

Andrzej Raczyński

Mechanika kwantowa cz. 1

1 Postulaty mechaniki kwantowej

Podstawy mechaniki kwantowej można ująć w kilku (4+1) ogólnych postulatach. Będą one kolejno wprowadzane i obszernie omawiane.

1.1 Stany

Postulat I

Z układem kwantowym związana jest ośrodkowa przestrzeń Hilberta. Jej elementy (wektory) reprezentują stany czyste układu (ogólniejsze pojęcie stanu tzw. mieszanego omówione będzie później).

To, w jaki sposób skonstruować przestrzeń Hilberta dla konkretnego układu, będzie dyskutowane niżej.

Przestrzeń Hilberta \mathcal{H} jest zbiorem elementów ψ, ϕ, χ, \dots nazywanych wektorami, o następujących własnościach

1. \mathcal{H} jest przestrzenią liniową (wektorową) nad ciałem liczb zespolonych \mathcal{C} , tzn.

1.1 \mathcal{H} jest grupą przemienną ze względu na dodawanie wektorów, tzn. dla dowolnych ψ, ϕ, χ, \dots

$$\begin{aligned}\psi + \phi &= \phi + \psi, \\ (\psi + \phi) + \chi &= \psi + (\phi + \chi), \\ \exists 0 \quad \psi + 0 &= \psi, \\ \forall \psi \quad \exists -\psi, \quad \psi + (-\psi) &= 0.\end{aligned}$$

1.2. istnieje operacja mnożenia wektora przez liczbę zespoloną, tzn. dla dowolnych zespolonych α, β, \dots

$$\begin{aligned}(\alpha + \beta)\psi &= \alpha\psi + \beta\psi, \\ \alpha(\psi + \phi) &= \alpha\psi + \alpha\phi,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\alpha(\beta\psi) &= (\alpha\beta)\psi, \\ 1\psi &= \psi.\end{aligned}$$

2. W \mathcal{H} zdefiniowano iloczyn skalarny o własnościach

$$\begin{aligned}\langle\psi|\phi\rangle &\in \mathcal{C}, \\ \langle\psi|\phi\rangle &= \langle\phi|\psi\rangle^*, \\ \langle\psi|\alpha\phi\rangle &= \alpha\langle\psi|\phi\rangle, \\ \langle\psi|(\phi+\chi)\rangle &= \langle\psi|\phi\rangle + \langle\psi|\chi\rangle, \\ \langle\psi|\psi\rangle &\geq 0, \quad \langle\psi|\psi\rangle = 0 \iff \psi = 0.\end{aligned}$$

3. Iloczyn skalarny indukuje normę - długość wektora

$$\|\psi\| = \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}.$$

4. Norma definiuje zbieżność ciągu $\{\psi_n\}$

$$\psi_n \rightarrow \psi \iff \forall \epsilon > 0 \exists N \forall n > N \|\psi_n - \psi\| < \epsilon.$$

5. Przestrzeń jest zupełna, tzn. dla ciągu Cauchy'ego, czyli takiego, że dostatecznie dalekie wyrazy ciągu różnią się od siebie dowolnie mało, czyli

$$\forall \epsilon > 0 \exists N \forall n, m > N \|\psi_n - \psi_m\| < \epsilon,$$

istnieje granica ciągu należąca do \mathcal{H} .

6. Osrodkowość oznacza, że istnieje przeliczalny zbiór gęsty, czyli taki, że po dołączeniu granic ciągów otrzymujemy całą przestrzeń; znaczy to, że istnieje przeliczalna baza (por. niżej).

Bazą jest układ $\{\psi_n\}$ liniowo niezależnych wektorów, taki że każdy wektor ψ można napisać jako superpozycję

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n, \tag{1}$$

gdzie c_n są współczynnikami zespolonymi. Na ogół zakładać będziemy, że baza jest ortonormalna, tzn. $\langle\psi_n|\psi_s\rangle = \delta_{ns}$ (delta Kroneckera). Jeśli baza $\{\psi_n\}$ nie jest ortonormalna, można ją zortonormalizować. Procedura ta (ortogonalizacja Grama-Schmidta) polega na tym, że pierwszy wektor nowej bazy wybieramy jako $\tilde{\psi}_1 = \psi_1$, a następnie bierzemy jako $\tilde{\psi}_n = \psi_n - \sum_{k=1}^{n-1} a_k \tilde{\psi}_k$;

współczynniki a_k należy dobrać tak, aby nowy wektor $\tilde{\psi}_n$ był ortogonalny do $\tilde{\psi}_k$, dla $k < n$. Na koniec wektor należy znormalizować, tzn. zamiast $\tilde{\psi}_j$ wziąć $\frac{\tilde{\psi}_j}{\|\tilde{\psi}_j\|}$.

Rozkład w bazie ortonormalnej ma postać

$$\psi = \sum c_n \psi_n, \quad (2)$$

gdzie współczynniki c_j można obliczyć rzutując wektor rozkładany ψ na wektor bazowy ψ_j

$$\langle \psi_j | \psi \rangle = \langle \psi_j | \sum_n c_n \psi_n \rangle = \sum_n c_n \langle \psi_j | \psi_n \rangle = \sum_n c_n \delta_{nj} = c_j. \quad (3)$$

Można więc napisać

$$|\psi\rangle = \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n | \psi \rangle, \quad (4)$$

co pozwala utożsamić

$$\sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n | = I \quad (5)$$

(I jest jedynką czyli identycznością).

Często rozszerza się przestrzeń Hilberta, dopuszczając bazy nieprzeliczalne i nienormowalne w sensie Kroneckera. Baza taka $\{\psi_\alpha\}$ jest numerowana parametrem rzeczywistym α , a wektory bazowe są ortonormalne w sensie Diraca

$$\langle \psi_\alpha | \psi_\beta \rangle = \delta(\alpha - \beta). \quad (6)$$

Pojęcie i własności delta Diraca omówiono w części nr 0.

Rozkład w bazie ciągłej ma postać

$$\psi = \int d\alpha c_\alpha \psi_\alpha, \quad (7)$$

gdzie współczynniki c_α otrzymamy podobnie jak w przypadku dyskretnym

$$\langle \psi_\beta | \psi \rangle = \langle \psi_\beta | \int d\alpha c_\alpha \psi_\alpha \rangle = \int d\alpha c_\alpha \langle \psi_\beta | \psi_\alpha \rangle = \int d\alpha c_\alpha \delta(\alpha - \beta) = c_\beta. \quad (8)$$

Można więc napisać

$$|\psi\rangle = \int d\alpha |\alpha\rangle \langle \alpha | \psi \rangle, \quad (9)$$

co pozwala utożsamiać

$$\int d\alpha |\alpha\rangle \langle \alpha| = I \quad (10)$$

Przykładem rozwinięcia w bazie ciągłej jest całka Fouriera (por. cz. 0). Niżej liczne związki będą napisane dla baz przeliczalnych. Odpowiednie relacje dla baz ciągłych otrzymać można zastępując sumy przez całki, a delty Kroneckera przez delty Diraca.

Wektory różnię się o stały czynnik opisują ten sam stan układu fizycznego.

Z postulatu I wynika zasada superpozycji: jeśli układ kwantowy może być w stanach reprezentowanych wektorami ψ_1 i ψ_2 , to może być w stanie reprezentowanym przez wektor $c_1\psi_1 + c_2\psi_2$. Od tej zasady istnieją wyjątki zwane regułami superwyboru.

1.2 Wielkości fizyczne

Postulat II

Wielkości fizyczne są reprezentowane przez operatory hermitowskie posiadające bazowe (czyli zupełne) układy wektorów własnych (pojęcia te będą wyjaśnione niżej).

Operatory A, B, \dots są transformacjami przekształcającymi wektory z \mathcal{H} w inne wektory

$$A\psi = \phi, \quad (11)$$

dla każdego ψ należącego do zbioru $D(\mathcal{H})$ zwanego dziedziną A , niekoniecznie tożsamą z \mathcal{H} .

Rozważane operatory są liniowe, tzn.

$$\forall \psi, \phi \in D(A) \quad \forall \alpha, \beta \in \mathcal{C} \quad A(\alpha\psi + \beta\phi) = \alpha A\psi + \beta A\phi. \quad (12)$$

Operatory można dodawać, mnożyć przez liczbę zespoloną i mnożyć (składać)

$$\begin{aligned} (A + B)\psi &= A\psi + B\psi, \\ (\alpha A)\psi &= \alpha A\psi, \\ (AB)\psi &= A(B\psi). \end{aligned} \quad (13)$$

Można zdefiniować funkcję operatora $f(A)$. Jeśli dla jednej zmiennej x funkcja f daje się rozwinąć na szereg $f(x) = \sum c_n x^n$, to funkcja operatora $f(A) = \sum c_n A^n$, np. $\exp(A) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} A^n$.

Dodawanie operatorów jest przemienne i łączne; ich mnożenie jest łączne, ale na ogół nie jest przemienne. Definiuje się komutator jako

$$[A, B] = AB - BA. \quad (14)$$

Jeśli $[A, B] = 0$, to mówi się, że te operatory komutują. Podstawowe własności komutatorów to

$$\begin{aligned} [B, A] &= -[A, B], \\ [A, B + C] &= [A, B] + [A, C], \\ [A, BC] &= B[A, C] + [A, B]C. \end{aligned} \quad (15)$$

Operatorem sprzężonym do A jest A^\dagger , taki że w iloczynie skalarnym zamiast działać operatorem A na prawy wektor można działać operatorem A^\dagger na lewy wektor

$$\langle \psi | (A|\phi\rangle) = (\langle \psi | A^\dagger) |\phi\rangle. \quad (16)$$

Dziedziny tych operatorów na ogół nie pokrywają się i zachodzi $D(A) \subset D(A^\dagger)$.

Sprzężenie operatora ma własności

$$\begin{aligned} (A + B)^\dagger &= A^\dagger + B^\dagger, \\ (\alpha A)^\dagger &= \alpha^* A^\dagger, \\ (AB)^\dagger &= B^\dagger A^\dagger. \end{aligned} \quad (17)$$

Operatory hermitowskie to takie, że $A\psi = A^\dagger\psi$ dla $\psi \in D(A)$. Dla operatorów samosprzężonych dodatkowo dziedziny są identyczne $D(A) = D(A^\dagger)$. W skończonej wymiarowej przestrzeni Hilberta nie ma różnicy między tymi klasami operatorów.

Definiuje się normę operatora jako

$$\|A\| = \sup_{\|\psi\|=1} \|A\psi\|. \quad (18)$$

Operatory o skończonej normie nazywamy ograniczonymi, w przeciwnym wypadku są nieograniczone.

Wektorem własnym operatora nazywamy taki wektor, że

$$A\psi = \alpha\psi, \quad (19)$$

gdzie α jest liczbą nazywaną wartością własną, a równanie - równaniem własnym. Wektory własne są określone z dokładnością do stałego czynnika; wektory własne różniące się tylko o stały czynnik utożsamiamy.

Jeśli wektory własne tworzą zbiór przeliczalny, można je ponumerować i napisać

$$A\psi_n = \alpha_n\psi_n. \quad (20)$$

Jeśli tej samej wartości własnej odpowiadają różne wektory własne, nazywamy ją zdegenerowaną. Warto wtedy zmienić sposób indeksowania i napisać

$$A\psi_{nj} = \alpha_n\psi_{nj}, \quad (21)$$

gdzie pierwszy indeks n numeruje wartości własne, a drugi - $j = 1, 2, \dots, k_n$ -wektory własne należące do tej samej wartości własnej; liczbę k_n nazywa się krotnością degeneracji. Wektory własne należące do tej samej wartości własnej tworzą podprzestrzeń przestrzeni Hilberta.

Dla operatora samosprzężonego wartości własne są rzeczywiste, a wektory własne należące do różnych wartości własnych są ortogonalne. Dla dowodu rozpatrzmy liczbę $\langle \psi_n | A | \psi_s \rangle$. Nie postawiono tu nawiasu, ponieważ dla operatora samosprzężonego wynik nie zależy od tego, na który wektor działa. Działając na prawy wektor otrzymamy

$$\langle \psi_n | (A | \psi_s \rangle) = \langle \psi_n | \alpha_s | \psi_s \rangle = \alpha_s \langle \psi_n | \psi_s \rangle. \quad (22)$$

Działając na lewy wektor otrzymamy

$$(\langle \psi_n | (A) | \psi_s \rangle) = \langle (\psi_n | \alpha_n) | \psi_s \rangle = \alpha_n^* \langle \psi_n | \psi_s \rangle. \quad (23)$$

Łącząc powyższe wyniki można napisać

$$(\alpha_s - \alpha_n^*) \langle \psi_n | \psi_s \rangle = 0. \quad (24)$$

Dla $s = n$ otrzymujemy $\alpha_n = \alpha_n^*$, czyli wartość własna jest rzeczywista. Dla $\alpha_n \neq \alpha_s$ musi zerować się iloczyn skalarny $\langle \psi_n | \psi_s \rangle = 0$, a więc wektory własne są ortogonalne.

Wektory własne do tej samej wartości własnej nie muszą być ortogonalne, ale można je wybrać tak, aby były ortogonalne (metodą ortogonalizacji Grama-Schmidta). O wektorach własnych operatora A o dyskretnym widmie będziemy zakładać ortonormalność, tzn $\langle \psi_n | \psi_s \rangle = \delta_{ns}$.

Rozszerzając przestrzeń Hilberta tak, aby zawierała wektory normowane do delty Diraca, można nieformalnie uogólnić pojęcie wektorów własnych ψ_α i wartości własnych α pisząc

$$A\psi_\alpha = \alpha\psi_\alpha, \quad \alpha \in \mathcal{R}. \quad (25)$$

Zbiór wartości własnych nazywamy widmem dyskretnym, a zbiór uogólnionych wartości własnych - widmem ciągłym (nie jest to ścisła definicja).

Operator hermitowski o znanych ortonormalnych bazowych wektorach własnych ψ_n i rzeczywistych wartościach własnych α_n można zapisać jako

$$A = AI = A \sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| = \sum_n \alpha_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|. \quad (26)$$

Jest to tak zwany rozkład spektralny operatora. Jego odpowiednikiem dla widma ciągłego jest

$$A = \int d\alpha \alpha |\psi_\alpha\rangle\langle\psi_\alpha|. \quad (27)$$

Operatory reprezentujące położenie w nieograniczonej przestrzeni $\mathbf{r} = (x, y, z)$ i pęd $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$ są hermitowskie i nieograniczone. Postuluje się regułę komutacji

$$[x, p_x] = [y, p_y] = [z, p_z] = i\hbar. \quad (28)$$

W ten sposób wprowadzona zostaje nowa stała fizyczna charakteryzująca układy kwantowe. Operatory położenia i pędu odnoszące się do różnych kierunków komutują. To samo dotyczy każdej pary operatorów położenia i każdej pary operatorów pędu.

Jeśli wielkości fizyczne mają odpowiedniki klasyczne, to zachowane są relacje funkcyjne między nimi, np.

- moment pędu cząstki $L_x = yp_z - zp_y$ i relacje otrzymane przez cykliczne przestawienie indeksów,
- kwadrat długości momentu pędu $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$,
- energia kinetyczna jednej cząstki $T = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)$,
- energia potencjalna jednej cząstki $V(x, y, z)$,
- energia całkowita jednej cząstki $H = T + V$.

Prawdziwe są także odpowiednie relacje dla układów wielu cząstek. Operatory wielkości fizycznych odnoszących się do różnych cząstek komutują.

Ważne komutatory to

$$\begin{aligned}
 [L_x, L_y] &= i\hbar L_z, \\
 [L_j, L^2] &= 0, \quad j = x, y, z, \\
 [\frac{\mathbf{p}^2}{2m}, L_j] &= 0, \quad j = x, y, z, \\
 [V(r), L_j] &= 0, \quad j = x, y, z, \quad r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \\
 [\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(r), L_j] &= 0
 \end{aligned} \tag{29}$$

1.3 Związek formalizmu z pomiarem

Postulat III

Postulat ten wiąże formalizm z doświadczeniem. Niech układ jest opisany unormowanym wektorem ψ , tzn. $\langle \psi | \psi \rangle = 1$; dokonujemy pomiaru wielkości reprezentowanej przez operator A .

Dla operatora A istnieją rozwiązania własne równania $A\psi_n = \alpha_n\psi_n$.

Wektor stanu ψ daje się rozłożyć w ortonormalnej bazie ψ_n

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n.$$

Wartości własne α_n są dozwolonymi wynikami pomiaru. Liczba $|c_n|^2$ jest prawdopodobieństwem uzyskania w pomiarze liczby α_n .

Równanie własne dla operatora energii (lub ogólniej dla operatora Hamiltona) znane jest jako równanie Schrödingera niezależne od czasu.

Postulat przewiduje dwa zjawiska charakterystyczne dla teorii kwantowej:

1. kwantyzację wielkości fizycznych, tzn. na ogół nie każda liczba może być wynikiem pomiaru;
2. probabilistyczny charakter teorii, tzn. na ogół pozwala ona przewidzieć wynik pomiaru tylko z pewnym prawdopodobieństwem. Nie wynika to z braku informacji, ale jest właściwością mikroświata.

Normalizacja wektora ψ gwarantuje normalizację prawdopodobieństwa, tzn. $\langle \psi | \psi \rangle = \sum_n |c_n|^2 = 1$.

Z powyższego wynika, że sytuacja pełnej przewidywalności wyniku pomiaru jest możliwa, ale wymaga takiego przygotowania układu, aby był opisany wektorem własnym operatora A , np. ψ_k dla ustalonego k . Wtedy rozwinięcie się trywializuje: $\psi = \psi_k$, czyli $c_k = 1$, $c_j = 0$ dla $j \neq k$. Prawdopodobieństwo otrzymania wielkości α_k jest więc równe 1.

W przypadku widma ciągłego opis powyższy się modyfikuje. Uogólnione wektory własne, spełniające równanie

$$A\psi_\alpha = \alpha\psi_\alpha, \quad (30)$$

są ortnonormalne w sensie Diraca, tzn $\langle \psi_\alpha | \psi_\beta \rangle = \delta(\alpha - \beta)$. Rozkład wektora stanu w bazie ma postać

$$\psi = \int d\alpha c(\alpha)\psi_\alpha. \quad (31)$$

W tej sytuacji nie ma kwantyzacji wielkości A , natomiast $|c(\alpha)|^2$ jest gęstością prawdopodobieństwa otrzymania wartości α w wyniku pomiaru. Jest to wielkość mianowana, natomiast

$$\int_{\alpha_1}^{\alpha_2} |c(\alpha)|^2 d\alpha \quad (32)$$

jest prawdopodobieństwem otrzymania w pomiarze liczby z przedziału (α_1, α_2) .

Niepełną lecz istotną informację o rozkładzie prawdopodobieństwa dają wartość średnia (oczekiwana) i średnie odchylenie kwadratowe. Wartość średnia jest średnią możliwych wyników pomiarów, ważoną prawdopodobieństwami ich wystąpienia

$$\bar{A} = \sum_n |c_n|^2 \alpha_n \quad (33)$$

lub

$$\bar{A} = \int d\alpha |c(\alpha)|^2 \alpha. \quad (34)$$

Wartość średnią można obliczyć bez znajomości szczegółów rozkładu

$$\begin{aligned} \langle \psi | A | \psi \rangle &= \sum_n c_n^* \langle \psi_n | A | \sum_s c_s | \psi_s \rangle = \sum_{ns} c_n^* c_s \langle \psi_n | A | \psi_s \rangle = \\ &= \sum_{ns} c_n^* c_s \langle \psi_n | \alpha_s | \psi_s \rangle = \sum_{ns} c_n^* c_s \alpha_s \delta_{ns} = \sum_n |c_n|^2 \alpha_n = \bar{A}. \end{aligned} \quad (35)$$

Analogicznie przebiega obliczenie dla rozkładu ciągłego.

Wariancję rozkładu definiujemy jako

$$W(A) = \overline{(A - \bar{A})^2} \equiv \overline{A^2} - \bar{A}^2, \quad (36)$$

a średnie odchylenie kwadratowe zdefiniowane jest jako $\Delta A = \sqrt{W(A)}$.

Dla układu opisanego wektorem własnym operatora A i tylko dla takiego wektora wariancja jest równa zero, tzn. wynik pomiaru jest określony z pewnością, czyli nie ma rozrzutu.

Dwie wielkości fizyczne są więc współmieralne, wtedy i tylko wtedy gdy mają wspólny zupełny układ wektorów własnych.

Dla dowodu założmy najpierw, że

$$\begin{aligned} A\psi_{nj} &= \alpha_n\psi_{nj}, \\ B\psi_{nj} &= \beta_j\psi_{nj} \end{aligned} \quad (37)$$

Dowolny wektor ψ można rozłożyć w tej bazie, tzn. $\psi = \sum_{nj} c_{nj}\psi_{nj}$. Wtedy

$$\begin{aligned} AB\psi &= \sum_{nj} c_{nj}\beta_j\alpha_n\psi_{nj}, \\ BA\psi &= \sum_{nj} c_{nj}\alpha_n\beta_j\psi_{nj}. \end{aligned} \quad (38)$$

Ponieważ mnożenie liczb α_n i β_j jest przemienne, $AB\psi = BA\psi$ dla dowolnego ψ , czyli $AB = BA$.

Dla dowodu w drugą stronę założmy że $AB = BA$. Niech wektor ψ_n jest wektorem własnym A do wartości α_n . Wtedy

$$A(B\psi_n) = B(A\psi_n) = B\alpha_n\psi_n = \alpha_n(B\psi_n), \quad (39)$$

czyli $B\psi_n$ jest też wektorem własnym do wartości własnej α_n , czyli wpada do podprzestrzeni przestrzeni Hilberta odpowiadającej tej wartości własnej.

Jeśli podprzestrzeń ta jest jednowymiarowa, to wektory ψ_n i $B\psi_n$ różnią się najwyżej o stały czynnik β_n , czyli $B\psi_n = \beta_n\psi_n$, i wektor ten jest równocześnie wektorem własnym A i B .

Jeśli ta podprzestrzeń jest wielowymiarowa, to wektory własne A można ponumerować drugim indeksem s jako ψ_{ns} i zachodzi $A\psi_{ns} = \alpha_n\psi_{ns}$. Wektory te nie muszą być wektorami własnym operatora B , ale można zbudować ich superpozycje $\tilde{\psi}_{nj} = \sum_s a_{js}\psi_{ns}$, tak aby były wektorami własnymi B ; inaczej mówiąc można rozwiązać równanie własne dla B w podprzestrzeni własnej A . Tak więc A i B mają wspólny zupełny układ wektorów własnych $\tilde{\psi}_{nj}$. Ograniczenie na dokładność pomiaru 2 wielkości reprezentowanych przez

operatory A i B jest dane przez zasad nieoznaczoności Heisenberga w postaci nierówności

$$W(A)W(B) \geq \frac{1}{4} |\langle \psi | [A, B] | \psi \rangle|^2. \quad (40)$$

Dowód wynika z nierówności Schwarz'a. Szczegóły w nieco innej notacji są przedstawione w części 0. Jeśli operatory A i B komutują, np. $[x, p_x] = i\hbar$, ograniczenie nie zależy od stanu. Dla operatorów położenia i pędu otrzymujemy zatem

$$W(x)W(p_x) \geq \frac{\hbar^2}{4}. \quad (41)$$

Lub dla średnich odchyłeń kwadratowych

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (42)$$

Warto dodać, że równość może być realizowana. Na przykład w reprezentacji położeniowej (patrz niżej) równość zachodzi dla stanu opisywanego funkcją falową Gaussa i tylko dla niego.

Zasada nieoznaczoności dla położenia i pędu oznacza, że gdy nieoznaczoność położenia zmierza do zera (nigdy zera nie osiągnie, punkt jest obiektem miary zero), to nieoznaczoność pędu zmierza do nieskończoności. Spotyka się dwa rodzaje prób komentowania tego:

(i) próba coraz dokładniejszego zlokalizowania cząstki, np. przez oświetlanie jej fotonami o coraz mniejszej długości fali, czyli coraz większej energii, w coraz większym stopniu w sposób niekontrolowany zaburza jej pęd. Sugeruje to, że cząstka w każdej chwili ma jakieś położenie i jakiś pęd, ale nie możemy znać ich równocześnie.

(ii) cząstka jest obiektem, którego nie można sobie wyobrazić klasycznie. Charakteryzujące ją wielkości fizyczne są komplementarne w sensie Bohra, czyli jednocześnie się wykluczają i uzupełniają. Cząstce nie przysługuje posiadanie jednocześnie położenia i pędu.

Podobnie można mówić o innych parach wielkości fizycznych, chociaż na ogół ograniczenie zależy od stanu ψ .

Można teraz powiedzieć, jak powinna być przestrzeń Hilberta dla danego układu fizycznego. Powinna ona mianowicie być taka, aby jej bazę stanowiły wspólne wektory własne maksymalnego zespołu niezależnych operatorów komutujących, czyli reprezentujących wszystkie wielkości współmieralne. Z

formalnego punktu widzenia każdy wybór maksymalnego zespołu komutujących operatorów jest równie dobry.

Stwierdzenie powyższe nie jest elegendkie: powinno się przecież najpierw określić przestrzeń Hilberta, a potem działające w niej operatory. Tu punktem wyjścia jest argument fizyczny: musimy określić, jakie wielkości fizyczne w ogóle przysługują układowi kwantowemu. Na przykład dla pojedynczej cząstki w jednym wymiarze będą to położenie, pęd, energia kinetyczna, energia potencjalna. W trzech wymiarach będą to trzy składowe położenia, trzy składowe pędu, trzy składowe momentu pędu, kwadrat momentu pędu, energia kinetyczna, energia potencjalna. Wymienione wielkości nie są niezależne i nie są współmieralne.

W przypadku jednego wymiaru weźmy przestrzeń Hilberta, której bazą są uogólnione wektory własne położenia $|x\rangle$. Nie można mieć równocześnie wektorów własnych pędu z powodu niekomutowania operatora pędu i położenia. Energia kinetyczna jest funkcją pędu, a energia potencjalna - położenia. Maksymalny układ komutujących operatorów to tylko operator położenia.

Jeśli z powodów fizycznych okazuje się, że przestrzeń Hilberta była za uboga, należy ją rozbudować przez operację iloczynu tensorowego przestrzeni.

Niech będą dane przestrzenie Hilberta \mathcal{H}_1 o bazie $\{\phi_n\}$ i \mathcal{H}_2 o bazie $\{\chi_j\}$. Iloczynem tensorowym $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ nazywa się przestrzeń, której bazą są iloczyny $\psi_{nj} = \phi_n \otimes \chi_j$, a iloczyn skalarny jest zdefiniowany przez iloczyny skalarne w \mathcal{H}_1 i \mathcal{H}_2 , tzn.

$$\langle \psi_{nj} | \psi_{n'j'} \rangle_{\mathcal{H}} = \langle \phi_n | \phi_{n'} \rangle_{\mathcal{H}_1} \langle \chi_j | \chi_{j'} \rangle_{\mathcal{H}_2}. \quad (43)$$

Niech \mathcal{H}_1 będzie przestrzenią odpowiadającą cząstce w jednym wymiarze, tzn. na przykład o bazie $|x\rangle$. Do opisu cząstki w 3 wymiarach należy użyć przestrzeni $\mathcal{H}_3 = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1$, a maksymalny zbiór komutujących operatorów to (x, y, z) (można wziąć inny, np. (x, p_y, z)). Do opisu N cząstek bez spinu potrzeba przestrzeni będącej iloczynem N przestrzeni \mathcal{H}_3 .

Gdy okazało się, że elektron ma spin $\frac{1}{2}$, do opisu samego spinu potrzebna była przestrzeń \mathcal{H}_s - dwuwymiarowa przestrzeń Hilberta, której bazą są np. 2 wektory własne s_z - rzutu spinu na oś z . Stany elektronu ze spinem opisane są wektorami z przestrzeni $\mathcal{H}_3 \otimes \mathcal{H}_s$.

1.4 Reprezentacje

W praktyce obliczenia wykonuje się nie w abstrakcyjnej przestrzeni Hilberta, lecz w jej reprezentacji: funkcyjnej lub macierzowej. Reprezentacji dostarcza maksymalny zespół niezależnych operatorów komutujących. Niech ich wspólny bazowy układ wektorów własnych będzie $\{\psi_n\}$ dla przeliczalnej bazy i $\{\psi_\alpha\}$ dla bazy nieprzeliczalnej. Zazwyczaj n lub α są zbiorami indeksów.

W bazie wektorów ψ_n dowolny wektor ψ daje się rozłożyć jako $\psi = \sum_n \psi_n \langle \psi_n | \psi \rangle$ i współczynniki rozwinięcia $c_n = \langle \psi_n | \psi \rangle$ reprezentują ten wektor. Iloczyn skalarny wektora ψ i wektora $\phi = \sum_s a_s \psi_s$, gdzie $a_s = \langle \psi_s | \phi \rangle$ ma postać

$$\langle \psi | \phi \rangle = \sum_{ns} c_n^* a_s \langle \psi_n | \psi_s \rangle = \sum_n c_n^* a_n, \quad (44)$$

gdzie skorzystano z ortonormalności wektorów ψ_n . Wektor $\{a_n\}$ jest więc kolumną zespolonych współczynników, a wektor c_n - wierszem, dodatkowo sprzężonym w sposób zespolony. Normalizacja wektora ψ oznacza, że $\sum_n |c_n|^2 = 1$.

Podobnie w przypadku bazy ciągłej dowolny wektor $\psi = \int d\alpha \psi_\alpha \langle \psi_\alpha | \psi \rangle$, a $\phi = \int d\alpha \psi_\alpha \langle \psi_\alpha | \phi \rangle$. Wektor ψ jest więc reprezentowany funkcją zespoloną zmiennej rzeczywistej $\psi(\alpha) = \langle \psi_\alpha | \psi \rangle$ i podobnie wektor ϕ jest reprezentowany funkcją $\phi(\beta) = \langle \psi_\beta | \phi \rangle$. Iloczyn skalarny $\langle \psi | \phi \rangle = \int d\alpha \psi(\alpha)^* \phi(\alpha)$, gdzie skorzystano z tego że funkcje bazowe ψ_α są znormalizowane do delty Diraca. Dla $\psi = \phi$ otrzymujemy warunek normalizacji $\int |\psi(\alpha)|^2 d\alpha = 1$.

W przypadku reprezentacji dyskretnej operatora B , takiego że $\psi = B\phi$ reprezentację otrzymamy biorąc iloczyn skalarny tej relacji z wektorem bazowym ψ_n i podstawiając rozkład operatora jednostkowego

$$\langle \psi_n | \psi \rangle = \langle \psi_n | B I \phi \rangle = \langle \psi_n | B \sum_s |\psi_s\rangle \langle \psi_s | \phi \rangle = \sum_s \langle \psi_n | B | \psi_s \rangle \langle \psi_s | \phi \rangle, \quad (45)$$

lub w oznaczeniach macierzowych

$$c_n = \sum_s B_{ns} a_s. \quad (46)$$

Operator B jest więc reprezentowany przez macierz $B_{ns} = \langle \psi_n | B | \psi_s \rangle$.

Dla operatora sprzężonego po hermitowsku do B zachodzi

$$\langle \psi_n | B | \psi_s \rangle = (\langle \psi_n | B^\dagger | \psi_s \rangle) = \langle \psi_s | B^\dagger | \psi_n \rangle^* = (B_{sn}^\dagger)^*. \quad (47)$$

Macierz operatora B^\dagger otrzymujemy z macierzy B przez transpozycję i sprzężenie zespolone. Te dwie operacje łącznie nazywane są sprzężeniem hermitowskim macierzy i też oznaczane krzyżem. Zatem dla operatora hermitowskiego $B_{ns} = B_{sn}^*$.

Operator w swojej własnej reprezentacji, tzn. takiej że $B\psi_n = \beta_n\psi_n$ reprezentowany jest przez macierz $B_{ns} = \langle \psi_n | B | \psi_s \rangle = \beta_n \delta_{ns}$. Jest to więc macierz diagonalna z wartościami własnymi na głównej przekątnej

W przypadku bazy ciągłej postępowanie jest podobne, przy czym sumy trzeba zastąpić całkami, a deltę Kroneckera - deltą Diraca.

$$\langle \psi_\alpha | \psi \rangle = \langle \psi_\alpha | B I \phi \rangle = \langle \psi_\alpha | B \int d\beta |\psi_\beta\rangle \langle \psi_\beta | \phi \rangle = \int d\beta \langle \psi_\alpha | B | \psi_\beta \rangle \langle \psi_\beta | \phi \rangle, \quad (48)$$

czyli

$$\psi(\alpha) = \int d\beta B(\alpha, \beta) \phi(\beta). \quad (49)$$

Operator B jest więc reprezentowany przez operator całkowy z jądrem $B(\alpha, \beta) \equiv \langle \psi_\alpha | B | \psi_\beta \rangle$. Operator w swojej reprezentacji, tzn. gdy $B\psi_\beta = \beta\psi_\beta$ reprezentowany jest przez $\langle \psi_\alpha | B | \psi_\beta \rangle = \beta\delta(\alpha - \beta)$. Działa więc lokalnie, tzn.

$$\psi(\alpha) = \int d\beta B(\alpha, \beta) \phi(\beta) = \int d\beta \beta \delta(\alpha - \beta) \phi(\beta) = \alpha \phi(\alpha). \quad (50)$$

W przypadkach operatora położenia i pędu operatory całkowe stają się pewnymi operatorami różniczkowymi. Weźmy cząstkę w jednym wymiarze i reprezentację położeniową. Bazę ciągłą tworzą wektory własne $|x\rangle$ operatora x . Dla operatora położenia zachodzi

$$\begin{aligned} \langle x | \psi \rangle &= \langle x | x \int dx' |x'\rangle \langle x' | \phi \rangle = \int dx' \langle x | x | x' \rangle \langle x' | \phi \rangle = \\ &= \int dx' x' \delta(x - x') \langle x' | \phi \rangle = x \langle x | \phi \rangle, \end{aligned} \quad (51)$$

czyli zgodnie z oczekiwaniami $\psi(x) = x\phi(x)$. Działanie operatora sprowadza się do mnożenia przez funkcję.

Dla operatora pędu w reprezentacji położeniowej relacja $|\psi\rangle = p_x|\phi\rangle$ sprowadza się do

$$\langle x | \psi \rangle = \int dx' \langle x | p_x | x' \rangle \langle x' | \phi \rangle. \quad (52)$$

Jądro operatora w ostatniej relacji można obliczyć korzystając z relacji komutacji $[x, p_x] = i\hbar$. Biorąc element macierzowy komutatora otrzymuje się

$$\langle x|(xp_x - p_x x|x') = i\hbar\langle x|x' \rangle. \quad (53)$$

Operator położenia działa na swoje wektory własne w lewo i prawo, co pozwala napisać

$$(x - x')\langle x|p_x|x' \rangle = i\hbar\delta(x - x'). \quad (54)$$

Z własności delty Diraca wynika, że $(x - x')\delta(x - x') = 0$. Różniczkując ten związek względem x otrzymuje się

$$0 = \delta(x - x') + (x - x')\frac{d}{dx}\delta(x - x'). \quad (55)$$

To pozwala napisać

$$(x - x')\langle x|p_x|x' \rangle = -i\hbar(x - x')\frac{d}{dx}\delta(x - x'). \quad (56)$$

i utożsamiać

$$\langle x|p_x|x' \rangle = -i\hbar\frac{d}{dx}\delta(x - x') \quad (57)$$

W ten sposób

$$\langle x|\psi \rangle = \int dx' \langle x|p_x|x' \rangle \langle x'|\phi \rangle = \int dx' (-i\hbar)\frac{d}{dx}\delta(x - x') \langle x'|\phi \rangle = -i\hbar\frac{d}{dx}\langle x|\phi \rangle, \quad (58)$$

lub po prostu

$$\psi(x) = -i\hbar\frac{d}{dx}\phi(x). \quad (59)$$

Podobnie można obliczyć dla reprezentacji pędowej, przy bazie $|p\rangle$ wektorów własnych operatora p_x takich że $p_x|p\rangle = p|p\rangle$

$$\begin{aligned} \text{dla } |\psi\rangle &= p_x|\phi\rangle \\ \psi(p) &= \langle p|\psi\rangle = p\langle p|\phi\rangle = p\phi(p), \end{aligned} \quad (60)$$

oraz

$$\begin{aligned} \text{dla } |\psi\rangle &= x|\phi\rangle, \\ \psi(p) &= \langle p|\psi\rangle = \int dp' \langle p|x|p' \rangle \langle p'|\phi \rangle = i\hbar\frac{d}{dp}\phi(p). \end{aligned} \quad (61)$$

Wektory własne $\psi_p(x) = \langle x|p\rangle$ operatora p_x w reprezentacji położeniowej spełniają więc równanie

$$-i\hbar \frac{d}{dx} \psi_p(x) = p\psi_p(x). \quad (62)$$

Rozwiązaniem tego równania jest

$$\langle x|p\rangle \equiv \psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right), \quad (63)$$

przy czym czynnik przed eksponentem zapewnia normalizację

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_p(x)^* \psi_{p'}(x) dx = \delta(p - p'). \quad (64)$$

Trójwymiarowe uogólnienie jest następujące ("daszek" oznacza operator tam, gdzie mógłby być pomylony z liczbą):

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{r}} &= (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}), \\ \hat{\mathbf{p}} &= (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z), \\ \hat{\mathbf{r}}\psi(\mathbf{r}) &= \mathbf{r}\psi(\mathbf{r}), \\ \hat{\mathbf{p}}\psi(\mathbf{r}) &= -i\hbar\nabla_{\mathbf{r}}\psi(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (65)$$

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{r}}\psi(\mathbf{p}) &= i\hbar\nabla_{\mathbf{p}}\psi(\mathbf{p}), \\ \hat{\mathbf{p}}\psi(\mathbf{p}) &= \mathbf{p}\psi(\mathbf{p}). \end{aligned} \quad (66)$$

1.5 Zmiana reprezentacji

Niech dane będą 2 bazy: $\{\psi_n\}$ jako baza własna operatora A i $\{\phi_j\}$ jako baza własna operatora B .

Wektor ψ w obu reprezentacjach dany jest odpowiednio przez $c_n = \langle \psi_n|\psi\rangle$ i $c'_j = \langle \phi_j|\psi\rangle$. Zachodzi

$$c'_j = \langle \phi_j|I\psi\rangle = \langle \phi_j|\sum_n |\psi_n\rangle\langle \psi_n|\psi\rangle = \sum_n U_{jn}c_n, \quad (67)$$

gdzie $U_{jn} \equiv \langle \phi_j|\psi_n\rangle$ jest macierzą unitarną, tzn. taką, że $U^{-1} = U^\dagger$. Rzeczywiście,

$$(UU^\dagger)_{jk} = \sum_n U_{jn}(U^\dagger)_{nk} = \sum_n \langle \phi_j|\psi_n\rangle\langle \phi_k|\psi_n\rangle^* = \langle \phi_j|\sum_n |\psi_n\rangle\langle \psi_n|\phi_k\rangle = \langle \phi_j|\phi_k\rangle = \delta_{jk}. \quad (68)$$

Transformacja macierzy dowolnego operatora C jest następująca

$$C'_{jk} \equiv \langle \phi_j | C | \phi_k \rangle = \langle \phi_j | \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| C \sum_s |\psi_s\rangle \langle \psi_s| \phi_k \rangle = \sum_{ns} \langle \phi_j | \psi_n \rangle \langle \psi_n | C | \psi_s \rangle \langle \psi_s | \phi_k \rangle = \sum_{ns} U_{jn} C_{ns} (U^\dagger)_{sk} \quad (69)$$

Odpowiednie relacje w przypadku baz ciągłych ψ_α i ϕ_β są następujące

$$\psi'(\alpha) \equiv \langle \phi_\alpha | \psi \rangle = \langle \phi_\alpha | \int d\beta |\psi_\beta\rangle \langle \psi_\beta | \psi \rangle = \int d\beta U(\alpha, \beta) \psi(\beta), \quad (70)$$

gdzie $U(\alpha, \beta) \equiv \langle \phi_\alpha | \psi_\beta \rangle$.

Dla operatora całkowego

$$C'(\alpha, \beta) \equiv \langle \phi_\alpha | C | \phi_\beta \rangle = \langle \phi_\alpha | \int d\mu |\psi_\mu\rangle \langle \psi_\mu | C \int d\nu |\psi_\nu\rangle \langle \psi_\nu | \phi_\beta \rangle = \int d\mu \int d\nu \langle \phi_\alpha | \psi_\mu \rangle \langle \psi_\mu | C | \psi_\nu \rangle \langle \psi_\nu | \phi_\beta \rangle = \int d\mu \int d\nu U(\alpha\mu) C(\mu\nu) (U^\dagger)(\nu\beta), \quad (71)$$

gdzie $U(\alpha\mu) \equiv \langle \phi_\alpha | \psi_\mu \rangle$.

W szczególności przejście od reprezentacji położeniowej do pędowej w jednym wymiarze ma postać

$$\psi(p) \equiv \langle p | \psi \rangle = \langle p | \int dx |x\rangle \langle x | \psi \rangle = \int dx \langle p | x \rangle \psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx \exp(-\frac{ipx}{\hbar}) \psi(x). \quad (72)$$

Dla transformacji odwrotnej zachodzi

$$\psi(x) \equiv \langle x | \psi \rangle = \langle x | \int dp |p\rangle \langle p | \psi \rangle = \int dp \langle x | p \rangle \psi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \exp(\frac{ipx}{\hbar}) \psi(p). \quad (73)$$

Jest to po prostu transformata Fouriera. W trzech wymiarach zachodzi

$$\psi(\mathbf{p}) \equiv \langle \mathbf{p} | \psi \rangle = \langle \mathbf{p} | \int d^3r |r\rangle \langle r | \psi \rangle = \int d^3r \langle \mathbf{p} | r \rangle \psi(r) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar^3}} \int d^3r \exp(-\frac{i\mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}) \psi(r) \quad (74)$$

oraz

$$\psi(r) \equiv \langle r | \psi \rangle = \langle r | \int d^3p |p\rangle \langle p | \psi \rangle = \int d^3p \langle r | p \rangle \psi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar^3}} \int d^3p \exp(\frac{i\mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}) \psi(p). \quad (75)$$

Przykład: Cząstka w jednowymiarowym potencjale liniowym:

- (i) $V(x) = \alpha x$, dla $x \geq 0$, $V(x) = \infty$, dla $x < 0$;
- (ii) $V(x) = \alpha|x|$.

W reprezentacji położeniowej równanie Schrödingera ma postać

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + \alpha x\psi = E\psi. \quad (76)$$

Jest to przykład, w którym reprezentacja pędowa jest wygodniejsza. Równanie Schrödingera w tej reprezentacji ma postać

$$\frac{p^2}{2m}\psi(p) + \alpha i\hbar \frac{d}{dp}\psi(p) = E\psi(p). \quad (77)$$

Rozwiązanie równania przez rozdzielanie zmiennych daje

$$\psi(p) = C \exp\left[\frac{-i}{\hbar\alpha}\left(Ep - \frac{p^3}{6m}\right)\right], \quad (78)$$

gdzie C jest stałą. Przejście do reprezentacji położeniowej daje

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}C \int_{-\infty}^{\infty} dp \exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right) \exp\left[\frac{-i}{\hbar\alpha}\left(Ep - \frac{p^3}{6m}\right)\right]. \quad (79)$$

Podstawiając $p = y(2m\hbar\alpha)^{\frac{1}{3}}$ otrzymuje się

$$\psi(x) = C' \int_{-\infty}^{\infty} dy \exp\left\{i\left[y\left(x - \frac{E}{\alpha}\right)\frac{1}{\hbar}(2m\hbar\alpha)^{\frac{1}{3}} - \frac{y^3}{3}\right]\right\}, \quad (80)$$

lub po wyrażeniu eksponentu przez sinus i kosinus i skorzystaniu z nieparzystości sinusa i parzystości kosinusa

$$\psi(x) = 2C' \int_{-\infty}^{\infty} dy \cos\left[y\left(x - \frac{E}{\alpha}\right)\frac{1}{\hbar}(2m\hbar\alpha)^{\frac{1}{3}} - \frac{y^3}{3}\right]. \quad (81)$$

Całka te postaci znana jest jako funkcja Airy'ego

$$\text{Ai}(z) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dy \cos\left(zy - \frac{y^3}{3}\right). \quad (82)$$

Jest to funkcja specjalna o znanych własnościach. W szczególności asymptotycznie

$$\begin{aligned} \text{Ai}(z) &\sim_{z \rightarrow \infty} \frac{1}{2\sqrt{\pi}z^{\frac{1}{4}}} \exp\left[-\frac{2}{3}z^{\frac{3}{2}}\right] \\ \text{Ai}(z) &\sim_{z \rightarrow -\infty} \frac{1}{\sqrt{\pi}(-z)^{\frac{1}{4}}} \sin\left[\frac{2}{3}(-z)^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}\right]. \end{aligned} \quad (83)$$

Istnieje jeszcze drugie rozwiązanie, znane jako funkcja Airy'ego $\text{Bi}(z)$; jest ona nienormowalna i nie przyda się w rozważanym kontekście.

Rozwiązanie dla $x \geq 0$ ma więc postać

$$\psi(x) = C_1 \text{Ai}\left[\left(x - \frac{E}{\alpha}\right) \frac{1}{\hbar} (2m\hbar\alpha)^{\frac{1}{3}}\right], \quad (84)$$

gdzie C_1 jest stałą wyrażającą się przez poprzednie stałe i parametry zadania. Ostatecznie trzeba ją wyznaczyć w warunku normalizacji.

W wersji (i) zadania $\psi(x) \equiv 0$ dla $x < 0$, bo tam potencjał jest nieskończony. Uwzględnienie warunków brzegowych w postaci żądania ciągłości funkcji daje $\psi(0) = 0$, przy czym nie ma ciągłości pochodnej ze względu na występującą nieskończoność. Otrzymujemy zatem

$$\psi(0) = C_1 \text{Ai}\left[\left(-\frac{E}{\alpha}\right) \frac{1}{\hbar} (2m\hbar\alpha)^{\frac{1}{3}}\right] = 0. \quad (85)$$

Jest to warunek kwantyzacji energii.

W przypadku (ii) potrzebne jest rozwiązanie dla $x < 0$. Dla $V(x) = \alpha|x|$ równanie dla $x < 0$ przechodzi w równanie dla $x > 0$ przez zamianę $x \rightarrow -x$. Rozwiązanie dla $x < 0$ ma postać

$$\psi(x) = C_2 \text{Ai}\left[\left(-x - \frac{E}{\alpha}\right) \frac{1}{\hbar} (2m\hbar\alpha)^{\frac{1}{3}}\right]. \quad (86)$$

Warunki brzegowe polegające na żądaniu ciągłości funkcji i pochodnej mają postać

$$\begin{aligned} C_1 \text{Ai}\left[\left(-\frac{E}{\alpha}\right) \frac{1}{\hbar} (2m\hbar\alpha)^{\frac{1}{3}}\right] &= C_2 \text{Ai}\left[\left(-\frac{E}{\alpha}\right) \frac{1}{\hbar} (2m\hbar\alpha)^{\frac{1}{3}}\right], \\ C_1 \text{Ai}'\left[\left(-\frac{E}{\alpha}\right) \frac{1}{\hbar} (2m\hbar\alpha)^{\frac{1}{3}}\right] \frac{1}{\hbar} (2m\hbar\alpha)^{\frac{1}{3}} &= C_2 \text{Ai}'\left[\left(-\frac{E}{\alpha}\right) \frac{1}{\hbar} (2m\hbar\alpha)^{\frac{1}{3}}\right] \frac{-1}{\hbar} (2m\hbar\alpha)^{\frac{1}{3}} \end{aligned} \quad (87)$$

Ai' jest pochodną funkcji Airy'ego. Istnieją dwie klasy rozwiązań. Jeśli funkcja Ai dla określonej energii jest różna od zera, to z pierwszego z równań wynika, że $C_1 = C_2$. Wtedy rozwiązanie jest funkcją parzystą, a drugie z równań narzuca warunek kwantyzacji w postaci $\text{Ai}'\left[\left(-\frac{E}{\alpha}\right) \frac{1}{\hbar} (2m\hbar\alpha)^{\frac{1}{3}}\right] = 0$.

Odwrotnie jeśli dla pewnej energii pochodna Ai' jest różna od zera, to z drugiego z równań wynika że $C_1 = -C_2$. Rozwiązanie jest funkcją nieparzystą,

a warunek kwantyzacji energii ma postać taką jak w przykładzie (i), tzn. $\text{Ai}[(\frac{E}{\alpha})\frac{1}{\hbar}(2m\hbar\alpha)^{\frac{1}{3}}] = 0$.

Przykład: Równanie Schrödingera dla ekranowanego potencjału kulombowskiego w reprezentacji pędowej.

Hamiltonian ma postać

$$H = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\hat{r}} \exp(-\gamma\hat{r}). \quad (88)$$

W reprezentacji pędowej operator pędu jest mnożeniem przez funkcję, natomiast operator położenia i jego funkcje są operatorami całkowymi. Równanie Schrödingera przybiera postać

$$\frac{p^2}{2m}\psi(\mathbf{p}) + \int d^3p' \langle \mathbf{p} | - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\hat{r}} \exp(-\gamma\hat{r}) | \mathbf{p}' \rangle \psi(\mathbf{p}') = E\psi(\mathbf{p}). \quad (89)$$

Jądro operatora całkowego można obliczyć wstawiając do środka operator jednostkowy $\int d^3r |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}|$

$$\langle \mathbf{p} | \frac{1}{\hat{r}} \exp(-\gamma\hat{r}) | \mathbf{p}' \rangle = \langle \mathbf{p} | \frac{1}{\hat{r}} \exp(-\gamma\hat{r}) \int d^3r |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}| | \mathbf{p}' \rangle = \int d^3r \langle \mathbf{p} | \mathbf{r} \rangle \frac{1}{r} \exp(-\gamma r) \langle \mathbf{r} | \mathbf{p}' \rangle, \quad (90)$$

gdzie skorzystano z tego, że operator $\hat{\mathbf{r}}$ działając na swój wektor własny daje funkcję położenia mnożoną przez ten wektor. Wstawiając funkcje własne pędu w reprezentacji położeniowej otrzymujemy

$$\langle \mathbf{p} | \frac{1}{\hat{r}} \exp(-\gamma\hat{r}) | \mathbf{p}' \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3r \exp\left[\frac{i(\mathbf{p}' - \mathbf{p})\mathbf{r}}{\hbar}\right] \frac{\exp(-\gamma r)}{r}. \quad (91)$$

Powyższą całkę można obliczyć przechodząc do współrzędnych sferycznych. Oznaczmy roboczo wektor $\frac{\mathbf{p}' - \mathbf{p}}{\hbar} \equiv \mathbf{q}$ skierujemy oś z wzdłuż \mathbf{q} ; wtedy kąt θ jest kątem między \mathbf{q} i \hat{z} . Całka ma wartość

$$\begin{aligned} & \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^\infty r^2 dr \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \exp[iqr \cos\theta] \exp(-\gamma r) \frac{1}{r} = \\ & \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} 2\pi \int_0^\infty r \exp(-\gamma r) dr \int_{-1}^1 \exp(iqr u) du = \\ & \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} 2\pi \int_0^\infty r \exp(-\gamma r) dr [\exp(iqr) - \exp(-iqr)] \frac{1}{iqr} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} 2\pi \frac{1}{q} \int_0^\infty \exp(-\gamma r) dr 2\mathfrak{S} \exp(iqr) = \\
& \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{4\pi}{q} \mathfrak{S} \int_0^\infty \exp[(iq - \gamma)r] = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{4\pi}{q} \mathfrak{S} \frac{-1}{iq - \gamma} = \\
& \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} 4\pi \frac{1}{\gamma^2 + q^2}. \tag{92}
\end{aligned}$$

Równanie Schrödingera przybiera więc postać

$$\frac{p^2}{2m} \psi(\mathbf{p}) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} 4\pi \int d^3p' \frac{1}{\gamma^2 + \frac{1}{\hbar^2}(\mathbf{p} - \mathbf{p}')^2} \psi(\mathbf{p}') = E\psi(\mathbf{p}). \tag{93}$$

Dla potencjału kulombowskiego należy wyłączyć ekranowanie kładąc $\gamma = 0$.

Zmiana reprezentacji przez transformację unitarną zachowuje reguły komutacji, tzn. jeśli komutator 2 operatorów $[A, B] = C$ i wszystkie operatory poddamy transformacji unitarnej danej operatorem U , czyli $A' = UAU^\dagger$ i $B' = UBU^\dagger$ to dla nowych operatorów mamy

$$[A', B'] = A'B' - B'A' = UAU^\dagger UBU^\dagger - UBU^\dagger UAU^\dagger = U[A, B]U^\dagger = UCU^\dagger = C'$$

Także wartości własne nie ulegają zmianie. Jeśli spełnione jest równanie własne $A\psi_n = \alpha_n\psi_n$, to zachodzi

$$\begin{aligned}
UA\psi_n &= \alpha_n U\psi_n, \\
UAU^\dagger U\psi_n &= \alpha_n U\psi_n, \\
A'\psi'_n &= \alpha_n \psi'_n,
\end{aligned} \tag{94}$$

gdzie wektory własne uległy transformacji: $\psi'_n = U\psi_n$.

Dozwolone wyniki pomiarów i zasady współmierzalności nie zależą więc od reprezentacji.

1.6 Ewolucja w czasie

Postulat IV.

Ewolucja układu w stanie czystym, gdy nie jest poddany pomiarowi, opisana

jest równaniem Schrödingera zależnym od czasu

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle, \quad (95)$$

gdzie H jest operatorem Hamiltona; najczęściej klasyczna funkcja Hamiltona i odpowiadający jej operator Hamiltona reprezentują energię całkowitą układu.

Przy warunku początkowym $\psi(t_0) = \psi_0$ i niezbyt wymagających założeń dotyczących regularności operatora H istnieje jednoznaczne rozwiązanie równania Schrödingera. Jest więc element deterministyczny w teorii: identyczne układy startujące z tych samych warunków początkowych znajdują się w tym samym stanie. Natomiast, jak już podkreślano, rozkład wyników pomiarów jest na ogół probabilistyczny.

Ewolucja wektora stanu w czasie pomiaru jest najbardziej zagadkowym elementem teorii kwantowej. Najprawdopodobniej ma to związek z faktem, że pomiar wymaga oddziaływania układu kwantowego z klasycznym aparatem pomiarowym i nie istnieje fundamentalna teoria takiego oddziaływania. Wszystko wskazuje na to, że w czasie pomiaru następuje nagle, nieciągła i niekontrolowana zmiana stanu.

Gdy mierzymy wielkość fizyczną A , której operator posiada wektory własne ψ_n do wartości własnych α_n , a układ opisany jest wektorem $\psi = \sum_n c_n \psi_n$, to przed pomiarem wiadomo, że wartość własna α_n może wystąpić z prawdopodobieństwem $|c_n|^2$ (postulat III). W pomiarze aktualizuje się jedna z potencjalnych możliwości, np. α_k . Przyjmuje się, że wektor stanu układu zmienia się nagle na ψ_k . Nazywa się to redukcją wektora stanu (paczki falowej). Kolejny pomiar, identyczny z pierwszym i wykonany natychmiast po nim, daje już pewnością ten sam wynik α_k .

(96)

Jeśli hamiltonian nie zależy od czasu, to istnieje specjalna klasa rozwiązań zwanych stacjonarnymi. Mają one postać

$$\psi_n(t) = \psi_n \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right), \quad (97)$$

gdzie wektory ψ_n spełniają równanie Schrödingera niezależne od czasu

$$H\psi_n = E_n\psi_n. \quad (98)$$

Stacjonarność oznacza, że wartość średnia dowolnej wielkości fizycznej oraz prawdopodobieństwa otrzymania poszczególnych wyników w pomiarze nie zależą od czasu

$$\bar{A}(t) = \langle (\psi_n \exp(\frac{-iE_n t}{\hbar}) | A | \psi_n \exp(\frac{-iE_n t}{\hbar})) \rangle = \langle \psi_n | A | \psi_n \rangle, \quad (99)$$

$$|\langle \phi_s | \psi_n \exp(\frac{-iE_n t}{\hbar}) \rangle| = |\langle \phi_s | \psi_n \rangle|, \quad (100)$$

gdzie ϕ_s tworzą bazę wektorów własnych jakiegoś operatora.

Ogólne rozwiązanie równania Schrödingera można zapisać jako superpozycję rozwiązań stacjonarnych

$$\psi(t) = \sum_n c_n \psi_n \exp(\frac{-iE_n t}{\hbar}). \quad (101)$$

Zaprezentowane podejście, w którym stany zależą od czasu, a wielkości fizyczne są reprezentowane przez operatory na ogół niezależne od czasu, jest nazywane obrazem Schrödingera. Można na ewolucję w czasie spojrzeć odmiennie.

Wprowadźmy unitarny operator $U(t)$ ewolucji w czasie, tzn.

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle. \quad (102)$$

Oznacza to, że operator U spełnia równanie

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t, t_0) = H U(t, t_0), \quad (103)$$

z warunkiem początkowym $U(t_0, t_0) = I$. Przyjmiemy $t_0 = 0$ i będziemy pisać po prostu $U(t)$.

Dla wektora sprzężonego równanie ma postać

$$-i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | = \langle \psi(t) | H, \quad (104)$$

a dla operatora ewolucji

$$-i\hbar \frac{d}{dt} U^\dagger(t) = U^\dagger(t) H. \quad (105)$$

Ewolucja wartości średniej operatora nie może zależeć od obrazu. Zachodzi

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \bar{A} &= \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle = \frac{d}{dt} \langle \psi(0) | U(t)^\dagger A U(t) | \psi(0) \rangle = \\ &\langle \psi(0) | \left\{ \frac{1}{-i\hbar} U^\dagger H A U + U^\dagger \frac{\partial A}{\partial t} U + \frac{1}{i\hbar} U^\dagger A H U \right\} | \psi(0) \rangle = \\ &\langle \psi(0) | \left\{ \frac{1}{-i\hbar} U^\dagger H U U^\dagger A U + U^\dagger \frac{\partial A}{\partial t} U + \frac{1}{i\hbar} U^\dagger A U U^\dagger H U \right\} | \psi(0) \rangle, \end{aligned} \quad (106)$$

gdzie w dwóch miejscach sztucznie wstawiono operator jednostkowy $I = U U^\dagger$. Definiujemy wektor stanu w obrazie Heisenberga

$$\psi_H = \psi(0) \quad (107)$$

i operator w obrazie Heisenberga

$$A_H(t) = U^\dagger(t) A U(t). \quad (108)$$

Ewolucję wartości średniej A można napisać jako

$$\frac{d}{dt} \bar{A} = \langle \psi_H | \left\{ \frac{1}{i\hbar} [A_H, H_H] + \left(\frac{\partial A}{\partial t} \right)_H \right\} | \psi_H \rangle \quad (109)$$

lub po prostu

$$\frac{d}{dt} \bar{A} = \langle \psi_H | \frac{d}{dt} A_H(t) | \psi_H \rangle, \quad (110)$$

gdzie

$$\frac{d}{dt} A_H(t) = \frac{1}{i\hbar} [A_H(t), H_H] + \left(\frac{\partial A}{\partial t} \right)_H. \quad (111)$$

To ostatnie równanie nazywa się równaniem Heisenberga.

Bardzo często hamiltonian w obrazie Schrödingera nie zależy od czasu. Wtedy operator $U(t) = \exp(-\frac{iHt}{\hbar})$, $H_H = H$, a dla niezależnego od czasu w obrazie Schrödingera operatora A równanie Heisenberga przyjmuje postać

$$i\hbar \frac{d}{dt} A_H = [A_H, H]. \quad (112)$$

Bardzo ważny jest obraz oddziaływania, pośredni między obrazem Schrödingera i Heisenberga. Jeśli operator Hamiltona przedstawimy w postaci $H =$

$H_0 + V$, gdzie H_0 nie zależy od czasu, to wektory i operatory w tym obrazie wprowadzamy jako

$$\begin{aligned}\psi_I(t) &= \exp\left(\frac{iH_0t}{\hbar}\right)\psi(t), \\ A_I(t) &= \exp\left(\frac{iH_0t}{\hbar}\right)A \exp\left(\frac{-iH_0t}{\hbar}\right).\end{aligned}\quad (113)$$

Równania ruchu w obrazie oddziaływania mają postać

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\psi_I(t) &= \frac{d}{dt} \exp\left(\frac{iH_0t}{\hbar}\right)\psi(t) = \frac{iH_0}{\hbar} \exp\left(\frac{iH_0t}{\hbar}\right)\psi(t) + \exp\left(\frac{iH_0t}{\hbar}\right)\frac{d}{dt}\psi(t) = \\ &= \frac{iH_0}{\hbar}\psi_I(t) + \exp\left(\frac{iH_0t}{\hbar}\right)\frac{1}{i\hbar}(H_0 + V)\psi(t) = \\ &= \frac{iH_0}{\hbar}\psi_I(t) + \exp\left(\frac{iH_0t}{\hbar}\right)\frac{1}{i\hbar}(H_0 + V) \exp\left(-\frac{iH_0t}{\hbar}\right) \exp\left(\frac{iH_0t}{\hbar}\right)\psi(t),\end{aligned}\quad (114)$$

gdzie wstawiono sztucznie operator jednostkowy $I = \exp\left(-\frac{iH_0t}{\hbar}\right) \exp\left(\frac{iH_0t}{\hbar}\right)$. Po skorzystaniu z komutowania H_0 i $\exp\left(\frac{iH_0t}{\hbar}\right)$ równanie ruchu można zapisać jako

$$i\hbar \frac{d}{dt}\psi_I(t) = V_I(t)\psi_I(t).\quad (115)$$

Równanie jest podobne do równania Schrödingera z tym, że zamiast całego hamiltonianu występuje tylko jego część V . Pożytek jest taki, że często oddziaływanie V jest w jakimś sensie "małe", co oznacza, że ewolucja wektora w obrazie oddziaływania jest wolna; to umożliwi wprowadzenie pewnych metod przybliżonych.

Operator wielkości fizycznej A w obrazie oddziaływania spełnia równanie

$$\frac{d}{dt}A_I(t) = \frac{d}{dt} \exp\left(\frac{iH_0t}{\hbar}\right)A \exp\left(\frac{-iH_0t}{\hbar}\right) = \quad (116)$$

$$\begin{aligned}& \frac{iH_0}{\hbar} \exp\left(\frac{iH_0t}{\hbar}\right)A \exp\left(\frac{-iH_0t}{\hbar}\right) + \exp\left(\frac{iH_0t}{\hbar}\right)A \exp\left(\frac{-iH_0t}{\hbar}\right)\frac{-iH_0}{\hbar} \\ & + \exp\left(\frac{iH_0t}{\hbar}\right)\frac{\partial A}{\partial t} \exp\left(\frac{-iH_0t}{\hbar}\right) = \frac{1}{i\hbar}[A_I(t), H_0] + \left(\frac{\partial A}{\partial t}\right)_I.\end{aligned}\quad (117)$$

Jest to równanie typu równania Heisenberga z tym, że zamiast pełnego hamiltonianu występuje jego część H_0 .

Przykład: operator położenia i pędu w jednym wymiarze dla: (i) cząstki swobodnej, (ii) oscylatora harmonicznego.

Wykorzystany będzie wzór znany jako formuła Bakera-Hausdorffa. Ma on postać

$$\exp(A)B \exp(-A) = B + \frac{1}{1!}[A, B] + \frac{1}{2!}[A, [A, B]] + \frac{1}{3!}[A, [A, [A, B]]] + \dots \quad (118)$$

Dowód polega na rozważeniu ogólniejszego operatora

$$C(\lambda) = \exp(\lambda A)B \exp(-\lambda A), \quad (119)$$

gdzie λ jest liczbą. Obliczmy pochodną

$$\frac{d}{d\lambda}C(\lambda) = A \exp(\lambda A)B \exp(-\lambda A) + \exp(\lambda A)B \exp(-\lambda A)(-A) = [A, C(\lambda)]. \quad (120)$$

Skorzystano z tego, że pochodną funkcji operatora można liczyć tak, jak dla funkcji, jeśli tylko pochodna funkcji wewnętrznej jest przemienna z różniczkowanym operatorem.

Jeśli rozwinąć $C(\lambda)$ na szereg względem λ , tzn. wziąć $C(\lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n \lambda^n$, otrzymamy

$$\sum_{n=0}^{\infty} C_n n \lambda^{n-1} = [A, \sum_{n=0}^{\infty} C_n \lambda^n]. \quad (121)$$

Przyrównując wyrazy przy tych samych potęgach λ otrzymamy wzór rekurencyjny

$$C_{n+1}(n+1) = [A, C_n]. \quad (122)$$

Ponieważ $C_0 = C(0) = B$, dostajemy

$$\begin{aligned} C_1 &= [A, B], \\ C_2 &= \frac{1}{2}[A, C_1] = \frac{1}{2}[A, [A, B]], \\ C_3 &= \frac{1}{3}[A, C_2] = \frac{1}{6}[A, [A, [A, B]]], \text{ itd.} \end{aligned} \quad (123)$$

Kładąc $\lambda = 1$ otrzymujemy wzór B-H.

W przypadku (i) $H = \frac{p_x^2}{2m}$, $A = \frac{itp_x^2}{2m\hbar}$.

Dla $B = x$ otrzymamy $[A, B] = [\frac{itp_x^2}{2m\hbar}, x] = \frac{it}{2m\hbar}[p_x^2, x] = \frac{it}{2m\hbar}2(-i\hbar p_x) = \frac{p_x}{m}t$. Jest to liczba, a więc $[A, [A, B]] = 0$ i dalsze komutatory znikają. Ostatecznie

$x_H = x + \frac{p_x}{m}t$.

Dla $B = p_x$, już $[A, B] = 0$ i $(p_x)_H = p_x$.

Otrzymujemy więc relacje analogiczne do relacji klasycznych: pęd się nie zmienia, a położenie zmienia się liniowo w czasie ze stałą prędkością $\frac{p_x}{m}$.

Przypadek (ii) jest nieco bardziej skomplikowany: $H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$,
 $A = \frac{it}{\hbar}(\frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2)$.

Dla $B = x$ otrzymujemy kolejno

$$\begin{aligned} [A, B] &= [\frac{it}{\hbar}(\frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2), x] = \frac{it}{\hbar} \frac{1}{2m} (-2i\hbar p_x) = \frac{p_x t}{m}, \\ [A, [A, B]] &= [\frac{it}{\hbar}(\frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2), \frac{p_x t}{m}] = \frac{it}{\hbar} \frac{1}{2} m\omega^2 \frac{t}{m} [x^2, p_x] = \\ &= \frac{1}{2} \frac{it^2}{\hbar} \omega^2 [x^2, p_x] = \frac{1}{2} \frac{it^2}{\hbar} \omega^2 2i\hbar x = -\omega^2 t^2 x, \\ [A, [A, [A, B]]] &= [\frac{it}{\hbar}(\frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2), -\omega^2 t^2 x] = [\frac{it}{\hbar} \frac{1}{2m} (-\omega^2 t^2) (-2i\hbar p_x) = \\ &= -\omega^2 t^3 \frac{p_x}{m}. \end{aligned} \tag{124}$$

Obliczone wyrazy dają

$$x_H = x + \frac{p_x}{m\omega}(\omega t) - \frac{1}{2}\omega^2 t^2 x - \frac{1}{6} \frac{p_x}{m\omega}(\omega t)^3 + \dots \tag{125}$$

Można rozpoznać wyrazy rozwinięcia w szereg funkcji sinus i kosinus, a całe rozwinięcie wynosi

$$x_H(t) = x \cos \omega t + \frac{p_x}{m\omega} \sin \omega t. \tag{126}$$

Analogiczny rachunek dla $B = p_x$ daje

$$(p_x)_H(t) = p_x \cos \omega t - m\omega x \sin \omega t. \tag{127}$$

Znów dostajemy kwantowe analogony rozwiązań klasycznych. Niestety są to tylko szczególne przypadki, a w ogólności nie ma tak prostego podobieństwa.

1.7 Cząstki identyczne

1.7.1 Nierozróżnialność

Postulat 5

Wektory stanu dla cząstek identycznych przy przestawieniu cząstek są symetryczne

(w przypadku cząstek o spinie całkowitym - bozonów) lub antysymetryczne (w przypadku cząstek o spinie połówkowym - fermionów).

Postulat ten dotyczy nie tylko cząstek elementarnych lub dobrze wyodrębnionych ich złożań, lecz także quasicząstek - pewnych wzbudzeń kolektywnych, którym mają własności cząstek (fonony, plazmony, polarytony,...).

W przypadku opisu w reprezentacji położeniowej identyczność cząstek powoduje, że gdy znajdują się one w tym samym obszarze przestrzennym, wobec niemożności określenia ich trajektorii, tracą dla obserwatora swoją identyczność. Zgodnie z zasadami mechaniki kwantowej, jeśli mamy do czynienia z wieloma drogami, po których może przebiegać proces, musimy wykonać sumę po wszystkich możliwych trajektoriach, a dopiero potem obliczać prawdopodobieństwa. Gdy z dwu identycznych cząstek po zderzeniu jedna poleci w lewo, a druga w prawo, należy dodać z odpowiednią fazą funkcje falowe dla obu procesów.

Formalnym objawem identyczności cząstek jest niezmienniczość hamiltonianu przy zamianie (przenumerowaniu) cząstek. Dla dwu cząstek oznacza to, że $H(1,2) = H(2,1)$. Inaczej można to ująć wprowadzając operator permutacji

$$P\psi(1,2) = \psi(2,1) \quad (128)$$

i zauważając, że dla cząstek nierozróżnialnych komutator $[H, P] = 0$.

Inaczej sformułowany postulat stwierdza, że w przyrodzie realizują się tylko takie stany, dla których wektory stanu są jednocześnie wektorami własnymi operatora P , to znaczy takie, że

$$P\psi(1,2) = \lambda\psi(1,2). \quad (129)$$

Ponowne przestawienie cząstek przywraca stan wyjściowy

$$\psi(1,2) = P^2\psi(1,2) = P\lambda\psi(1,2) = \lambda^2\psi(1,2). \quad (130)$$

Oznacza to że $\lambda^2 = 1$, a więc

$\lambda = 1$, $\psi(2,1) = \psi(1,2)$, wektor symetryczny lub

$\lambda = -1$, $\psi(2,1) = -\psi(1,2)$, wektor antysymetryczny.

Jest możliwe, że w przestrzeni dwuwymiarowej nie jest konieczne, aby $P^2\psi(1,2) = \psi(1,2)$. W takim przypadku istniałyby nowa klasa cząstek.

W przypadku wielu cząstek ($N > 2$) należy dla każdej pary cząstek wprowadzić operator permutacji P_{jk} zamieniający cząstki o numerach j i k . Hamiltonian Komutuje z P_{jk} , a wektory $\psi(1,2,\dots,j,\dots,k,\dots,N) = \pm\psi(1,2,\dots,k,\dots,j,\dots,N)$.

1.7.2 Zasada Pauliego

Zasada Pauliego jest konsekwencją postulatu o antysymetrii wektora stanu dla fermionów. Jeśli zespoły liczb kwantowych (1) i (2) są identyczne, tzn $\psi(1,2) = -\psi(2,1)$, a $\psi(1,2) = -\psi(2,1)$, to wektor jest równy zero. Mogą to być położenie i spin elektronu, ale zasada jest prawdziwa dla każdego zespołu liczb kwantowych reprezentujących kompletny zespół operatorów.

Jeśli w szczególności weźmiemy położenie i spin, to gęstość prawdopodobieństwa znalezienia dwóch cząstek o tym samym spinie (połówkowym) w tym samym punkcie jest równa zero. Ze względu na ciągłość funkcji falowej, prawdopodobieństwo równoczesnego znalezienia obu cząstek w tej samej części przestrzeni jest małe.

1.7.3 Reprezentacja liczby obsadzeń

Jeśli chcemy opisać zbiór identycznych cząstek opisanych tymi samymi liczbami kwantowymi, to do opisu stanu wystarczy podać liczbę n takich cząstek, przy czym $n = 0, 1, 2, \dots$ dla bozonów i $n = 0, 1$ dla fermionów. Odpowiedni wektor stanu jest $|n\rangle$.

Operatory działające na takie stany wprowadza się następująco. Niech dane będą operatory a i a^\dagger spełniające regułę komutacji

$$[a, a^\dagger] = 1. \quad (131)$$

Weźmy operator $a^\dagger a$. Jest to operator hermitowski. Oczekujemy, że będzie miał wektory własne ϕ_ν i wartości własne ν

$$a^\dagger a \phi_\nu = \nu \phi_\nu. \quad (132)$$

Z reguły komutacji wynikaq, że

$$\begin{aligned} a^\dagger a(a\phi_\nu) &= (aa^\dagger - 1)a\phi_\nu = a\nu\phi_\nu - \phi_\nu = (\nu - 1)(a\phi_\nu), \\ a^\dagger a(a^\dagger\phi_\nu) &= a^\dagger(a^\dagger a + 1)\phi_\nu = a^\dagger\nu\phi_\nu + \phi_\nu = (\nu + 1)(a^\dagger\phi_\nu). \end{aligned} \quad (133)$$

to znaczy, że $a\phi_\nu$ jest wektorem własnym $a^\dagger a$ do wartości własnej $\nu - 1$, a $a^\dagger\phi_\nu$ jest wektorem własnym $a^\dagger a$ do wartości własnej $\nu + 1$. Jeśli nie ma degeneracji, można napisać

$$\begin{aligned} a\phi_\nu &= c_\nu\phi_{\nu-1}, \\ a^\dagger\phi_\nu &= c'_\nu\phi_{\nu+1}. \end{aligned} \quad (134)$$

Obecność degeneracji oznaczałaby, że powinny istnieć dodatkowe liczby kwantowe dla rozróżnienia stanów.

Wartości współczynników można określić następująco, zakładając normalizację wektorów ψ_ν

$$\begin{aligned}\langle \phi_\nu | a^\dagger a | \phi_\nu \rangle &= \langle \phi_\nu | \nu | \phi_\nu \rangle = \nu, \text{ oraz} \\ \langle \phi_\nu | a^\dagger a | \phi_\nu \rangle &= (\langle \phi_\nu | a) a | \phi_\nu \rangle = \langle \phi_{\nu-1} | |c_\nu|^2 | \phi_{\nu-1} \rangle = |c_\nu|^2.\end{aligned}\quad (135)$$

Stąd $c_\nu = \sqrt{\nu}$. Analogicznie

$$\begin{aligned}\langle \phi_\nu | a a^\dagger | \phi_\nu \rangle &= \langle \phi_\nu | (a^\dagger a + 1) | \phi_\nu \rangle = \langle \phi_\nu | (\nu + 1) | \phi_\nu \rangle = \nu + 1, \text{ oraz} \\ \langle \phi_\nu | a a^\dagger | \phi_\nu \rangle &= (\langle \phi_\nu | a^\dagger) a^\dagger | \phi_\nu \rangle = \langle \phi_{\nu+1} | |c'_\nu|^2 | \phi_{\nu+1} \rangle = |c'_\nu|^2.\end{aligned}\quad (136)$$

Stąd $c'_\nu = \sqrt{\nu + 1}$. Ale liczba ν jest kwadratem normy wektora $a\psi_\nu$. Nie może zatem być ujemna. Wydawałoby się, że używając wielokrotnie operatora a można dostać wektor o wartości własnej ν dowolnie małej, a więc także ujemnej. Dla uniknięcia sprzeczności należy żądać, aby ta rekurencja została przerwana od dołu, tzn. istnieje wektor ϕ_0 , taki że $a\phi_0 = 0$. Z tego wektora można wygenerować wszystkie inne używając wielokrotnie operatora a^\dagger

$$\phi_n = \frac{1}{\sqrt{n}} a^\dagger \phi_{n-1} = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n \phi_0. \quad (137)$$

Można więc interpretować operator $n = a^\dagger a$ jako operator liczby bozonów, a wektory ϕ_n utożsamiać z wektorami $|n\rangle$. Operator a niszczy jedną cząstkę, a operator a^\dagger ją tworzy. Nazywa się je operatorami anihilacji i kreacji. Taki opis stanu, traktujący cząstki jako kwanty pewnego pól nazywa się drugą kwantyzacją.

Jeśli istnieje wiele stanów bozonu numerowanych liczbami $1, 2, \dots, n$ należy wprowadzić operatory anihilacji a_j , kreacji a_j^\dagger i liczby cząstek $n_j = a_j^\dagger a_j$ dla każdego stanu, przy czym wszystkie operatory odnoszące się do różnych stanów komutują, tzn. $[a_j, a_k^\dagger] = \delta_{jk}$, $[a_j, a_k] = 0$, itd. Stan o liczbie cząstek n_j w stanie j generuje się jako

$$|n_1, n_2, \dots, n_j, \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots n_j! \dots}} (a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2} \dots (a_j^\dagger)^{n_j} \dots |0\rangle, \quad (138)$$

gdzie $|0\rangle \equiv |0, 0, \dots, 0, \dots\rangle$ jest próżnią, a więc stanem, w którym nie ma żadnej cząstki.

Dla fermionów potrzebny jest inny sposób opisu. Narzucmy na operatory kreacji i anihilacji reguły antykomutacji

$$\begin{aligned} \{a, a^\dagger\} &= 1, \\ \{a, a\} &= \{a^\dagger, a^\dagger\} = 0, \end{aligned} \quad (139)$$

gdzie $\{A, B\} \equiv AB + BA$. Stąd $a^2 = (a^\dagger)^2 = 0$.

Operator $a^\dagger a$ ma wektory własne

$$a^\dagger a \phi_\nu = \nu \phi_\nu. \quad (140)$$

Zastosowany dwukrotnie daje

$$\begin{aligned} a^\dagger a a^\dagger a \phi_\nu &= \nu^2 \phi_\nu \text{ oraz} \\ a^\dagger a a^\dagger a \phi_\nu &= a^\dagger (1 - a^\dagger a) a \phi_\nu = a^\dagger a \phi_\nu = \nu \phi_\nu. \end{aligned} \quad (141)$$

Stąd $\nu^2 = \nu$, czyli $\nu \equiv n = 0, 1$. Są to liczby obsadzeń właściwe dla fermionów.

Operatory a i a^\dagger są operatorami anihilacji i kreacji cząstki, gdyż

$$\begin{aligned} a^\dagger a (a^\dagger \phi_0) &= a^\dagger (1 - a^\dagger a) \phi_0 = a^\dagger \phi_0, \text{ czyli} \\ a^\dagger \phi_0 &= c \phi_1, \\ |c|^2 &= (\langle \phi_0 | a^\dagger) a^\dagger | \phi_0 \rangle = \langle \phi_0 | a a^\dagger | \phi_0 \rangle = \langle \phi_0 | (1 - a^\dagger a) | \phi_0 \rangle = 1, \text{ czyli } c = 1. \end{aligned} \quad (142)$$

oraz

$$\begin{aligned} a^\dagger a (a \phi_1) &= 0, \text{ czyli} \\ a \phi_1 &= c' \phi_0, \\ |c'|^2 &= (\langle \phi_1 | a) a | \phi_1 \rangle = \langle \phi_1 | a^\dagger a | \phi_1 \rangle = 1, \text{ czyli } c' = 1. \end{aligned} \quad (143)$$

Ostatecznie

$$\begin{aligned} a^\dagger \phi_0 &= \phi_1, \\ a \phi_1 &= \phi_0. \end{aligned} \quad (144)$$

Próba utworzenia drugiej cząstki w danym stanie lub zniszczenia cząstki, której nie ma, dają zero

$$\begin{aligned} a^\dagger \phi_1 &= (a^\dagger)^2 \phi_0 = 0 \phi_0 = 0, \\ a \phi_0 &= a^2 \phi_1 = 0 \phi_1 = 0. \end{aligned} \quad (145)$$

Jeśli istnieje wiele stanów fermionu numerowanych liczbami $1, 2, \dots, n$ należy wprowadzić operatory anihilacji a_j , kreacji a_j^\dagger i liczby cząstek $n_j = a_j^\dagger a_j$ dla każdego stanu, przy czym wszystkie operatory odnoszące się do różnych stanów antykomutują, tzn. $\{a_j, a_k^\dagger\} = \delta_{jk}$, $\{a_j, a_k\} = 0$ itd.

Stan o liczbie cząstek $n_j = 0, 1$ w stanie j generuje się

$$|n_1, n_2, \dots, n_j, \dots\rangle = (a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2} \dots (a_j^\dagger)^{n_j} \dots |0\rangle, \quad (146)$$

W reprezentacji położeniowej stan zawierający N bezspinowych bozonów, przy czym n_j bozonów jest w stanie ψ_j , $\sum_j n_j = N$, opisany jest funkcją

$$\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N | n_1, n_2, \dots \rangle = C \sum_P \psi_1(\mathbf{r}_{i_1}) \dots \psi_1(\mathbf{r}_{i_{n_1}}) \psi_2(\mathbf{r}_{i_{n_1+1}}) \dots \psi(\mathbf{r}_{i_{n_1+n_2}}) \dots \quad (147)$$

gdzie sumowanie jest po wszystkich permutacjach i_1, i_2, \dots, i_N liczb $1, 2, \dots, N$, a C jest czynnikiem normalizacyjnym.

Dla N fermionów obsadzających stany $\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N$ otrzymujemy wyznacznik Slatera

$$\langle 1, 2, \dots, N | 1, 1, \dots, 1 \rangle = C' \sum_P (-1)^P \psi_1(i_1) \psi_2(i_2) \dots \psi_N(i_N) = \frac{1}{N!^{\frac{1}{2}}} \det \begin{pmatrix} \psi_1(1) & \psi_1(2) & \dots & \psi_1(N) \\ \psi_2(1) & \psi_2(2) & \dots & \psi_2(N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_N(1) & \psi_N(2) & \dots & \psi_N(N) \end{pmatrix} \quad (148)$$

gdzie $(-1)^P$ jest parzystością permutacji, a zespół zmiennych przestrzennie-spinowych (\mathbf{r}_j, σ_j) oznaczono krótko jako j .