**mărimi măsurabile în mecanica cuantică**

**Noțiunea de observabilă în mecanica cuantică**

În cursul precedent am prezentat primele două postulate ale mecanicii cuantice. Recapitulând, am constatat că sistemele de microparticule au o evoluție care nu poate fi descrisă folosind legile mecanicii clasice (macroscopice). Pentru a putea descrie evoluția sistemelor de particule microscopice, se modifică noțiunea de stare mecanică clasică, admițând că aceasta poate fi înlocuită cu un alt concept: vectorul de stare. Primul postulat afirmă că oricui sistem microscopic i se poate asocia o funcție de stare. Funcția de stare a unui sistem cuantic se modifică în timp. Dacă acesta evoluează într-un câmp de potențial, legea de evoluție a funcții de stare este dată de ecuația lui Schrödinger. Evoluția în timp a funcției de undă, pentru toate sistemele cuantice ce se află în câmpuri de potențial, conform ecuației lui Schrödinger, este garantată de cel de al doilea postulat al mecanicii cuantice.

Așa cum a fost formulată mecanica cuantică, rezultă că legile ei se aplică numai la microparticule nu și la sistemele fizice macroscopice. Ca urmare a acestui fapt, trebuie să admitem că teoria cuantică împarte lumea în două: lumea macroscopică, formată din sisteme pentru care sunt valabile legile mecanicii clasice și lumea microscopică, formată din sisteme în care sunt valabile legile mecanicii cuantice. Primele două postulate ale mecanicii cuantice se referă la situația în care sistemul cuantic nu interacționează cu sistemele macroscopice. Se spune, uneori, că postulatul al doilea al mecanicii cuantice descrie evoluția unitară a sistemelor cuantice. Este firesc să ne întrebăm ce se întâmplă când un sistem cuantic interacționează cu un sistem macroscopic (clasic). Din punct de vedere al științei fizice, această interacțiune este esențială. Noi, ființe macroscopice, nu putem avea informații despre lumea exterioară decât prin experiențe efectuate la acest nivel al realității. Aceasta înseamnă că despre sistemele cuantice nu avem informații decât în mod indirect, prin intermediul efectelor pe care le produc acestea asupra parametrilor ce descriu sistemele macroscopice.

Sistemele clasice sunt caracterizate de valorile mărimilor fizice de la un anumit moment de timp (de exemplu, vectorul de poziție, vectorul impuls, energia, etc). Toate aceste mărimi sunt direct observabile de către noi și, din acest motiv, le vom numi mărimi observabile. Starea unui sistem cuantic este descrisă de funcția de undă. Aceasta este o proprietate fizică ce nu este observabilă de către noi. În urma interacțiunii dintre un sistem cuantic și unul clasic se modifică, în general, atât starea sistemului cuantic cât și starea sistemului clasic. Fie o mărime fizică λ ce caracterizează sistemul macroscopic ( de exemplu, poziția unei găuri într-un panou). Să presupunem că interacțiunea dintre sistemul macroscopic și sistemul cuantic se face în așa fel încât acest parametru caracterizează acest proces. Dacă, după interacțiune, parametrul λ nu se modifică, se spune că s-a făcut un proces de preparare a sistemului cuantic astfel încât i se poate asocia acestuia valoarea dată a parametrului macroscopic (de exemplu, microparticula a avut poziția găurii). Dacă, în urma interacțiunii, valoarea parametrului λ se modifică, se spune că am avut un proces de măsurare (observare) a sistemului cuantic. Constatăm că procesele de preparare și măsurare sunt identice din punct de vedere fizic: se produce un fenomen de interacțiune dintre un sistem cuantic și unul macroscopic în urma căruia se asociază sistemului cuantic o anumită valoare a unui parametru macroscopic. Din acest motiv, în literatura de specialitate se insistă numai pe unul din procese, de obicei pe procesul de observare (măsurare).

Faptele experimentale bazate pe procese de observare au fost sintetizate într-un postulat astfel:

**Postulatul a treilea al mecanicii cuantice:** *După fiecare măsurătoare, funcția de undă a sistemului cuantic suferă o modificare bruscă (colaps cuantic) trecând în una din mai multe funcții posibile. Noua funcție de undă este corelată cu valoarea parametrului macroscopic pe care o capătă sistemul de observare. Colapsul cuantic are un caracter statistic.*

Astfel formulat, postulatul al treilea nu oferă decât o descriere calitativă a fenomenului de observare. El are totuși, pentru cunoscători, avantajul unei formulări sintetice a teoriei cuantice. Se impun astfel anumite dezvoltări ale acestui postulat. Cel mai elegant, după mine, este să realizăm o schemă de principiu a procesului de observare. Fie această schemă cea de mai jos:

0

0

0

0

Ψ1

S.Q. S.C. Ψ2

Ψ Ψ3

Ψn

λ1 λ2 λ3 λn

p1 p2 p3 pn

În această schemă, S.Q., este un sistem microscopic (cuantic) iar S.C. este un sistem macroscopic (clasic). Sistemul cuantic, înainte de interacțiune, este descris de funcția de stare Ψ. După interacțiunea cu sistemul clasic, el trece în una din stările cuantice descrise de vectorii de stare Ψ1, Ψ2, ..., Ψn. Constatăm astfel o primă consecință a postulatului al treilea al mecanicii cuantice: deși sistemul cuantic intră într-o stare cuantică bine precizată, după interacțiunea cu sistemul clasic, el poate, în general, să treacă în una din mai multe stări cuantice posibile. Conform postulatului analizat, această trecere se face în mod instantaneu, ne existând, din punct de vedere fizic, cel puțin la nivelul la care face referire mecanica cuantică, un proces fizic continuu de trecere de la funcția de undă inițială la cea finală. Deoarece unei funcții de undă inițiale îi pot corespunde mai multe funcții de undă finale în care poate trece sistemul cuantic, din punct de vedere matematic, rezultă că nu poate exista o ecuație diferențială liniară ce poate descrie acest proces. În limbajul fizicii, aceasta se traduce prin faptul că, deși între starea inițială și cea finală există o legătură cauzală, între starea cuantică inițială și starea cuantică finală nu există corelație deterministă. Opus conceptului de corelație deterministă este conceptul de corelație statistică (probabilistică). Cu alte cuvinte, sistemul cuantic poate trece, în urma interacțiunii, în mod aleator (întâmplător), în una din stările cuantice finale. Fiecare stare cuantică finală realizându-se cu o anumită probabilitate.

Sistemul de observare este caracterizat prin parametrul macroscopic λ. În urma interacțiunii el trece în una din valorile λ1, λ2,..., λn. Postulatul trei ne garantează faptul că fiecărei valori a parametrului observabil îi corespunde o singură funcție de undă a sistemului cuantic după interacțiune. Deoarece trecerea de la funcția de undă inițială la funcția de undă finală are un caracter statistic și valorile observabile ale mărimii macroscopice se produc într-un mod aleator. Aceasta înseamnă că, repetând de mai multe ori experiența în aceleași condiții inițiale, obținem de fiecare dată altă valoare a parametrului macroscopic dar că frecvența de apariție a fiecărei valori tinde, când numărul de experimente este foarte mare, către o valoare limită ce se numește probabilitatea evenimentului.

Experimente de tipul celor prezentate schematic mai sus, constituie baza empirică a fizicii cuantice. Problema fizicii cuantice este să prezică, pentru fiecare sistem cuantic, cunoscând funcția de stare inițială, următoarele: funcțiile de undă ce pot corespunde sistemului după interacțiunea cu sistemul clasic, valorile posibile ale mărimi observabile după interacțiune precum și probabilitățile de producere a diferitelor evenimente.

În mecanica cuantică se numește spectrul de valori al sistemului cuantic mulțimea λ1, λ2,..., λn a tuturor valorilor posibile în urma măsurătorii pentru mărimea observabilă λ. Spectrul de valori poate să fie discret (de linii) așa cum l-am prezentat noi sau să ocupe un anumit domeniu numeric (continuu). Funcția de undă care corespunde unei valori a mărimii observate se numește funcție proprie a valorii date.

Din punct de vedere matematic (formal), trecerea de la funcția de undă inițială Ψ la una din funcțiile finale Ψi cu i=1,2...,n, este rezultatul unei operații. Operațiile care transformă o funcție într-o altă funcție se numesc în matematică operatori. Folosind instrumentul matematic al operatorilor, fizica cuantică asociază fiecărui proces de observare ce implică modificarea unei mărimi fizice asociate sistemului clasic (numit și aparat de măsură sau observator) un anumit operator. Acești operatori sunt denumiți, sugestiv, observabile (de la faptul că ei sunt asociați unei mărimi fizice direct observabile). Pentru a sugera variabila căreia îi este asociat, observabila se notează cu litera mare cu care se notează mărimea fizică. De exemplu, dacă λ este mărimea fizică observabilă, operatorul asociat ei se notează astfel: .

Pentru anumiți vectori de stare, rezultatul acțiunii operatorului este o funcție care este egală cu produsul dintre funcția inițială și o anumită valoare a mărimii fizice măsurate. Adică, este valabilă ecuația:

O astfel de ecuație se numește ecuația cu valori și vectori proprii a operatorului. Comparând această ecuație cu considerațiile fizice de mai sus, rezultă că funcțiile de stare pe care le poate lua sistemul cuantic după măsurarea unei mărimi fizice macroscopice precum și valorile posibile ale acestei mărimi sunt vectorii proprii și, respectiv, valorile proprii ale operatorului asociat acestei mărimi. De aici rezultă și direcția de cercetare în fizica cuantică: găsirea operatorilor ce pot fi asociați diferitelor mărimi fizice și rezolvarea ecuației cu valori și funcții proprii a acestuia.

Fie un sistem cuantic oarecare. Așa cum am arătat, mulțimea funcțiilor de stare se poate organiza ca un spațiu vectorial infinit dimensional normat (spațiul Hilbert al sistemului cuantic dat). Se poate demonstra că mulțimea vectorilor proprii ai unei observabile constituie o bază a spațiului Hilbert. Fie această bază vectorii proprii ai observabilei . Orice alt vector poate fi scris ca o combinație liniară a vectorilor bazei. Fie acest vector chiar vectorul de stare inițial al sistemului cuantic. Rezultă că el poate fi scris sub forma:

Din definiția normei vectorului de stare și din faptul că el este normat la unitate, rezultă că:

Aplicând operatorul asupra vectorului Ψ și făcând produsul scalar al acestui vector cu vectorul rezultant prin aplicarea operatorului, obținem:

În calcule am ținut cont de:

Valoarea medie a mărimii fizice măsurate este dată de relația:

Comparând valoarea medie experimentală cu produsul scalar de mai sus, rezultă imediat că dacă se aleg coeficienți ci astfel încât:

atunci:

Constatăm astfel că teoria operatorilor permite aflarea și a probabilităților de obținere a diferitelor valori experimentale. În felul acesta, de principiu, orice problemă de fizică ce implică un proces de măsurare (sau de preparare) dintre un sistem cuantic și unul clasic este rezolvabilă complet folosind teoria observabilelor.

**Exemple de observabile**

**Operatorul energiei**

Ecuația lui Schrödinger netemporală:

dacă este scrisă sub forma:

cu

reprezintă ecuația cu valori și vectori proprii a energiei. Operatorul fiind deci observabila energiei.

**Operatorul pozițiilor**

Vom studia, din motive de simplitate, fără să limităm prin aceasta semnificația generală a rezultatului, cazul unui sistem cuantic format dintr-o singură particulă în mișcare unidimensională. În literatura de specialitate, observabila poziției se notează cu . Ecuația cu valori și funcții proprii a acestui operator va fi:

În această formulă, x reprezintă variabila de poziție iar x’ reprezintă valoarea proprie (o anumită poziție dată, deci o constantă). Deoarece spațiul este continuu, spectrul valorilor proprii ale operatorului pozițiilor este continuu (întreaga dreaptă reală). Funcțiile de undă, în general sunt funcții de poziție. Ele trebuie să fie diferite de zero în regiunile în care particula cuantică poate exista și nule în afara domeniului de existență. Deoarece, pentru o funcție proprie a operatorului de poziție, domeniul spațial de existență al particulei se reduce la un punct (valoarea proprie x’), vectorul propriu trebuie să fie nul pe întreaga dreaptă reală, cu excepția punctului corespunzător valorii proprii. Vom nota o astfel de funcția astfel:

După cum știm, funcțiile de undă trebuie să aibă norma egală cu unitatea. Aceasta înseamnă că este îndeplinită egalitatea:

Deoarece funcția este nulă cu excepția unui singur punct, această egalitate nu poate fi îndeplinită, conform definiției obișnuite a funcțiilor, de nicio funcție. Pentru a puntea fi îndeplinită egalitatea de mai sus, trebuie generalizată noțiunea de funcție. Astfel încât, suntem nevoiți să admitem că relația funcțională ce definește vectorii proprii ai operatorului de poziție este:

Această relație funcțională se numește funcția lui Dirac. Ea face parte dintr-o clasă de alte obiecte matematice ce extind noțiunea de funcție numite funcții generalizate sau distribuții. O proprietate importantă a funcție Dirac este:

Deoarece, vectorii proprii ai oricărei observabile constituie o bază în spațiul Hilbert asociat sistemului cuantic, rezultă că și funcțiile proprii ale operatorului pozițiilor constituie o bază. Din acest motiv, orice vector din spațiul Hilbert poate fi scris ca o combinație liniară de aceste funcții. Adică:

De aici rezultă că:

Deoarece am demonstrat, pe cazul general, că pătratul modulului coeficienților de descompunere a unui vector de stare după vectorii bazei unui operator reprezintă probabilitatea de obținere, în urma unei măsurători, a valorii proprii corespunzătoare vectorului propriu dat, rezultă că și în acest caz, relația de mai sus reprezintă o probabilitate. Deoarece poziția este o variabilă continuă, mărimea

reprezintă în fapt densitatea de probabilitate (probabilitatea ca particula să fie găsită în unitatea de volum din jurul punctului considerat). Acest rezultat ne arată acum semnificația fizică a funcției de undă: *funcțiile de undă reprezintă „funcții de probabilitate”, pătratul modulului lor reprezentând densitatea de probabilitate de găsire, în urma unei măsurători, a particulei într-un anumit punct din spațiu*.

**Operatorul impulsurilor**

Vom considera, ca și anterior, cazul unui sistem cuantic format dintr-o singură particulă ce are o mișcare unidimensională. Pentru impuls, în mecanica cuantică se definește observabila:

Ecuația cu valori și vectori proprii a operatorului impulsului este:

Impulsul, ca și poziția, este o mărime continuă ce poate lua valori pe întreaga axă reală. Să alegem soluția acestei ecuații o funcție armonică de forma:

unde C este o constantă de integrare arbitrară. Noi știm că vectorii proprii sunt ortogonali, astfel încât trebuie să fie satisfăcută egalitatea:

sau:

Integrala din stânga nu are sens în analiza matematică obișnuită. Extinderea analizei matematice de la funcțiile obișnuite la funcțiile generalizate, permite atribuirea unui sens și acestei integrale. Calculele arată că:

Deci, valoare coeficientului C este:

Vectorii proprii ai operatorului impulsului se pot scrie atunci astfel:

Orice vector de undă poate fi descompus în baza vectorilor proprii ai impulsului, obținând:

unde am înlocuit coeficienții cp cu notația obișnuită în literatură . Această scriere a vectorilor de undă se numește descompunere Fourier a vectorilor de stare după vectorii proprii ai impulsului (se spune că funcția de stare este dată în reprezentarea impulsurilor).

**Operatorul momentului cinetic**

În general, problemele de mecanică cuantică se obțin din problemele de mecanică clasică procedând în felul următor: se consideră un sistem mecanic clasic. Acesta este descris de anumite mărimi mecanice. Fiecărei mărimi mecanice clasice i se asociază un operator specific astfel încât problema clasică este transformată în una cuantică. Dacă o mărime clasică este compusă (de exemplu este produsul sau suma a două mărimi), atunci operatorul cuantic al acesteia se obține înlocuind în formula mărimi clasice parametrii clasici cu operatorii specifici. Un caz particular al acestui mod de introducere a operatorilor cuantici este cazul momentului cinetic.

Fie un sistem mecanic format dintr-un singur punct material. Momentul cinetic al acesteia este, conform definiției clasice:

Introducând în locul variabilelor mecanice de poziție și impuls operatorii specifici, se obține operatorul momentului cinetic. Pentru a nu complica lucrurile, vom scrie doar componenta pe axa Oz a acestui operator:

Deoarece momentul cinetic este o mărime ce se folosește la studiul mișcării în jurul unui punct fix, sistemul de coordonate adecvat pentru studiul acesteia este sistemul de coordonate sferice. Așa cum știm, coordonatele sferice sunt . Din punct de vedere al aplicațiilor practice, este important nu atât operatorul momentului cinetic ci operatorul pătratului momentului cinetic. Acesta este notat cu . Considerând distanța față de punctul de rotație fixă, ecuația cu valori și vectori proprii a acestui operator este:

Funcțiile proprii ale acestui operator se numesc funcții sferice. Aparatul matematic necesar rezolvării acestei ecuații este foarte laborios. Având în vedere timpul alocat acestui curs și faptului că importante sunt în primul rând concluziile acestui calcul, nu vom insista asupra formei matematice a funcțiilor sferice ci doar asupra valorilor proprii posibile (spectrului pătratului momentului cinetic). Calculele arată că:

Numărul l este un număr de cuantificare și poate lua doar valori pozitive întregi sau semiîntregi. Pornind de la acest rezultat, se poate demonstra că componenta operatorului momentului cinetic pe o axă (de exemplu axa Oz) are valorile proprii date de relația:

unde numărul de cuantificare are valorile posibile:

adică 2l+1 valori.

**Relațiile de incertitudine ale lui Heisenberg**

Am constatat că pentru o particulă ce are funcția de undă Ψ, dacă se măsură mărimea λ, se pot obține seturile de valori λ1, λ2,..., λn cu probabilitățile p1 ,p2, p3,...,pn. Dacă, în urma măsurării, se realizează valoarea λi sistemul cuantic trece univoc în starea cuantică caracterizată de vectorul de stare Ψi. Să presupunem că după ce s-a făcut prima măsurare a mărimii λ se face o nouă măsurare a aceleiași mărimi. Ce rezultat se obține la a doua măsurare?

Ψ Ψi Ψi

λi λi

pi<1 pi=1

La prima măsurătoare, deoarece vectorul de stare nu este, în general, un vector propriu al observabilei măsurate, se pot obține mai multe valori ale lui λ, cu diferite probabilități determinate de forma concretă a vectorului de stare inițial. După ce s-a făcut prima măsurătoare, sistemul cuantic trece într-o stare cuantică descrisă vectorul propriu corespunzător valorii proprii ce s-a măsurat. La cea de a doua măsurare, deoarece vectorul de stare este un vector propriu al mărimii măsurate iei îi corespunde doar o valoare proprie (cea care a fost măsurată anterior). Deci rezultatul măsurării numărul doi este aceeași valoare proprie iar vectorul de stare rămâne nemodificat.

Să efectuăm acum succesiv două măsurători corespunzătoare la două mărimi fizice macroscopice diferite. Fie aceste mărimi α și β. Acestor mărimi le corespund observabilele și . În cazul în care sistemul cuantic intră cu starea Ψ, la măsurătoarea lui α se vor obține valorile α1, α2, ..., αn cu probabilitățile pα1, pα2,...., pαn. Dacă se face o măsurare a mărimii β asupra sistemului cuantic ce se află în aceeași stare cuantică Ψ, se obțin valorile β1, β2,..., βm cu probabilitățile pβ1, pβ2,...., pβm. Se pune problema dacă probabilitățile de apariție ale valorilor proprii ale celei de a doua măsurători depind de rezultatul primei măsurători.

Ψ Ψαi Ψβj

pαi p’βj

Există două situații: distribuția ,probabilităților rezultatelor celei de a doua măsurători nu depind de rezultatul primei măsurători sau distribuția rezultatelor celei de a doua măsurători depind de rezultatul primei măsurători.

În primul caz, rezultă că rezultatul măsurătorilor nu depinde de ordinea de efectuare a operațiilor de măsurare. Din acest motiv se spune că observabilele și sunt comutabile. În cel de al doilea caz, distribuția rezultatelor depinde de ordinea măsurătorilor și se spune că observabilele și nu sunt comutabile.

Să considerăm mărimea fizică α cu spectrul α1, α2, ..., αn cu probabilitățile de realizare pβ1, pβ2,...., pβm. Valoarea medie a acestei mărimi va fi:

Abaterea pătratică medie a rezultatelor experimentale în jurul valorii medii este, prin definiție:

În mod analog se pot defini valoare medie și abaterea pătratică medie și pentru mărimea fizică β.

Heisenberg a demonstrat că, pentru mărimile fizice necomutabile, nu se poate realiza o stare cuantică în care produsul abaterilor pătratice medii să scadă sub o anumită valoare limită. Valoarea limită a produsului abaterilor pătratice medii este dată de inegalitatea:

În cazul unor mărimi fizice comutabile, produsul abaterilor pătratice medii poate să tindă, pentru anumite stări cuantice, la zero.

Inegalitatea de mai sus se numește inegalitatea lui Heisenberg. Vom da câteva exemple de astfel de inegalități.

* Poziția pe o axă și componenta impulsului pe acea axă sunt variabile necomutabile:
* Unghiul de rotație și componenta normală a momentului cinetic pe lanul de rotație sunt variabile necomutabile:
* Deși timpului în mecanica cuantică nu i se poate asocia o observabilă (el este un simplu parametri în cazul mecanicii cuantice) se poate demonstra o rație de incertitudine între timp și energie asemănătoare cu cele de mai sus:

Poziția pe o axă și componenta impulsului pe o direcție perpendiculară pe aceasta sunt mărimi comutabile astfel încât se poate prepara o stare în care abaterile pătratice medii ale acestora să tindă amândouă către zero.

Relațiile de incertitudine ale lui Heisenberg ne arată că nu se poate realiza o stare cuantică în care parametrii măsurabili să aibă toți o singură valoare proprie (cu probabilitatea unu). Dacă s-ar putea realiza o astfel de stare, sistemul cuantic în acea stare ar fi identic cu un sistem mecanic clasic în care mărimile mecanice de stare sunt perfect determinate. Dintr-o astfel de stare, sistemul microscopic ar evolua determinist, ca și sistemele macroscopice. În felul acesta mecanica cuantică nu ar mai fi necesară, legile macroscopice putându-se aplica și în microcosmos. Relațiile de incertitudine ne arată însă că acest lucru nu este posibil și că nu există nicio posibilitate de a reduce mecanica cuantică la mecanica clasică (considerând-o doar o descriere incompletă a sistemului mecanic clasic, de exemplu).