Podstawowe wiadomości z mechaniki kwantowej

1 Wstęp

Wprowadzenie w 1913 roku przez Nielsa Bohra modelu Bohra atomu i jego częściowe bardzo spektakularne sukcesy (wyjaśnienie widma emisyjnego i absorpcyjnego wodoru, jakościowe i ilościowe, wyprowadzenie stałej Rydberga z podstawowych zasad ruchu elektronu w atomie) przekonało większość fizyków do zaakceptowania poglądu, że w mikroświecie mogą obowiązywać takie prawa fizyki, które nie daje się sformułować w języku fizyki (mechaniki) klasycznej. Nieco później w 1924 roku Louis de Broglie wprowadził następną rewolucyjną koncepcję dualizmu korpuskularno falowego. W analogii do znanych już własności światła, które w zjawiskach dyfrakcji i interferencji zachowuje się jak fala elektromagnetyczna a w zjawiskach: fotoelektrycznym, absorpcji i emisji promieniowania jak zbiór czastek, (porcji) energii, de Broglie postawił hipotezę, że masywne cząstki powinny wykazywać również własności falowe. Po doświadczeniach Davissona, Germera i Thomsona (1926), w których wykazali oni falowe własności (dyfrakcję) odpowiednio przygotowanego strumienia elektronów stało się jasne, że nowa teoria mikroświata musi zawierać w sobie opis własności korpuskularno-falowych materii.

Spowodowało to podjęcie wielu rewolucyjnych prób opisu fizyki mikroświata, które łącznie doprowadziły ostatecznie w latach 1926-28 do pełnego sformułowania zupełnie nowej teorii fizycznej, mechaniki kwantowej.

Największe zasługi w sformułowaniu nowej teorii położyli Schrödinger, Heisenberg, Dirac, Pauli, Born, Bohr, Jordan, później von Neumann i wielu innych. Wykorzystali oni szereg współczesnych im osiągnięć matematyki (głownie teorię przestrzeni Hilberta) i sami przyczynili się do rozwoju pewnych gałęzi matematyki (np. teorii dystrybucji, teorii prawdopodobieństwa).

Praktycznie od końca lat trzydziestych ubiegłego wieku można traktować mechanikę kwantową jak teorię aksjomatyczną, to znaczy teorię opartą na kilku podstawowych pewnikach (aksjomatach), z których wszystkie twierdzenia, wnioski dotyczące opisu mikroświata dają się wyprowadzić. Przykładem teorii aksjomatycznej, znanym wszystkim ze szkoły, jest np. geometria (euklidesoowa). W kolejnym rozdziale omówię aksjomaty (postulaty) mechaniki kwantowej i podam przykłady jak należy się nimi posługiwać oraz interpretować wyniki obliczeń.

2 Postulaty mechaniki kwantowej

Postulaty (aksjomaty) mechaniki kwantowej można formułować na kilka sposobów, łącząc lub rozdzielając niektóre z nich, lub zmieniając kolejność. Nie ma to znaczenia, jeśli ostatecznie wszystkie niezbędne pewniki są użyte. Poniżej sformułuję te postulaty tak abym mógł objaśniać mechanikę kwantową słuchaczom o słabym przygotowaniu matematycznym w sposób możliwie najprostszy.

2.1 Opis (reprezentacja) układu fizycznego

Postulat 1 Stan układu fizycznego *reprezentowany jest przez* funkcję falową. *Jest to wektor w pewnej (abstrakcyjnej) przestrzeni wektorowej. Przestrzenie tego typu, występujące w mechanice kwantowej, nazywają się przestrzeniami Hilberta* $\{\mathcal{H}\}$.

Terminy funkcja falowa, wektor stanu, stan układu są używane równoważnie. W ogólności funkcja falowa jest funkcją o wartościach zespolonych, choć w szczególnych przypadkach może mieć wartości rzeczywiste (liczby rzeczywiste są szczególnym przypadkiem liczb zespolonych). W różnych zagadnieniach fizycznych przestrzenie Hilberta mogą być różne.

Przestrzenie Hilberta są to przestrzenie liniowe (wektorowe), unitarne i zupełne.

Niech $x, y, z, \ldots$ będą wektorami, elementami pewnej przestrzeni $\{\mathcal{L}\}$ a $\alpha, \beta, \gamma, \ldots$ liczbami (w ogólności zespolonymi). Określimy dwa działania: "mnożenie" wektorów przez liczby $\alpha \cdot x$ oraz "dodawanie" wektorów $x + y$. Przestrzeń $\mathcal{L}$ nazywa się liniową (wektorową) jeżeli dla dowolnych jej elementów $x, y \in \mathcal{L}$ i dowolnych liczb $\alpha, \beta \in C$ (C - zbiór liczb zespolonych) $\alpha \cdot x \in \mathcal{L}$ oraz $x + y = y + x \in \mathcal{L}$ przy czym działania spełniają następujące warunki:

$$(\alpha + \beta) \cdot x = \alpha \cdot x + \beta \cdot x, \qquad \alpha \cdot (x + y) = \alpha \cdot x + \alpha \cdot y \tag{1}$$

$$(\alpha\beta) \cdot x = \alpha \cdot (\beta \cdot x), \qquad (x + y) + z = x + (y + z), \qquad 1 \cdot x = x \tag{2}$$

W szczególności istnieje wektor zerowy $\hat{0}$ taki, że $0 \cdot x = \hat{0}$ i $x + \hat{0} = \hat{0} + x = x$, oraz dla każdego elementu x_0 istnieje element przeciwny y_0 ($x_0 + y_0 = \hat{0}$).

Każdy zbiór elementów z określonymi powyżej regułami "dodawania" i "mnożenia" jest wektorową przestrzenią liniową. Jeżeli na elementach tej przestrzeni określimy iloczyn skalarny to taka przestrzeń jest unitarna.

Każdej parze wektorów $x, y \in \mathcal{L}$ przyporządkujemy liczbę (w ogólności zespoloną) (x, y) – iloczyn skalarny. Musi ona spełniać następujące warunki:

$$(x, y) = (y, x)^* \qquad (x, \alpha y) = \alpha(x, y) \qquad (x_1 + x_2, y) = (x_1, y) + (x_2, y) \qquad (x, x) \geq 0, \tag{3}$$

przy czym w ostatnim warunku zero występuje tylko wtedy gdy $x = \hat{0}$. Gwiazdka w pierwszej równości oznacza sprzężenie zespolone.

Iloczyn (x, x) nazywa się kwadratem długości wektora x, a jego długość $|x| = \sqrt{(x, x)}$.

Warto przypomnieć definicję iloczynu skalarnego wektorów w zwykłej 3-wymiarowej przestrzeni. Dla dowolnej pary wektorów $\vec{a}$ i $\vec{b}$ określa się go jako:

$$(a, b) \equiv \vec{a} \cdot \vec{b} = |\vec{a}||\vec{b}| \cos(\vec{a}, \vec{b}) \tag{4}$$

Wprowadzając bazę trzech ortogonalnych wektorów jednostkowych $\{\vec{e}_i\}, i = 1, 2, 3$ (co jest łatwiej uogólnić na n wymiarów niż często stosowany zapis bazy w postaci wektorów $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$) możemy zapisać:

$$\vec{a} = \sum_{i=1}^{3} \vec{e}_i \, a_i \qquad \vec{b} = \sum_{i=1}^{3} \vec{e}_i \, b_i \tag{5}$$

oraz

$$(a,b) \equiv \vec{a}\cdot\vec{b} = \sum_{i=1}^{3} \vec{e}_i\, a_i \cdot \sum_{j=1}^{3} \vec{e}_j\, b_j = \sum_{i,j=1}^{3} a_i\, b_j\, \vec{e}_i\cdot\vec{e}_j = \sum_{i,j=1}^{3} a_i\, b_j\, \delta_{i,j} = \sum_{i=1}^{3} a_i\, b_i \qquad (6)$$

Po drodze skorzystaliśmy z faktu, że iloczyn skalarny wektorów bazy $\vec{e}_i\cdot\vec{e}_j = 1$ jeżeli $i = j$ lub 0 jeżeli $i \neq j$, co oznaczyliśmy symbolem Kroneckera $\delta_{i,j}$.

Wzór końcowy (6) nadaje się znakomicie do uogólnienia definicji iloczynu skalarnego na dowolne przestrzenie wektorowe (także funkcyjne, tzn. takie których elementami są funkcje, także zespolone) o dowolnej liczbie wymiarów, skończonej, nieskończonej przeliczalnej, lub nieskończonej nieprzeliczalnej.

W przypadku przestrzeni wektorowej o skończonej liczbie n – wymiarów mamy

$$(x,y) = \sum_{i=1}^{n} x_i^*\, y_i \qquad (7)$$

a dla nieskończonej przeliczalnej liczby wymiarów

$$(x,y) = \sum_{i=1}^{\infty} x_i^*\, y_i\ . \qquad (8)$$

Jeżeli funkcje $f(x), g(x)$ określone są na swojej dziedzinie $x \in D$, to można je traktować jako wektory o nieskończonej nieprzeliczalnej liczbie wymiarów, tak, że $f(x_0), g(x_0)$ są składowymi wektorów f, g w punkcie x_0. Wówczas iloczyn skalarny wyraża się jako:

$$(f,g) = \int_D f^*(x)\, g(x) dx \qquad (9)$$

Dziedzina D może być obszarem domkniętym, np. pewnym przedziałem $[a,b]$, lub otwartym, np. $(-\infty,\infty)$, w zależności od konkretnego problemu.

Przestrzeń Hilberta jest przestrzenią unitarną i zupełną. Definicji zupełności nie przytaczam, bo jest dla Państwa zbyt trudna (wymaga dodatkowej wiedzy matematycznej zwiazanej z pojęciem ciagłości). Intuicyjnie można wyczuć, że przestrzeń ta zawiera wszystkie możliwe wektory.

W przestrzeni wektorowej, unitarnej i zupełnej istnieje baza ortogonalnych wektorów jednostkowych, przy pomocy której można wyznaczyć dowolny wektor w tej przestrzeni, podobnie jak dowolny wektor w zwykłej przestrzeni 3–wymiarowej można wyznaczyć przy pomocy trzech wektorów jednostkowych skierowanych wzdłuż 3-ch osi wzajemnie prostopadłych.

2.2 Postulat o przyporządkowaniu

Postulat 2 Wielkości fizyczne *reprezentowane są w mechanice kwantowej przez operatory liniowe, samosprzężone (hermitowskie).*

Operatory (tam gdzie występują niejawnie, tzn. jako symbol) będziemy oznaczali literą z daszkiem, np. $\hat{x}, \hat{p}_x, \hat{Q}$ itp.

Przyporządkowanie podstawowe

Równania mechaniki kwantowej można sformułować w różnych *"językach"* zwanych reprezentacjami. Podstawowe są reprezentacje: położeniowa, pędowa i energetyczna. Wszystkie te opisy są równoważne, z tym że niektóre konkretne problemy łatwiej rozwiązuje się w jednej reprezentacji a inne w innych. W naszych zastosowaniach wystarczy posługiwać się reprezentacją położeniową, o której piszę poniżej.

W reprezentacji położeniowej operator położenia $\hat{x}$ ma najprostszą możliwą postać, tzn. jest operatorem mnożenia przez liczbę x, wartość współrzędnej. Zatem działanie operatora $\hat{x}$ jest określone następująco:

$$\hat{x}\, f(x) = x\, f(x) \tag{10}$$

Analogicznie są określone operatory $\hat{y}$ i $\hat{z}$. Cała trójka tych operatorów $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) = \hat{\vec{r}}$ stanowi operator wektorowy $\hat{\vec{r}}$.

Bardzo ważną rolę odgrywają operatory $(\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z) = \hat{\vec{p}}$, składowe wektorowego operatora pędu. Ich jawna postać (w reprezentacji położeniowej) jest następująca:

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\,, \qquad \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}\,, \qquad \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}\,. \tag{11}$$

Zatem działanie jednej ze składowych operatora pędu, np. $\hat{p}_x$ polega na zróżniczkowaniu funkcji (na którą działa operator) po odpowiedniej współrzędnej i domnożeniu przez stałą $-i\hbar$ zapewniającą odpowiednie jednostki.

$$\hat{p}_x\, \Psi(x,y,z) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\, \Psi(x,y,z) = -i\hbar\, \frac{\partial \Psi(x,y,z)}{\partial x} \tag{12}$$

i analogicznie dla pozostałych składowych.

Powyższe przyporządkowanie operatorów położenia i pędu nazywa się przyporządkowaniem podstawowym. Na marginesie dodam, że przyprządkowanie to wiąże się dość ściśle z mechaniką klasyczną w tzw. sformułowaniu Hamiltonowskim.

Warto zauważyć, że wynik kolejnego działania dwóch operatorów może zależeć od kolejności działań. W ogólności $\hat{P}\,\hat{Q} \neq \hat{Q}\,\hat{P}$. Na przykład, $\hat{x}\,\hat{y} = \hat{y}\,\hat{x}$, ponieważ mnożenie liczb jest przemienne, $\hat{x}\,\hat{p}_y = \hat{p}_y\,\hat{x}$ ponieważ mnożenie przez jedną współrzędną jest przemienne z różniczkowaniem po innej, ale $\hat{x}\,\hat{p}_x \neq \hat{p}_x\,\hat{x}$. Widać to dokładnie w działaniach na dowolną funkcję $f(x,y,z)$:

$$\hat{x}\,\hat{p}_x\, f(x) = -i\hbar\, x\, \frac{\partial f(x,y,z)}{\partial x} \tag{13}$$

oraz z własności pochodnej iloczynu

$$\hat{p}_x\,\hat{x}\, f(x) = -i\hbar\, \frac{\partial}{\partial x}(x\, f(x,y,z)) = -i\hbar\,(1 \cdot f(x,y,z) + x \frac{\partial f(x,y,z)}{\partial x}) \tag{14}$$

Dlatego definiujemy komutator $[\hat{P}, \hat{Q}]$ operatorów jako:

$$[\hat{P}, \hat{Q}] = \hat{P}\,\hat{Q} - \hat{Q}\,\hat{P} = -[\hat{Q}, \hat{P}] \tag{15}$$

Jeżeli operatory są przemienne to ich komutator wynosi zero i mówimy o nich, że komutują. Natomiast odejmując stronami równanie (14) od (13) otrzymujemy

$$[\hat{x}, \hat{p}_x]\, f(x,y,z) = -i\hbar\, f(x,y,z) \qquad \text{czyli} \qquad [\hat{x}, \hat{p}_x] = -i\hbar\,. \tag{16}$$

O operatorach, które nie są przemienne (ich komutator jest różny od zera) mówimy, że nie komutują. Operatory $\hat{P}, \hat{Q}$, dla których $[\hat{P}, \hat{Q}] = \pm i\hbar$ nazywają się kanonicznie sprzężone. Kanonicznie sprzężone są zawsze te same składowe operatorów położenia i pędu w dowolnej reprezentacji.

Przyporządkowanie wtórne

Wielkościom fizycznym, które w fizyce klasycznej są funkcjami współrzędnych i pędów przyporządkowane są w mechanice kwantowej operatory, będące takimi samymi funkcjami operatorów współrzędnych i pędów. Np. energia kinetyczna pojedynczego ciała wyraża się klasycznie jako $E_{kin} = T = \frac{mv^2}{2} = \frac{(mv)^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}$, ponieważ klasyczny pęd $\vec{p} = m\vec{v}$.

Zatem operator energii kinetycznej $\hat{T}$ otrzymamy zastępując w klasycznym wyrażeniu $\vec{p}$ operatorem $\hat{\vec{p}}$. Ponieważ

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial x}\right) = -i\hbar\,\vec{\nabla} \tag{17}$$

to

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\nabla^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\Delta\,. \tag{18}$$

Operator wektorowy ∇ nazywa się gradientem, a jego kwadrat Δ Laplasjanem. W szczególnym przypadku np. ruchu w jednym wymiarze operator ten przyjmie prostszą postać (wkład da tylko jedna składowa pędu, np. x-owa):

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\partial^2}{\partial x^2}\,. \tag{19}$$

Ponieważ energia potencjalna w fizyce klasycznej zależy tylko od położenia, $E_{pot} = V = V(x,y,z)$, to odpowiedni operator energii potencjalnej w mechanice kwantowej jest po prostu operatorem mnożenia przez liczbę, wartość funkcji $V(x,y,z)$. Czyli $\hat{V} = V(x,y,z)$. W przypadku 1-wymiarowym $\hat{V} = V(x)$.

W mechanice klasycznej energia całkowita pojedynczej cząstki w polu sił potencjalnych jest sumą energii kinetycznej i potencjalnej $E = E_{kin} + E_{pot} = T + V$. W mechanice kwantowej reprezentuje ją operator całkowitej energii, zwany Hamiltonianem, $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$. Dla jednej cząstki będzie on miał postać:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\Delta + V(x,y,z)\,, \tag{20}$$

co w przypadku 1-wymiarowym upraszcza się do

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\,. \tag{21}$$

Innym ważnym w zastosowaniach operatorem jest operator (wektorowy) momentu pędu. W fizyce klasycznej moment pędu $\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p}$, którego składowe możemy określić z wyznacznika:

$$\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix} , \tag{22}$$

gdzie $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ są to wektory jednostkowe w kierunkach osi układu. Zatem kolejne składowe wynoszą: $l_x = (y\, p_z - z\, p_y)$, itd. cyklicznie $[l_y = (z\, p_x - x\, p_z)$ oraz $l_z = (x\, p_y - y\, p_x)]$.

Operator momentu pędu otrzymamy zastępując w powyższych wzorach współrzędne i pędy przez odpowiednie operatory:

$$\hat{\vec{l}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} = -i\hbar \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix} . \tag{23}$$

Układy fizyczne mikroświata wykazują też osobliwe własności, które nie mają klasycznych odpowiednków (np. spin cząstek elementarnych, dziwność, "kolor", "zapach"). Tych (mierzalnych) wielkości fizycznych nie daje się w żaden sposób wyrazić przy pomocy współrzędnych i pędów. Można je natomiast reprezentować w teorii wprowadzając odpowiednie operatory i podając reguły ich komutacji z innymi znanymi operatorami. Takie postępowanie nazywa się przyporządkowaniem nieklasycznym i całkowicie wystarcza do przeprowadzania obliczeń i porównywania teorii z eksperymentem.

Wszystkie operatory reprezentujące wielkości fizyczne muszą być samosprzężone (inaczej hermitowskie). Jeżeli dla dowolnych funkcji f, g zachodzi $(f, \hat{P}\, g) = (\hat{Q}\, f, g)$, to operator $\hat{Q}$ nazywa się sprzężonym (po hermitowsku) do operatora $\hat{P}$ i zapisuje to jako $\hat{Q} = \hat{P}^\dagger$. Jeżeli przy tym $\hat{Q} = \hat{P}$, to operator $\hat{P}$ jest samosprzężony, $\hat{P} = \hat{P}^\dagger$ czyli taki, dla którego zachodzi zawsze (czyli dla dowolnych funkcji f, g z jego dziedziny) warunek:

$$(f, \hat{P}\, g) = (\hat{P}\, f, g) \, . \tag{24}$$

2.3 Postulat o wartościach własnych

Postulat 3 *Jedynymi możliwymi wartościami pomiaru wielkości fizycznej p reprezentowanej przez operator $\hat{P}$ są wartości własne tego operatora.*

Równanie operatorowe

$$\hat{P}\, f = p\, f \tag{25}$$

nazywa się równaniem własnym operatora $\hat{P}$. Rozwiązać równanie własne znaczy znaleźć wszystkie liczby p_i (wartości własne) oraz wszystkie funkcje (wektory własne, funkcje własne) f_i spełniające związki:

$$\hat{P}\, f_i = p_i\, f_i \, . \tag{26}$$

Postulat 3 oznacza, że jeżeli znamy operator $\hat{P}$ w konkretnym problemie i umiemy rozwiązać zagadnienie (26), to możemy (jeszcze przed dokonaniem pomiarów) przewidzieć wszystkie możliwe wyniki pomiaru. Konkretny pomiar musi dać jedną z tych wartości (z dokładnością do błędu przyrządu pomiarowego).

Zbiór wszystkich wartości własnych operatora nazywamy widmem. Operatory samosprzężone są szczególnie ważne ponieważ ich wartości własne muszą być rzeczywiste i ich funkcje własne tworzą ortogonalne bazy odpowiednich przestrzeni (mogą pełnić rolę wektorów bazy). Można to ściśle udowodnić. Widmo operetora może być dyskretne (wartości własne dają się ponumerować) lub ciągłe. Dyskretne jest np. widmo operatorów momentu pędu (całkowite wielokrotności $\hbar$) oraz operatora energii układów związanych. Ciagłe są np. widma operatorów położenia, pędu, energii kinetycznej i energii układów niezwiązanych.

Dla przykładu rozważmy atom wodoru, układ związany protonu i elektronu. Jeżeli jest on odosobniony, to operator energii elektronu w atomie ma postać (20). Umiemy rozwiązać równanie własne dla tego operatora z odpowiednim potencjałem V sił elektrostatycznych działających między elektronem i protonem:

$$\hat{H}\Psi_n(x,y,z) = [-\frac{\hbar^2}{2m}\,\Delta + V(x,y,z)]\Psi_n(x,y,z) = E_n\Psi_n(x,y,z)\ . \tag{27}$$

W najprostszym przypadku otrzymujemy te same wartości własne energii co w modelu Bohra atomu wodoru. Ale uzupełniając ten operator o człony dodatkowe (np. oddziaływanie orbitalnego i wewnętrznego momentu magnetycznego, uwzględniając teorie względności) możemy rozwiązać ten kwantowy problem dużo bardziej dokładnie. Pomiary potwierdziły wszystkie wnioski płynące z tych rozwiązań.

Stan z $n = 1$, czyli stan $\Psi_1(x,y,z)$ odpowiadający najniższej energii nazywa się stanem podstawowym a energia E_1 - energią stanu podstawowego.

2.4 Postulat o wartości średniej

Postulat 4 *Wykonajmy długą serię pomiarów wielkości fizycznej p, której przyporządkowany jest operator $\hat{P}$. Przed każdym pomiarem układ fizyczny na którym wykonujemy pomiar był w takim samym stanie oznaczonym funkcją (wektorem stanu) Ψ. Wówczas $\overline{p}$ – średnia wartośc wszystkich pomiarów wyniesie:*

$$\overline{p} = (\Psi, \hat{P}\Psi)\ . \tag{28}$$

Ten postulat podsumowuje probabilistyczną interpretację mechaniki kwantowej. Rozważmy pewne przypadki szczególne i wyprowadźmy kilka wniosków z tego postulatu.

- Jeśli zachodzi $\hat{P}\,\Psi = p\,\Psi$, tzn. stan Ψ jest stanem własnym operatora $\hat{P}$ o wartości własnej p, to

$$\overline{p} = (\Psi, \hat{P}\Psi) = (\Psi, p\Psi) = p(\Psi,\Psi) = p\ , \tag{29}$$

ponieważ w mechanice kwantowej posługujemy się wyłacznie funkcjami unormowanymi, $(\Psi, \Psi) = 1$. W takim przypadku każdy pomiar da tę samą wartość p i średnia też wynosi p.

Tak bywa np. przy pomiarach energii atomów gazów (w temperaturach pokojowych). Ponieważ każdy z nich jest w stanie podstawowym, każdy pomiar da tę samą wartość, energię stanu podstawowego.

- Stan Ψ nie jest stanem własnym operatora $\hat{P}$, którego widmo jest dyskretne. Wówczas znając rozwiązanie zagadnienia własnego $\hat{P}\,\phi_i = p_i\,\phi_i$ możemy przeprowadzić następujące rozumowanie. Skorzystamy z faktu, że zbiór funkcji własnych $\{\phi_i\}$ operatora samosprzężonego stanowi bazę przestrzeni Hilberta, w której dowolną inną funkcję (np. Ψ) można przedstawić jako

$$\Psi = \sum_i c_i\,\phi_i \qquad \text{gdzie} \qquad c_i = (\phi_i, \Psi) \tag{30}$$

Wówczas

$$\begin{aligned} \overline{p} &= (\Psi, \hat{P}\Psi) = \left(\sum_i c_i\,\phi_i, \hat{P}\sum_i c_j\,\phi_j\right) = \sum_{i,j} c_i^* c_j\,(\phi_i, \hat{P}\,\phi_j) = \sum_{i,j} c_i^* c_j (\phi_i, p\,\phi_j) \\ &= \sum_{i,j} c_i^* c_j\,p_j\,(\phi_i, \phi_j) = \sum_{i,j} c_i^* c_j p_j \delta_{i,j} = \sum_i |c_i|^2\,p_i\ , \end{aligned} \tag{31}$$

gdzie wykorzystaliśmy liniowość przestrzeni (równania (1-3)), równanie własne i ortonormalność funkcji bazy (tzn. $(\phi_i, \phi_j) = \delta_{i,j}$, patrz dyskusja poniżej wzoru (6)).

Aby zinterpretować ten wynik przypomnijmy sobie pojęcie średniej wielu pomiarów w doświadczeniu. Jeżeli w serii pomiarów otrzymaliśmy wartości p_i powtórzone n_i razy ($n_i \geq 0$), to wartością średnią (arytmetyczną) będzie suma wszystkich wartości podzielona przez liczbę wszystkich pomiarów $N = \sum_i n_i$. Zatem

$$\overline{p} = \frac{\sum_i n_i\,p_i}{N} = \sum_i \frac{n_i}{N}\,p_i. \tag{32}$$

Czynniki $\frac{n_i}{N}$ oznaczają stosunek liczby n_i wyników p_i do liczby wszystkich wyników czyli doświadczalne prawdopodobieństwo otrzymania w pojedynczym pomiarze wyniku p_i. Porównując ostatnie wyrazy równań (31) i (32) widzimy, że taki sens mają liczby $|c_i|^2$, które możemy obliczyć znając wektor stanu Ψ i zagadnienie własne operatora $\hat{P}$.

Zatem, choć postulat nie pozwala nam przewidzieć, jaki wynik otrzymamy w konkretnym, pojedynczym pomiarze, to pozwala przewidzieć prawdopodobieństwa z jakimi różne wymiki pomiarów muszą się pojawiać. Przy dużej liczbie pomiarów otrzymujemy przewidywania rozkładu wyników pomiarów z bardzo dużą dokładnością.

- Stan Ψ nie jest stanem własnym operatora $\hat{P}$, którego widmo jest ciągłe. Niech będzie to operator położenia $\hat{P} = \hat{x}$ (dla prostoty przyjmijmy problem 1-wymiarowy). W tym przypadku iloczyn skalarny wektorów jest określony w postaci całkowej (8). Mamy wtedy

$$\overline{x} = (\Psi, \hat{x}\,\Psi) = \int \Psi^*(x)\,x\,\Psi(x)\,dx = \int |\Psi(x)|^2\,x\,dx\ . \tag{33}$$

Wzór końcowy (33) jest analogiczny do (32), tylko ze względu na ciągłośc widma operatora $\hat{x}$ (którego wartość własna x może przybierać dowolne wartości ciągłe) sumowanie zostało zastąpione całkowaniem. Zatem $|\Psi(x)|^2$ oznacza teraz nie prawdopodobieństwo ale gęstość prawdopodobieństwa. Aby otrzymać prawdopodobieństwo, że przy pomiarze położenia x cząstki znajdującej się w stanie kwantowym Ψ, wynik znajdzie się w przedziale (x_0, x_0+dx) (dx bardzo małe) trzeba gęstość prawdopodobieństwa w punkcie x_0 pomnożyć przez szerokość przedziału: Prawdopodobieństwo $= |\Psi(x)|^2\, dx$.

W przypadku 3-wymiarowym $|\Psi(x,y,z)|^2$ oznacza gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w punkcie (x,y,z), a $|\Psi(x,y,z)|^2\, dxdydz$ prawdopodobieństwo znalezienia jej w elemencie objętości $dV = dxdydz$ wokól tego punktu (dx, dy, dz bardzo małe).

Np. stan podstawowy elektronu w atomie wodoru zależy tylko od zmiennej radialnej $r = \sqrt{x^2+y^2+z^2}$ i wyraża się następująco:

$$\Psi_{n=1}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}\, e^{-r/a_0}\ , \tag{34}$$

gdzie a_0 jest promieniem Bohra. Jeżeli warunek unormowania zapiszemy w zmiennych sferycznych (r, ϑ, φ) to widać, że $|\Psi_{n=1}(r)|^2$ odgrywa rolę gęstości prawdopodobieństwa znalezienia elektronu w określonej odległości r od protonu a $|\Psi_{n=1}(r)|^2\, dV$, gdzie $dV = 4\pi\, r^2\, dr$, jest prawdopodobieństwem, że elektron znajduje się w warstwie kuli o promieniu w przedziale $[r, r+dr]$. Można to zapisać w postaci:

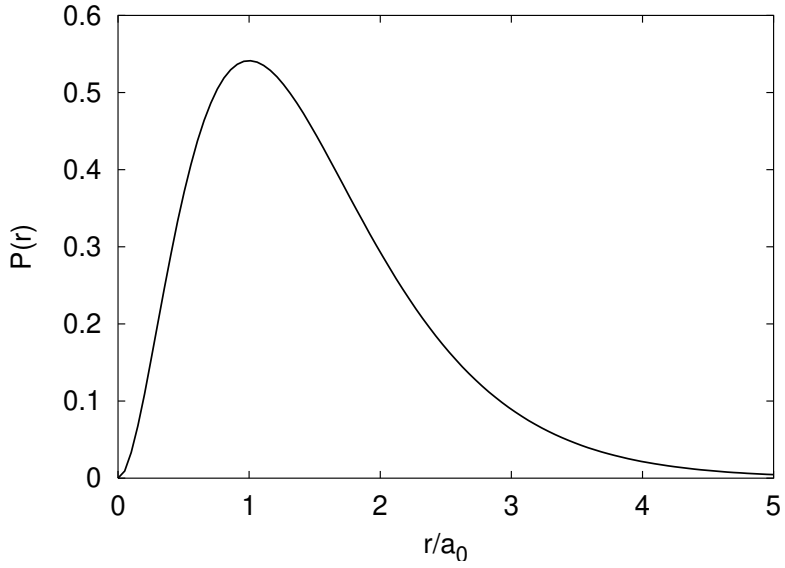
$$|\Psi_{n=1}(r)|^2\, dV = \left(\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}\, e^{-r/a_0}\right)^2 (4\pi r^2 dr) = P(r)\, dr$$

Zatem

$$P(r) = \frac{4r^2}{a_0^3}\, e^{-2r/a_0}$$

jest szukaną gestością prawdopodobieństwa radialnego rozkładu położenia elektronu. Na Rys. 1. przedstawiłem wykres tej funkcji, z którego widać, że najbardziej prawdopodobna odległość elektronu od protonu jest równa promieniowi Bohra, ale elektron może sie znaleźć zarówno bliżej jak i dalej od protonu z mniejszym prawdopodobieństwem. Pomiary potwierdzają te obliczenia teoretyczne.

Na podstawie postulatu o wartości średniej można udowodnić bardzo ważną zasadę obowiązującą w mechanice kwantowej, mianowicie zasadę nieoznaczoności. Mówi ona o niepewnościach równoczesnych pomiarów dwóch wielkości fizycznych wykonanych na tym samym stanie układu fizycznego. Miarą takiej niepewności (dla jednej wielkości fizycznej p) jest średnie odchylenie kwadratowe od wartości średniej co oznaczamy przez $\overline{(\Delta p)^2}$ lub w skrócie $(\Delta p)^2$. Dla wielkości fizycznych p i q, które reprezentują odpowiednio operatory $\hat{P}$ i $\hat{Q}$ można udowodnić następujące twierdzenie.



Rysunek 1: Gestość prawdopodobieństwa radialnego położenia elektronu w stanie podstawowym atomu wodoru. Promień Bohra atomu wodoru oznaczony jest przez a_0.

Przy jednoczesnym pomiarze p i q na układzie którego stan reprezentuje Ψ zachodzi

$$\overline{(\Delta p)^2}\,\overline{(\Delta q)^2} = (\Delta p)^2\,(\Delta q)^2 \geq -\frac{1}{4}\{\left(\Psi, [\hat{P},\hat{Q}]\Psi\right)\}^2\,. \tag{35}$$

Jeżeli za $\hat{P}$ i $\hat{Q}$ podstawimy parę operatorów sprzężonych kanonicznie, jak np. $\hat{x}$ i $\hat{p}_x$ to ponieważ $[\hat{x},\hat{p}_x] = i\hbar$ oraz $(\Psi,\Psi) = 1$ otrzymamy

$$(\Delta x)^2\,(\Delta p_x)^2 \geq -\frac{1}{4}\{\,(\Psi, [\hat{x},\hat{p}_x]\Psi)\,\}^2 = -\frac{1}{4}(i\hbar)^2 = \frac{\hbar^2}{4}\,. \tag{36}$$

lub jeszcze prościej

$$(\Delta x)\,(\Delta p_x) \geq \frac{\hbar}{2}\,. \tag{37}$$

To jest słynna zasada nieoznaczoności Heisenberga. Oznacza ona, w sensie statystycznym, że jeśli staramy się zwiekszyć dokładność pomiarów jednej z tych wielkości, np. położenia (przez zmniejszenie średniego odchylenia kwadratowego) to jednocześnie dokładność pomiaru odpowiedniej składowej pędu maleje odwrotnie proporcjonalnie. W skrajnym przypadku, jeśli uda nam się uda zmierzyć idealnie dokładnie jedną wielkość, np. z pomiarów $(\Delta x) = 0$ to całkowicie stracimy informację o sprzężonej z x składowej pędu ponieważ z (36) wynika, że wtedy $(\Delta p_x) \geq \hbar/(2\Delta x) \to \infty$. Doświadczenie całkowicie potwierdza te wnioski.

Fakt, że stała Plancka jest wielkością bardzo małą ($\hbar = 1.0546 \cdot 10^{-34}$ J·s) powoduje, że konsekwencje zasady nieoznaczoności nie dają się zauważyć nawet dla bardzo małych obiektów makroskopowych. I tak np. jeżeli zlokalizujemy makroskopowy obiekt o rozmiarach liniowych rzędu mikrometra (10^{-6} m) to jeśli jego gęstość odpowiada gęstości wody (1 g/cm^3), niepewność wyznaczenia prędkości jest $\Delta v \geq 10^{-11}$ cm/s. Jest do dokładność, której praktycznie nie można osiągniąć w eksperymencie. Natomiast jeżeli jeżeli zlokalizujemy obiekt atomowy o rozmiarach

rzędu angstrema (10^{-10} m), to przy takiej samej gestości niepewność jednoczesnego pomiaru prędkości staje się większa od 1 km/s !!!

Zasada nieoznaczoności jest odbiciem tego, że obiekty mikroświata mają jednocześnie własności korpuskularne i falowe. Lokalizacja (dokładny pomiar położenia) podkreśla własności korpuskularne, zamazując własności falowe. Odwrotnie, dokładniejszy pomiar pędu podkreśla własności falowe zamazując jednocześnie korpuskularne (przez co pomiar położenia staje się bardzo niedokładny). Wrócę jeszcze do tych spraw przy omawianiu następnego postulatu o rozwoju układu w czasie.

2.5 Postulat o rozwoju układu w czasie

Z postulatu o wartości średniej wynika probabilistyczna interpretcja przewidywań mechaniki kwantowej. Można zapytać: czy w mechanice kwantowej nie obowiązuje znana z mechaniki klasycznej przyczynowość?. Czy w mikroświecie przestają obowiązywać przyczynowe prawa przyrody tzn. takie, że określone przyczyny, w jednakowych warunkach wywołują zawsze takie same skutki?

Odpowiedź na to pytanie jest przecząca. Prawa rządzące zamianami układu w czasie są przyczynowe (deterministyczne) ale w trochę innym sensie niż w fizyce klasycznej. Deterministyczne są zmiany w czasie wektora stanu układu fizycznego (funkcji falowej). Ponieważ wyniki przyszłych pomiarów są związane z wektorem stanu w sposób probabilistyczny, można je przewidzieć również tylko w taki sam, probabilistyczny sposób.

Postulat 5 *Jeżeli układ fizyczny jest izolowany, to jego wektor stanu Ψ zmienia się w czasie zgodnie z równaniem*

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\,\Psi \ , \tag{38}$$

gdzie $\hat{H}$ jest Hamiltonianem tego układu (operatorem całkowitej energii układu).

Równanie (38) nazywa się równaniem Schrödingera zależnym od czasu albo równaniem Schrödingera z czasem. Jest ono deterministyczne, ale pozwala przewidzieć wektor stanu, który nie jest bezpośrednio mierzalny.

Przedyskutujmy teraz najważniejsze wnioski płynące z postulatu 5 o rozwoju w czasie. Dla prostoty rozważań matematycznych założmy, że rozważamy pojedynczą cząstkę w polu sił potencjalnych. Jeżeli układ jest izolowany to jego energia całkowita jest stała (nie wymienia energii z otoczeniem), zatem jego Hamiltonian nie zależy od czasu i przyjmuje postać (20) w przypadku 3-wymiarowym albo (21) w przypadku 1-wymiarowym. Rozważania są najprostsze w tym ostatnim przypadku ale ich uogólnienie na przypadek 3-wymiarowy a nawet $3n$-wymiarowy (dla układu n cząstek jest trywialnie proste). Równanie (38) z Hamiltonianem (21) przyjmuje postać:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \Psi(x,t) \ , \tag{39}$$

gdzie jest oczywiste, że wektor stanu $\Psi(x,t)$ musi zależeć od współrzędnych x i t.

W teorii równań różniczkowych znana jest standardowa metoda ich rozwiązywania – metoda rozdzielania (separacji) zmiennych. Poszukuje się rozwiązań w postaci funkcji o rozdzielonych zmiennych (i jeśli takie rozwiązanie istnieje to jest jedyne).

Zatem poszukujemy rozwiązań równania (39) w postaci:

$$\Psi(x,t) = \phi(x)\, f(t)\ . \tag{40}$$

Podstawiając to poszukiwane rozwiązanie do (39) otrzymujemy:

$$i\hbar\ \phi(x)\,\frac{d}{dt}f(t) = f(t)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\phi(x)\ , \tag{41}$$

ponieważ, przy różniczkowaniu po x funkcja $f(t)$ jest traktowana jak stała (i tak samo $\phi(x)$ przy różniczkowaniu po t). Dzieląc obie strony tego równania przez poszukiwaną funkcję (40) otrzymujemy równanie:

$$\frac{i\hbar}{f(t)}\,\frac{d}{dt} = \frac{1}{\phi(x)}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\phi(x) \quad = \quad E\ . \tag{42}$$

Zauważmy, że lewa strona tego równania zależy wyłącznie od zmiennej t, a prawa tylko od zmiennej x. Taka równość, dla dowolnych wartości zmiennych może zachodzić tylko wtedy gdy każda z tych funkcji jest tą samą stałą. Oznaczmy tę stałą przez E.

Przyrównując prawą stronę do E otrzymamy po pomnożeniu przez $\phi(x)$ równanie własne operatora energii układu.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\phi(x) = E\,\phi(x) \tag{43}$$

czyli równanie własne

$$\hat{H}\,\phi_n(x) = E_n\,\phi_n(x)\ . \tag{44}$$

To równanie nazywa się równaniem Schrödingera niezależnym od czasu. Widać stąd, że stała E musi mieć wartość jednej z wartości własnych operatora energii (dla prostszego zapisu dalszych zwiazków założyłem, że jego widmo jest dyskretne).

Przyrównując do stałej E_n lewą stronę równania (42) otrzymamy (po podzieleniu przez $(i\hbar)$ równanie różniczkowe:

$$\frac{d\left[\ln f(t)\right]}{dt} = -\frac{i}{\hbar}\,E_n\ , \tag{45}$$

które można bezpośrednio scałkować. Rozwiązaniem jest funkcja

$$f(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n\,t}\ .$$

W ten sposób otrzymaliśmy pełne rozwiązanie równania Schrödingera zależnego od czasu w postaci funkcji o rozdzielonych zmiennych przestrzennych i czasowych

$$\Psi_n(x,t) = \phi_n(x)\,e^{-\frac{i}{\hbar}E_n\,t}\ . \tag{46}$$

Rozwiązanie (46), będące tzw. rozwiązaniem szczególnym, mimo że jawnie zależy od czasu, odpowiada stanowi stacjonarnemu układu (stanowi, w którym gęstości prawdopodobieństwa, wartości średnie, nie zależą od czasu). Wynika to z faktu, że kwadrat modułu funkcji $f(t)$ wynosi 1, zatem $|\Psi(x,t)|^2 = |\phi(x)|^2$ nie zależy od t. Ale ponieważ równanie (38) jest liniowe to istnieją rozwiązania ogólne będące kombinacjami liniowymi rozwiązań szczególnych. Rozwiązanie ogólne ma więc postać:

$$\Psi(x,t) = \sum_n a_n \, \Psi_n(x,t) = \sum_n a_n \, \phi_n(x) \, e^{-\frac{i}{\hbar} E_n \, t} \; , \tag{47}$$

gdzie a_n są to współczynniki, które można obliczyć z warunków początkowych, tzn. ze znajomości wektora stanu w chwili początkowej $\Psi(x, t=0) \equiv \Psi_0(x)$. Jeżeli go znamy (np. z wcześniej przeprowadzonych pomiarów) to zgodnie z (47) można ten wektor wyrazić w następujący sposób (ponieważ dla $t = 0$, $e^0 = 1$):

$$\Psi_0(x) = \sum_i a_i \, \Psi_i(x, t=0) = \sum_i a_i \, \phi_i(x) \tag{48}$$

Ponieważ $\phi_i(x)$, funkcje Hamiltonianu tworzą bazę ortonormalną to po pomnożeniu skalarnie równania (48) przez jeden z wektorów bazy $\phi_n(x)$ otrzymujemy wartość współczynnika a_n:

$$(\phi_n(x), \Psi_0(x)) = (\phi_n(x), \sum_i a_i \, \phi_i(x)) = \sum_i a_i \, (\phi_n(x), \phi_i(x)) = \sum_i a_i \, \delta_{i,j} = a_n \; . \tag{49}$$

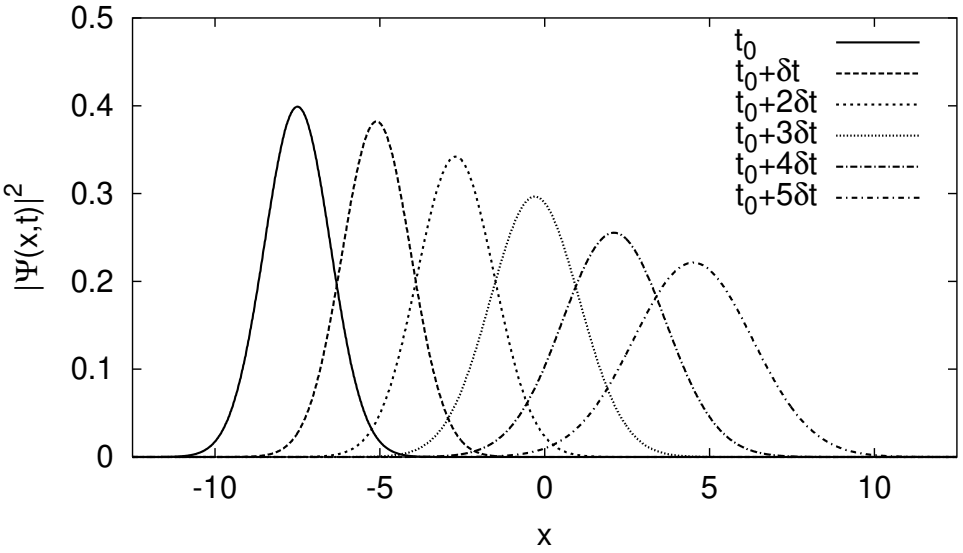
Funkcja (47) opisuje stan niestacjonarny. Związana z nią gęstość prawdopodobieństwa zmienia się w czasie, to samo dotyczy wartości średnich dowolnych operatorów. Tak więc znając wektor stanu układu w chwili początkowej można obliczyć go w dowolnej chwili późniejszej jak również przewidywać (w sensie prawdopodobieństw) wyniki przyszłych pomiarów.

Nieco bardziej skomplikowany (technicznie) jest przypadek, gdy Hamiltonian ma ciągłe widmo wartości własnych. Wówczas jego równanie własne (równanie Schrödingera bez czasu) przyjmuje nieco inną postać niż (44) a mianowicie:

$$\hat{H} \, \phi(k,x) = E(k) \, \phi(k,x) \; , \tag{50}$$

gdzie zmienna k może przybierać wartości zmieniające się w sposób ciągły. Wówczas postępowanie przebiega zasadniczo tak samo ale we wzorach (47)–(49) sumowanie zostaje zastąpione odpowiednim całkowaniem co technicznie bywa znacznie trudniejsze.

Dla zilustrowania ciekawych wniosków wypływajacych z równania Schrödingera z czasem omówię (bez przeprowadzania obliczeń) ruch cząstki swobodnej np. elektronu. Załóżmy, że w chwili początkowej t_0 pomiar zlokalizował tę cząstkę w niewielkim obszarze wokół wartości x_0 i że znamy wektor tego stanu w kształcie funkcji dzwonowej Gaussa. Jest to tak zwana paczka falowa. Gęstość prawdopodobieństwa w chwili początkowej jest przedstawiona linią ciągłą na Rysunku 2. Stosunkowo proste obliczenia pozwalają wyznaczyć wektor stanu w dowolnej chwili późniejszej. Kolejne funkcje dzwonowe przedstawiają gęstości prawdopodobieństwa znalezienia znalezienia elektronu w odpowiednim położeniu w kolejnych chwilach. Widać, że z upływem



Rysunek 2: Rozpływanie się gestości prawdopodobieństwa położenia swobodnego elektronu poruszajacego się wzdłuż osi x.

czasu maksimum paczki porusza się ze stałą prędkością, faktycznie równą klasycznej prędkości cząstki swobodnej. Ale jednocześnie maksimum obniża się, a szerokość paczki rośnie. Mówimy, że paczka reprezentująca cząstkę swobodną "rozpływa sie" z czasem. Oznacza to, że przedział lokalizacji cząstki rośnie. Obliczenia pokazują, że przedział lokalizacji cząstki podwoi się po czasie

$$t = \frac{\sqrt{3}\, m\, a^2}{\hbar} \ ,$$

gdzie a jest początkową wartością przedziału lokalizacji.

W świecie makroskopowym nie obserwujemy nigdy rozpływania się cząstek. Dlaczego? Niech mały obiekt makroskopowy ma liniowe rozmiary, $a \approx 10^{-3}$ cm. Przy standardowej gestości 1 g/cm^3 jego masa jest rzędu $m \approx 10^{-9}$ g. Ponieważ $\hbar \approx 10^{-27}$ w jednostkach cgs, to $t \approx 10^{-9}\,(10^{-3})^2/10^{-27} \approx 10^{12}$ sekund czyli 30 000 lat! Aby miec szansę na zaobserwowanie rozpłynięcia się takiego pyłku na podwojony obszar musielibyśmy czekać dziesiątki tysięcy lat. Dla ciał większych czasy takie będą jeszcze większe o wiele rzędów wielkości.

Tymczasem w przypadku czastek mikroświata skala czasowa tego procesu jest bardzo krótka. Dla elektronu zlokalizowanego w przedziale rzędu jego obserwowanych rozmiarów $a \approx 10^{-8}$ cm, ponieważ masa elektronu jest rzedu 10^{-27} g, czas podwojenia przedzialu lokalizacji wynosi $t \approx 10^{-27}\,(10^{-8})^2/10^{-27} \approx 10^{-16}$ sekundy, czyli niemal natychmiast. Jest to kolejnym przejawem dualizmu korpuskularno-falowego.

Na zakończenie powiem, że historycznie równanie Schrödingera zależne od czasu zostało wcześniej "wyprowadzone" w analogii do równania fali biegnącej (dla przypadku cząstki swobodnej) a dopiero później zyskało rangę postulatu, wręcz prawa przyrody. Przypomnijmy, że fale biegnące (okresowe) reprezentowane są przez funkcje typu $\cos(kx \pm \omega t), \sin(kx \pm \omega t)$, gdzie

znak plus dotyczy fali biegnącej w lewo a minus fali biegnącej w prawo. W przestrzeni funkcji zespolonych odpowiednią falą (tzw. falą płaską) jest $\exp i(kx \pm \omega t) = \cos(kx \pm \omega t) + i \sin(kx \pm \omega t)$.

Łatwo sprawdzić, że dla cząstki swobodnej, której Hamiltonian jest operatorem energii kinetycznej (18) fala płaska spełnia równanie (38), które w tym przypadku przyjmuje postać:

$$i\hbar \frac{d}{dt} e^{i(kx-\omega t)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} e^{i(kx-\omega t)} .$$

Lewa strona wynosi

$$L = i\hbar \, e^{i(kx-\omega t)} \, (-i\omega) = \hbar\omega \, e^{i(kx-\omega t)}$$

a prawa

$$P = -\frac{\hbar^2}{2m} e^{i(kx-\omega t)} \, (ik)^2 = \frac{(\hbar k)^2}{2m} e^{i(kx-\omega t)} =$$

Zatem dla $E = \hbar\omega = \frac{(\hbar k)^2}{2m}$ równanie Schrödingera z czasem jest spełnione przez falę biegnącą w prawo (to samo otrzymujemy dla fali biegnącej w lewo). Funkcja będąca falą biegnącą jest więc rozwiązaniem szczególnym reprezentującym cząstkę swobodną, a superpozycja takich fal (inaczej kombinacja liniowa) jest rozwiązaniem ogólnym. Taka superpozycja może być zlokalizowana na niewielkim obszarze przestrzeni i w ten sposób ujmować matematycznie własności korpuskularne. Nic też dziwnego, że tego typu funkcja dobrze opisuje własności falowe cząstki, dyfrakcję i interferencję, np. przy przechodzeniu strumienia elektronów przez dwie wąskie szczeliny.

Literatura

1. S. Szpikowski, *Elementy mechaniki kwantowej*, Wydawnictwo UMCS, Lublin 1999.
2. L.I. Schiff, *Mechanika kwantowa*, PWN, Warszawa 1977.
3. B. Średniawa, *Mechanika kwantowa*, PWN, Warszawa 1970.