p) \right] \psi(p') \\
&= i\hbar \int dp' \delta(p' - p) \frac{\partial}{\partial p'} \psi(p') \\
&= i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \psi(p).
\end{aligned} \tag{6.18}$$

7 Zasada nieoznaczoności

7.1 Gaussowski pakiet falowy

Rozważmy pewną szczególną funkcję falową

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} \tilde{\psi}(k) e^{ikx},$$

gdzie $\tilde{\psi}(k)$ wybierzemy jako funkcje Gaussa:

$$\tilde{\psi}(k) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi\alpha}} \exp\left(-\frac{(k - k_0)^2}{2\alpha}\right). \tag{7.19}$$

Funkcja ta jest unormowana (w kwadracie):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dk |\tilde{\psi}(k)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi\alpha}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \exp\left(-\frac{(k - k_0)^2}{\alpha}\right) = 1. \tag{7.20}$$

Dla tak dobranej $\tilde{\psi}(k)$ łatwo wyliczyć $\psi(x)$:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi\alpha}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(k - k_0)^2}{2\alpha} + ikx\right).$$

Prześledźmy krok po kroku wyliczenie tej całki. Po pierwsze zmienmy zmienne $\kappa = k - k_0$ i dopełnijmy do kwadratu

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \frac{e^{i k_0 x}}{\sqrt[4]{\pi\alpha}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\kappa}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{\kappa^2}{2\alpha} + i \kappa x + \frac{\alpha}{2} x^2\right) \exp\left(-\frac{\alpha}{2} x^2\right) \\ &= \exp\left(i k_0 x - \frac{\alpha}{2} x^2\right) \frac{1}{\sqrt[4]{\pi\alpha}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\kappa}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2\alpha} (\kappa^2 - 2i \kappa \alpha x - \alpha^2 x^2)\right).\end{aligned}$$

Wprowadzając nową zmienną $\kappa_0 = i\alpha x$, argument exponenty pod całką przyjmuje postać $(\kappa - \kappa_0)^2$ i całka po $d\kappa$ na mocy wzoru (7.20) równa jest $\sqrt{2\pi\alpha}$. A zatem

$$\psi(x) = \sqrt[4]{\frac{\alpha}{\pi}} e^{-\frac{\alpha x^2}{2}} e^{i k_0 x}. \quad (7.21)$$

A zatem pakiet falowy $\psi(x)$ ma postać zbliżoną do fali płaskiej o liczbie falowej k_0 , ale o zależnej od położenia amplitudzie o kształcie gaussowskim. Funkcja (7.21) jest unormowana:

$$\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x) \psi(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\alpha x^2} = 1.$$

Średni ped dla takiego pakietu falowego wynosi

$$\langle p \rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{\pi\alpha}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk k \exp\left(-\frac{(k - k_0)^2}{\alpha}\right) = \hbar k_0,$$

a średnie odchylenie kwadratowe pedu:

$$\sigma^2(p) = \frac{\hbar^2}{\sqrt{\pi\alpha}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk (k - k_0)^2 \exp\left(-\frac{(k - k_0)^2}{\alpha}\right) = \hbar^2 \frac{\alpha}{2}.$$

Z kolei średnie położenie dane jest jako

$$\langle x \rangle = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx x e^{-\alpha x^2} = 0,$$

a średnie odchylenie kwadratowe położenia

$$\sigma^2(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx x^2 e^{-\alpha x^2} = \frac{1}{2\alpha}.$$

Zauważmy teraz, że

$$\sigma^2(p)\sigma^2(x) = \frac{\hbar^2}{4}. \quad (7.22)$$

Definiując *nieoznaczoność* pędu i *nieoznaczoność* położenia jako

$$\Delta p = \sqrt{\sigma^2(p)}, \quad \Delta x = \sqrt{\sigma^2(x)}$$

możemy (7.22) przepisać jako

$$\Delta p \Delta x = \frac{\hbar}{2}. \quad (7.23)$$

Związki (7.22) i (7.23) noszą nazwę *zasady nieoznaczoności Heisenberga*. Ze związków tych wynika, że w określonym stanie ψ , który tu wybraliśmy jako gaussian, pęd i położenie znane są z dokładnością, których iloczyn jest stały, rzędu \hbar . W miarę jak będziemy zmniejszać Δp wzrastać będzie Δx . I odwrotnie, w stanie o małym Δx pęd będzie praktycznie nieokreślony. Powstaje pytanie, na ile ogólna jest to zasada i na ile zależy ona od wyboru stanu ψ .

7.2 Wielkości sprzężone

Rozważmy dwa operatory hermitowskie \hat{A} i \hat{B} , takie że

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C},$$

gdzie \hat{C} jest też operatorem hermitowskim. Niech

$$\begin{aligned} a &= \langle \hat{A} \rangle_\psi = (\psi, \hat{A}\psi), \\ b &= \langle \hat{B} \rangle_\psi = (\psi, \hat{B}\psi), \end{aligned}$$

gdzie $\psi(\vec{r})$ jest unormowaną funkcją falową. Zdefiniujmy operatory

$$\hat{\delta}_A = \hat{A} - a, \quad \hat{\delta}_B = \hat{B} - b.$$

Łatwo wykazać, że

$$[\hat{\delta}_A, \hat{\delta}_B] = i\hat{C}.$$

Rozważmy teraz pomocniczą całkę zależną od rzeczywistego parametru α :

$$I(\alpha) = \int d^3\vec{r} \left| (\alpha\hat{\delta}_A - i\hat{\delta}_B) \psi(\vec{r}) \right|^2 \geq 0.$$

Całka ta jest zawsze dodatnia. Ponieważ operatory $\hat{\delta}_A, \hat{\delta}_B$ są hermitowskie

$$\begin{aligned}
I(\alpha) &= \int d^3\vec{r} \left((\alpha\hat{\delta}_A - i\hat{\delta}_B) \psi \right)^* (\alpha\hat{\delta}_A - i\hat{\delta}_B) \psi \\
&= \int d^3\vec{r} \psi^* \left\{ (\alpha\hat{\delta}_A + i\hat{\delta}_B) (\alpha\hat{\delta}_A - i\hat{\delta}_B) \right\} \psi \\
&= \int d^3\vec{r} \psi^* \left\{ \alpha^2\hat{\delta}_A^2 + \hat{\delta}_B^2 - i\alpha [\hat{\delta}_A, \hat{\delta}_B] \right\} \psi \\
&= \int d^3\vec{r} \psi^* \left\{ \alpha^2\hat{\delta}_A^2 + \hat{\delta}_B^2 + \alpha\hat{C} \right\} \psi \\
&= \alpha^2\sigma_\psi^2(\hat{A}) + \sigma_\psi^2(\hat{B}) + \alpha \langle \hat{C} \rangle_\psi \geq 0.
\end{aligned}$$

Ostatnia nierówność musi być spełniona dla każdego α , a zatem wyznacznik równania kwadratowego na α musi być ujemny lub równy zero:

$$\langle \hat{C} \rangle_\psi^2 - 4\sigma_\psi^2(\hat{A})\sigma_\psi^2(\hat{B}) \leq 0.$$

Stąd natychmiast otrzymujemy, że

$$\sigma_\psi^2(\hat{A})\sigma_\psi^2(\hat{B}) \geq \frac{\langle \hat{C} \rangle_\psi^2}{4}. \quad (7.24)$$

A zatem zasada nieoznaczoności wynika z nieprzemienności operatorów \hat{A} i \hat{B} . To czy we wzorze (7.24) będziemy mieli znak równości, czy silnej nierówności zależy od stanu ψ , po którym średniujemy. W szczególności, dla operatorów pedu i położenia otrzymujemy

$$\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Warto w tym miejscu wspomnieć o innej zasadzie nieoznaczoności wiążącej czas z energią. Ponieważ w mechanice kwantowej czas jest parametrem i nie odpowiada mu żaden operator, zasada ta nie daje się wyprowadzić w pokazany wyżej sposób. Wróćmy do tego problemu w jednym z następnych rozdziałów.