2. predavanje

Vladimir Dananić

10. listopada 2011.

Sadržaj

Heisenbergove relacije

U klasičnoj mehanici čestica uvijek ima određen položaj i količinu gibanja. Te su dvije fizičke veličine osnovne dinamičke veličine povezane jednadžbom gibanja, tj. Newtonovom dinamikom. Ako znamo sve sile koje djeluju na česticu i ako znamo položaj i količinu gibanja čestice *u jednom trenutku*, onda *potpuno znamo položaj i količinu gibanja čestice u svakom drugom trenutku*. Staza čestice ima *objektivno postojanje*; ona postoji čak i onda kada ju ne promatramo.
Za razliku od materijalne čestice, val u klasičnoj mehanici ne može imati određen položaj i količinu gibanja. Što se položaja vala tiče, možemo reći da je on određen najpreciznije do iznosa valne duljine, a što se količine gibanja vala tiče, ta veličina gotovo da i nema smisla, kao što nema smisla nekakva masa vala. Fizičkog smisla ima samo tok (fluks) količine gibanja i energije.
Što onda reći o kvantu, koji ima dvojnu narav, čestičnu i valnu? De Broglieve relacije jednoznačno povezuju dvije naravi sa suprotnim svojstvima.

Heisenbergove relacije

Jasno je da takvo povezivanje povlači stanovitu neodređenenost—niti položaj niti količina gibanja kvanta ne mogu biti sasvim određeni. To znači da potpuno određivanje jedne od tih veličina povlači potpunu neodređenost one druge. Ove se tvrdnje odnose na **istodobno mjerenje** položaja i količine gibanja. Razumije se da u jednome trenutku možemo s prioizvoljnom preciznošću izmjeriti položaj uz istodobno potpuno nepoznavanje količine gibanja, a u sljedećem trenutku možemo s proizvoljnom preciznošću izmjeriti količinu gibanja uz potpuno nepoznavanje položaja. Ovdje je, dakle, riječ o načelnoj neodređenosti, a ne o neodređenosti proizašloj iz nedostatnosti mjerne tehnike i mjernog uređaja. Ona je izražena Heisenbergovim relacijama neodređenosti, koje kažu da je umnožak neodređenosti koordinate položaja i pripadajuće joj komponente količine gibanja odozdo ograničen fundamentalnom konstantom, Planckovom konstantom.

Heisenbergove relacije

U Kartezijevim koordinatama Heisenbergove relacije imaju sljedeći oblik:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \ , \ \Delta y \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2} \ , \ \Delta z \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2} \tag{1}$$

No, mi imamo tri komponente položaja i tri komponente količine gibanja, tj. sveukupno bismo trebali imati devet umnožaka neodređenosti. Za preostalih šest, "mješovitih", umnožaka vrijede klasična pravila neodređenosti, ili neodredljivosti. Naprimjer, $\Delta x \Delta p_y \geq 0$, $\Delta y \Delta p_z \geq 0$, itd. U pokusu s prolaskom elektrona kroz sustav dvaju proreza vidimo da elektron očituje valna svojstva, tj. da se na zaslonu stvara interferencijska slika od točkica koje stvaraju pojedinačni elektroni, sve dok ne pokušamo ustanoviti kroz koji je prorez pojedinačni elektron prošao. Ako ustanovim, nestaje interferencijska slika. Kako onda odgovoriti na pitanje, odnosno na tvrdnju da se je pojedinačni elektron morao u svakom trenutku negdje nalaziti, odnosno da se je morao gibati nekakvom stazom bez obzira na to što mi tu stazu nismo izmjerili?

Heisenbergove relacije

Odgovor na to pitanje i njemu slična dan je tzv. kopenhaškom interpretacijom kvantne mehanike. Naime, staza elektrona nema objektivno postojanje izvan pokusa, tj. bez mjerenja. No, takav odgovor, premda je još uvijek "služben", nije jednodušno prihvaćen. Jedno od alternativnih tumačenja kvantne mehanike je i tzv. Bohmovo tumačenje, po kojemu staze čestica imaju objektivno postojanje (tj. postoji i onda kad ju ne mjerimo) ali je ukupna potencijalna energija **nelokalna**. To znači da uz klasični potencijal $V(x)$ postoji i tzv. kvantni potencijal koji ovisi o povijesti staze, a ne samo o jednom, trenutnom, položaju čestice.
Mi se ne ćemo zadržavati na tim i takvim gorućim pitanjima tumačenja kvantne mehanike. Dovoljno je reći da u kopenhaškom tumačenju imamo dobro navedene "recepte" kako izračunati nešto što se može mjeriti. A za takve poduhvate potrebno je usvojiti određeni matematički formalizam, slično kao što je za Newtonovu mehaniku potrebno znati njoj pripadajući matematički formalizam.

Prva kvantizacija

Jasno je da veličine poput položaja i količine gibanja više ne mogu biti predočene na klasični način, nego te veličine postaju **operatori**. Operator je matematička veličina koja je predočena svojim djelovanjem na određeni **vektor**. U kvantnoj mehanici taj vektor zovemo **vektorom stanja**. Sam je Heisenberg bio ustanovio tzv. matričnu mehaniku, tako što je klasične veličine zamijenio matricama. No, operatori i matrice mogu se jednoznačno povezati, tj. jedan se operator može predočiti, reprezentirati, određenom matricom. Poslije je Schrödinger bio pokazao da postoji uzajamno jednoznačna povezanost, ekvivalentnost, matrične mehanike i jednadžbe koju je on bio ustanovio. Dakle, umjesto staze čestice, za koju moramo moći definirati vektore položaja i brzine (količine gibanja), u kvantnoj mehanici imamo vektore stanja iz koji izračunavamo matrične elemente operatora (matrica) koji definiraju određene fizičke veličine. Prijelaz od određene klasične veličine na njezinu zamjenu s određenim operatorom zovemo **prvom kvantizacijom**.

Prva kvantizacija i Hilbertov prostor

Gdje se nalaze vektori stanja? To nisu obični trodimenzijski vektori na koje smo navikli i za koje imamo zornu predodžbu, nego su to vektori u apstraktnom prostoru beskonačne dimenzije. U tom prostoru definiramo i skalarni umnožak, a time i normu (iznos) vektora. Takav se prostor zove **Hilbertov prostor**. Dakle, kvantna mehanika "živi" u Hilbertovu prostoru. Pri "izvodu" Schrödingerove jednadžbe vidjeli smo da količinu gibanja trebamo zamijeniti s operatorm deriviranja po prostornoj (prostornim) koordinatama. No, malo smo prije rekli da i prostorne koordinate moramo zamijeniti s određenim operatorm. To je istina, ali možemo izabrati takav vektor stanja u kojem je operator prostornoga položaja tako jednostavan da ga možemo poistovijetiti s običnim vektorom. Dakle, možemo izabrati bazu vektorskoga prostora u kojem je operator položaja dijagonalan. U tom prostoru operator količine gibanja ima već spomenuti oblik.

Hilbertov prostor

Hilbertov je prostor apstraktni beskonačno dimenzijski vektorski prostor s definiranim skalarnim umnoškom i normom. Kao primjer Hilbertovoga prostora možemo navesti skup sviju kompleksnih funkcija realne varijable x. Zašto funkcije zovemo vektorima? Zato što zadovoljavaju aksiome vektorskoga prostora koji su vrlo jednostavni:

1. Linearni spoj dviju funkcija f i g, $\alpha f + \beta g$, gdje su $\alpha\,,\ \beta \in \mathbb{C}$, element je istoga prostora
2. $(\alpha + \beta) f = \alpha f + \beta f$
3. $\alpha(\beta f) = (\alpha\beta) f$
4. $1 \cdot f = f$

U ovakvom se vektorskom prostoru definira skalarni umnožak dviju funkcija $f(x)$ i $g(x)$:

$$(f, g) = \int_{-\infty}^{+\infty} f^*(x) \cdot g(x) dx \tag{2}$$

Hilbertov prostor

Norma vektora, tj. funkcije, jednaka je:

$$\|f\| = \sqrt{(f,f)} = \sqrt{\int_{-\infty}^{+\infty} f^*(x) \cdot f(x) dx} = \sqrt{\int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2 \, dx} \qquad (3)$$

Za intuitivno shvaćanje Hilbertovoga prostora dovoljno je zapitati se koliko se dobro, ili loše, jedna funkcija $f(x)$ na određenomu intervalu slaže s nekom drugom funkcijom $g(x)$. To je slično pitanje kao i pitanje koliko jedan obični vektor $\vec{a}$ "gleda" u smjeru nekog drugog vektora $\vec{b}$. Odgovor na to pitanje daje nam skalarni umnožak vektora, odnsono kut između dvaju vektora koji se određuje s pomoću skalarnoga umnoška. Dakle, "kut" ϕ između dviju funkcija (tj. vektora) f i g određen je jednadžbom:

$$\cos(\phi) = \frac{(f,g)}{\|f\|\|g\|} \qquad (4)$$

Prva kvantizacija i Hilbertov prostor

Dakle, u prvoj kvantizaciji imamo operatore položaja X , Y , Z. Uzet ćemo bazu Hilbertovoga prostora u kojoj je djelovanje tih operatora najjednostavnije moguće: $X\Psi(x,y,z) = x\Psi(x,y,z)$, $Y\Psi(x,y,z) = y\Psi(x,y,z)$ i $Z\Psi(x,y,z) = z\Psi(x,y,z)$. U toj bazi operator količine gibanja ima oblik $P_x\Psi(x,y,z) = -i\hbar\frac{\partial\Psi(x,y,z)}{\partial x}$, $P_y\Psi(x,y,z) = -i\hbar\frac{\partial\Psi(x,y,z)}{\partial y}$ i $P_z\Psi(x,y,z) = -i\hbar\frac{\partial\Psi(x,y,z)}{\partial z}$. Skraćeno to možemo pisati kao $P_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$, $P_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}$ i $P_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$. Operator I, ili jednostavno 1, definiramo kao **jedinični operator**. Njegovo se djelovanje na vektor stanja svodi na to da ne promijeni ništa.

Poredak djelovanja dvaju operatora A i B jako je važan. Naime, najčešće ne ćemo dobiti isti rezultat ako na vektor stanja najprije djelujemo operatorom A, a zatim na rezultat toga djelovanja, koji je opet vektor u istom prostoru, djelujemo operatorom B, kao i kada operatorima djelujemo u obrnutom poretku. Za bilo koja dva operatora A i B definiramo njihov komutator $[A,B] = AB - BA$.

Prva kvantizacija i Hilbertov prostor

Tako za operatore položaja i količine gibanja imamo sljedeće komutatore:

$$[P_x, X] = -i\hbar I \ , \ [P_y, Y] = -i\hbar I \ , \ [P_z, Z] = -i\hbar I \tag{5}$$

Svi ostali komutatori, koje možemo složiti od operatora položaja i količine gibanja, jednaki su 0, tj. ti operatori međusobno komutiraju. Naprimjer $[P_x, Y] = 0$, itd. Razumije se da jedinični operator komutira sa svim i svakim operatorima. Upravo navedeni komutatori na drugačiji način iskazuju Heisenbergove relacije neodređenosti. No, prije nego što pokušamo dokazati tu tvrdnju, pogledajmo kako se iz poznatih operatora dobivaju mjerljive veličine, odnosno kakva svojstva moraju imati operatori za koje kažemo da predočuju određenu fizičku veličinu. Kao prvo, srednja vrijednost $\langle A \rangle$ operatora A u određenom stanju opisanom valnom funkcijom $\Psi(x, t)$ određena je izrazom:

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) A \Psi(x, t) dx \tag{6}$$

Hermitski operatori

U definiciji srednje vrijednosti (6) operator A djeluje na valnu funkciju $\Psi(x,t)$, tj. djeluje na desno od sebe. No, pitanje je zašto bi na desno od operatora trebala staja valna funkcija $\Psi(x,t)$, a ne njezina kompleksno konjugirana funkcija $\Psi^*(x,t)$? Ako je nešto mjerljivo onda rezultat ne bi smio ovisiti o tomu hoćemo li uzeti valnu funkciju ili njezinu kompleksno konjugiranu funkciju. Taj uvjet postavlja određena ograničenja na operator A. Mjerljiva veličina $\langle A\rangle$ mora biti realan broj. Dakle, mora vrijediti

$$\langle A\rangle^* = \langle A\rangle \Longrightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x,t) A^* \Psi^*(x,t) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t) A \Psi(x,t) dx \tag{7}$$

Uvjet (7) možemo prepisati i ovako:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left(A\Psi(x,t)\right)^* \Psi(x,t) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t) A \Psi(x,t) dx \tag{8}$$

U jednadžbi (8) operator A naprije djeluje na valnu fukciju, pa se onda sve to kompleksno konjugira i množi s valnom funkcijom, a rezultat mora

Hermitski operatori

biti isti kao da operator djeluje na valnu funkciju i množi s kompleksno konjugiranom valnom funkcijom. Operatori koji imaju to svojstvo zovu se **hermitski operatori**. Fizičke veličine moraju biti predočene hermitskim operatorima.

Nadalje, za svaki operator A definiramo njegov **transponirani** operator A^T takav da vrijedi:

$$\Psi^* A \Psi = \left(A^T \Psi^*\right) \Psi \tag{9}$$

Jasno je da vrijedi $\left(A^T\right)^T = A$. Iz ove definicije i definicije dane jednadžbom (8) uvjet hermitičnosti možemo napisati ovako:

$$A^* = A^T \Longrightarrow (A^*)^T = A\ ,\ \ A^\dagger = A \tag{10}$$