3.1 Kedualan gelombang-zarah

Suatu revolusi berlaku dalam fizik pada awal abad ke20. Penemuan fenomena keradioaktifan dan pemerihalan fenomena jasad hitam dan kesan fotoelektrik membawa kepada teori kuantum.

Pada skala yang sangat kecil, zarah tidak lagi bertelatah seperti bola billiard. Ia juga mempunyai sifat gelombang. Misalnya, apabila zarah-zarah elektron dilalukan menerusi sepasang celah, pola belauan dan interferens dilihat. Walaubagaimanapun, sifat kezarahannya masih kekal – walaupun keamatan zarah-zarah itu terlalu rendah sehinggakan hanya satu zarah melalui celah pada suatu masa, pola belauan masih kelihatan dalam ketibaan zarah-zarah. Ini dikenali sebagai kedualan gelombang-zarah.

Sifat zarah seakan gelombang ini membawa kepada prinsip ketakpastian Heisenberg. Ia menyatakan bahawa ada had dalam mengetahui secara tepat kedua-dua momentum dan kedudukan sesuatu zarah itu serentak,

$$\Delta p_x \Delta x \gtrsim \hbar$$

di mana $\hbar = h/2\pi$, dengan *h* mewakili pemalar Planck. Prinsip ketakpastian ini wujud bagi setiap pasangan pembolehubah yang pelengkap, seperti momentum dengan kedudukan (bagi setiap dimensi), dan tenaga dengan masa.

Bagi pembolehubah pelengkap, ukuran oleh suatu pembolehubah mengubah nilai ukuran pembolehubah yang satu lagi. Pembolehubah-pembolehubah ini tidak komut, misalnya,

$$[\hat{p}_x, \hat{x}] \neq 0.$$

Sebaliknya, pembolehubah-pembolehubah yang komut boleh mengukur secara bebas pada masa yang sama, setepat dikehendaki.

3.2 Proses pencerapan

Dalam teori kuantum, keadaan sesuatu sistem itu boleh diperihalkan oleh fungsi gelombang berkenaan ψ katakan. Ia juga disebut fungsi keadaan. Sesuatu pencerapan itu dikaitkan dengan suatu operator $\hat{A}$ katakan yang bertindak ke atas fungsi gelombang ini. Apabila pencerapan dibuat, hasilnya ialah satu daripada nilai eigen a_k operator berkenaan,

$$\hat{A} u_k = a_k u_k \ .$$

Kebarangkalian untuk memperolehi suatu nilai eigen tertentu itu sebagai hasil ukuran bergantung kepada banyaknya sumbangan fungsi eigen berkenaan c_n sebagai komponen hasiltambah linear fungsi-fungsi eigen yang memberikan fungsi gelombang asal,

$$\psi = \sum_n c_n u_n \ .$$

Setelah sesuatu nilai eigen diperolehi sebagai hasil pengukuran, fungsi gelombang yang memerihalkan sistem itu berubah menjadi fungsi eigen yang sepadan dengan nilai eigen itu, u_k. Setelah itu, ukuran yang sama memberikan nilai yang sama kerana sumbangan fungsi eigen yang lain kepada fungsi gelombang kini ialah sifar. Namun jika ukuran yang lain $\hat{B}$ katakan dibuat selepas itu, yang sepadan dengan parameter yang pelengkap kepada yang pertama itu, atau kata lain dengan operator sepadan yang tak komut dengan operator yang pertama itu,

$$[\hat{A}, \hat{B}]\psi \equiv \hat{A}\hat{B}\psi - \hat{B}\hat{A}\psi \neq 0$$

untuk apa-apa ψ, keadaan selepas ukuran berubah kepada suatu daripada fungsi eigen operator kedua, v_j, di mana

$$\hat{B}v_j = b_j v_j \ ,$$

yang bukan fungsi eigen operator pertama. Dengan itu, ukuran dengan operator pertama sekali lagi berkemungkinan memberikan hasil yang berlainan, iaitu nilai eigen operator pertama yang berlainan, bergantung kepada d_m dalam

$$v_j = \sum_m d_m u_m \ .$$

Jadi dalam mekanik kuantum, berlainan dari gambaran klasik, sesuatu ukuran itu bukan berpisah dan asing dari sistem yang diukur, tapi boleh mengubah keadaan sistem tersebut.

Dalam keadaan biasa suatu fungsi gelombang Ψ itu berevolusi seperti diberikan oleh persamaan Schroedinger bersandar masa,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi = E\Psi$$

yang datang dari ukuran tenaga

$$\hat{H}\Psi = E\Psi.$$

Dalam kata lain, keadaan pegun seharusnya fungsi eigen tenaga. Seolah-olah sistem itu sentiasa diukuri tenaga.

Dalam keadaan diukur pula, fungsi keadaan jatuh kepada satu daripada fungsi eigen bagi operator yang mewakili ukuran berkenaan. Bagaimana ini berlaku tidak diketahui.

3.3 Kesan kuantum

Jadi teori kuantum membolehkan fenomena gelombang bagi zarah. Keadaan zarah berkebarangkalian, dan dikawali prinsip ketakpastian. Ukuran mengubah keadaan. Sesuatu zarah atau sistem itu boleh berada dalam keadaan campuran sehinggalah diukur.

Zarah-zarah dalam satu sistem dikatakan tersimpul kerana walaupun keadaannya tidak diketahui hingga diukur, keadaan yang diukur nanti saling bergantungan antara satu dengan lain. Misalnya dua elektron yang dikeluarkan oleh suatu nukleus mereput tanpa perubahan nilai momentum sudut, seharusnya mempunyai arah spin yang bertentangan. Apabila arah spin satu diantaranya diukur, arah spin yang satu lagi serta-merta diketahui, walaupun terpisah berjuta tahun-cahaya.

3.4 Matematik kuantum

Keadaan diwakili vektor keadaan dalam apa yang dipanggil ruang Hibert, $|\varphi\rangle \in \mathcal{H}$. Hasildarab scalar di antara dua keadaan, $\langle\varphi|\psi\rangle = \int \varphi^*(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})\, d^3\mathbf{x}$. Perhatikan bahawa hasildarab ini linear, $\langle\varphi|\chi\rangle = a\langle\varphi|\psi\rangle + b\langle\varphi|\xi\rangle$ diberi $|\chi\rangle = a|\psi\rangle + b|\xi\rangle$. Perhatikan juga, $\langle\varphi|\psi\rangle^* = \langle\psi|\phi\rangle$ dan $\langle\varphi|\varphi\rangle \geq 0$, yang sifar hanya jika $|\varphi\rangle = 0$.

Cerapan diwakili operator $\hat{A}$ ke atas $\mathcal{H}$: bagi $|\varphi\rangle \in \mathcal{H}$, maka $\hat{A}|\varphi\rangle \in \mathcal{H}$. Ada kelinearan: $\hat{A}(a|\varphi\rangle + b|\psi\rangle) = a\hat{A}|\varphi\rangle + b\hat{A}|\psi\rangle$. Misal operator ialah $-i\nabla$ yang mewakili $\mathbf{p}$.

Adjoin $\hat{A}^*$ sesuatu operator $\hat{A}$ itu diberikan oleh hubungan $\langle\varphi|\hat{A}^*|\psi\rangle = \langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle^*$. Bagi operator swadjoin, $\hat{A}^* = \hat{A}$. Pencerap fizikal diwakili oleh operator-operator swadjoin.

Jika $\hat{A}|u\rangle = a|u\rangle$, maka $|u\rangle$ dikatakan vector atau fungsi eigen bagi $\hat{A}$ dengan nilai eigen *a*. Maka $\langle\phi|\hat{A}|u\rangle = a\langle\phi|u\rangle$.

Perhatikan bahawa $\langle u|\hat{A}^*|\varphi\rangle = \langle\varphi|\hat{A}|u\rangle^* = a^*\langle\varphi|u\rangle^* = a^*\langle u|\varphi\rangle$. Ini benar untuk apa-apa φ, jadi $\langle u|\hat{A}^* = a^*\langle u|$.

Apabila $\hat{A}$ nyata, $\hat{A}^* = \hat{A}$, maka $\langle u|\hat{A}|u\rangle = a\langle u|u\rangle = a^*\langle u|u\rangle$, jadi $a^* = a$, ataupun *a* nyata. Jika juga $\hat{A}|v\rangle = b|v\rangle$, maka $\langle u|\hat{A}|v\rangle = b\langle u|v\rangle = a\langle u|v\rangle$, yang bermakna samada *a* = *b* atau $\langle u|v\rangle = 0$.

Kebanyakan operator terdefinisi hanya dalam subruang kepada $\mathcal{H}$.

Untuk mana-mana $\hat{A}$ swadjoin, kita boleh cari vektor eigen asas bagi $\hat{A}$. Dari atas, $\hat{A}|u_n\rangle = a_n|u_n\rangle$, untuk *n* = 0, 1, 2, …, dengan $\langle u_m|u_n\rangle = \delta_{mn}$ di mana δ_{mn} = 1 jika *m* = *n* dan 0 jika tidak. Kita boleh tuliskan suatu fungsi gelombang $|\varphi\rangle$ sebagai terbina daripada cebisan-cebisan asas ini. Untuk mana-mana $|\varphi\rangle \in \mathcal{H}$, kita boleh tulis $|\varphi\rangle = \sum_n \varphi_n\, |u_n\rangle$. Pekali φ_n diberikan oleh $\langle u_m|\varphi\rangle = \sum_n \varphi_n\langle u_m|u_n\rangle = \varphi_m$. Dalam kata lain, $|\varphi\rangle = \sum_n |u_n\rangle\, \varphi_n = \sum_n |u_n\rangle\langle u_n|\varphi\rangle$.

Boleh kita kata bahawa φ_m ialah pemerihalan $|\varphi\rangle$ dalam perwakilan $|u_m\rangle$. Dalam perwakilan ini, $\langle\varphi|\psi\rangle = \sum_n\langle\varphi|u_n\rangle\langle u_n|\psi\rangle = \sum_n\langle\varphi_n|\psi_n\rangle$. Oleh kerana ini perlu benar bagi apa-apa $|\varphi\rangle$, maka kita boleh fahami $\sum_n|u_n\rangle\langle u_n| = \hat{1}$. Ini konsisten dengan $\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\varphi|\hat{1}|\psi\rangle = \sum_n\langle\varphi|u_n\rangle\langle u_n|\psi\rangle = \sum_n \varphi_n{}^*\psi_n$. Juga $\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle = \sum_n\langle\varphi|\hat{A}|u_n\rangle\langle u_n|\psi\rangle = \sum_n\langle\varphi|u_n\rangle a_n\langle u_n|\psi\rangle$, jadi $\hat{A} = \sum_n|u_n\rangle\, a_n\langle u_n|$. Bahkan, $f(\hat{A}) = \sum_n|u_n\rangle f(a_n)\langle u_n|$.

Teori kuantum membuat andaian kebarangkalian seperti berikut. Nilai jangkaan bagi $\hat{A}$ untuk keadaan diwakilkan $|\varphi\rangle$ adalah $\langle\hat{A}\rangle = \frac{\langle\varphi|\hat{A}|\varphi\rangle}{\langle\varphi|\varphi\rangle}$. Pembawah merupakan pernormalan, $\langle\hat{A}\rangle = \langle\varphi|\hat{A}|\varphi\rangle$ jika $\langle\varphi|\varphi\rangle = 1$. Dan, $\langle\hat{A}^2\rangle = \langle\varphi|\hat{A}^2|\varphi\rangle$. Jika a_n berbeza nilai, kebarangkalian memerolehi a_n dalam pengukuran $\hat{A}$ ke atas keadaan $|\varphi\rangle$ ialah $P_n = |\langle u_n|\varphi\rangle|^2 = |\varphi_n|^2$. Kenormalan $|\varphi\rangle$ membabatkan $\sum_n P_n = 1$.

Bagi operator dengan nilai eigen selanjar, $\hat{A}|u_a\rangle = a|u_a\rangle$, keadaan $|\varphi\rangle = \int da\, \varphi(a)|u_a\rangle$. Keortogonan fungsi eigen diberikan dalam bentuk $\langle u_{a'}|u_a\rangle = \delta(a' - a)$, dan perwakilan bagi sesuatu fungsi keadaan sebagai $\langle u_{a'}|\varphi\rangle = \int da\, \varphi(a)\delta(a' - a) = \varphi(a')$. Kebarangkalian untuk memperolehi hasil ukuran di antara *a* dan *a*+*da* ialah $P(a)da = |\langle u_a|\varphi\rangle|^2 da$. Perhatikan bahawa $\int P(a)da = 1$.