

Rozdział 11

Postulaty mechaniki kwantowej

Mechanika kwantowa, jak zresztą każda teoria fizyczna, bazuje na kilku postulatach, które przyjmujemy "na wiarę". Nie umiemy powiedzieć dlaczego obowiązują takie, a nie inne postulaty. Jedyne co możemy stwierdzić to to, że wszystkie dane i wyniki doświadczalne są zgodne z proponowanymi postulatami. Rolę postulatów w mechanice klasycznej pełnią, na przykład, trzy zasady dynamiki Newtona, a w elektrodynamice równania Maxwell'a. Doświadczenie potwierdza ich słuszność i określa zakres stosowalności. Nie wchodząc więc w rozważania o charakterze bardziej filozoficznym niż fizycznym, po prostu przedstawimy postulaty mechaniki kwantowej. Postulaty te już pojawiły się w toku wykładu, teraz jedynie je zbierzemy i uporządkujemy. Warto jednak stwierdzić, że możliwe są różne sformułowania, zależne przede wszystkim od stopnia abstrakcji wybranego aparatu matematycznego. Nie jest jednak naszym celem ani daleko posunięta ścisłość matematyczna, ani też wyrafinowana abstrakcyjność.

11.1 Postulat 1: wektor stanu

W każdej chwili czasu t stan układu fizycznego jest określony przez wektor $|\psi(t)\rangle$ należący do pewnej przestrzeni Hilberta $\mathcal{H}$.

Uwagi

1. W praktycznych zastosowaniach wygodnie jest ten stan unormować, tj. wziąć

$$|\psi'(t)\rangle = \frac{|\psi(t)\rangle}{\|\psi(t)\|}, \quad (11.1)$$

gdzie normę obliczamy za pomocą iloczynu skalarnego, w który wyposażona jest przestrzeń Hilberta $\mathcal{H}$.

2. W przestrzeni wektorowej można budować kombinacje liniowe, co jest odzwierciedleniem zasady superpozycji. Kombinacja liniowa wektorów stanu (odpowiednio unormowana) jest też, choć oczywiście innym, wektorem stanu. Dlatego też postulat ten można nazwać zasadą superpozycji.
3. W rozdziale 2 postulowaliśmy istnienie funkcji falowej $\psi(\vec{r}, t)$ opisującej stan układu. Jak wiemy, w przestrzeni $\mathcal{H}$ można wybrać różne bazy – reprezentacje. Funkcja falowa jest po prostu wektorem stanu w reprezentacji położeniowej: $\psi(\vec{r}, t) = \langle \vec{r} | \psi(t) \rangle$, jest więc obiektem równoważnym, lecz mniej ogólnym, bowiem możemy skonstruować inne reprezentacje: pędową, energetyczną i inne. Oczywiście, w konkretnych zastosowaniach łatwiej jest posługiwać się funkcją falową, niż ogólnym, abstrakcyjnym wektorem stanu.

11.2 Postulat 2: obserwable

Każdej mierzalnej wielkości fizycznej $\mathcal{A}$ odpowiada obserwabla $\hat{A}$ działająca w $\mathcal{H}$ (operator hermitowski).

Uwagi

1. Fakt, że operator $\hat{A}$ jest obserwabłą oznacza, że (dla wartości własnych tworzących zbiór dyskretny)

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{A} = \hat{A}^\dagger, \text{ operator} \\ \text{hermitowski} \\ \hat{A} |u_n^{in}\rangle = a_n |u_n^{in}\rangle \end{array} \right\} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} a_n \in \mathbb{R}, \text{ degener. } g_n\text{-krotna} \\ \{|u_n^{in}\rangle\} - \text{ baza ortonorm. w } \mathcal{F} \end{array} \right\} \quad (11.2)$$

2. Operatory kwantowo-mechaniczne można konstruować za pomocą zasady odpowiedniości. Jednak dla niektórych wielkości (spin) trzeba szukać innych sposobów ich określania.
3. Możliwy jest też inny sposób konstrukcji obserwabli posiadających odpowiedniki klasyczne. Nawiasy Poissona dla klasycznych wielkości zostają zastąpione przez komutator odpowiednich operatorów (i pomnożone przez czynnik $i\hbar$). Otrzymane w ten sposób relacje komutacyjne służą za punkt wyjścia do konstrukcji jawnej postaci operatorów. Metodą tą posłużyliśmy się w rozdziale 7 znajdując postać operatora pędu w reprezentacji położeniowej. Wykorzystamy ją także przy dyskusji operatora momentu pędu.

11.3 Postulat 3: wyniki pomiarów – – wartości własne obserwabli

Jedynym dopuszczalnym wynikiem pomiaru wielkości fizycznej $\mathcal{A}$ może być któraś z wartości własnych obserwabli (operatora hermitowskiego) $\hat{A}$.

Uwagi

1. Wynik pomiaru jest zawsze (mianowaną) liczbą rzeczywistą. Dlatego też $\hat{A}$ musi być obserwabłą – operatorem hermitowskim.
2. Postać obserwabli $\hat{A}$, a co za tym idzie, zbiór wartości własnych i stany własne są określone przez fizyczną naturę układu (jego strukturę). Dlatego też zbiór dopuszczalnych wyników pomiarowych nie zależy od stanu $|\psi\rangle$, w którym układ znajdował się tuż przed pomiarem. Znaczenie stanu $|\psi\rangle$ określa następny postulat.
3. Widmo (zbiór wartości własnych obserwabli $\hat{A}$) może być dyskretny, co oznacza, że rezultaty pomiaru są skwantowane. Postulat ten bywa więc nazywany zasadą kwantowania.

11.4 Postulat 4: prawdopodobieństwo wyników pomiarowych

Postulat ten jest uogólnieniem i sformalizowaniem idei rozkładu spektralnego, o której mówiliśmy w rozdziałach 1 i 2. Uogólnienie to omówimy dla trzech różnych przypadków.

Niech $|\psi\rangle$ oznacza unormowany wektor z przestrzeni $\mathcal{H}$ opisujący stan pewnego układu fizycznego. Zwróćmy tu uwagę, że żądając unormowania stanu $|\psi\rangle$ nieznacznie modyfikujemy postulat 1. Nie jest to żądanie konieczne, ale znacząco ułatwia i upraszcza zapis prawdopodobieństw (por. dyskusja w rozdziale 3, wzory (3.55)–(3.64)).

Niech $\mathcal{A}$ oznacza pewną wielkość fizyczną, której odpowiada obserwablą $\hat{A}$.

11.4.1 Przypadek widma dyskretnego bez degeneracji

W tym przypadku $\{|\varphi_n\rangle\}$ stanowi zbiór wektorów własnych obserwabl $\hat{A}$ odpowiadających wartościom własnym $\{a_n\}$, przy czym

$$\begin{aligned} \hat{A}|\varphi_n\rangle &= a_n|\varphi_n\rangle && - \text{zagadnienie własne,} \\ \langle\varphi_m|\varphi_n\rangle &= \delta_{mn} && - \text{ortonormalność,} \\ \sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| &= \hat{1} && - \text{zupełność.} \end{aligned} \quad (11.3)$$

Postulat 4a

A. Prawdopodobieństwo P_n tego, że w wyniku pomiaru wielkości fizycznej $\mathcal{A}$, w układzie opisanym unormowanym wektorem stanu $|\psi\rangle$, otrzymamy wartość własną a_n wynosi

$$P_n = |\langle\varphi_n|\psi\rangle|^2. \quad (11.4)$$

bowiem w tym wypadku wartości własnej a_n odpowiada tylko jeden wektor własny $|\varphi_n\rangle$.

11.4.2 Przypadek widma dyskretnego z degeneracją

W tym wypadku wartości własnej a_n obserwabl $\hat{A}$ odpowiada g_n różnych wektorów własnych

$$\begin{aligned} \hat{A}|\varphi_n^i\rangle &= a_n|\varphi_n^i\rangle && - \text{zagadnienie własne,} \\ \langle\varphi_m^i|\varphi_n^j\rangle &= \delta_{mn}\delta_{ij} && - \text{ortonormalność,} \\ \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} |\varphi_n^i\rangle\langle\varphi_n^i| &= \hat{1} && - \text{zupełność,} \end{aligned} \quad (11.5)$$

gdzie górny indeks przebiega zbiór $\{1, 2, 3, \dots, g_n\}$, zaś g_n nazywamy stopniem degeneracji wartości własnej a_n .

Postulat 4b

B. Prawdopodobieństwo P_n tego, że w wyniku pomiaru wielkości fizycznej $\mathcal{A}$, w układzie opisanym unormowanym wektorem stanu $|\psi\rangle$, otrzymamy wartość własną a_n wynosi

$$P_n = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle \varphi_n^i | \psi \rangle|^2. \quad (11.6)$$

W tym przypadku każda kombinacja liniowa stanów o tym samym numerze n , jakim jest oznaczona zmierzona wartość własna, jest wektorem własnym obserwabli $\hat{A}$

$$\hat{A} \left(\sum_{i=1}^{g_n} C_n^i |\varphi_n^i\rangle \right) = a_n \left(\sum_{i=1}^{g_n} C_n^i |\varphi_n^i\rangle \right), \quad (11.7)$$

(patrz także (3.49) i (10.10)). Omawiane prawdopodobieństwo jest sumą kwadratów modułów amplitud $\sum_{i=1}^{g_n} |C_n^i|^2$.

11.4.3 Przypadek widma ciągłego

Obserwabla $\hat{A}$ ma wartości własne β należące do zbioru ciągłego, więc wektory własne $\{\varphi_\beta\}$ są także numerowane indeksem ciągłym. Wówczas mamy

$$\begin{aligned} \hat{A} |\varphi_\beta\rangle &= \beta |\varphi_\beta\rangle && - \text{zagadnienie własne,} \\ \langle \varphi_\alpha | \varphi_\beta \rangle &= \delta(\alpha - \beta) && - \text{ortonormalność uogólniona,} \\ \int d\beta |\varphi_\beta\rangle \langle \varphi_\beta| &= \hat{1} && - \text{zupełność,} \end{aligned} \quad (11.8)$$

Postulat 4c

C. Prawdopodobieństwo P_n tego, że w wyniku pomiaru wielkości fizycznej $\mathcal{A}$, w układzie opisanym unormowanym wektorem stanu $|\psi\rangle$, otrzymamy wartość z przedziału $(\beta, \beta + d\beta)$ wynosi

$$dP_\beta = |\langle \varphi_\beta | \psi \rangle|^2 d\beta, \quad (11.9)$$

a więc $|\langle \varphi_\beta | \psi \rangle|^2$ jest funkcją ciągłą, mającą sens gęstości prawdopodobieństwa.

Uwagi

1. Niech $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ będzie dowolnym wektorem stanu pewnego układu fizycznego. Wartość oczekiwana (średnia wartość z wielu pomiarów) wielkości fizycznej $\mathcal{A}$, której odpowiada obserwabla $\hat{A}$, wynosi

$$\langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle. \quad (11.10)$$

Dla ilustracji rozważmy dalej przypadek bez degeneracji (11.3) i skorzystajmy z rozkładu jedynek

$$\begin{aligned}\langle A \rangle &= \sum_n \langle \psi | \hat{A} | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | \psi \rangle \\ &= \sum_n \langle \psi | \varphi_n \rangle a_n \langle \varphi_n | \psi \rangle \\ &= \sum_n a_n |\langle \varphi_n | \psi \rangle|^2.\end{aligned}\quad (11.11)$$

Z dowolności stanu $|\psi\rangle$ wynika możliwość utożsamienia

$$\hat{A} = \sum_n a_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n|, \quad (11.12)$$

co stanowi rozkład spektralny operatora $\hat{A}$ (tzn. rozkład na operatory rzutowe $|\varphi_n\rangle \langle \varphi_n|$). Rozumowanie to wskazuje, dlaczego omawiany postulat łączymy z ideą rozkładu spektralnego. Zauważmy jeszcze, że z rozkładu (11.12) wynika, że $C_n = \langle \varphi_n | \psi \rangle$ określa amplitudę prawdopodobieństwa tego, że w wyniku pomiaru uzyskamy wartość własną a_n . Analogiczne rozkłady spektralne możemy oczywiście wypisać dla dwóch pozostałych przypadków.

2. Posługując się definicją wartości oczekiwanej i rozkładem spektralnym, wraz z odpowiednią jego interpretacją, możemy połączyć postulaty 3 i 4 w jeden. Zaletą takiego podejścia jest zmniejszenie liczby postulatów, zaś wadą konieczność nieco rozbudowanej interpretacji. Dlatego pozostaniemy przy podanym sformułowaniu postulatów mechaniki kwantowej.
3. Z tego postulatu wynika probabilistyczna interpretacja funkcji falowej $\psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \psi \rangle$. Położenie cząstki ma widmo ciągłe, zaś $|\vec{r}\rangle$ to wektor własny operatora położenia. Więc $\langle \vec{r} | \psi \rangle$ jest amplitudą gęstości prawdopodobieństwa tego, że w wyniku pomiaru położenia cząstki otrzymamy wartość $\vec{r}$. Innymi słowy, jest to amplituda gęstości prawdopodobieństwa tego, że cząstka znajduje się w punkcie $\vec{r}$. Postulat 4 jest więc uogólnieniem stwierdzenia, że $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ jest gęstością prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w punkcie $\vec{r}$.
4. Warunek normowania sprawia, że wektory różniące się o stały czynnik $|\psi_1\rangle = \alpha |\psi_2\rangle$ możemy utożsamić.
5. W szczególności, globalny czynnik fazowy jest bez znaczenia fizycznego. Różnica faz pomiędzy wektorami stanu może jednak mieć istotne znaczenie ze względu na możliwość interferencji amplitud.

11.5 Postulat 5: pomiar – redukcja wektora stanu

Jeśli w układzie fizycznym opisanym stanem $|\psi\rangle$ dokonamy pomiaru wielkości fizycznej $\mathcal{A}$ otrzymując a_n , jedną z wartości własnych obserwabli $\hat{A}$, to po pomiarze stanem układu jest unormowany rzut stanu $|\psi\rangle$ na (unormowany) wektor własny $|\varphi_n\rangle$ odpowiadający zmierzonej wartości własnej

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\text{pomiar } a_n} |\varphi_n\rangle \frac{\langle \varphi_n | \psi \rangle}{\sqrt{|\langle \varphi_n | \psi \rangle|^2}} \quad (11.13)$$

Innymi słowy mówimy, że w wyniku pomiaru następuje redukcja (lub kolaps) stanu $|\psi\rangle$ do stanu $|\varphi_n\rangle$.

Uwagi

1. Mówimy tu o rzutowaniu, bowiem $|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|$ jest operatorem rzutowania.
2. Postulat ten nietrudno uogólnić, uwzględniając charakter widma obserwabli $\hat{A}$. Dla przypadku z degeneracją otrzymamy wyrażenie (3.66). Operator rzutowania rzutuje stan $|\psi\rangle$ na g_n -wymiarową podprzestrzeń w przestrzeni $\mathcal{H}$.
3. Jeśli stan układu przed pomiarem jest jednym ze stanów własnych obserwabli $\hat{A}$ (tzn. $|\psi\rangle = |\varphi_k\rangle$), to pomiar wielkości fizycznej $\mathcal{A}$ da wartość a_k z prawdopodobieństwem równym 1, zaś stan układu pozostanie bez zmiany (nadal będzie stanem $|\varphi_k\rangle$).
4. Postulat o redukcji stanu kwantowo-mechanicznego wydaje się być najbardziej tajemniczy i najmniej zrozumiały spośród całej szóstki postulatów. Postulat ten leży u podstaw pewnych paradoksów (np. znany od lat 30-tych XX wieku, paradoks EPR, Einsteina, Podolsky'ego i Rosena). Paradoksy takie dają się zrozumieć i wyjaśnić na gruncie mechaniki kwantowej, jednak do dziś budzą dyskusje i kontrowersje dotyczące sposobów jej interpretacji.

11.6 Postulat 6: ewolucja w czasie – – równanie Schrödingera

Stan $|\psi(t)\rangle$ układu fizycznego ewoluuje w czasie zgodnie z równaniem Schrödingera

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle, \quad (11.14)$$

gdzie hamiltonian $\hat{H}(t)$ jest obserwabłą (zwaną hamiltonianem) odpowiadającą całkowitej energii układu. Hamiltonian może (ale nie musi) być funkcją czasu.

Uwagi

1. Postulat ten jest jedynym postulatem dynamicznym. Określa on dynamikę wektora stanu, to jest sposób w jaki $|\psi(t)\rangle$ zmienia się w czasie.
2. Jest to równanie pierwszego rzędu względem czasu, więc do jego pełnego rozwiązania konieczne jest określenie stanu początkowego dla pewnej chwili t_0 .
3. Równanie Schrödingera jest w pełni deterministyczne. Ewolucja wektora stanu (lub funkcji falowej w reprezentacji położeniowej) jest wyznaczona jednoznacznie. Probabilistyczna interpretacja mechaniki kwantowej wynika z pozostałych postulatów.
4. Głównym sposobem konstrukcji hamiltonianu jest zasada odpowiedniości. Jeżeli punktem wyjścia jest nierelatywistyczna fizyka klasyczna, wówczas dostajemy nierelatywistyczną mechanikę kwantową, w której całkowita energia cząstki musi być znacznie mniejsza niż jej energia spoczynkowa.
5. Znaczenie równania Schrödingera jest nie do przecenienia. Zasadnicza część niniejszego wykładu jest poświęcona badaniu rozwiązań tego równania i jego różnorodnych konsekwencji.
