

CURSUL 6

6.1 SPAȚIUL HILBERT

Abordarea spațiului funcțiilor de stare se face prin generalizarea rezultatelor obținute în cazul spațiilor vectoriale finit dimensionale. Este fundamentală pentru teoria cuantică analiza ecuației cu valori proprii pentru operatorii hermitici $\hat{a}$ care operează asupra funcțiilor ψ din spațiul Hilbert.

$$\hat{a}\Psi = a\psi \quad (6.1)$$

Această analiză presupune emiterea de enunțuri care să generalizeze constatările rezultate din analiza efectuată în cazul spațiilor finit dimensionale.

i. Valorile proprii ale unui operator hermitic $\hat{a}$ ce operează asupra funcțiilor $\psi(x)$ sunt valori reale și pot defini un *spectru discret*, un *spectru continuu* sau un *spectru combinat* alcătuit din porțiuni de spectru discret și porțiuni cu spectru continuu. Vom indica funcțiile proprii și valorile proprii aparținând spectrului discret cu un indice inferior n , care ia valori naturale, iar pe acelea ce țin de spectrul continuu cu indicele λ a cărei variație se presupune a fi continuă. Vom scrie deci:

- pentru spectrul discret $\hat{a}\psi_n = a_n\psi_n$, $n \in N$

- pentru spectrul continuu $\hat{a}\psi_\lambda = a_\lambda\psi_\lambda$, $\lambda \in R_+$

ii. Orice funcție Ψ normabilă poate fi scrisă ca o combinație liniară a funcțiilor proprii ψ_n și ψ_λ , iar această combinație liniară va presupune un termen în care se efectuează o integrare pe domeniul reprezentat de variabila continuă λ :

$$\Psi(x) = \sum_n \alpha_n \psi_n(x) + \int \alpha_\lambda \psi_\lambda(x) \overline{d\lambda} \quad (6.2)$$

Am notat cu $\overline{d\lambda}$ elementul de volum al domeniului de variație al variabilei continue λ , integrala extinzându-se de-a lungul întregului domeniu de variație al lui λ .

iii. Relațiile (5.55) permit calculul coeficienților α_n și α_λ prin relații analoage acestora.

$$\alpha_n = \langle \psi_n | \Psi \rangle = \int \psi_n^*(x) \Psi(x) \bar{d}x \quad (6.3)$$

$$\alpha_\lambda = \langle \psi_\lambda | \Psi \rangle = \int \psi_\lambda^*(x) \Psi(x) \bar{d}x \quad (6.4)$$

Ținând seama de (6.2), se obține pentru α_n :

$$\begin{aligned} \alpha_n &= \int \psi_n^*(x) \left\{ \sum_m \alpha_m \psi_m(x) + \int \alpha_\nu \psi_\nu(x) \bar{d}x \right\} \bar{d}x = \\ &= \sum_m \alpha_m \int \psi_n^*(x) \psi_m(x) \bar{d}x + \int c_\nu \bar{d}\nu \int \psi_n^*(x) \psi_\nu(x) \bar{d}x \end{aligned}$$

Rezultă,

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \int \psi_n^*(x) \psi_m(x) \bar{d}x = \delta_{nm} \quad (6.5)$$

și

$$\langle \psi_n | \psi_\nu \rangle = \int \psi_n^*(x) \psi_\nu(x) \bar{d}x = 0 \quad (6.6)$$

Prin introducerea relației (6.2) în (6.4) se obține

$$\langle \psi_\lambda | \psi_m \rangle = \int \psi_\lambda^*(x) \psi_m(x) \bar{d}x = 0 \quad (6.7)$$

relație care atestă ca și cea anterioară ortogonalitatea dintre funcțiile proprii ale spectrului continuu și acelea ale spectrului discret.

Relația (6.5) exprimă ortonormarea funcțiilor proprii ce aparțin spectrului discret. Notând

$$\alpha_{\lambda\nu} \equiv \int \psi_\lambda^*(x) \psi_\nu(x) \bar{d}x \quad (6.8)$$

expresia (6.4) devine echivalentă cu $\alpha_\lambda \equiv \int \alpha_{\lambda\nu} \alpha_\nu \bar{d}\nu$ care pentru a fi satisfăcută presupune ca

$$\int \psi_\lambda^*(x) \psi_\nu(x) \bar{d}x = \delta(\lambda - \nu) \quad (6.9)$$

$\delta(\lambda - \nu)$ fiind funcția δ a lui Dirac. Această relație exprimă ortonormarea funcțiilor proprii ale spectrului continuu și se numește **condiția de ortonormare generalizată**. Cum pentru $\lambda = \nu$, $\delta(\lambda - \nu) \rightarrow \infty$,

$$\int |\psi_\nu(x)|^2 \bar{d}x = \infty \quad (6.10)$$

Constatăm așadar, că funcțiile proprii aparținând spectrului continuu nu sunt normabile și nici nu se anulează pentru $x \rightarrow \infty$ în spațiul configurațiilor.

Pe de altă parte – deși nu aparțin spațiului stărilor – dezvoltarea (6.2) nu este posibilă dacă aceste funcții proprii **generalizate** nu sunt luate în calcul, întrucât în spațiul Hilbert funcțiile proprii ce definesc spectrul discret sunt insuficiente pentru a defini o bază.

iv. În sfârșit, pentru ca să fie posibil calculul coeficienților α_λ , produsul scalar între funcțiile nenormabile și cele normabile trebuie să poată fi definit, condiție care presupune ca pentru x tinzând la infinit, funcția proprie generalizată

$\psi_\lambda(\mathbf{x})$, corespunzătoare unei valori proprii λ din spectrul continuu, să rămână mărginită.

6.2 NOTAȚIILE *DIRAC*

Am stabilit într-o secțiune anterioară că orice vector de stare ψ poate fi definit în spațiul euclidian n -dimensional prin componentele sale în raport cu o anumită bază ortonormată $\{\psi_i\}_i$, motiv pentru care vom reprezenta vectorul ψ în baza $\{\psi_i\}_i$ prin componentele sale ordonate într-o matrice coloană:

$$\psi = \begin{Bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{Bmatrix} \quad (6.11)$$

Conjugatul hermitic ψ^+ al vectorului ψ va defini o matrice linie a componentelor sale:

$$\psi^+ = (\alpha_1^*, \alpha_2^*, \dots, \alpha_n^*) \quad (6.12)$$

În baza acestor relații se observă că

$$(\gamma\psi)^{+'} = \gamma^* \psi^+ \quad (6.13)$$

Prin introducerea notațiilor lui Dirac, se obține că

$$\psi \equiv |\psi\rangle, \psi^+ \equiv \langle\psi| \quad (6.14)$$

rezultând în virtutea relațiilor (6.11) și (6.12):

$$\langle\psi| = |\psi\rangle^+, |\psi\rangle = \langle\psi|^+ \quad (6.15)$$

Cele mai simple construcții ce se pot realiza cu aceste notații sunt de forma $|\psi\rangle; \langle\psi|; \langle\phi|\psi\rangle$ și $|\phi\rangle\langle\psi|$.

- vectorul $|\psi\rangle$ este un “ket” al spațiului euclidian n -dimensional;
- vectorul $\langle\psi|$ este un “bra” al spațiului vectorial conjugat;
- simbolul $\langle\phi|\psi\rangle$ reprezintă produsul $\phi^+ \psi$ mai precis, produsul scalar al acestor vectori care definește și norma vectorului ψ , de exemplu: $\|\psi\| = \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}$
- construcții de forma $|\phi\rangle\langle\psi|$ vom întâlni în expresii ce conțin dezvoltări ale vectorului ψ .

□ Vectorii bazelor spațiilor *bra* și *ket* îi vom nota cu $\langle 1|, \langle 2|, \dots, \langle n|$ pentru *spațiul bra* și $|1\rangle, |2\rangle, \dots, |n\rangle$ pentru *spațiul ket*.

□ **Condiția de ortonormare a bazei** se scrie

$$\langle j | k \rangle = \delta_{jk} \quad (6.16)$$

Descompunerile după vectorii proprii ai bazelor se scriu

$$|\psi\rangle = \sum_{j=1}^n \alpha_j |j\rangle = \sum_{j=1}^n |j\rangle \langle j | \psi \rangle$$

respectiv

$$\langle \psi | = \sum_{j=1}^n \alpha_j^* \langle j | = \sum_{j=1}^n \langle \psi | j \rangle \langle j |$$

□ În notațiile Dirac, operatorul $\hat{F}$ se scrie fără simbolul $\wedge$.

Astfel, condiția ca $\hat{F}$ să reprezinte un operator liniar se scrie acum

$$F(c_1 |\psi\rangle + c_2 |\phi\rangle) = c_1 (F|\psi\rangle) + c_2 (F|\phi\rangle)$$

Revenind la semnificația simbolului $|\phi\rangle \langle \psi|$ se observă că operând la dreapta cu **ket-ul** $|\chi\rangle$ se obține $|\phi\rangle \langle \psi | \chi \rangle$, în care $\langle \psi | \chi \rangle$ este un produs scalar, deci un număr, iar $|\phi\rangle \langle \psi | \chi \rangle$ este un ket proporțional cu $|\phi\rangle$. Analog, $\langle \chi | \phi \rangle \langle \psi |$ va fi un **bra** proporțional cu $\langle \psi |$. Așadar, simbolul $|\phi\rangle \langle \psi|$ este un operator liniar ce realizează o corespondență între vectorii de același tip.

□ O proprietate interesantă manifestă operatorul unitar I . Astfel dacă ψ este un vector propriu normat,

$$I|\psi\rangle = \sum_{j=1}^n |j\rangle \langle j | \psi \rangle = \sum_{j=1}^n |j\rangle \langle j | \quad (6.17)$$

Această relație se numește **condiția de completitudine** și conduce la:

$$\begin{aligned} \|\psi\|^2 &= \langle \psi | \psi \rangle = \langle \psi | I | \psi \rangle = \sum_{j=1}^n \langle \psi | j \rangle \langle j | \psi \rangle = \\ &= \sum_{j=1}^n \alpha_j^* \alpha_j = \sum_{j=1}^n |\alpha_j|^2 \end{aligned} \quad (6.18)$$

Pentru a obține **reprezentarea matriceală** presupunem vectorul $|\psi\rangle$ definit prin componentele sale $\alpha_j : \alpha_j = \langle j | \psi \rangle$. Aplicăm vectorului $|\psi\rangle$ operatorul hermitic F și obținem funcția $|\phi\rangle : |\phi\rangle = F|\psi\rangle$ sau, înmulțind ambii membrii cu $\langle j |$ și folosind

relația de completitudine (6.17), găsim:

$$\begin{aligned}\langle j|\psi\rangle &\equiv \varphi_j = \langle j|F|\psi\rangle = \langle j|FI|\psi\rangle \\ &= \sum_{k=1}^n \langle j|F|k\rangle \langle k|\psi\rangle = \sum_{k=1}^n f_{jk} \psi_k\end{aligned}$$

în care matricea $f_{jk} = \langle j|F|k\rangle$ este o matrice $n \times n$.

□ **Ecuția cu valori proprii** pentru operatorul $\hat{F}$ se scrie $F|\psi\rangle = f|\psi\rangle$

□ În sfârșit, **valoarea medie a operatorului hermitic $\hat{F}$** se notează $\langle F \rangle_\psi$:

$\langle F \rangle_\psi = \langle \psi|F|\psi\rangle$ în care $|\psi\rangle$ este vectorul propriu corespunzător valorii proprii f în ecuația cu valori proprii $F|\psi\rangle = f|\psi\rangle$ și deci $\langle F \rangle_\psi = f$.

6.3 DISTRIBUȚIA *DIRAC* (FUNCȚIA GENERALIZATĂ “*DELTA*”).

Teoria cuantică operează în spațiul Hilbert al funcțiilor de stare. Acest spațiu are dimensiunea infinită și – în consecință – aparatul matematic va presupune în mod necesar o construcție adecvată, în cadrul căreia apare și funcția “delta” și pe care matematicienii o identifică cu o distribuție. Pentru a simplifica expunerea, vom considera formal această distribuție ca pe o funcție $\delta(x)$ definită prin relațiile:

$$\delta(x) = \begin{cases} 0, & x \neq 0 \\ \infty, & x = 0 \end{cases} \quad (6.19)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1 \quad (6.20)$$

O definiție alternativă mai riguroasă consideră o funcție oarecare, nulă pe întreg domeniul de definiție, cu excepția unui interval mic Δx ce include și $x=0$. Dacă pe măsura restrângerii intervalului Δx funcția manifestă o astfel de creștere încât *aria de sub curba ce o reprezintă să rămână constant egală cu unitatea*, la limită această funcție va defini distribuția $\delta(x)$, numită **distribuția lui Dirac**.

O astfel de funcție manifestă o serie de **proprietăți** folosite curent în teoria cuantică:

▪ pentru orice funcție continuă $f(x)$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) f(x) dx = f(0) \quad (6.21)$$

relație evidentă ținând seama de definiția (6.19).

Sub o formă mai generală, se poate considera că pentru orice punct $x=a$ în

vecinătatea originii,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-a) f(x) dx = f(a) \quad (6.22)$$

se pot demonstra cu ușurință relațiile:

$$\delta(-x) = \delta(x) \quad (6.23)$$

$$x\delta(x) = 0 \quad (6.24)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta'(x) f(x) dx = -f'(0) \quad (6.25)$$

$$\delta'(-x) = -\delta'(x) \quad (6.26)$$

$$x\delta'(x) = -\delta(x) \quad (6.27)$$

în care s-a notat cu $\delta'(x)$ derivata în raport cu x .

- **Considerând dezvoltarea unei funcții $f(x)$ în integrală Fourier**

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(k) e^{ikx} dk \quad (6.28)$$

(6.26) în care s-a notat cu $\tilde{f}(k)$ transformata Fourier a acestei funcții

$$\tilde{f}(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx \quad (6.29)$$

rezultă și pentru $\delta(x)$ o dezvoltare în integrală Fourier:

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dk \quad (6.30)$$

din care se observă că $\tilde{\delta}(x) = \frac{1}{2\pi}$.

- În sfârșit, vom observa că

$$\int_{\alpha}^{\beta} f(x) \delta(x) dx = \begin{cases} 0 & \text{când intervalul } (\alpha, \beta) \text{ nu conține originea} \\ f(0) & \text{când acest interval conține originea} \end{cases}$$

6.4 REPREZENTAREA CUANTICĂ GENERALĂ

Soluționarea problemelor curente ale mecanicii cuantice presupune o trecere de la vectorii de stare abstracți $|\psi\rangle$ sau de la operatorii asociați variabilelor dinamice F la mulțimi de numere. Aceasta se poate realiza alegând în spațiul Hilbert o anumită bază ortonormată, prin intermediul căreia vom asocia vectorilor de stare

componentele acestora scrise în această bază, iar operatorilor, elementele lor de matrice. Bazele putând fi alese preferențial se vor obține corespunzător reprezentări cuantice diferite. Vom alege desigur baze alcătuite din vectorii proprii ai unui operator hermitic $\hat{F}$ asociat unei anumite observabile dinamice și vom vorbi despre **reprezentarea în coordonate** dacă alegem ca observabilă dinamică poziția x , despre **reprezentarea în impulsuri** când ne convine alegerea observabilei impuls p , sau despre **reprezentarea energetică** când ne raportăm variabilei dinamice energie.

Considerăm o anumită variabilă dinamică căreia i se asociază operatorul hermitic $\hat{F}$ și studiem ecuația cu valori proprii a acestui operator în baza ortonormată $\{\psi_i\}_i$, $F|f\rangle = f|f\rangle$.

Relațiile de ortogonalitate se scriu:

- pentru spectrul discret $\langle \psi_j | \psi_k \rangle = \delta_{jk} = \langle j | k \rangle$

- pentru spectrul continuu $\langle \psi_{\lambda'} | \psi_{\lambda''} \rangle = \delta(\lambda' - \lambda'') = \langle \lambda' | \lambda'' \rangle$

în care j și k sunt indici cu variație discretă, iar λ variază continuu.

Scriem și **relațiile de normare**,

- pentru spectrul discret:

$$\sum_i |i\rangle \langle i| = 1 = \sum_i \psi_i \psi_i^*$$

- pentru spectrul continuu:

$$\int_{\lambda} |\lambda\rangle \langle \lambda| d\lambda = \int_{\lambda} \psi_{\lambda} \psi_{\lambda}^* d\lambda = 1$$

Orice vector de stare $|\psi\rangle$ se poate descompune după vectorii bazei:

$$|\psi\rangle = \sum_i \alpha_i |\psi_i\rangle = \sum_i \alpha_i |i\rangle$$

sau

$$|\psi\rangle = \int_{\lambda} \alpha_{\lambda} |\lambda\rangle d\lambda = \int_{\lambda} \alpha_{\lambda} \psi_{\lambda} d\lambda$$

în ambele cazuri

$$\alpha_f = \langle f | \psi \rangle$$

Astfel vectorul de stare $|\psi\rangle$ în baza $\{\psi_i\}$ este definit în mod univoc de componentele sale α_i , λ în baza aleasă și se numește **funcție de undă a stării ψ în reprezentarea F sau în reprezentarea generală**.

Presupunem acum un operator arbitrar Q care realizează trecerea de la vectorul $|\psi\rangle$ la vectorul $|\varphi\rangle$, $|\varphi\rangle = Q|\psi\rangle$ și căruia în reprezentarea F i se asociază

matricea $Q_{f'f''} = \langle f' | Q | f'' \rangle$. Această matrice transformă componentele vectorului $|\psi\rangle$ în componentele vectorului $|\varphi\rangle$:

- în cazul spectrului discret $\beta_{f'} = \sum_f Q_{f'f} \alpha_f$

- în cazul spectrului continuu $\beta_{f'} = \int_f Q_{f'f} \alpha_f df$

Operatorul $\hat{F}$ se reprezintă în *baza proprie* alcătuită din *vectorii săi proprii* $\{\psi_f\}_f$, prin *matricea diagonală*

- pentru spectrul discret $F_{mn} = m \delta_{mn}$ și

- pentru spectrul continuu $F_{\lambda'\lambda''} = \lambda' \delta(\lambda' - \lambda'')$

motiv pentru care *reprezentarea* F este considerată ca fiind *acea reprezentare în care operatorul $\hat{F}$ este diagonal*.

Considerăm și ecuația cu valori proprii pentru operatorul hermitic $\hat{Q}$, $Q|q\rangle = q|q\rangle$ pe care o înmulțim la stânga cu $\langle m|$. Se obține în cazul spectrului discret

$$\langle m | Q | q \rangle \equiv \sum_n \langle m | Q | n \rangle \langle n | q \rangle = q \langle m | q \rangle \text{ echivalentă cu } \sum_n Q_{mn} q_n = q q_m.$$

În cazul spectrului continuu se obține analog, $\int_\lambda Q_{\lambda'\lambda''} q_{\lambda''} d\lambda'' = q q_{\lambda'}$.

Valoarea medie a observabilei Q în starea $|\psi\rangle$ în cazul spectrului discret va fi

$$\begin{aligned} \langle Q \rangle_\psi &= \langle \psi | Q | \psi \rangle = \sum_{m,n} \langle \psi | m \rangle \langle m | Q | n \rangle \langle n | \psi \rangle = \\ &= \sum_{m,n} \alpha_m^* Q_{mn} \alpha_n = \sum_{m,n} Q_{mn} \alpha_m^* \alpha_n \end{aligned}$$

iar în cazul spectrului continuu, $\langle Q \rangle_\psi = \int Q_{\lambda'\lambda''} \alpha_{\lambda'}^* \alpha_{\lambda''} d\lambda' d\lambda''$.

Aceste formule se simplifică în cazul când operatorul $\hat{Q}$ este însuși operatorul $\hat{F}$.

Se obțin mediile: $\langle F \rangle_\psi = \sum_i f |\alpha_i|^2$ pentru discret sau $\langle F \rangle_\psi = \int f |\alpha_\lambda|^2 d\lambda$ pentru continuu.

Probabilitatea ca la o măsurare a observabilei dinamice F , aflate în starea $|\psi\rangle$, să găsim valoarea f este $W_\psi(f) = |\langle f | \psi \rangle|^2 = |\alpha_f|^2$.

Astfel, probabilitatea ca la o măsurare a observabilei dinamice descrise de opera-

torul $\hat{Q}$ să găsim în starea $|\psi\rangle$ valoarea q , va fi

$$i) W_{\psi}(q) = |\langle q|\psi\rangle|^2 = \left| \sum_m \langle q|m\rangle \langle m|\psi\rangle \right|^2 = \left| \sum_m q_m^* \alpha_m \right|^2 \text{ în cazul spectrului discret sau}$$

$$ii) W_{\psi}(q) = \left| \int q_{\lambda}^* \alpha_{\lambda} d\lambda \right|^2 \text{ în cazul spectrului continuu.}$$

Se practică, în mod curent, trecerea de la o reprezentare la alta, cum ar fi de la reprezentarea F la reprezentarea G . Această trecere se realizează folosind relația de completitudine. Pentru a stabili relațiile de trecere vom admite că spectrul operatorului F este discret și folosim relațiile de transformare ale componentelor la schimbarea bazei. Obținem componentele γ_g funcției de undă $|\psi\rangle$ în baza alcătuită din vectorii proprii $|g\rangle$ ai operatorului

$$\hat{G} : \gamma_g = \langle g|\psi\rangle = \sum_f \langle g|f\rangle \langle f|\psi\rangle = \sum_f g_f^* \alpha_f.$$

Analog obținem matricea operatorului $\hat{Q}$ în reprezentarea G

$$\begin{aligned} Q_{g'g''} &= \langle g'|\hat{Q}|g''\rangle = \sum_{f',f''} \langle g'|f'\rangle \langle f'|\hat{Q}|f''\rangle \langle f''|g''\rangle = \\ &= \sum_{f',f''} g_{f'}^* g_{f''} Q_{f'f''} \end{aligned}$$

În același mod, se stabilesc formulele în cazul unui spectru continuu al operatorului $\hat{F}$. În concluzie,

$$\text{-în cazul spectrului discret } \gamma_g = \sum_f g_f^* \alpha_f \text{ și } Q_{g'g''} = \sum_{f',f''} g_{f'}^* g_{f''} Q_{f'f''}$$

$$\text{-în cazul spectrului continuu } \gamma_g = \int g_f^* \alpha_f df \text{ și } Q_{g'g''} = \int g_{f'}^* g_{f''} Q_{f'f''} df' df''$$

Rezultă că trecerea de la reprezentarea F la reprezentarea G presupune cunoașterea funcției de undă $g_f = \langle f|g\rangle$ în reprezentarea F a stării ce corespunde vectorului propriu al operatorului $\hat{G}$. În definitiv, se stabilesc relațiile:

$$\text{- pentru spectrul discret al operatorului } \hat{F} : \sum_{f'} G_{ff'} g_{f'} = g \cdot g_f$$

$$\text{- pentru spectrul continuu al operatorului } \hat{F} : \int G_{ff'} g_{f'} df' = g \cdot g_f$$

APLICAȚII

1. Reprezentarea – x sau reprezentarea în coordonate.

Particula liberă ce se deplasează în direcția axei Ox se poate găsi – în principiu – în orice punct al acestei axe.

Aceasta înseamnă că ecuația cu valori proprii a operatorului poziție $\hat{x}$ - pe care

în notațiile Dirac îl vom nota X -

$$X|x\rangle = x|x\rangle,$$

admite soluții pentru orice x real, generând astfel un spectru continuu al valorilor proprii, pentru care se scriu relațiile

$$\text{- de ortogonalitate: } \langle x' | x'' \rangle = \delta(x' - x'')$$

$$\text{- de normare: } \int |x\rangle \langle x| dx = I$$

Starea sistemului cuantic este descrisă în reprezentarea x de un set continuu de componente $\alpha_x = \langle x | \psi \rangle \equiv \alpha(x)$ care definesc funcția de undă ψ . Operatorului oarecare hermitic $\hat{F}$ ce descrie o observabilă dinamică i se asociază matricea cu elemente continue $F_{x' x''} = \langle x' | F | x'' \rangle$.

Schimbarea stării se obține cu formula

$$\beta(x) = \beta_x = \int F_{xx'} \alpha_{x'} dx' \equiv \int F_{xx'} \alpha(x') dx'$$

și dacă operatorul $\hat{F}$ este însuși operatorul coordonatelor $\hat{X}$, matricea acestuia este diagonală $X_{x' x''} = x' \delta(x' - x'')$.

Rezultă

$$\beta(x) = \int x \delta(x - x') \alpha(x') dx' = x \alpha(x)$$

O variabilă dinamică folosită în mod curent în mecanica cuantică este impulsul microparticulei al cărui operator în notație Dirac îl vom nota P în virtutea convenției făcute. Pentru a scrie matricea operatorului impuls $\hat{p}$ în reprezentarea- x vom folosi relația de comutare $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ sau scrisă matricial, $XP - PX = i\hbar I$.

Considerăm vectorii proprii $\langle x' |$ și $| x'' \rangle$ ai operatorului $\hat{x}$.

În baza acestei relații de comutare putem scrie:

$$\langle x' | XP | x'' \rangle - \langle x' | PX | x'' \rangle = i\hbar \langle x' | x'' \rangle$$

și folosind ecuația cu valori proprii a operatorului $\hat{x}$ și conjugata acesteia $\langle x | X = x | x \rangle$, ca și relația de ortogonalitate $\langle x' | x'' \rangle = \delta(x' - x'')$ se obține:

$$(x' - x'') \langle x' | P | x'' \rangle = i\hbar \delta(x' - x'')$$

Ținând seama de relația $x\delta'(x) = -\delta(x)$, ecuația algebrică $xf(x) = \delta(x)$ admite soluția $f(x) = -\delta'(x)$ astfel că $P_{x' x''} = -i\hbar \delta'(x' - x'')$.

Schimbarea stării presupune relația

$$\begin{aligned}\beta(x) &= \int P_{xx'} \alpha_{x'} dx' = -i\hbar \int \delta'(x - x') \alpha(x') dx' = \\ &= i\hbar \int \delta'(x' - x) \alpha(x') dx' = -i\hbar \frac{d\alpha(x)}{dx}\end{aligned}$$

Având în vedere proprietatea fundamentală a funcției generalizate $\delta(x)$, matricea operatorului impuls se mai poate scrie sub forma $P_{x'x''} = -i\hbar \delta(x' - x'') \frac{d}{dx'}$.

Ca și în mecanica clasică în care variabilele dinamice se pot exprima funcție de coordonate și impuls, și în mecanica cuantică, în baza principiului de corespondență, orice operator $\hat{F}$ asociat unei observabile dinamice se poate exprima în funcție de operatorii $\hat{x}$ și $\hat{p}$ (X și P în notație Dirac). Se observă că atât expresia matricii operatorului X , cât și aceea a matricii operatorului P , conțin $\delta(x' - x'')$. Vom presupune deci, că matricea oricărui operator $\hat{F}$ asociat unei observabile dinamice se va exprima prin relația

$$F_{x'x''} = \delta(x' - x'') \hat{F}$$

în care $\hat{F}$ include atât înmulțirea cu x' , impusă de reprezentarea- x , cât și derivarea în raport cu x' , cerută de reprezentarea- x a impulsului.

Considerând relația $\beta_{f'} = \int Q_{f'f} \alpha_f df$ și particularizând $Q_{f'f}$ la $F_{x'x''}$, se va obține, în baza proprietăților funcției δ , $\beta(x) = \hat{F}\alpha(x)$ astfel că se obțin expresiile $\hat{X} \equiv x$ și $\hat{p} \equiv -i\hbar \frac{d}{dx}$, adică expresiile pe care deja le-am postulat în secțiunile anterioare.

De asemenea, în baza relației $W_{\psi}(f) = |\alpha_f|^2 = |\langle f | \psi \rangle|^2$, probabilitatea de a găsi particula pe dreapta Ox în punctul de abscisă x rezultă a fi

$$W_{\psi}(x) = |\alpha(x)|^2 \text{ iar în baza relației } W_{\psi}(q) = \left| \int_{\lambda} q_{\lambda}^* \alpha_{\lambda} d\lambda \right|^2, \text{ probabilitatea ca în}$$

urma măsurării observabilei dinamice descrise de operatorul $\hat{F}$ să se obțină

$$\text{valoarea } f \text{ este } W_{\psi}(f) = \left| \int \alpha_f^*(x) \alpha(x) dx \right|^2.$$

2. Reprezentarea- p sau reprezentarea în spațiul impulsurilor

Există aplicații care recomandă reprezentarea în spațiul impulsurilor, ce folosește

drept bază vectorii proprii $|p\rangle$ ai operatorului impuls $\hat{p} : P|p\rangle = p|p\rangle$.

Valorile proprii p generează și în acest caz un spectru continuu, astfel că relațiile de ortogonalitate și normare, se scriu $\langle p' | p'' \rangle = \delta(p' - p'')$.

Stările vor fi descrise în reprezentarea- p de funcțiile de undă $\alpha_p = \langle p | \psi \rangle \equiv \tilde{\alpha}(p)$.

Modulul pătrat al acestor funcții reprezintă probabilitatea ca la o măsurare a impulsului particulei în starea α_p să rezulte valoarea p .

Un raționament asemănător cu cel prezentat anterior evidențiază în reprezentarea- p următoarele expresii ale operatorilor:

- pentru operatorul coordonatelor $\hat{x} = i\hbar \frac{d}{dp}$

- pentru operatorul impulsului $\hat{p} = p$

De asemenea, se obțin expresiile:

- pentru funcția de undă

$$\tilde{\alpha}(p) \equiv \langle p | \psi \rangle = \int \langle p | x \rangle \langle x | \psi \rangle dx = \int \alpha_p^*(x) \alpha(x) dx$$

- pentru elementele de matrice ale unui operator $\hat{F}$

$$\begin{aligned} F_{p' p''} &\equiv \langle p' | F | p'' \rangle = \int \langle p' | x' \rangle \langle x' | F | x'' \rangle \langle x'' | p'' \rangle dx' dx'' = \\ &= \int \alpha_{p'}^*(x') F_{x' x''} \alpha_{p''}(x'') dx' dx'' \end{aligned}$$

- pentru operatorul impulsului, $\hat{p} = p$.

3. Reprezentarea energetică

Vom considera acum ecuația Schrödinger (2.48) scrisă în notație Dirac:

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi(t)\rangle}{\partial t} = H |\Psi(t)\rangle$$

Această ecuație este verificată de o undă asociată de Broglie

$$\Psi(\vec{r}, t) = A e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p} \cdot \vec{r})} = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \cdot A e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}}$$

în care factorul $\psi_E \equiv A e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}}$ nu mai depinde de timp.

Transcriem această soluție în notație Dirac sub forma: $|\Psi_E(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \cdot |\psi_E\rangle$.

Atât vectorul $|\Psi_E(t)\rangle$, cât și vectorul $|\psi_E\rangle$ sunt vectori proprii ai hamiltonianului H cu valoarea proprie E .

$$H|\Psi_E(t)\rangle = E|\Psi_E(t)\rangle$$

$$H|\psi_E\rangle = E|\psi_E\rangle$$

În **reprezentarea energetică** se iau ca bază vectorii proprii $|\psi_E\rangle$. Vom considera că spectrul valorilor proprii ale hamiltonianului este discret și nedegenerat și pentru a simplifica scrierea vom nota $|n\rangle \equiv |\psi_{E_n}\rangle$ **vectorul propriu ce corespunde valorii proprii E_n** : $H|n\rangle = E_n|n\rangle$. Avem, de asemenea, în vedere ca baza aleasă să fie ortonormată $\langle m|n\rangle = \delta_{mn}$ și $\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$.

Starea sistemului în reprezentarea energetică va fi descrisă de componentele $\alpha_n(t) = \langle n|\Psi(t)\rangle$ care descriu funcția de undă a stării. Operatorilor asociați variabilelor dinamice le vor corespunde matrici $F_{mn} = \langle m|F|n\rangle$ care nu depind de timp.

Hamiltonianul va fi reprezentat de o matrice diagonală $H_{mn} = E_n\delta_{mn}$. Înmulțim scalar la stânga ecuația lui Schrödinger cu $\langle n|$, apoi ținem seama de condițiile de ortonormare și de formula care exprimă componentele α_n ale stării. Se obține

$$\text{ecuația } i\hbar \frac{d\alpha_n(t)}{dt} = E_n\alpha_n(t) \text{ ce admite soluția } \alpha_n(t) = \alpha_n(0)e^{-\frac{i}{\hbar}E_nt}.$$

Starea funcției de undă căreia îi corespunde un singur coeficient α_n nenul manifestă o energie determinată și se numește **staționară**, evoluția temporală a acesteia fiind definită de factorul exponențial.

Valoarea medie a variabilei dinamice F în starea $|\Psi(t)\rangle$ va fi:

$$\langle F \rangle_\Psi = \sum_{m,n} F_{mn} \alpha_m^*(t) \alpha_n(t)$$

și particularizată la media hamiltonianului evidențiază conservarea energiei

$$\langle H \rangle_\Psi = \sum_n E_n |\alpha_n(t)|^2 = \sum_n |\alpha_n(0)|^2$$

Probabilitatea ca la o măsurare a energiei sistemului aflat în starea $|\Psi(t)\rangle$ să se obțină valoarea E_n este dată de $W_\Psi(E_n) = |\alpha_n(t)|^2 = |\alpha_n(0)|^2$ relație ce evidențiază semnificația statistică a funcției de undă asociată stării microparticu -

lei. În anumite situații, vectorii bazei depind de timp. Pentru o dependență de forma $|n(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}|n\rangle$ elementele de matrice ale operatorului F vor fi și ele funcții de timp: $F_{mn}(t) = \langle m(t)|F|n(t)\rangle = F_{mn}e^{i\omega_{mn}t}$. În această relație, F_{mn} nu depind de timp, iar mărimea $\omega_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar}$ se numește **pulsație a tranziției** între stările $|m\rangle$ și $|n\rangle$. Se obțin următoarele expresii *pentru derivatele în raport cu timpul*

$$\frac{dF_{mn}(t)}{dt} = i\omega_{mn}F_{mn}(t)$$

$$\frac{d^2 F_{mn}(t)}{dt^2} = -\omega_{mn}^2 F_{mn}(t)$$

Trecerea de la *reprezentarea-x* la cea *energetică* se face în baza relației $\gamma_g = \int g_f^* \alpha_f df$, care se particularizează în cazul nostru rezultând ,

$$\alpha_n(t) = \int \langle n(x)|\Psi(x,t)\rangle dx$$

în care $|n(x)\rangle$ este *funcția proprie a hamiltonianului*, $H|n(x)\rangle = E_n|n(x)\rangle$.

Pentru matricea operatorului $\hat{F}$ se obține $F_{mn} = \int \langle m(x)|F_{xx'}|n(x')\rangle dx dx'$ și dacă ținem seama că $F_{xx'} = \delta(x - x')\hat{F}$ găsim în definitiv, $F_{mn} = \int \langle m(x)|\hat{F}|n(x)\rangle dx$.

6.5 PRINCIPIILE TEORIEI CUANTICE ȘI POSTULATELE INTERPRETATIVE

Teoria cuantică se dezvoltă ca teorie de sine stătătoare, în baza unor **postulate** și **principii fundamentale**, cu care de altfel ne-am familiarizat într-o măsură oarecare și pe care *le recapitulăm sintetic în această secțiune*, în scopul aplicării lor ulterioare:

□ În primul rând, amintim că la baza teoriei cuantice stă **principiul suprapunerii stărilor** care afirmă că *un sistem cuantic ce se poate afla într-un șir de stări descrise de vectorii proprii $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots, |\psi_i\rangle$ se poate afla și într-o stare rezultată prin suprapunerea acestora, descrisă de vectorul*

$$|\psi\rangle = \sum_i \alpha_i |\psi_i\rangle \quad (6.31)$$

cu specificația expresă că *suprapunerea stărilor rămâne invariantă la translațiile spațiale sau temporale ori prin rotațiile vectorilor de stare.*

□ Am amintit, de asemenea, **principiul de corespondență** în virtutea căruia *fiecare variabilă dinamică din mecanica clasică i se asociază o observabilă și între observabilele asociate există aceleași relații ca între variabilele dinamice corespunzătoare din mecanica clasică.*

În baza acestui principiu, vom considera că întrucât în mecanica clasică toate variabilele dinamice se pot exprima în funcție de coordonatele și impulsurile generalizate q și p și observabilele asociate variabilelor dinamice vor trebui să fie exprimabile prin intermediul operatorilor $\hat{p}$ și $\hat{q}$ corespunzători variabilelor p și q , numiți **operatori cuantici fundamentali** iar între acești operatori, în mod necesar, vor exista relațiile de comutare

$$\left[\hat{p}_k, \hat{q}_l \right] = \frac{\hbar}{i} \delta_{kl}; \quad \left[\hat{p}_k, \hat{p}_l \right] = 0; \quad \left[\hat{q}_k, \hat{q}_l \right] = 0$$

□ În cazul în care sistemul evoluează în timp, în cadrul unui proces determinat de cauze exterioare, nu se mai poate vorbi despre un anumit vector propriu $|\psi\rangle$, deoarece sistemul cuantic va urma o succesiune de stări și, în mod necesar, se

asociază sistemului o funcție de undă $\psi(\vec{r}, t)$, care va descrie această succesiune

în timp a stărilor sistemului. Presupunând că procesul este provocat de interacția sistemului cu un câmp de forțe, caracterizat de energia potențială $\hat{U}(\vec{r})$,

operatorul lui Hamilton se scrie $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \hat{U}(\vec{r})$.

Acest **principiu al evoluției în timp a funcției de undă** stabilește că evoluția în timp a funcției de undă $\psi(\vec{r}, t)$ este descrisă de ecuația

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi \quad (6.32)$$

numită **ecuația Schrödinger dependentă de timp**.

□ În sfârșit, mecanica cuantică fiind o teorie științifică va trebui să aibă la bază concepția deterministă, în virtutea căreia *cauza precede efectul*. **Determinismul cuantic** la nivel macroscopic diferă calitativ atât de **determinismul dinamic**, cât și de cel **probabilistic**, cu care ne confruntăm în fizica microscopică clasică.

Presupunem un sistem cuantic care la momentul t este descris de vectorul de stare $|\psi(t)\rangle$ și care evoluează neperturbat de prezența unor aparate de măsură, ajungând la momentul t' în starea $|\psi(t')\rangle$.

Exprimăm matematic această evoluție prin relația

$$|\psi(t')\rangle = \hat{T}(t', t) |\psi(t)\rangle \quad (6.33)$$

în care - în mod necesar, pentru a conserva *norma vectorilor și relațiile de suprapunere impuse de principiul de superpoziție* - operatorul $\hat{T}$ trebuie să fie un operator unitar, ca să transforme un vector de stare într-un vector de stare. Constatăm astfel că, *determinismul cuantic are atât un caracter dinamic, ce decurge din determinarea univocă a vectorului $|\psi(t')\rangle$, obținut ca un efect al cauzei $|\psi(t)\rangle$, cât și un caracter statistic, imprimat de semnificația pur statistică a vectorului de stare.* În legătură cu aceasta, trebuie subliniată încă o diferență între **determinismul statistic clasic** - în care determinarea cauzală presupune un ansamblu alcătuit dintr-un număr foarte mare de particule - și **determinismul cuantic** - în care conținutul statistic al relației cauzale caracterizează individual fiecare microparticulă.

Obținem astfel încă un principiu care fundamentează teoria cuantică și anume **principiul cauzalității**. Aceste principii nu sunt însă, suficiente pentru elaborarea teoriei cuantice, fiind necesară completarea lor cu postulatele interpretative, și stabilite anterior. *Reamintim aceste postulate:*

- Singurele rezultate posibile ale unei observații descrise de observabila $\hat{A}$ sunt valorile proprii ale acestei observabile.
- Valoarea medie a rezultatelor obținute în urma măsurării observabilei $\hat{A}$ pentru un sistem cuantic alcătuit dintr-un mare număr de microparticule identice, care se află într-o stare descrisă de vectorul de stare $|\psi\rangle$, este dată de relația

$$\langle a \rangle_\psi = \frac{\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (6.34)$$

În cazul vectorilor de stare normați la unitate, rezultă $\langle a \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$, iar dacă în urma măsurării sistemul trece într-una din stările sale proprii ψ_n , obținem

$$\langle a \rangle_\psi = \langle \psi_n | \hat{A} | \psi_n \rangle = \langle \psi_n | a_n \psi_n \rangle = a_n \langle \psi_n | \psi_n \rangle = a_n$$

expresie care arată că *valoarea măsurată a observabilei dinamice într-una din stările proprii ale sistemului cuantic este egală cu valoarea proprie a_n .*

- Considerând un sistem cuantic ce se poate găsi într-o succesiune de stări cuantice, descrise de vectorii proprii $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots, |\psi_k\rangle$ ai operatorului $\hat{A}$,

orice vector propriu $|\psi\rangle$ al acestui operator se poate scrie sub forma:

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^n \alpha_i |\psi_i\rangle.$$

În urma măsurării observabilei reprezentate prin operatorul $\hat{A}$, în starea $|\psi\rangle$, sistemul cuantic poate prezenta pentru această observabilă oricare dintre valorile proprii $a_1, a_2, \dots, a_k$ ale operatorului $\hat{A}$. Teoria cuantică nu poate răspunde întrebării: *care dintre aceste valori proprii se obține în urma măsurării*, însă stabilește că *probabilitatea ca în urma măsurării observabilei $\hat{A}$ să rezulte valoarea proprie a_i , este $|\alpha_i|^2$ astfel că, dacă sistemul în urma interacției cu aparatul de măsură a trecut în starea proprie $|\psi_i\rangle$ se va obține cu certitudine prin măsurare valoarea proprie a_i .*

6.6 EVOLUȚIA STĂRILOR SISTEMELOR CUANTICE

Ecuția (6.33), scrisă sub forma

$$|\psi(t)\rangle = \hat{T}(t - t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad (6.35)$$

evidențiază o familie de **operatori de evoluție cauzală** $\hat{T}(\Delta t)$, în care s-a notat Δt intervalul temporal între momentul inițial t_0 la care starea sistemului este descrisă de vectorul de stare $|\psi(t_0)\rangle$ și momentul curent t , imediat următor, la care starea instantanee este descrisă de vectorul $|\psi(t)\rangle$. Modificarea vectorului de stare poate fi considerată a se datora fie modificării în timp a vectorilor bazei, fie a operatorului asociat observabilei dinamice, fie ambelor situații. Deosebim astfel, trei moduri de a descrie evoluția stării sistemului cuantic.

6.6.1 REPRESENTAREA SCHRÖDINGER

Considerăm un sistem cuantic la momentul inițial t_0 în starea descrisă de $|\psi(t_0)\rangle$, în raport cu vectorii bazei $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots, |\psi_n\rangle$. Sistemul evoluează în cadrul unui proces astfel că la momentul ulterior $t_0 + \Delta t$ el se va afla într-o stare descrisă de vectorul $|\psi(t_0 + \Delta t)\rangle$, exprimat în aceeași bază. Dacă evoluția sistemului se produce în absența interacției sistemului cu aparatul de măsură, vom considera că vectorul propriu al sistemului s-a modificat, conform **ecuației de evoluție** (6.35), $|\psi(t_0 + \Delta t)\rangle = \hat{T}(\Delta t) |\psi(t_0)\rangle$ în care Δt este un interval infinitezimal ce permite să se considere pentru operatorul $\hat{T}(\Delta t)$ forma

$$\hat{T}(\Delta t) \equiv \hat{1} - i \hat{\omega} \Delta t \quad (6.36)$$

astfel că

$$\hat{T}^+(\Delta t) = \hat{1} + i\hat{\omega}^+ \Delta t \quad (6.37)$$

În aceste relații se presupune că $\hat{\omega}$ este un operator hermitic $\hat{\omega} = \hat{\omega}^+$.

Se obține astfel, calitatea de *operator unitar* pentru $\hat{T}(\Delta t)$:

$$\begin{aligned} \hat{T}^+(\Delta t) \cdot \hat{T}(\Delta t) &= (\hat{1} + i\hat{\omega}^+ \Delta t)(\hat{1} - i\hat{\omega} \Delta t) \cong \\ &\cong \hat{1} + i(\hat{\omega}^+ - \hat{\omega})\Delta t = \hat{1} \end{aligned}$$

Introducând operatorul hermitic $\hat{H} \equiv \hbar \hat{\omega}$, relația (6.35) se scrie

$$|\psi(t_0 + \Delta t)\rangle = \left(\hat{1} - \frac{i}{\hbar} \hat{H} \Delta t \right) |\psi(t_0)\rangle = |\psi(t_0)\rangle - \frac{i}{\hbar} \Delta t \hat{H} |\psi(t_0)\rangle$$

sau, echivalent

$$i\hbar \frac{|\psi(t_0 + \Delta t)\rangle - |\psi(t_0)\rangle}{\Delta t} = \hat{H} |\psi(t_0)\rangle$$

care la limită pentru $\Delta t \rightarrow 0$, ținând seama că t_0 a fost ales arbitrar, devine

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (6.38)$$

Operatorul $\hat{H}$ introdus prin relația $\hat{H} = \hbar \hat{\omega}$ descrie o observabilă dinamică ce va rezulta din considerațiile ce urmează: scriem ecuația cu valori proprii pentru

operatorul $\hat{\omega}$: $\hat{\omega}|\varphi_n\rangle = \omega_n|\varphi_n\rangle$. Evoluția stării proprii $|\varphi_n(t)\rangle$ va fi descrisă de (6.35): $|\varphi_n(t + \Delta t)\rangle = (\hat{1} - i\omega_n \Delta t)|\varphi_n(t)\rangle$.

Observăm că $e^{-i\omega_n \Delta t} \cong \hat{1} - i\omega_n \Delta t$ astfel că $|\varphi_n(t + \Delta t)\rangle = |\varphi_n(t)\rangle e^{-i\omega_n \Delta t}$.

S-a obținut soluția unei unde armonice plane *ce se propagă cu pulsația ω_n , pulsație ce se corelează cu energia E_n a stării staționare $|\varphi_n\rangle$* , prin *relația*

Einstein - de Broglie: $E_n = \hbar \omega_n$. Cum $\hat{H} = \hbar \hat{\omega}$, rezultă:

$$\hat{H}|\varphi_n\rangle = \hbar \hat{\omega}|\varphi_n\rangle = \hbar \omega_n|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle \quad (6.39)$$

Este evident așadar că operatorul $\hat{H}$ descrie energia sistemului identificându-se astfel cu operatorul hamiltonian al sistemului. Astfel, ecuația (2.228) devine

ecuația generală de mișcare a sistemelor cuantice, iar ecuația $\hat{H}|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle$ reprezintă *ecuația de mișcare pentru stările staționare*. O astfel de reprezentare, în care se consideră că vectorii de stare variază în timp, iar operatorii variabilelor dinamice se consideră invariabili, se numește **reprezentare Schrödinger**.

6.6.2 REPREZENTAREA HEISENBERG

În această reprezentare se consideră că în cursul evoluției stărilor, vectorii de stare rămân invariabili, în timp ce operatorii ce descriu variabile dinamice variază în timp. Considerăm ecuația (6.33) scrisă sub forma

$$|\psi(t)\rangle = \hat{T}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad (6.40)$$

în care $|\psi(t)\rangle$ reprezintă efectul cauzei $|\psi(t_0)\rangle$.

Transformarea $\hat{T}(t, t_0)$ poate fi concepută ca o succesiune de transformări unitare infinitezimale $\hat{T}(dt)$. Înlocuim (6.40) în (6.38) și obținem $i\hbar \frac{d\hat{T}(t, t_0)}{dt} |\psi(t_0)\rangle = \hat{H}\hat{T}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$.

Constatăm așadar că operatorul $\hat{T}(t, t_0)$ satisface ecuația

$$i\hbar \frac{d\hat{T}}{dt} = \hat{H}\hat{T} \quad (6.41)$$

Presupunem acum, că starea unui sistem cuantic la momentul t_0 este descrisă de vectorul de stare $|\psi(t_0)\rangle$, în raport cu baza $|\psi_i(t_0)\rangle$. **Reprezentarea Heisenberg** consideră că evoluția stărilor sistemului cuantic presupune evoluția vectorilor bazei care se transformă în conformitate cu ecuația de evoluție (6.40):

$$|\psi_n(t)\rangle = \hat{T}(t, t_0) |\psi_n(t_0)\rangle \quad (6.42)$$

O expresie asemănătoare se poate scrie și pentru vectorii bra

$$\langle \psi_m(t) | = \langle \psi_m(t_0) | \hat{T}^\dagger(t, t_0) \quad (6.43)$$

În baza acestor relații și ținând seama că operatorul evoluției este unitar, obținem:

$$\langle \psi_m(t) | \psi(t) \rangle = \langle \psi_m(t_0) | \hat{T}^\dagger \hat{T} | \psi(t_0) \rangle = \langle \psi_m(t_0) | \psi(t_0) \rangle$$

Această relație evidențiază faptul că vectorul de stare $|\psi(t)\rangle$ manifestă o mișcare în raport cu baza $|\psi_m(t_0)\rangle$ însă rămâne fix în raport cu baza $|\psi_m(t)\rangle$. Această constatare arată că descrierile Schrödinger și Heisenberg sunt echivalente. În reprezentarea Heisenberg însă se admite că operatorii asociați observabilelor dinamice evoluează în timp.

Astfel, în cazul unui operator $\hat{a}$ oarecare, elementele de matrice ale acestui operator în baza $|\psi_m(t_0)\rangle$ se scriu $\langle \psi_m(t_0) | \hat{a} | \psi_n(t_0) \rangle$, iar în baza $|\psi_m(t)\rangle$ (la momentul imediat următor t) se scriu

$$\langle \psi_m(t) | \hat{a} | \psi_n(t) \rangle = \langle \psi_m(t_0) | \hat{T}^\dagger \hat{a} \hat{T} | \psi_n(t_0) \rangle$$

rezultând expresia evoluției în timp a operatorului $\hat{a}(t)$:

$$\hat{a}(t) = \hat{T}^+(t, t_0) \hat{a}(t_0) \hat{T}(t, t_0) \quad (6.44)$$

Derivăm această expresie în raport cu timpul și obținem:

$$\frac{d}{dt} \hat{a}(t) = \frac{d \hat{T}^+}{dt} \hat{a}(t_0) \hat{T} + \hat{T}^+ \hat{a}(t_0) \frac{d \hat{T}}{dt}$$

Ținem seama de (2.231) și de ecuația conjugată a acesteia.

Se obține:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{a}(t) &= \frac{i}{\hbar} \left(\hat{T}^+ \hat{H}(t_0) \hat{a}(t_0) \hat{T} - \hat{T}^+ \hat{a}(t_0) \hat{H}(t_0) \hat{T} \right) = \\ &= \frac{i}{\hbar} \left(\hat{T}^+ \hat{H}(t_0) \hat{T} \hat{T}^+ \hat{a}(t_0) \hat{T} - \hat{T}^+ \hat{a}(t_0) \hat{T} \hat{T}^+ \hat{H}(t_0) \hat{T} \right) \end{aligned} \quad (6.45)$$

În baza relației (6.44), observăm că $\hat{T}^+ \hat{H}(t_0) \hat{T} = \hat{H}(t)$ și (6.45) devine

$$\frac{d}{dt} \hat{a}(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}(t), \hat{a}(t)] \quad (6.46)$$

ecuație cunoscută ca *ecuația de mișcare a lui Heisenberg*.

6.6.3 FORMALISMUL DE INTERACȚIE

În cadrul acestei noi descrieri se presupune că *atât vectorii de stare, cât și operatorii sunt variabili în timp*. Formalismul de interacție se folosește în cazul când hamiltonianul $\hat{H}$ al sistemului se poate scrie ca o sumă între hamiltonianul neperturbat $\hat{H}_0$, care nu depinde explicit de timp, și hamiltonianul $\hat{H}_1$, ce exprimă perturbația $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$. Se presupune că $H_1 \ll H_0$, adică *energia transferată sistemului neperturbat este mică în raport cu energia totală a acestuia în starea neperturbată*. Vom nota cu $\hat{T}_I$ operatorul unitar al evoluției de interacție și cu $|\psi_I(t)\rangle$ și $\hat{a}_I(t)$ vectorii de stare, respectiv operatorii din descrierea de interacție. Aceștia verifică relațiile:

$$|\psi_I(t)\rangle = \hat{T}_I(t_0, t) |\psi(t)\rangle \quad (6.47)$$

$$\hat{a}_I(t) = \hat{T}_I(t_0, t) \hat{a} \hat{T}_I^{-1}(t_0, t) \quad (6.48)$$

Prin perturbarea sistemului, *vectorul de stare al stării neperturbate devine funcție de undă ce descrie evoluția stării neperturbate în conformitate cu ecuația lui*

Schrödinger (6.38):

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = (\hat{H}_0 + \hat{H}_I)|\psi(t)\rangle \quad (6.49)$$

Derivăm (6.47) și obținem: $\frac{d|\psi_I(t)\rangle}{dt} = \frac{\partial \hat{T}_I}{\partial t}|\psi(t)\rangle + \hat{T}_I \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t}$

Cum operatorul $\hat{T}_I$ este unitar, ecuația (6.47) permite să scriem:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \hat{T}_I^{-1}|\psi_I(t)\rangle \\ \hat{T}_I \hat{H}_I |\psi(t)\rangle &= \hat{T}_I \hat{H}_I \hat{T}_I^{-1}|\psi_I(t)\rangle \end{aligned}$$

și punând $\hat{H}_{II} \equiv \hat{T}_I \hat{H}_I \hat{T}_I^{-1}$ rezultă:

$$i\hbar \frac{d|\psi_I(t)\rangle}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}_{II} |\psi_I(t)\rangle \quad (6.50)$$

Folosind (6.48) găsim prin derivare

$$\frac{d\hat{a}_I}{dt} = \frac{\partial \hat{T}_I}{\partial t} \hat{a} \hat{T}_I^{-1} + \hat{T}_I \frac{\partial \hat{a}}{\partial t} \hat{T}_I^{-1} + \hat{T}_I \hat{a} \frac{\partial \hat{T}_I^{-1}}{\partial t}$$

și punând $\hat{H}_{0I} = \hat{T}_I \hat{H}_0 \hat{T}_I^{-1}$, ecuația devine

$$\frac{d\hat{a}_I(t)}{dt} = \frac{\partial \hat{a}_I(t)}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \left[\hat{H}_{0I}, \hat{a}_I \right] \quad (6.51)$$

Și acest formalism de reprezentare este echivalent cu reprezentările Schrödinger și Heisenberg. Fiecare dintre cele trei formalisme de reprezentare a mecanicii cuantice își conține propria justificare. Astfel:

- *Formalismul Schrödinger* se pretează cel mai bine la descrierea stării sistemului cuantic și la interpretarea evoluției stărilor cuantice;

- *Formalismul Heisenberg* – echivalent cu formalismul Schrödinger – reușește să obțină fizica clasică printr-un proces de trecere la limită a fizicii cuantice. Această operație nu se poate efectua în cadrul formalismului Schrödinger, deoarece unele mărimi cuantice, cum ar fi vectorii de stare, nu au limită clasică;

- *Formalismul de interacție* – echivalent cu celelalte două – este folosit mai ales în teoria cuantică a câmpului, adaptându-se cu ușurință calculului cu perturbații.

6.7 TRANSFORMĂRI DE COORDONATE

Omogenitatea și izotropia spațiului, precum și uniformitatea timpului, presupun invarianța anumitor mărimi fizice față de anumite transformări ale coordonatelor,

cum ar fi *translațiile spațiale, temporale sau rotațiile*. Privite ca observabile dinamice, acestor operații li se asociază în mecanica cuantică operatorii care verifică ecuații de evoluție de forma (6.35), obținându-se astfel o metodologie de abordare proprie mecanicii cuantice.

6.7.1 OPERATORUL TRANSLAȚIEI

Omogenitatea spațiului presupune echivalența tuturor pozițiilor din spațiu, în timp ce izotropia implică echivalența tuturor direcțiilor. Aceasta înseamnă că anumite mărimi fizice ce manifestă proprietatea de conservare în timp sau invarianță spațială nu trebuie să fie influențate de o translație a aparatului de măsură pe o distanță Δq . Vom nota cu $\hat{D}$ operatorul unitar asociat translației aparatului de măsură. Acest operator aplicat vectorului de stare $|q\rangle$ va defini o nouă stare $|q + \Delta q\rangle$ în conformitate cu ecuația

$$|q + \Delta q\rangle = \hat{D}|q\rangle \quad (6.52)$$

Dacă $\hat{p}$ reprezintă *operatorul impulsului generalizat, conjugat canonic coordonatei generalizate q* , se poate adopta pentru $\hat{D}$ forma:

$$\hat{D} = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{p} \Delta q} \quad (6.53)$$

Acest operator fiind funcție de $\hat{p}$, satisface relația de comutare

$$[\hat{D}, \hat{q}] = \frac{\hbar}{i} \frac{d\hat{D}}{d\hat{p}} = -\Delta q \cdot \hat{D} \quad (6.54)$$

(6.54) echivalentă cu $\hat{q}\hat{D} = \hat{D}(\hat{q} + \Delta\hat{q})$.

Înmulțim la stânga ambii membrii ai acestei relații cu $\hat{D}^+$ și ținem seama că $\hat{D}^+ \hat{D} = \hat{I}$.

Se obține

$$\hat{D}^+ \hat{q} \hat{D} = \hat{q} + \Delta\hat{q} \quad (6.55)$$

Această relație arată că *operatorul $\hat{q} + \Delta\hat{q}$ se obține printr-o transformare unitară, care aplicată stării $|q\rangle$ va genera starea $|q + \Delta q\rangle$, astfel că forma adoptată (6.53) pentru $\hat{D}$ corespunde evoluției dictate de (6.52). În cazul când Δq este foarte mic,*

$$\hat{D} = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{p} \Delta q} \approx \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \hat{p} \Delta q \quad (6.56)$$

relație asemănătoare cu (6.56) în care operatorul unitar $\hat{T}(\Delta t)$ realizează o *translație în timp*.

6.7.2 OPERATORUL ROTAȚIEI

Transformarea dictată de relațiile

$$x' = x \cos \theta + y \sin \theta$$

$$y' = -x \sin \theta + y \cos \theta$$

definiște o rotație cu un unghi θ în planul (xOy) .

Dacă în particular unghiul $\theta = \Delta\alpha$ este foarte mic,

$$x' = x + y\Delta\alpha$$

$$y' = -x\Delta\alpha + y$$

(6.57)

Aceste relații arată că o rotație infinitesimală este echivalentă cu două translații: una cu cantitatea $y\Delta\alpha$, cealaltă cu $-x\Delta\alpha$.

Presupunem o particulă aflată în starea $|\psi(\theta)\rangle$ supusă măsurării. Rotind aparatul de măsură cu un unghi infinitesimal $\Delta\alpha$ în jurul axei Oz , starea particulei indicată de aparatul de măsură va fi descrisă de $|\psi(\Delta\alpha)\rangle$.

Vom considera că rotația aparatului a presupus un operator unitar de rotație $\hat{R}(\Delta\alpha)$

$$|\psi(\Delta\alpha)\rangle = \hat{R}(\Delta\alpha)|\psi(\theta)\rangle \quad (6.58)$$

Pe de altă parte, efectul operatorului $\hat{R}(\Delta\alpha)$ asupra vectorului de stare $|\psi(x, y)\rangle$ se traduce prin două translații infinitesimale, descrise de operatorii de translație

$$\hat{D}_x = \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \hat{p}_x \hat{y} \Delta\alpha \text{ și } \hat{D}_y = \hat{I} + \frac{i}{\hbar} \hat{p}_y \hat{x} \Delta\alpha$$

aplicați succesiv vectorului $|\psi(x, y)\rangle$ pentru a-l mișca în starea rotită $|\psi(x + y\Delta\alpha, y - x\Delta\alpha)\rangle$. Rezultă

$$\begin{aligned} \hat{R}(\Delta\alpha) &= \hat{D}_x \hat{D}_y = \left(\hat{I} - \frac{i}{\hbar} \hat{p}_x \hat{y} \Delta\alpha \right) \left(\hat{I} + \frac{i}{\hbar} \hat{p}_y \hat{x} \Delta\alpha \right) \approx \\ &\approx \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \left(\hat{x} \hat{p}_y - \hat{y} \hat{p}_x \right) \Delta\alpha = \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \hat{L}_z \end{aligned} \quad (6.59)$$

în care s-a notat cu $\hat{L}_z = \hat{x} \hat{p}_y - \hat{y} \hat{p}_x$. Operatorul $\hat{L}_z$ este un operator hermitic și descrie proiecția momentului cinetic pe direcția z . Hermiticitatea acestui operator conferă operatorului $\hat{R}(\Delta\alpha)$ caracterul de operator unitar. Rotația de unghi finit θ poate fi exprimată așadar de operatorul

$$\hat{R}(\theta) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{L}_z \theta} \quad (6.60)$$

6.7.3 INVERSIUNEA AXELOR

Schimbarea semnului tuturor coordonatelor se numește **inversiune**. Această opera-

ție este descrisă de *operatorul paritate* $\hat{G}$. Vom observa că *aplicând de două ori operatorul $\hat{G}$ unei anumite stări descrise de $|x, y, z\rangle$ se obține aceeași stare.*

Ecuția cu valori proprii $\hat{G}|x, y, z\rangle = g|x, y, z\rangle$ arată că

$$\hat{G}^2|x, y, z\rangle = g^2|x, y, z\rangle = |x, y, z\rangle$$

din care deducem $g^2 = 1$. Stările caracterizate de valoarea proprie $g = 1$ se numesc *pare*, iar acelea descrise de valoarea proprie $g = -1$ se numesc *stări impare*.