Siirtyminen klassisesta mekaniikasta kvanttimekaniikkaan

Essi Maaranen
LuK-tutkielma
Matemaattisten ja fysikaalisten tieteiden tutkinto-ohjelma
Luonnontieteellinen tiedekunta
Oulun yliopisto
Toukokuu 2022

Tiivistelmä

Kvanttimekaniikka kehitettiin kuvaamaan niitä mikroskooppisia ilmiöitä, joita ei kyetty klassisen mekaniikan puitteissa selittämään. Tässä tutkielmassa klassisen mekaniikan formalismeista rajaudutaan käsittelemään keskenään ekvivalentteiksi osoitettavia Newtonin, Lagrangen sekä Hamiltonin mekaniikkaa. Näistä formalismeista Hamiltonin mekaniikkaan keskitytään eniten, sillä Hamiltonin funktiolla ja Poissonin sulkusuureilla esitetyllä Hamiltonin mekaniikan liikeyhtälöllä on selkeät vastineet kvanttimekaniikan formalismeissa.

Kvanttimekaniikan formalismeista puolestaan käsitellään keskenään ekvivalentteiksi osoitettavia Heisenbergin kuvaa sekä Schrödingerin kuvaa. Heisenbergin kuvan liikeyhtälö saadaan Poissonin sulkusuureilla ilmaistusta Hamiltonin mekaniikan liikeyhtälöstä korvaamalla siinä esiintyvä Poissonin sulkusuure kommutaattorilla sekä korvaamalla liikeyhtälössä esiintyvät funktiot kvanttimekaanisilla operaattoreilla. Schrödingerin kuvan yhtälöiden kehittämisessä oleellista on Hamiltonin operaattorin muodostaminen klassisen mekaniikan Hamiltonin funktiosta. Nämä kaksi formalismia voidaan osoittaa keskenään ekvivalenteiksi hyödyntämällä aikaevoluutiooperaattoria. Tällöin formalismien aikariippuvuuksia voidaan muokata, jolloin on mahdollista osoittaa, että molemmat formalismit antavat operaattoreille saman odotusarvon.

Sisältö

1 Johdanto

Klassinen mekaniikka ja erityisesti Newtonin lait ovat kaikille jo yläasteelta tuttu tapa kuvata arkipäiväisiä ilmiöitä fysikaalisesti. Erityisesti Newtonin toinen laki $\boldsymbol{F} = m\boldsymbol{a}$, jossa $\boldsymbol{F}$ on voima, m on massa ja $\boldsymbol{a}$ on kiihtyvyys, on kaikille tuttu [1]. Kuitenkin muut klassisen mekaniikan formalismit, kuten Hamiltonin mekaniikka, ovat suurimmalle osalle tuntemattomia, koska niihin perehtyminen ei ole monille tarpeellista. Klassisen mekaniikan avulla on mahdollista fysikaalisesti käsitellä arkisia tilanteita, kuten törmäyksiä, mutta sen avulla voidaan myös kuvailla kohtuullisissa määrin planeettojen liikkeitä [1]. Kuitenkaan klassinen mekaniikka ei sovellu muun muassa mikroskooppisten ilmiöiden fysikaaliseen käsittelyyn. Tämä ongelma ilmeni 1900-luvun alussa, kun klassisen mekaniikan teorian perusteella ei kyetty selittämään esimerkiksi mustan kappaleen säteilyä tai valosähköistä ilmiötä. [2]

Uusi fysiikan osa-alue eli kvanttimekaniikka kehittyi kuvaamaan juuri näitä mikroskooppisia ilmiöitä. Kvanttimekaniikka eroaa huomattavasti klassisesta mekaniikasta, sillä kvanttimekaniikka pohjautuu ajatukseen tilojen superpositioista, jotka säilyvät ajassa. Kvanttimekaniikassa on myös epävarmuusperiaatteita, joita ei löydy klassisesta mekaniikasta. [2]

Moni fysiikasta edes vähän kiinnostunut on törmännyt kvanttimekaniikasta ainakin superpositioperiaatteeseen sekä paikan ja liikemäärän epätarkkuusperiaatteeseen erilaisten vitsien tai ajatusleikkien muodossa. Useat tietävät Erwin Schrödingerin kehittelemän ajatusleikin laatikossa olevasta kissasta, joka on sekä elossa että kuollut, kunnes laatikon kansi avataan ja katsotaan, onko kissa elossa. Tämä ajatusleikki siis kuvastaa kvanttimekaanista ajatusta tilojen superpositioista, mutta on kaikille käsitettävissä. [3] Kuitenkaan kvanttimekaniikan teoriat eivät ole kovinkaan yleisesti tunnettuja, mikä on täysin ymmärrettävää, sillä kvanttimekaniikkaan tutustutaan tarkemmin vasta yliopistossa.

Tämän tutkielman tarkoituksena on kirjallisuuteen pohjautuen esittää, miten klassisen mekaniikan liikeyhtälöistä päädytään kvanttimekaniikassa käytettäviin liikeyhtälöihin. Jotta tämä saavutettaisiin, alkaa tutkielma klassisen mekaniikan esittelyllä. Klassisesta mekaniikasta käydään ensin läpi lukijoille tutuin formalismi eli Newtonin mekaniikka, jonka jälkeen edetään Lagrangen mekaniikkaan sekä Hamiltonin mekaniikkaan. Hamiltonin mekaniikka on näistä oleellisin siirryttäessä kvanttimekaniikkaan, sillä kyseisessä formalismissa tärkeä Hamiltonin funktio on analoginen kvanttimekaniikan Hamiltonin operaattorin kanssa. Klassista mekaniikkaa käsittelevän kappaleen lopussa todetaan vielä esitetyt formalismit ekvivalenteiksi. Kvanttimekaniikkaan siirryttäessä aloitetaan Heisenbergin formalismista. Tämän yhteydessä käsitellään teoriaa kommutaattoreista ja niiden ominaisuuksista, jonka jälkeen esitetään Heisenbergin kuvan liikeyhtälö. Schrödingerin kuvaan edetessä käsitellään tarkemmin kvanttimekaanisia operaattoreita ja niiden ominaisuuksia, jotka ovat tämän tutkielman kannalta tärkeitä. Tämän jälkeen käydään läpi Hamiltonin operaattorin muodostaminen ja esitetään Schrödingerin liikeyhtälö. Kuten klassisenkin mekaniikan tapauksessa, kappaleen lopussa todetaan nämä formalismit keskenään ekvivalenteiksi.

Tämän tutkielman päälähteinä toimivat lähteet [2, 4, 5] sekä [6]. Erityisesti Thunebergin luentomoniste *Analyyttinen mekaniikka* [4] on toiminut kattavana lähteenä sekä klassisesta mekaniikasta että kvanttimekaniikan formalismeista kerrottaessa. Muut päälähteistä ovat toimineet tämän luentomonisteen teoriaa syventävinä lähteinä. Fetterin ja Waleckan kirja *Theoretical Mechanics of Particles and Continua* [5] on toiminut syventävänä lähteenä erityisesti Lagrangen ja Hamiltonin mekaniikasta kerrottaessa sekä Heisenbergin kuvan käsittelyssä. Puolestaan Mathurin ja Singhin kirja *Concepts in Quantum Mechanics* [2] sekä Messiahn kirja *Quantum Mechanics* [6] ovat toimineet lähteinä koko kvanttimekaniikkaa käsittelevässä osuudessa.

2 Klassisen mekaniikan formalismit

Klassista mekaniikkaa hyödynnetään kuvaamaan makroskooppisia systeemejä, kuten erilaisia putoamisia ja törmäyksiä. Sillä voidaan myös kohtuullisen hyvin käsitellä esimerkiksi planeettojen liikettä, mutta se ei sovellu kuvaamaan mikroskooppisia systeemejä tai kappaleita, joiden nopeus lähenee valonnopeutta. [1]

Klassisessa mekaniikassa voidaan hyödyntää eri formalismeja, joita ovat muun muassa Newtonin mekaniikka, Lagrangen mekaniikka sekä Hamiltonin mekaniikka. Useampi eri formalismi voi mahdollistaa systeemien yksinkertaisemman käsittelyn, sillä esimerkiksi Lagrangen mekaniikalla voi yksinkertaisemmin käsitellä systeemejä, joihin vaikuttavat voimat ovat liian monimutkaisia Newtonin mekaniikalla käsitelttäväksi. Eri formalismeilla on myös joitakin rajoituksia, joten tietyllä formalismilla voi olla mahdotonta käsitellä tietynlaista systeemiä. Esimerkiksi Lagrangen mekaniikka ei sovellu kuvaamaan systeemejä, jotka eivät ole konservatiivisia [4] ja Newtonin mekaniikan käyttäminen vaatii sen, että kaikki kappaleeseen vaikuttavat voimat tunnetaan.

2.1 Newtonin mekaniikka

Newtonin mekaniikassa Newtonin lait ovat keskeisessä asemassa, sillä näiden lakien avulla määritetään voimat, jotka vaikuttavat tarkasteltavaan systeemiin. Newtonin ensimmäinen laki ilmaisee, että kappale, johon ei vaikuta mikään voima, jatkaa liikettä tasaisella nopeudella tai pysyy levossa. Newtonin toisen lain mukaan kappaleeseen vaikuttava voima muuttaa kappaleen liikemäärää. Newtonin toinen laki voidaan siis ilmaista kaavana

$$\boldsymbol{F} = \dot{\boldsymbol{p}} = m\ddot{\boldsymbol{x}}, \tag{1}$$

jossa $\boldsymbol{F}$ on voima, $\boldsymbol{p}$ on liikemäärä, t on aika, m on massa ja $\boldsymbol{x}$ on sijainti. Tämän lisäksi tummennettu merkki tarkoittaa kyseessä olevan vektori ja pisteillä vektorin yläpuolella tarkoitetaan aikaderivaattoja siten, että pisteiden lukumäärä ilmaisee monesko aikaderivaatta on kyseessä. Newtonin kolmannen lain mukaan jokaisella voimalla on yhtä suuri, mutta vastakkaismerkkinen vastavoima. Tämän lain voi ilmaista matemaattisesti muodossa

$$\boldsymbol{F}_{12} = -\boldsymbol{F}_{21}, \tag{2}$$

jonka alaindeksistä ilmenee kumpi kappale kohdistaa voiman kumpaan kappaleeseen siten, että ensimmäinen numeroista ilmaisee kumpi kappale kohdistaa voiman ja toinen numeroista ilmaisee kappaleen, johon voima kohdistuu. Pelkästään Newtonin lakien avulla on mahdollista käsitellä joitakin klassisen mekaniikan systeemejä, mutta monesti näiden käsittely helpottuu hyödyntämällä säilymislakeja, kuten energian tai liikemäärän säilymislakia. [4, 5]

2.2 Lagrangen mekaniikka

Siirryttäessä Newtonin mekaniikasta Lagrangen mekaniikkaan täytyy tehdä muutos siihen, miten paikkaa ilmaistaan. Newtonin mekaniikassa tähän käytetään paikkavektoreita $\boldsymbol{x}_k$, kun taas Lagrangen mekaniikassa se tehdään yleistetyillä koordinaateilla q_i. Alaindeksillä i tarkoitetaan Lagrangen mekaniikan yhteydessä systeemin vapausasteita, joten $i = 1,2,\ldots,3N$ systeemille, jossa on N kappaletta hiukkasia. Alaindeksillä k tarkoitetaan Newtonin mekaniikan systeemin vapausasteita eli $k = 1,2,\ldots,N$, kun systeemissä on N kappaletta hiukkasia. [4]

Lagrangen mekaniikassa tärkeä funktio on Lagrangen funktio

$$L = T - V \tag{3}$$

jossa T on kineettinen energia ja V on potentiaalienergia. Lagrangen funktiossa esiintyvä kineettinen energia T määritellään jokaisen yksittäisen hiukkasen kineettisen energian summana seuraavan kaavan mukaisesti

$$T = \sum_i \frac{1}{2} m_i \dot{x}_i^2, \tag{4}$$

jossa m on hiukkasen massa ja $\dot{x}$ on hiukkasen nopeus. Yleisessä muodossa Lagrangen funktio voidaan ilmaista yleistettyjen koordinaattien q_i, yleistettyjen nopeuksien $\dot{q}_i$ sekä ajan t funktiona. Jos halutaan käsitellä klassisen mekaniikan systeemiä Lagrangen mekaniikkaa hyödyntäen, kyseiselle systeemille on pakko pystyä ilmaisemaan Lagrangen funktio kaavan (3) muodossa. [4, 5]

Lagrangen liikeyhtälöksi konservatiivisille systeemeille saadaan [4]

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0, \tag{5}$$

jonka tarkempi johtaminen tullaan käsittelemään kappaleessa 2.4.

2.3 Hamiltonin mekaniikka

Siirryttäessä Lagrangen mekaniikasta Hamiltonin mekaniikkaan yleistetty nopeus $\dot{q}_i$ korvataan kanonisella liikemäärällä p_i, joka määritellään seuraavan kaavan mukaisesti

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}, \tag{6}$$

jossa L on Lagrangen funktio ja $\dot{q}_i$ on yleistetty nopeus. [4, 5]

Hamiltonin mekaniikassa keskeinen yhtälö on Hamiltonin funktio, jonka yleinen määritelmä on

$$H(q,p,t) = \sum_i p_i \dot{q}_i - L\left(q,\dot{q},t\right), \tag{7}$$

jossa p_i on kanoninen liikemäärä, q_i on yleistetty sijainti ja L on Lagrangen funktio (3). Kaavan (7) mukainen Hamiltonin funktion määritelmä muuttujista $(q,\dot{q},t)$ muuttujiin (q,p,t) voidaan tulkita Legendren muunnokseksi. Tätä Hamiltonin funktiota hyödyntämällä voidaan määrittää Hamiltonin liikeyhtälöt

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \tag{8}$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \tag{9}$$

$$\frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t}, \tag{10}$$

joissa q_i on yleistetyt koordinaatit, H on Hamiltonin funktio, p_i on kanoninen liikemäärä, L on Lagrangen funktio ja t on aika. [4, 5]

Hamiltonin liikeyhtälöstä (10) ilmenee, että Hamiltonin funktio on liikevakio, jos Lagrangen funktiolla ei ole eksplisiittistä aikariippuvuutta. Jos tämän lisäksi systeemi on konservatiivinen ja sen potentiaalienergia on muotoa $V(q_1,\ldots,q_n)$, niin Hamiltonin funktio on yhtä suuri kuin systeemin kokonaisenergia E. Tällöin Hamiltonin funktio voidaan esittää muodossa

$$H \equiv T + V = E, \tag{11}$$

jossa T on systeemin kineettinen energia, V on potentiaalienergia ja E on kokonaisenergia. Tämä Hamiltonin funktion esitysmuoto on hyödyllinen, kun määritetään kvanttimekaaninen Hamiltonin operaattori. [4, 5]

2.3.1 Poissonin sulkusuure

Poissonin sulkusuure on liikeyhtälö, jonka määritelmä on

$$[F,G]_{PB} = \sum_i \left(\frac{\partial F}{\partial q_i}\frac{\partial G}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i}\frac{\partial G}{\partial q_i} \right). \tag{12}$$

Tätä määritelmää tarkastelemalla voidaan osoittaa, että Poissonin sulkusuureille pätee seuraavat kaavat

$$\begin{aligned}[F,G]_{PB} &= \sum_i \left(\frac{\partial F}{\partial q_i}\frac{\partial G}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i}\frac{\partial G}{\partial q_i}\right) = -\sum_i \left(-\frac{\partial F}{\partial q_i}\frac{\partial G}{\partial p_i} + \frac{\partial F}{\partial p_i}\frac{\partial G}{\partial q_i}\right) \\ &= -\sum_i \left(\frac{\partial G}{\partial q_i}\frac{\partial F}{\partial p_i} - \frac{\partial G}{\partial p_i}\frac{\partial F}{\partial q_i}\right) = -[G,F]_{PB}, \end{aligned} \tag{13}$$

$$[F,F]_{PB} = \sum_i \left(\frac{\partial F}{\partial q_i}\frac{\partial F}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i}\frac{\partial F}{\partial q_i}\right) = 0. \tag{14}$$

Ne ovat siis antisymmetrisiä sekä jonkin mielivaltaisen funktion F Poissonin sulkusuure itsensä kanssa häviää. [4–6]

Myöhemmin käsiteltäviä kommutaatiorelaatioita varten on hyödyllistä, että määritetään kanonisten muuttujien Poissonin sulkusuureet

$$[p_i,p_j]_{PB} = \sum_k \left(\frac{\partial p_i}{\partial q_k}\frac{\partial p_j}{\partial p_k} - \frac{\partial p_i}{\partial p_k}\frac{\partial p_j}{\partial q_k}\right) = \sum_k \left(0 \cdot \frac{\partial p_j}{\partial p_k} - \frac{\partial p_i}{\partial p_k} \cdot 0\right) = 0, \tag{15}$$

$$[q_i,q_j]_{PB} = \sum_k \left(\frac{\partial q_i}{\partial q_k}\frac{\partial q_j}{\partial p_k} - \frac{\partial q_i}{\partial p_k}\frac{\partial q_j}{\partial q_k}\right) = \sum_k \left(\frac{\partial q_i}{\partial q_k} \cdot 0 - 0 \cdot \frac{\partial q_j}{\partial q_k}\right) = 0, \tag{16}$$

$$[p_i,q_j]_{PB} = \sum_k \left(\frac{\partial p_i}{\partial q_k}\frac{\partial q_j}{\partial p_k} - \frac{\partial p_i}{\partial p_k}\frac{\partial q_j}{\partial q_k}\right) = -\sum_k \frac{\partial p_i}{\partial p_k}\frac{\partial q_j}{\partial q_k} = -\sum_k \delta_{ik}\delta_{jk} = -\delta_{ij}, \tag{17}$$

jossa δ_{ij} on Kroneckerin delta. Kroneckerin delta saa joko arvon 0 tai 1 riippuen alaindekseistä i ja j seuraavan määritelmän mukaisesti

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{jos} \quad i = j \\ 0, & \text{jos} \quad i \neq j. \end{cases} \tag{18}$$

Tarkasteltaessa kommutaatiorelaatioita kanonisia muuttujia vastaaville kvanttimekaanisille operaattoreille, niin huomataan niiden omaavan useita samoja ominaisuuksia kanonisten muuttujien Poissonin sulkusuureiden kanssa. [4, 5]

2.3.2 Hamiltonin mekaniikan liikeyhtälö Poissonin sulkusuureilla ilmaistuna

Hamiltonin funktion H ja jonkin mielivaltaisen funktion F Poissonin sulkusuureeksi saadaan siis määritelmän (12) mukaan ja Hamiltonin liikeyhtälöitä (8) ja (9) hyödyntäen [4,5]

$$\begin{aligned}[H,F]_{PB} &= \sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial q_i}\frac{\partial F}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial p_i}\frac{\partial F}{\partial q_i}\right) = -\sum_i \left(\dot{p}_i\frac{\partial F}{\partial p_i} + \dot{q}_i\frac{\partial F}{\partial q_i}\right) \\ &= -\sum_i \left(\frac{dp_i}{dt}\frac{\partial F}{\partial p_i} + \frac{dq_i}{dt}\frac{\partial F}{\partial q_i}\right) = -\Big(\frac{dF}{dt} - \frac{\partial F}{\partial t}\Big). \end{aligned} \tag{19}$$

Newtonin mekaniikka	Lagrangen mekaniikka	Hamiltonin mekaniikka
$\boldsymbol{F} = \frac{d\boldsymbol{p}}{dt}$, $\boldsymbol{F}_{ij} = -\boldsymbol{F}_{ji}$	$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0$	$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}$, $\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$, $\frac{dF}{dt} = -[H,F]_{PB} + \frac{\partial F}{\partial t}$

Taulukko 1: Newtonin, Lagrangen ja Hamiltonin mekaniikan keskeiset liikettä kuvaavat yhtälöt.

Tästä saadaan määritettyä Hamiltonin mekaniikan liikeyhtälö Poissonin sulkusuureilla ilmaistuna

$$\frac{dF}{dt} = -[H,F]_{PB} + \frac{\partial F}{\partial t}. \tag{20}$$

Huomattavaa on Hamiltonin liikeyhtälöiden (8) ja (9) sisältyminen tähän liikeyhtälöön. Valittaessa funktioksi F yleistetyt koordinaatit q_i saadaan tulokseksi Hamiltonin liikeyhtälö (8). Puolestaan funktion F ollessa kanoninen liikemäärä p_i saadaan liikeyhtälöstä (20) tulokseksi Hamiltonin liikeyhtälö (9). [4, 5]

Hamiltonin mekaniikan liikeyhtälöstä (19) voidaan myös huomata, että funktio F on liikevakio, jos sillä ei ole eksplisiittistä aikariippuvuuta sekä sen Poissonin sulkusuure Hamiltonin funktion kanssa on nolla [4].

Taulukossa 1 on koottuna käsiteltyjen klassisen mekaniikan liikettä kuvaavat yhtälöt.

2.4 Klassisen mekaniikan formalismien ekvivalenttius

Newtonin, Lagrangen sekä Hamiltonin mekaniikka ovat keskenään ekvivalentit klassisen mekaniikan formalismit. Osoitetaan tämä toteamalla ensin Newtonin mekaniikka ekvivalentiksi Lagrangen mekaniikan kanssa. Tämän voi tehdä aloittamalla Newtonin toisesta laista (1) hyödyntämällä näennäistä siirtymää $\delta \boldsymbol{x}_i$. Näennäinen siirtymä tarkoittaa välittömästi tapahtuvaa infinitesimaalista koordinaattien siirtymää siten, että systeemin rajoitteet säilyvät ja se voidaan ilmaista muodossa

$$\delta \boldsymbol{x}_i = \sum_j \frac{\partial \boldsymbol{x}_i}{\partial q_j} \delta q_j. \tag{21}$$

Tällöin saadaan

$$\begin{aligned}\sum_i \frac{d\boldsymbol{p}_i}{dt}\delta\boldsymbol{x}_i &= \sum_j \left\{\sum_i m_i \ddot{\boldsymbol{x}}_i \frac{\partial \boldsymbol{x}_i}{\partial q_j}\right\}\delta q_j \\ &= \sum_j \left\{\sum_i m_i \left[\frac{d}{dt}\left(\dot{\boldsymbol{x}}_i \frac{\partial \boldsymbol{x}_i}{\partial q_j}\right) - \dot{\boldsymbol{x}}_i \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \boldsymbol{x}_i}{\partial q_j}\right)\right]\right\}\delta q_j. \end{aligned} \tag{22}$$

Jaetaan yhtälön oikea puoli kahteen osaan ja tarkastellaan näitä kahta osaa erikseen

$$\begin{aligned}\sum_i m_i \frac{d}{dt}\left(\dot{\boldsymbol{x}}_i \frac{\partial \boldsymbol{x}_i}{\partial q_j}\right) &= \frac{d}{dt}\sum_i \frac{1}{2} m_i \cdot 2\left(\dot{\boldsymbol{x}}_i \frac{\partial \dot{\boldsymbol{x}}_i}{\partial \dot{q}_j}\right) = \frac{d}{dt}\sum_i \frac{1}{2} m_i \left(\frac{\partial \dot{x}_i^2}{\partial \dot{q}_j}\right) \\ &= \frac{d}{dt}\frac{\partial}{\partial \dot{q}_j}\sum_i \frac{1}{2} m_i \dot{x}_i^2, \end{aligned} \tag{23}$$

$$\sum_i m_i \dot{\boldsymbol{x}}_i \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \boldsymbol{x}_i}{\partial q_j}\right) = \sum_i m_i \dot{\boldsymbol{x}}_i \left(\frac{\partial \dot{\boldsymbol{x}}_i}{\partial q_j}\right) = \frac{\partial}{\partial q_j}\sum_i \frac{1}{2} m_i \dot{x}_i^2, \tag{24}$$

jolloin huomataan, että yhtälö (22) voidaan ilmaista myös kineettisen energian T avulla muodossa

$$\sum_i \frac{d\boldsymbol{p}_i}{dt}\delta\boldsymbol{x}_i = \sum_j \left\{\frac{d}{dt}\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_j} - \frac{\partial T}{\partial q_j}\right\}\delta q_j. \tag{25}$$

Tämä voidaan ilmaista vielä yksinkertaisemmassa muodossa määrittelelmällä yleistetty voima Q_j seuraavan kaavan mukaisesti

$$Q_j = \sum_j \frac{d\boldsymbol{p}_i}{dt}\frac{\partial \boldsymbol{x}_i}{\partial q_j} = -\frac{\partial V}{\partial q_j}. \tag{26}$$

Viimeisimmässä välivaiheessa on huomioitu, että voima $\boldsymbol{F}_i$ voidaan esittää potentiaalienergian V negatiivisena gradienttina. Koska potentiaalienergia V ei riipu yleistetystä nopeudesta $\dot{q}_i$, voidaan yhtälö (22) ilmaista muodossa

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial(T-V)}{\partial \dot{q}_i}\right) - \frac{\partial(T-V)}{\partial q_i} = \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0, \tag{27}$$

jossa L on Lagrangen funktio (3). Tämä vaatii myös systeemin rajoitteiden olevan holonomisia. Huomataan myös, että saatu yhtälö on Lagrangen liikeyhtälö konservatiivisille voimille (5). [4, 5, 7]

Tarkastellaan tämän jälkeen Lagrangen funktion differentiaalia dL. Tätä varten on tarpeellista huomata, että Lagrangen liikeyhtälöstä (5) saadaan määritelmä

$$\dot{p}_i = \frac{\partial L}{\partial q_i}. \tag{28}$$

Lagrangen funktion differentiaaliksi saadaan siis

$$dL = \left(\frac{\partial L}{\partial q_i}\right) dq_i + \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) d\dot{q}_i + \left(\frac{\partial L}{\partial t}\right) dt = \dot{p}_i dq_i + p_i d\dot{q}_i + \left(\frac{\partial L}{\partial t}\right) dt.$$

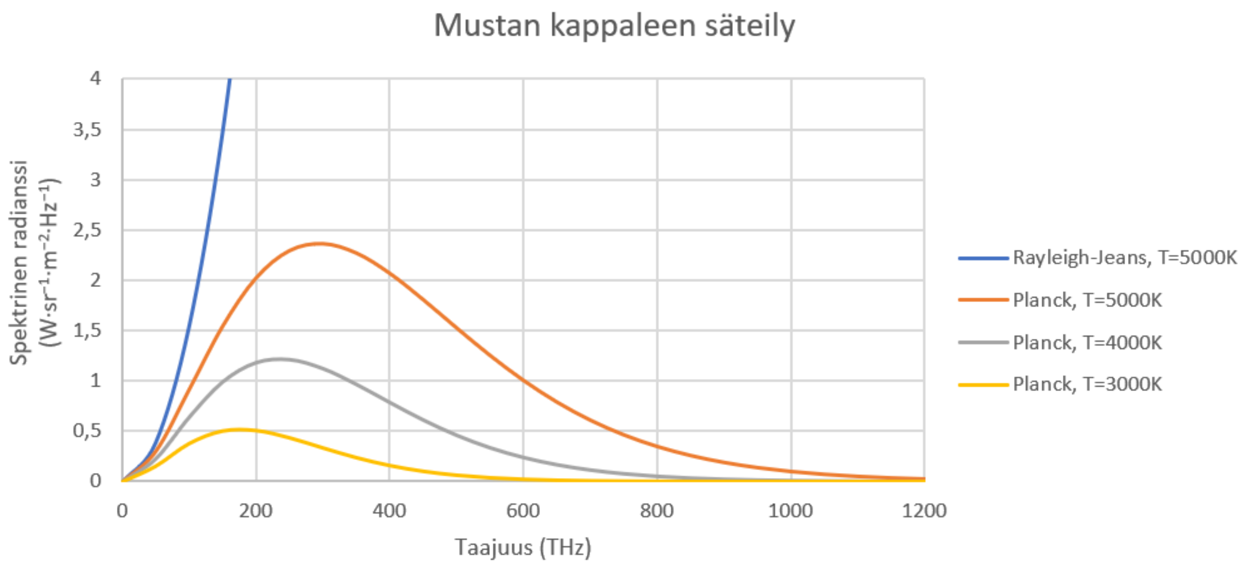
Koska Hamiltonin funktio H määritellään kaavan (7) mukaisesti, sen differentiaaliksi saadaan

$$\begin{aligned} dH &= \sum_i \left(p_i d\dot{q}_i + \dot{q}_i dp_i - \dot{p}_i dq_i + p_i d\dot{q}_i\right) + \left(\frac{\partial L}{\partial t}\right) dt \\ &= \sum_i \left(\dot{q}_i dp_i - \dot{p}_i dq_i\right) - \left(\frac{\partial L}{\partial t}\right) dt. \end{aligned} \tag{29}$$

Toisaalta Hamiltonin funktion differentiaali voidaan ilmaista myös muodossa

$$dH = \sum_i \left[\left(\frac{\partial H}{\partial q_i}\right) dq_i + \left(\frac{\partial H}{\partial p_i}\right) dp_i\right] + \left(\frac{\partial H}{\partial t}\right) dt. \tag{30}$$

Koska näiden kahden differentiaalin tulee olla yhtä suuret, saadaan lopputulokseksi Hamiltonin liikeyhtälöt (8) - (10). Tämän perusteella Hamiltonin mekaniikka on ekvivalentti Lagrangen mekaniikan kanssa, joten kaikki kolme käsiteltyä klassisen mekaniikan formalismia ovat keskenään ekvivalentit. [4, 5]



Kuva 1: Kuva mustan kappaleen säteilyn spektristä, jossa on esitetty spektrinen radianssi taajuuden funktiona eri lämpötiloissa. Planck viittaa Planckin säteilylakiin ja Rayleigh-Jeans viittaa Rayleigh-Jeansin säteilylakiin.

3 Kvanttimekaniikan formalismit

1900-luvun alkupuolella huomattiin, että klassinen mekaniikan puitteissa ei pystytty selittämään kaikkia mikroskooppisia ilmiöitä. Klassisen mekaniikan mukaan atomien ei pitäisi olla vakaita, sillä niiden tulisi emittoida sähkömagneettista säteilyä elektronien liikkeen seurauksena. Tämän lisäksi klassinen mekaniikka ei kyennyt selittämään muun muassa mustan kappaleen säteilyä tai valosähköistä ilmiötä. Plackin vuonna 1905 esittämän teorian mukaan säteilyä voi absorboitua tai emittoitua vain tietyn suuruisina energiapaketteina eli kvantteina. Näiden kvanttien energia oli verrannollinen säteilyn aallonpituuteen. Tämän uusi teoria mahdollisti mustan kappaleen säteilyn spektrin ongelman selittämisen. Klassisen mekaniikan mukaan säteilyn taajuuden kasvaessa, tulisi spektrisen radianssin lähestyä ääretöntä kuvan 1 mukaisesti. Kuitenkaan tällaista ilmiötä ei ole kokeellisesti havaittu, vaan saavutettuaan huippunsa spektrinen radianssi alkaa lähestyä nollaa taajuuden kasvaessa. [2]

Mikroskooppisten systeemien käsittelyyn kehittyi uusi fysiikan osa-alue eli kvanttimekaniikka. Tämän uuden teorian taustalla oli muun muassa ajatus tilojen superpositiosta. Superpositiossa oleva tila voidaan ilmaista vähintään kahden tilan lineaarikombinaationa. Jos siis tila $|X\rangle$ on tilojen $|A\rangle$ ja $|B\rangle$ superpositiossa, voidaan tila $|X\rangle$ ilmaista seuraavan kaavan mukaisessa muodossa

$$|X\rangle = \alpha\,|A\rangle + \beta\,|B\rangle\,, \tag{31}$$

jossa α ja β ovat vakioita. [2]

Toinen hyvin perustavanlaatuinen taustalla oleva ajatus kvanttimekaniikan kehittämisessä oli epätarkkuusperiaate. Kvanttimekaniikassa on useampi epätarkkuusperiaate, kuten energian ja ajan sekä paikan ja liikemäärän. Käsitellään tässä paikan ja liikemäärän epätarkkuusperiaattetta. Epätarkkuusperiaate voidaan lyhyesti ilmaista muodossa, että hiukkasen paikkaa sekä liikemäärää ei pystytä yhtäaikaa määrittämään tarkasti, vaan tähän liittyy aina epävarmuutta. Tämä epätarkkuusperiaate voidaan ilmaista matemaattisesti seuraavan kaavan mukaisesti

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}, \tag{32}$$

jossa Δx on paikan epätarkkuus, Δp on liikemäärän epätarkkuus ja $\hbar$ on redusoitu Planckin vakio. [2] Tämä on huomattava ero klassiseen mekaniikkaan, jossa jokainen dynaamisista muuttujista on hyvin määritelty jokaisella ajanhetkellä [6].

3.1 Heisenbergin kuva

Heisenbergin kuva on kvanttimekaniikan formalismi, joka on hyvin analoginen klassisen mekaniikan kanssa, mikä tekee siitä helposti lähestyttävän, jos on aiemmin perehtynyt Hamiltonin mekaniikkaan. Kuitenkin tässä formalismissa on haasteensa, joihin kuuluu formalismin abstraktius. [4]

Myöhempää kvanttimekaniikan formalismien tarkastelua varten on tiedettävä, missä aikariippuvuus on kyseisissä formalismissa. Heisenbergin kuvassa aikariippuvuus on operaattoreissa, jolloin itse kvanttimekaaniset tilat ovat ajasta riippumattomia [4]. Tämä operaattoreiden aikariippuvuus on eräs esimerkki analogisuudesta klassisen mekaniikan kanssa, sillä klassisessa mekaniikassa systeemin ominaisuuksista muun muassa liikemäärä on ajasta riippuva.

3.1.1 Kommutaattori

Kommutaattori on matemaattinen operaatio, jonka määritelmä on [4, 6]

$$[\hat{F},\hat{G}] = \hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F}. \tag{33}$$

Klassisessa mekaniikassa funktioiden F ja G kommutaattori on yhtä suuri kuin nolla, joten funktiot F ja G kommutoivat. Kvanttimekaniikkaan siirryttäessä tämä ei kuitenkaan enää päde, sillä funktiot F ja G korvataan kvanttimekaanisilla operaattoreilla $\hat{F}$ ja $\hat{G}$, jotka eivät välttämättä kommutoi. [4]

Kommutaattoreiden ominaisuuksiin kuuluu muun muassa

$$[\hat{F},\hat{G}] = \hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F} = -\left(\hat{G}\hat{F} - \hat{F}\hat{G}\right) = -[\hat{G},\hat{F}], \tag{34}$$

$$[\hat{F},\hat{F}] = \hat{F}\hat{F} - \hat{F}\hat{F} = 0. \tag{35}$$

Operaattoreiden järjestys ei siis ole merkityksetön, vaan yleisesti operaattoreita ei voida olettaa kommutatiivisiksi. Tämän lisäksi jokin mielivaltainen operaattori on aina kommutatiivinen itsensä kanssa, joten sen kommutaattori häviää. Nämä ominaisuudet ovat samoja, kuin Poissonin sulkusuureille aikaisemmin osoitetut ominaisuudet (14). Kuitenkin sekä Poissonin sulkusuureilla että kommutaattorilla on muitakin yhteisiä ominaisuuksia, kuten Jacobin indentiteetti. [2, 6]

Kommutatiivisuudella on merkitystä siihen, minkälaista algebraa voi hyödyntää laskuissa. Jos operaattorit ovat kommutatiiviset, niin operaattoreiden järjestyksellä ei ole väliä. Erityisesti, jos kyseessä ovat kommutoivat observaabelit, niin laskuissa voidaan hyödyntää perinteistä algebraa. [6]

Kvanttimekaniikassa kanonisia muuttujia vastaavien paikka- ja liikemääräoperaattoreiden kommutaatiorelaatiot ovat hyvin merkittäviä. Nämä kommutaatiorelaatiot ovat paikkaoperaattorille $\hat{q}$ ja liikemääräoperaattorille $\hat{p}$

$$[\hat{q}_i,\hat{q}_j] = [\hat{p}_i,\hat{p}_j] = 0, \tag{36}$$

sekä

$$[\hat{p}_i,\hat{q}_j] = -i\hbar\delta_{ij}, \tag{37}$$

jossa δ_{ij} on Kroneckerin delta [4]. Näistä kommutaatiorelaatioista ilmenee, että paikka- ja liikemääräoperaattorit kommutoivat itsensä kanssa, mutta eivät välttämättä ole kommutatiivisia keskenään.

Hyödyntämällä kommutaatiorelaatiota

$$\left[\frac{\partial}{\partial q_i},q_j\right] = \delta_{ij}, \tag{38}$$

jossa δ_{ij} on Kroneckerin delta (18) sekä liikemääräoperaattorin $\hat{p}_i$ määritelmää

$$\hat{p}_i = -i\hbar\frac{\partial}{\partial q_i} \tag{39}$$

saadaan paikka- ja liikemääräoperaattoreiden välinen kommutaatiorelaatio (37) helposti johdettua [6]

$$\begin{aligned}[\hat{p}_i,\hat{q}_j] &= \left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial q_i}, q_j\right] = \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial q_i}\right)q_j - q_j\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial q_i}\right) = -i\hbar\left[\frac{\partial}{\partial q_i},q_j\right] \\ &= -i\hbar\delta_{ij}.\end{aligned} \tag{40}$$

Tästä huomataan, että paikka- ja liikemääräoperaattoreiden kommutaatiorelaatiot muistuttavat huomattavasti kanonisten muuttujien Poissonin sulkusuureita (15)-(17).

3.1.2 Liikeyhtälö Heisenbergin kuvassa

Kvanttimekaniikan liikeyhtälö Heisenbergin kuvassa on hyvin samanlainen klassisen mekaniikan liikeyhtälön (20) kanssa. Tämä samankaltaisuus perustuu siihen, että siirtyminen kvanttimekaniikan liikeyhtälöihin Heisenbergin kuvassa pääasiassa koostuu Poissonin sulkusuureen $[H,F]_{PB}$ korvaamisesta kommutaattorilla $[\hat{H},\hat{F}]$ sekä funktion F korvaamisella sitä vastaavalla operaattorilla $\hat{F}$ klassisen mekaniikan liikeyhtälössä (20) [4].

Nämä muutokset tekemällä saadaan kvanttimekaniikan liikeyhtälöksi Heisenbergin kuvassa

$$\frac{d\hat{F}}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{F}] + \frac{\partial \hat{F}}{\partial t}, \tag{41}$$

jossa $\hat{F}$ on jokin mielivaltainen operaattori ja $\hat{H}$ on Hamiltonin operaattori [4].

Jos Heisenbergin liikeyhtälön operaattori $\hat{F}$ kommutoi Hamiltonin operaattorin $\hat{H}$ kanssa sekä operaattorilla $\hat{F}$ ei ole eksplisiittistä aikariippuvuutta, niin Heisenbergin liikeyhtälö redusoituu muotoon

$$\frac{d\hat{F}}{dt} = 0, \tag{42}$$

jolloin $\hat{F}$ on liikevakio. Tällöin operaattorin $\hat{F}$ ominaisarvo pysyy vakiona kaikilla ajanhetkillä. [2]

3.2 Schrödingerin kuva

Schrödingerin kuva on toinen kvanttimekaniikan formalismi, jonka lähtökohtana toimi de Broglien kehittämät teoriat liittyen hiukkasten aaltoluonteeseen. [6]

Myöhempää formalismien tarkastelua varten on oleellista tietää, että Schrödingerin kuvassa aikariippuvuus on kvanttimekaanisissa tiloissa, jolloin operaattorit ovat ajasta riippumattomia [4].

3.2.1 Yleistä operaattoreista

Operaattoreiden ominaisuuksista hermiittisyys ja unitaarisuus ovat tärkeitä tulevien aiheiden käsittelyn kannalta.

Jos operaattori on hermiittinen, niin kyseinen operaattori on oma hermiittinen konjugaattinsa. Tämän voi ilmaista kaavana muodossa

$$\hat{H} = \hat{H}^\dagger = (\hat{H}^*)^T, \tag{43}$$

jossa $\hat{H}$ on jokin hermiittinen operaattori ja yläindekseistä $\dagger$ tarkoittaa hermiittistä konjugaattia, T tarkoittaa transpoosia ja $*$ kompleksikonjugaattia. Hermiittisten operaattoreiden lineaarikombinaatiot ovat myös hermiittisiä ja niiden ominaisarvot ovat reaalisia. [6]

Unitaarisille operaattoreille pätee

$$\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{I}, \tag{44}$$

jossa on $\hat{U}$ on jokin mielivaltainen unitaarinen operaattori. Kahden unitaarisen operaattorin tulo on unitaarinen. [6]

Observaabeli on operaattori, joka kuvastaa jotakin mitattavaa suuretta, kuten paikkaa, liikemäärää tai energiaa. Tämän takia on selvää, että observaabelin ominaisarvo ei voi olla imaginaarinen. Observaabelien on siis oltava hermiittisiä, sillä hermiittisen operaattorin ominaisarvot ovat aina reaalisia. [6]

3.2.2 Hamiltonin operaattori

Koska seuraavassa Schrödingerin kuvan käsittelyssä ollaan rajoituttu vain yhteen ulottuvuuteen ja tarkastellaan operaattoreita sijaintiavaruudessa, niin paikka- ja liikemääräoperaattorit ovat muotoa [4]

$$\hat{x} = x, \tag{45}$$

$$\hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}. \tag{46}$$

Sijoittamalla Hamiltonin funktioon (11) aiemmin määritetyt paikka- (45) ja liikemääräoperaattorit (46) saadaan määritettyä Hamiltonin operaattori [4]

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) = \frac{1}{2m}\Big(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\Big)^2 + V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x). \tag{47}$$

Aiemmin mainittujen ehtojen ollessa voimassa Hamiltonin funktio on yhtä suuri kuin systeemin kokonaisenergia [7]. Vastaavasti Hamiltonin operaattori on kvanttimekaanisen systeemin energiaa kuvaava operaattori, jossa ensimmäinen termi kuvaa systeemin kineettistä energiaa ja jälkimmäinen termi kuvaa systeemin potentiaalienergiaa [3].

3.2.3 Liikeyhtälö Schrödingerin kuvassa

Aikariippuvuuteen voidaan tehdä muutoksia hyödyntämällä unitaarista aikaevoluutiooperaattoria

$$\hat{U}(t,t_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right], \tag{48}$$

	Heisenbergin kuva	Schrödingerin kuva
Liikeyhtälö	$\frac{d\hat{F}}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{F}] + \frac{\partial \hat{F}}{\partial t}$	$i\hbar\frac{d}{dt}\lvert\Psi(t)\rangle = \hat{H}\lvert\Psi(t)\rangle$
Aikariippuvuus	Operaattorit	Kvanttimekaaniset tilat

Taulukko 2: Käsiteltyjen formalismien liikeyhtälöt ja aikariippuvuudet.

jonka ensimmäinen aikaderivaatta on [6]

$$\frac{d}{dt}\hat{U}(t,t_0) = \frac{d}{dt}\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right] = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\cdot\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right] = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\hat{U}(t,t_0). \quad (49)$$

Aikaevoluutio-operaattorilla pystytään kuvaamaan kvanttimekaanisten tilojen kehitystä ajassa [6]

$$\lvert\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t,t_0)\lvert\Psi(t_0)\rangle\,, \quad (50)$$

jossa $\lvert\Psi\rangle$ on Diracin braket-notaation mukainen vektoriavaruuden kvanttimekaanista tilaa kuvaava vektori ja $\langle\Psi\rvert$ on tämän vektoriavaruuden duaalivektoriavaruuden vektori, joka kuvaa samaa kvanttimekaanista tilaa kuin $\lvert\Psi\rangle$ [3].

Aikaevoluutio-operaattoria (48) ja sen ensimmäistä aikaderivaattaa (49) hyödyntämällä voidaan siis määrittää ajasta riippuvan kvanttimekaanisen tilan $\lvert\Psi(t)\rangle$ aikaderivaatta

$$\frac{d}{dt}\lvert\Psi(t)\rangle = \left(\frac{d}{dt}\hat{U}(t,t_0)\right)\lvert\Psi(t_0)\rangle = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\hat{U}(t,t_0)\lvert\Psi(t_0)\rangle = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\lvert\Psi(t)\rangle\,, \quad (51)$$

jolloin Schrödingerin kuvan ajasta riippuvaksi liikeyhtälöksi saadaan

$$i\hbar\frac{d}{dt}\lvert\Psi(t)\rangle = \hat{H}\lvert\Psi(t)\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\lvert\Psi(t)\rangle + V(x)\lvert\Psi(t)\rangle\,, \quad (52)$$

jossa $\lvert\Psi(t)\rangle$ on ajasta riippuva kvanttimekaaninen tila ja $\hat{H}$ on Hamiltonin operaattori [6].

3.3 Heisenbergin ja Schrödingerin kuvien ekvivalenttius

Taulukossa 2 on vielä koottuna Heisenbergin ja Schrödingerin kuvien liikeyhtälöt sekä aikariippuvuudet. Koska Heisenbergin kuvassa aikariippuvuus on operaattoreissa ja Schrödingerin kuvassa aikariippuvuus on kvanttimekaanisissa tiloissa, täytyy näiden kahden formalismin ekvivalenttiuden osoittamiseksi kyetä muokkaamaan eri kuvien aikariippuvuuksia.

3.3.1 Aikariippuvuuden muuttaminen

Aikaisemmin määritettiin tapa kuvata kvanttimekaanisten tilojen aikakehitystä (50). Tätä samaa ajatusta pystytään hyödyntämään siten, että Heisenbergin kuvan ajasta riippumattoman kvanttimekaanisen tilan sekä Schrödingerin kuvan ajasta riippuvan tilan välille saadaan määritettyä yhteys [2]

$$|\Psi\rangle_H = \hat{U}^\dagger(t,t_0)\,|\Psi(t)\rangle_S = \hat{U}^\dagger(t,t_0)\hat{U}(t,t_0)\,|\Psi(t_0)\rangle_S = |\Psi(t_0)\rangle_S\,. \tag{53}$$

Kvanttimekaanisten tilojen aikakehityksen ja aikariippuvuuden muokkaamisen lisäksi aikaevoluutio-operaattorilla (48) pystytään muokkaamaan operaattoreiden aikariippuvuuksia, joten sitä hyödyntämällä voidaan ilmaista Heisenbergin kuvan operaattoreita Schrödingerin kuvan operaattoreiden avulla [2, 6]

$$\hat{A}_H = \hat{U}^\dagger(t,t_0)\hat{A}_S\hat{U}(t,t_0). \tag{54}$$

Kaavoissa (53) ja (54) alaindeksi ilmaisee, onko kyseinen tila tai operaattori Heisenbergin vai Schrödingerin kuvassa. Alaindeksi H viittaa Heisenbergin kuvaan ja S viittaa Schrödingerin kuvaan.

3.3.2 Operaattorin odotusarvo

Koska kvanttimekaniikassa tilojen superpositio romahtaa, jos se mitataan, on odotusarvot ainoa järkevä tapa mitata systeemin ominaisuutta, kuten liikemäärää tai sijaintia. Odotusarvo jollekin kvanttimekaanisen systeemin mitattavalle ominaisuudelle saadaan mittaamalla useasti ja määrittämällä näiden tulosten keskiarvo. Odotusarvo mielivaltaiselle operaattorille $\hat{A}$ saadaan kaavasta

$$\langle\hat{A}\rangle = \langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle\,, \tag{55}$$

jossa mitattavat hiukkaset ovat kaikki tilassa $|\Psi\rangle$. [3]

Hyödyntämällä aikasemmin määritettyjä tapoja muokata kvanttimekaanisten tilojen aikariippuvuutta (53) sekä ilmaista Heisenbergin kuvien operaattoreita Schrödingerin kuvan operaattoreiden ja aikaevoluutio-operaattorin avulla (54), voidaan osoittaa, että Heisenbergin kuva sekä Schrödingerin kuva antavat saman odotusarvon operaattorille $\hat{A}$ [2, 6]

$$\langle\hat{A}\rangle = \langle\Psi|\hat{A}(t)|\Psi\rangle_H = \langle\Psi(t_0)|\hat{U}^\dagger(t,t_0)\hat{A}\hat{U}(t,t_0)|\Psi(t_0)\rangle_S = \langle\Psi(t)|\hat{A}|\Psi(t)\rangle_S\,. \tag{56}$$

Koska kvanttimekaniikassa odotusarvot ovat ainoa mitattava asia systeemistä, jos kaksi eri kvanttimekaniikan formalismia antaa saman odotusarvon mielivaltaiselle operaattorille $\hat{A}$, täytyy näiden kahden formalismin olla keskenään ekvivalentit [2]. Koska kaavassa (56) osoitettiin Schrödingerin kuvan ja Heisenbergin kuvan antavan saman odotusarvon operaattorille, täytyy niiden olla ekvivalentit.

4 Loppupäätelmät

Newtonin mekaniikka, Lagrangen mekaniikka ja Hamiltonin mekaniikka ovat siis keskenään ekvivalentit klassisen mekaniikan formalismit. Erityisesti Hamiltonin mekaniikka on klassisesta mekaniikasta kvanttimekaniikkaan siirryttäessä tärkeä, sillä Poissonin sulkusuureilla esitettyyn Hamiltonin mekaniikan liikeyhtälöön sekä Hamiltonin funktioon löytyy selkeät vastineet kvanttimekaniikasta.

Heisenbergin kuvan liikeyhtälö saadaan muodostettua Poissonin sulkusuureilla esitetystä Hamiltonin mekaniikan liikeyhtälöstä korvaamalla Poissonin sulkusuure kommutaattorilla sekä korvaamalla yhtälössä esiintyvät funktiot kvanttimekaanisilla operaattoreilla. Sekä Schrödingerin kuvassa että Heisenbergin kuvassa Hamiltonin funktiosta muodostettu Hamiltonin operaattori on merkittävä. Heisenbergin kuvan liikeyhtälössä Hamiltonin operaattori esiintyy kommutaattorissa ja Schrödingerin kuvassa se puolestaan esiintyy Schrödingerin yhtälössä. Schrödingerin yhtälö on tärkeä Schrödingerin kuvassa, sillä sen avulla kuvataan kvanttimekaanisten tilojen kehitystä ajassa.

Näiden kahden kvanttimekaniikan formalismin aikariippuvuudet ovat keskenään päinvastaiset. Heisenbergin kuvassa aikariippuvuus on operaattoreissa kun taan Schrödingerin kuvassa aikariippuvuus on tiloissa. Muokkaamalla näiden formalismien aikariippuvuuksia, voidaan Heisenbergin kuva ja Schrödingerin kuva osoittaa keskenään ekvivalenteiksi.

Tässä tutkielmassa rajauduttiin käsittelemään siirtymistä klassisesta mekaniikasta kvanttimekaniikan Heisenbergin kuvaan ja Schrödingerin kuvaan. Tätä tutkielmaa voisi laajentaa tarkastelemalla, miten muita kvanttimekaniikan formalismeja voidaan johtaa klassisesta mekaniikasta. Esimerkiksi olisi mahdollista käsitellä, miten vaikutusfunktionaalista päästään kvanttimekaniikan polkuintegraali-formalismiin tai miten klassisesta mekaniikasta päädytään Diracin kuvaan, joka on Heisenbergin kuvan ja Schrödingerin kuvan välimuoto.

Viitteet

[1] H. D. Young, R. A. Freedman ja A. L. Ford. *Sears and Zemansky's University Physics - Volume 1*. 12. painos. San Francisco: Pearson Addison-Wesley cop.; 2008.

[2] V. S. Mathur ja S. Singh. *Concepts in Quantum Mechanics*. Florida: Taylor & Francis Group; 2009.

[3] D. J. Griffiths. *Intoduction to Quantum Mechanics*. 2. painos. New Jersey: Pearson Education; 2005.

[4] E. Thuneberg. *Analyyttinen mekaniikka*. Luentomoniste. Fysikaalisten tieteiden laitos, Oulun yliopisto; 2006.

[5] A. L. Fetter ja J. D. Walecka. *Theoretical Mechanics of Particles and Continua*. New York: Dover Publications; 2003.

[6] A. Messiah. *Quantum Mechanics*. New York: Dover Publications; 1999.

[7] H. Goldstein, C. Poole ja J. Safko. *Classical Mechanics*. Kalifornia: Pearson Education, Inc.; 2002.