

1 Wstęp

Mechanika kwantowa została sformułowana w połowie lat dwudziestych XX wieku jako narzędzie opisu zjawisk mikroświata, tj. zjawisk zachodzących na skalę atomową i do dziś stanowi podstawową teorię zjawisk atomowych. Bezpośrednim bodźcem powstania mechaniki kwantowej był brak poprawnego opisu teoretycznego w ramach fizyki klasycznej szeregu faktów doświadczalnych, zgromadzonych z końcem XIX wieku. Do najważniejszych zaliczyć należy (oprócz oczywiście promieniowania atomów):

- promieniowanie ciała doskonale czarnego,
- efekt fotoelektryczny,
- efekt Comptona.

Okazało się, że energia jest emitowana (bądź absorbowana) nie w sposób ciągły, jak tego wymaga opis klasyczny, ale porcjami, czyli kwantami. Stąd wzięła się zresztą nazwa *mechanika kwantowa*. Oczywiście fakt emisji energii porcjami wymaga istnienia *porcji minimalnej* (inaczej możliwa byłaby emisja ciągła), a więc stałej przyrody, która określa wartość energii owej porcji minimalnej. Tą nową, odkrytą na początku stulecia stałą, jest tzw. stała Plancka:

$$h = 6.626075510 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} = 6.626075510 \times 10^{-27} \text{ erg} \cdot \text{s}. \quad (1.1)$$

Warto zwrócić uwagę na to, jak mała jest to liczba. Ma ona wymiar *działania* (*energia·czas*). Podniesieniu 1 kg cukru na wysokość jednego metra w czasie 1 sekundy odpowiada w przybliżeniu działanie 1/10 J·s. Zatem o istnieniu minimalnej porcji energii w życiu codziennym można całkowicie zapomnieć. Dopiero badając zjawiska, dla których typowe wartości działania są porównywalne z h , ujawnia się istnienie *porcji podstawowej* i mechanika klasyczna przestaje się stosować. Rozumowanie to można odwrócić: jeśli w mechanice kwantowej formalnie wykonać przejście graniczne $h \rightarrow 0$, to prawa kwantowe powinny się zredukować do praw mechaniki klasycznej. Jest to treść sformułowanej przez Nielsa Bohra tzw. zasady korespondencji.

Drugą ideą teoretyczną jest tzw. *dualizm korpuskularno falowy*. Okazuje się, że niektóre doświadczenia dotyczące promieniowania elektromagnetycznego, które zgodnie z fizyką klasyczną ma charakter falowy, można wytłumaczyć jedynie zakładając, że promieniowanie to składa się ze strumienia cząstek, tzw. fotonów (efekt fotoelektryczny). Z kolei strumienie cząstek, np. elektronów, wykazują charakter falowy (np. zjawisko dyfrakcji). Ta ostatnia idea pochodzi od Louisa de Broglie'a.

Wspomniane wyżej idee teoretyczne zaowocowały w latach dwudziestych powstaniem pełnej, matematycznie poprawnej teorii – mechaniki kwantowej, sformułowanej niezależnie przez Erwina Schrödingera i Wernera Heisenberga. Teoria ta dawała nie tylko jakościowe, ale także ilościowe wytłumaczenie zjawisk atomowych.

Początek wieku XX to także powstanie szczególnej i ogólnej teorii względności Alberta Einsteina. Szczególna teoria względności jest w gruncie rzeczy kinematyczną

konsekwencją prostego faktu doświadczalnego: stałości prędkości światła c . Słynny wzór Einsteina:

$$E^2 = m^2 c^4 + \vec{p}^2 c^2 \quad (1.2)$$

podaje związek między energią a pędem i masą spoczynkową czastki swobodnej. Jest to związek między kwadratem energii a kwadratem pędu, gdy tymczasem związek klasyczny:

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m} + const. \quad (1.3)$$

wiąże liniowo kwadrat pędu z energią. Mechanika kwantowa Schrödingera i Heisenberga nie respektuje zależności (1.2) i z tego względu jest teorią *nierelatywistyczną*. Sformułowanie teorii kwantowej respektującej związek Einsteina udało się Paulowi Dirakowi. Równanie Diraka ma dwie niesłychanie ważne konsekwencje: pojawienie się spinu, który w nierelatywistycznej mechanice kwantowej trzeba było wprowadzać „rękami” oraz przewidzenie istnienia antycząstek.

Inną konsekwencją szczególnej teorii względności jest to, że oddziaływania nie są natychmiastowe. Rzeczywiście, na przykład zmiana położenia jądra jest „wyczuwana” przez elektron po bardzo krótkim, ale jednak skończonym czasie. Ten aspekt teorii Einsteina nie jest zawarty w równaniu Diraka, które jest w gruncie rzeczy równaniem czastki swobodnej. Dalszym uogólnieniem relatywistycznej mechaniki kwantowej, które bierze pod uwagę i ten aspekt teorii względności jest relatywistyczna teoria pola.

Współczesne sformułowanie mechaniki kwantowej zawdzięczamy Richardowi Feynmanowi. Jest to podejście oparte o matematyczny formalizm tzw. *całek po trajektoriach*, który znajduje także zastosowanie w kwantowej teorii pola.

Cechą odróżniającą mechanikę kwantową od klasycznej, na której Feynman oparł swój formalizm, i która ma daleko idące konsekwencje rachunkowe i interpretacyjne jest probabilistyczny charakter mechaniki kwantowej.

2 Prawdopodobieństwo i amplitudy prawdopodobieństwa¹

2.1 Prawdopodobieństwo

Dla zjawisk powtarzalnych prawdopodobieństwo zdarzenia A można określić jako

$$n_A \simeq p_A N \quad (2.1)$$

gdzie N jest całkowitą liczbą prób (np. rzutów kostką), a n_A jest liczbą przypadków, w których zaszło zdarzenie A (np. liczba rzutów kostką, w których wyszła jedynka). Dla skończonych N stosunek n_A/N fluktuuje z N . Prawdopodobieństwo p_A natomiast jest liczbą < 1 , która nie zależy od N . We wzorze (2.1) prawdopodobieństwo p_A należy wybrać tak, aby te fluktuacje malały ze wzrostem N .

¹Za wykładami Jamesa Binney i Davida Skinnera, Merton College, Oxford.

Często mamy do czynienia ze zdarzeniami złożonymi. Jeśli A jest zdarzeniem, że rzucając kostką białą uzyskamy 1, a B że kostka czerwona pokaże 5, to zjawisko AB (rzucamy dwie kostki, kostka biała pokazuje 1 i kostka czerwona 5) zachodzi z prawdopodobieństwem

$$p(A \text{ i } B) = p_{A*B} = p_A p_B. \quad (2.2)$$

Wzór (2.2) jest prawdziwy, tylko gdy zdarzenia A i B są *niezależne* (wynik rzutu kostką białą nie wpływa na wynik rzutu kostką czerwoną).

W jednym rzucie kostką możliwy jest tylko jeden wynik. Dlatego otrzymanie 1 w rzucie kostką białą (zdarzenie A) wyklucza otrzymanie 2 (zdarzenie C); A i C są zdarzeniami *rozłącznymi*. Prawdopodobieństwo, że w rzucie białą kostką otrzymamy 1 lub 2 jest sumą

$$p(A \text{ lub } B) = p_{A+B} = p_A + p_B. \quad (2.3)$$

W rzucie kostką mamy $n = 6$ możliwych zdarzeń: otrzymanie 1 lub 2 lub ... lub 6. Ponieważ nic innego nie może się stać, prawdopodobieństwo

$$p(1 \text{ lub } 2 \text{ lub } 3 \dots \text{ lub } n) = 1 = \sum_{i=1}^n p_i. \quad (2.4)$$

Jeżeli wszystkie wyniki są jednakowo prawdopodobne

$$p_i = \frac{1}{n}. \quad (2.5)$$

2.2 Wartość oczekiwana

Zmienna losowa x to wielkość, którą mierzymy, a wartość którą otrzymujemy w wyniku pomiaru pojawia się z pewnym prawdopodobieństwem. Pozostając przy przykładzie *dyskretnym* (rzuty kostką), zmienna losowa x_i może przyjmować wartości od $x_1 = 1$ do $x_6 = 6$. *Wartość oczekiwana* zdefiniowana jest jako:

$$\langle x \rangle = \sum_i x_i p_i. \quad (2.6)$$

Dla zdarzeń powtarzalnych, *średnia* wartość \bar{x} uzyskana w N próbach dąży do $\langle x \rangle$ gdy N jest bardzo duże.

Dla dwóch (lub więcej) zmiennych losowych, x oraz y , niech p_{ij} będzie prawdopodobieństwem, że w pomiarze x otrzymamy wynik x_i , w pomiarze y wynik y_j . Wartość oczekiwana sumy wynosi

$$\begin{aligned} \langle x + y \rangle &= \sum_{i,j} (x_i + y_j) p_{ij} = \sum_{i,j} x_i p_{ij} + \sum_{i,j} y_j p_{ij} \\ &= \sum_i x_i \sum_j p_{ij} + \sum_j y_j \sum_i p_{ij}. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Ale $\sum_j p_{ij}$ jest prawdopodobieństwem otrzymania x_i bez względu na to jaki jest wynik pomiaru y . Zatem

$$\sum_j p_{ij} = p_i^{(x)}, \quad \sum_i p_{ij} = p_j^{(y)}, \quad (2.8)$$

czyli

$$\langle x + y \rangle = \langle x \rangle + \langle y \rangle. \quad (2.9)$$

Wartość oczekiwana sumy dwóch zmiennych losowych jest sumą ich wartości oczekiwanych, bez względu czy są to zmienne losowe niezależne.

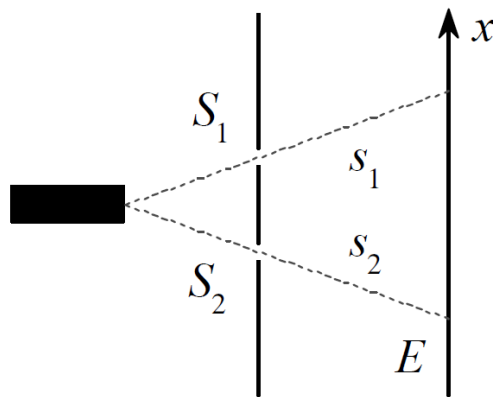
Miarą *fluktuacji* zmiennej losowej jest *wariancja*:

$$\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - 2 \langle x \langle x \rangle \rangle + \langle \langle x \rangle^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2. \quad (2.10)$$

2.3 Amplitudy prawdopodobieństwa

Wiele dziedzin naukowych posługuje się rachunkiem prawdopodobieństwa, ale mechanika kwantowa odróżnia się od nich sposobem, w jaki wylicza się prawdopodobieństwa. Bowiem tylko w mechanice kwantowej prawdopodobieństwo p jest dane jako kwadrat modułu pewnej liczby zespolonej A zwanej amplitudą prawdopodobieństwa:

$$p = |A|^2. \quad (2.11)$$



Rysunek 1: Eksperyment z dwoma szczelinami.

W mechanice kwantowej omówione powyżej własności prawdopodobieństwa przenoszą się na amplitudy, co pociąga za sobą pojawianie się nowych zjawisk, które nie mają analogii w fizyce klasycznej. Przypuśćmy, że pewne zjawisko może zajść na dwa rozłączne sposoby s_1 lub s_2 , z których każdy opisany jest amplitudą prawdopodobieństwa $A(s_2)$ oraz $A(s_1)$. Dla ustalenia uwagi, rozważmy działło elektronowe, z którego wystrzelujemy elektrony w kierunku ekranu E . Przed ekranem w odległości L znajduje się przesłona z dwoma szczelinami $S_{1,2}$. Rozumując klasycznie, elektron wystrzelony z działła może dostać się do ekranu albo przez szczelinę S_1 (trajektoria s_1), albo przez szczelinę S_2 (trajektoria s_2). Kwantowo amplituda prawdopodobieństwa, że elektron dotarł do ekranu którąkolwiek drogą wynosi:

$$A(s_1 \text{ lub } s_2) = A(s_1) + A(s_2). \quad (2.12)$$

Ta zasada zastępuje zasadę dodawania prawdopodobieństw (2.3). Jest ona jednak sprzeczna z równaniem (2.3) gdyż prawdopodobieństwo dotarcia elektronu do ekranu nie jest sumą prawdopodobieństw przejścia przez szczelinę S_1 i S_2 . Rzeczywiście:

$$\begin{aligned} p(s_1 \text{ lub } s_2) &= |A(s_1 \text{ lub } s_2)|^2 = |A(s_1) + A(s_2)|^2 \\ &= |A(s_1)|^2 + |A(s_2)|^2 + (A^*(s_1)A(s_2) + A(s_1)A^*(s_2)) \\ &= p(s_1) + p(s_2) + 2 \operatorname{Re}(A^*(s_1)A(s_2)). \end{aligned} \quad (2.13)$$

Ostatni człon $2 \operatorname{Re}(A^*(s_1)A(s_2))$ odróżnia wynik klasyczny od kwantowego. Zauważmy, że zależy on od względnej fazy amplitud $A(s_1)$ i $A(s_2)$, podczas gdy w $p(s_1)$ i $p(s_2)$ fazy nie występują. Rzeczywiście, jeśli

$$A = |A| e^{i\varphi}$$

mamy

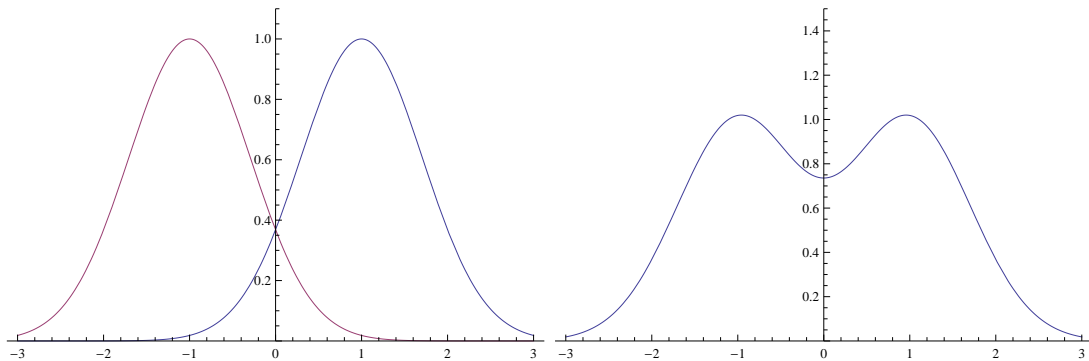
$$\begin{aligned} (A^*(s_1)A(s_2) + A(s_1)A^*(s_2)) &= |A(s_1)| |A(s_2)| [e^{i(\varphi(s_2) - \varphi(s_1))} + e^{-i(\varphi(s_2) - \varphi(s_1))}] \\ &= 2 |A(s_1)| |A(s_2)| \cos(\varphi(s_2) - \varphi(s_1)). \end{aligned} \quad (2.14)$$

Człon ten jest odpowiedzialny za kwantową interferencję. Zauważmy, że człon interferencyjny pojawia się tylko wtedy, kiedy nie wiemy, przez którą szczelinę przeleciał elektron.

Spróbujmy zastanowić się, jak wygląda rozkład prawdopodobieństwa znalezienia elektronu w zmiennej x wzdłuż ekranu E . Oznaczając odpowiednie prawdopodobieństwa indeksami 1 lub 2 mamy

$$\begin{aligned} p(x) &= p_1(x) + p_2(x) + I(x), \\ I(x) &= 2\sqrt{p_1(x)p_2(x)} \cos(\varphi_1(x) - \varphi_2(x)). \end{aligned} \quad (2.15)$$

Choć nie dysponujemy jeszcze formalizmem, żeby wyliczyć $p(x)$, to można przyjąć, że prawdopodobieństwa $p_{1,2}(x)$ są funkcjami „wypikowanymi” wokół klasycznego obrazu szczelin na ekranie E , tak jak to przedstawia rysunek 2. Suma prawdopodobieństw jest więc funkcją o 2 maksimach.

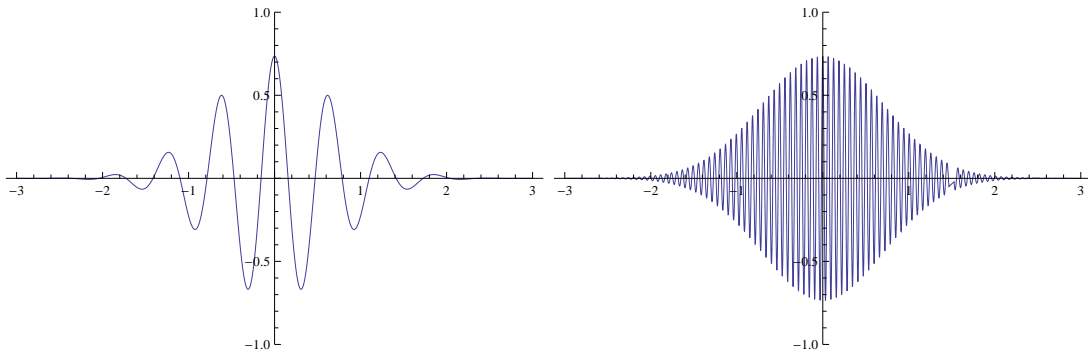


Rysunek 2: Prawdopodobieństwo jako suma dwóch funkcji Gaussa .

Z kolei, aby wyliczyć człon interferencyjny, musimy założyć coś o zależności faz $\varphi_{1,2}$ od x . Jak się przekonamy, zależność ta z dobrym przybliżeniem jest liniowa. Zatem

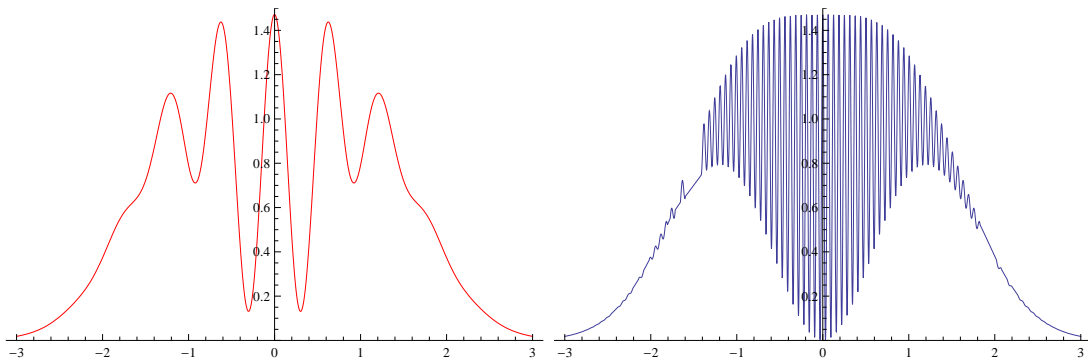
$$I(x) = 2\sqrt{p_1(x)p_2(x)} \cos(\alpha x), \quad (2.16)$$

gdzie stała α zależy od energii i masy wystrzelianych cząstek, odległości ekranu od szczelin itd. Okazuje się, że dla rozsądnych wartości tych wszystkich parametrów typowa odległość między maksimami oscylującej funkcji $I(x)$ dla działka elektronowego jest rzędu ułamków milimetra, zaś dla zwykłej strzelby na „klasyczne” naboje, odległość ta jest niewyobrażalnie mała, rzędu 10^{-29} m! Sytuacja ta jest przedstawiona na rysunku 3.



Rysunek 3: Człon interferencyjny: z lewej przypadek kwantowy z prawej klasyczny .

Dodając człon interferencyjny do sumy prawdopodobieństw $p_1(x) + p_2(x)$ otrzymujemy rozkład pokazany na rysunku 4. A zatem człon interferencyjny jest wyraźnie



Rysunek 4: Prawdopodobieństwo z członem interferencyjnym: z lewej przypadek kwantowy z prawej klasyczny .

widoczny zarówno dla przypadku z elektronami jak i ze zwykłymi kulami. Jednakże w przypadku klasycznym oscylacje są tak gęste, że nie jesteśmy w stanie ich zaobserwować, gdyż rozdzielczość aparatury pomiarowej jest rzędu wielkości większa niż

okres oscylacji. W rzeczywistości mierzony rozkład jest średnią

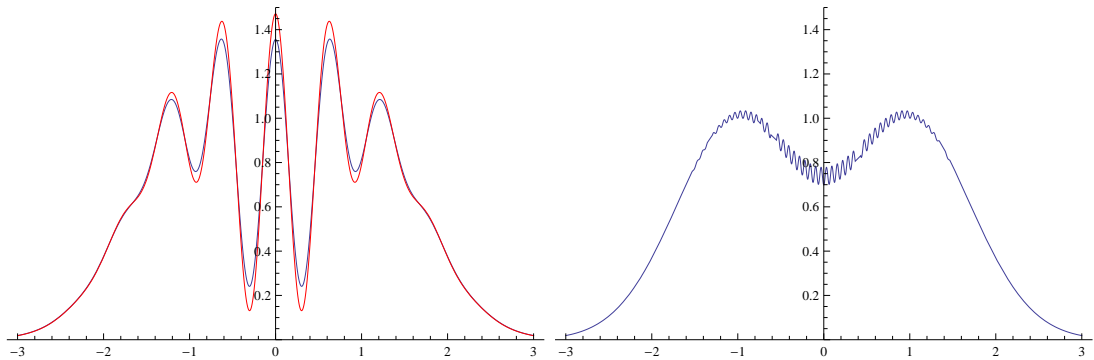
$$p_{\text{exp}}(x) = \frac{1}{2\delta} \int_{x-\delta}^{x+\delta} dx' p(x') \quad (2.17)$$

gdzie δ jest rozdzielczością aparaturową. Wynik takiego uśrednienia jest pokazany na rysunku 5. Widzimy, że dla przypadku kwantowego takie uśrednienie praktycznie nie zmienia rozkładu prawdopodobieństwa $p(x)$ (krzywa czerwona) i mamy

$$p_{\text{exp}}(x) \simeq p(x). \quad (2.18)$$

Natomiast w przypadku klasycznym uśrednianie praktycznie całkowicie wyzerowuje człon interferencyjny, tak że

$$p_{\text{exp}}(x) \simeq p_1(x) + p_2(x). \quad (2.19)$$



Rysunek 5: Uśrednione prawdopodobieństwo z członem interferencyjnym: z lewej przypadku kwantowy (czerwona linia bez uśrednienia), z prawej klasyczny.

2.4 Stany kwantowe

Z każdym pomiarem wykonanym nad układem fizycznym stowarzyszone jest spektrum: możliwe wyniki dla danej wielkości, np. energia, pęd, położenie, moment pędu, itp. Możliwe wyniki mogą przyjmować wartości dyskretne lub ciągle. Np. rzut spinu na oś z może być $\pm 1/2$, współrzędna x zmienia się w przedziale $(-\infty, +\infty)$. Z każdym możliwym wynikiem pomiaru stowarzyszona jest amplituda prawdopodobieństwa. Zatem w mechanice kwantowej system fizyczny jest scharakteryzowany przez zbiór amplitud, układ klasyczny natomiast scharakteryzowany jest przez wartości wielkości fizycznych.

Aby opisać stan kwantowy musimy, po pierwsze wybrać zespół obserwabli fizycznych, które w sposób *kompletny* charakteryzują badany układ, a po drugie musimy znaleźć *spektrum* dla tych wielkości fizycznych. W mechanice kwantowej nie jest oczywiste, jak zrealizować pierwszy postulat, gdyż nie wszystkie wielkości fizyczne, które

można klasycznie zmierzyć, da się użyć do scharakteryzowania układu kwantowego. Klasycznie np. możemy jednocześnie zmierzyć położenie cząstki i jej pęd, kwantowo natomiast – jak się wkrótce przekonamy – pęd i położenie nie dają się jednocześnie wyznaczyć.

Założmy, że udało nam się spełnić powyższe postulaty. Wówczas stan układu, który za Dirakiem oznaczmy wielkością zwaną ketem

$$|\psi\rangle$$

należy rozumieć, jako zbiór wszystkich amplitud a_i , które określają nam prawdopodobieństwo otrzymania wyniku A_i przy pomiarze wielkości A na stanie $|\psi\rangle$. Jeżeli układem fizycznym jest np. cząstka w studni potencjału to wielkościami $A_i = E_i$ mogą być dozwolone energie układu, albo położenie cząstki. Wówczas amplitudy $a_i = a(E_i)$ określają prawdopodobieństwo, że energia cząstki wynosi E_i , albo $a_x = a(x)$ są amplitudami prawdopodobieństwa, że cząstka jest w punkcie x . Ten przykład pokazuje, że spektra mogą być dyskretne, lub ciągłe. Możemy też opisać układ amplitudami związanymi z wartościami pędu, momentu pędu, spinu itd. Ket $|\psi\rangle$ zawiera w sobie wszystkie informacje o stanie kwantowym, niezależnie od tego jaki konkretny zbiór amplitud wybierzemy do jego opisu. Jeśli już zdecydujemy się na jakiś konkretny wybór, wówczas możemy myśleć o stanie kwantowym jako o wektorze (skończonym, „nieskończonym”, bądź „ciągłym”):

$$|\psi\rangle \rightarrow \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}. \quad (2.20)$$

Kety spełniają zasadę superpozycji:

$$|\psi_3\rangle = |\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle$$

jeśli stany $|\psi_1\rangle$ i $|\psi_2\rangle$ mogą być osiągnięte na dwa różne (rozłączne) sposoby, a my tego nie obserwujemy. Kety można mnożyć przez liczby zespolone

$$|\psi'\rangle = \alpha |\psi\rangle,$$

co oznacza, że wszystkie amplitudy mnożymy przez α . Zatem kety tworzą *przestrzeń wektorową* V . W każdej przestrzeni wektorowej można wybrać *bazę*. Baza jest to zbiór liniowo niezależnych wektorów $|i\rangle$, takich że każdy wektor można zapisać jako

$$|\psi\rangle = \sum_i a_i |i\rangle. \quad (2.21)$$

W reprezentacji (2.20) wektory bazowe wygodnie wybrać jako wektory kolumnowe o 1 na i -tym miejscu:

$$|i\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \end{bmatrix} \leftarrow i\text{-ta pozycja} \quad (2.22)$$

W teorii przestrzeni wektorowych istnieje pojęcie przestrzeni sprzężonej V' . W zwykłej, euklidesowej 3-wym. przestrzeni V' jest nierozróżnialna od V . Przestrzeń V' wygodnie sobie wyobrazić jako przestrzeń wektorów sprzężonych i transponowanych (bra):

$$\langle \psi | = [a_1^* \quad a_2^* \quad \dots \quad a_n^*]. \quad (2.23)$$

Przestrzeń sprzężoną V' wygodnie jest interpretować, jako przestrzeń zespolonych funkcji liniowych na przestrzeni V . Niech bra $\langle f |$ będzie taką funkcją. Wówczas przez $\langle f | \psi \rangle$ oznaczamy wynik działania funkcji f na ket $|\psi\rangle$. Liczbę zespoloną $\langle f | \psi \rangle$ (amplitudę prawdopodobieństwa!) w „normalny” sposób zapisalibyśmy jako $f(\psi)$, a w zasadzie (konwencja) $f^*(\psi)$. Ponieważ funkcje $\langle f |$ są liniowe:

$$\langle f | \{ \alpha |\psi\rangle + \beta |\phi\rangle \} = \alpha \langle f | \psi \rangle + \beta \langle f | \phi \rangle. \quad (2.24)$$

Podobnie

$$\langle h | = \langle f | + \langle g | \quad (2.25)$$

oznacza

$$\langle h | \psi \rangle = \langle f | \psi \rangle + \langle g | \psi \rangle. \quad (2.26)$$

I analogicznie

$$\langle g | = \alpha \langle f | \implies \langle g | \psi \rangle = \alpha \langle f | \psi \rangle. \quad (2.27)$$

Ponieważ zdefiniowaliśmy dodawanie i mnożenie funkcji $\langle f |$ przez stałą zespoloną, tym samym zdefiniowaliśmy dołączoną przestrzeń wektorową V' . Teraz pokażemy, że ma ona wymiar taki sam jak przestrzeń V , co uzasadnia zapis (2.23). W przestrzeni V mamy n wymiarową bazę $\{|i\rangle\}$. Funkcja $\langle f |$ jest w pełni zdefiniowana przez podanie n liczb $\langle f | i \rangle$. Rzeczywiście

$$\langle f | \psi \rangle = \sum_{i=1}^n a_i \langle f | i \rangle. \quad (2.28)$$

Zdefiniujmy n funkcji $\langle j |$ poprzez zbiór równań:

$$\langle j | i \rangle = \delta_{ji}. \quad (2.29)$$

Korzystając z (2.29) i z (2.21) możemy wyliczyć działanie funkcji $\langle j |$ na dowolny ket $|\psi\rangle$. Rozważmy teraz kombinację liniową

$$\langle g | = \sum_{j=1}^n \langle f | j \rangle \langle j |. \quad (2.30)$$

ponieważ dla każdego $|i\rangle$

$$\langle g | i \rangle = \langle f | j \rangle \quad (2.31)$$

a co za tym idzie

$$\langle g | = \langle f |. \quad (2.32)$$

Przestrzenie V' i V mają zatem ten sam wymiar.

Używając (2.29) możemy powiedzieć, że $\langle i|$ jest sprzężone do $|i\rangle$. Tę definicję sprzężenia możemy rozciągnąć na dowolny wektor $|\psi\rangle$:

$$|\psi\rangle = \sum_i a_i |i\rangle \quad \text{wtedy} \quad \langle\psi| = \sum_i a_i^* \langle i|. \quad (2.33)$$

Obliczmy działanie funkcji $\langle\psi|$ na ket $|\psi\rangle$

$$\langle\psi| \psi\rangle = \sum_i |a_i|^2 \geq 0. \quad (2.34)$$

Zatem dla każdego $|\psi\rangle$ liczba $\langle\psi| \psi\rangle$ jest nieujemna i znika tylko wtedy gdy wszystkie $a_i = 0$, co oznaczamy $|\psi\rangle = 0$. Liczbę $\langle\psi| \psi\rangle$ nazywamy długością (normą) wektora $|\psi\rangle$. W zasadzie norma powinna być równa 1 ($|a_i|^2$ to prawdopodobieństwa), ale często wyliczamy amplitudy, które nie są poprawnie znormalizowane. Równanie (2.34) pozwala na unormowanie dowolnego wektora niezerowego:

$$|\psi'\rangle = \sum_i \frac{a_i}{\sqrt{\langle\psi| \psi\rangle}} |i\rangle \quad \implies \quad \langle\psi'| \psi'\rangle = 1. \quad (2.35)$$

Uogólniając relację (2.34) na dwa różne wektory

$$|\psi\rangle = \sum_i a_i |i\rangle, \quad |\phi\rangle = \sum_i b_i |i\rangle \quad (2.36)$$

mamy

$$\langle\phi| \psi\rangle = \sum_i b_i^* a_i, \quad \langle\psi| \phi\rangle = \sum_i a_i^* b_i, \quad (2.37)$$

czyli

$$\langle\psi| \phi\rangle = \langle\phi| \psi\rangle^*. \quad (2.38)$$

Równanie (2.37) pokazuje, że obliczenie liczby zespolonej $\langle\psi| \phi\rangle$ jest w ścisłej analogii z iloczynem skalarnym wektorów. Równanie (2.38) pozwala także na zapis funkcji:

$$\begin{aligned} \langle f| \psi\rangle &= f^*(\psi) \\ \langle\psi| f\rangle &= f(\psi) \quad \text{zamiast} \quad \psi^*(f). \end{aligned} \quad (2.39)$$

Wybór bazy podyktowany jest fizyką. Np. stany o określonej energii E_i . Jeśli układ jest w stanie $|i\rangle$, i dokonamy pomiaru energii, to z prawdopodobieństwem 1 (czyli na pewno) otrzymamy wynik E_i . Dlatego często stosujemy notację

$$|i\rangle \rightarrow |E_i\rangle. \quad (2.40)$$

Każda sensowna teoria musi dawać wyniki powtarzalne. Jeżeli powtórzymy drugi raz pomiar energii, musimy dostać znowu wynik E_i . Pomiar energii układu, który jest w stanie $|E_i\rangle$ nie zmienia tego stanu.

A co się dzieje, jeżeli układ jest w stanie

$$|\psi\rangle = \sum_i a_i |E_i\rangle. \quad (2.41)$$

Wówczas, w wyniku pomiaru energii możemy otrzymać każdą z dozwolonych energii E_i z prawdopodobieństwem $|a_i|^2$. Jeśli już jednak otrzymamy konkretną wartość E_i , to przy następnym pomiarze dostaniemy *na pewno* znowu E_i . Czyli w wyniku pomiaru stan $|\psi\rangle$ zmienia się (kolapsuje) do stanu $|E_i\rangle$:

$$|\psi\rangle \xrightarrow[\text{pomiar, wynik: } E_i]{} |E_i\rangle. \quad (2.42)$$

Jest to jeden z najtrudniejszych problemów interpretacyjnych w mechanice kwantowej, gdyż kolaps następuje w całej przestrzeni, a zatem w jej fragmentach niepowiązanych przyczynowo.

Innym przykładem bazy są stany $|x\rangle$. Jeżeli układ znajduje się w stanie $|x\rangle$ to w wyniku pomiaru położenia dostaniemy x z prawdopodobieństwem 1. Wówczas

$$|\psi\rangle = \sum_i a_i |i\rangle \implies |\psi\rangle = \int dx a_x |x\rangle = \int dx \psi(x) |x\rangle. \quad (2.43)$$

W ostatnim kroku amplitudy prawdopodobieństwa oznaczyliśmy

$$a_x = \psi(x). \quad (2.44)$$

Warunek normalizacyjny

$$\langle j | i \rangle = \delta_{ji} \implies \langle x' | x \rangle = \delta(x' - x) = \delta(x - x'). \quad (2.45)$$

Funkcja $\delta(x' - x)$ zwana funkcją delta Diraca jest tak naprawdę dystrybucją, czyli obiektem, który ma tylko sens pod całką:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx' \delta(x' - x) g(x') = g(x) \quad (2.46)$$

gdzie g jest zwykłą funkcją.

Korzystając z (2.45) możemy obliczyć

$$\langle x | \psi \rangle = \int dx' \psi(x') \langle x | x' \rangle = \int dx' \psi(x') \delta(x - x') = \psi(x). \quad (2.47)$$

Amlituda $\psi(x) = \langle x | \psi \rangle$ ma szczególne znaczenie w mechnice kwantowej i nazywa się ją *funkcją falową*. Jeśli układem fizycznym jest cząstka poruszająca się w potencjale, $|\psi(x)|^2$ jest prawdopodobieństwem znalezienia cząstki w punkcie x . Zatem

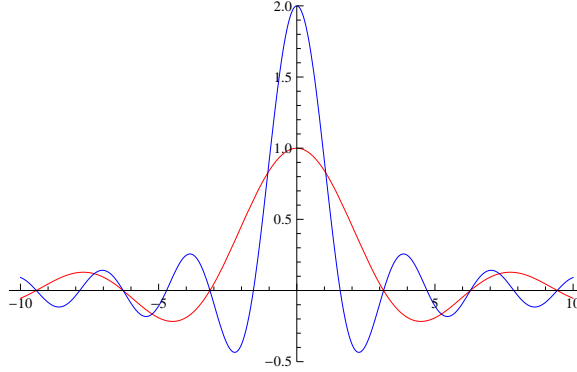
$$\int dx |\psi(x)|^2 = 1. \quad (2.48)$$

Funkcje falowe muszą być całkowalne w kwadracie.

2.5 Dodatek: funkcja δ Diraka

Dystrybucję $\delta(x)$ można rozumieć jako granicę pewnych ciągów funkcyjnych. Dobrym przykładem jest ciąg

$$\delta(\kappa) = \frac{1}{\pi} \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{\sin R\kappa}{\kappa}. \quad (2.49)$$



Rysunek 6: Wykres funkcji $\sin kR/k$ dla małego R (linia czerwona) i dla dużego R (linia niebieska).

Warto narysować wykres funkcji $\delta_R(\kappa) = 2 \sin R\kappa / \kappa$ dla różnych R . Widzimy, że w miarę jak R dąży do nieskończoności wartość funkcji $\delta_R(\kappa)$ w zerze dąży do ∞ , a podstawa $\Delta\kappa = 2\pi/R$ dąży do zera. Łatwo się przekonać, że całka z $\delta_R(\kappa)$ pozostaje jednak stała

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\kappa \delta_R(\kappa) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\kappa R \frac{\sin R\kappa}{R\kappa}.$$

Wprowadzając nową zmienną $\xi = R\kappa$ otrzymujemy, że

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\kappa \delta_R(\kappa) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \frac{\sin \xi}{\xi} = 1.$$

Całka ta nie zależy od R . Aby wykazać, że jest równa 1 rozważmy całkę z funkcji analitycznej $f(z)$ podzielonej przez z po konturze C , który składa się z dużego łuku o promieniu R , odcinka $(-R, -r)$, małego łuku o promieniu r i odcinka (r, R) w granicy $r \rightarrow 0$ i $R \rightarrow \infty$. Wewnątrz konturu C nie ma osobliwości więc

$$\int_{C_R} dz \frac{f(z)}{z} + \int_{-R}^{-r} dz \frac{f(z)}{z} - \int_{C_r} dz \frac{f(z)}{z} + \int_r^R dz \frac{f(z)}{z} = 0.$$

Znak przy C_r jest ujemny ze względu na kierunek obiegu. Załóżmy, że $f(z)$ znika w nieskończoności, wtedy całka po C_R znika. Z kolei całka po C_r wynosi:

$$\lim_{r \rightarrow 0} \int_0^\pi d\theta i r e^{i\theta} \frac{f(r e^{i\theta})}{r e^{i\theta}} = i \pi f(0).$$

Definiując całkę od $-\infty$ do $+\infty$ w sensie wartości głównej mamy:

$$P \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{f(z)}{z} = i \pi f(0). \quad (2.50)$$

Podstawiając za $f(z) = e^{iz}$ i porównując części urojone (2.50) otrzymujemy

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{\sin x}{x} = \pi \cos 0 = \pi,$$

gdzie opuściliśmy symbol P , ponieważ $\sin x/x$ nie ma osobliwości. Stąd całka z δ Diraka

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta(x) = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta_R(x) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \frac{\sin \xi}{\xi} = 1. \quad (2.51)$$

Jest to podstawowa cecha funkcji δ Diraka: całka po osi rzeczywistej wynosi 1. Funkcja $\delta(x)$ Diraka scałkowana z dowolną *funkcją próbną* $g(x)$ daje wartość $g(0)$. Rzeczywiście, dla reprezentacji (2.49)

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta(x) g(x) &= \frac{1}{\pi} \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{\sin Rx}{x} g(x) \\ &= \frac{1}{\pi} \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \frac{\sin \xi}{\xi} g\left(\frac{\xi}{R}\right) \\ &= g(0) \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \frac{\sin \xi}{\xi} \\ &= g(0). \end{aligned} \quad (2.52)$$

Powyższy dowód nie jest w pełni ścisły, ponieważ dość beztrzesko zamieniliśmy kolejność przejścia granicznego z $R \rightarrow \infty$ i całkę po dx . Wynik ten jednak można do łatwo zrozumieć intuicyjnie. W miarę jak R rośnie, wkład do całki pochodzi tylko z wąskiego obszaru wokół $x = 0$, gdzie funkcja $g(x)$ w porównaniu z $\delta_R(x)$ jest prawie stała: $g(x) \approx g(0)$ i można ją wyciągnąć przed całkę, która na mocy (2.51) równa jest 1.

Zauważmy, że

$$\frac{1}{\pi} \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{\sin R\kappa}{\kappa} = \frac{1}{2\pi} \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{-R}^{+R} dx e^{i\kappa x}. \quad (2.53)$$

Czyli, przy okazji udowodniliśmy, że

$$\delta(\kappa) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{i\kappa x}. \quad (2.54)$$