Abstrakcyjne sformułowanie teorii kwantów.

Opisana w tej książce mechanika falowa jest jedną z realizacji ogólnej abstrakcyjnej teorii kwantów (mechaniki kwantowej). Mechanika falowa oparta na ideach de Broglie'a i Schrödingera rozwijana była początkowo niezależnie od mechaniki macierzowej Borna, Heisenberga i Jordana, ale rozróżnienie między tymi sformułowaniami stało się niepotrzebne po wykazaniu (Schrödinger 1926d) ich równoważności. Okazało się wówczas, że oba te sformułowania są różnymi realizacjami tej samej ogólnej, teorii kwantów. W tym rozdziale wprowadzimy takie ogólne sformułowanie teorii kwantów opierając je na sześciu postulatach. Pokażemy, jak otrzymać mechanikę falową jako szczególną realizację takiej ogólnej teorii i podamy także inną ważną realizację — kwantową teorię pola elektromagnetycznego.

Formułowanie postulatów teorii kwantów rozpoczniemy od ustalenia matematycznego języka, w którym najwygodniej opisać tę teorię. Od czasu ukazania się w latach 1927-1929 cyklu pionierskich prac von Neumanna (podsumowaniem tych prac była wydana w 1932 monografia przetłumaczona w roku 1955 na angielski jako Mathematical Foundations of Quantum Mechanics) wiadomo, że językiem tym jest teoria przestrzeni Hilberta i operatorów liniowych działających w tej przestrzeni. Na szczęście nie jest potrzebna głęboka znajomość matematycznych podstaw tej teorii do zrozumienia najważniejszych własności teorii kwantowej. W zupełności wystarczy nam znajomość tej teorii "na poziomie algebraicznym", to znaczy bez uwzględniania trudnych problemów wynikających z faktu, iż przestrzeń Hilberta jest nieskończenie wymiarowa. Wszystkie postulaty będzie można w pełni zrozumieć wyobrażając sobie przestrzeń Hilberta teorii kwantów jako skończenie wymiarową przestrzeń wektorową nad ciałem liczb zespolonych z hermitowskim iloczynem skalarnym i z normą wyznaczoną przez ten iloczyn skalarny. Niestety przy omawianiu konkretnych realizacji teorii kwantów nie udaje się na ogół całkowicie uniknąć problemów wynikających z faktu, iż przestrzeń funkcji falowych jest nieskończenie wymiarowa.

PODSTAWOWE POJĘCIA MATEMATYCZNE

Podstawową rolę w sformułowaniu kwantowej teorii odgrywają operatory liniowe działające w przestrzeni Hilberta. Zgodnie z zapowiedzią nie będziemy zwracali uwagi na to, że w nieskończenie wymiarowej przestrzeni Hilberta pojęcie operatora jest nieodłącznie związane z pojęciem dziedziny tego operatora. Z faktu, iż w ogólności operatory nie są określone na całej przestrzeni Hilberta, a tylko na pewnym jej podzbiorze, wynikają poważne komplikacje natury matematycznej, które nie występują w N- wymiarowej przestrzeni, kiedy zbiór operatorów liniowych jest równoważny zbiorowi macierzy $N \times N$.

Przyporządkowania wektorom układu N liczb zespolonych, zaś operatorom liniowym macierzy układów $N \times N$ liczb zespolonych najłatwiej jest dokonać posługując się pojęciem bazy. W przestrzeni Hilberta posługujemy się zazwyczaj bazą ortonormalną. Baza ortonormalna jest to każdy maksymalny zbiór wektorów $|\psi_i\rangle$ spełniających warunki ortonormalności

$$\langle\psi_i|\psi_j\rangle = \delta_{ij}. \tag{1}$$

Będziemy używali tu notacji wprowadzonej przez Diraca (ostre nawiasy) na oznaczenie wektorów i iloczynu skalarnego. Przy pomocy wektorów bazy możemy zamienić każdy wektor $|\psi\rangle$ na ciąg liczb zespolonych c_i — współrzędnych wektora $|\psi\rangle$ w bazie $|\psi_i\rangle$,

$$c_i = \langle\psi_i|\psi\rangle, \quad |\psi\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} c_i|\psi_i\rangle, \tag{2}$$

zaś każdy operator A na macierz,

$$a_{ij} = \langle\psi_i|A\psi_j\rangle, \quad \langle\psi_i|A\psi\rangle = \sum_{j=1}^{\infty} a_{ij}c_i, \tag{3}$$

Każdemu operatorowi A odpowiada operator do niego sprzężony $A^\dagger$ zdefiniowany (pomijając wszelkie problemy związane z określeniem dziedzin operatorów) przez równania

$$\langle\psi|A^\dagger\phi\rangle = \langle\phi|A\psi\rangle^*. \tag{4}$$

Podstawiając do tego wzoru w miejsce dowolnych wektorów $|\psi\rangle$ i $|\phi\rangle$ wektory bazy otrzymamy znaną z algebry zależność między macierzą i macierzą do niej sprzężoną

$$a^\dagger_{ij} = a^*_{ji}. \tag{5}$$

W teorii kwantów wyróżnioną rolę odgrywają operatory samosprzężone, operatory unitarne i operatory rzutu ortogonalnego (rzutowe),

$$\text{Samosprzężone}: \quad A^\dagger = A, \tag{6}$$

$$\text{Unitarne}: \quad U^\dagger U = 1, \quad UU^\dagger = 1, \tag{7}$$

$$\text{Rzutowe}: \quad P^2 = P, \quad P^\dagger = P. \tag{8}$$

Każdemu operatorowi samosprzężonemu można przypisać rodzinę spektralną operatorów rzutowych, która odgrywa ważną rolę w teorii kwantów. Rodzina spektralna operatora samosprzężonego jest to rodzina operatorów rzutowych $P(\lambda), \quad -\infty < \lambda < \infty$ spełniająca następujące warunki:

$$\lim_{\epsilon \to 0} P(\lambda + \epsilon) = P(\lambda), \quad P(-\infty) = \mathbf{0}, \quad P(\infty) = \mathbf{1}, \tag{9}$$

$$P(\lambda_1)P(\lambda_2) = P(\lambda_2)P(\lambda_1) = P(\min(\lambda_1, \lambda_2)), \tag{10}$$

gdzie **0** i **1** oznaczają operator zerowy i operator jednostkowy. Z powyższych wzorów widać, że gdy parametr λ przebiega cały swój zbiór wartości, operatory rzutowe rodziny spektralnej "wypełniają" stopniowo całą przestrzeń.

W najprostszym przypadku, gdy przestrzeń jest N-wymiarowa, rodzina spektralna składa się zawsze z $N+1$ elementów "nanizanych" na oś rzeczywistą przebieganą przez parametr λ. Są to: operator zerowy, operator rzutowania na jednowymiarową podprzestrzeń, operator rzutowania na dwuwymiarową podprzestrzeń zawierającą ową podprzestrzeń jednowymiarową, itd. aż do wyczerpania wszystkich wymiarów. W tym przypadku wartości parametru λ, dla których następuje skokowo powiększenie wymiaru podprzestrzeni są dowolne. W zależności od wyboru kolejnych podprzestrzeni, otrzymujemy różne rodziny spektralne. W przestrzeni skończenie wymiarowej konstrukcję tę można ujednoznacznić wybierając macierz hermitowską o niezwyrodniałym widmie. Wiadomo z algebry liniowej, że macierz taka ma zbiór ortogonalnych wektorów własnych tworzących bazę. Dla widma ze zwyrodnieniem będą to ortogonalne podprzestrzenie własne. Rodzina spektralna stowarzyszona z hermitowską macierzą jest zbudowana następująco. Od $-\infty$ do najmniejszej wartości własnej operatory $P(\lambda)$ są równe operatorowi zerowemu. Dla wartości λ równej najmniejszej wartości własnej λ_1 funkcja $P(\lambda)$ dokonuje skoku przyjmując wartość równą operatorowi rzutowania P_1 na kierunek własny odpowiadający tej najmniejszej wartości własnej. $P(\lambda)$ doznaje kolejnego skoku, gdy λ osiągnie wartość równą drugiej co do wielkości wartości własnej λ_2. W tym punkcie do operatora rzutowania P_1 dodajemy operator rzutowania P_2, który w sumie z P_1 tworzy operator rzutowania na podprzestrzeń rozpiętą na dwóch pierwszych wektorach własnych $P_{12} = P_1 + P_2$. Procedurę dodawania operatora rzutowania na kolejny kierunek własny powtarzamy aż do wyczerpania wszystkich wektorów własnych. Otrzymujemy w ten sposób operatory rzutowania na podprzestrzenie rozpięte na rosnącej liczbie wektorów własnych aż do otrzymania na końcu operatora jednostkowego rzutującego na całą przestrzeń. Rodzina spektralna odpowiadająca macierzy hermitowskiej jest zatem funkcją zmieniającą się skokowo, dla wartości $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_N$. Skoki funkcji $P(\lambda)$ w tych punktach są równe operatorom rzutowym P_i rzutującym na podprzestrzenie własne.

Między tymi wartościami funkcja $P(\lambda)$ jest stała. Podsumowując te rozważania stwierdzamy, że w przestrzeni skończenie wymiarowej z każdą macierzą hermitowską związana jest dokładnie jedna rodzina spektralna wyznaczona przez operatory rzutowania na podprzestrzenie własne tej macierzy. Macierz hermitowską M można wyrazić przez operatory P_i rzutowania na podprzestrzenie własne odpowiadające wartościom własnym λ_i za pomocą wzoru

$$M = \sum_i \lambda_i P_i. \tag{11}$$

Wykorzystując pojęcie całki Riemanna-Stieltjesa sumę tę można wyrazić przez rodzinę spektralną. Przypomnijmy, że całka ta będąca naturalnym uogólnieniem całki Riemanna zdefiniowana jest jako następująca granica

$$\int f(x)dg(x) = \lim_{|x_i - x_{i+1}| \to 0} \sum_i f(x_k)(g(x_k) - g(k_{k-1}). \tag{12}$$

W całce tej zamiast przyrostu zmiennej x występuje przyrost funkcji $g(x)$. W przypadku funkcji $g(x)$ odcinkami stałej całka ta daje właśnie sumę skoków tej funkcji pomnożonych przez wartości funkcji $f(x)$ w punktach tych skoków. Dla macierzy M otrzymujemy więc

$$M = \int \lambda \, dP(\lambda), \tag{13}$$

który jest równoważny wzorowi (11). Wzór taki obowiązuje w ogólnym przypadku, a nie tylko w skończenie wymiarowej przestrzeni Hilberta.

Między operatorami samosprzężonymi i rodzinami spektralnymi istnieje zawsze jednojednoznaczny związek, ale znalezienie rodziny spektralnej dla danego operatora jest na ogół trudnym problemem matematycznym; nie ma ogólnego przepisu na znajdowanie takich rodzin. Dużo łatwiej jest podać przyporządkowanie odwrotne. Jeżeli dana jest pewna rodzina spektralna $P_A(\lambda)$ to można dla niej skonstruować operator samosprzężony $\hat{A}$ zdefiniowany wzorem

$$\hat{A} = \int \lambda \, dP_A(\lambda). \tag{14}$$

Jeżeli rodzina spektralna jest różniczkowalną funkcją parametru λ (widmo ciągłe), to wzór powyższy można przedstawić w postaci całki po λ

$$\hat{A} = \int d\lambda \, \lambda \, \frac{dP_A(\lambda)}{d\lambda}. \tag{15}$$

Przy użyciu rodziny spektralnej można również wyrazić dowolną funkcję operatora $\hat{A}$

$$f(\hat{A}) = \int f(\lambda) \, dP_A(\lambda). \tag{16}$$

Stosowanie powyższych spektralnych przedstawień operatorów napotyka jednak na trudności, gdyż w zagadnieniach fizycznych potrafimy najczęściej odgadnąć postać operatora a nie rodzinę spektralną, którą trzeba dopiero skonstruować. Konstrukcję tę można przeprowadzić tylko w niektórych przypadkach.

Z własności rodziny spektralnej $P_A(\lambda)$ możemy odczytać charakter widma operatora $\hat{A}$. W najprostszym przypadku przestrzeni skończenie wymiarowej widmo to składało się tylko z wartości własnych; było to czyste widmo punktowe. W ogólnym przypadku, gdy $P_A(\lambda)$ nie jest funkcją odcinkami stałą, wystąpi także widmo ciągłe. Występowanie widma ciągłego nie jest przypadkiem anomalnym. Mamy z nim do czynienia na każdym kroku w teorii kwantów, ale analiza matematyczna takiego widma jest złożona, ponieważ w przestrzeni Hilberta nie ma wektorów własnych należących do wartości własnych z widma ciągłego.

Rodzinę spektralną operatorów rzutowych można także przypisać każdemu operatorowi unitarnemu. Jedyna różnica polega na tym, że rodzina ta określona jest nie na osi rzeczywistej ale na jednostkowym okręgu (parametryzowanym kątem, $0 < \lambda \leq 2\pi$), ponieważ widmo operatora unitarnego składa się z liczb o module 1.

POSTULATY TEORII KWANTÓW

Dwoma podstawowymi pojęciami fizycznymi, na których będziemy opierać całą strukturę teorii kwantowej w ogólnym, abstrakcyjnym sformułowaniu są pojęcia: pytania elementarnego dotyczącego układu kwantowego oraz stanu układu kwantowego. Pytanie elementarne to takie pytanie, na które odpowiedź może brzmieć tylko "TAK" lub "NIE". Na podstawie znajomości odpowiedzi na pytania elementarne określamy stan układu, podobnie jak na podstawie serii odpowiedzi w grze w 20 pytań odgadujemy wymyślone słowo. Wprowadzimy kilka postulatów, które określą rolę pytań elementarnych w badaniu własności stanów układu i wielkości fizycznych. Postulaty te nie stanowią podstaw do aksjomatyzacji teorii kwantów. Mają one jedynie ułatwić uporządkowanie wiedzy na temat teorii kwantowej. Tym tłumaczy się dość duża dowolność w ich doborze. Podany poniżej zestaw pochodzi od autorów.

Postulat 0: O modelu matematycznym

Matematycznym narzędziem teorii kwantów jest teoria przestrzeni Hilberta nad ciałem liczb zespolonych i teoria operatorów liniowych działających w tej przestrzeni.

Postulat I: O pytaniach elementarnych

Pytania elementarne reprezentowane są przez operatory rzutu ortogonalnego. Pytania elementarne można łączyć spójnikami "LUB" oraz "I" tworząc w ten sposób nowe pytania pod warunkiem, że spełnione są opisane poniżej warunki zgodności.

Pytanie elementarne powstałe przez połączenie pytań $\mathcal{P}_1$ i $\mathcal{P}_2$ spójnikiem "LUB" reprezentowane jest przez operator $P_1 + P_2$ pod warunkiem, że suma ta jest też operatorem rzutowym. łatwo wykazać, że warunkiem koniecznym i dostatecznym na to jest, żeby suma operatorów rzutowych była operatorem rzutowym jest $P_1 \cdot P_2 = \mathbf{0}$. Pytanie elementarne powstałe przez połączenie pytań $\mathcal{P}_1$ i $\mathcal{P}_2$ spójnikiem "I" reprezentowane jest przez operator $P_1 \cdot P_2$ pod warunkiem, że iloczyn ten jest też operatorem rzutowym. Warunkiem koniecznym i dostatecznym na to jest, żeby operatory P_1 i P_2 były przemienne $P_1 \cdot P_2 = P_2 \cdot P_1$. Tak więc reguły kwantowego rachunku zdań są istotnie różne od reguł klasycznych. Konieczność spełnienia warunków zgodności przy łączeniu pytań jest wyrazem komplementarności różnych własności układu kwantowego. Komplementarność ta prowadzi do znanych nam dobrze zasad nieoznaczoności. Pytania dotyczące jednocześnie dwóch komplementarnych wielkości fizycznych (na przykład położenia i pędu) są niedozwolone.

Postulat II: O stanach układu

Każdy stan układu kwantowego reprezentowany jest przez operator gęstości ρ. Operator gęstości jest to samosprzężony ($\rho^\dagger = \rho$), nieujemny ($\langle\psi|\rho\psi\rangle \geq 0$ dla każdego $|\psi\rangle$) operator o śladzie równym jedności ($\mathrm{Tr}\{\rho\} = 1$).

Stany opisane przez operatory gęstości, które są jednocześnie operatorami rzutowymi nazywamy stanami czystymi. Z warunków spełnianych przez operatory gęstości wynika, że operator rzutowy opisujący stan czysty jest operatorem rzutowania na jednowymiarową podprzestrzeń (kierunek) przestrzeni Hilberta. Można więc opisywać stany czyste także przez wektory w przestrzeni Hilberta, z tym, że wszystkie wektory różniące się czynnikiem fazowym reprezentują ten sam stan. Wszystkie pozostałe stany to stany mieszane. Operatory gęstości stanowią zbiór wypukły. Można je do siebie dodawać po pomnożeniu przez dodatnie współczynniki sumujące się do jedności bez naruszenia warunków nakładanych na te operatory. Stany czyste leżą w "narożnikach" tego zbioru wypukłego.

Postulat III: O prawdopodobieństwach

Prawdopodobieństwo p uzyskania twierdzącej odpowiedzi na pytanie reprezentowane przez operator rzutowy P równe jest $p = \mathrm{Tr}\{P\rho\}$, jeżeli układ kwantowy jest w stanie opisanym przez operator gęstości ρ.

Z postulatu tego wynika, że operator jednostkowy $\mathbf{1}$ reprezentuje pytanie, na które odpowiedź brzmi zawsze "TAK", operator zerowy $\mathbf{0}$ reprezentuje pytanie, na które odpowiedź brzmi zawsze "NIE", zaś zaprzeczenie pytania reprezentowanego przez operator P jest reprezentowane przez operator $\mathbf{1}-P$. Pytanie reprezentowane przez operator jednostkowy jest w istocie pytaniem o istnienie układu. Zadając to pytanie nie uzyskujemy żadnej dodatkowej informacji o układzie.

Dla stanów czystych ślad zawiera tylko jeden wyraz, który można przedstawić w postaci: $p = \langle\psi|P\psi\rangle$. Można z tego postulatu wywnioskować też jakie pytanie reprezentuje operator P_ψ rzutowania na kierunek wektora $|\psi\rangle$. Operator rzutowania na kierunek reprezentuje bowiem zarówno pytanie, jak i stan układu. Jeżeli układ jest właśnie w tym stanie (to znaczy $\rho = P_\psi$) to wtedy i tylko wtedy prawdopodobieństwo uzyskania odpowiedzi twierdzącej na pytanie reprezentowane przez P_ψ jest równe jeden. Oznacza to, że pytanie reprezentowane przez P_ψ brzmi: Czy układ znajduje się w stanie opisanym przez $|\psi\rangle$? Jeżeli układ jest w jakimkolwiek innym stanie czystym, reprezentowanym przez $|\phi\rangle$, to prawdopodobieństwo uzyskania odpowiedzi twierdzącej na pytanie P_ψ jest równe $\mathrm{Tr}\{P_\psi P_\phi\} = |\langle\psi|\phi\rangle|^2$. Jedynie w przypadku, gdy wektory $|\psi\rangle$ i $|\phi\rangle$ są wzajemnie ortogonalne, prawdopodobieństwo znalezienia stanu $|\psi\rangle$, gdy układ jest w stanie $|\phi\rangle$ jest równe zero.

Ze względu na to, że wzór na prawdopodobieństwo zależy liniowo od ρ, przy dodawaniu operatorów gęstości z wagami sumującymi się do jedności prawdopodobieństwa też sumują się z tymi samymi wagami. Oznacza to, że dodawanie operatorów gęstości oznacza klasyczne mieszanie stanów. Każdy stan mieszany można rozłożyć na sumę stanów czystych. Wystarczy w tym celu przedstawić operator gęstości ρ w postaci diagonalnej jako sumę (w ogólności nieskończoną) operatorów P_i rzutujących na wektory własne $\rho = \sum p_i\ P_i$. Współczynniki występujące w tym rozkładzie są dodatnie (ρ jest operatorem nieujemnym) i sumują się do jedności (ślad jest równy jeden). Rozkład ten jest jednoznaczny tylko wtedy, gdy wszystkie wartości własne p_i są niezwyrodniałe. W ogólności jednak ten sam stan mieszany można otrzymać ze "zmieszania" różnych stanów czystych.

Ze względu na to, że w teorii kwantów jedynymi obserwowalnymi wielkościami są prawdopodobieństwa odpowiedzi twierdzących na wszelkie możliwe pytania, zbiór tych prawdopodobieństw w istocie określa stan układu. Stan czysty możemy uzyskać tylko wtedy, gdy uda nam się uzyskać odpowiedzi na tak wiele pytań, by wyizolować tylko jeden kierunek w przestrzeni Hilberta. Jeżeli informacja o stanie układu jest niepełna, to stan układu jest mieszany. Stany mieszane zarówno w teorii kwantów jak i w klasycznej teorii statystycznej występują w sytuacjach, w których informacja o układzie ma charakter statystyczny, to znaczy znamy jedynie prawdopodobieństwa występowania stanów wchodzących w skład mieszaniny.

Postulat IV: O wielkościach fizycznych

Każda wielkość fizyczna A reprezentowana jest przez rodzinę spektralną operatorów rzutowych $P_A(\lambda)$. Operator rzutowy $P_A(\lambda)$ reprezentuje pytanie: Czy wielkość fizyczna A ma wartość nie większą od λ?

Na mocy postulatu I iloczyn operatorów $(\mathbf{1} - P_A(\lambda_1)) \cdot P_A(\lambda_2) = P_A(\lambda_2) - P_A(\lambda_1)$ reprezentuje pytanie: Czy wielkość fizyczna A ma wartość większą od λ_1 i nie większą od λ_2? Pytanie to można także przedstawić w postaci: Czy wielkość fizyczna A ma wartość z przedziału $(\lambda_1, \lambda_2]$?

Mając do dyspozycji rodzinę spektralną reprezentującą wielkość fizyczną A można na podstawie postulatu III podać przybliżony wzór na średnią wartość tej wielkości w postaci

$$\langle A \rangle \approx \sum_i \lambda_i \mathrm{Tr}\{(P_A(\lambda_{i+1}) - P_A(\lambda_i))\rho\}. \tag{17}$$

W granicy, gdy wszystkie $|\lambda_{i+1} - \lambda_i|$ dążą do zera, suma przechodzi w całkę Riemanna-Stieltjesa i na wartość średnią otrzymujemy wzór (por. (14))

$$\langle A \rangle = \mathrm{Tr}\{\hat{A}\rho\}. \tag{18}$$

Wyrażenie po prawej stronie nazywamy często wartością oczekiwaną operatora $\hat{A}$ w stanie ρ. W najprostszym przypadku, gdy układ jest w stanie czystym, wartość średnia A dana jest wzorem

$$\langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A} \psi \rangle. \tag{19}$$

Postulat V: O ewolucji układu w czasie.

Zależność od czasu prawdopodobieństwa p określonego postulatem III dana jest wzorem $p(t) = \mathrm{Tr}\{\exp(-i\hat{H}t/\hbar)P\exp(i\hat{H}t/\hbar)\rho\}$, gdzie $\hat{H}$ jest operatorem reprezentującym hamiltonian układu.

Wzór ten można zinterpretować na dwa sposoby, zapisując $p(t)$ w dwóch równoważnych formach: $p(t) = \mathrm{Tr}\{P(t)\rho\}$, lub $p(t) = \mathrm{Tr}\{P\rho(t)\}$, gdzie $P(t) = \exp(i\hat{H}t/\hbar)P\exp(-i\hat{H}t/\hbar)$, zaś $\rho(t) = \exp(-i\hat{H}t/\hbar)\rho\exp(i\hat{H}t/\hbar)$. W tym drugim przypadku skorzystaliśmy z niezmienniczości względem cyklicznych przestawień operatorów pod znakiem śladu ($\mathrm{Tr}\{ABC\} = \mathrm{Tr}\{BCA\}$). W pierwszym przypadku ewolucji czasowej podlegają operatory rzutowe a wraz z nimi także operatory reprezentujące wielkości fizyczne. Taką interpretację ewolucji nazywamy obrazem Heisenberga. W drugim przypadku ewolucji czasowej podlegają operatory gęstości reprezentujące stany układu. Taką interpretację ewolucji nazywamy obrazem Schrödingera. Obie te interpretacje są całkowicie równoważne, gdyż dają taką samą zależność od czasu prawdopodobieństw. Można także wprowadzić interpretację pośrednią, w której pytania i operatory reprezentujące wielkości fizyczne podlegają swobodnej ewolucji, zaś wpływ oddziaływań uwzględniony jest w ewolucji operatorów gęstości reprezentujących stany układu. Taką interpretację ewolucji nazywamy obrazem Diraca, lub obrazem oddziaływania.

W najprostszym przypadku, gdy układ jest w chwili początkowej w stanie czystym, będzie on zawsze w stanie czystym, gdyż operator rzutowy po transformacji unitarnej pozostaje operatorem rzutowym, $(UPU^\dagger)^2 = UPU^\dagger$. Jeżeli P jest operatorem rzutowania na kierunek $|\psi\rangle$, to $UPU^\dagger$ jest operatorem rzutowania na wektor $U|\psi\rangle$. Ewolucję czasową dla stanów czystych można więc przedstawić jako zmianę w czasie wektora reprezentującego stan układu: $|\psi(t)\rangle = \exp(-i\hat{H}t/\hbar)|\psi(0)\rangle$.

Z postulatu V wynikają równania różniczkowe ewolucji dla operatorów w obrazie Heisenberga i Schrödingera

$$i\hbar\partial_t\hat{A}(t) = \left[\hat{A}(t), \hat{H}\right], \quad i\hbar\partial_t\hat{\rho}(t) = \left[\hat{H}, \rho(t)\right]. \tag{20}$$

W przypadku stanu czystego reprezentowanego przez wektor $|\psi(t)\rangle$ równanie ewolucji w obrazie Schrödingera przyjmuje postać

$$i\hbar\partial_t|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle. \tag{21}$$

Postulat VI: o układach złożonych.

Przestrzeń Hilberta $\mathcal{H}$ układu złożonego ma strukturę iloczynu tensorowego przestrzeni Hilberta $\mathcal{H}_1$ i $\mathcal{H}_2$ układów wchodzących w jego skład. W przypadku, gdy podukładami są jednakowe cząstki, ten iloczyn tensorowy podlega dodatkowo symetryzacji (bozony) lub antysymetryzacji (fermiony), w celu zagwarantowania kwantowej nierozróżnialności cząstek.

Powyższy postulat wyjaśnia budowę kwantowej teorii układów, które są złożone z prostszych podukładów. Wyjaśnia on, na przykład, jak z kwantowej teorii elektronu i kwantowej teorii protonu powstaje kwantowa teoria atomu wodoru. Własności układów złożonych w teorii kwantowej, wynikające ze struktury iloczynu tensorowego, są istotnie różne od własności klasycznych układów złożonych, dla których obowiązuje struktura iloczynu kartezjańskiego. Mówiąc obrazowo (choć nieprecyzyjnie) liczba możliwych stanów układu złożonego w teorii kwantowej jest równa *iloczynowi* liczb stanów dla podukładów, podczas, gdy w teorii klasycznej jest to tylko suma. W teorii kwantowej pojawiają się nowe możliwości składania stanów podukładów (znane pod nazwą "splatania stanów") nieznane w teorii klasycznej. Stan spleciony dwóch podukładów jest to każdy stan opisany przez wektor stanu w przestrzeni Hilberta dla układu złożonego, który nie jest po prostu iloczynem (zewnętrznym) wektorów opisującym podukłady. W najprostszym przypadku będzie to suma tylko dwóch składników (współczynniki a_1 i a_2 są tak dobrane, by wektor $|\Psi_{12}\rangle$ był unormowany)

$$|\Psi_{12}\rangle = a_1|\psi_1\rangle|\phi_1\rangle + a_2|\psi_2\rangle|\phi_2\rangle. \tag{22}$$

Stany podukładów w takim stanie splecionym są ze sobą skorelowane. Gdy podukład pierwszy jest w stanie $|\psi_1\rangle$, to podukład drugi jest w stanie $|\phi_1\rangle$ i tak samo dla stanu drugiego. Korelacja ta oznacza, że odpowiedzi na pytania dotyczące z osobna obu układów będą ze sobą skorelowane. Charakterystyczną cechą stanów splecionych jest powstawanie z nich stanów mieszanych jednego z podukładów, gdy zignorujemy całkowicie wszelkie informacje dotyczące drugiego podukładu. Matematycznym wyrazem takiej ignorancji jest wykonanie operacji śladu w przestrzeni Hilberta drugiego podukładu. W rezultacie utraty informacji o drugim podukładzie otrzymujemy stan mieszany pierwszego podukładu. Na przykład dla stanu opisanego wzorem (22) otrzymujemy w ten sposób stan mieszany podukładu pierwszego opisany przez operator gęstości działający w płaszczyźnie rozpiętej przez wektory $|\psi_1\rangle$ i $|\psi_2\rangle$.

KWANTOWANIE KANONICZNE

Ogólne postulaty podane powyżej stosują się do każdej teorii kwantowej, ale z powodu swojej uniwersalności nie zawierają żadnych specyficznych informacji na temat konkretnych zastosowań teorii kwantowej. Nie dostarczają nam one żadnych sposobów rozwiązywania konkretnych problemów, a jedynie porządkują naszą wiedzę na temat teorii kwantów. Dotyczą one w równej mierze nierelatywistycznej mechaniki kwantowej pojedynczej cząstki, jak i relatywistycznej teorii pól kwantowych, czy też teorii strun. Nie ma żadnej uniwersalnej i pewnej metody budowania teorii kwantowej do opisu danego układu fizycznego, ale bardzo często udaje się odgadnąć poprawną teorię kwantową przy użyciu metody heurystycznej zwanej kanonicznym kwantowaniem. Nazwa pochodzi stąd, iż w tej metodzie punktem wyjścia jest formalizm kanoniczny teorii klasycznej. Podstawowe pojęcia tego formalizmu (zmienne kanoniczne, hamiltonian, nawiasy Poissona, przekształcenia kanoniczne) znajdują swoje odpowiedniki w teorii kwantowej. Kanoniczne kwantowanie teorii klasycznej opiera się na tym, że (P. A. M. Dirac 1926a) "matematyczne operacje w obydwu teoriach podlegają w wielu przypadkach tym samym prawom". Kanoniczne kwantowanie dostarcza owego brakującego ogniwa, dzięki któremu udaje się wypełnić konkretną treścią opisane w tym rozdziale ogólne, abstrakcyjne sformułowanie teorii kwantowej. Związek między teorią kwantową i kanonicznym sformułowaniem teorii klasycznej odkryli niezależnie Dirac (1926a) oraz Born, Heisenberg i Jordan (1926).

W kanonicznym formalizmie teorii klasycznej punktem wyjścia jest opis układu o N stopniach swobody przy użyciu par współrzędnych kanonicznych (q^i, p_j), $i, j = 1, 2, \ldots, N$. Ewolucja czasowa układu fizycznego opisana jest w formalizmie kanonicznym równaniami Hamiltona; do ich znalezienia potrzebna jest znajomość hamiltonianu $H(q^i, p_j)$ — energii danej jako funkcja współrzędnych kanonicznych. Równania ewolucji można wyrazić przez nawiasy Poissona: pochodna czasowa wielkości fizycznej $F(q^i, p_j)$ dana jest wzorem

$$\frac{dF(q^i, p_j)}{dt} = \{F(q^i, p_j), H(q^i, p_j)\}. \tag{23}$$

Dzięki nawiasowi Poissona w zbiorze funkcji zmiennych kanonicznych pojawia się struktura algebry Liego, gdyż mamy zdefiniowaną w nim operację binarną $\{,\}$ spełniającą warunki

$$
\begin{aligned}
\{F, G\} &= -\{G, F\}, & (24)\\
\{\lambda_1 F_1 + \lambda_2 F_2, G\} &= \lambda_1\{F_1, G\} + \lambda_2\{F_2, G\}, & (25)\\
\{FG, H\} &= F\{G, H\} + \{F, H\}G, & (26)\\
\{F,\{G,H\}\} &+ \{H,\{F,G\}\} + \{G,\{H,F\}\} = 0. & (27)
\end{aligned}
$$

W teorii kwantowej współrzędne kanoniczne (jako wielkości fizyczne) są reprezentowane przez samosprzężone operatory $(\hat{q}^i, \hat{p}_j)$. Kwantowanie kanoniczne opiera się na dwóch heurystycznych postulatach:
Postulat 1. Wielkości fizyczne w teorii kwantowej są takimi samymi funkcjami współrzędnych kanonicznych (operatorów $(\hat{q}^i, \hat{p}_j)$ jak ich klasyczne odpowiedniki.
Postulat 2. Algebraiczne związki między podstawowymi wielkościami fizycznymi indukowane przez nawias Poissona pozostają w mocy; nawias Poissona zostaje zastąpiony w teorii kwantowej przez komutator podzielony przez $i\hbar$.

Zauważmy, że zastąpienie nawiasów Poissona przez komutatory jest naturalnym założeniem, ponieważ te ostatnie spełniają te same związki algebraiczne

$$
\begin{aligned}
\left[\hat{F}, \hat{G}\right] &= -\left[\hat{G}, \hat{F}\right], & (28)\\
\left[\lambda_1 \hat{F}_1 + \lambda_2 \hat{F}_2, \hat{G}\right] &= \lambda_1\left[\hat{F}_1, \hat{G}\right] + \lambda_2\left[\hat{F}_2, \hat{G}\right], & (29)\\
\left[\hat{F}\hat{G}, \hat{H}\right] &= \hat{F}\left[\hat{G}, \hat{H}\right] + \left[\hat{F}, \hat{H}\right]\hat{G}, & (30)\\
\left[\hat{F},\left[\hat{G},\hat{H}\right]\right] &+ \left[\hat{H},\left[\hat{F},\hat{G}\right]\right] + \left[\hat{G},\left[\hat{H},\hat{F}\right]\right] = 0. & (31)
\end{aligned}
$$

Postulaty te nazwaliśmy heurystycznymi, gdyż nie można ich stosować w sposób automatyczny; przy ich realizacji nieprzemienność operatorów prowadzi do istotnych komplikacji. W przypadku postulatu 1 komplikacje te przejawiają się w niejednoznaczności operatorów reprezentujących wielkości fizyczne. W przypadku postulatu 2 okazuje się, że żądanie, by komutatory dla *wszystkich* operatorów dawały te same rezultaty jak odpowiednie związki poissonowskie, prowadzi do sprzeczności. Zilustrujemy te trudności na przykładzie układu o jednym stopniu swobody opisanym przez zmienne kanoniczne x i p. Komutator odpowiadających im operatorów $\hat{x}$ i $\hat{p}$ ma wartość

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar. \tag{32}$$

Ze względu na to, że operatory reprezentujące zmienne kanoniczne nie są przemienne, zastosowanie postulatu 1 daje wynik niejednoznaczny. Czy wielkość fizyczna xp^2 ma być reprezentowana przez operator $\hat{x}\hat{p}^2$? A może przez operator $\hat{p}\hat{x}\hat{p}$? Ten drugi operator jest, w odróżnieniu od pierwszego, samosprzężony. Samosprzężony jest jednak również operator $(\hat{p}^2\hat{x} + \hat{x}\hat{p}^2)/2$. Odpowiedzi na te pytania dostarcza umiejętnie zastosowany postulat 2. Kluczowym pojęciem jest tu zwrot "podstawowe wielkości fizyczne" użyty w jego sformułowaniu. Wielkość fizyczna xp^2 raczej do takich wielkości nie należy, ale będzie do nich należał hamiltonian. Typowy hamiltonian jest sumą energii kinetycznej i potencjalnej $H = p^2/2m + V(x)$ i nie ma żadnego problemu z przyporządkowaniem mu operatora. Nawet jednak w tym bardzo prostym przypadku natknęlibyśmy się na trudności, gdybyśmy chcieli użyć innych współrzędnych kanonicznych niż x (współrzędna kartezjańska) i p. W teorii klasycznej każdy taki wybór jest dozwolony pod warunkiem, że różne układy współrzędnych łączy przekształcenie kanoniczne. W teorii kwantowej możemy też dokonać przekształcenia operatorów zmiennych kanonicznych, ale pod warunkiem, że procedury kwantowania dokonamy we współrzędnych kartezjańskich. Odpowiednikiem przekształceń kanonicznych są w teorii kwantowej przekształcenia unitarne i po skwantowaniu we współrzędnych kartezjańskich możemy dokonać dowolnego przekształcenia unitarnego. Wytłumaczeniem wyjątkowej roli układu kartezjańskiego jest fakt, że pęd kanonicznie sprzężony do kartezjańskiej współrzędnej jest jednocześnie generatorem przesunięć. Tak jak hamiltonian przesuwa układ w czasie, tak pęd p przesuwa go w przestrzeni. Doprecyzowanie postulatów kanonicznego kwantowania polega na dodaniu informacji o grupach przekształceń teorii klasycznej, które mają pozostać niezmienione po skwantowaniu. Zastosowanie tego wymogu często prowadzi do jednoznacznej teorii (tak jest w przypadku nierelatywistycznej mechaniki), ale nie ma gwarancji sukcesu w każdym przypadku.

Procedura kanonicznego kwantowania prowadzi do związków algebraicznych między operatorami, ale nic nie mówi o tym, które przedstawienie (reprezentację) operatorów należy wybrać. Dla układu o skończonej liczbie stopni swobody wszystkie przedstawienia są unitarnie równoważne, ale nawet w tym prostym przypadku przy rozwiązywaniu konkretnego problemu jedno przedstawienie może mieć przewagę nad drugim. Na przykład przedstawienie położeniowe jest na ogół wygodniejsze przy rozwiązywaniu równania Schrödingera, ponieważ potencjały są funkcjami położenia. Przedstawienie pędowe jest jednak bardziej dogodne dla cząstek swobodnych, gdyż ewolucja czasowa sprowadza się po prostu do mnożenia przez czynnik fazowy.

NIERELATYWISTYCZNA MECHANIKA FALOWA JAKO REALIZACJA OGÓLNEJ TEORII KWANTÓW

Podstawowym obiektem mechaniki falowej jest funkcja falowa. Jest ona reprezentacją wektora w przestrzeni Hilberta i opisuje stan czysty układu. Ewolucje czasową funkcji falowej określa równanie Schrödingera mechaniki falowej, które jest szczególnym przypadkiem ogólnego, operatorowego równania ewolucji wektora falowego (21). Operator $\hat{H}$ w tym przypadku zbudowany jest z operacji różniczkowania względem x, y i z oraz mnożenia przez funkcje reprezentujące zewnętrzne potencjały.

Podstawowymi wielkościami fizycznymi w mechanice falowej są współrzędne wektora położenia. Działanie operatorów $\hat{x}, \hat{y}$ i $\hat{z}$ reprezentujących te wielkości polega na mnożeniu funkcji falowej przez jej argumenty x, y i z. Operatory położenia są operatorami nieograniczonymi; nie każda funkcja falowa całkowalna z kwadratem pozostaje funkcją całkowalną z kwadratem po pomnożeniu przez jedną ze współrzędnych. Dziedziny operatorów $\hat{x}, \hat{y}$ i $\hat{z}$ są jedynie podzbiorami przestrzeni Hilberta. Można bez trudu znaleźć rodziny spektralne operatorów rzutowych reprezentujące wielkości fizyczne x, y i z. Mają one postać operatorów mnożenia funkcji falowej przez funkcje schodkowe $\theta(\xi - x)$, $\theta(\eta - y)$ i $\theta(\zeta - z)$. Operatory te zależą w sposób ciągły od swoich parametrów i dlatego widmo wszystkich trzech składowych położenia jest ciągłe. Nie należy tutaj mylić ciągłości operatora rzutowego danego przez funkcję schodkową z oczywistą nieciągłością samej funkcji schodkowej. Ciągłość rodziny operatorów rzutowych $P(\lambda)$ jako funkcji parametru λ oznacza, że norma $||P(\lambda)||$ wektora uzyskanego przez działanie na dowolny wektor $|\psi\rangle$ operatorem $P(\lambda)$ jest ciągłą funkcją λ. W naszym przypadku oznacza to, że całka

$$\int_{\infty}^{\xi} dx \; |\psi(x, y, z)|^2 \tag{33}$$

jest ciągłą funkcją parametru ξ, co wynika z całkowalności funkcji ψ.

Probabilistyczna interpretacja funkcji falowej wynika z postulatu IV i z postaci operatorów rzutowych dla składowych położenia. Różnica dwóch funkcji schodkowych $\theta(\xi_2 - x) - \theta(\xi_1 - x)$ reprezentuje pytanie: Czy współrzędna x cząstki należy do przedziału o końcach w ξ_1 i ξ_2. Pytania dotyczące różnych współrzędnych można łączyć spójnikiem "I", gdyż mnożenie przez funkcje schodkowe od różnych zmiennych jest przemienne. Z takiego pomnożenia otrzymujemy operator rzutowy $P_{\Delta V} = (\theta(\xi_2 - x) - \theta(\xi_1 - x))(\theta(\eta_2 - y) - \theta(\eta_1 - y))(\theta(\zeta_2 - x) - \theta(\zeta_1 - x))$ reprezentujący pytanie: Czy cząstka znajduje się w sześcianie ΔV określonym przez powyższe wartości parametrów? Otrzymujemy w ten sposób wzór na prawdopodobieństwo $p_{\Delta V}$ otrzymania twierdzącej odpowiedzi na powyższe pytanie

$$p_{\Delta V} = \int_{\xi_1}^{\xi_2} dx \int_{\eta_1}^{\eta_2} dy \int_{\zeta_1}^{\zeta_2} dz\, |\psi(x,y,z)|^2, \tag{34}$$

który odtwarza postulat Borna o probabilistycznej interpretacji funkcji falowej.

W podobny sposób, jak położenie cząstki, można opisać jej pęd. Do takiego opisu potrzebna jest rodzina operatorów rzutowych reprezentujących pytania dotyczące pędu cząstki. Ze względu na to, że w tym przypadku interpretację probabilistyczną ma kwadrat modułu transformaty Fouriera funkcji falowej, odpowiednie operatory najłatwiej skonstruować najpierw w działaniu na funkcję $\tilde{\psi}(p_x, p_y, p_z)$. Na przykład, dla składowej x pędu operator $P_{\Delta p_x}$ reprezentujący pytanie: Czy składowa p_x ma wartość w przedziale (λ_1, λ_2)? jest mnożeniem funkcji falowej w przedstawieniu pędowym przez różnicę funkcji schodkowych $\theta(\lambda_2 - p_x) - \theta(\lambda_1 - p_x)$. W przedstawieniu położeniowym operator ten jest operatorem całkowym, którego postać można wyznaczyć odwracając przekształcenie Fouriera. Otrzymujemy w ten sposób

$$\begin{aligned}(P_{\Delta p_x}\psi)(x,y,z) \\ = \int dx'\, \frac{\exp(i\lambda_1(x-x')/\hbar) - \exp(i\lambda_2(x-x')/\hbar)}{2\pi i(x-x')}\psi(x',y,z).\end{aligned} \tag{35}$$

Łatwo można się przekonać, że operator (35) nie jest przemienny z operatorami rzutowania $\theta(\xi_2 - x) - \theta(\xi_1 - x)$. Pytań dotyczących tych samych składowych położenia i pędu nie można więc łączyć, co jest oczywiście konsekwencją zasady nieoznaczoności Heisenberga. Dysponując rodziną spektralną operatorów rzutowych (35) dla operatorów składowych pędu można na podstawie wzoru (15) skonstruować sam operator pędu $\hat{p}_x$.

$$\begin{aligned}(\hat{p}_x\psi)(x,y,z) &= \int d\lambda\, \lambda \int dx'\, \frac{d}{d\lambda}\, \frac{\exp(i\lambda(x-x')/\hbar)}{2\pi i(x-x')}\psi(x',y,z) \\ &= \int \frac{d\lambda}{2\pi\hbar}\lambda \exp(i\lambda x/\hbar)\tilde{\psi}(\lambda,y,z) = \frac{\hbar}{i}\partial_x\psi(x,y,z).\end{aligned} \tag{36}$$

W tym wzorze transformata Fouriera dotyczy tylko pierwszego argumentu funkcji falowej. Odtworzyliśmy zatem znaną postać operatora pędu.

Znalezienie rodzin spektralnych dla operatorów położenia i pędu było stosunkowo łatwe, ponieważ dotyczyło właściwie kinematyki kwantowej, a nie dynamiki. Informacje o dynamice zawarte są w hamiltonianie, który (postulat V) wyznacza rozwój układu w czasie. Najważniejsze zatem, ale i najtrudniejsze, jest znalezienie rodziny spektralnej dla operatora $\hat{H}$. Zagadnienie to rozwiązywaliśmy już kilkakrotnie w tej książce poszukując stanów własnych hamiltonianu. Rozwiązaliśmy problemy cząstki w jamie potencjału, oscylatora harmonicznego, cząstki naładowanej w polu kulombowskim i w stałym polu magnetycznym. Znalezione tam rozwiązania można przetłumaczyć na język rodzin spektralnych. Zrobimy to dla najprostszego przypadku oscylatora harmonicznego w jednym wymiarze. Rodzinę spektralną budujemy w tym przypadku z operatorów rzutowania na wektory stanu, których funkcje falowe opisane są przez wielomiany Hermite'a pomnożone przez funkcję gaussowską. Bardzo podobnie, jak dla rozkładu spektralnego w przypadku skończenie wymiarowej przestrzeni Hilberta, rodzina spektralna jest sumą operatorów rzutowych P_n na wektory własne, w której współczynnikami są funkcje schodkowe,

$$P(\lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} \theta(\lambda - (n + 1/2)\hbar\omega) P_n, \tag{37}$$

zaś sam operator energii dany jest wzorem

$$\hat{H} = \sum_{n=0}^{\infty} (n + 1/2)\hbar\omega P_n. \tag{38}$$

W zastosowaniach teorii kwantów dużo częściej posługujemy się obrazem Schrödingera niż obrazem Heisenberga — łatwiej jest rozwiązywać równania na funkcje niż na operatory. Szczególnym ale ważnym przypadkiem, gdy obraz Heisenberga jest bardzo użyteczny jest teoria oscylatora harmonicznego i układów pokrewnych (np. cząstki naładowanej w stałym polu elektrycznym i/lub magnetycznym) charakteryzujących się liniowymi równaniami ewolucji na operatory. Takie równania można bez trudu rozwiązać ponieważ rozwiązania równań ewolucji są prawie takie same w teorii kwantowej, jak w teorii klasycznej, różnią się jedynie tym, że wartości początkowe w teorii kwantowej są operatorami. W najprostszym przypadku jednowymiarowego oscylatora harmonicznego równania ruchu mają postać

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \left[\hat{x}, \hat{H}\right]/i\hbar = \hat{p}/m \tag{39}$$

$$\frac{d\hat{p}}{dt} = \left[\hat{p}, \hat{H}\right]/i\hbar = -m\omega^2\hat{x}. \tag{40}$$

Rozwiązaniem tych równań są operatory, zależą od czasu w następujący sposób

$$\hat{x}(t) = \hat{x}(0)\cos(\omega t) + \hat{p}(0)\sin(\omega t)/m\omega, \tag{41}$$

$$\hat{p}(t) = \hat{p}(0)\cos(\omega t) - m\omega\hat{x}(0)\sin(\omega t). \tag{42}$$

Przy pomocy tych rozwiązań można znaleźć zależność od czasu różnych wielkości fizycznych (na przykład wszelkich korelacji między położeniem i pędem) bez potrzeby rozwiązywania równania Schrödingera. Tak więc ogólne sformułowanie kwantowej teorii pozwala na większą elastyczność; w zależności od potrzeb możemy posługiwać się albo obrazem Schrödingera albo obrazem Heisenberga. Innym ważnym przykładem, gdzie ogólna teoria kwantowa i obraz Heisenberga są bardzo przydatne, jest kwantowa teoria pola elektromagnetycznego.

KWANTOWA TEORIA POLA ELEKTROMAGNETYCZNEGO JAKO REALIZACJA OGÓLNEJ TEORII KWANTÓW

Pole elektromagnetyczne jest równie ważnym układem fizycznym, jak układ złożony tylko z cząstek obdarzonych masą, i jego teoria też podlega procedurze kwantyzacji. Pokażemy jak to zrobić w najprostszym przypadku dla swobodnego pola elektromagnetycznego w próżni lub w ośrodku o stałych wartościach ϵ i μ. Wyrażenie na energię pola elektromagnetycznego, na podstawie którego zbudujemy hamiltonian dane jest wzorem

$$E = H = \int d^3r \left(\mathbf{D}^2(\mathbf{r})/2\epsilon + \mathbf{B}^2(\mathbf{r})/2\mu\right). \tag{43}$$

Jako zmiennych kanonicznych użyjemy wektorów indukcji magnetycznej i elektrycznej. Uzasadnieniem tego wyboru będzie postać nawiasów Poissona. W celu uzyskania z wzorów

$$\begin{aligned} \partial_t \mathbf{D}(\mathbf{r}) &= \{\mathbf{D}(\mathbf{r}), H\} = \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}), & (44)\\ \partial_t \mathbf{B}(\mathbf{r}) &= \{\mathbf{B}(\mathbf{r}), H\} = -\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}), & (45) \end{aligned}$$

równań Maxwella jako równań ewolucji dla pola elektromagnetycznego należy przyjąć następujący kształt nawiasów Poissona dla składowych wektorów $\mathbf{B}$ i $\mathbf{D}$

$$\{B_i(\mathbf{r}), D_j(\mathbf{r}')\} = \varepsilon_{ijk}\partial_k \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \tag{46}$$

Dla innych wektorów pola nawias Poissona nie jest uniwersalny a zależy poprzez ϵ i μ od własności ośrodka. Kanoniczne kwantowanie w tym przypadku polega na nałożeniu na operatory $\hat{\mathbf{B}}(\mathbf{r})$ i $\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{r})$ reguł komutacyjnych

$$\left[\hat{B}_i(\mathbf{r}), \hat{D}_j(\mathbf{r}')\right] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\partial_k \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \tag{47}$$

Oczywiście, tak jak w nierelatywistycznej mechanice kwantowej, istnieje wiele przedstawień operatorów spełniających te same związki komutacyjne. Najczęściej używane jest przedstawienie operatorów przez operatory kreacji i anihilacji fotonów, ale najbliższe opisanej w naszej książce mechanice falowej jest przedstawienie, w którym jeden z operatorów (na przykład $\hat{\mathbf{B}}$) jest realizowany jako mnożenie, zaś drugi jest realizowany jako różniczkowanie. Odpowiednikiem współrzędnych q^i są wartości wektora potencjału $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ w różnych punktach przestrzeni a zatem różniczkowanie ma charakter funkcjonalny. Związki przemienności (47) są spełnione przez następujące operatory

$$\hat{\mathbf{B}}(\mathbf{r}) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}), \quad \hat{\mathbf{D}}(\mathbf{r}) = i\hbar \frac{\delta}{\delta \mathbf{A}(\mathbf{r})}. \tag{48}$$

Tak więc w tym przypadku potencjał wektorowy odgrywa rolę współrzędnej x, co uzasadnia nazwę przedstawienie Schrödingera. Pozostaje jeszcze tylko do spełnienia warunek $\nabla \cdot \hat{\mathbf{D}}(\mathbf{r}) = 0$ (operator $\hat{\mathbf{B}}$ spełnia taki warunek automatycznie ze względu na swoją budowę). Nie możemy nałożyć warunku znikania dywergencji na $\hat{\mathbf{D}}$, ponieważ składowe tego operatora są niezależne. Można jedynie ograniczyć przy pomocy tego warunku dopuszczalne wektory stanu układu żądając, by spełnione było równanie

$$\nabla \cdot \frac{\delta}{\delta \mathbf{A}(\mathbf{r})} \Psi [\mathbf{A}] = 0. \tag{49}$$

Równanie to można zinterpretować jako warunek niezmienniczości funkcjonału $\Psi [\mathbf{A}]$ przy przekształceniu argumentu $\mathbf{A} \to \mathbf{A} + \nabla\Lambda$. Tak więc równanie (49) jest warunkiem niezmienniczości teorii kwantowej względem przekształceń cechowania potencjału. Można oczywiście podać też odpowiednik przedstawienia pędowego, w którym role operatorów $\hat{\mathbf{B}}$ i $\hat{\mathbf{D}}$ są odwrócone.

W przedstawieniu Schrödingera, na mocy (43), kwantowy hamiltonian przyjmuje postać

$$\hat{H} = \int d^3r \left(-\frac{\hbar^2}{2\epsilon} \frac{\delta^2}{\delta \mathbf{A}(\mathbf{r})} + \frac{1}{2\mu} (\nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}))^2 \right). \tag{50}$$

Na podstawie tego wzoru można powiedzieć, że pole elektromagnetyczne jest jednym olbrzymim oscylatorem o nieskończonej liczbie stopni swobody. Stan podstawowy takiego nieskończonego oscylatora jest też opisany przez funkcję Gaussa z tym, że w wykładniku zamiast współrzędnych x pojawią się wartości pola $\mathbf{B}$ we wszystkich punktach.

$$\Psi_0 [\mathbf{A}] = C \exp \left[-\frac{1}{4\pi^2\hbar} \sqrt{\frac{\epsilon}{\mu}} \int d^3r \int d^3r' \, \mathbf{B}(\mathbf{r}) \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}') \right]. \tag{51}$$

Można sprawdzić bezpośrednim rachunkiem, że powyższy funkcjonał spełnia równanie $\hat{H}\Psi = E_0\Psi$. Wartość własna E_0 jest jednak nieskończona, bo każdy stopień swobody, tak jak każdy jednowymiarowy oscylator harmoniczny, daje wkład do energii stanu podstawowego równy $\hbar\omega/2$. Ta nieskończona stała nie wpływa na szczęście na przewidywania teorii. Można po prostu uznać, że właściwym hamiltonianem jest różnica $\hat{H} - E_0$ i wtedy stan podstawowy (stan próżni) ma energię zero.

RELATYWISTYCZNA TEORIA KWANTÓW

Kwantowa teoria swobodnego pola elektromagnetycznego jest najprostszym, ale realistycznym, przykładem relatywistycznej teorii kwantowej. W krótkim opisie tej teorii podanym powyżej relatywistyczne własności nie są widoczne, ale ogólne sformułowanie teorii kwantów omawiane w tym rozdziale pozwala na łatwiejsze wykazanie, że teoria ta spełnia zasady teorii względności. Przede wszystkim, łatwiej jest wykazać istnienie pełnej symetrii między współrzędną czasową i współrzędnymi przestrzennymi. Wystarczy w tym celu rozszerzyć postulat V dodając do niego analogicznie sformułowany warunek dotyczący przesunięć w kierunku przestrzennym (na przykład w kierunku x): Zależność od współrzędnej x prawdopodobieństwa p dana jest wzorem $p(x) = \mathrm{Tr}\{\exp(-i\hat{P}_x x/\hbar) P \exp(i\hat{P}_x x/\hbar)\rho\}$, gdzie $\hat{P}_x$ jest operatorem składowej x pędu układu. Analogicznie, jak było to w przypadku hamiltonianu, ogólne sformułowanie nie daje informacji na temat konstrukcji operatora pędu, ale posługując się metodą kanonicznego kwantowania możemy skonstruować operator pędu dla swobodnego pola elektromagnetycznego posługując się odpowiednim wzorem elektrodynamiki klasycznej

$$\hat{\mathbf{P}} = \int d^3r \hat{\mathbf{D}}(\mathbf{r}) \times \hat{\mathbf{B}}(\mathbf{r}) = i\hbar \int d^3r \frac{\delta}{\delta \mathbf{A}(\mathbf{r})} \times (\nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r})). \tag{52}$$

Niezmienniczość relatywistyczna elektrodynamiki nie pozostawia wątpliwości co do wyboru podstawowych wielkości fizycznych tej teorii. Należą do nich niewątpliwie operatory pola i wszystkie generatory grupy Poincarego. Reguły komutacyjne dla tych wielkości muszą być takie same, jak nawiasy Poissona dla odpowiednich wielkości fizycznych. Do skonstruowania pełnej relatywistycznej teorii, oprócz operatorów energii (hamiltonianu) i pędu, potrzebne są również operatory momentu pędu i środka masy (energii). Moment pędu $\mathbf{M}$ jest generatorem obrotu, zaś środek masy $\mathbf{N}$ jest generatorem szczególnych przekształceń Lorentza. Konstruujemy je z odpowiednich wyrażeń klasycznych (por. Białynicki-Birula i Białynicka-Birula 1974)

$$\hat{\mathbf{M}} \;=\; i\hbar \int d^3r \; \mathbf{r} \times \left(\frac{\delta}{\delta \mathbf{A}(\mathbf{r})} \times (\nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r})) \right), \tag{53}$$

$$\hat{\mathbf{N}} \;=\; \int d^3r\, \mathbf{r} \left(-\frac{\hbar^2}{2\epsilon} \frac{\delta^2}{\delta \mathbf{A}(\mathbf{r})} + \frac{1}{2\mu} (\nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}))^2 \right). \tag{54}$$

Można sprawdzić bezpośrednim rachunkiem, że 10 zdefiniowanych powyżej operatorów spełnia związki komutacyjne dla generatorów grupy Poincarego (niejednorodnej grupy Lorentza). Spełnione są również odpowiednie związki komutacyjne między generatorami i operatorami $\hat{\mathbf{D}}$ i $\hat{\mathbf{B}}$, co gwarantuje właściwe reguły transformacyjne dla wektorów pola przy przekształceniach Lorentza. Kwantowa teoria pola elektromagnetycznego może być przedstawiona w obrazie Schrödingera, albo w obrazie Heisenberga. W tym drugim przypadku związek z teorią klasyczną, z której powstała teoria kwantowa, jest bardzo bezpośredni: operatory pola elektromagnetycznego spełniają, na mocy kanonicznych reguł komutacyjnych (por. (44), równania Maxwella. Otrzymana w ten sposób teoria kwantowa różni się znacznie od nierelatywistycznej mechaniki kwantowej, ale obie te teorie są realizacjami tych samych ogólnych postulatów teorii kwantów.