

## Rozdział 9

# Reprezentacje położeniowa i pędowa

### 9.1 Reprezentacja położeniowa

Reprezentacja położeniowa jest szczególnie uprzywilejowana i najczęściej używana. Dlatego też uwagę ją omówimy, poświęcając wiele czasu na dokładne omówienie i wyprowadzenie niuansów pojawiających się w praktycznej pracy nad różnymi zagadnieniami mechaniki kwantowej. Aby unaocznić sobie pewne aspekty dyskusji możemy myśleć o układzie fizycznym złożonym z pojedynczej, bezspinowej cząstki poruszającej się w polu o potencjale  $V(\vec{r})$ .

#### 9.1.1 Definicja reprezentacji położeniowej

Reprezentację położeniową budujemy jako zbiór wektorów własnych obserwacji  $\hat{\mathbf{R}}$  – operatora położenia cząstki, który z założenia jest hermitowski. Jego zagadnienie własne zapiszemy w postaci

$$\hat{\mathbf{R}} |u_{\vec{r}}\rangle = \vec{r} |u_{\vec{r}}\rangle. \quad (9.1)$$

Operator  $\hat{\mathbf{R}}$  jest wektorowy, w tym sensie, że stanowi trójkę operatorów  $\hat{\mathbf{R}} = (X, Y, Z) = (X_1, X_2, X_3)$  – po jednym dla każdej ze współrzędnych w zwykłej przestrzeni położenia. Możemy więc alternatywnie napisać

$$X_j |u_{\vec{r}}\rangle = x_j |u_{\vec{r}}\rangle, \quad j = 1, 2, 3. \quad (9.2)$$

gdzie  $x_j$  to składowe położenia cząstki, to jest  $\vec{r} = (x, y, z) = (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3$ . Stwierdzenie, że wektor  $\vec{r}$  (jak w równaniu (9.1)) jest wartością własną operatora  $\hat{\mathbf{R}}$  rozumiemy więc w sensie trzech równań (9.2) – dla każdej składowej położenia oddzielnie.

W równaniu (9.1) wektor  $\vec{r}$  pełni dwojaką rolę. Z jednej strony jest to wartość własna operatora położenia –  $\vec{r}$  stanowi możliwy wynik pomiaru położenia cząstki. Z drugiej strony, wektor ten jest indeksem numerującym (w sposób ciągły) wektory własne  $|u_{\vec{r}}\rangle$  operatora położenia.

Wektory własne operatora hermitowskiego  $\hat{\mathbf{R}}$  tworzą bazę (reprezentację) w przestrzeni Hilberta  $\mathcal{H}$  – przestrzeni stanów cząstki bezspinowej. A zatem utożsamiamy wprowadzoną wcześniej bazę  $\{|u_{\alpha}\rangle\}$  z wektorami  $\{|u_{\vec{r}}\rangle\}$ , zaś wektor  $\vec{r} \in \mathbb{R}^3$  przejmuje rolę ciągłego indeksu  $\alpha$ . Wprowadzimy ogólnie przyjętą notację, oznaczając wektor  $|u_{\vec{r}}\rangle$  po prostu jego "numerem", a więc pisząc

$$|u_{\vec{r}}\rangle \equiv |\vec{r}\rangle \quad \text{oraz} \quad \hat{\mathbf{R}} |\vec{r}\rangle = \vec{r} |\vec{r}\rangle. \quad (9.3)$$

Stosując jednak taką notację musimy pamiętać, że wektor  $\vec{r}$  jest wartością własną operatora  $\hat{\mathbf{R}}$ , a zatem jest zwykłym wektorem położenia cząstki. Natomiast  $|u_{\vec{r}}\rangle \equiv |\vec{r}\rangle$  jest wektorem z przestrzeni Hilberta, a więc zupełnie innym obiektem matematycznym.

Tak wybraną reprezentację nazwiemy reprezentacją położeniową. Zbiór wektorów  $\{|\vec{r}\rangle\} \in \mathcal{H}$  tworzy w przestrzeni Hilberta bazę ciągłą (numerowaną przez ciągły indeks). Wektor  $\vec{r}$  jest teraz (zamiast  $\alpha$ ) indeksem, więc zachodzą odpowiedniości

$$\int_{\mathcal{I}} d\alpha \longrightarrow \int d^3r, \quad \delta(\alpha - \beta) \longrightarrow \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (9.4)$$

Będziemy więc nadal mieć do czynienia z całkami i deltami Diraca. Całkę  $\int d^3r$ , o ile nie są zaznaczone granice całkowania, rozumiemy jako całkę po całym obszarze dostępnym dla cząstki. Obszar taki zawiera się w  $\mathbb{R}^3$ , może być podzbiorem całej przestrzeni lub też całą przestrzenią i zastępuje zbiór indeksów  $\mathcal{I}$ .

Wektory  $|\vec{r}\rangle$  muszą tworzyć bazę ortonormalną i zupełną (por. (8.2) i (8.6)). Przyjmujemy, że z założenia są spełnione relacje

$$\langle \vec{r}_1 | \vec{r}_2 \rangle = \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \quad - \quad \text{ortonormalność}, \quad (9.5a)$$

$$\int d^3r |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}| = \hat{1} \quad - \quad \text{zupełność (tzw. rozkład jedyński)}. \quad (9.5b)$$

Na zakończenie tego paragrafu wypiszmy element macierzowy operatora położenia w reprezentacji położeniowej. Z (9.3) oraz (9.5a) mamy

$$\langle \vec{r}_1 | \hat{\mathbf{R}} | \vec{r}_2 \rangle = \langle \vec{r}_1 | \vec{r}_2 | \vec{r}_2 \rangle = \vec{r}_2 \langle \vec{r}_1 | \vec{r}_2 \rangle = \vec{r}_2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2), \quad (9.6)$$

gdzie  $\vec{r}_2$  – trójka liczb będąca wartością własną operatora  $\hat{\mathbf{R}}$  może być wyniesiona na zewnątrz iloczynu skalarnego. Widzimy więc, że obliczenie elementu macierzowego operatora położenia w reprezentacji położeniowej jest bardzo proste. Wyrażenie (9.6) zawiera deltę Diraca. Jeśli zestawimy je z (8.51), to stwierdzimy, że możemy się spodziewać uproszczeń rachunkowych.

### 9.1.2 Funkcje falowe w reprezentacji położeniowej

Dowolny stan  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  zapisujemy w wybranej reprezentacji (rozkładamy w bazie)

$$|\psi\rangle = \hat{1} |\psi\rangle = \int d^3r |\vec{r}\rangle \langle \vec{r} | \psi \rangle. \quad (9.7)$$

Zgodnie z definicją (8.47) wielkość

$$\langle \vec{r} | \psi \rangle = \psi(\vec{r}), \quad (9.8)$$

nazwiemy funkcją falową stanu  $|\psi\rangle$  w reprezentacji położeniowej.

Przenosi się tu cała, omawiana w poprzednich rozdziałach interpretacja funkcji falowej. Według probabilistycznej interpretacji wzoru (8.47),  $\psi(\vec{r})$  – funkcja falowa stanu  $|\psi\rangle$  w reprezentacji położeniowej, określa amplitudę gęstości prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w stanie  $|\vec{r}\rangle$ , tj. w otoczeniu punktu  $\vec{r}$ . Mówimy tu znów o gęstości, bo mamy do czynienia z reprezentacją ciągłą.

Zbadajmy normowanie stanu  $|\psi\rangle$ . Bierzemy iloczyn skalarny stanu  $|\psi\rangle$  z samym sobą, korzystamy z rozkładu jedyński (9.5b) i stosujemy oznaczenie (9.8), otrzymując

$$\begin{aligned} \langle \psi | \psi \rangle &= \langle \psi | \hat{1} | \psi \rangle = \int d^3r \langle \psi | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \psi \rangle \\ &= \int d^3r \langle \vec{r} | \psi \rangle^* \langle \vec{r} | \psi \rangle = \int d^3r \psi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}). \end{aligned} \quad (9.9)$$

A zatem funkcja falowa  $\psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \psi \rangle$  musi być funkcją całkowalną w kwadracie. Jeżeli tylko  $\langle \psi | \psi \rangle$  jest skończone, to można przeprowadzić normowanie funkcji falowej. Oczywiście, żądając aby  $\langle \psi | \psi \rangle = 1$  otrzymujemy z (9.9) standardowy warunek normalizacyjny dla funkcji falowej (w reprezentacji położeniowej). Widzimy więc, że przenoszą tu się, i to bez żadnego problemu, wszelkie znane nam już własności funkcji falowych. Uzasadnia to nazewnictwo i notację wprowadzone w (9.8).

### 9.1.3 Operatory w reprezentacji położeniowej

Formalne (abstrakcyjne) operatory działają w przestrzeni Hilberta  $\mathcal{H}$ . Jeśli więc dwa stany  $|\psi'\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}$  są związane ze sobą relacją  $|\psi'\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$ , wówczas odpowiednie funkcje falowe w reprezentacji położeniowej spełniają związek wynikły, z zaadaptowania do aktualnych potrzeb, relacji (8.49) lub (8.50). Dokonując odpowiednich podstawień otrzymujemy

$$\psi'(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \psi' \rangle = \langle \vec{r} | \hat{A} | \psi \rangle = \int d^3r_1 \langle \vec{r} | \hat{A} | \vec{r}_1 \rangle \psi(\vec{r}_1). \quad (9.10)$$

A więc tak jak w ogólnym przypadku, do określenia jak działa operator  $\hat{A}$  na funkcje falowe w reprezentacji położeniowej, niezbędne są elementy macierzowe  $\langle \vec{r} | \hat{A} | \vec{r}' \rangle$  obliczone w tejże reprezentacji.

#### Operator położenia

Operator położenia działając na stan  $|\psi\rangle$  produkuje pewien nowy stan  $|\psi'\rangle$ , to jest  $|\psi'\rangle = \hat{\mathbf{R}}|\psi\rangle$ . Nietrudno jest znaleźć związek między odpowiednimi funkcjami falowymi w reprezentacji położeniowej. Na podstawie (9.6), z (9.10) dostajemy

$$\begin{aligned} \psi'(\vec{r}) &= \langle \vec{r} | \psi' \rangle = \langle \vec{r} | \hat{\mathbf{R}} | \psi \rangle = \int d^3r_1 \langle \vec{r} | \hat{\mathbf{R}} | \vec{r}_1 \rangle \langle \vec{r}_1 | \psi \rangle \\ &= \int d^3r_1 \vec{r}_1 \delta(\vec{r} - \vec{r}_1) \langle \vec{r}_1 | \psi \rangle = \vec{r} \langle \vec{r} | \psi \rangle = \vec{r} \psi(\vec{r}) \end{aligned} \quad (9.11)$$

Działanie operatora położenia  $\hat{\mathbf{R}}$ , "przeniesione" do przestrzeni funkcji falowych sprowadza się do mnożenia  $\psi(\vec{r})$  przez wektor położenia. Ze wzoru tego widzimy, że operator  $\hat{\mathbf{R}}$  spełnia ogólny warunek (8.52). Wobec tego, na podstawie (9.11) i (8.53) możemy odczytać operator położenia w reprezentacji położeniowej

$$\hat{\mathbf{R}}^{(r)} = \vec{r}, \quad (9.12)$$

co bynajmniej nie jest wynikiem nieoczekiwanym.

### 9.1.4 Operator pędu w reprezentacji położeniowej

Skorzystamy ponownie z ogólnego podejścia opisanego wzorem (8.49), lub (8.50). Rozważmy operator pędu  $\hat{\mathbf{P}}$ , dla którego interesuje nas element macierzowy  $\langle \vec{r} | \hat{\mathbf{P}} | \vec{r}' \rangle$ . Niestety w tym przypadku nie ma z góry zdefiniowanego działania operatora pędu na stany bazy położeniowej, musimy więc zająć się obliczeniami.

Jak pamiętamy mechanikę kwantową można konstruować zastępując klasyczne nawiasy Poissona wielkości fizycznych przez komutatory (pomnożone przez  $i\hbar$ ) odpowiednich operatorów kwantowo-mechanicznych. Dlatego też, jako punkt wyjścia przyjmujemy kanoniczną relację komutacyjną (3.104c) dla składowych operatorów położenia i pędu:

$$[X_j, P_k] = i\hbar\delta_{jk}. \quad (9.13)$$

Biorąc teraz element macierzowy  $\langle \vec{r} | \cdot | \vec{r}' \rangle$  obu stron relacji komutacyjnej, dostajemy

$$\langle \vec{r} | [X_j, P_k] | \vec{r}' \rangle = i\hbar \delta_{jk} \langle \vec{r} | \vec{r}' \rangle = i\hbar \delta_{jk} \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (9.14)$$

gdzie skorzystaliśmy z relacji ortonormalności (9.5a). Z drugiej strony obliczamy element macierzy komutatora, otrzymując

$$\langle \vec{r} | [X_j, P_k] | \vec{r}' \rangle = \langle \vec{r} | (X_j P_k - P_k X_j) | \vec{r}' \rangle = (x_j - x'_j) \langle \vec{r} | P_k | \vec{r}' \rangle \quad (9.15)$$

co wynika z równania własnego (9.2) i jego sprzężenia hermitowskiego. Porównując obie uzyskane relacje mamy

$$\delta_{jk} \delta(\vec{r} - \vec{r}') = -\frac{i}{\hbar} (x_j - x'_j) \langle \vec{r} | P_k | \vec{r}' \rangle \quad (9.16)$$

W dalszych obliczeniach wykorzystamy twierdzenie, którego dowód podany jest w *Uzupełnieniach*.

**Twierdzenie 9.1** *Delta-funkcja Diraca ma następującą własność*

$$\delta_{jk} \delta(\vec{r}) = -x_j \frac{\partial}{\partial x_k} \delta(\vec{r}). \quad (9.17)$$

Wykorzystując tezę (9.17) po lewej stronie równania (9.16) piszemy

$$-(x_j - x'_j) \frac{\partial}{\partial x_k} \delta(\vec{r} - \vec{r}') = -\frac{i}{\hbar} (x_j - x'_j) \langle \vec{r} | P_k | \vec{r}' \rangle, \quad (9.18)$$

skąd po skróceniu, otrzymujemy

$$\langle \vec{r} | P_k | \vec{r}' \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k} \delta(\vec{r} - \vec{r}') = i\hbar \frac{\partial}{\partial x'_k} \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (9.19)$$

Należy pamiętać, że wyrażenie to ma sens jedynie w ramach teorii dystrybucji, tj. w sensie formuły (8.49), gdzie element macierzowy operatora występuje pod znakiem całki.

Obliczony element macierzowy operatora pędu w reprezentacji położeniowej wykorzystamy w celu znalezienia wyrażenia  $\langle \vec{r} | P_k | \psi \rangle$  (por. reguła (8.49)). Dostajemy więc

$$\langle \vec{r} | P_k | \psi \rangle = \int d^3r' \langle \vec{r} | P_k | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | \psi \rangle = i\hbar \int d^3r' \left[ \frac{\partial}{\partial x'_k} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \right] \psi(\vec{r}'). \quad (9.20)$$

Całkę obliczamy przez części. Człon brzegowy (powierzchniowy) musi zniknąć, bowiem funkcja falowa na granicy obszaru jest równa zero. A więc dalej

$$\langle \vec{r} | P_k | \psi \rangle = -i\hbar \int d^3r' \delta(\vec{r} - \vec{r}') \frac{\partial}{\partial x'_k} \psi(\vec{r}') = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k} \psi(\vec{r}). \quad (9.21)$$

Element macierzowy operatora pędu w reprezentacji położeniowej zawierał deltę Diraca, tak jak to rozważaliśmy w ogólnym przypadku (8.51). Udało się nam dokonać takich przekształceń, że doprowadziliśmy do formuły mającej ogólny kształt wzoru (8.53). Wobec tego możemy napisać

$$\langle \vec{r} | P_k | \psi \rangle = P_k^{(r)} \psi(\vec{r}) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k} \psi(\vec{r}), \quad (9.22)$$

a stąd, wobec dowolności funkcji falowej  $\psi(\vec{r})$ , wynika już konkretna postać operatora pędu w reprezentacji położeniowej. Zauważmy, że jesteśmy tu w zgodzie z ogólną notacją zaproponowaną we wzorach (8.50). Tak więc mamy

$$P_k^{(r)} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k}, \quad k = 1, 2, 3, \quad (9.23)$$

czego zresztą należało oczekiwać. Teraz jednak, uzyskana postać operatora pędu w reprezentacji położeniowej została wyprowadzona z reguły komutacyjnej, a nie przyjęta jako postulat. W tym przypadku udało nam się pozbyć całek, możliwy jest zwarty zapis działania operatora pędu. Jest to więc specyficzna ilustracja relacji (8.50) gdzie sens dystrybucyjny zniknął.

### 9.1.5 Zasada odpowiedniości w reprezentacji położeniowej

W powyższych rozważaniach wykazaliśmy, że w reprezentacji położeniowej działanie operatorów położenia i pędu na dowolną funkcję falową wyraża się wzorami

$$\langle \vec{r} | \hat{\mathbf{R}} | \psi \rangle = \hat{\mathbf{R}}^{(r)} \psi(\vec{r}) = \vec{r} \psi(\vec{r}), \quad (9.24a)$$

$$\langle \vec{r} | \hat{\mathbf{P}} | \psi \rangle = \hat{\mathbf{P}}^{(r)} \psi(\vec{r}) = -i\hbar \nabla \psi(\vec{r}), \quad (9.24b)$$

a więc działanie operatora położenia na  $\psi(\vec{r})$  sprowadza się do mnożenia przez wektor, zaś działanie operatora pędu do różniczkowania względem zmiennych przestrzennych.

Nietrudno jest zastosować te same argumenty co poprzednio do potęg operatorów położenia i pędu. Na przykład, stosując dwukrotnie rozkład jedyńki, dla kwadratu operatora pędu mamy

$$\langle \vec{r} | \hat{\mathbf{P}}^2 | \psi \rangle = \int d^3r_1 \int d^3r_2 \langle \vec{r} | \hat{\mathbf{P}} | \vec{r}_1 \rangle \langle \vec{r}_1 | \hat{\mathbf{P}} | \vec{r}_2 \rangle \langle \vec{r}_2 | \psi \rangle. \quad (9.25)$$

Wstawiając elementy macierzowe w/g (9.19) i wykonując te same, choć coraz bardziej złożone przekształcenia, otrzymamy w końcu

$$\langle \vec{r} | \hat{\mathbf{P}}^2 | \psi \rangle = -\hbar^2 \nabla^2 \psi(\vec{r}) = \left( \hat{\mathbf{P}}^{(r)} \right)^2 \psi(\vec{r}). \quad (9.26)$$

A zatem znalazłszy działanie operatorów  $\hat{\mathbf{R}}$  i  $\hat{\mathbf{P}}$  na funkcję falową  $\psi(\vec{r})$ , możemy już konstruować w reprezentacji położeniowej dowolne inne operatory, będące funkcjami tych dwóch. I tak na przykład dla hamiltonianu  $\hat{H}$ , mamy

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{R}}) \xrightarrow{\text{repr. położeniowa}} \hat{H}^{(r)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \quad (9.27)$$

Rezultat dyskusji możemy oczywiście zapisać w sposób bardziej ogólny, a mianowicie

$$A_{klas}(\vec{r}, \vec{p}) \xrightarrow{\text{repr. położeniowa}} \hat{A}^{(r)} = \hat{A}(\vec{r}, -i\hbar \nabla). \quad (9.28)$$

W ten sposób, zasada odpowiedniości wprowadzona wcześniej właściwie *ad hoc*, uzyskuje w języku reprezentacji położeniowej rzetelne uzasadnienie formalne. Związek z fizyką klasyczną, polegający na sposobie konstruowania operatorów na podstawie klasycznych wielkości fizycznych, jest kolejnym uzasadnieniem szczególnej roli reprezentacji położeniowej.

## 9.2 Reprezentacja pędowa

Celem niniejszego podrozdziału jest pokazanie, że reprezentacja położeniowa, choć najczęściej używana, nie jest jedyną możliwą. Omówimy pokrótce reprezentację pędową.

Postępujemy w sposób zupełnie analogiczny do poprzedniego przypadku, dlatego też poniższe rozważania będą już nieco skrótowe. Niech  $\hat{\mathbf{P}}$  oznacza wektorowy, a więc złożony z 3 składowych  $\hat{\mathbf{P}} = (\hat{P}_x, \hat{P}_y, \hat{P}_z) = (\hat{P}_1, \hat{P}_2, \hat{P}_3)$  operator pędu (pewnej cząstki). Jego wektory i wartości własne oznaczmy

$$\hat{\mathbf{P}} | u_{\vec{p}} \rangle \equiv \hat{\mathbf{P}} | \vec{p} \rangle = \vec{p} | \vec{p} \rangle, \quad (9.29)$$

gdzie jak uprzednio  $\vec{p}$  jest wartością własną operatora  $\hat{\mathbf{P}}$ , czyli możliwym wynikiem pomiaru pędu cząstki. Oczywiście  $\vec{p} \in \mathbb{R}^3$  i jest zwykłym wektorem. Wektor  $| \vec{p} \rangle$  z przestrzeni Hilberta

oznaczamy jego "numerem" (analogicznie jak to zrobiliśmy w (9.3) dla położenia). Stany (wektory) własne operatora hermitowskiego  $\hat{\mathbf{P}}$  tworzą w  $\mathcal{H}$  bazę, a zatem są ortonormalne i zupełne, tj. spełniają relacje

$$\langle \vec{\mathbf{p}}_1 | \vec{\mathbf{p}}_2 \rangle = \delta(\vec{\mathbf{p}}_1 - \vec{\mathbf{p}}_2), \quad (9.30a)$$

$$\int d^3p |\vec{\mathbf{p}}\rangle \langle \vec{\mathbf{p}}| = \hat{\mathbf{1}}. \quad (9.30b)$$

Zbiór indeksów jest zbiorem ciągłym. Wobec tego, podobnie jak w (9.4) całka po  $d\alpha$  przejdzie w całkę względem  $d^3p$ , a także  $\delta(\alpha - \beta)$  będzie zastąpiona przez  $\delta(\vec{\mathbf{p}} - \vec{\mathbf{p}}')$ . Tak wybraną w  $\mathcal{H}$  reprezentację (bazę) nazwiemy reprezentacją pędową. Postępując dalej, analogicznie jak przy dyskusji reprezentacji położeniowej, otrzymujemy

$$\langle \vec{\mathbf{p}}_1 | \hat{\mathbf{P}} | \vec{\mathbf{p}}_2 \rangle = \vec{\mathbf{p}}_2 \langle \vec{\mathbf{p}}_1 | \vec{\mathbf{p}}_2 \rangle = \vec{\mathbf{p}}_2 \delta(\vec{\mathbf{p}}_1 - \vec{\mathbf{p}}_2), \quad (9.31)$$

co oczywiście jest elementem macierzowym operatora pędu w reprezentacji pędowej.

Niech teraz  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  będzie dowolnym wektorem opisującym stan cząstki. Wówczas (w analogii do (9.7)) możemy napisać

$$|\psi\rangle = \hat{\mathbf{1}} |\psi\rangle = \int d^3p |\vec{\mathbf{p}}\rangle \langle \vec{\mathbf{p}} | \psi \rangle = \int d^3p |\vec{\mathbf{p}}\rangle \tilde{\psi}(\vec{\mathbf{p}}). \quad (9.32)$$

Oczywiście wielkość

$$\langle \vec{\mathbf{p}} | \psi \rangle = \tilde{\psi}(\vec{\mathbf{p}}), \quad (9.33)$$

nazwiemy funkcją falową (cząstki) w reprezentacji pędowej. Sprawdźmy teraz konsekwencje normowania stanu  $|\psi\rangle$ . A zatem

$$\begin{aligned} 1 = \langle \psi | \psi \rangle &= \langle \psi | \hat{\mathbf{1}} | \psi \rangle = \int d^3p \langle \psi | \vec{\mathbf{p}} \rangle \langle \vec{\mathbf{p}} | \psi \rangle, \\ &= \int d^3p \tilde{\psi}^*(\vec{\mathbf{p}}) \tilde{\psi}(\vec{\mathbf{p}}) = \int d^3p |\tilde{\psi}(\vec{\mathbf{p}})|^2 \end{aligned} \quad (9.34)$$

gdzie skorzystaliśmy z rozkładu jedyńki (9.30b) w reprezentacji pędowej. Widzimy więc, że zgodnie z ogólnymi wymogami, funkcja falowa  $\tilde{\psi}(\vec{\mathbf{p}})$  w reprezentacji pędowej jest unormowana do jedności, tak samo jak to było w reprezentacji położeniowej (i zresztą w każdej innej, patrz (8.48) i jego dyskusja). Dlatego też interpretujemy funkcję  $\tilde{\psi}(\vec{\mathbf{p}})$  jako amplitudę gęstości prawdopodobieństwa tego, że badana cząstka ma pęd w otoczeniu  $\vec{\mathbf{p}}$ .

Pracując w reprezentacji położeniowej badaliśmy, w jaki sposób w tejże reprezentacji wyrażają się operatory położenia i pędu. Rozważymy ten sam problem w reprezentacji pędowej. Niech więc  $|\psi'\rangle = \hat{\mathbf{P}} |\psi\rangle$ . Wobec tego, podobnie jak przy wyprowadzaniu relacji (9.11), w tym wypadku dostajemy

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}'(\vec{\mathbf{p}}) &= \langle \vec{\mathbf{p}} | \psi' \rangle = \langle \vec{\mathbf{p}} | \hat{\mathbf{P}} | \psi \rangle = \langle \vec{\mathbf{p}} | \hat{\mathbf{P}} \hat{\mathbf{1}} | \psi \rangle \\ &= \int d^3p_1 \langle \vec{\mathbf{p}} | \hat{\mathbf{P}} | \vec{\mathbf{p}}_1 \rangle \langle \vec{\mathbf{p}}_1 | \psi \rangle. \end{aligned} \quad (9.35)$$

Korzystając z wyrażenia (9.31) otrzymujemy

$$\tilde{\psi}'(\vec{\mathbf{p}}) = \int d^3p_1 \vec{\mathbf{p}}_1 \delta(\vec{\mathbf{p}} - \vec{\mathbf{p}}_1) \langle \vec{\mathbf{p}}_1 | \psi \rangle = \vec{\mathbf{p}} \langle \vec{\mathbf{p}} | \psi \rangle = \vec{\mathbf{p}} \tilde{\psi}(\vec{\mathbf{p}}) \quad (9.36)$$

Widzimy więc, że działanie operatora pędu w reprezentacji pędowej sprowadza się do pomnożenia funkcji falowej  $\tilde{\psi}(\vec{\mathbf{p}})$  przez pęd (wartość własną)

$$\hat{\mathbf{P}}^{(p)} \tilde{\psi}(\vec{\mathbf{p}}) = \vec{\mathbf{p}} \tilde{\psi}(\vec{\mathbf{p}}), \quad (9.37)$$

co jest wynikiem podobnym do relacji (9.11) uzyskanej w reprezentacji położeniowej. Dość żmudne obliczenia doprowadziły nas do wyrażenia (9.23) określającego operator pędu w reprezentacji położeniowej. W dużej mierze analogiczna (nie będziemy więc jej tu podawać) procedura obliczeniowa pozwala znaleźć postać operatora położenia w reprezentacji pędowej. Otrzymujemy wtedy

$$\hat{\mathbf{R}}^{(p)} = i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{\mathbf{p}}} = \nabla_{\vec{\mathbf{p}}}, \quad \text{lub} \quad X_j^{(p)} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_j} \quad (9.38)$$

czyli operator położenia w reprezentacji pędowej to gradient obliczany w przestrzeni pędów  $\vec{\mathbf{p}} \in \mathbb{R}^3$ .

### 9.3 Związek między reprezentacjami $|\vec{\mathbf{r}}\rangle$ i $|\vec{\mathbf{p}}\rangle$

#### 9.3.1 Wprowadzenie

Stanowi fizycznemu  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  przyporządkowaliśmy funkcje falowe

$$\psi(\vec{\mathbf{r}}) = \langle \vec{\mathbf{r}} | \psi \rangle \quad - \quad \text{w reprezentacji położeniowej}, \quad (9.39a)$$

$$\tilde{\psi}(\vec{\mathbf{p}}) = \langle \vec{\mathbf{p}} | \psi \rangle \quad - \quad \text{w reprezentacji pędowej}, \quad (9.39b)$$

przy czym są one współczynnikami rozkładu stanu  $|\psi\rangle$  odpowiednio w bazach  $\{|\vec{\mathbf{r}}\rangle\}$  i  $\{|\vec{\mathbf{p}}\rangle\}$ , to znaczy

$$|\psi\rangle = \int d^3r |\vec{\mathbf{r}}\rangle \langle \vec{\mathbf{r}} | \psi \rangle = \int d^3r |\vec{\mathbf{r}}\rangle \psi(\vec{\mathbf{r}}), \quad (9.40a)$$

$$|\psi\rangle = \int d^3p |\vec{\mathbf{p}}\rangle \langle \vec{\mathbf{p}} | \psi \rangle = \int d^3p |\vec{\mathbf{p}}\rangle \tilde{\psi}(\vec{\mathbf{p}}), \quad (9.40b)$$

Co więcej, operatory położenia i pędu to

	Reprezentacja	
	położeniowa	pędowa
operator położenia	$\hat{\mathbf{R}}^{(r)} = \vec{\mathbf{r}}$	$X_j^{(p)} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_j}$
operator pędu	$P_k^{(r)} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k}$	$\hat{\mathbf{P}}^{(p)} = \vec{\mathbf{p}}$

(9.41)

Nasuwa się więc wniosek, że obie reprezentacje są wzajemnie ściśle powiązane.

Aby dokładnie zbadać ten związek, posłużymy się metodami, które omawialiśmy już w poprzednim rozdziale. Rozważmy  $\psi(\vec{\mathbf{r}}) = \langle \vec{\mathbf{r}} | \psi \rangle$  – funkcję falową w reprezentacji położeniowej i skorzystajmy z rozkładu jedynki w reprezentacji pędowej

$$\psi(\vec{\mathbf{r}}) = \langle \vec{\mathbf{r}} | \hat{\mathbf{1}} | \psi \rangle = \int d^3p \langle \vec{\mathbf{r}} | \vec{\mathbf{p}} \rangle \langle \vec{\mathbf{p}} | \psi \rangle = \int d^3p \langle \vec{\mathbf{r}} | \vec{\mathbf{p}} \rangle \tilde{\psi}(\vec{\mathbf{p}}). \quad (9.42)$$

Postępując teraz "odwrotnie", piszemy

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}(\vec{\mathbf{p}}) &= \langle \vec{\mathbf{p}} | \hat{\mathbf{1}} | \psi \rangle = \int d^3r \langle \vec{\mathbf{p}} | \vec{\mathbf{r}} \rangle \langle \vec{\mathbf{r}} | \psi \rangle \\ &= \int d^3r \langle \vec{\mathbf{p}} | \vec{\mathbf{r}} \rangle \psi(\vec{\mathbf{r}}) = \int d^3r \langle \vec{\mathbf{r}} | \vec{\mathbf{p}} \rangle^* \psi(\vec{\mathbf{r}}). \end{aligned} \quad (9.43)$$

Z powyższych relacji wynika, że jeżeli tylko znamy wielkość  $\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle$ , to możemy sprawnie przejść od reprezentacji pędowej do położeniowej (za pomocą (9.42)), lub na odwrót od położeniowej do pędowej (9.43). Możemy także interpretować iloczyn skalarny  $\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle$  jako macierz przejścia od jednej reprezentacji do drugiej.

Zanim przystąpimy do obliczeń  $\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle$  zastanówmy się nad sensem fizycznym tej wielkości. Otóż umówiliśmy się nazywać  $\langle \vec{r} | \psi \rangle$  funkcją falową stanu  $|\psi\rangle$  w reprezentacji położeniowej. Wobec tego  $\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle$  możemy nazwać funkcją falową pędu w reprezentacji położeniowej. Ponieważ  $|\vec{p}\rangle$  to stan własny operatora pędu, więc możemy jeszcze precyzyjniej stwierdzić, że  $\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle$  to funkcja własna pędu w reprezentacji położeniowej. Możemy odwrócić rozumowanie i nazwać  $\langle \vec{p} | \vec{r} \rangle$  funkcją własną położenia w reprezentacji pędowej. Oczywiście zachodzi przy tym relacja

$$\langle \vec{p} | \vec{r} \rangle = \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle^*. \quad (9.44)$$

Co więcej  $|\langle \vec{p} | \vec{r} \rangle|^2$ , zgodnie z interpretacją probabilistyczną, jest

- gęstością prawdopodobieństwa tego, że cząstka mająca pęd  $\vec{p}$  (stan własny) znajduje się w otoczeniu punktu  $\vec{r}$  w przestrzeni;
- gęstością prawdopodobieństwa tego, że cząstka znajdująca się w punkcie  $\vec{r}$  ma pęd odpowiadający wartości własnej  $\vec{p}$ .

Niestety, taka interpretacja sprawia poważne kłopoty, które omówimy po obliczeniu jawnej postaci funkcji  $\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle$ .

### 9.3.2 Funkcje własne pędu w reprezentacji położeniowej

Szukamy więc funkcji własnej pędu w reprezentacji położeniowej, czyli innymi słowy macierzy przejścia między reprezentacjami położeniową a pędową. Oznaczmy dla wygody

$$\varphi_{\vec{p}}(\vec{r}) \equiv \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle. \quad (9.45)$$

Aby znaleźć tę funkcję, rozważmy element macierzowy powstający przez "obłożenie" zagadnienia własnego pędu (9.29) przez bra  $\langle \vec{r} |$

$$\langle \vec{r} | \hat{\mathbf{P}} | \vec{p} \rangle = \langle \vec{r} | \vec{p} | \vec{p} \rangle = \vec{p} \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = \vec{p} \varphi_{\vec{p}}(\vec{r}), \quad (9.46)$$

gdzie po prawej wyciągnęliśmy zwykły wektor (wartość własną pędu) przed element macierzowy. Za pomocą relacji (9.22), w której kładziemy  $|\psi\rangle = |\vec{p}\rangle$  otrzymujemy

$$\langle \vec{r} | \hat{\mathbf{P}} | \vec{p} \rangle = \hat{\mathbf{P}}^{(r)} \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = -i\hbar \nabla \varphi_{\vec{p}}(\vec{r}), \quad (9.47)$$

Porównując prawe strony dwóch ostatnich równań otrzymujemy równanie różniczkowe

$$-i\hbar \nabla \varphi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \vec{p} \varphi_{\vec{p}}(\vec{r}). \quad (9.48)$$

Równanie to ma oczywiste rozwiązanie w postaci

$$\varphi_{\vec{p}}(\vec{r}) = N_0 \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}\right), \quad (9.49)$$

gdzie  $N_0$  jest stałą normalizacyjną. Normowanie jest tu jednak sprawą delikatną. Zauważmy bowiem, że z zupełności bazy położeniowej (9.5b) i z normalizacji (9.30a) wynika

$$\int d^3r |\varphi_{\vec{p}}(\vec{r})|^2 = \int d^3r \langle \vec{p} | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = \langle \vec{p} | \vec{p} \rangle = \delta(0). \quad (9.50)$$



A więc mamy kłopot. Warto w tym miejscu przypomnieć sobie, że w teorii transformacji Fouriera mamy pożyteczną relację

$$(2\pi)^3 \delta(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) = \int d^3r \exp[-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{r}]. \quad (9.51)$$

Wobec tego, dla naszych funkcji  $\varphi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle$  z warunku ortonormalizacji (9.30a) otrzymujemy

$$\begin{aligned} \delta(\vec{p}_1 - \vec{p}_2) &= \langle \vec{p}_1 | \vec{p}_2 \rangle = \int d^3r \langle \vec{p}_1 | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \vec{p}_2 \rangle \\ &= |N_0|^2 \int d^3r \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{p}_1 \cdot \vec{r}\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p}_2 \cdot \vec{r}\right) \\ &= |N_0|^2 \int d^3r \exp\left[-\frac{i}{\hbar} (\vec{p}_1 - \vec{p}_2) \cdot \vec{r}\right]. \end{aligned} \quad (9.52)$$

Druga równość wynika z rozkładu jedynki w reprezentacji położeniowej, a trzecia z (9.49). Zamieniając w elementarny sposób zmienną całkowania  $\vec{r} = \hbar \vec{q}$  dostajemy

$$\begin{aligned} \delta(\vec{p}_1 - \vec{p}_2) &= |N_0|^2 \hbar^3 \int d^3q \exp[-i(\vec{p}_1 - \vec{p}_2) \cdot \vec{q}] \\ &= |N_0|^2 \hbar^3 (2\pi)^3 \delta(\vec{p}_1 - \vec{p}_2) \end{aligned} \quad (9.53)$$

A więc widzimy, że stała normalizacyjna wynosi

$$|N_0|^2 = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \implies N_0 = \frac{e^{i\phi}}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}. \quad (9.54)$$

Wybieramy fazę globalną równą zeru. Tym samym funkcje własne operatora pędu w reprezentacji położeniowej są postaci

$$\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = \varphi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}\right). \quad (9.55)$$

Zgodnie z wprowadzoną interpretacją, możemy na wielkość  $\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle$  spojrzeć dwojako. Po pierwsze, jest to funkcja własna pędu w reprezentacji położeniowej, bowiem  $|\vec{p}\rangle$  jest stanem własnym pędu. Po drugie, jest to element macierzowy macierzy przejścia pomiędzy reprezentacją położeniową a pędową (relacje (9.42) oraz (9.43)).

Łatwo jest sprawdzić, że powyższa funkcja rzeczywiście jest funkcją własną pędu w reprezentacji położeniowej. Istotnie, zgodnie z przepisem (9.22)

$$\begin{aligned} \hat{P}^{(r)} \varphi_{\vec{p}}(\vec{r}) &= -i\hbar \nabla \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}\right) \\ &= -i\hbar \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \left(\frac{i}{\hbar} \vec{p}\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}\right) = \vec{p} \varphi_{\vec{p}}(\vec{r}), \end{aligned} \quad (9.56)$$

tak jak być powinno.

### 9.3.3 Zmiana reprezentacji – pary fourierowskie

Do tej pory pracowaliśmy w reprezentacji położeniowej, w której stan  $|\psi\rangle$  reprezentujemy za pomocą funkcji falowej  $\psi(\vec{r}) \equiv \langle \vec{r} | \psi \rangle$ . Chcemy teraz stan  $|\psi\rangle$  przedstawić w reprezentacji pędowej. Korzystamy ze wzoru (9.43), gdzie podstawiamy  $\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle$ , a zatem

$$\tilde{\psi}(\vec{p}) = \int d^3r \varphi_{\vec{p}}^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3r \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}\right) \psi(\vec{r}). \quad (9.57)$$

I na odwrót, przechodzimy od reprezentacji pędowej do położeniowej, więc na mocy (9.42) otrzymujemy

$$\psi(\vec{r}) = \int d^3p \varphi_{\vec{p}}(\vec{r}) \tilde{\psi}(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}\right) \tilde{\psi}(\vec{p}). \quad (9.58)$$

Wnioskujemy więc, że funkcje falowe stanu  $|\psi\rangle$  w reprezentacjach położeniowej i pędowej stanowią parę transformat Fouriera. Jeśli wobec tego znamy skądinąd (np. z rozwiązania równania Schrödingera) funkcję falową cząstki w reprezentacji położeniowej, to za pomocą transformaty (9.57) znajdziemy odpowiednią funkcję falową w reprezentacji pędowej. Transformata (9.58) zapewnia zaś przejście odwrotne – od pędowej funkcji falowej do zwykłej, tj. do reprezentacji położeniowej.

### 9.3.4 Cząstka swobodna

Funkcje falowe  $\varphi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle$  interpretowaliśmy (w reprezentacji położeniowej) jako funkcje własne pędu, albo jako współczynniki przejścia pomiędzy reprezentacjami  $|\vec{r}\rangle$  i  $|\vec{p}\rangle$ . Możemy jednak nadać tym funkcjom jeszcze inną interpretację.

Rozważmy mianowicie cząstkę swobodną (bezsピンową, o masie  $m$ ), której hamiltonian ma postać

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m}. \quad (9.59)$$

Zbadajmy stacjonarne równanie Schrödingera, czyli zagadnienie własne dla hamiltonianu

$$\hat{H}|\phi\rangle = E|\phi\rangle \quad \implies \quad \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m}|\phi\rangle = E|\phi\rangle, \quad (9.60)$$

które w reprezentacji położeniowej przyjmuje postać

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi(\vec{r}) = E \phi(\vec{r}), \quad (9.61)$$

co oczywiście wynika np. z (9.26). Zamiast rozwiązywać równanie różniczkowe (9.61) możemy postąpić inaczej. Drugie z równań (9.60) zapiszemy jako

$$\hat{\mathbf{P}}^2|\phi\rangle = 2mE|\phi\rangle, \quad (9.62)$$

co stanowi równanie własne dla kwadratu operatora pędu. Ponieważ zaś  $\hat{\mathbf{P}}|\vec{p}\rangle = \vec{p}|\vec{p}\rangle$ , więc natychmiast mamy  $\hat{\mathbf{P}}^2|\vec{p}\rangle = \vec{p}^2|\vec{p}\rangle$ . Zatem stan  $|\phi\rangle$  jest stanem własnym pędu proporcjonalnym do stanu  $|\vec{p}\rangle$ . A więc po podstawieniu do (9.62) (stała proporcjonalności i tak się skraca) mamy

$$\vec{p}^2|\vec{p}\rangle = 2mE|\vec{p}\rangle. \quad (9.63)$$

Wnioskujemy stąd, że stan  $|\vec{p}\rangle$  jest nie tylko stanem własnym pędu, ale także stanem własnym hamiltonianu (energii) swobodnej cząstki odpowiadającym energii  $E = \vec{p}^2/2m$ .

Przechodząc do reprezentacji położeniowej stwierdzamy, że funkcja falowa

$$\varphi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}\right) \quad (9.64)$$

jest funkcją własną pędu oraz funkcją własną energii swobodnej cząstki, przy czym  $E = \vec{p}^2/2m$ . Zwróćmy uwagę, że energia  $E$  jest zdegenerowana, bo odpowiadają jej funkcje własne (9.64), w których energia określa jedynie wartość  $p = |\vec{p}|$ , zaś kierunek wektora pędu jest dowolny.

### 9.3.5 Kłopoty interpretacyjne

Normując funkcję własną pędu  $\varphi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle$  (w reprezentacji położeniowej) natrafiłszy na kłopoty. Odwołaliśmy się do "sztuczek" z teorii dystrybucji i transformacji Fouriera. Niestety nie są to jedyne kłopoty. Zgodnie z przyjętą interpretacją  $\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle$  jest amplitudą prawdopodobieństwa tego, że cząstka o pędzie  $\vec{p}$  zostanie znaleziona w otoczeniu punktu  $\vec{r}$ . Wydaje się to być w porządku, dopóki nie uświadomimy sobie, że

$$|\varphi_{\vec{p}}(\vec{r})|^2 = \left| \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}\right) \right|^2 = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}, \quad (9.65)$$

więc całka z gęstości prawdopodobieństwa po całej przestrzeni  $\mathbb{R}^3$  daje nieskończoność. Cały kłopot w tym, że prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w całej przestrzeni powinno być równe 1. Zanim przejdziemy do dalszej dyskusji, warto poczynić dwie uwagi.

Po pierwsze, zasada nieoznaczoności mówi, że jeśli cząstka ma ściśle określony pęd (o rozmyciu dążącym do zera), to rozmycie jej położenia powinno dążyć do nieskończoności. W tym więc sensie nasz kłopot może wydawać się niewielki. Po drugie, jeśli będziemy całkować gęstość prawdopodobieństwa (9.65) po skończonej objętości (nie wprowadzając żadnych innych modyfikacji), to wynik całkowania powinien być skończony, można więc mieć nadzieję, że jakoś uda się przeprowadzić normowanie prawdopodobieństwa.

Spróbujmy teraz uzmysłowić sobie, skąd wzięły się problemy. Wprowadzając reprezentację  $|\vec{p}\rangle$  (a potem szukając związków z reprezentacją  $|\vec{r}\rangle$ ) przyjeśliśmy milcząco, że wartości własne pędu tworzą zbiór ciągły, czego konsekwencją jest relacja ortonormalizacyjna (9.30a) zawierająca deltę Diraca zamiast delty Kroneckera i z której korzystaliśmy w (9.52). Innymi słowy przyjeśliśmy, że operator pędu ma widmo ciągłe. Oczywiście to samo dotyczy widma energii, gdy traktujemy  $\varphi_{\vec{p}}(\vec{r})$  jako funkcję własną hamiltonianu cząstki swobodnej. Operatory mające widmo ciągłe występują w różnych zagadnieniach fizycznych i sprawiają trudności podobne do omawianych tutaj. Nie jest naszym celem dyskutowanie matematycznych aspektów tych trudności. Rozwiązuje się je zazwyczaj technikami zbliżonymi do tutaj zastosowanych, tj. (mówiąc w uproszczeniu)) przez odwołanie się do teorii dystrybucji i transformacji Fouriera. Mamy jednak wtedy do czynienia z nienormowalnymi (w sensie relacji (9.65)) funkcjami falowymi. Jak poradzić sobie z ich interpretacją fizyczną?

Jeden ze sposobów przenosimy z fizyki klasycznej, gdzie często opisujemy fale za pomocą tzw. fal płaskich typu  $\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega t)$ , które rozciągają się w całej przestrzeni i także są kłopotliwe (bo np. traktując je ściśle – niosą nieskończoną energię). Wyjście z kłopotu polega na cichym założeniu, że fale płaskie stanowią składowe pakietów falowych. Podobnie możemy postępować w mechanice kwantowej, po cichu myśląc o funkcjach  $\varphi_{\vec{p}}(\vec{r})$  jako o składowych pakietu falowego. Matematyczna analiza pakietów bywa żmudna i dosyć uciążliwa. Funkcje  $\varphi_{\vec{p}}(\vec{r})$  są zaś proste i łatwo poddają się manipulacjom matematycznym. Wygodnie jest się więc nimi posługiwać przyjmując, że w końcu dokonamy ich superpozycji tworząc pakiety falowe. Pakiet falowy tworzy funkcję normowalną funkcję falową i jego interpretacja probabilistyczna nie sprawia już żadnych kłopotów. Co więcej, pakiet charakteryzuje się skończonymi rozmyciami pędu i położenia, co jest w pełni zgodne z zasadą nieoznaczoności.

Innym sposobem ominięcia omawianych trudności interpretacyjnych jest rozważanie układów fizycznych w skończonej objętości (w pudle o objętości  $\mathcal{V}$ ). Metoda ta nie tylko (jak już wskazywaliśmy) ogranicza obszar dostępny dla cząstki, lecz także na ogół prowadzi do widma dyskretnego, czyli pozwala uniknąć problemów z widmem ciągłym. Funkcje falowe są wówczas normowalne. Przykładem może być cząstka w nieskończenie głębokiej jamie potencjału, gdzie żadne kłopoty się nie pojawiają.

Podsumowując, stwierdzamy, że funkcje falowe  $\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle$  mogą być pożytecznym narzędziem matematycznym (tak samo jak fale płaskie w fizyce klasycznej), a z ich interpretacją radzimy sobie w któryś z omówionych sposobów.

\* \* \* \* \*