

1. Matematyka Fizyki Kwantowej: Część Pierwsza

Notatki Piotra Szańkowskiego

SŁOWO WSTĘPNE

Mechanika kwantowa, w przeciwieństwie do klasycznych teorii fizycznych, wydaje się być zagmatwana, nieintuicyjna i zupełnie niezrozumiała. Dlaczego tak jest? Weźmy za przykład mechanikę klasyczną, która opisuje ruch cząstek pod wpływem działających na nie sił. Chyba wszyscy się zgodzą, że bez większego wysiłku każdy z nas może sobie w przejrzysty sposób zwizualizować procesy opisywane przez tę teorię. Wynika to z tego, że *formalizm* mechaniki klasycznej jest kompatybilny z użytkownikami formalizmu, czyli nami. Co mamy tu namyśli? Równanie Newtona (to jest właśnie formalizm mechaniki klasycznej) mówi o tym jak w czasie zmieniają się położenia i prędkości cząstek. Każdy może sobie wyobrazić co to znaczy, że cząstka jest tutaj a za jakiś czas będzie tam, innymi słowy, pojęcia prędkości i położenia są dla nas intuicyjnie zrozumiałe i nie wymagają żadnych dodatkowych wyjaśnień. Mimo to, nawet w mechanice klasycznej możemy napotkać trudności natury koncepcyjnej, przykładem jest tu pojęcie siły - czym ona jest i jak ją sobie wyobrażać? Aby odpowiedzieć na to pytanie najprościej jest odwołać się do naszych codziennych doświadczeń. Wiadomo, że jak coś się popchnie to to coś zaczyna się poruszać, a więc siła jest czymś takim jak popchnięcie. Ale to nie wszystko! Newton mówi, że istnieją też siły działające na odległość: takie siły które nie wymagają bezpośredniego kontaktu. Jak to możliwe, że coś się zaczyna się poruszać mimo iż nikt tego nie popchnął? Proste, odpowiada Newton, zauważmy, że upuszczony przedmiot zaczyna się poruszać w kierunku ziemi. Skoro się porusza to znaczy, że musi działać siła. Co więcej, jest ewidentnym, że jest to siła którą Ziemia wywiera na przedmiot na odległość. Czyli siły działające na odległość są jak grawitacja, coś z czym mamy do czynienia każdego dnia, a więc jest nam znajome i rozumiemy to intuicyjnie. Tak więc, mechanika klasyczna wydaje się być zrozumiała ponieważ jej formalizm opera się na pojęciach, które rozumiemy intuicyjnie bo obcowaliśmy z nimi przez całe nasze życie.

W przypadku mechaniki kwantowej, jak sami się niedługo przekonacie, jej formalizm jest oddzielony od użytkownika bezdenną czeluścią. Najprościej mówiąc, hardware ludzkiego mózgu ewoluował w warunkach, w których kwantowe efekty nie mają większego wpływu na to czy się zje czy się zostanie zjedzonym. Nasze zmysły i sposób w jaki interpretujemy zewnętrzne bodźce jest klasyczny do szpiku kości. Zwyczajnie nie jest możliwym aby sobie wyobrazić co znaczy np. superpozycja stanów “żywy-martwy kot Schrödingera”. Aby wydobyć z tego formalizmu wielkości, które rozumiemy i możemy sobie wyobrazić niezbędnym jest rozpięcie nad czeluścią mostu – niezbędna jest *interpretacja formalizmu*.

Generalnie są dwa podejścia do tego zagadnienia. W pierwszym podejściu zakłada się, że wszechświat jako całość jest opisywany mechaniką kwantową. Oczywiście użytkownik formalizmu jest częścią wszechświata, a więc także on jest opisany przez formalizm, którego chce używać. Głównym problemem z jakim boryka się to podejście polega na tym, że należy wykazać w jaki sposób iluzja klasycznego świata mogłaby wynikać z praw mechaniki kwantowej. Niestety, aby w pełni zrozumieć jak taki problem można rozwiązać niezbędna jest zaawansowana i bardzo techniczna wiedza o mechanice kwantowej. Rzecz jasna, nie jest to temat, który mógłby się mieścić w ramach podstawowego kursu z tego przedmiotu.

Drugie podejście, zwane *interpretacją Kopenhaską*, zakłada, że między światem kwantowym a klasycznym światem użytkownika istnieje ostra granica. Łącznikiem między tymi dwoma, zupełnie odmiennymi światami jest nie do końca sprecyzowany proces *pomiaru*. Zakłada się, że to właśnie pomiar jest jedynym sposobem w jaki użytkownik może się czegoś dowiedzieć o badanym układzie kwantowym. Jednakże, każdy taki akt pomiaru nieuchronnie zmienia stan mierzonego układu. W ten sposób właśnie tłumaczy się dlaczego nie obserwujemy kotów w superpozycji “żywy-martwy”. W wyniku pomiaru kwantowe superpozycje “kolapsują” do klasycznych stanów, a o tym czy zmierzony kot Schrödingera okaże się żywy czy martwy decyduje przypadek. W ogóle, w tej interpretacji wszelkie przewidywania mechaniki kwantowej, tzn. przewidywane wyniki pomiarów, mają charakter *probabilistyczny*. Ta interpretacja stanowi niezbędne minimum aby móc posłużyć się formalizmem mechaniki kwantowej w badaniach naukowych. W sumie sprowadza się ona do zestawu reguł, które mówią co trzeba zrobić z elementami formalizmu aby przewidzieć jaki będzie wyniki danego doświadczenia z kwantowymi cząstkami. Można ją podsumować w barwny sposób przytaczając słowa Davida Mermin’a: “Shut up and calculate!”.

Jasnym jest, że niezależnie od przyjętej interpretacji, warunkiem koniecznym do zrozumienia fizyki kwantowej jest dobre zaznajomienie się z matematyką na której zbudowany jest jej formalizm. Właśnie dlatego nasze zajęcia zaczynamy od omówienia matematyki mechaniki kwantowej. Pierwszym tematem będą elementy rachunku prawdopodobieństwa.

I. ELEMENTY RACHUNKU PRAWDOPODOBIENSTWA

A. Zmienna losowa

Niech X będzie *zmienną losową*, tzn. taką zmienną, która może przyjmować wartości z pewnego zbioru Ω_X , zwanego zbiorem zdarzeń, ale w taki sposób, że nie wiemy, którą z tych wartości przyjmie gdy ją “zmierzymy”. Przykładem zmiennej losowej jest *moneta*. “Pomiarem” monety jest zwyczajne jej rzucenie. Wynikiem takiego pomiaru może być *orzel* lub *reszka*, a więc zbiór zdarzeń dla monety składa się z dwóch elementów: $\Omega_{\text{moneta}} = \{\text{orzel}, \text{reszka}\}$.

Przykładem z mechaniki kwantowej jest *położenie cząstki*. Tym razem “pomiar” położenia to prawdziwy pomiar przy użyciu odpowiednio skonstruowanego detektora. Wynikiem takiego pomiaru może być dowolna liczba rzeczywista (załóżmy, że ograniczymy ruch cząstki do jednego wymiaru). Tak więc, w przypadku położenia cząstki zbiór zdarzeń jest prosta rzeczywista: $\Omega_{\text{położenie}} = \mathbb{R}$.

B. Prawdopodobieństwo

Prawdopodobieństwem nazywamy funkcję P , która każdemu podzbiorni $\omega \subseteq \Omega_X$ przypisuje liczbę taką, że

$$0 \leq P(\omega) \leq 1. \quad (1)$$

przy czym

$$P(\omega) = 0, \text{ tylko dla } \omega = \emptyset \quad \text{i} \quad P(\omega) = 1, \text{ tylko dla } \omega = \Omega_X \quad (2)$$

co oznacza, że prawdopodobieństwo zdarzenia “ X nie przyjmie żadnej wartości” ($P(\emptyset)$) wynosi zero i prawdopodobieństwo, że “ X przyjmie jakąkolwiek wartość” ($P(\Omega_X)$) wynosi 1 (*Uwaga* – podaliśmy tutaj tylko kilka własności jakie powinno mieć P , po pełny opis aksjomatycznej definicji prawdopodobieństwa Kołogomorowa zapraszam na Wikipedie: <http://pl.wikipedia.org/wiki/Prawdopodobieństwo>, jednak ostrzegam: czytanie tak zaawansowanej matmy może się skończyć uszkodzeniem mózgu!).

Dygresja – Zauważmy, że przytoczona powyżej definicja P nie mówi nic (przynajmniej na pierwszy rzut oka) jak wyznaczyć P dla konkretnej zmiennej losowej X . Dla porównania przypomnijmy *klasyczną definicję prawdopodobieństwa Laplace’a*, która mówi, że prawdopodobieństwo zajścia zdarzenia $\omega \subseteq \Omega_X$ jest równe

$$P_{\text{klas}}(\omega) = \frac{n(\omega)}{n(\Omega_X)}, \quad (3)$$

gdzie n to moc zbioru (czyli liczba elementów zawartych w zbiorze). Według tej definicji prawdopodobieństwo wyrzucenia orła byłoby równe

$$P_{\text{klas}}(\{\text{orzel}\}) = \frac{n(\{\text{orzel}\})}{n(\{\text{orzel}, \text{reszka}\})} = \frac{1}{2}, \quad (4)$$

brzmi rozsądnie. A więc jest to definicja *konstruktywna*. Problem z tą definicją jest dwojaki. Po pierwsze, kompletnie nie działa w przypadku $X = (\text{położenie cząstki})$, gdyż moc dowolnego podzbiorni $n(\omega \subseteq \Omega_{\text{położenie}})$ jest równa *continuum*. Po drugie, klasyczna definicja zakłada, że wszystkie zdarzenia są równie prawdopodobne ($P_{\text{klas}}(\{\text{orzel}\}) = P_{\text{klas}}(\{\text{reszka}\})$), co nie zawsze odpowiada rzeczywistości.

C. Gęstość prawdopodobieństwa

Gęstością prawdopodobieństwa p nazywamy funkcję od elementów zbioru zdarzeń $x \in \Omega_X$, zdefiniowaną przez wzór:

$$P(\omega \subseteq \Omega_x) = \int_{x \in \omega} p(x) dx, \quad (5)$$

dla ciągłego zbioru ω (np. $\omega = [-15, -5)$) w przypadku $X = (\text{położenie cząstki})$ lub

$$P(\omega \subseteq \Omega_x) = \sum_{x \in \omega} p(x), \quad (6)$$

dla dyskretnego zbioru ω (np. $\omega = \{\text{orzel}\}$ w przypadku $X = (\text{moneta})$). Z definicji p (równania (??) i (??)) i własności P (równanie (??)) wynikają następujące własności gęstości prawdopodobieństwa:

1. p jest nieujemne: $0 \leq p(x) \leq 1$ dla wszystkich $x \in \Omega_X$,

2. p jest unormowane do jedności: $\int_{x \in \Omega_X} p(x) dx = 1$.

Przykłady –

1. Uczciwa moneta:

$$p(x) = \frac{1}{2}\delta_{x,0} + \frac{1}{2}\delta_{x,1}, \quad (7)$$

gdzie $x = 0$ - orzeł, $x = 1$ - reszka, $\delta_{ii} = 1$, $\delta_{ij} = 0$ jeśli $i \neq j$ (tzw. *delta Kroneckera*).

2. Obciążona moneta:

$$p(x) = w\delta_{x,0} + (1-w)\delta_{x,1}, \quad (8)$$

gdzie $0 \leq w \leq 1$.

3. Rozkład Gaussa (znany także jako rozkład normalny)

$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}, \quad (9)$$

dla $-\infty \leq x \leq \infty$.

4. Rozkład Poissona:

$$p(x) = \frac{e^{-\lambda}\lambda^x}{x!}, \quad (10)$$

dla $x = 0, 1, 2, \dots$

D. Wartość oczekiwana

Oprócz pytań o prawdopodobieństwo, często interesuje nas odpowiedź na pytanie o wartość oczekiwaną (*wartość średnią*) wielkości zależących od zmiennej losowej X . Jako przykład rozważmy kwantową cząstkę, dla której gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w punkcie x wynosi $p(x)$ (czyli zmienną losową jest $X = (\text{położenie cząstki})$). Możemy się zastanowić w którym położeniu cząstka będzie przebywać najczęściej, lub inaczej, jaka jest wartość średnia położenia cząstki. W tym przypadku, wartość średnia położenia będzie zdefiniowana wzorem

$$(\text{średnie } X) \equiv \langle X \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} xp(x)dx. \quad (11)$$

Ogólniej, wartość średnia wielkości $f(X)$ jest zdefiniowana jako

$$\langle f(X) \rangle = \int_{x \in \Omega_X} f(x)p(x)dx, \quad (12)$$

dla rozkładu ciągłego, oraz

$$\langle f(X) \rangle = \sum_{x \in \Omega_X} f(x)p(x), \quad (13)$$

dla rozkładu dyskretnego.

Zadania

Zadanie 1: Znajdź średnią i dyspersję rozkładu Gaussa.

Odpowiedź –

Średnia:

$$\langle X \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}} dx = x_0 \quad (14)$$

Dyspersja, zwykle oznaczana jako $\langle \Delta^2 X \rangle$, jest zdefiniowana wzorem

$$\langle \Delta^2 X \rangle \equiv \langle (X - \langle X \rangle)^2 \rangle = \langle X^2 - 2X\langle X \rangle + \langle X \rangle^2 \rangle = \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2. \quad (15)$$

Średnią już znamy, więc wystarczy obliczyć kwadrat X -a:

$$\langle X^2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}} dx = \sigma^2 + x_0^2, \quad (16)$$

co daje

$$\langle \Delta^2 X \rangle = \sigma^2. \quad (17)$$

Zadanie 2: Znajdź średnią i dyspersję rozkładu Poissona.

Odpowiedź –

Średnia:

$$\langle X \rangle = \sum_{x=0}^{\infty} x e^{-\lambda} \frac{\lambda^x}{x!} = \sum_{x=0}^{\infty} e^{-\lambda} \frac{\lambda^x}{(x-1)!} = \lambda \underbrace{\sum_{x'=0}^{\infty} x' e^{-\lambda} \frac{\lambda^{x'}}{x'!}}_{=1, \text{ normalizacja}} = \lambda \quad (18)$$

Dyspersja:

$$\langle X^2 \rangle = \sum_{x=0}^{\infty} x^2 e^{-\lambda} \frac{\lambda^x}{x!} = \sum_{x=0}^{\infty} (x^2 + x - x) e^{-\lambda} \frac{\lambda^x}{x!} = \sum_{x=0}^{\infty} (x(x-1) + x) e^{-\lambda} \frac{\lambda^x}{x!} = \sum_{x=2}^{\infty} e^{-\lambda} \frac{\lambda^x}{(x-2)!} + \langle X \rangle = \lambda^2 + \lambda, \quad (19)$$

a więc

$$\langle \Delta^2 X \rangle = \lambda \quad (20)$$

E. Delta Diraca

Wspominaliśmy wcześniej, że klasyczna definicja prawdopodobieństwa nie zadziała dla ciągłych zmiennych losowych takich jak położenie cząstki. Jednakże, okazuje się, że aby zbudować formalizm mechaniki kwantowej będziemy potrzebować matematycznego narzędzia przy pomocy którego można zbudować odpowiednik Laplaceowego prawdopodobieństwa ciągłej zmiennej. Tym narzędziem jest *delta Diraca*, od nazwiska P. M. Diraca, jednego z pionierów fizyki kwantowej.

Delta Diraca $\delta(x)$, to *dystrybucja* (uogólnienie pojęcia funkcji) zdefiniowana przez swoje “działanie” na tzw. funkcje próbne spełniające odpowiednie założenia (np., znikanie w $\pm\infty$ szybciej niż dowolny wielomian, różniczkowalność). To działanie oznacza się zwykle w następujący sposób:

$$\langle \psi | \delta \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) \psi(x) dx. \quad (21)$$

Od delty wymaga się aby dla dowolnej funkcji próbnej zachodziło

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) \psi(x) dx = \psi(0). \quad (22)$$

Intuicyjnie (czytaj: fizycznie) można δ zdefiniować jako “funkcję”, która jest bardzo wypikowana w zerze i znika we wszystkich innych punktach. Dodatkowo całka z δ ma być znormalizowana do jedności.

$$\delta(x) = \begin{cases} \infty & \text{dla } x = 0 \\ 0 & \text{dla } x \neq 0 \end{cases} \quad \text{oraz} \quad \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1. \quad (23)$$

Należy podkreślić, że *nie istnieje funkcja*, która spełniałaby te własności. Aby uściślić tę definicję często rozważa się *modele delty*, które są zwykłymi funkcjami zależącymi od parametru, gdy ten parametr dąży do pewnej granicy.

Zadania

Zadanie 3: Przykłady modeli delty.

1. $\delta_\tau(x) = \frac{1}{2\tau} e^{-\frac{|x|}{\tau}}$, pokaż, że $\lim_{\tau \rightarrow 0} \delta_\tau(x) = \delta(x)$.
2. $\delta_\alpha(x) = \frac{1}{\alpha\sqrt{\pi}} e^{-\frac{x^2}{\alpha^2}}$, pokaż, że $\lim_{\alpha \rightarrow 0} \delta_\alpha(x) = \delta(x)$
3. $\delta_M(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-M}^M e^{-ikx} dk$, pokaż, że $\lim_{M \rightarrow \infty} \delta_M(x) = \delta(x)$

Aby wykazać równość dystrybucji należy sprawdzić czy ich działanie na funkcję próbną są takie same, np. jeśli $\lim_{M \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x) \left(\int_{-M}^M dk e^{-ikx} \right) = \psi(0)$, to $\lim_{M \rightarrow \infty} \delta_M(x) = \delta(x)$.

Zadanie 4: Udowodnij następujące własności delty:

1. $\frac{d\delta(x)}{dx} \psi(x) = -\delta(x) \frac{d\psi(x)}{dx}$
2. $\delta(x - x_0) \psi(x) = \delta(x) \psi(x + x_0)$
3. $\delta(\alpha x) \psi(x) = \frac{1}{|\alpha|} \delta(x) \psi(x)$