

## Rozdział 3

# Podstawy formalizmu mechaniki kwantowej

W zasadzie wykład metod matematycznych fizyki (II-gi rok studiów) powinien zapewnić odpowiednie przygotowanie matematyczne czytelnika. Mimo to jednak choćby dla ustalenia notacji przypomnimy tu najistotniejsze fakty. Podkreślamy, że celem niniejszego wykładu nie jest ścisłość matematyczna, lecz raczej pogładowość, która pozwala skoncentrować się bardziej na fizycznych, niż matematycznych aspektach mechaniki kwantowej. Wiele stwierdzeń, czy własności obiektów matematycznych podamy bez dowodów, czy wyprowadzeń. Czytelnika zainteresowanego fizyką matematyczną odsyłamy do bardziej specjalistycznej literatury.

### 3.1 Przestrzeń funkcji falowych i operatory

#### 3.1.1 Przestrzeń funkcji falowych – przestrzeń Hilberta

**Uwaga :**

W wielu poniższych wzorach będziemy pomijać argumenty funkcji, co nie powinno wpłynąć na przejrzystość i sensowność formuł.

**Przestrzeń wektorowa  $\mathcal{F}$  funkcji falowych**

Interpretacja probabilistyczna narzuca na funkcje falowe cząstki (układu fizycznego) warunek

$$\int_{\mathcal{V}} d^3r \, |\psi(\vec{r}, t)|^2 = \|\psi\|^2 = 1. \quad (3.1)$$

Ogranicza to klasę dopuszczalnych funkcji falowych do przestrzeni funkcji całkowalnych z kwadratem. Przestrzeń ta jest przestrzenią Hilberta, oznaczaną zazwyczaj przez  $\mathcal{L}^2$ . Dodatkowe przesłanki fizyczne każą dalej ograniczyć przestrzeń funkcyjną. Żądamy więc, aby funkcje falowe miały własności:

- były ciągłe i różniczkowalne tyle razy ile trzeba;
- na brzegach obszaru  $\mathcal{V}$  funkcje falowe powinny znikać;
- jeśli  $\mathcal{V}$  – obszar nieskończony, to  $\lim_{|\vec{r}| \rightarrow \infty} \psi(\vec{r}) = 0$ .

A zatem pracujemy na ogół w podprzestrzeni przestrzeni  $\mathcal{L}^2$ . Podprzestrzeń tą oznaczymy przez  $\mathcal{F}$ . W niektórych przypadkach wygodnie jest pracować w przestrzeni funkcji nienormalizowanych w powyższym sensie. Sytuacja taka ma miejsce np. dla cząstki swobodnej (gdy energia potencjalna znika). O sytuacji tej już wspominaliśmy i wskazaliśmy na sposoby ominięcia kłopotów z funkcjami nienormalizowanymi. Powrócimy do tego problemu później.

Fakt, że funkcje falowe tworzą przestrzeń wektorową jest bardzo istotny. Własności przestrzeni wektorowych wskazują, że kombinacje liniowe funkcji falowych są także funkcjami falowymi. W ten sposób, niejako automatycznie uwzględniamy zasadę superpozycji.

Przestrzeń  $\mathcal{F}$  jest wyposażona w naturalny iloczyn skalarny

$$\varphi, \psi \in \mathcal{F} \longrightarrow \langle \varphi | \psi \rangle \in \mathbb{C}, \quad (3.2)$$

który jest zdefiniowany przez następującą całkę

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \int_{\mathcal{V}} d^3r \varphi(\vec{r})^* \psi(\vec{r}). \quad (3.3)$$

Iloczyn skalarny w przestrzeni wektorowej musi spełniać warunki:

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \langle \psi | \varphi \rangle^*, \quad (3.4a)$$

$$\langle \varphi | (\lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2) \rangle = \lambda_1 \langle \varphi | \psi_1 \rangle + \lambda_2 \langle \varphi | \psi_2 \rangle, \quad (3.4b)$$

$$\langle (\lambda_1 \varphi_1 + \lambda_2 \varphi_2) | \psi \rangle = \lambda_1^* \langle \varphi_1 | \psi \rangle + \lambda_2^* \langle \varphi_2 | \psi \rangle. \quad (3.4c)$$

przy czym relacja (3.4c) wynika z dwóch poprzednich. Formuły (3.4b) i (3.4c) oznaczają, jak mówimy, że iloczyn skalarny jest liniowy w drugim, a antyliniowy w pierwszym składniku.

Z definicji iloczynu skalarnego wynika określenie normy wektora z przestrzeni  $\mathcal{F}$

$$\mathbb{R} \ni \|\psi\|^2 = \langle \psi | \psi \rangle = \int_{\mathcal{V}} d^3r |\psi(\vec{r})|^2 = \int_{\mathcal{V}} d^3r \psi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}). \quad (3.5)$$

Iloczyn skalarny w przestrzeni  $\mathcal{F}$  spełnia bardzo ważną nierówność, zwaną nierównością Schwarza

$$|\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle|^2 \leq \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle \langle \psi_2 | \psi_2 \rangle, \quad (3.6)$$

przy czym równość zachodzi tylko wtedy, gdy wektory  $\psi_1, \psi_2 \in \mathcal{F}$  są proporcjonalne, to znaczy gdy  $\psi_1 = \lambda \psi_2$ , ( $\lambda \in \mathbb{C}$ ).

### Baza ortonormalna w $\mathcal{F}$

W przestrzeni Hilberta (wektorowej) można wybrać bazę ortonormalną, tj. zbiór funkcji (wektorów)  $\{u_i\}$  spełniających warunek

$$\langle u_i | u_j \rangle = \int_{\mathcal{V}} d^3r u_i^*(\vec{r}) u_j(\vec{r}) = \delta_{ij}, \quad (3.7)$$

i takich, że dla dowolnej funkcji falowej  $\psi(\vec{r}) \in \mathcal{F}$  można zbudować rozkład

$$\psi(\vec{r}) = \sum_i c_i u_i(\vec{r}), \quad c_i \in \mathbb{C}. \quad (3.8)$$

Rozkład ten jest jednoznaczny. Jeśli funkcja falowa zależy od innych parametrów (np. od czasu), to współczynniki  $c_i$  rozkładu także będą zależeć od tych parametrów. Łatwo sprawdzić, że współczynniki  $c_i$  dane są wzorem

$$c_k = \langle u_k | \psi \rangle = \int_{\mathcal{V}} d^3r u_k^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}). \quad (3.9)$$

Zwróćmy uwagę, że indeksy numerujące wektory bazy  $i \in \mathcal{I}$  – tworzą pewien zbiór  $\mathcal{I}$ . Indeksów tych jest tyle, ile wynosi wymiar przestrzeni Hilberta  $\mathcal{F}$ . Zatem zbiór  $\mathcal{I}$  może być skończony lub nie, co zależy od charakteru konkretnego zagadnienia.

Dla dwóch wektorów  $\varphi, \psi \in \mathcal{F}$  możemy wypisać rozkłady typu (3.8), to jest

$$\varphi(\vec{r}) = \sum_i b_i u_i(\vec{r}), \quad \psi(\vec{r}) = \sum_i c_i u_i(\vec{r}), \quad (3.10)$$

wówczas z ortonormalności bazy (i z liniowości przestrzeni) wynika, że

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \sum_i b_i^* c_i, \quad (3.11a)$$

$$\|\varphi\|^2 = \sum_i |b_i|^2, \quad \text{oraz} \quad \|\psi\|^2 = \sum_i |c_i|^2. \quad (3.11b)$$

W szczególności, dla unormowanej funkcji falowej mamy więc

$$\|\psi\|^2 = 1 \iff \sum_i |c_i|^2 = 1, \quad (3.12)$$

co oczywiście ma zasadnicze znaczenie przy probabilistycznej interpretacji funkcji falowej.

### Relacja zupełności

Rozważmy rozkład (3.8) funkcji falowej i weźmy pod uwagę wyrażenie (3.9) dla współczynników tego rozkładu. Otrzymujemy wtedy

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) &= \sum_i c_i u_i(\vec{r}) = \sum_i \langle u_i | \psi \rangle u_i(\vec{r}), = \sum_i \left[ \int_{\mathcal{V}} d^3x u_i^*(\vec{x}) \psi(\vec{x}) \right] u_i(\vec{r}) \\ &= \int_{\mathcal{V}} d^3x \left[ \sum_i u_i^*(\vec{x}) u_i(\vec{r}) \right] \psi(\vec{x}). \end{aligned} \quad (3.13)$$

Porównując obie strony tej relacji, wnioskujemy że

$$\sum_i u_i^*(\vec{x}) u_i(\vec{r}) = \delta(\vec{x} - \vec{r}), \quad (3.14)$$

co stanowi tzw. relację zupełności dla funkcji  $\{u_i(\vec{r})\}$  tworzących bazę w przestrzeni  $\mathcal{F}$ . I na odwrót, zbiór funkcji spełniających relację (3.14) tworzy bazę w  $\mathcal{F}$ .

### 3.1.2 Operatory na przestrzeni funkcji falowych

#### Operatory liniowe w $\mathcal{F}$

Operator działający na przestrzeni  $\mathcal{F}$  jest odwzorowaniem

$$\hat{A} : \mathcal{F} \longrightarrow \mathcal{F}, \quad (3.15)$$

to znaczy wektorowi (funkcji)  $\psi \in \mathcal{F}$  przyporządkowuje inny wektor  $\psi' = \hat{A}\psi \in \mathcal{F}$  (z tej samej przestrzeni). W naszych rozważaniach ograniczamy się do badania operatorów liniowych, to jest takich, dla których

$$\hat{A}(\lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2) = \lambda_1 \hat{A}\psi_1 + \lambda_2 \hat{A}\psi_2, \quad (3.16)$$

dla dowolnych  $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$ .

Operatory można mnożyć (składać) (zwróćmy uwagę, że jako pierwszy działa na funkcję falową operator stojący z prawa)

$$(\hat{A}\hat{B})\psi = \hat{A}(\hat{B}\psi) = \hat{A}\psi', \quad (3.17)$$

gdzie  $\psi' = \hat{B} \psi$ . Należy z całą mocą podkreślić, że mnożenie operatorów jest na ogół nieprzemienne (nie jest obojętne w jakiej kolejności działają), to jest

$$\hat{A} \hat{B} \neq \hat{B} \hat{A}. \quad (3.18)$$

Bardzo pożyteczne jest pojęcie komutatora dwóch operatorów

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A} \hat{B} - \hat{B} \hat{A}. \quad (3.19)$$

Za jego pomocą, zamiast relacji (3.18), wygodnie jest zapisać nieprzemienność mnożenia (składania) operatorów w postaci

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{C}, \quad (3.20)$$

gdzie operator  $\hat{C}$  jest na ogół różny od zera.

Przykładem operatorów działających na funkcje falowe są: operator mnożenia funkcji falowej przez współrzędną  $x$  i operator różniczkowania względem tej współrzędnej

$$\hat{X} \psi(\vec{r}) = x \psi(\vec{r}), \quad (3.21a)$$

$$\hat{D}_x \psi(\vec{r}) = \frac{\partial}{\partial x} \psi(\vec{r}). \quad (3.21b)$$

Pracując z tymi operatorami należy zachować pewną ostrożność wynikającą stąd, że mogą one wyprowadzać funkcje falowe z przestrzeni funkcji normowalnych, tzn. rezultat ich działania na funkcję normowalną może być funkcją, która już nie jest normowalna. Jest to pewien niuans matematyczny, który może w pewnych zastosowaniach mieć duże znaczenie. Mimo to jednak, nie będziemy się zbytnio przejmować tą trudnością. W większości badanych tu konkretnych przypadków takich problemów nie ma.

**Twierdzenie 3.1** *Zdefiniowane powyżej operatory  $\hat{X}$  oraz  $\hat{D}_x$  są nieprzemienne. Ich komutator wynosi*

$$[\hat{X}, \hat{D}_x] = \left[ x, \frac{\partial}{\partial x} \right] = -1. \quad (3.22)$$

**Dowód.** Niech  $\psi(\vec{r}) \in \mathcal{F}$  będzie dowolną funkcją falową. Wówczas mamy

$$\begin{aligned} [\hat{X}, \hat{D}_x] \psi(\vec{r}) &= \left( x \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} x \right) \psi(\vec{r}) = x \frac{\partial \psi(\vec{r})}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} [x \psi(\vec{r})] \\ &= x \frac{\partial \psi(\vec{r})}{\partial x} - \left( \frac{\partial x}{\partial x} \right) \psi(\vec{r}) - x \frac{\partial \psi(\vec{r})}{\partial x} = -\psi(\vec{r}) \end{aligned} \quad (3.23)$$

bowiem składniki pierwszy i trzeci (zawierające pochodne funkcji falowej) się znoszą. Z dowolności funkcji  $\psi$  wynika teza (3.22). ■

### Elementy macierzowe operatorów

Operator  $\hat{A}$  działając na funkcję falową  $\psi$  produkuje nową funkcję  $\psi' = \hat{A} \psi$ . Można więc obliczać iloczyn skalarny

$$\langle \varphi | \psi' \rangle = \langle \varphi | \hat{A} \psi \rangle = \int_V d^3r \varphi^*(\vec{r}) [\hat{A} \psi(\vec{r})]. \quad (3.24)$$

Tak obliczoną liczbę (w ogólności zespoloną) nazywamy elementem macierzowym operatora  $\hat{A}$  i zwyczajowo zapisujemy jako

$$\int_V d^3r \varphi^*(\vec{r}) \hat{A} \psi(\vec{r}) = \langle \varphi | \hat{A} | \psi \rangle. \quad (3.25)$$

Jak pokażemy dalej, notacja ta jest wygodna i pożyteczna. Ma ona charakter mnemotechniczny, a ponadto pozwala na pewne interesujące uogólnienia.

### Zagadnienie własne dla operatora

Równanie operatorowe  $\hat{A}\psi = \lambda\psi$ , gdzie  $\lambda \in \mathbb{C}$ , nazywamy zagadnieniem własnym dla operatora  $\hat{A}$ . Wektor  $\psi$  nazywamy wektorem własnym, zaś liczbę  $\lambda$  (w ogólności zespoloną) wartością własną. Intuicyjnie można to zrozumieć w następujący sposób: wektory własne operatora  $\hat{A}$  są to takie wektory, że działanie operatora  $\hat{A}$  "wydłuża" je lub "skraca", przy czym jednak ich "kierunek" pozostaje niezmienny.

### Operatory sprzężone

Niech  $\hat{A}$  będzie operatorem na przestrzeni Hilberta  $\mathcal{F}$ . Operator  $\hat{A}^\dagger$  nazwiemy sprzężonym do operatora  $\hat{A}$ , jeśli dla wszystkich  $\varphi, \psi \in \mathcal{F}$  spełniony jest warunek

$$\langle \psi | (\hat{A}^\dagger \varphi) \rangle = \langle \varphi | (\hat{A} \psi) \rangle^* = \langle (\hat{A} \psi) | \varphi \rangle. \quad (3.26)$$

Sprzęganie operatora jest więc swego rodzaju regułą przenoszenia go z prawego do lewego składnika iloczynu skalarnego (lub na odwrót). Zapisując iloczyny skalarne za pomocą całek otrzymamy

$$\int_V d^3r \psi^*(\vec{r}) (\hat{A}^\dagger \varphi(\vec{r})) = \left[ \int_V d^3r \varphi^*(\vec{r}) (\hat{A} \psi(\vec{r})) \right]^* = \int_V d^3r (\hat{A} \psi(\vec{r}))^* \varphi(\vec{r}). \quad (3.27)$$

Posługując się elementami macierzowymi wzór (warunek) (3.26) zapiszemy jako

$$\langle \psi | \hat{A}^\dagger | \varphi \rangle = \langle \varphi | \hat{A} | \psi \rangle^* \quad \text{lub} \quad \langle \psi | \hat{A}^\dagger | \varphi \rangle^* = \langle \varphi | \hat{A} | \psi \rangle, \quad (3.28)$$

gdzie druga równość jest po prostu sprzężeniem zespolonym pierwszej.

Operator  $\hat{A}^\dagger$  – sprzężony do danego operatora  $\hat{A}$  jest wyznaczony jednoznacznie, przy czym podstawowe własności operacji sprzęgania operatorów są następujące

$$(\hat{A} + \hat{B})^\dagger = \hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger, \quad (3.29a)$$

$$(\hat{A} \hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger, \quad (3.29b)$$

$$(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}, \quad (3.29c)$$

$$(\alpha \hat{A})^\dagger = \alpha^* \hat{A}^\dagger, \quad \text{dla } \alpha \in \mathbb{C}. \quad (3.29d)$$

Dowody (wyprowadzenia) tych własności można znaleźć w podręcznikach algebry liniowej lub metod matematycznych fizyki.

Zwróćmy uwagę, że jeżeli przestrzeń  $\mathcal{F}$  jest skończenie wymiarowa, to operator  $\hat{A}$  w niej działający, jest reprezentowany przez macierz złożoną z elementów  $a_{ij} \in \mathbb{C}$ . Operator sprzężony  $\hat{A}^\dagger$  jest wówczas reprezentowany przez macierz transponowaną o współczynnikach sprzężonych w sposób zespolony

$$(\hat{A})_{ij} = a_{ij} \quad \implies \quad (\hat{A}^\dagger)_{ij} = a_{ji}^*. \quad (3.30)$$

**Lemat 3.1** Operatorem sprzężonym do operatora  $\hat{D}_x$  (patrz (3.21b)) jest operator

$$\hat{D}_x^\dagger = \left( \frac{\partial}{\partial x} \right)^\dagger = - \frac{\partial}{\partial x}. \quad (3.31)$$

**Dowód.** Jako punkt wyjścia weźmy prawą stronę warunku (3.26) lub (3.27). Dla dowolnych funkcji falowych  $\psi(\vec{r})$  i  $\varphi(\vec{r})$  mamy

$$\langle (\hat{D}_x \psi) | \varphi \rangle = \int_V d^3r \left( \frac{\partial \psi^*(\vec{r})}{\partial x} \right) \varphi(\vec{r}). \quad (3.32)$$

Całkę obliczamy przez części

$$\langle (\hat{D}_x \psi) | \varphi \rangle = \psi^*(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) \Big|_{\partial \mathcal{V}} - \int_{\mathcal{V}} d^3 r \psi^*(\vec{r}) \left( \frac{\partial \varphi(\vec{r})}{\partial x} \right). \quad (3.33)$$

gdzie w pierwszym składniku obliczamy wartości na brzegu  $\partial \mathcal{V}$  obszaru  $\mathcal{V}$ . Człon ten znika na mocy przyjętych na początku rozdziału założeń dotyczących funkcji falowych. A zatem widzimy że

$$\langle (\hat{D}_x \psi) | \varphi \rangle = \int_{\mathcal{V}} d^3 r \psi^*(\vec{r}) \left( -\frac{\partial \varphi(\vec{r})}{\partial x} \right) = \langle \psi | \left( -\frac{\partial}{\partial x} \right) \varphi \rangle. \quad (3.34)$$

Porównując wynik z lewą stroną (3.26) stwierdzamy, że teza (3.31) jest udowodniona. ■

### Funkcje operatorów

Jeżeli zwykła (liczbowa) funkcja  $f(z)$  ma rozwinięcie w szereg potęgowy (szereg Taylora)

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n z^n, \quad f_n \in \mathbb{C}, \quad (3.35)$$

to za pomocą tego rozwinięcia definiujemy funkcję operatora  $\hat{A}$

$$\hat{F} = f(\hat{A}) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n \hat{A}^n. \quad (3.36)$$

Ponieważ umiemy mnożyć i dodawać operatory definicja taka jest zrozumiała. Nie będziemy tu badać matematycznych kwestii dotyczących na przykład zbieżności szeregów operatorowych. W pewnych przypadkach udaje się praktycznie wyliczyć taki szereg, co pozwala zapisać funkcję operatorową w zwartej postaci.

Niech  $\lambda$  i  $\varphi$  będą wartością i wektorem własnym operatora  $\hat{A}$  (tzn.  $\hat{A}\varphi = \lambda\varphi$ ). Wówczas  $\lambda^k$  i  $\varphi$  są rozwiązaniami zagadnienia własnego dla  $k$ -tej potęgi operatora  $\hat{A}$ . Wynika to z wielokrotnego podziałania operatorem  $\hat{A}$  na wektor własny  $\varphi$ . Stosując to rozumowanie do kolejnych składników rozwinięcia (3.36) stwierdzamy, że  $f(\lambda)$  i  $\varphi$  są, odpowiednio, wartością własną i wektorem własnym funkcji operatorowej  $f(\hat{A})$ .

### 3.1.3 Operatory hermitowskie

Operator samosprzężony – hermitowski to taki, że

$$\hat{A} = \hat{A}^\dagger, \quad (3.37)$$

a zatem taki dla którego, na mocy (3.28), zachodzi

$$\langle \psi | \hat{A} | \varphi \rangle = \langle \varphi | \hat{A} | \psi \rangle^*, \quad \text{lub} \quad \langle \psi | \hat{A} | \varphi \rangle^* = \langle \varphi | \hat{A} | \psi \rangle. \quad (3.38)$$

**Twierdzenie 3.2** *Operator  $\hat{P}_x = -i\hbar \hat{D}_x$  jest hermitowski, t.j*

$$(\hat{P}_x)^\dagger = \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^\dagger = \hat{P}_x. \quad (3.39)$$

**Dowód.** Na mocy relacji (3.29d) i (3.31) mamy

$$(\hat{P}_x)^\dagger = (-i\hbar \hat{D}_x)^\dagger = i\hbar (\hat{D}_x)^\dagger = i\hbar (-\hat{D}_x) = \hat{P}_x, \quad (3.40)$$

co kończy dowód. ■

Operatory hermitowskie mają cały szereg pożytecznych własności, z których będziemy w trakcie wykładu często korzystać.

1. Jeżeli  $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ , to  $\hat{A} = 0$  wtedy i tylko wtedy, gdy  $\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = 0$  dla wszystkich wektorów (funkcji)  $\psi \in \mathcal{F}$ .
2. Operator  $\hat{A}$  jest hermitowski wtedy i tylko wtedy, gdy

$$\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \in \mathbb{R}, \quad (3.41)$$

dla każdego  $\psi \in \mathcal{F}$ . Relacja ta wynika automatycznie z definicji (3.38).

3. Wartości własne operatora hermitowskiego są rzeczywiste.

$$\hat{A} - \text{hermitowski, oraz } \hat{A}u = \lambda u, \quad \implies \quad \lambda \in \mathbb{R}. \quad (3.42)$$

Z (3.41) mamy  $\langle u | \hat{A} | u \rangle \in \mathbb{R}$ . Wobec tego uzyskujemy  $\langle u | \hat{A} | u \rangle = \lambda \langle u | u \rangle = \lambda \|u\|^2 \in \mathbb{R}$ . Ponieważ norma wektora jest z definicji rzeczywista, więc w rezultacie

$$\lambda = \frac{\langle u | \hat{A} | u \rangle}{\|u\|^2} \in \mathbb{R}. \quad (3.43)$$

4. Jeżeli  $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$  (operator hermitowski) to jego wektory własne odpowiadające różnym wartościom własnym są ortogonalne.

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{A} - \text{hermitowski} \\ \hat{A}u_1 = \lambda_1 u_1 \\ \hat{A}u_2 = \lambda_2 u_2 \\ \lambda_1 \neq \lambda_2 \end{array} \right\} \implies \left\{ \begin{array}{l} u_1 \perp u_2 \\ \text{to znaczy} \\ \langle u_1 | u_2 \rangle = 0 \end{array} \right\}. \quad (3.44)$$

Z założenia i z własności (3.4) iloczynu skalarnego mamy następujący ciąg równości  $\lambda_2 \langle u_1 | u_2 \rangle = \langle u_1 | \lambda_2 u_2 \rangle = \langle u_1 | \hat{A} | u_2 \rangle$ . Korzystamy dalej z (3.38) i uzyskujemy

$$\begin{aligned} \lambda_2 \langle u_1 | u_2 \rangle &= \langle u_2 | \hat{A} | u_1 \rangle^* = \langle u_2 | \lambda_1 u_1 \rangle^* = (\lambda_1 \langle u_2 | u_1 \rangle)^* \\ &= \lambda_1^* \langle u_2 | u_1 \rangle^* = \lambda_1 \langle u_1 | u_2 \rangle \end{aligned} \quad (3.45)$$

co wynika z faktu, że  $\lambda_1 \in \mathbb{R}$ , oraz z własności iloczynu skalarnego. A zatem

$$(\lambda_2 - \lambda_1) \langle u_1 | u_2 \rangle = 0. \quad (3.46)$$

Ponieważ  $\lambda_1 \neq \lambda_2$ , więc musi być  $\langle u_1 | u_2 \rangle = 0$ , co kończy dowód.

5. Mówimy, że wartości własne operatora (hermitowskiego, ale niekoniecznie) są zdegenerowane, jeśli jednej i tej samej wartości własnej odpowiada  $g_n$  różnych wektorów własnych. Wówczas

$$\hat{A}u_n^{i_n} = a_n u_n^{i_n}, \quad i_n = 1, 2, \dots, g_n. \quad (3.47)$$

a więc jednej wartości własnej  $a_n$  odpowiadają funkcje własne dodatkowo numerowane przez  $i_n = 1, 2, \dots, g_n$ . Liczbę  $g_n$  nazywamy stopniem degeneracji wartości własnej  $a_n$ . Mówimy, że  $a_n$  jest  $g_n$ -krotnie zdegenerowana. Funkcje  $\{u_n^{i_n}\}_{i_n=1}^{g_n}$  odpowiadają jednej i tej samej wartości własnej, nie możemy więc *a priori* twierdzić, że są one ortogonalne. Można jednak udowodnić, że funkcje te rozpinają  $g_n$ -wymiarową podprzestrzeń  $\mathcal{F}_n$  przestrzeni  $\mathcal{F}$ , a więc stanowią w  $\mathcal{F}_n$  bazę, którą można następnie poddać procedurze ortogonalizacji i w końcu unormować.

6. Dowolna kombinacja liniowa funkcji  $\{u_n^{i_n}\}_{i_n=1,2,\dots,g_n}$  odpowiadających  $g_n$ -krotnie zdegenerowanej wartości własnej  $a_n$  operatora  $\hat{A}$

$$\psi_n = \sum_{i_n=1}^{g_n} C_n^{i_n} u_n^{i_n}, \quad C_n^{i_n} \in \mathbb{C}, \quad (3.48)$$

jest funkcją własną operatora  $\hat{A}$  odpowiadającą tej samej wartości własnej. Istotnie, z liniowości problemu wynika, że

$$\begin{aligned} \hat{A} \psi_n &= \hat{A} \left( \sum_{i_n=1}^{g_n} C_n^{i_n} u_n^{i_n} \right) = \sum_{i_n=1}^{g_n} C_n^{i_n} \hat{A} u_n^{i_n} \\ &= \sum_{i_n=1}^{g_n} C_n^{i_n} a_n u_n^{i_n} = a_n \left( \sum_{i_n=1}^{g_n} C_n^{i_n} u_n^{i_n} \right) = a_n \psi_n, \end{aligned} \quad (3.49)$$

co kończy uzasadnienie tezy.

7. Jeżeli więc badając zagadnienie własne dla operatora  $\hat{A}$  – hermitowskiego znajdziemy wszystkie wartości własne  $\{a_n\}$  o stopniu degeneracji odpowiednio równym  $g_n$ , to podzielimy przestrzeń  $\mathcal{F}$  na  $g_n$ -wymiarowe podprzestrzenie  $\mathcal{F}_n$  (oczywiście może się zdarzyć  $g_n = 1$ ). Przeprowadzając (o ile to potrzebne, gdy  $g_n \neq 1$ ) procedurę ortonormalizacji w każdej z podprzestrzeni  $\mathcal{F}_n$ , otrzymamy ortonormalny zbiór wektorów (funkcji)  $\{u_n^{i_n}\}$  (funkcje odpowiadające różnym  $n$  są, zgodnie z (3.44) ortogonalne). Twierdzimy, że w przestrzeni skończenie wymiarowej

$$\dim \mathcal{F} = N < \infty, \quad \hat{A} = \hat{A}^\dagger, \quad \implies \quad \{u_n^{i_n}\} - \text{baza ortonormalna w } \mathcal{F}. \quad (3.50)$$

W takim przypadku baza liczy skończoną liczbę elementów. Wobec tego, podobnie jak w (3.8) możemy zapisać dowolny wektor (funkcję) z  $\mathcal{F}$  w postaci rozwinięcia

$$\psi(\vec{r}) = \sum_n^N \sum_{i_n=1}^{g_n} C_n^{i_n} u_n^{i_n}(\vec{r}), \quad \text{gdzie} \quad C_n^{i_n} = \langle u_n^{i_n} | \psi \rangle. \quad (3.51)$$

gdzie sumy są skończone. A więc w przestrzeni skończenie wymiarowej dowolny wektor można rozłożyć w bazie utworzonej przez wektory własne operatora hermitowskiego. W przestrzeni nieskończenie wymiarowej twierdzenie to może, ale nie musi, być prawdziwe. Oczywiście o ile zachodzi, to wtedy baza liczy nieskończenie wiele elementów i suma w (3.51) jest także nieskończona.

8. Jeżeli funkcja  $f(z)$  jest rzeczywista (współczynniki rozwinięcia w szereg są rzeczywiste) to wówczas

$$\left\{ \begin{array}{l} f(z) - \text{rzeczywista} \\ \hat{A} = \hat{A}^\dagger - \text{hermitowski} \end{array} \right\} \implies \left\{ \begin{array}{l} \hat{F} = f(\hat{A}) = \hat{F}^\dagger \\ \text{hermitowski} \end{array} \right\}. \quad (3.52)$$

Jeżeli więc operator  $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$  spełnia zagadnienie własne  $\hat{A}u = au$ ,  $a \in \mathbb{R}$ , to zagadnienie własne dla  $f(\hat{A})$  ma rozwiązanie z rzeczywistymi wartościami własnymi  $f(a)$  i tymi samymi wektorami własnymi.

## 3.2 Obserwable i pomiary

### 3.2.1 Obserwable

Obserwabłą nazwiemy taki operator hermitowski, dla którego zbiór wektorów własnych tworzy bazę w przestrzeni  $\mathcal{F}$ . Zatem dla obserwabli, twierdzenie (3.50) obowiązuje, i to niezależnie od

wymiaru przestrzeni  $\mathcal{F}$ . Wobec tego dla obserwabli z definicji mamy

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{A} = \hat{A}^\dagger - \text{obserwabla} \\ \hat{A} u_n^{i_n} = a_n u_n^{i_n} \end{array} \right\} \implies \left\{ \begin{array}{l} a_n \in \mathbb{R}, \text{ degeneracja } g_n\text{-krotna} \\ \{u_n^{i_n}\} - \text{baza ortonormalna w } \mathcal{F} \end{array} \right\} \quad (3.53)$$

Dla dowolnej funkcji falowej  $\psi \in \mathcal{F}$  można zbudować rozkład postaci (3.51), spełniający warunek

$$\sum_n \sum_{i_n=1}^{g_n} |C_n^{i_n}|^2 = 1, \quad (3.54)$$

wynikający z żądania unormowania funkcji falowej (por. (3.12)). W relacjach tych baza  $\{u_n^{i_n}\}$ , a co za tym idzie i sumowania (względem indeksu  $n$ ), mogą być skończone lub nie.

### 3.2.2 Wyniki pomiarów i ich prawdopodobieństwa

Mówiliśmy, że stan układu fizycznego jest w pełni określony przez funkcję falową  $\psi(\vec{r}, t)$  – wektor z pewnej przestrzeni Hilberta  $\mathcal{F}$ . Zajmiemy się teraz omówieniem sposobu przewidywania wyników pomiarów dostarczających informacji o układzie fizycznym. Wskażemy, jak na podstawie znajomości funkcji falowej możemy uzyskać takie informacje. W układach fizycznych można mierzyć różne wielkości je charakteryzujące. Oczywiście to, jakie wielkości mają sens i jakie są mierzalne zależy zarówno od struktury układu, jak i od warunków konkretnego doświadczenia.

Koncepcja pomiaru ma w fizyce klasycznej sens intuicyjny, który nie wymaga specjalnych komentarzy. W mechanice kwantowej sytuacja jest jednak inna. Wynika to przede wszystkim stąd, że pomiar przeprowadzany w układzie kwantowo-mechanicznym zakłóca jego stan. Postaramy się wyjaśnić najważniejsze aspekty pojęcia pomiaru kwantowo-mechanicznego, choć niektóre subtelności są do dziś przedmiotem kontrowersji oraz aktywnych badań naukowych.

Przede wszystkim przyjmiemy, że pomiar jest dokonywany za pomocą makroskopowego urządzenia podlegającego zasadom mechaniki (fizyki) klasycznej. Oznacza to, że do opisu przyrządu pomiarowego nie jest potrzebna mechanika kwantowa. Przyjmujemy też, że aparatura pomiarowa jest, przynajmniej teoretycznie, tak dokładna i precyzyjna jak tylko to potrzebne (w praktyce, niestety, istnieją różnorodne ograniczenia natury technicznej).

Sformułujemy teraz postulaty, mówiące w jaki sposób mechanika kwantowa pozwala przewidywać wyniki pomiarów wiążąc je z funkcją falową układu.

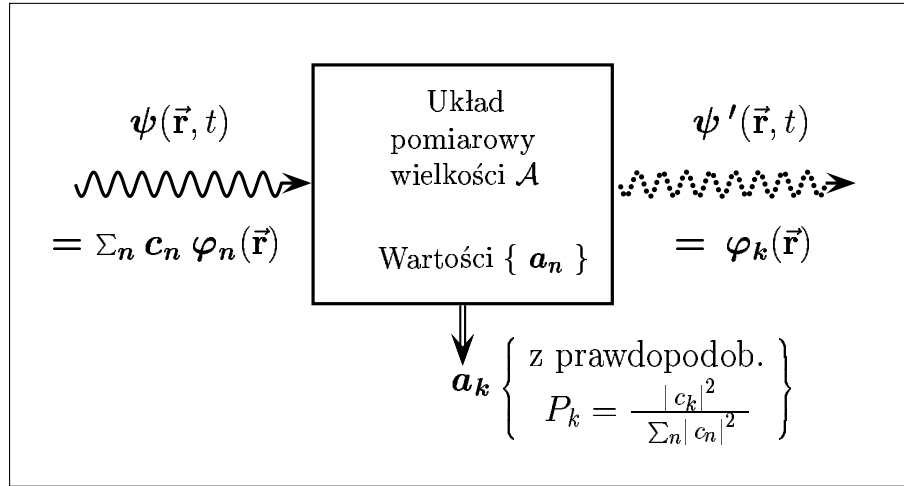
Postulujemy, że każdej wielkości fizycznej  $\mathcal{A}$  (której sensu fizycznego na razie nie precyzujemy), możemy przyporządkować pewną obserwabę

$$\text{wielkość fizyczna } \mathcal{A} \longrightarrow \hat{A} = \hat{A}^\dagger \text{ obserwabla,} \quad (3.55)$$

a więc operator hermitowski, którego wartości własne są rzeczywiste, a wektory własne tworzą bazę ortonormalną w przestrzeni stanów (funkcji falowych).

Następnie postulujemy, że analizując wyniki doświadczenia polegającego na pomiarze pewnej wielkości fizycznej  $\mathcal{A}$  charakteryzującej badany układ fizyczny będziemy zawsze stosować zasadę rozkładu spektralnego. Znaczenie i sens tej zasady jest następujący.

- Wynik pomiaru wielkości  $\mathcal{A}$  musi być liczbą (odpowiednio mianowaną), która należy do zbioru  $\{a_n\}$  wartości własnych obserwabli  $\hat{A}$  przyporządkowanej wielkości  $\mathcal{A}$ . Wyjaśnia to dlaczego żądamy, aby obserwabłą był operator hermitowski – wynik pomiaru musi być



**Rys. 3.1:** Schemat ilustrujący ideę rozkładu spektralnego – wyniki pomiaru wielkości fizycznej  $\mathcal{A}$ .

liczbą rzeczywistą. Zbiór wartości  $\{a_n\}$  może być skończony lub nie (od tego zależy także kształt zbioru wskaźników). Charakter zbioru wartości  $\{a_n\}$  zależy więc zarówno od tego jaki układ fizyczny rozważamy, jak i od tego jaką konkretnie wielkość fizyczną mierzymy. Postulat ten ilustruje środkowa część rysunku 3.1, w której urządzenie pomiarowe "wyrzuca" wartość  $a_n$ .

- Ograniczymy się na razie do dyskusji przypadku bez degeneracji. Założymy, że układ fizyczny został przygotowany w ten sposób, że tuż przed pomiarem jego funkcja falowa miała postać

$$\psi(\vec{r}) = \sum_n C_n u_n(\vec{r}), \quad (3.56)$$

gdzie  $u_n(\vec{r})$  – funkcje własne obserwabli  $\hat{A}$  odpowiadające wartościom własnym  $a_n$  i tworzące bazę w przestrzeni  $\mathcal{F}$ . Ilustruje to fala "wchodząca" do przyrządu pomiarowego (rys.3.1) Mechanika kwantowa pozwala nam jedynie powiedzieć, że prawdopodobieństwo tego, że w wyniku pomiaru wielkości  $\mathcal{A}$  otrzymamy wartość własną  $a_k$  wynosi

$$P_k = \frac{|C_k|^2}{\sum_n |C_n|^2} = \frac{|\langle u_k | \psi \rangle|^2}{\sum_n |\langle u_n | \psi \rangle|^2} = \frac{|\langle u_k | \psi \rangle|^2}{\|\psi\|^2}. \quad (3.57)$$

Mianownik powyższego wyrażenia wypisaliśmy w sposób jawny, jednak suma w nim występująca jest równa jedności (normalizacja funkcji falowej  $\psi$ ), Zatem mianownik ten jest tak naprawdę zbyteczny. Zwróćmy uwagę, że iloczyn skalarny w liczniku tego wyrażenia, to nic innego niż kwadrat modułu rzutu wektora  $\psi$  na (jednowymiarową – przypadek bez degeneracji) podprzestrzeń odpowiadającą wartości własnej  $a_k$ . Iloczyn skalarny  $\langle u_k | \psi \rangle$  nazywamy amplitudą prawdopodobieństwa tego, że w wyniku pomiaru wielkości fizycznej  $\mathcal{A}$  otrzymamy wartość własną  $a_k$  odpowiedniej obserwabli  $\hat{A}$ . Mówimy też niekiedy, że  $\langle u_k | \psi \rangle$  jest amplitudą prawdopodobieństwa tego, że cząstka przygotowana w stanie  $\psi$  jest w stanie  $u_n$ . Stwierdzenie takie ma (niestety) charakter nieco żargonowy i niejako antycypujący pomiar, bowiem w domyśle zostaje powiedzenie, że "w wyniku pomiaru wielkości  $\mathcal{A}$  otrzymamy wartość własną  $a_n$ ". Oczywiście prawdopodobieństwa  $P_k$  dane w

(3.57) spełniają

$$\sum_k P_k = 1, \quad (3.58)$$

bo prawdopodobieństwo otrzymania jakiegokolwiek wyniku pomiaru musi być zawsze równe 1.

- Niezwykle istotne jest to, że zbiór  $\{a_k\}$  możliwych wyników pomiaru wielkości fizycznej  $\mathcal{A}$  nie zależy od tego jaka (przed pomiarem) funkcja falowa  $\psi(\vec{r}, t)$  opisywała stan układu. Zbiór ten zależy jedynie od obserwabli  $\hat{A}$  – od jej wartości własnych. Jakie obserwable i jak skonstruowane dotyczą danego układu zależy od jego natury fizycznej, a nie od tego jaka jest jego aktualna funkcja falowa. Z drugiej strony, prawdopodobieństwa  $P_k$  otrzymania konkretnej wartości  $a_k$  zależą już od  $\psi$  poprzez amplitudy  $C_k = \langle u_k | \psi \rangle$ .
- Z powyższego postulatu wynika, że jeśli układ fizyczny został przygotowany w stanie własnym obserwabli  $\hat{A}$ , to jest gdy w kombinacji (3.56) mamy  $C_n = \delta_{nk}$ , czyli gdy  $\psi(\vec{r}) = u_k(\vec{r})$ , wówczas w wyniku pomiaru wielkości fizycznej  $\mathcal{A}$  otrzymamy wartość  $a_k$  z prawdopodobieństwem równym 1.
- Jeżeli w rezultacie pomiaru wielkości fizycznej  $\mathcal{A}$  otrzymaliśmy wartość własną  $a_k$  obserwabli  $\hat{A}$ , to postulujemy, że po pomiarze następuje tak zwana redukcja funkcji falowej, polegająca na tym, że  $\psi(\vec{r})$  – funkcja falowa przed pomiarem przechodzi w nową funkcję (fala "wychodząca" na rys.3.1)

$$\psi(\vec{r}) \xrightarrow{\text{pomiar } a_k} \psi'(\vec{r}) = u_k(\vec{r}). \quad (3.59)$$

Stan układu po pomiarze jest opisywany przez funkcję falową  $u_k$ , będącą stanem (wektorem) własnym obserwabli  $\hat{A}$  z jednowymiarowej (brak degeneracji) podprzestrzeni  $\mathcal{F}_k$ . Jeśli po pierwszym pomiarze (zanim funkcja falowa zdąży w wyniku ewolucji czasowej zmienić się w znaczący sposób) dokonamy ponownego pomiaru wielkości  $\mathcal{A}$  to, z prawdopodobieństwem 1, otrzymamy znów wartość  $a_k$ . Wynika to stąd, że po pierwszym pomiarze, a tuż przed drugim, układ znalazł się w stanie  $\psi'(\vec{r}) = u_k(\vec{r})$ . Efekt ten, zachodzący w chwili pomiaru, nazywamy "redukcją" funkcji falowej. Nazwa ta bierze się stąd, że z całej kombinacji liniowej (3.56) "wybrany" został stan odpowiadający rezultatowi pomiaru. Redukcja funkcji falowej zachodząca w chwili pomiaru jest jednym z najbardziej tajemniczych aspektów mikroświata i do dziś budzi istotne kontrowersje. Jednym z wyjaśnień jest stwierdzenie, że redukcja funkcji falowej zachodzi dlatego, że aparat pomiarowy jest (w/g naszych założeń) obiektem klasycznym. Pełny kwantowo-mechaniczny opis układu złożonego z badanego układu i z przyrządu pomiarowego jest bardzo skomplikowany i, jak się wydaje, także nie jest w pełni zadowalający. Jako ciekawostkę można powiedzieć, że Roger Penrose (jeden z najwybitniejszych współczesnych fizyków matematycznych) wiąże redukcję funkcji falowej z zupełnie dziś niezbadanymi efektami wynikającymi z kwantowej natury oddziaływań grawitacyjnych. Fakt zachodzenia redukcji funkcji falowej (zresztą potwierdzony doświadczalnie) przyjmujemy, w niniejszych wykładach, jako prawo przyrody, którego natura jest nieznana. Pomiar "niszczy" funkcję falową  $\psi(\vec{r}, t)$  (tę sprzed pomiaru) i "ustala" nową  $u_k(\vec{r})$ , która następnie ewoluuje w czasie zgodnie z równaniem Schrödingera.

### Przypadek z degeneracją

Przeprowadzona do tej pory dyskusja dotyczyła obserwabli  $\hat{A}$ , której wartości własne są niezdegenerowane. Trzeba więc uogólnić naszą analizę na przypadek z degeneracją. Rozkład funkcji falowej na funkcje własne obserwabli  $\hat{A}$  ma teraz postać (3.51), co jest oczywistym uogólnieniem

rozkładu (3.56). Wygodnie nam będzie posługiwać się nieco zmodyfikowanym zapisem, dlatego relację (3.51) zapiszemy w postaci

$$\psi(\vec{r}) = \sum_n \psi_n(\vec{r}), \quad \text{gdzie} \quad \psi_n(\vec{r}) = \sum_{i_n=1}^{g_n} C_n^{i_n} u_n^{i_n}(\vec{r}). \quad (3.60)$$

Funkcje  $\{\psi_n\}$  są więc kombinacjami liniowymi funkcji własnych obserwabli  $\hat{A}$ , które odpowiadają jednej i tej samej wartości własnej  $a_n$ . Możemy je interpretować jako "składowe" (rzuty) pełnej funkcji falowej, leżące w  $g_n$ -wymiarowych podprzestrzeniach  $\mathcal{F}_n$  przestrzeni  $\mathcal{F}$ . Każda z funkcji  $\{\psi_n\}$  jest funkcją własną obserwabli  $\hat{A}$ , to jest spełnia relację  $\hat{A}\psi_n = a_n\psi_n$  i to niezależnie od wartości współczynników kombinacji (druga część (3.60)). Wynika to z własności (3.49) wektorów własnych operatorów. Co więcej, funkcje takie odpowiadające dwóm różnym wartościom własnym są ortogonalne

$$\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \delta_{mn}. \quad (3.61)$$

Dowód można przeprowadzić metodą taką samą w stwierdzeniu (3.44). Zwróćmy jednak uwagę, że funkcje  $\psi_n(\vec{r})$  nie są na ogół unormowane. Aby więc można je było nazwać funkcjami falowymi, należy je unormować.

Rozważmy ponownie pomiar wielkości fizycznej  $\mathcal{A}$ . Wynikiem pomiaru może znowu być tylko jedna z wartości własnych obserwabli  $\hat{A}$ , powiedzmy  $a_k$ . Tak samo jak poprzednio, dopuszczalne wyniki pomiaru nie zależą od funkcji falowej  $\psi$ . Natomiast prawdopodobieństwo uzyskania właśnie takiego wyniku zależy od stanu układu i jest dane przez kwadrat modułu rzutu wektora  $\psi$  na podprzestrzeń  $\mathcal{F}_k$ , a więc przez

$$P_k = \frac{|\langle \psi_k | \psi \rangle|^2}{\sum_n \sum_{i_n=1}^{g_n} |C_n^{i_n}|^2} = \frac{|\langle \psi_k | \psi_k \rangle|^2}{\sum_n \sum_{i_n=1}^{g_n} |C_n^{i_n}|^2}. \quad (3.62)$$

Równość iloczynów skalarnych  $\langle \psi_k | \psi_k \rangle = \langle \psi_k | \psi \rangle$  wynika z ortogonalności wektorów  $\psi_m$  o różnych indeksach. Bez trudu sprawdzamy, że

$$\begin{aligned} \langle \psi_k | \psi \rangle &= \sum_{i_k=1}^{g_k} (C_k^{i_k})^* \sum_n \sum_{i_n=1}^{g_n} C_n^{i_n} \langle u_k^{i_k} | u_n^{i_n} \rangle \\ &= \sum_{i_k=1}^{g_k} \sum_n \sum_{i_n=1}^{g_n} (C_k^{i_k})^* C_n^{i_n} \delta_{kn} \delta_{i_k i_n} = \sum_{i_k=1}^{g_k} |C_k^{i_k}|^2 = \langle \psi_k | \psi_k \rangle. \end{aligned} \quad (3.63)$$

Wobec tego, w przypadku degeneracji, prawdopodobieństwo uzyskania w wyniku pomiaru wartości  $a_k$  wynosi

$$\begin{aligned} P_k &= \frac{\sum_{i_k=1}^{g_k} |C_k^{i_k}|^2}{\sum_n \sum_{i_n=1}^{g_n} |C_n^{i_n}|^2} = \frac{\sum_{i_k=1}^{g_k} |\langle u_k^{i_k} | \psi \rangle|^2}{\sum_n \sum_{i_n=1}^{g_n} |\langle u_n^{i_n} | \psi \rangle|^2} \\ &= \frac{\sum_{i_k=1}^{g_k} |\langle u_k^{i_k} | \psi \rangle|^2}{\|\psi\|^2}, \end{aligned} \quad (3.64)$$

gdzie ponownie można pominąć mianownik, jako równy jedności ze względu na normowanie funkcji falowej  $\psi$ . Otrzymane prawdopodobieństwo (3.64) ewidentnie stanowi uogólnienie wzoru (3.57), do którego się redukuje, gdy przy brak degeneracji "odpada" suma po indeksie  $i_k$ . Suma wszystkich uzyskanych tu prawdopodobieństw jest równa jedności, tak samo jak w przypadku bez degeneracji (wynika to z warunku normowania funkcji falowej i z relacji (3.51)).

Po pomiarze (wartości  $a_k$ ) funkcja falowa  $\psi$  redukuje się do podprzestrzeni  $\mathcal{F}_k$ . A zatem, dla przypadku z degeneracją, stan układu po pomiarze wyraża się

$$\psi(\vec{r}) = \sum_n \sum_{i_n=1}^{g_n} C_n^{i_n} u_n^{i_n}(\vec{r}) \xrightarrow{\text{pomiar } a_k} \psi'(\vec{r}) = \frac{\psi_k(\vec{r})}{\|\psi_k\|}, \quad (3.65)$$

gdzie jawnie normujemy zredukowaną funkcję falową. Ponieważ  $\|\psi_k\|^2 = \langle \psi_k | \psi_k \rangle = \langle \psi_k | \psi \rangle$ , więc podstawiając (3.60) i (3.63) do powyższego, dostajemy

$$\psi(\vec{r}) \xrightarrow{\text{pomiar } a_k} \psi'(\vec{r}) = \frac{\sum_{i_k=1}^{g_k} C_k^{i_k} u_k^{i_k}(\vec{r})}{\sqrt{\sum_{i_k=1}^{g_k} |C_k^{i_k}|^2}} = \frac{\sum_{i_k=1}^{g_k} u_k^{i_k}(\vec{r}) \langle u_k^{i_k} | \psi \rangle}{\sqrt{\sum_{i_k=1}^{g_k} |C_k^{i_k}|^2}}. \quad (3.66)$$

Tym razem mianownik jest potrzebny, bo  $\psi_k$  nie była unormowana. Podsumowując stwierdzamy, że stan układu tuż po pomiarze jest stanem własnym obserwabli  $\hat{A}$  z wartością własną  $a_k$ . Podkreślmy jednak, że nie jest dowolny wektor z podprzestrzeni  $\mathcal{F}_k$ , lecz "część" wektora  $\psi$  (sprzed pomiaru) leżąca w  $\mathcal{F}_k$  i potem unormowana. Zauważmy jeszcze, że przechodząc we wzorze (3.66) do przypadku niezdegenerowanego ( $g_n = 1$ , indeks  $i_n$  zbyteczny) otrzymujemy

$$\psi(\vec{r}) \xrightarrow{\text{pomiar}} \psi'(\vec{r}) = \frac{C_k u_k(\vec{r})}{|C_k|} = e^{i\text{Arg}(C_k)} u_k(\vec{r}), \quad (3.67)$$

co różni się od formuły (3.59) jedynie czynnikiem fazowym o module równym 1. Czynniki ten nie ma znaczenia fizycznego, (omówimy to bardziej szczegółowo za chwilę) więc możemy uznać, że przewidywania fizyczne wynikające z (3.59) i (3.66) są jednakowe.

Aby praktycznie wykorzystać te reguły, trzeba odpowiedzieć na zasadnicze pytanie, jak konstruować obserwabłę (operator)  $\hat{A}$  odpowiadający wielkości fizycznej  $\mathcal{A}$ . Jeżeli będziemy umieli to zrobić, wówczas (przynajmniej w zasadzie) rozwiązujemy zagadnienie własne dla tego operatora, to jest znajdujemy zbiory  $\{a_n\}$  oraz  $\{u_n\}$  – wartości i wektory własne. Rozkładając funkcję falową  $\psi$  w szereg względem bazy  $\{u_n\}$  obliczymy współczynniki  $C_n = \langle u_n | \psi \rangle$ , czyli amplitudy prawdopodobieństwa. Tym samym możemy obliczyć prawdopodobieństwo (3.57), tego że w wyniku pomiaru uzyskamy dla wielkości fizycznej  $\mathcal{A}$  wartość równą  $a_n$ . Zanim zajmiemy się odpowiedzią na pytanie, jak skonstruować obserwabłę  $\hat{A}$ , poczynimy kilka istotnych uwag.

### Pewne uwagi dodatkowe. Efekty interferencyjne

Jeżeli funkcję falową pomnożymy przez dowolny czynnik  $\alpha \in \mathbb{C}$ , co "psuje" normowanie, to po pierwsze stwierdzamy, że nie ma to wpływu na rozwiązania zagadnień własnych dla obserwabli (liczba się skraca). Po drugie, przewidywania fizyczne wynikające ze wzorów (3.57) lub (3.64) nie ulegną zmianie, bowiem dodatkowy czynnik  $|\alpha|^2$  pojawi się zarówno w liczniku jak i w mianowniku, więc skróci się. Dlatego też zawsze będziemy normować funkcje falowe.

Analogicznie, nie ma wpływu na przewidywania fizyczne zamiana funkcji falowej  $\psi$  na  $\tilde{\psi} = e^{i\phi}\psi$ . Nie psuje to ani normowania, ani prawdopodobieństw, bo  $|e^{i\phi}| = 1$ . Wnioskujemy więc, że dwie proporcjonalne funkcje falowe reprezentują ten sam stan fizyczny.

Niezbędna tu jest jednak pewna ostrożność. Dla przykładu rozważmy funkcję falową

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{i\phi_1}\psi_1 + e^{i\phi_2}\psi_2), \quad (3.68)$$

gdzie  $\psi_k$  są unormowane, zaś fazy  $\phi_k \in \mathbb{R}$ . W zasadzie  $e^{i\phi_k}\psi_k$  oraz  $\psi_k$  reprezentują ten sam stan fizyczny. Jednak superpozycję trzeba traktować ostrożnie. Korzystając w elementarny sposób z

własności iloczynu skalarnego, dostajemy

$$\begin{aligned}
 \langle \psi | \psi \rangle &= \frac{1}{2} \langle (e^{i\phi_1}\psi_1 + e^{i\phi_2}\psi_2) | (e^{i\phi_1}\psi_1 + e^{i\phi_2}\psi_2) \rangle \\
 &= \frac{1}{2} e^{-i\phi_1+i\phi_1} \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle + \frac{1}{2} e^{-i\phi_1+i\phi_2} \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle \\
 &\quad + \frac{1}{2} e^{-i\phi_2+i\phi_1} \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle + \frac{1}{2} e^{-i\phi_2+i\phi_2} \langle \psi_2 | \psi_2 \rangle \\
 &= 1 + \operatorname{Re}[e^{i(\phi_2-\phi_1)} \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle],
 \end{aligned} \tag{3.69}$$

skąd jasno wynika, że różnica faz może odgrywać istotną rolę. Wnioskujemy więc, że globalny czynnik fazowy nie ma znaczenia fizycznego i może być wybrany dowolnie. Natomiast różnica faz (faza względna) pomiędzy dwoma (lub więcej) funkcjami falowymi tworzącymi superpozycję może mieć znaczenie zasadnicze.

Aby się jeszcze lepiej o tym przekonać, załóżmy że unormowane funkcje falowe  $\psi_1$  i  $\psi_2$  są stanami własnymi obserwabli  $\hat{B}$  odpowiadającymi wartościom własnym  $b_1 \neq b_2$ . Wobec tego funkcje te są ortogonalne:  $\langle \psi_j | \psi_k \rangle = \delta_{jk}$ . Niech teraz  $\hat{A}$  będzie inną obserwabłą, która ma wartości własne  $a_n$  (dla prostoty – niezdegenerowane) i odpowiednie stany własne  $u_n$ . Jeśli układ fizyczny jest w stanie  $\psi_k$ , to na mocy relacji (3.57) prawdopodobieństwo uzyskania wyniku pomiarowego  $a_n$  wynosi  $P_k(a_n) = |\langle u_n | \psi_k \rangle|^2$ .

Rozważmy teraz stan

$$\psi = \alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2, \quad \alpha_j = \langle \psi_j | \psi \rangle \in \mathbb{C}, \tag{3.70}$$

przy warunku  $|\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2 = 1$ , który zapewnia normowanie funkcji  $\psi$ . Wielkości  $|\alpha_j|^2$  skrótowo nazywamy prawdopodobieństwem tego, że układ w stanie  $\psi$  zostanie znaleziony w stanie  $\psi_j$ . Ścisłej mówiąc,  $|\alpha_j|^2$  interpretować należy jako prawdopodobieństwo tego, że w wyniku pomiaru wielkości fizycznej  $\mathcal{B}$  (obserwabli  $\hat{B}$ ) otrzymamy wartości  $b_j$ .

Pytamy teraz, jakie jest prawdopodobieństwo uzyskania wartości  $a_n$  w wyniku pomiaru wielkości fizycznej  $\mathcal{A}$ , gdy stan układu jest opisany funkcją falową  $\psi$  określoną w (3.70). Zgodnie z definicją (3.57), przy unormowanej funkcji falowej

$$\begin{aligned}
 P(a_n) &= |\langle u_n | \psi \rangle|^2 = |\langle u_n | (\alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2) \rangle|^2 \\
 &= \langle u_n | (\alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2) \rangle \langle u_n | (\alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2) \rangle^* \\
 &= |\alpha_1|^2 |\langle u_n | \psi_1 \rangle|^2 + |\alpha_2|^2 |\langle u_n | \psi_2 \rangle|^2 \\
 &\quad + \alpha_1\alpha_2^* \langle u_n | \psi_1 \rangle \langle u_n | \psi_2 \rangle^* + \alpha_1^*\alpha_2 \langle u_n | \psi_1 \rangle^* \langle u_n | \psi_2 \rangle \\
 &= |\alpha_1|^2 P_1(a_n) + |\alpha_2|^2 P_2(a_n) \\
 &\quad + 2\operatorname{Re}[\alpha_1\alpha_2^* \langle u_n | \psi_1 \rangle \langle u_n | \psi_2 \rangle^*]
 \end{aligned} \tag{3.71}$$

Trzeci człon tego wyrażenia zależy nie tylko od wartości modułów liczb zespolonych  $\alpha_j$  ale także od różnicy ich faz (fazy względnej). Człon ten możemy nazwać interferencyjnym. Jego obecność jest charakterystyczna dla zagadnień mechaniki kwantowej i dobrze ilustruje fakt, że faza globalna funkcji falowej jest bez znaczenia (można ją wybrać w sposób dowolny), natomiast faza względna ma znaczenie zasadnicze i w żadnym wypadku nie wolno o niej zapominać.

### 3.3 Wartości oczekiwane

W poprzednim podrozdziale wprowadziliśmy postulat mówiący, że wyniki pomiarów wykonywanych w układach kwantowo-mechanicznych podlegają zasadzie rozkładu spektralnego. Nie

jesteśmy na ogół w stanie powiedzieć, że wynik pomiaru wielkości fizycznej  $\mathcal{A}$  da konkretny wynik. Możemy natomiast powiedzieć, że wynik  $a_k$  (wartość własna obserwabli  $\hat{A}$ ) otrzymamy z prawdopodobieństwem  $P_k$  (patrz (3.57) lub (3.64)). Mechanika kwantowa, w przeciwieństwie do fizyki klasycznej, nie pozwala przewidywać wyników pojedynczego pomiaru. Wiedząc jak układ jest przygotowany (znając odpowiednią funkcję falową) możemy jedynie obliczać prawdopodobieństwa takich czy innych rezultatów pomiaru. Wynika stąd, że wykonując pomiar w układzie fizycznym przygotowanym w stanie opisanym funkcją falową  $\psi(\vec{r}, t)$  nie możemy ściśle przewidzieć jego wyników. Co więcej, po pomiarze następuje redukcja funkcji falowej i (na ogół) układ przechodzi do stanu innego niż ten, w którym go przygotowano. Tak więc pojedynczy pomiar nie daje informacji o funkcji falowej przed pomiarem, a jedynie o stanie układu po pomiarze, który to stan jest stanem własnym obserwabli odpowiadającym zmierzonej wartości własnej. Wyjątkiem jest sytuacja, gdy układ przed pomiarem został przygotowany w stanie  $u_n(\vec{r})$  – jednym ze stanów własnych obserwabli  $\hat{A}$  odpowiadającej mierzonej wielkości fizycznej. Pojedynczy pomiar możemy uznać za metodę przygotowania układu fizycznego w określonym stanie własnym takiej, czy innej obserwabli.

Jak więc wygląda realistyczna sytuacja pomiarowa pozwalająca wnioskować o funkcji falowej  $\psi(\vec{r}, t)$  charakteryzującej stan układu zanim dokonaliśmy pomiaru? Ponieważ posługujemy się pojęciem prawdopodobieństwa, pouczające jest rozważenie sytuacji pomiarowej z punktu widzenia standardowego rachunku prawdopodobieństwa. Załóżmy, że wynik  $a_k$  pewnego doświadczenia pojawia się z prawdopodobieństwem  $p_k$ . Jaki jest średni wynik dużej serii złożonej z  $N \gg 1$  pomiarów, w której każdy z wyników  $a_k$  otrzymano  $n_k$  razy? Najpierw zauważmy, że w oczywisty sposób  $\sum_k n_k = N$ . Zgodnie z częstościową interpretacją prawdopodobieństwa możemy napisać  $p_k = n_k/N$  (co jest słuszne przynajmniej przy  $N \rightarrow \infty$ ). Możemy więc intuicyjnie stwierdzić, że średni wynik pomiarów to

$$\langle a \rangle = \frac{\sum_k a_k n_k}{N} = \sum_k a_k p_k, \quad (3.72)$$

Wracamy teraz do zagadnień mechaniki kwantowej. Rozważmy, dla prostoty, przypadek bez degeneracji. Wielkości fizycznej  $\mathcal{A}$  odpowiada obserwabla  $\hat{A}$  o wartościach własnych  $a_n$  i wektorach własnych  $u_n$  stanowiących bazę ortonormalną w przestrzeni funkcji falowych. Stan układu fizycznego opisywany jest (unormowaną) funkcją falową  $\psi$ , którą zgodnie z (3.56) możemy rozłożyć w bazie

$$\psi = \sum_n C_n u_n, \quad C_n = \langle u_n | \psi \rangle, \quad \sum_n |C_n|^2 = 1. \quad (3.73)$$

Założmy teraz, że mamy bardzo wiele identycznych układów, każdy przygotowany w stanie  $\psi$ . W każdym z nich wykonujemy pomiar wielkości  $\mathcal{A}$ . Nie możemy przewidzieć dokładnie wyniku pojedynczego pomiaru. Umiemy jedynie stwierdzić, że pomiar taki da wartość  $a_k$  z prawdopodobieństwem  $P_k = |C_k|^2 = |\langle u_k | \psi \rangle|^2$ . Jaka więc będzie wartość średnia wyników takiej serii pomiarów?

Możemy też spojrzeć inaczej. Pomiaru wielkości  $\mathcal{A}$  dokonujemy w jednym układzie znajdującym się w stanie  $\psi$ . Z prawdopodobieństwem  $P_k$  otrzymujemy wartość  $a_k$ . Po redukcji funkcji falowej ponownie przygotowujemy układ tak, aby znów znalazł się w stanie  $\psi$ . Ponawiamy pomiar, spodziewając się na ogół innego rezultatu  $a_m$ , który zdarzy się z innym prawdopodobieństwem  $P_m$ . Następnie powtarzamy tę procedurę wielokrotnie, pytając o średnią wartość naszych rezultatów doświadczalnych.

W obu przypadkach, rozumując na gruncie teorii rachunku prawdopodobieństwa, stwierdza-

my, że średnia wartość z wielu pomiarów powinna wynosić

$$\langle A \rangle = \sum_k a_k P_k. \quad (3.74)$$

Rozważmy tę wielkość dalej, korzystając z wprowadzonych już ustaleń dotyczących pomiarów i ich prawdopodobieństw. Z postulatu (3.57) otrzymujemy więc

$$\langle A \rangle = \sum_k a_k P_k = \sum_k a_k |\langle u_k | \psi \rangle|^2 = \sum_k a_k C_k^* C_k, \quad (3.75)$$

gdzie ostatni krok wynika z rozkładu (3.73). Przekształcając dalej, wiemy, że funkcje  $\{u_n\}$  tworzą bazę, wobec czego piszemy

$$\langle A \rangle = \sum_k \sum_m a_m C_k^* C_m \delta_{km} = \sum_k \sum_m a_m C_k^* C_m \langle u_k | u_m \rangle. \quad (3.76)$$

Z określenia iloczynu skalarnego dalej mamy

$$\langle A \rangle = \sum_k \sum_m C_k^* C_m \int_V d^3r u_n^*(\vec{r}) a_m u_m(\vec{r}) \quad (3.77)$$

Z określenia działania operatora  $\hat{A}$  na funkcje  $u_n$  i z liniowości wyrażeń wynika dalej

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \sum_k \sum_m C_k^* C_m \int_V d^3r u_k^*(\vec{r}) (\hat{A} u_m(\vec{r})) \\ &= \int_V d^3r \left( \sum_n C_n^* u_n^*(\vec{r}) \right) \left( \hat{A} \sum_m C_m u_m(\vec{r}) \right) \end{aligned} \quad (3.78)$$

Rozpoznajemy rozwinięcia (3.73) funkcji falowej i jej sprzężenia. Otrzymujemy więc

$$\langle A \rangle = \int_V d^3r \psi^*(\vec{r}) (\hat{A} \psi(\vec{r})) = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle, \quad (3.79)$$

gdzie posłużyliśmy się notacją (3.25) dla elementu macierzowego operatora. Stwierdzamy więc, że mechanika kwantowa pozwala obliczyć poszukiwaną średnią za pomocą wzoru (3.79).

Liczbę (mianowaną)  $\langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$  nazywamy wartością oczekiwaną wielkości fizycznej  $\mathcal{A}$  (której odpowiada operator – obserwabla  $\hat{A}$ ) dla układu fizycznego, którego stan opisuje funkcja falowa  $\psi$ . Podkreślmy jednak, że obliczenia  $\langle A \rangle$  dotyczą

- albo średniego wyniku pomiarów przeprowadzonych na dużej liczbie identycznie przygotowanych (w stanie  $\psi$ ) egzemplarzy danego układu fizycznego;
- albo długiej serii pomiarów wykonywanych w jednym układzie, który po kolejnym pomiarze jest ponownie przygotowany w stanie  $\psi$ .

Zauważmy, że wartość oczekiwana  $\langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$  jest zawsze rzeczywista, co wynika zarówno z powyższego wyprowadzenia, jak i z własności (3.41) operatorów hermitowskich. Po drugie, widzimy, że ważną rolę odgrywa fakt unormowania funkcji falowych, której norma nie pojawia się w mianownikach. I wreszcie zauważmy, że zmiana globalnej fazy funkcji falowej (tj. zamiana  $\psi \rightarrow e^{i\phi} \psi$ ) w żaden sposób nie wpływa na wielkość obliczanej wartości oczekiwanej.

Oczywiście pozostaje problem konstrukcji operatorów hermitowskich – obserwabli odpowiadających wielkościom fizycznym. Aby wykorzystać praktycznie formułę (3.79) trzeba wiedzieć jak operator  $\hat{A}$  działa na funkcję falową  $\psi(\vec{r})$ .

### 3.3.1 Dyskusja dodatkowa. Dyspersje

Wartość oczekiwana  $\langle A \rangle$  daną w (3.79) możemy obliczyć, gdy tylko znamy funkcję falową układu fizycznego i postać operatora (obserwabli)  $\hat{A}$ .

Faktyczny pomiar jest dokonywany na wielu identycznie przygotowanych egzemplarzach badanego układu. Każdy z pomiarów daje którąś z wartości własnych  $a_k$  obserwabli  $\hat{A}$  z prawdopodobieństwem  $P_k = |\langle u_k | \psi \rangle|^2$ . Wielokrotnie powtarzane pomiary dostarczają więc informacji o rozkładzie  $P_k$  i tym samym o funkcji falowej  $\psi$  układu. Rozkład prawdopodobieństwa można scharakteryzować za pomocą dyspersji (wariancji) zdefiniowanej jako

$$\begin{aligned}\sigma^2(A) &= \left\langle \left( \hat{A} - \langle A \rangle \right)^2 \right\rangle = \left\langle \left( \hat{A}^2 - 2\langle A \rangle \hat{A} + \langle A \rangle^2 \right) \right\rangle \\ &= \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 = \langle \psi | \hat{A}^2 | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle^2,\end{aligned}\quad (3.80)$$

przy czym  $\langle A \rangle \in \mathbb{R}$  jest liczbą komutującą z dowolnym operatorem. Wartość oczekiwana  $\langle A \rangle$  jest dana wzorem (3.75). Natomiast  $\langle A^2 \rangle$  obliczamy korzystając z rozkładu (3.73) i otrzymujemy

$$\begin{aligned}\langle A^2 \rangle &= \langle \psi | \hat{A}^2 | \psi \rangle = \langle \psi | \left( \hat{A}^2 \sum_k u_k \langle u_k | \psi \rangle \right) \rangle \\ &= \sum_k \langle u_k | \psi \rangle \langle \psi | \hat{A}^2 u_k \rangle = \sum_k a_k^2 |\langle u_k | \psi \rangle|^2 = \sum_k a_k^2 |C_k|^2,\end{aligned}\quad (3.81)$$

bowiem z zagadnienia własnego obserwabli  $\hat{A}$  wynika, że  $\hat{A}^2 u_k = a_k^2 u_k$ . Łącząc teraz formuły (3.80), (3.81) i (3.75) dostajemy

$$\sigma^2(A) = \sum_k a_k^2 |C_k|^2 - \left( \sum_k a_k |C_k|^2 \right)^2. \quad (3.82)$$

Przy podnoszeniu szeregu do kwadratu musimy uważać

$$\begin{aligned}\sigma^2(A) &= \sum_k a_k^2 |C_k|^2 - \sum_k a_k |C_k|^2 \sum_m a_m |C_m|^2 \\ &= \sum_k a_k |C_k|^2 \left[ a_k - \sum_m a_m |C_m|^2 \right].\end{aligned}\quad (3.83)$$

Dyspersja rozkład wyników pomiarowych jest więc dość skomplikowanym wyrażeniem, które na ogół jest różne od zera. Sukcesywne pomiary wielkości fizycznej  $\mathcal{A}$  w układzie przygotowanym w stanie  $\psi$  pozwalają zbudować rozkład prawdopodobieństwa  $P_k = |\langle u_k | \psi \rangle|^2$ , zaś jego dyspersja  $\sqrt{\sigma^2(A)}$  dostarcza dalszych informacji o funkcji falowej  $\psi$ .

Szczególne sytuacja ma miejsce wtedy, gdy stan  $\psi$  układu tuż przed pomiarem jest stanem własnym obserwabli  $\hat{A}$ . Oznacz to, zgodnie z (3.73), że  $\psi = u_s$ , a zatem współczynniki rozkładu spełniają  $C_n = \delta_{ns}$ . Zachodzi wówczas następujące

**Twierdzenie 3.3** *Stan  $\psi$  układu jest stanem własnym obserwabli  $\hat{A}$  wtedy i tylko wtedy gdy dyspersja  $\sigma^2(A)$  zeruje się*

$$\{ \psi = u_s \} \iff \{ \sigma^2(A) = 0 \}. \quad (3.84)$$

Wartość oczekiwana obserwabli jest wtedy równa jednej z jej wartości własnych.

**Dowód.** Załóżmy najpierw, że  $\psi = u_s$ , czyli  $C_n = \delta_{ns}$ . Wówczas ze wzoru (3.83) wynika, że

$$\sigma^2(A) = \sum_k a_k \delta_{ks} \left[ a_k - \sum_m a_m \delta_{ms} \right] = a_s (a_s - a_s) = 0, \quad (3.85)$$

co kończy dowód pierwszej części twierdzenia.

Przeprowadzimy dowód w przeciwną stronę. Rozważmy operator  $\tilde{A} = \hat{A} - \langle A \rangle$ , gdzie  $\langle A \rangle$  jest wartością oczekiwaną wielkości  $\mathcal{A}$  w dowolnym stanie (unormowanym)  $\psi$ . Obliczamy normę wektora

$$\|\tilde{A}\psi\|^2 = \langle \tilde{A}\psi | \tilde{A}\psi \rangle = \langle \psi | \tilde{A}^2 \psi \rangle, \quad (3.86)$$

bowiem operator  $\tilde{A}$  jest hermitowski (suma operatora hermitowskiego i liczby rzeczywistej). Idąc dalej, mamy

$$\begin{aligned} \|\tilde{A}\psi\|^2 &= \langle \psi | (\hat{A} - \langle A \rangle)(\hat{A} - \langle A \rangle) \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A}^2 \psi \rangle - \langle A \rangle^2 \langle \psi | \psi \rangle \\ &= \sigma^2(A). \end{aligned} \quad (3.87)$$

Teraz, z założenia,  $\sigma^2(A) = 0$ . Zatem norma  $\|\tilde{A}\psi\|^2 = 0$ . Zerową normę ma tylko wektor zerowy, więc

$$\tilde{A}\psi = 0 \quad \implies \quad \hat{A}\psi = \langle A \rangle \psi. \quad (3.88)$$

Ostatnia równość oznacza, że funkcja  $\psi$  jest funkcją własną obserwacji  $\hat{A}$  z wartością własną  $\langle A \rangle$ . Twierdzenie jest udowodnione. ■

Jeśli funkcja falowa układu jest superpozycją stanów własnych obserwacji odpowiadających różnym wartościom własnym, to wówczas dyspersja  $\sigma^2(a) \neq 0$ . Mówimy wtedy, że wielkość fizyczna, której odpowiada obserwacja  $\hat{A}$  nie ma dobrze określonej wartości. Przykład taki rozważamy w *Uzupełnieniach*.

W dowodzie poprzedniego twierdzenia "ukryty" jest dowód następnego.

**Twierdzenie 3.4** *Dyspersja dowolnej wielkości fizycznej mierzona w dowolnym stanie układu fizycznego jest zawsze nieujemna.*

$$\sigma^2(A) \geq 0, \quad \text{dla każdej obserwacji } \hat{A}. \quad (3.89)$$

**Dowód.** We wzorze (3.87) pokazaliśmy, że  $\sigma^2(A) = \|\tilde{A}\psi\|^2$ . Norma dowolnego wektora jest nieujemna, co kończy dowód. ■

## 3.4 Konstrukcja operatorów – obserwacji

### 3.4.1 Operatory położenia i pędu

Na obecnym etapie budowy formalizmu mechaniki kwantowej przyjmujemy dwa poniższe przyporządkowania jako postulaty.

1. Operatorem położenia cząstki, który oznaczymy przez  $\hat{\mathbf{R}}$  jest operator złożony z trzech składowych (tzw. operator wektorowy)  $\hat{\mathbf{R}} = (\hat{X}_1, \hat{X}_2, \hat{X}_3)$ , których działanie na funkcję falową sprowadza się do jej pomnożenia przez odpowiednią współrzędną

$$\hat{X}_j : \psi(\vec{r}) \longrightarrow \hat{X}_j \psi(\vec{r}) = x_j \psi(\vec{r}), \quad j = 1, 2, 3. \quad (3.90)$$

Współrzędne są rzeczywiste, więc tak zdefiniowany operator jest hermitowski. Ponieważ działanie operatora  $\hat{\mathbf{R}}$  sprowadza się do mnożenia funkcji falowej przez odpowiednie współrzędne, więc często przyjmujemy, że

$$\hat{\mathbf{R}} = \vec{r}, \quad (3.91)$$

czyli po prostu utożsamiamy operator z samym wektorem wodzącym.

2. Operatorem pędu jest operator  $\hat{\mathbf{P}} = -i\hbar\nabla$ . Ma on trzy składowe, z których każda działa na funkcję falową

$$\hat{P}_j : \psi(\vec{r}) \longrightarrow \hat{P}_j\psi(\vec{r}) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \psi(\vec{r}). \quad (3.92)$$

Zgodnie z twierdzeniem (3.39) jest to operator hermitowski. Zwróćmy uwagę, że w tej chwili formalizujemy intuicyjne przypuszczenie (2.23).

Należy pamiętać, że mówimy tu o operatorach położenia i pędu, a nie o położeniu i pędzie cząstki. Mechanika kwantowa nie może nam powiedzieć jakie jest położenie czy pęd cząstki. Jedyne co możemy powiedzieć (na mocy relacji (3.79)) to to, że dla cząstki znajdującej się w stanie opisywanym funkcją falową  $\psi(\vec{r}, t)$  wartości oczekiwane położenia i pędu wynoszą odpowiednio

$$\langle \vec{r} \rangle = \langle \psi | \hat{\mathbf{R}} | \psi \rangle = \int_{\mathcal{V}} d^3r \psi^*(\vec{r}, t) \vec{r} \psi(\vec{r}, t), \quad (3.93a)$$

$$\langle \vec{p} \rangle = \langle \psi | \hat{\mathbf{P}} | \psi \rangle = \int_{\mathcal{V}} d^3r \psi^*(\vec{r}, t) [-i\hbar\nabla \psi(\vec{r}, t)]. \quad (3.93b)$$

Jedną z zasadniczych cech mechaniki kwantowej, całkowicie odmienną od fizyki klasycznej jest to, że obserwowalne–operatory nie są przemienne – nie komutują. W oparciu o twierdzenie (3.22) i definicje (3.90), (3.92), możemy napisać kanoniczną relację komutacyjną dla operatorów położenia i pędów

$$[\hat{X}_j, \hat{P}_k] = i\hbar\delta_{jk}. \quad (3.94)$$

W dalszych rozdziałach rozwinieśmy formalizm mechaniki kwantowej, w ramach którego pokażemy, że przedstawione tu rozumowanie można odwrócić. Chodzi o to, że jako postulat można przyjąć relację komutacyjną (3.94), a z niej wyprowadzić definicje (3.90) i (3.92), co odbierze im status postulatów.

### Umowa terminologiczna

Pisząc funkcję falową w postaci  $\psi = \psi(\vec{r}, t)$  usiłowaliśmy powstrzymać się od nazywania jej argumentu  $\vec{r}$  położeniem cząstki. Przypominamy więc, że sens fizyczny mają jedynie:

- $|\psi(\vec{r}, t)|^2$  – gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w sąsiedztwie punktu  $\vec{r} \in \mathcal{V}$  (por. (2.27) i jego dyskusja);
- $\langle \vec{r} \rangle$  – wartość oczekiwana (3.93a) określająca średnią wartość zmierzonego położenia cząstki (pomiar wielokrotny).

Aby uniknąć dziwolągów słownikowych czy gramatycznych, od tej pory będziemy mówić o wektorze  $\vec{r}$  – argumencie funkcji falowej jako o wektorze położenia. Jest to jednak umowa terminologiczna nie niosąca sensu fizycznego. Pamiętajmy, że wektor  $\vec{r}$  **NIE** jest położeniem cząstki, w tym sensie co w mechanice klasycznej.

### 3.4.2 Zasada odpowiedniości

W mechanice klasycznej stan układu fizycznego jest określony przez podanie współrzędnych i pędów uogólnionych (zmiennych kanonicznych)  $\{q_i(t), p_i(t)\}$  w funkcji czasu. Wielkości te ewoluują w czasie zgodnie z hamiltonowskimi równaniami ruchu. Wielkości fizyczne charakteryzujące układ (np. energia, pęd kinetyczny, moment pędu, itp.) są zbudowane jako pewne funkcje zmiennych kanonicznych. Na gruncie klasycznym potrafimy (dla jednej cząstki) zbudować funkcję

$\mathcal{A}_{kl} = \mathcal{A}_{kl}(\vec{\mathbf{r}}_{kl}, \vec{\mathbf{p}}_{kl}, t)$ , która odpowiada jakiejś wielkości fizycznej. Ponieważ wiemy jak tworzyć funkcje operatorów (por. (3.36)), więc nasuwa się myśl, aby w klasycznej funkcji  $\mathcal{A}_{kl}$  zamienić  $\vec{\mathbf{r}}_{kl} \rightarrow \hat{\mathbf{R}}$  oraz  $\vec{\mathbf{p}}_{kl} \rightarrow \hat{\mathbf{P}}$ , co pozwoliłoby dostać pewien operator. Natrafiamy jednak od razu na dwie trudności.

- Funkcję  $\mathcal{A}_{kl}$  budujemy na ogół za pomocą zmiennych kanonicznych (współrzędnych uogólnionych, np. sferycznych). Postać takich funkcji może zależeć od wyboru układu współrzędnych. Nie wiemy więc, jaki układ współrzędnych jest właściwy do przeprowadzenia zamiany wielkości klasycznych na operatory.
- Operatory nie komutują. Wiemy, że  $\hat{\mathbf{R}} \cdot \hat{\mathbf{P}} \neq \hat{\mathbf{P}} \cdot \hat{\mathbf{R}}$ . Co gorsza, iloczyn operatorów  $\hat{\mathbf{R}} \cdot \hat{\mathbf{P}}$  nie jest hermitowski, bowiem

$$\begin{aligned} (\hat{\mathbf{R}} \cdot \hat{\mathbf{P}})^\dagger &= (\hat{X}\hat{P}_x + \hat{Y}\hat{P}_y + \hat{Z}\hat{P}_z)^\dagger \\ &= \hat{P}_x\hat{X} + \hat{P}_y\hat{Y} + \hat{P}_z\hat{Z} = \hat{\mathbf{P}} \cdot \hat{\mathbf{R}} \neq \hat{\mathbf{R}} \cdot \hat{\mathbf{P}}. \end{aligned} \quad (3.95)$$

Iloczyn taki nie jest więc obserwabłą – nie może odpowiadać wielkości fizycznej, choć klasyczny iloczyn  $\vec{\mathbf{r}}_{kl} \cdot \vec{\mathbf{p}}_{kl} = \vec{\mathbf{p}}_{kl} \cdot \vec{\mathbf{r}}_{kl}$  nie sprawia żadnych trudności.

Uniknąć tych trudności można przez przyjęcie następujących założeń.

1. Klasyczną wielkość  $\mathcal{A}_{kl}$  budujemy we współrzędnych kartezjańskich i wtedy stosujemy podstawienia (3.90) i (3.92) tworząc w ten sposób operator kwantowo-mechaniczny.
2. W razie potrzeby stosujemy procedurę symetryzacyjną. Aby wyjaśnić, na czym to polega, zilustrujemy ją przykładem

$$\vec{\mathbf{r}}_{kl} \cdot \vec{\mathbf{p}}_{kl} \longrightarrow \frac{1}{2} (\hat{\mathbf{R}} \cdot \hat{\mathbf{P}} + \hat{\mathbf{P}} \cdot \hat{\mathbf{R}}). \quad (3.96)$$

Wobec relacji (3.95) operator po prawej jest ewidentnie hermitowski, może więc być obserwabłą – odpowiadać wielkości fizycznej.

W świetle tych uwag, formułujemy zasadę odpowiedniości, zwaną też czasami zasadą kwantowania.

Obserwabłę (operator hermitowski)  $\hat{A}$  tworzymy z klasycznej wielkości fizycznej  $\mathcal{A}_{kl}(\vec{\mathbf{r}}_{kl}, \vec{\mathbf{p}}_{kl}, t)$  wyrażonej we współrzędnych kartezjańskich przez podstawienia

$$\vec{\mathbf{r}}_{kl} \longrightarrow \hat{\mathbf{R}} = \vec{\mathbf{r}}, \quad \vec{\mathbf{p}}_{kl} \longrightarrow \hat{\mathbf{P}} = -i\hbar \nabla, \quad (3.97)$$

przy (o ile taka potrzeba zachodzi) zastosowaniu odpowiedniej procedury symetryzacji. Zasadę tą bez trudu stosujemy dla jednej cząstki i łatwo uogólniamy dla  $N$  cząstek, gdy operatory będą mieć dodatkowo numer określający, do której cząstki się odnoszą. Po zbudowaniu obserwabli możemy, znów w razie potrzeby, przejść do innego układu współrzędnych.

W zasadzie można formułować zasadę odpowiedniości w sposób bardziej ogólny – niezależny od układu współrzędnych. Podejście takie jest jednak znacznie bardziej skomplikowane (odpowiednie relacje nie byłyby takie proste jak (3.97)). Zyskując na elegancji matematycznej niewiele byśmy zyskali na fizycznym zrozumieniu teorii.

Na zakończenie podkreślamy, że

- istnieją wielkości fizyczne (np. spin cząstek elementarnych), które nie mają odpowiednika w fizyce klasycznej. Konstrukcja odpowiedniego operatora – obserwabli musi być wtedy przeprowadzona innymi metodami.

- czas  $t$  nie jest obserwabłą. Jest to parametr zewnętrzny mierzony za pomocą zegara zewnętrznego w stosunku do jakiegokolwiek układu kwantowo-mechanicznego.

### 3.4.3 Hamiltonian cząstki

Hamiltonian układu fizycznego pełni w mechanice klasycznej zasadniczą rolę i odpowiada energii układu. Skupiając na razie uwagę na pojedynczej cząstce o masie  $m$ , wypisujemy jej klasyczny hamiltonian

$$H_{kl} = \frac{\vec{p}_{kl}^2}{2m} + V(\vec{r}_{kl}, t), \quad (3.98)$$

gdzie  $V(\vec{r}_{kl}, t)$  jest energią potencjalną wynikającą z oddziaływania cząstki z otoczeniem. Energia potencjalna jest funkcją położenia cząstki, więc jej kwantowo-mechaniczny odpowiednik będzie tą samą funkcją operatora  $\hat{\mathbf{R}}$ , której działanie na funkcję falową sprowadza się do pomnożenia  $\psi(\vec{r}, t)$  przez  $V(\vec{r}, t)$ .

Przechodząc do mechaniki kwantowej, w myśl zasady odpowiedniości, stwierdzamy, że wielkości fizycznej jaką jest energia odpowiadać będzie operator Hamiltona (zwany krótko hamiltonianem) o postaci

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{R}}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}, t). \quad (3.99)$$

Wynik ten, uzyskany w oparciu o zasadę odpowiedniości oczywiście w pełni pokrywa się z wprowadzoną *per analogiam* relacją (2.25). Równanie Schrödingera (2.6) postulowane uprzednio dla pojedynczej cząstki staje się więc przypadkiem szczególnym równania

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \hat{H} \psi(\vec{r}, t). \quad (3.100)$$

Tym samym postulatem mechaniki kwantowej jest jedynie równanie (3.100) (patrz także (2.26)), zaś równanie (2.6) wynika zeń, oczywiście po zastosowaniu zasady odpowiedniości do konstrukcji hamiltonianu pojedynczej cząstki.

## 3.5 Nawiasy Poissona i relacje komutacyjne. Metoda kwantowania

Omawialiśmy tutaj formalizm mechaniki kwantowej stosując pojęcia intuicyjne. Nie było naszym celem ani przedstawienie formalnego opisu pełnej struktury matematycznej mechaniki kwantowej, ani też utrzymanie matematycznej ścisłości. W tym podrozdziale skrótowo omówimy jeden ze sposobów formalnego przejścia od fizyki klasycznej do kwantowej. W tym celu przypomnijmy znane z mechaniki klasycznej pojęcie nawiasów Poissona. Rozważmy układ fizyczny o  $n$  stopniach swobody opisany współrzędnymi i pędami kanonicznymi  $(\{q_i\}, \{p_i\})$ . Wielkości fizyczne  $\mathcal{A}$  i  $\mathcal{B}$  przedstawione są za pomocą funkcji  $A_{kl}(q_i, p_i)$  oraz  $B_{kl}(q_i, p_i)$ . Dla wielkości tych tworzymy nawiasy Poissona zdefiniowane wzorem

$$\{A_{kl}, B_{kl}\}_P = \sum_{j=1}^n \left( \frac{\partial A_{kl}}{\partial q_j} \frac{\partial B_{kl}}{\partial p_j} - \frac{\partial B_{kl}}{\partial q_j} \frac{\partial A_{kl}}{\partial p_j} \right) \quad (3.101)$$

Przechodząc na grunt mechaniki kwantowej wiemy, że wielkościom fizycznym  $\mathcal{A}$  i  $\mathcal{B}$  musimy przyporządkować odpowiednie obserwabły (operatory hermitowskie)  $\hat{A}$  oraz  $\hat{B}$ . Reguła ich konstrukcji jest następująca. Klasyczne nawiasy Poissona muszą przechodzić w komutator operatorów

$$\{A_{kl}, B_{kl}\}_P \xrightarrow{\text{kwantowanie}} \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}, \hat{B}]. \quad (3.102)$$

Tak narzucony warunek kwantowania wystarczy do konstruowania mechaniki kwantowej w odpowiednio dobranej przestrzeni funkcji falowych. Zastępuje on zasadę odpowiedniości, bowiem narzucenie relacji komutacyjnych pozwala wyznaczyć postać operatorów.

Aby lepiej zilustrować tę procedurę, rozważmy pojedynczą cząstkę opisaną klasycznie trzema składowymi położenia  $\vec{r} = (x_1, x_2, x_3)$  i trzema składowymi pędu  $\vec{p} = (p_1, p_2, p_3)$ . Bez trudu obliczamy nawiasy Poissona

$$\{x_k, x_m\}_P = \sum_{j=1}^3 \left( \frac{\partial x_k}{\partial x_j} \frac{\partial x_m}{\partial p_j} - \frac{\partial x_m}{\partial x_j} \frac{\partial x_k}{\partial p_j} \right) = 0, \quad (3.103a)$$

$$\{p_k, p_m\}_P = \sum_{j=1}^3 \left( \frac{\partial p_k}{\partial x_j} \frac{\partial p_m}{\partial p_j} - \frac{\partial p_m}{\partial x_j} \frac{\partial p_k}{\partial p_j} \right) = 0, \quad (3.103b)$$

$$\{x_k, p_m\}_P = \sum_{j=1}^3 \left( \frac{\partial x_k}{\partial x_j} \frac{\partial p_m}{\partial p_j} - \frac{\partial p_m}{\partial x_j} \frac{\partial x_k}{\partial p_j} \right) = \delta_{km}. \quad (3.103c)$$

W myśl reguły (3.102) klasyczne nawiasy Poissona przechodzą w relacje komutacyjne dla operatorów położenia i pędu

$$[\hat{X}_k, \hat{X}_m] = 0, \quad (3.104a)$$

$$[\hat{P}_k, \hat{P}_m] = 0, \quad (3.104b)$$

$$[\hat{X}_k, \hat{P}_m] = i\hbar\delta_{km}. \quad (3.104c)$$

Ostatnia z nich jest identyczna z relacją (3.94), która wynika z konkretnej postaci operatorów  $\hat{X}_k$  oraz  $\hat{P}_m$ . Uzyskana tutaj relacja (3.104c) ma charakter ogólniejszy, bo nie zależy od postaci występujących w niej operatorów – jest narzucona z góry. Można więc przeprowadzić konstrukcję operatorów w następujący sposób:

- wybrać (ustalić) relacje komutacyjne;
- dobrać odpowiednią przestrzeń Hilberta (przestrzeń stanów – funkcji falowych);
- znaleźć konkretną postać operatorów.

Warto zwrócić uwagę, że rezultaty ostatniego kroku (tj. postać operatorów) zależą od doboru przestrzeni Hilberta. W dalszych rozdziałach podamy przykłady takiej właśnie procedury. W szczególności, relacja (3.104c) zastosowana do operatorów położenia i pędu w odpowiednio dobranej przestrzeni funkcji falowych doprowadzi nas do uprzednio postulowanych odpowiedniości (3.90) i (3.92). Omówimy i inne przykłady, w których relacje komutacyjne posłużą jako punkt wyjścia do konstrukcji operatorów – obserwabli.

Metoda konstrukcji formalizmu mechaniki kwantowej polegająca na zastąpieniu klasycznych nawiasów Poissona przez komutatory kwantowo-mechanicznych operatorów jest jednak żmudna. Rozpoczynając studia nad mechaniką kwantową powinno się wiedzieć o istnieniu tej metody i o szczególnej roli jaką w niej odgrywają komutatory. W dalszym ciągu wykładu najczęściej jednak będziemy wybierać bardziej intuicyjne, choć z pewnością mniej ścisłe podejście.

\*\*\*\*\*