Mana personīgā lapa – šeit.

Adrese komentāriem: Karlis.Podnieks@lu.lv

Sk. arī citus piedzīvojumus:
Klasiskā mehānika,
Gāzu kinētiskā teorija,

K.Podnieks. **The simplest possible "derivation" of Schroedinger equation.** May be considered as a mathematical joke, 2012.

Kvantu mehānika:

matemātiķa piedzīvojumi

Kārlis Podnieks, LU profesors

Lekcijas 2008.gada novembrī-decembrī

Lekcijas slaidi vēlāk ir būtiski papildināti!

Kāpēc?

Pirms kāda laika mēģināju studēt statistisko fiziku, lasot Landau un Lifšica zināmo grāmatu. [Kāpēc man to vajadzēja?] Sajūtas bija divējādas.

No vienas puses – es apbrīnoju fiziķu intuīciju, ar kuras palīdzību viņi atrod "pareizo" ceļu un neapmaldās diezgan sarežģītajās matemātiskajās struktūrās, ko viņi izmanto savu teoriju un modeļu būvei.

No otras puses – kā matemātiķim, lasot tādus tekstus, man "zūd pamats zem kājām". Ik pa brīdim fiziķu spriedumos un formulu izvedumos tiek izmantoti paņēmieni, kas matemātiķim liekas "pagrābti no gaisa". Nekur netiek mēģināts šos paņēmienus noformulēt un salikt kādā sakārtotā kolekcijā. Liekas, ka tiem nav gala...

Protams, ne reizi vien matemātiķi ir centušies fiziķu teorijas "izvest tīros ūdeņos" (tas nav pārmetums fiziķiem, bet matemātiķu mentāla vajadzība...). Slavenākais piemērs laikam ir 1930-to gadu fon Neimana grāmata par kvantu mehāniku.

Lasot Landau un Lifšica grāmatu, arī man radās tāda vēlēšanās – apgūt pašam un izstāstīt kolēģiem, kas fiziķu teorijas "ir īstenībā" (t.i. matemātikā). Otrs iemels: daudzkārt klausoties mūsu kolēģu – kvantu skaitļotāju referātus, man tā arī nav radies skaidrs un izsmeļošs priekšstats par viņu teorijas pamatiem.

Šovasar man izdevās atrast divas šajā ziņā izcilas Aleksandra Hinčina grāmatas, uz kurām arī balstās šīs manas lekcijas izklāsts:

A. Y. Khinchin Wikipedia. Mathematical Foundations of Statistical Mechanics, 1943 (in Russian), 1960 (English translation).

A. Y. Khinchin. Mathematical Foundations of Quantum Statistics, 1951 (in Russian).

Sk. arī jaunāku viedokli:

Mathematical formulation of quantum mechanicsWikipedia

Atkārtojums: klasiskā mehānika.

Niels Bohr:

"There is no quantum world. There is only an abstract quantum physical description. It is wrong to think the task of physics is to find out how nature *is*. Physics concerns what we can *say* about nature."

Tā Bors esot izteicies, sk. Aage Petersen (1963: The Philosophy of Niels Bohr. *Bulletin of the Atomic Scientists*, XIX(7): 8–14).

Kvantu mehānika

Ja ļoti gribas "sajust fizikālu pamatu zem kājām" (noticēt, ka viss sekojošais jāņem nopietni), var vispirms palasīt *The Feynman Lectures on Physics*, vol. 1, Ch. 37, Addison-Wesley, 1963 (krievu tulkojumā: vol. 3-4, Mir, 1970, arī īpašo sējumu vol.8-9, Mir, 1978). Liekas, ka Ričards Feinmans fiziku prot pasniegt labāk par visiem. Arī par matemātiku viņš izsakās, un atšķirībā no "visiem", nepasaka nevienu muļķību.

Kvantu mehānikā sistēmas "klasiskais stāvoklis" – koordinātes un ātrumi – ne vienmēr ir noteikti viennozīmīgi – tie var būt "izsmērēti", BET TOTIES – noteikti ir to vērtību varbūtību sadalījumi.

[Ja runa ir par varbūtību sadalījumiem, tad kvantu mehānikas sistēmas ir tikpat **determinētas un apgriežamas** (reversible) kā klasiskās sistēmas.]

Piemērs. Ja sistēma sastāv no vienas vienīgas daļiņas, tad šīs daļiņas "stāvoklis" ir kaut kāds varbūtību sadalījums (x, y, z) telpā. Varam aprēķināt varbūtību, ka daļiņa atrodas dotajā telpas apgabalā. Neko vairāk par šo daļiņu mēs "domāt nedrīkstam". Ja gribam "uzzināt precīzāk", tad mums daļiņai jāsūta virsū cita daļiņa un jāskatās sadursmes rezultāts ("mērījums"). Bet tad daļiņa turpinās savu kustību jau savādāk nekā pirms sadursmes...

Tāpēc kvantu mehānikā sistēmas stāvokli katrā laikā momentā uzdod nevis konkrēti skaitļi $q_1, q_2, ..., q_s, p_1, p_2, ..., p_s$ (punkts klasiskajā fāzu telpā), bet īpašā veidā izteikts varbūtību sadalījums.

[Vēlāk redzēsim, ka sistēmas stāvoklis ir nevis varbūtību sadalījums, bet *varbūtību amplitūda*, no kuras šo varbūtību sadalījumu var izrēķināt. Kvantu mehānikas likumi regulē vispirms varbūtību amplitūdas izmaiņas, laikam ejot, un tikai caur tām – varbūtību sadalījuma izmaiņas. Un varbūtību amplitūda “uzvedas viļņveidīgi”...]

Lai to labāk uztvertu, mēs varam mēģināt balstīties uz savu iepriekšējā dzīvē iegūto varbūtību blīvuma intuīciju. Vienīgais, ko mēs nedrīkstam ņemt no šīs intuīcijas – domu, ka "īstenībā" daļiņa atrodas konkrētā punktā ar koordinātēm x, y, z, bet "mēs tikai to precīzi nezinām". Daļiņa NEATRODAS, tā ir telpā vairāk vai mazāk "izsmērēts" veidojums.

Tātad **pirmajā tuvinājumā** kvantu sistēmas stāvokli katrā laika momentā gribētos uzdot ar varbūtību blīvuma **funkciju**

$$p(q_1, q_2, ..., q_s).$$

[Vēlāk tās vietā liksim varbūtību amplitūdu – funkciju $\psi(q_1, q_2, ..., q_s)$, kuras vērtības būs kompleksi skaitļi, bet funkciju *p* iegūsim kā $p=|\psi|^2$.]

Ja kādas kvantu sistēmas konfigurāciju (t.i. koordinātu) telpā ir tikai galīgs skaits (*n*) punktu $e_1, e_2, ..., e_n$ (tos tad gribas saukt par "bāzes stāvokļiem"), tad varbūtību blīvuma **funkcijas** $p(q_1, q_2, ..., q_s)$ vietā nāk varbūtību sadalījuma **vektors** $(a_1, a_2, ..., a_n)$, kur $\sum_{k=1}^{n} a_k = 1$. Bet arī šajā gadījumā mēs nedrīkstam domāt, ka sistēma katrā laika momentā atrodas kādā bāzes stāvoklī, kuru mēs "tikai nezinām". Tā NEATRODAS, tā var būt "izsmērēta" pa vairākiem vai pat visiem bāzes stāvokļiem.

T.i. klasiskās fāzu telpas vietā te tiek ņemta **konfigurāciju** (koordinātu) **telpa**, kurai ir s dimensijas (tikai vispārinātās koordinātes q_k, bez impulsiem p_k).

Un ja W ir šīs telpas apgabals, tad integrālis

$$\int_W p(q_1, q_2, \ldots, q_s)\, dq_1\, dq_2 \ldots dq_s$$

dod varbūtību, ka sistēmas stāvoklis atrodas apgabalā W.

Tātad kvantu sistēmas stāvoklis katrā laikā momentā ir viena **konkrēta funkcija** no (q_1, q_2, ..., q_s). Ja mūs interesē sistēmas kustība laikā, tad tā būs jau funkcija no

(q_1, q_2, ..., q_s, t), kur *t* ir laiks.

Jautājums. **Klasiskajā mehānikā**, ja ir zināma daļiņu kustība laikā, t.i. ir zināmas koordinātu funkcijas $q_i(t)$, tad daļiņu ātrumi un impulsi ir atrodami caur šo funkciju atvasinājumiem pēc laika: $p_i = m_i \frac{dq_i}{dt}$. Taču, ja ir jāuzdod daļiņu kustības sākuma stāvoklis, tad ir jāuzdod gan sākuma koordinātes q_i, gan sākuma ātrumi (jeb sākuma impulsi p_i). Vispārīgajā gadījumā koordinātu un impulsu saistību nosaka Hamiltona vienādojumi.

Kā šī situācija mainās **kvantu mehānikā**? Ja daļiņu koordinātes ir "izsmērētas", tad arī impulsi ir "izsmērēti"? Bet kā koordinātes un impulsi (precīzāk – to varbūtību sadalījumi) savā starpā ir saistīti? Sk. tālāk.

Varbūtību amplitūda

Bet izrādās, ka kvantu sistēmas stāvokli precīzi uzdod nevis varbūtību blīvuma funkcija, bet gan noteiktām prasībām atbilstoša funkcija $\boldsymbol{\psi(q_1, q_2, ..., q_s)}$, kuras vērtības (it kā negaidīti?) ir **kompleksi skaitļi** (pašas koordinātes q_i joprojām paliek reāli skaitļi). Un par mūs visvairāk interesējošo sadalījuma blīvuma funkciju kalpo **moduļa kvadrāts $|\psi|^2$.**

Šīs funkcijas fiziķi apzīmē ar grieķu burtu **ψ** ("psi") un bieži sauc par *viļņu funkcijām (wave functions)*. Tagad biežāk lieto terminu "kvantu stāvoklis".

Funkcijas vērtību $\psi(q_1, q_2, ..., q_s)$ sauc par sistēmas **varbūtību amplitūdu** atrasties konfigurāciju telpas punktā $(q_1, q_2, ..., q_s)$.

Varbūtību amplitūdas ir **bezdimensiju** skaitļi.

Ne gluži parasti liekas tas, ka šīs amplitūdas ir kompleksi skaitļi. Vēlāk redzēsim, ka amplitūdas “uzvedas viļņveidīgi”, un tieši tāpēc to modelēšanai vislabāk der kompleksie skaitļi. Un tomēr – to galvenais "uzdevums" ir uzdot varbūtību sadalījumu – par sadalījuma blīvuma funkciju kalpo ψ moduļa kvadrāts $|\psi|^2$.

Tātad, ja kādā laika momentā sistēma atrodas stāvoklī ψ, un ja W ir konfigurāciju telpas apgabals, tad **varbūtība, ka sistēmas koordinātes $q_1, q_2, ..., q_s$ atrodas apgabalā W** ir:

$$\frac{\int_W |\psi|^2 dq_1 dq_2 \ldots dq_s}{\int |\psi|^2 dq_1 dq_2 \ldots dq_s}$$

(saucējā ir integrālis pa visu telpu).

Te mēs redzam dažas no sākumā minētajām "noteiktajām prasībām" funkcijai ψ: integrālim pa visu telpu no $|\psi|^2$ ir jābūt galīgam, tāpat – integrālim pa W no $|\psi|^2$ ir jāeksistē visiem "mērojamiem" apgabaliem W.

Sistēmām ar (daļēji) diskrētiem stāvokļiem (spini utml.) integrāļu vietā dažviet būs summas.

Piemērs. Ja sistēma sastāv no vienas vienīgas daļiņas, tad šīs daļiņas stāvokli katrā laika momentā uzdod kāda kompleksa funkcija **ψ(x, y, z)**. Stāvoklim mainoties laikā, mainās arī šī funkcija, t.i. mums būtībā ir darīšana ar 4 argumentu funkciju **ψ(x, y, z, t)**. Varbūtību, ka daļiņa laika momentā *t* atrodas noteiktā telpas apgabalā W, nosaka varbūtību blīvums $|\boldsymbol{\psi}|^2$.

Līdz ar to klasiskās 6-dimensiju **fāzu telpas** (x, y, z, p_x, p_y, p_z) vietā mums te ir 3-argumentu **komplekso funkciju telpa**, t.i. Hilberta telpa (sk. tālāk), kurai dimensiju skaits jau ir bezgalīgs.

Ja *c* ir patvaļīgs komplekss skaitlis, kas nav 0, tad funkcijas ψ un cψ uzdod vienu un to pašu sistēmas stāvokli. [Kāpēc? Ne tikai tāpēc, ka abas dod vienādus varbūtību sadalījumus, bet tāpēc, ka to paredz mūsu veidojamais – izcili sekmīgais – modelis.] Tāpēc stāvokļu funkcijas varam **normēt**, pieprasot, lai

$$\int |\psi|^2 dq_1 dq_2 \ldots dq_s = 1 \cdot$$

Bet normēšana vien vēl *nenosaka* stāvokļa funkciju ψ viennozīmīgi, jo arī $e^{ib}\psi$ (reizinātājs ir patvaļīgs komplekss skaitlis ar moduli 1) ir normēta funkcija, kas uzdod tādu pat stāvokli kādu uzdod ψ. [Kāpēc? Ne tikai tāpēc, ka abas dod vienādus varbūtību sadalījumus, bet tāpēc, ka to paredz mūsu veidojamais – izcili sekmīgais – modelis.]

Tātad, precīzi runājot, kvantu sistēmas stāvoklis ir "stars Hilberta telpā" (sk. tālāk), t.i. funkciju kopa, kas rodas, kādu vienu funkciju ψ reizinot ar patvaļīgiem (nenulles) kompleksiem skaitļiem *c*. Šīs kopas, t.i. sistēmas stāvokļa apzīmēšanai Diraks ir ievedis simbolu |ψ>, kur ψ ir jebkura no kopas funkcijām.

Piemēri?

[Hinčina grāmatā par tādiem netiek runāts.]

Tas, ko fiziķi dara ar savām "viļņu funkcijām" konkrētos gadījumos, matemātiķa prātam ir grūti aptverams.

Varētu likties, ka vienkāršākais gadījums būtu brīvas daļiņas kustība (tādas, uz kuru nekādi spēku lauki nedarbojas). Bet sk. piemēram, Wikipedia: Free particle. Tur aplūkots tikai gadījums, kad daļiņas impulss ir precīzi zināms. Tad koordinātes var būt zināmas tikai "ļoti vāji" (Heizenberga nenoteiktība) un daļiņas stāvokli apraksta "plakans vilnis":

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) = e^{i(\boldsymbol{kr} - wt)} \quad ,$$

kur **r** ir daļiņas rādiusvektors. Tā kā te |ψ|=1, tad šī funkcija nav normējama, un tātad – *nav fiziski iespējama*. Un tomēr fiziķi ar to spēlējas daudzu lappušu garumā...

Nedaudz sakarīgāks teksts ir Wikipedia: Particle in a box.

[24.11.2011. Bet kā tas ir Feinmanam? Krievu izdevuma 8-9.sējuma 14.lpp.:

$$\langle \boldsymbol{r}_2 | \boldsymbol{r}_1 \rangle = \frac{e^{\frac{i}{\hbar} \boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{r}_{12}}}{r_{12}} ; \boldsymbol{r}_{12} = \boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_1 ; |\langle \boldsymbol{r}_2 | \boldsymbol{r}_1 \rangle|^2 = \frac{1}{r_{12}^2} \ .$$

Tā ir amplitūda, ka brīva daļiņa, kuras impulsa vektors ir $\boldsymbol{p}$, no pozīcijas $\boldsymbol{r}_1$ nonāks pozīcijā $\boldsymbol{r}_2$. Šīs amplitūdas moduļa kvadrāts vismaz ir normējams...]

Savā ziņā pretēju situāciju apraksta fiziķu izmantotā *Diraka delta-funkcija* δ(x), ko Diraks "definē" kā "funkciju", kam integrālis ir 1, ja integrācijas apgabals ietver x=0, citādi integrālis ir 0. Tas atbilst situācijai, ka daļiņas koordinātes ir precīzi zināmas (tad impulss nevar būt zināms vispār):

$$\psi(x, y, z) = \delta(x - x_0)\delta(y - y_0)\delta(z - z_0).$$

Arī tas, protams, ir *fiziski neiespējams* stāvoklis. Ne velti Enriko Fermi savu lekciju konspektā raksta: "Handle with care!" [Hinčina grāmatā delta funkcija vispār netiek pat pieminēta.]

Šī situācija, protams, nav fiziķu nesakarības sekas. Tāda ir realitāte: fiziski reālistiskajos gadījumos kvantu mehānikas funkcijas iznāk vai nu analītiski ļoti sarežģītas, vai vispār analītiski neattēlojamas (tad jāiztiek ar dator-aprēķiniem).

Kāpēc tik dīvaini? Kā tas var būt?

[Hinčina grāmatā par to netiek runāts.]

Kā tas var būt, ka daļiņas ir telpā "izsmērētas"? Nevis mēs nezinām precīzi, kur tās atrodas, bet tās nekur "precīzi neatrodas"!

Vislielākais trieciens mūsu ikdienas intuīcijai laikam ir eksperiments ar elektronu kūli, kas "lido" uz ekrānu, kurā ir divi caurumi. Ekrāna otrā pusē atkal "lido" elektroni, bet aina (interferences aina) tur ir tāda, ka ir nepareizi domāt, ka katrs elektrons ir "izlidojis" pa vienu no caurumiem! Labāk būtu domāt, ka tas ir "izlidojis" pa abiem caurumiem reizē – bet arī tas nav nepieciešams. Jo, lai izdarītu aprēķinus, kuru rezultāti precīzi atbilst tam, kas ir novērojams eksperimentā, tāda izrunāšanās nav nepieciešama.

Einšteins līdz sava mūža beigām tā arī nenoticēja, ka tik "nejēdzīga bilde" var būt "galīgā pasaules aina" ...

Un kāpēc attiecīgos varbūtību sadalījumus nosaka kaut kādas kompleksas "varbūtību amplitūdas"?

Atbild Ričards Feinmans: tas viss tik ļoti atšķiras no mūsu makropasaules pieredzes, ka to nevajag mēģināt "izskaidrot", tas neizdosies, pie tā vienkārši jāpierod un jāiemācas ar to rīkoties...

[Kāds varbūt teiks, ka Feinmans aizstāv tikai vienu no kvantu mehānikas "interpretacijām" – t.s. **Kopenhāgenas interpretāciju** (es to sauktu par "minimālo" interpretāciju, jo formālajai kvantu teorijai tā necenšas neko pielikt klāt). Ir radušās vēl citas "interpretācijas", kas cenšas rekonstruēt kvantu mehāniku, izmantojot **makropasaules analoģijas** (t.s. *hidden variables interpretation* un *many-worlds interpretation*). Tādā veidā tiek mēģināts padarīt kvantu mehāniku "saprotamu". Tiesa, mūsu aprēķinos neko jaunu, salīdzinot ar esošo formālo kvantu teoriju, vismaz pagaidām šīs interpretācijas neienes, tāpēc, manuprāt, tās var mierīgi ignorēt.]

[25.12.2011] Interpretācijām (un citām filozofiskām izdarībām) būs jēga tikai tad, ja tās **parādīs ceļu**, pa kuru teorijai tālāk attīstīties, ļaus iegūt "jaunus vienādojumus – veco vietā:

"... Dirac war never interested in interpretations [of quantum theory – K.P.]. It seemed to him to be a pointless preoccupation that led to no new equations."

Full text: p. 277 of
Manjit Kumar. Quantum: Einstein, Bohr and the Great Debate About the Nature of Reality. *Icon Books Ltd*, 2008, 480 pp.

"In these cases, as in the case of quantum mechanics, a very strictly empiricist position could have circumvented the problem [of interpretation – K.P.] altogether, by reducing the content of the theory to a list of predicted numbers. But perhaps science can offer us more than such a list; and certainly science needs more than such a list **to find its ways** [marked bold by me – K.P.]."

Full text: **Federico Laudisa**, **Carlo Rovelli**. Relational Quantum Mechanics. *Stanford Encyclopedia of Philosophy*, 2008.

Varbūtību statuss kvantu mehānikā

Ja sistēmas atrodas stāvoklī ψ, un ja varbūtība, ka tās koordinātes (q_1, q_2, ..., q_s) atrodas konfigurāciju telpas apgabalā W, pēc formulas

$$\int_W |\psi|^2 dq_1 dq_2 \dots dq_s$$

sanāk vienāda ar *p*, tad ko tas nozīmē?

Tas nozīmē, ka ja *n* reizes izdarot mērījumus, kas atrod q_1, q_2, ..., q_s vērtības (*pirms katra mērījuma sistēma ir jāatgriež stāvoklī ψ – "whatever it means"*), mēs konstatēsim, ka šiem *n* mērījumiem *m* mērījumos punkts (q_1, q_2, ..., q_s) atrodas apgabalā W, tad daļskaitlis *m/n* būs tuvu skaitlim *p*. Un jo lielāks *n*, jo tuvāk *m/n* būs skaitlim *p*.

Starp citu, pēc mērījuma, kura rezultātā ir iegūti skaitļi q_{10}, q_{20}, ..., q_{s0}, sistēma kādu brīdi atradīsies stāvoklī ψ_0, kurā

$$|\psi_0(q_1, q_2, ..., q_s)|^2>0$$

punkta q_{10}, q_{20}, ..., q_{s0} mazā apkārtnē, bet $\psi_0(q_1, q_2, ..., q_s)=0$ visos pārējos punktos.

Kāpēc varbūtību amplitūdas ir kompleksi skaitļi?

[Hinčina grāmatā par to netiek runāts. Bet tas, par ko runāts šajā slaidā, ir būtiski nepieciešams, lai saprastu kvantu skaitļošanas procesus.]

Tas "nāk" no viļņu mehānikas. Amplitūdas vērtība

$$\psi(q_1, q_2, ..., q_s) = ue^{iv}$$

satur ne tikai moduli u, kura kvadrāts u^2 spēlē varbūtību blīvuma lomu. Tā satur arī **fāzi** e^{iv}.

Fāzes spēlē savu "viļņveidīgo" lomu situācijā, kad kombinējas divi notikumi E1 un E2, kuru varbūtību amplitūdas ir attiecīgi $u_1 e^{iv_1}$ un $u_2 e^{iv_2}$.

1) Ja gribam aprēķināt varbūtību, ka pēc E1 iestāšanās sekos E2, tad abas **amplitūdas ir jāsareizina**, iegūstot $u_1 u_2 e^{i(v_1+v_2)}$. Pēc tam varam rēķināt amplitūdas moduļa kvadrātu – sanāks $(u_1 u_2)^2$.

2) Ja gribam aprēķināt varbūtību divu **neatšķiramu** nesavienojamu notikumu E1 un E2 disjunkcijai, tad **amplitūdas ir jāsaskaita**, iegūstot $u_1 e^{iv_1} + u_2 e^{iv_2}$. Pēc tam varam rēķināt amplitūdas moduļa kvadrātu $\left|u_1 e^{iv_1} + u_2 e^{iv_2}\right|^2$.

Starp citu, ja $u_1=u_2=u$, tad kā rezultāts te var sanākt jebkurš skaitlis no *0* līdz $4u^2$. To sauc par **amplitūdu interferenci**.

Piemērs. Eksperiments ar elektronu kūli un ekrānu ar diviem caurumiem. Gribam rēķināt varbūtību, ka ekrāna otrajā pusē elektrons nonāks dotajā punktā. Tad vispirms jāsaskaita amplitūdas tā ceļojumam caur vienu un caur otru caurumu, un tikai tad jārēķina moduļa kvadrāts: $\left|u_1 e^{iv_1} + u_2 e^{iv_2}\right|^2$. Jo tie ir *neatsķirami* notikumi.

3) Ja notikumi E1 un E2 ir **atšķirami**, tad to disjunkcijas varbūtību var rēķināt kā parasti – summējot pašas varbūtības, nevis amplitūdas: $\left|u_1 e^{iv_1}\right|^2 + \left|u_2 e^{iv_2}\right|^2 = u_1^2 + u_2^2$.

Ja $u_1=u_2=u$, tad rezultātā te vienmēr sanāk $2u^2$ (atceramies, ka neatšķiramu notikumu gadījumā varēja sanākt **divreiz vairāk**!).

Piemērs. Eksperiments ar elektronu kūli un ekrānu ar diviem caurumiem. Aiz ekrāna elektronus apšauda ar fotoniem, nosakot noteiktu, pa kuru caurumu katrs elektrons ieradies. Tad notikumi ir atšķirami – tāpēc ir jāsaskaita amplitūdu moduļu kvadrāti, t.i. pašas varbūtības: $u_1^2 + u_2^2$.

Skalārais reizinājums

Stāvokļu skalārā reizinājuma (*inner product*) jēdzienam kvantu mehānikā ir izcila vieta.

Jebkuriem diviem stāvokļiem ψ_1, ψ_2, to **skalāro reizinājumu** (ψ_1, ψ_2) definē kā

$$(\psi_{1,} \psi_2) = \int \psi_1 \overline{\psi_2} \, dq_1 \, dq_2 \ldots dq_s \ .$$

Šeit $\overline{x}$ apzīmē skaitļa $x=ai+b$ komplekso saistīto skaitli, t.i. $\overline{x}=a-ib$. Vispārīgajā gadījumā (ψ_1, ψ_2) ir komplekss skaitlis.

[Fiziķi skalāro reizinājumu (ψ_1, ψ_2) apzīmē ar $<\psi_2 \mid \psi_1>$ (otrādi!), pie tam Diraks te ir ieviesis savu **ket-vektoru** un **bra-vektoru** terminoloģiju. Hinčins šos terminus ignorē.]

Tā kā $\psi\overline{\psi}=|\psi|^2$, tad (ψ, ψ) sakrīt ar stāvokļa **normas kvadrātu** $||\psi||^2$, un normētam stāvoklim: $(\psi, \psi)=1$.

Stāvokļus ψ_1, ψ_2 sauc par **ortogonāliem**, ja $(\psi_1, \psi_2) = 0$.

Skalārā reizinājuma īpašības:

$(\psi_1+\psi_2, \psi_3) = (\psi_1, \psi_3)+(\psi_2, \psi_3)$,

$(\psi_1, \psi_2+\psi_3) = (\psi_1, \psi_2)+(\psi_1, \psi_3)$,

$(c\psi_1, \psi_2) = c(\psi_1, \psi_2)$,

$$(\psi_1, c\psi_2) = \bar{c}(\psi_1, \psi_2) \ ,$$

$$(\psi_2, \psi_1) = \overline{(\psi_1, \psi_2)} \ ,$$

(ψ, ψ) ir ne tikai reāls, bet arī nenegatīvs,

(ψ,ψ)=0 tad un tikai tad, ja ψ=0.

Tādā veidā sistēmas stāvokļi gandrīz jau veido **kompleksu Hilberta telpu.**

Hilberta telpa

[Ne no Hinčina grāmatas.] Sk. Hilbert space[Wikipedia].

Formāli, par kompleksu Hilberta telpu sauc elementu kopu, kas:

1) Ir kompleksa *vektoru telpa*, t.i. tās elementus var savā starpā saskaitīt, kā arī tos var reizināt ar kompleksiem skaitļiem. Viens no elementiem ir *nulles vektors* 0.

2) Jebkuriem diviem vektoriem x, y ir definēts *skalārais reizinājums* (*inner product*) (x, y) ar tikko minētajām īpašībām. Tad $\sqrt{(x, x)}$ definē vektora x *normu* ||x||, bet ||x−y|| – *attālumu* starp x un y.

3) Telpas *pilnība*: ja telpa satur vidēji konverģentas vektoru virknes locekļus, tad tā satur arī vektoru, kas ir šīs virknes *robeža*.

Virknes $\{x_k \mid k=1..\infty\}$ vidējo konverģenci (*convergence in mean*) definē šādi: $\|x_m - x_n\| \to 0$, ja min (m, n)→∞.

Un x ir virknes $\{x_k \mid k=1..\infty\}$ *robeža*, ja $\|x_k - x\| \to 0$, ja k→∞.

Svarīgs speciālgadījums ir *separabla Hilberta telpa ar bezgalīgi daudzām dimensijām*. Izrādās, ka visas šādas telpas ir izomorfas ar telpu L^2 (visu komplekso funkciju telpu, kuru moduļu kvadrāti ir integrējami). Tieši šo telpu savā grāmatā izmanto Hinčins.

Citi svarīgi speciālgadījumi: telpas ar galīgu dimensiju skaitu (piemēram, Eiklīda telpas), telpas ar galīgu vai sanumurējamu punktu skaitu.

Superpozīcijas princips

Ja funkcijas $\psi_1(q_1, q_2, ..., q_s)$ un $\psi_2(q_1, q_2, ..., q_s)$ uzdod "iespējamus" (?) sistēmas stāvokļus, tad arī funkcija $\psi=c_1\psi_1+c_2\psi_2$ uzdod "iespējamu" sistēmas stāvokli (c_1, c_2 ir patvaļīgas kompleksas konstantes, abas reizē nav 0).

Šis princips tiek attiecināts arī uz bezgalīgām summām. Ko nozīmē, piemēram,

$$\psi=\sum_{k=1}^{\infty} c_k \psi_k \ ,$$

kur katra funkcija ψ_k (un tātad arī ψ) uzdod "iespējamu" sistēmas stāvokli?

$\psi=\sum_{k=1}^{\infty} c_k \psi_k$ nozīmē vidējo konverģenci: ja apzīmējam

$$S_n=\sum_{k=1}^{n} c_k \psi_k \ ,$$

tad $(\psi-S_n, \psi-S_n)\to 0$, ja $n\to\infty$.

Atcerēsimies, ka:

$$(\psi-S_n, \psi-S_n)=\int |\psi-S_n|^2 d\boldsymbol{q} \ .$$

Superpozīcijas princips, liekas, nozīmē vienkārši to, ka sistēmas "iespējamie" stāvokļi aizpilda visu Hilberta telpu. **Citu, "svinīgāku" jēgu es superpozīcijas principā nesaskatu.** [25.12.2011. Liekas, ka superpozīcijas princips ir tikai "svinīgāks" formulējums kvantu teorijas pamatprincipam: daļiņa NEATRODAS, tā ir telpā vairāk vai mazāk "izsmērēts" veidojums.]

Mehāniskie lielumi kvantu mehānikā

Piemērs. Ja sistēma sastāv no vienas daļiņas ar masu *m*, kas kustas telpā (x, y, z) konstantā spēku laukā ar potenciālu V(x, y, z), tad pilnā enerģija būs:

$$H=\frac{1}{2}mv^2+V(x,y,z)=\frac{1}{2\mathrm{m}}(p_x^2+p_y^2+p_z^2)+V(x,y,z)\ .$$

Te Jums ir klasiskā mehāniskā lieluma piemērs. Šāds potenciāls V(x, y, z) var atbilst, piemēram, elektriskajam laukam, bet ne magnētiskajam laukam, kur spēki ir atkarīgi arī no daļiņas ātruma.

Tāpat ka klasiskajā mehānikā, arī kvantu mehānikā mehānisks lielums ir funkcija

$$F(q_1,q_2,\ldots,q_s,p_1,p_2,\ldots,p_s)\ ,$$

kuras vērtības ir reāli skaitļi. [Starp citu, kas tie tādi impulsi? Mūsu sistēmas modelī tie vēl nemaz nav ievesti!] Bet tā kā kvantu sistēmas stāvoklis var būt "izsmērēts", tad arī klasisko mehānisko lielumu vērtības dotajā sistēmas stāvoklī var būt "izsmērētas". Kvantu mehānika dod mums tikai metodes, **kā izrēķināt katra lieluma vērtību varbūtību sadalījumu dotajā sistēmas stāvoklī**.

Ja lielums F ir *atkarīgs tikai no koordinātēm* q_1, q_2, ..., q_s, t.i.

$$F=F(q_1,q_2,\ldots,q_s)=F(\boldsymbol{q})\ ,$$

tad situācija ir vienkārša:

Sistēmas (normētā) stāvoklī ψ lieluma F **matemātiskā cerība** aprēķināma ļoti dabiskā ceļā:

$$E_{\psi}(F)=\int F(\boldsymbol{q})|\psi|^2 d\boldsymbol{q}=(F\cdot\psi,\psi) \ .$$

Tā var izrēķināt ne tikai cerību, bet arī visu varbūtību sadalījumu:

$$P_{\psi}\{a\le F\le b\} = E_{\psi}(F_{ab}),$$

kur lielums F_{ab} ir definēts tā: $F_{ab} = 1$, ja $a\le F\le b$, un = 0, citādi.

Toties gadījumā, ja lielums

$$F(q_1, q_2, \ldots, q_s, p_1, p_2, \ldots, p_s)$$

ir *atkarīgs arī no impulsiem* (piemēram, vienkāršākais gadījums: $F=p_k$), tad tā matemātisko cerību un varbūtību sadalījumu aprēķināt vairs nav tik vienkārši.

[Starp citu, kas tie tādi impulsi? Mūsu sistēmas modelī tie vēl nemaz nav ievesti!]

Un te parādās jauns efekts: **divus dažādus lielumus ne vienmēr var vienlaicīgi precīzi izmērīt!** Arī – mērījot vispirms vienu, pēc tam – otru, var iegūt savādākus rezultātus nekā mērījot vispirms otru, un pēc tam – pirmo. Cēlonis – "divi operatori nekomutē" (sk. tālāk).

Pašsaistītie lineārie operatori

(*self-adjoint linear operators*)

Cits termins – Ermīta (*Hermite*) operatori.

Kvantu mehānikā katram mehāniskam lielumam "noteiktā veidā" (?) tiek

piekārtots pašsaistīts lineārs operators (sk. tālāk), un tikai pēc tam šim lielumam var sākties varbūtību aprēķini.

Operators (Hilberta telpā) ir attēlojums A, kas katram (vai ne katram) stāvoklim ψ piekārto kādu stāvokli Aψ.

Lineārs operators A: visiem ψ_1, ψ_2:

$$A(c_1\psi_1+c_2\psi_2) = c_1A\psi_1+c_2A\psi_2,$$

(c_1, c_2 ir patvaļīgas kompleksas konstantes).

Pašsaistīts operators A: visiem ψ_1, ψ_2:

$$(A\psi_1, \psi_2) = (\psi_1, A\psi_2).$$

[Kāpēc vajadzīgs tieši pašsaistīts? Tāpēc... Bet sk. uzdevumu.]

Piemērs. Ja lielums $F=F(q_1, q_2, ..., q_s)$ ir atkarīgs tikai no koordinātēm, tad tam vienmēr piekārto operatoru $A(\psi)=F\cdot\psi$, jeb:

$$A\psi(q_1, q_2, ..., q_s) = F(q_1, q_2, ..., q_s)\cdot\psi(q_1, q_2, ..., q_s).$$

Ja $F=q_i$, tad atbilstošo operatoru apzīmē ar Q_k, t.i. $Q_k(\psi)= q_k\psi$.

Uzdevums. Pārliecinieties, ka ja lieluma $F(q_1, q_2, ..., q_s)$ *vērtības ir reāli skaitļi*, tad atbilstošais operators $A(\psi)=F\cdot\psi$ ir pašsaistīts lineārs operators.

[Varbūt, matemātiķa cienīga pozīcija būtu: nemaz neinteresēties par mehāniskiem lielumiem. Vai tad ar pašsaistītiem lineāriem operatoriem mums nepietiek? Diraks savā grāmatā "Principles of Quantum Mechanics" tā arī dara: vispirms attīsta matemātisko teoriju, un tikai beigās "pieslēdz" operatorus pie "observables" – t.i. mehāniskiem lielumiem un mērījumiem.]

Operators P_k

$\hbar = \frac{h}{2\pi}$, kur h – Planka konstante ($kg \cdot m^2 \cdot s^{-1}$, enerģija reiz laiks).

[Starp citu, kas tie tādi impulsi? Mūsu sistēmas modelī tie vēl nemaz nav ievesti! Tikai tagad to izdarīsim!]

Ja mehāniskais lielums

$$F = F(q_1, q_2, \ldots, q_s, p_1, p_2, \ldots, p_s)$$

ir *atkarīgs arī no impulsiem*, tad tam piekārtojamo operatoru atrast nav nemaz tik viegli. [Kas tie tādi impulsi?]

Piemēram, vienkāršākais gadījums: $F=p_k$. Kā uzminēt, ka impulsam p_k jāpiekārto tieši šāds operators P_k:

$$P_k(\psi) = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial q_k} \text{ , jeb } P_k = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_k} \text{ ?}$$

Teorēma. P_k ir pašsaistīts lineārs operators.

Pierādījums. Sāksim ar to, ka

$$\frac{\partial(\phi\bar{\psi})}{\partial q_k} = \frac{\partial \phi}{\partial q_k}\bar{\psi} + \phi \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial q_k} \text{ ;}$$

$$\int \frac{\partial(\phi\bar{\psi})}{\partial q_k} d\boldsymbol{q} = \int d\boldsymbol{q}' \int_{-\infty}^{+\infty} \phi\bar{\psi}\, d q_k = 0 \text{ ;}$$

un tāpēc:

$$\int \frac{\partial \phi}{\partial q_k}\bar{\psi}\, d\boldsymbol{q} = -\int \phi \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial q_k} d\boldsymbol{q} \text{ .} \qquad (*)$$

Šeit mēs pieņemam, ka $\psi(q_1, q_2, ..., q_s)\to 0$, ja $q_k\to+\infty$ vai $q_k\to-\infty$. (Kā gan citādi, ja $|\psi|^2$ integrālis pa visu telpu ir galīgs...)

Līdz ar to ($c=-i\hbar$):

$$(P_k\phi, \psi)=c\int\frac{\partial\phi}{\partial q_k}\bar{\psi}\,d\,\boldsymbol{q}=-c\int\phi\frac{\partial\bar{\psi}}{\partial q_k}d\,\boldsymbol{q}$$, izmantojot (*);

$$(\phi, P_k\psi)=\int\phi\overline{(c\frac{\partial\psi}{\partial q_k})}d\,\boldsymbol{q}=\bar{c}\int\phi\frac{\partial\bar{\psi}}{\partial q_k}d\,\boldsymbol{q}\ ;$$

un, tā kā mums $\bar{c}=-c$, tad $(P_k\phi, \psi)=(\phi, P_k\psi)$. Q.E.D.

[2012.02.21. Piedāvāju minējumu. Ja reiz sistēmas stāvoklis ψ ir tik "svarīga" funkcija, tad interesanti, kā "uzvedas" tās **atvasinājumi** pēc koordinātēm q_k? Pats stāvoklis ir bezdimensiju lielums, tātad šo atvasinājumu dimensija būs m^{-1}. Ja atvasinājumu $\frac{\partial\psi}{\partial q_k}$ pareizināsim ar Planka konstanti, tad iegūsim vērtību $\hbar\frac{\partial\psi}{\partial q_k}$, kuras dimensija ir $kg\cdot m\cdot s^{-1}$, un tā ir impulsa dimensija! Un ja gribam, lai $c\frac{\partial\psi}{\partial q_k}$ būtu pašsaistīts operators, vajag lai $\bar{c}=-c$ (sk. pierādījuma beigas), t.i. lai c=c'i. Vēl pietrūkst tikai pamatojums, kāpēc vajadzīga mīnusa zīme.]

[Vai šīs formulas nebūtu jāuzskata par **impulsa definīciju**? Nekur agrāk mēs impulsus nebijām ieveduši!]

Piemērs. Daļiņai (x, y, z):

$$P_x=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\ ;\quad P_y=-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\ ;\quad P_z=-i\hbar\frac{\partial}{\partial z}\ ;$$

$$Q_x=x\,;Q_y=y\,;Q_z=z\ .$$

Tātad, ja daļiņas amplitūda ir $\psi(x, y, z)$, tad 3 impulsa operatori to pārveido par "vektora" $-i\hbar\,\boldsymbol{grad}\,\psi$ komponentēm. "Pavelk" uz kaut ko impulsam līdzīgu?

Hinčins savā grāmatā stipri ekspluatē apsvērumu, kas varbūtību sadalījuma aprēķinu reducē uz matemātiskās cerības aprēķinu:

$$P_\psi\{a\le F\le b\} = E_\psi F_{ab},$$

kur lielums F_{ab} ir definēts tā: F_{ab} = 1, ja $a\le F\le b$, un = 0, citādi.

Bet kā, zinot lieluma F operatoru A, uzbūvēt lieluma F_{ab} operatoru? Par to nekas nav pateikts...

Man neradās pārliecība, ka fiziķiem te ir kāds noteikts algoritms, kas katram mehāniskam lielumam (un jebkurai funkcijai no tā) piekārto pašsaistītu lineāru operatoru. [Ne no Hinčina grāmatas: svarīgs orientieris te esot *correspondence principle*: operatoram ir jābūt tādam, lai lielām daļiņām sanāktu tādi pat rezultāti kā klasiskajā mehānikā.]

[Gluži tāpat, man nav pārliecības, ka fiziķiem ir kāds noteikts algoritms, kas dotajai reālajai mehāniskajai sistēmai piekārto tās Hamiltona funkciju.]

Operatoru algebra

Daži kaut cik universāli paņēmieni tomēr eksistē...

Ja mehāniskiem lielumiem F un G esam piekārtojuši pašsaistītus lineārus operatorus A un B, tad lielumam cF+dG (c un d ir *reāli* skaitļi) droši varam piekārtot operatoru cA+dB.

Uzdevums. Pārliecinieties, ka cA+dB tiešām ir pašsaistīts lineārs operators (ja c, d ir *reāli* skaitļi).

Ja lielumiem F un G esam piekārtojuši operatorus A un B, tad lielumam F·G varam *mēģināt* piekārtot operatoru kompozīciju AB, t.i. AB(ψ) = A(Bψ).

BET:

Operatoru kompozīcija nav komutatīva!

Uzdevums. Pārliecinieties, ka $Q_k P_k - P_k Q_k = i\hbar$, t.i. ka

$Q_k P_k$ nav tas pats kas $P_k Q_k$.

Uzdevums. Pārliecinieties arī, ka $Q_j Q_k = Q_k Q_j$, $P_j P_k = P_k P_j$, un ka ja j nav k, tad $Q_j P_k = P_k Q_j$,.

Bet F·G=G·F būs vienmēr, tāpēc šādā "nekomutatīvā situācijā" A(B(ψ)) nebūs labs kandidāts lielumam F·G atbilstošajam operatoram.

[Ne no Hinčina grāmatas: ja divu lielumu operatori nekomutē, tad šiem lielumiem izpildās kaut kas līdzīgs Heizenberga nenoteiktības principam: tos abus vienlaicīgi nevar precīzi izmērīt. Kā redzam, q_k un p_k ir tieši tādi, jo $P_k Q_k$ nav tas pats kas $Q_k P_k$! Tas atbilst visbiežāk citētajam nenoteiktības principa formulējumam: $\Delta q \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$.]

Bet ja AB=BA, tad AB būs labs kandidāts lielumam F·G atbilstošajam operatoram.

Tiešām:

a) Ja A un B ir pašsaistīti operatori, tad:

$$(AB\psi_1, \psi_2)=(B\psi_1, A\psi_2)=(\psi_1, BA\psi_2).$$

Tātad, ja AB=BA, tad AB arī ir pašsaistīts operators.

b) Savukārt, ja AB ir pašsaistīts operators, tad

$$(AB\psi_1, \psi_2)=(\psi_1, AB\psi_2)=(\psi_1, BA\psi_2).$$

Tātad AB=BA.

Katrs operators komutē pats ar sevi, tāpēc lielumam F^2 varam droši piekārtot operatoru A^2. Tas pats – ar citām pakāpēm F^k.

Tātad, ja lielums G ir funkcija f no lieluma F, G=f(F), un f(x) **var izteikt kā pakāpju rindas (Teilora rindas) summu** no x, tad mēs zinām kā būvēt G atbilstošo operatoru. Piemēram, ja f(x) ir sin(x), vai e^{ax}, vai $x^2/(1-x)$, vai kāda cita no fiziķu iecienītajām funkcijām...

[Ne no Hinčina grāmatas: ja lielums K ir funkcija no diviem lielumiem, K=f(F, G), tad f izvirzīšana pakāpju rindā var līdzēt tikai tad, ja F, G atbilstošie operatori A, B komutē, AB=BA. Ja tie nekomutē, tad "dažreiz" varot AB vietā paņemt (AB+BA)/2...]

Piemērs. Ja sistēma sastāv no vienas daļiņas ar masu m, kas kustas telpā (x, y, z) konstantā spēku laukā ar potenciālo enerģiju V(x, y, z), tad tās pilnā enerģija būs:

$$H=\frac{1}{2\mathrm{m}}(p_x^2+p_y^2+p_z^2)+V(x,y,z) \quad .$$

Būvēsim šim lielumam atbilstošo operatoru. Impulsam p_x, kā jau redzējām, atbilst operators P_x:

$$P_x\psi=-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x} \quad .$$

Tālāk, impulsa kvadrātam $p_x{}^2$ atbilst operators $P_x{}^2$:

$$P_x{}^2\psi=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x})=-\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} \quad .$$

Līdz ar to kinētiskajai enerģijai T atbilstošais operators ir:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2})=\frac{-\hbar^2}{2\mathrm{m}}\nabla^2 \quad ,$$

kur ∇^2 ("nabla") apzīmē Laplasa operatoru

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2} \ .$$

Potenciālā enerģija V ir atkarīga tikai no koordinātēm, t.i. tai atbilstošais operators ir stāvokļa funkcijas reizināšana ar V(x, y, z).

Savelkot to visu kopā, daļiņas pilnajai enerģijai atbilstošais operators būs:

$$H=-\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\nabla^2+V \ .$$

Mehāniska lieluma matemātiskā cerība

Ja lielums F *atkarīgs tikai no koordinātēm* $\boldsymbol{q}=(q_1, q_2, ..., q_s)$. t.i. F=F(**q**), tad stāvoklī ψ tā matemātiskā cerība:

$$E_\psi F=\int F(\boldsymbol{q})|\psi(\boldsymbol{q})|^2 d\,\boldsymbol{q}=\int F\,\psi\,\psi^* d\,\boldsymbol{q} \ ;$$

$$\int F\,\psi\,\psi^* d\,\boldsymbol{q}=\int (A\,\psi)\,\psi^* d\,\boldsymbol{q}=(A\,\psi,\psi) \ .$$

Tātad šajā gadījumā:

$$\mathbf{E_\psi F = (A\psi, \psi).}$$

Kvantu mehānikā šis princips tiek ("pēc definīcijas") vispārināts visiem lielumiem, arī tiem, kas atkarīgi ne tikai no koordinātēm.

Tas nozīmē, ka, piekārtojot lielumam F tā operatoru A, mums ir jānodrošina (tai skaitā), lai $E_\psi F = (A\psi, \psi)$.

Piemērs. Koordinātei q_k atbilst operators $Q_k(\psi)=q_k\,\psi$ (vienkārša reizināšana ar koordināti):

$$E_\psi q_k=(Q_k\,\psi,\psi)=\int q_k\,\psi\,\bar{\psi}\,d\,\boldsymbol{q}=\int q_k\|\psi\|^2 d\,\boldsymbol{q} \ ,$$

kas ir pilnīgi dabiski – tā tiešām ir q_k vidējā vērtība stāvoklī ψ.

Un tālāk atkal seko Hinčina iecienītais paņēmiens: ja vēlamies aprēķināt ne tikai lieluma F matemātisko cerību, bet arī varbūtību sadalījumu, tad vispirms definējam lielumu F_{ab}, kur

F_{ab} = 1, ja a≤F≤b, un = 0, citādi. Pēc tam lielumam F_{ab} piekārtojam tā operatoru A_{ab}, un tad:

$$P_\psi\{a\le F\le b\} = E_\psi F_{ab} = (A_{ab}\psi, \psi).$$

Uzdevums. Pārliecinieties, ka ja A ir pašsaistīts lineārs operators, tad (Aψ, ψ) ir reāls skaitlis, t.i. jebkura **mehāniska lieluma matemātiskā cerība ir reāls skaitlis.**

Lielumu spektri un mērījumi

Var gadīties, ka kādā sistēmas stāvoklī *ψ* lielums *F* ar varbūtību 1 pieņem tikai vienu noteiktu vērtību *d*. Tad, protams, $E_\psi F = d$ un dispersija

$$D_\psi F = E_\psi(F-d)^2 = 0.$$

Uzdevums. Izvediet no šī nosacījuma, ka tad Aψ=dψ, t.i. ka:

a) d ir F atbilstošā operatora A **īpašvērtība**; b) stāvoklis ψ ir šīs īpašvērtībai d piederoša operatora A **īpašfunkcija**.

Uzdevums. Pārliecinieties, ka pašsaistītam lineāram operatoram visas īpašvērtības ir *reāli skaitļi.*

Visu īpašvērtību kopa veido operatora **spektru**. Teorētiski spektrs var sastāvēt gan no vienlaidu apgabaliem (piemēram, segmentiem), gan no izolētām īpašvērtībām. [Vienlaidu spektrs var būt, piemēram, tādiem lielumiem kā koordinātes q_k.]

Savā grāmatā Hinčins solās aplūkot tikai tādus operatorus, kam spektrs sastāv no izolētām īpašvērtībām $d_1<d_2<...<d_n<...$, kur $d_n\to\infty$. [Te "prasās pēc piemēriem"...]

Kvantu mehānikā, ja kādā sistēmas stāvoklī mēs izmērām lielumu F, iegūstot vērtību d, tad sistēma vismaz uz brīdi pāriet stāvoklī ψ, kurā F=d ar varbūtību 1.

Secinājums: **mērot lielumu F, mēs varam iegūt tikai tādas vērtības, kas pieder atbilstošā operatora A spektram.**

Kā redzam, dažu lielumu vērtību spektru diskrētums nav speciāli jāpostulē [kā to vajadzēja darīt Plankam un Boram] – tas dabiski seko no atbilstošo operatoru īpašībām. [Te "prasās pēc piemēriem"...]

Bāzes stāvokļi

Ja stāvokļi ψ_1, ψ_2 pieder vienai un tai pašai operatora A īpašvērtībai, tad arī $c_1\psi_1+c_2\psi_2$ pieder šai īpašvērtībai. T.i. katrai operatora A īpašvērtībai atbilstošās īpašfunkcijas veido apakštelpu.

Tajos gadījumos, kas tiek aplūkoti Hinčina grāmatā, katrai operatora A īpašvērtībai d_i atbilstošās īpašfunkcijas veido apakštelpu ar *galīgu* dimensiju skaitu (visbiežāk ir tikai viena dimensija). Šai apakštelpai var uzbūvēt galīgu *ortonormētu bāzi.*

(Funkcijas ψ, V ir ortogonālas, ja $(\psi, V)=0$, funkcija ψ ir normēta, ja $(\psi, \psi)=1$).

Uzdevums. Pārliecinieties, ka divām dažādām īpašvērtībām piederošas īpašfunkcijas ir ortogonālas. T.i. divām dažādām īpašvērtībām piederošie sistēmas stāvokļi ir *nesavienojami*.

Tātad, apvienojot visu īpašvērtību d_i ortonormētās bāzes, mēs iegūstam **sanumurējamu ortonormētu bāzi** sistēmas stāvokļu (Hilberta) telpā:

$$\{\psi_n \mid n=1..\infty\}.$$

Visos svarīgajos gadījumos šī bāze esot **pilnīga**, t.i. katru sistēmas stāvokli ψ var izteikt kā:

$$\psi=\sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n \ ,$$

kur c_n ir kompleksi skaitļi un $(\psi-S_n, \psi-S_n)\to 0$, ja $n\to\infty$ (S_n ir pirmo *n* saskaitāmo summa).

Uzdevums. Pārliecinieties, ka:

a) $c_n = (\psi, \psi_n)$, t.i. ja sistēma atrodas stāvoklī ψ, tad ar amplitūdu c_n tā atrodas arī bāzes stāvoklī ψ_n;

b) $(\psi, \psi)=\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2$;

c) Un tātad, ja ψ ir normēta funkcija, tad $\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2=1$.

Uzdevums. Pārliecinieties, ka

$$P_{\psi}(a\leq F\leq b)=\sum |(\psi, \psi_n)|^2 \ ,$$

kur summēts tiek pa visiem tiem bāzes stāvokļiem ψ_n, kas pieder operatora A tām īpašvērtībām d_i, kam $a\leq d_i\leq b$.

Uzdevums. Pārliecinieties, ka ja operatora A visas īpašvērtības ir $d_1<d_2<...<d_n<...$, kur $d_n\to\infty$, tad operatora A^2 visas īpašvērtības ir d_1^2, d_2^2, ... d_n^2 ..., pie tam īpašvērtībai d_n^2 piederošo A^2 īpašfunkciju kopa sakrīt ar īpašvērtībai d_n piederošo A īpašfunkciju kopu.

Kvantu sistēma kustībā

$\hbar=\dfrac{h}{2\pi}$, kur *h* – Planka konstante ($kg\cdot m^2 s^{-1}$, enerģija x laiks)

Klasiskās mehānikas likumi viennozīmīgi nosaka sistēmas trajektoriju fāzu telpā $(q_1, q_2, ..., q_s, p_1, p_2, ..., p_s)$. Ja ir zināms, ka šī trajektorija sākas dotajā punktā

(q_1^o, q_2^o, ..., q_s^o, p_1^o, p_2^o, ..., p_s^o), tad šo trajektoriju var aprēķināt, sastādot sistēmas Hamiltona funkciju H(q_1, q_2, ..., q_s, p_1, p_2, ..., p_s) un pēc tam atrisinot 2s diferenciālvienādojumu sistēmu.

Kvantu sistēmai Hamiltona funkcija H ir viens no mehāniskajiem lielumiem, kam atbilst noteikts lineārs pašsaistīts operators H, ko mēdz saukt par sistēmas **hamiltoniānu**.

Piemērs. Sistēmai, uz kuru darbojas laikā nemainīgs spēku lauks, Hamiltona funkcija ir pilnās enerģijas funkcija: H=T+V, kur T=T(p_1, p_2, ..., p_s) ir sistēmas kinētiskā enerģija, bet V=V(q_1, q_2, ..., q_s) – potenciālā enerģija.

Ja sistēma sastāv no vienas daļiņas ar masu m, kas kustas telpā (x, y, z) konstantā spēku laukā ar potenciālo enerģiju V(x, y, z), tad pilnā enerģija būs:

$$H=\frac{1}{2\mathrm{m}}\left(p_x^2+p_y^2+p_z^2\right)+V(x,y,z)\ .$$

[Pieņēmums, ka potenciālā enerģija ir atkarīga tikai no daļiņas koordinātēm, der, piemēram, kustībai elektriskajā laukā, bet neder kustībai magnētiskajā laukā.]

Atbilstošo operatoru – hamiltoniānu mēs jau uzbūvējām:

$$H=-\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\nabla^2+V\ ,$$

kur ∇^2 apzīmē Laplasa operatoru $\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$.

Šrēdingera vienādojums

Schroedinger equation[Wikipedia], 1926

Heisenberg: matrix mechanics[Wikipedia], 1925

Feynman: path integral formulation[Wikipedia], 1948

Klasiskajā mehānikā fāzu telpā caur katru punktu iet tieši viena sistēmas trajektorija (gan uz priekšu, gan atpakaļ).

Pēc analoģijas, arī kvantu mehānikas likumiem ir jābūt tādiem, ka dotās kvantu sistēmas stāvoklis $\psi(q_1, q_2, \ldots, q_s)$ laikā mainās kā noteikta funkcija (nevis "lēkā" ar kaut kādam varbūtībām):

$$\psi = \psi(q_1, q_2, \ldots, q_s, t) = \psi(\boldsymbol{q}, t) \; .$$

Tas ir **fundamentāls postulāts**!

[21.02.2012 Ja jau $\psi(\mathbf{q}, t)$ ir tik svarīga funkcija, tad interesanti, kā "uzvedas" tās parciālais atvasinājums pēc laika

$$\frac{\partial \psi(\boldsymbol{q}, t)}{\partial t} \; ?$$

Atvasinājuma dimensija ir s^{-1} (kā frekvencei), pareizinot ar Planka konstanti, mēs iegūtu enerģijas dimensiju $kg \cdot m^2 s^{-2}$! Un ja pareizinātu vēl ar i, tad iegūtu pašsaistītu lineāru operatoru enerģijai:

$$E(\psi) = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \text{ , jeb } E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \; ?$$

Teorēma. E ir pašsaistīts lineārs operators.

Pierādījums. Sāksim ar to, ka

$$\frac{\partial(\phi \bar{\psi})}{\partial t} = \frac{\partial \phi}{\partial t} \bar{\psi} + \phi \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial t} \; ;$$

$$\int \frac{\partial(\phi \bar{\psi})}{\partial t} d\boldsymbol{q} = \frac{\partial}{\partial t} \int \phi \bar{\psi} \, d\boldsymbol{q} = \frac{\partial}{\partial t} const = 0 \; ;$$

un tāpēc:

$$\int \frac{\partial \phi}{\partial t} \bar{\psi} \, d\boldsymbol{q} = -\int \phi \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial t} d\boldsymbol{q} \; . \qquad (**)$$

Līdz ar to ($c = i\hbar$):

$$(E\phi, \psi) = \int c \frac{\partial \phi}{\partial t} \bar{\psi} \, d\boldsymbol{q} = -c \int \phi \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial t} d\boldsymbol{q} \text{ , izmantojot (**);}$$

$$(\phi, E\psi) = \int \phi \overline{\left(c \frac{\partial \psi}{\partial t}\right)} d\boldsymbol{q} = \bar{c} \int \phi \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial t} d\boldsymbol{q} \; ;$$

un, tā kā mums $\bar{c}$=−c, tad $(E\phi,\psi)=(\phi,E\psi)$. Q.E.D.

Vai tiešām esam uzminējuši enerģijas operatoru

$$E=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\ \textbf{?}$$

Situācija tomēr ir nedaudz īpatnēja. Līdz šim mēs aplūkojām operatorus, kas funkcijas F(**q**) pārveidoja par tādām pat funkcijām. Bet tagad mums ir darīšana ar funkcijām F(**q**, t)! Un operators E darbojas ar tādām funkcijām, nevis ar F(**q**) – kā citi operatori, ko piekārtojām mehāniskiem lielumiem.

Un tikai tad, ja ievērojam, ka E nav vis viens operators, bet operators E_t, kas atkarīgs no parametra t (t.i. laika), mēs varam to uzlūkot par "parasto" operatoru, kas funkcijas F(**q**) pārveido par tādām pašām.

Tiešām, E_t ir operators, kas darbojas laika momentā *t*, un katrai funkcijai $\eta_1(\boldsymbol{q})=\psi(\boldsymbol{q},t)$ piekārto citu funkciju

$$\eta_2(\boldsymbol{q})=i\hbar\frac{\partial\psi(\boldsymbol{q},t)}{\partial t}\ .$$

Bet ja sistēmas enerģiju mums ir izdevies uzrakstīt arī kā funkciju H no koordinātēm un impulsiem, tad atbilstošajam operatoram -hamiltoniānam H katrā laika momentā ir jādod tāds pat rezultāts kā operatoram E_t!

Tātad:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=H\psi\ .$$

Tas arī ir **Šrēdingera vienādojums**, kas kvantu mehānikā spēlē **Otrā Ņūtona likuma** ($F=ma,\frac{dp}{dt}=F$) lomu. Tas ir parciāls diferenciālvienādojums, laikam *t* tas ir pirmās kārtas vienādojums, bet koordinātēm q_k – otrās kārtas (atceramies vienas daļiņas piemēru). No tā (plus papildus nosacījumi) var aprēķināt funkciju $\psi(q_1, q_2, ..., q_s, t)$.

Mazliet labāk sakārtotā veidā šo “izvedumu” sk.

K.Podnieks. **The simplest possible “derivation” of Schroedinger equation.** May be considered as a mathematical joke, 2012.

[Feinmans savās lekcijās nedaudz pasmejas par Šrēdingera vienādojuma "izvedumiem", arī par to "izvedumu", kas savulaik izdevās pašam Šrēdingeram.

Arī mūsu izvedums ir izsmejams, jo universālo enerģijas operatoru $E=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ mēs izfantazējām visai avantūristiski.

Bet ja pēc vienādojuma noformulēšanas izrādās, ka tas precīzi apraksta to, kas notiek dabā, tad "izvedums" vairs nav būtisks. Arī Nūtona likumus taču "neizved", bet postulē. Rīkoties savādāk nozīmē jaukt studentiem galvas. Domāju, ka arī matemātiķiem tāda pieeja ir pieņemama – ja runa ir par fundamentālajiem likumiem, kuri fizikas teorijā vienkārši ir jāpostulē. Matemātiķus kaitina citas situācijas – kad no vieniem likumiem izved citus (atkarīgos), izmantojot ārpus-matemātiskus apsvērumus. Tas liecina par nesakārtotiem teorijas pamatiem.]

Uzdevums. Parādiet, ka ja $\psi(q, t)$ ir Šrēdingera vienādojuma atrisinājums, tad norma

$$(\psi, \psi) = \int |\psi|^2 dq$$

nav atkarīga no laika t. T.i. ja $(\psi, \psi)=1$ kādā laika momentā, tad ψ paliks normēta funkcija arī turpmāk (un arī pirms tam). [Aplūkojiet Šrēdingera vienādojumu kopā ar tam kompleksi saistīto vienādojumu, un aprēķiniet normas (ψ, ψ) pilno atvasinājumu pēc laika t, un tad dēļ $(H\psi, \psi)=(\psi, H\psi)$ tas iznāks vienāds ar 0.]

Šrēdingera vienādojuma atrisinājumi

ir analītiski ļoti sarežģīti.

Sk. Schroedinger equation[Wikipedia], te dots atrisinājums brīvai daļiņai.

http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/quantum/scheq.html#c2 - free particle.

http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/quantum/pbox.html#c1 – particle in a box.

Sk. Hydrogen atom[Wikipedia], te dots atrisinājums, kas apraksta ūdeņraža atomu (protons ar elektronu). Tur iesaistīti Lagerra polinomi...

Sk. List of quantum mechanical systems with analytical solutions[Wikpedia]

Un kaut cik sarežģītos gadījumos analītisks atrisinājums jau vairs nav iegūstams – jāiztiek ar dažādiem tuvinājumiem, vai ar to, ko var dot dators.

Sistēmas stacionārie stāvokļi

Pieņemsim, ka mūsu kvantu sistēma ir tāda, ka **operatora H spektrs ir diskrēts**, un stāvokļu Hilberta telpai eksistē pilnīga ortonormēta bāze no H īpašfunkcijām:

$$\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_n, \ldots;$$

kur $H\psi_n = E_n\psi_n$, t.i. ar E_n mēs apzīmējam H īpašvērtības (te tās var arī atkārtoties).

Tad jebkuru Šrēdingera vienādojuma atrisinājumu $\psi(q, t)$ var uzrakstīt kā summu:

$$\psi(q,t)=\sum_{n=1}^{\infty} a_n(t)\,\psi_n(q) \quad ,$$

kur $a_n(t)$ ir kompleksas laika t funkcijas. [Kāpēc?]

Ar q te saīsināti apzīmētas koordinātes q_1, q_2, ..., q_s.

Turpmāk uzskatīsim, ka operators H nav atkarīgs no laika. Tātad runa ir par *konservatīvu sistēmu*, t.i. sistēmu, uz kuru darbojas laikā nemainīgi spēki. Tad H ir pilnās enerģijas operators un īpašvērtības E_n nozīmē pieļaujamās enerģijas vērtības.

Uzdevums. Parādiet, ka ja H nav atkarīgs no laika, tad: ih $da_n/dt = E_n a_n(t)$, un tātad:

$$a_n(t)=c_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} ,$$

kur c_n ir kompleksas konstantes.

Tātad jebkuru Šrēdingera vienādojuma atrisinājumu ψ(q, t) var uzrakstīt kā summu:

$$\psi(q,t)=\sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \psi_n(q) ,$$

kur c_n ir kompleksas konstantes.

Arī otrādi, ja ψ(q, t) var uzrakstīt kā minēto summu ar kādām konstantēm c_n, tad ψ(q, t) ir Šrēdingera vienādojuma atrisinājums.

Funkcijas ψ(q, t) norma $(\psi, \psi) = \sum |c_n|^2$, t.i. lai funkcija ψ būtu normēta, vajag, lai $\sum |c_n|^2 = 1$.

Funkcija $e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}\psi_n(q)$ arī ir normēts Šrēdingera vienādojuma atrisinājums. Tā kā divos dažādos laika momentos šīs funkcijas vērtības atšķiras tikai ar konstantu reizinātāju, tad šajos sistēmas stāvokļos visu mehānisko lielumu varbūtību sadalījumi laikā nemainās, t.i. *kvantu* sistēmas fiziskais stāvoklis laika gaitā paliek viens un tas pats.

Tāpēc funkcijas $e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}\psi_n(q)$ sauc par sistēmas **stacionārajiem stāvokļiem**. [Tas varētu būt saistīts ar abiem mūsu pieņēmumiem: mūsu kvantu sistēma ir tāda, ka operatoram H ir diskrēts spektrs un ka H nav atkarīgs no laika (t.i. sistēma "dzīvo" konstantā ārejo spēku laukā). Ja kāda stāvoklī sistēmas pilnajai enerģijai ir noteikta vērtība, tad šāds stāvoklis ir stabils, un lai to izmainītu (lai sistēmu "no tā izsistu"), būs vajadzīga pietiekami liela ārēja iedarbība.]