

## Rozdział 24

# (U.3) Podstawy formalizmu mechaniki kwantowej

### 24.1 Wartości oczekiwane i dyspersje dla stanu superponowanego

#### 24.1.1 Założenia wstępne

W rozdziale 3 wykazaliśmy twierdzenie (3.84) mówiące, że dla funkcji falowej układu fizycznego będącej stanem własnym obserwabli  $\hat{A}$  dyspersja wielkości fizycznej, której odpowiada  $\hat{A}$ , znika. Jeśli zaś stan układu jest superpozycją stanów własnych  $\hat{A}$ , to wtedy  $\sigma^2(a) \neq 0$ .

Fakty te omówimy teraz na przykładzie energii. Niech funkcje  $\varphi_1(\vec{r})$  oraz  $\varphi_2(\vec{r})$  będą stanami własnymi hamiltonianu (niezależnego od czasu) układu fizycznego

$$\hat{H}\varphi_k(\vec{r}) = E_k \varphi_k(\vec{r}), \quad k = 1, 2, \quad E_1 \neq E_2. \quad (24.1)$$

Hamiltonian jest operatorem hermitowskim, więc jego stany własne są ortogonalne i unormowane

$$\langle \varphi_j | \varphi_k \rangle = \int d^3r \varphi_j^*(\vec{r}) \varphi_k(\vec{r}) = \delta_{jk}. \quad (24.2)$$

Niech teraz funkcja falowa rozważanego układu będzie superpozycją

$$\psi(\vec{r}, t) = \beta_1 e^{-i\omega_1 t} \varphi_1(\vec{r}) + \beta_2 e^{-i\omega_2 t} \varphi_2(\vec{r}), \quad (24.3)$$

gdzie oznaczyliśmy  $\omega_k = E_k/\hbar$ . Jest to więc superpozycja stanów stacjonarnych (patrz (2.57)). Współczynniki są tak dobrane, aby

$$|\beta_1|^2 + |\beta_2|^2 = 1. \quad (24.4)$$

Funkcja falowa  $\psi$  jest więc (zgodnie z (3.12)) unormowana. Gęstość prawdopodobieństwa  $|\psi|^2$  wynosi

$$\begin{aligned} |\psi|^2 &= \psi^*(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) \\ &= |\beta_1|^2 |\varphi_1(\vec{r})|^2 + |\beta_2|^2 |\varphi_2(\vec{r})|^2 + 2 \operatorname{Re} \{ \beta_1^* \beta_2 e^{i(\omega_1 - \omega_2)t} \varphi_1(\vec{r}) \varphi_2(\vec{r}) \}, \end{aligned} \quad (24.5)$$

co obliczymy identycznie jak we wzorze (2.36). Gęstość ta zawiera, jak należało oczekiwać, człon interferencyjny zależny od czasu poprzez różnicę faz składników superpozycji. Całkując wyrażenie (24.5) po całym zakresie zmienności argumentu  $\vec{r}$  uzyskamy jedynkę (normowanie), bowiem funkcje  $\varphi_k$  są ortonormalne.

Celem naszych dalszych rozważań jest obliczenie dyspersji energii

$$\sigma^2(E) = \langle \psi | \hat{H}^2 | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle^2. \quad (24.6)$$

a więc najpierw musimy obliczyć potrzebne elementy macierzowe hamiltonianu (wartości oczekiwane).

### 24.1.2 Obliczenia elementów macierzowych

W zasadzie  $\langle E \rangle = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle$  możemy wypisać bez obliczeń. Wystarczy uzmysłowić sobie, że amplitudy  $\beta_k$  są amplitudami prawdopodobieństwa tego, że w wyniku pomiaru energii otrzymamy wartości równe  $E_k$ . Wobec tego od razu mamy

$$\langle E \rangle = |\beta_1|^2 E_1 + |\beta_2|^2 E_2. \quad (24.7)$$

Sprawdźmy jednak (dla ćwiczenia rachunkowego) ten wynik. Z definicji wartości oczekiwanej

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \\ &= \left\langle \left( \beta_1 e^{-i\omega_1 t} \varphi_1 + \beta_2 e^{-i\omega_2 t} \varphi_2 \right) \middle| \hat{H} \middle| \left( \beta_1 e^{-i\omega_1 t} \varphi_1 + \beta_2 e^{-i\omega_2 t} \varphi_2 \right) \right\rangle \\ &= |\beta_1|^2 \langle \varphi_1 | \hat{H} | \varphi_1 \rangle + \beta_1^* \beta_2 e^{i(\omega_1 - \omega_2)t} \langle \varphi_1 | \hat{H} | \varphi_2 \rangle \\ &\quad + \beta_1 \beta_2^* e^{-i(\omega_1 - \omega_2)t} \langle \varphi_2 | \hat{H} | \varphi_1 \rangle + |\beta_2|^2 \langle \varphi_2 | \hat{H} | \varphi_2 \rangle. \end{aligned} \quad (24.8)$$

Z ortonormalności stanów własnych hamiltonianu wynika, że

$$\langle \varphi_j | \hat{H} | \varphi_k \rangle = E_k \langle \varphi_j | \varphi_k \rangle = E_k \delta_{jk}, \quad (24.9)$$

więc człony mieszane w (24.8) znikają i dostajemy

$$\langle E \rangle = |\beta_1|^2 E_1 + |\beta_2|^2 E_2, \quad (24.10)$$

co jest oczywiście zgodne z wynikiem (24.7) uzyskanym bezpośrednio z probabilistycznej interpretacji składników funkcji falowej  $\psi$ .

Drugi element macierzowy potrzebny do obliczenia dyspersji, tj.  $\langle E^2 \rangle$  obliczamy w podobny sposób. Cała różnica polega na tym, że we wzorach (24.8) i (24.9) zamiast  $\hat{H}$  trzeba wstawić  $\hat{H}^2$ , co wyprodukuje  $E_k^2$  zamiast  $E_k$ . Wobec tego

$$\langle E^2 \rangle = |\beta_1|^2 E_1^2 + |\beta_2|^2 E_2^2. \quad (24.11)$$

### 24.1.3 Dyspersja energii

Mając już wartości oczekiwane  $\langle E \rangle$  i  $\langle E^2 \rangle$  łatwo wyliczamy dyspersję energii. Z (24.6) otrzymujemy

$$\sigma^2(E) = |\beta_1|^2 E_1^2 + |\beta_2|^2 E_2^2 - \left( |\beta_1|^2 E_1 + |\beta_2|^2 E_2 \right)^2. \quad (24.12)$$

Proste wymnożenie prowadzi do

$$\sigma^2(E) = |\beta_1|^2 E_1^2 (1 - |\beta_1|^2) + |\beta_2|^2 E_2^2 (1 - |\beta_2|^2) - 2 |\beta_1|^2 |\beta_2|^2 E_1 E_2. \quad (24.13)$$

Ponieważ z (24.4) wynika, że  $(1 - |\beta_1|^2) = |\beta_2|^2$  (i na odwrót), zatem

$$\sigma^2(E) = |\beta_1|^2 |\beta_2|^2 (E_1^2 + E_2^2 - 2 E_1 E_2) = |\beta_1|^2 |\beta_2|^2 (E_1 - E_2)^2. \quad (24.14)$$

Widać więc, że  $\sigma^2(E) > 0$  jeśli tylko  $E_1 \neq E_2$ .

Możemy policzyć dyspersję energii również w inny sposób. Skorzystamy ze wzoru (3.83), w którym podstawimy  $C_k = \beta_k e^{-i\omega_k t}$  dla  $k = 1, 2$ , oraz  $C_k = 0$  dla  $k > 2$ . Ponadto weźmiemy  $a_k = E_k$ , bowiem rolę obserwabli  $\hat{A}$  odgrywa teraz hamiltonian. Wobec tego z (3.83) otrzymujemy

$$\sigma^2(E) = \sum_{k=1}^2 E_k |\beta_k|^2 \left[ E_k - \sum_{m=1}^2 E_m |\beta_m|^2 \right]. \quad (24.15)$$

Rozpisując najpierw sumę wewnętrzną, a potem zewnętrzną, dostajemy

$$\begin{aligned}\sigma^2(E) &= E_1|\beta_1|^2 \left[ E_1 - E_1|\beta_1|^2 - E_2|\beta_2|^2 \right] + E_2|\beta_2|^2 \left[ E_2 - E_1|\beta_1|^2 - E_2|\beta_2|^2 \right] \\ &= |\beta_1|^2|\beta_2|^2 (E_1 - E_2)^2,\end{aligned}\quad (24.16)$$

gdzie ponownie posłużyliśmy się relacją (24.4). Oczywiście uzyskany w ten sposób wynik jest identyczny z uprzednim, tj. z (24.14).

Energia układu ma więc różną od zera dyspersję energii. Twierdzenie (3.84) nie jest spełnione. Stan  $\psi(\vec{r}, t)$  nie jest stanem własnym hamiltonianu, mimo że jest superpozycją takich stanów.

Identyczne rozumowanie można przeprowadzić dla funkcji falowej będącej superpozycją stanów własnych dowolnej innej obserwabli  $\hat{K}$ . Wnioski będą takie same:  $\psi(\vec{r}, t)$  nie będzie stanem własnym  $\hat{K}$ .

## 24.2 Pomiary i stany pośrednie

Rozważmy pewien układ fizyczny, w którym można określić dwie niekomutujące obserwabli  $\hat{A}$  i  $\hat{B}$ . Ponieważ są one nieprzemienne więc zbiory ich stanów własnych wyznaczają w przestrzeni stanów dwie różne bazy

$$\hat{A}|a_k\rangle = \alpha_k|a_k\rangle \quad \{|a_k\rangle\} - \text{ baza w } \mathcal{H}, \quad (24.17a)$$

$$\hat{B}|b_m\rangle = \beta_m|b_m\rangle \quad \{|b_m\rangle\} - \text{ baza w } \mathcal{H}. \quad (24.17b)$$

Obie bazy są ortonormalne i zupełne

$$\langle a_k | a_{k'} \rangle = \delta_{kk'} \quad \sum_k |a_k\rangle \langle a_k| = \hat{1}, \quad (24.18a)$$

$$\langle b_m | b_{m'} \rangle = \delta_{mm'} \quad \sum_m |b_m\rangle \langle b_m| = \hat{1}. \quad (24.18b)$$

Przyjmujemy (dla prostoty rozważań), że wartości własne obu obserwabli  $\{\alpha_k\}$  i  $\{\beta_m\}$  są niezdegenerowane.

### 24.2.1 Doświadczenie 1: dwa kolejne pomiary

Niech stan układu, w pewnej chwili początkowej, będzie dany wektorem  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ . W tak przygotowanym układzie dokonujemy pomiaru obserwabli  $\hat{A}$ . W wyniku pomiaru, z prawdopodobieństwem

$$\mathcal{P}(|a_k\rangle \leftarrow |\psi\rangle) = |\langle a_k | \psi \rangle|^2 = \langle \psi | a_k \rangle \langle a_k | \psi \rangle = \langle \psi | \mathbf{P}_k^{(a)} | \psi \rangle, \quad (24.19)$$

gdzie  $\mathbf{P}_k^{(a)} = |a_k\rangle \langle a_k|$  jest operatorem rzutu na stan  $|a_k\rangle$ , otrzymano wartość własną  $\alpha_k$  obserwabli  $\hat{A}$ . Natychmiast po pomiarze nastąpiła także redukcja stanu  $|\psi\rangle$  do stanu

$$\begin{aligned}|\psi\rangle &\xrightarrow{\text{pomiar } \alpha_k} |\psi'\rangle = \frac{\mathbf{P}_k^{(a)}\psi}{\|\mathbf{P}_k^{(a)}\psi\|} \\ &= |a_k\rangle \frac{\langle a_k | \psi \rangle}{|\langle a_k | \psi \rangle|} = |a_k\rangle \frac{\langle a_k | \psi \rangle}{|\langle a_k | \psi \rangle|},\end{aligned}\quad (24.20)$$

bo stan  $|a_k\rangle$  jest z założenia unormowany. Czynniki po prawej stronie (24.20) jest czynnikiem fazowym, więc możemy napisać

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\text{pomiar } \alpha_k} |\psi'\rangle = |a_k\rangle e^{i\phi_k}. \quad (24.21)$$

Podkreślmy raz jeszcze, że po pomiarze  $\hat{A}$  układ przeszedł (nastąpiła redukcja stanu) do stanu (24.21) z prawdopodobieństwem (24.19).

Tuż po pomiarze  $\hat{A}$  dokonujemy następnego pomiaru, lecz tym razem mierzymy obserwabłą  $\hat{B}$ . Ważne jest, aby odstęp czasu pomiędzy pomiarami był mały, aby ewolucja czasowa (zgodna z równaniem Schrödingera) nie zdażyła w znaczący sposób zmienić stanu  $|\psi'\rangle$ . Wobec tego pomiar  $\hat{B}$  z prawdopodobieństwem (czynniki fazowy  $e^{i\phi_k}$  nie ma tu znaczenia)

$$\begin{aligned}\mathcal{P}(|b_m\rangle \leftarrow |\psi'\rangle) &= |\langle b_m | \psi' \rangle|^2 = |\langle b_m | a_k \rangle|^2 \\ &= \mathcal{P}(|b_m\rangle \leftarrow |a_k\rangle),\end{aligned}\quad (24.22)$$

da wartość własną  $\beta_m$  obserwabli  $\hat{B}$ . Nastąpi także (z tym samym prawdopodobieństwem) redukcja stanu

$$|\psi'\rangle \xrightarrow{\text{pomiar } \beta_m} |\psi''\rangle = |b_m\rangle e^{i\theta_k}. \quad (24.23)$$

Oba pomiary są całkowicie niezależne. Stan  $|\psi'\rangle$  wystąpił po pomiarze  $\hat{A}$  z prawdopodobieństwem  $\mathcal{P}(|a_k\rangle \leftarrow |\psi\rangle)$ . Prawdopodobieństwo łączne tego, że w wyniku pomiaru  $\hat{A}$  otrzymano wartość  $\alpha_k$ , zaś pomiar  $\hat{B}$  dał  $\beta_m$  wynosi

$$\begin{aligned}\mathcal{P}(|b_m\rangle \leftarrow |a_k\rangle \leftarrow |\psi\rangle) &= \mathcal{P}(|b_m\rangle \leftarrow |a_k\rangle) \mathcal{P}(|a_k\rangle \leftarrow |\psi\rangle) \\ &= |\langle b_m | a_k \rangle|^2 |\langle a_k | \psi \rangle|^2.\end{aligned}\quad (24.24)$$

Prawdopodobieństwo to możemy także zapisać za pomocą odpowiednich operatorów rzutowych w postaci

$$\begin{aligned}\mathcal{P}(|b_m\rangle \leftarrow |a_k\rangle \leftarrow |\psi\rangle) &= \langle \psi | a_k \rangle \langle a_k | b_m \rangle \langle b_m | a_k \rangle \langle a_k | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \mathbf{P}_k^{(a)} \mathbf{P}_m^{(b)} \mathbf{P}_k^{(a)} | \psi \rangle\end{aligned}\quad (24.25)$$

W układzie dokonano (szybko, jeden po drugim) pomiarów obserwabli  $\hat{A}$  i  $\hat{B}$ , co spowodowało przejścia

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\text{pomiar } \alpha_k} |a_k\rangle \xrightarrow{\text{pomiar } \beta_m} |b_m\rangle, \quad (24.26)$$

gdzie pominęliśmy czynniki fazowe. Prawdopodobieństwo całego procesu jest równe iloczynowi (24.24) prawdopodobieństw poszczególnych przejść. Zwracamy uwagę, że dzięki pomiarowi  $\hat{A}$  stan pośredni został ustalony, zaszła bowiem redukcja (24.21).

### 24.2.2 Doświadczenie 2: bez stanu pośredniego

Rozważmy znów ten sam układ fizyczny, przygotowany w tym samym stanie początkowym  $|\psi\rangle$ . Zbadamy teraz sytuację, w której od razu mierzymy obserwabłą  $\hat{B}$ , pomijając pomiar pośredni – obserwabli  $\hat{A}$ . W tym przypadku z prawdopodobieństwem

$$\mathcal{P}(|b_m\rangle \leftarrow |\psi\rangle) = |\langle b_m | \psi \rangle|^2 = \langle \psi | b_m \rangle \langle b_m | \psi \rangle = \langle \psi | \mathbf{P}_m^{(b)} | \psi \rangle, \quad (24.27)$$

otrzymano wartość własną  $\beta_m$  obserwabli  $\hat{B}$ . Stan  $|\psi\rangle$  uległ redukcji (z tym samym prawdopodobieństwem) do stanu

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\text{pomiar } \beta_m} |\tilde{\psi}\rangle = |b_m\rangle e^{i\lambda_m}. \quad (24.28)$$

Zanalizujmy uważnie prawdopodobieństwo (24.27). Korzystamy z zupełności (24.18a) stanów własnych obserwabli  $\hat{A}$ , dzięki czemu mamy

$$\begin{aligned}\mathcal{P}(|b_m\rangle \leftarrow |\psi\rangle) &= \langle \psi | b_m \rangle \langle b_m | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \hat{\mathbf{1}} | b_m \rangle \langle b_m | \hat{\mathbf{1}} | \psi \rangle \\ &= \sum_k \langle \psi | a_k \rangle \langle a_k | b_m \rangle \sum_{k'} \langle b_m | a_{k'} \rangle \langle a_{k'} | \psi \rangle.\end{aligned}\quad (24.29)$$

W otrzymanej podwójnej sumie wyodrębnijmy te składniki, w których  $k = k'$ , otrzymamy wówczas

$$\begin{aligned}
 \mathcal{P}(|b_m\rangle \leftarrow |\psi\rangle) &= \sum_k \langle \psi | a_k \rangle \langle a_k | b_m \rangle \langle b_m | a_k \rangle \langle a_k | \psi \rangle \\
 &\quad + \sum_k \sum_{k' \neq k} \langle \psi | a_k \rangle \langle a_k | b_m \rangle \langle b_m | a_{k'} \rangle \langle a_{k'} | \psi \rangle \\
 &= \sum_k |\langle b_m | a_k \rangle|^2 |\langle a_k | \psi \rangle|^2 \\
 &\quad + \sum_k \sum_{k' \neq k} \langle \psi | a_k \rangle \langle a_k | b_m \rangle \langle b_m | a_{k'} \rangle \langle a_{k'} | \psi \rangle.
 \end{aligned} \tag{24.30}$$

W pierwszym składniku rozpoznajemy iloczyn prawdopodobieństw typu (24.24), tym samym piszemy

$$\begin{aligned}
 \mathcal{P}(|b_m\rangle \leftarrow |\psi\rangle) &= \sum_k \mathcal{P}(|b_m\rangle \leftarrow |a_k\rangle \leftarrow |\psi\rangle) \\
 &\quad + \sum_k \sum_{k' \neq k} \{ \text{człony interferencyjne} \} \\
 &= \sum_k \mathcal{P}(|b_m\rangle \leftarrow |a_k\rangle) \mathcal{P}(|a_k\rangle \leftarrow |\psi\rangle) \\
 &\quad + \sum_k \sum_{k' \neq k} \{ \text{człony interferencyjne} \}.
 \end{aligned} \tag{24.31}$$

Jest to bardzo ważny rezultat. Stany początkowy i końcowy są w obu doświadczeniach te same. Jednak prawdopodobieństwo obu eksperymentów jest istotnie różne – gdy nie określamy stanu pośredniego pojawiają się złożone wyrazy interferencyjne.

### 24.2.3 Dyskusja

Różnica prawdopodobieństw wyników obu doświadczeń polega na tym, że w doświadczeniu pierwszym dokonaliśmy pomiaru pośredniego (obserwabili  $\hat{A}$ ). Zaburzenie układu wywołane pomiarem  $\hat{A}$  likwiduje człony interferencyjne i ustala stan pośredni  $|a_k\rangle$ . W drugim doświadczeniu nie można powiedzieć, że układ "przechodzi" przez taki, czy inny stan  $|a_k\rangle$ . Przed pomiarem obserwacji  $\hat{B}$  wszystkie stany  $\{|a_k\rangle\}$  są "możliwe", interferują ze sobą i stąd pojawia się drugi składnik wzoru (24.31). Uzyskanie (jak w doświadczeniu pierwszym) informacji o stanie pośrednim niszczy ich spójność i człony interferencyjne nie pojawiają się.

Sytuacja ta jest w pewnej mierze analogiczna do interferencyjnego doświadczenia Younga. Jeżeli określimy stan pośredni (tj. stwierdzimy przez który otwór przesłony przejdzie foton) to zniszczymy obraz interferencyjny na ekranie.

"Nieokreśloność" stanów pośrednich (tzn. sytuacja, gdy nie dokonujemy pomiarów pozwalających je określić) ma więc zasadnicze znaczenie przy przewidywaniu wyników doświadczeń. W mechanice klasycznej zawsze znamy stany pośrednie, bowiem w przypadku klasycznym nie ma czegoś takiego jak redukcja stanu. Klasyczny pomiar nie zakłóca stanu układu. W mechanice kwantowej, jak pokazaliśmy, sytuacja jest jednak zupełnie inna.

\*\*\*\*\*