1. Matematyka Fizyki Kwantowej: Cześć Druga

Piotr Szańkowski

I. PRZESTRZEŃ WEKTOROWA

Kolejnym punktem naszej jest ogólna struktura matematyczna mechaniki kwantowej, która jest strukturą przestrzeni wektorowej zwanej *przestrzenią Hilberta.*

A. Definicja przestrzeni wektorowej V nad ciałem liczb zespolonych

Zbiór V nazywamy *przestrzenią wektorową* jeśli:

1. *V jest zamknięta ze względu na mnożenie wektorów przez skalar (liczbę)*— Istnieje operacja mnożenia wektora (elementu V) przez liczbę (skalar), taka że jeśli $\mathbf{v}$ należy do V i a jest liczbą (n.p. rzeczywistą, zespoloną), to $a\mathbf{v}$ także należy do V.

$$\forall_{a\in\mathbb{K}} \quad \mathbf{v} \in V \Rightarrow a\mathbf{v} \in V \tag{1}$$

2. *V jest zamknięta ze względu na dodawanie wektorów*— Istnieje operacja dodawania wektorów, taka że jeśli $\mathbf{v}$ i $\mathbf{w}$ należą do V i a oraz b są liczbami, to $a\,\mathbf{v} + b\,\mathbf{w}$ także należą do V.

$$\forall_{a,b\in\mathbb{K}} \quad \mathbf{v}, \mathbf{w} \in V \Rightarrow a\,\mathbf{v} + b\,\mathbf{w} \in V \tag{2}$$

B. Baza

Wektor postaci

$$\mathbf{v} = \sum_{i=1}^{N} v_i \mathbf{e}_i, \tag{3}$$

nazywamy *kombinacją liniową wektorów* $\mathbf{e}_1$, $\mathbf{e}_2, \ldots, \mathbf{e}_N$ *ze współczynnikami rozkładu* v_1, $v_2, \ldots, v_N$.

Zbiór wektorów, $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \ldots, \mathbf{e}_N\}$ nazywamy *liniowo niezależnym* gdy zachodzi

$$c_1\mathbf{e}_1 + \ldots + c_N\mathbf{e}_N = 0 \Leftrightarrow c_1 = \ldots = c_N = 0 \tag{4}$$

Zbiór wektorów, $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \ldots, \mathbf{e}_N\}$, który jest *liniowo niezależny* i *maksymalny* stanowi jedną z możliwych *baz* przestrzeni wektorowej.

Ilość wektorów bazowych nazywamy wymiarem przestrzeni wektorowej.

Dowolny wektor można w *jednoznaczny* sposób przedstawić jako kombinację liniową wektorów bazy

Wektory w skończenie wymiarowej przestrzeni wygodnie jest reprezentować w *postaci macierzowej*:

$$\mathbf{v} = \sum_{i=1}^{N} v_i \mathbf{e}_i \equiv \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_N \end{bmatrix}. \tag{5}$$

Dodawanie wektorów i mnożenie przez skalary tłumaczy się w następujący sposób:

$$a\,\mathbf{v} + b\,\mathbf{w} = \sum_{i=1}^{N} (a\,v_i + b\,w_i)\mathbf{e}_i = \begin{bmatrix} a\,v_1 + b\,w_1 \\ a\,v_2 + b\,w_2 \\ \vdots \\ a\,v_N + b\,w_N \end{bmatrix}. \tag{6}$$

Przykłady —

1. Przestrzeń strzałek o wspólnym początku z mnożeniem przez liczbę rzeczywistą λ zdefiniowanym jako rozciągnięcie/skrócenie strzałki o skalę $|\lambda|$ gdy $|\lambda| > 1$ / $|\lambda| < 1$ oraz odwrócenie zwrotu strzałki gdy $\lambda < 0$. Dodawanie jest zdefiniowane przez *regułę równoległoboku.*

   Jedną z baz w tej przestrzeni stanowią trzy wzajemnie prostopadłe strzałki, które definiują osie układu współrzędnych. A więc wymiar tej przestrzeni wynosi trzy.

2. Przestrzeń zespolonych funkcji, $\psi : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$, z mnożeniem przez liczbę i dodawaniem zdefiniowanym w zwykły sposób.

   Jedną z baz jaką możemy wybrać w takiej przestrzeni jest zbiór fal płaskich $\{\varphi_k(x) = e^{-ikx}\}_{k\in\mathbb{R}}$. Jak widzimy wektory bazowe są numerowane ciągłym parametrem, a więc wymiar tej przestrzeni jest nie tylko nieskończony, ale nawet nieprzeliczalny.

Zadania

Zadanie 1: Znajdź współczynniki rozkładu wektora

$$\mathbf{v} = \begin{bmatrix} -2 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix}, \tag{7}$$

w bazach

$$B_1 = \{ \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \}, \tag{8}$$

$$B_2 = \{ \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \}. \tag{9}$$

Czy zbiór

$$B_3 = \{ \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \\ 0 \end{bmatrix} \} \tag{10}$$

jest bazą w trójwymiarowej przestrzeni wektorowej?

Rozwiązanie —

Współczynniki rozkładu w bazach to: $(-2, -1, 1)$ w B_1 i $(-2, 0, 1)$ w B_2. Zbiór B_3 nie jest bazą, bo po pierwsze: wektory nie są liniowo niezależne:

$$\begin{bmatrix} 2 \\ 3 \\ 0 \end{bmatrix} = 2 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + 3 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \tag{11}$$

po drugie: zbiór nie jest maksymalne, np. wektor

$$\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{12}$$

jest liniowo niezależny od pozostałych.

C. Przestrzeń stanów układu kwantowego

W mechanice kwantowej stany układu są opisane przez wektory z zespolonej przestrzeni wektorowej. Przyjmijmy, że będziemy oznaczać wektory stanu greckimi literami (bez pogrubienia i strzałki!): Ψ, Φ, ψ, ϕ, χ, φ. Wymiar przestrzeni stanów potrzebny do opisana danego układu zależy od jego fizyki. Na przykład

1. *Kwantowy bit - Kubit* — z definicji jest to układ, którego stany można opisać wektorami z dwuwymiarowej przestrzeni o bazie $\{\varphi_0, \varphi_1\}$ (oznaczenia stanów bazowych mają kojarzyć się z możliwymi stanami klasycznego bitu: 0 lub 1). Stan kubitu jest wtedy opisany przez

$$\Psi_{\text{kubit}} = c_0\varphi_0 + c_1\varphi_1 = \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \end{bmatrix}. \tag{13}$$

   Fizycznymi realizacjami takiego układu może być n.p. foton, dla którego stan φ_0 to pozioma polaryzacja, a stan φ_1 to polaryzacja pionowa. Innym przykładem może być elektron unieruchomiony w kropce kwantowej w dostatecznie schłodzonym krysztale. Stanem 0 może być ustawienie *spinu* w "górę", a stanem 1 - spin w "dół".

2. *Cząstka swobodna* — do opisu tego układu potrzebna jest przestrzeń wektorowa złożona z funkcji o nieprzeliczalnie dużym wymiarze. Jak wspomnieliśmy wcześniej jedną z możliwych baz jest zbiór fal płaskich $\{\varphi_k(x) = e^{-ikx}\}_{k\in\mathbb{R}}$. Wektory stanu nieprzeliczalnie wymiarowej przestrzeni stanów zwykle nazywa się *funkcjami falowymi*:

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(k)\varphi_k(x)dk = \int_{-\infty}^{\infty} c(k)e^{-ikx}dk. \tag{14}$$

   W przypadku nieprzeliczalnie wymiarowej przestrzeni współczynnik rozkładu, $c(k)$, jest ciągłą funkcją! (porównaj ten przykład z problemem propagacji paczki falowej)

3. *Cząstka uwięziona w studni potencjału* — gdy ruch cząstki jest ograniczony przez potencjał przestrzeń stanów staje się przeliczalnie wymiarowa! Oznacza to, że baza składać się będzie z nieskończonej liczby funkcji falowych, ale w przeciwieństwie do przypadku swobodnego indeks numerujący te funkcję będzie dyskretny: $\{\varphi_i(x)\}_{i=1,2,\ldots}$. Wtedy funkcja falowa "spułapkowanej" cząstki wyraża się przez sumę:

$$\psi(x) = \sum_{i=1}^{\infty} c_i\varphi_i(x). \tag{15}$$

   Współczynniki rozkładu, $\{c_i\}_{i=1,2,\ldots}$, znowu są po prostu zbiorem (co prawda nieskończonym) liczb zespolonych. Niestety, w tym przypadku macierzowa notacja przestaje działać, bo "słupki" musiałyby być nieskończenie wysokie (spróbuj coś takiego napisać...).

D. Zasada superpozycji

Jedną z najważniejszych konsekwencji opisu stanu układu kwantowego przy pomocy przestrzeni wektorowej jest *zasada superpozycji*. Przywołajmy ponownie przykład bitu i jego kwantowego odpowiednika - kubitu. Bit możemy zdefiniować jako obiekt fizyczny, który może znaleźć się w jednym z dwóch stanów: $\{0, 1\}$. Kwantowy odpowiednik klasycznych stanów bitu to stany bazowe kubitu:

$$(\text{bit w stanie } 0) \leftrightarrow \Psi_{\text{kubit}} = \varphi_0 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \tag{16}$$

$$(\text{bit w stanie } 1) \leftrightarrow \Psi_{\text{kubit}} = \varphi_1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \tag{17}$$

Jednakże, kubit może znajdować się w znacznie większej ilości stanów! Dowolna kombinacja liniowa, lub inaczej *superpozycja*, stanów bazowych jest stanem kwantowym, a więc nic nie stoi na przeszkodzie aby kubit znajdował się w stanie

$$\Psi_{\text{kubit}} = c_0\varphi_0 + c_1\varphi_1 = \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \end{bmatrix}. \tag{18}$$

Chciałoby się powiedzieć, że taka superpozycja opisuje bit, który jest jednocześnie w stanie 0 i w stanie 1. Niestety (albo stety), ten naiwny obrazek jest zbyt ubogi aby mógł dobrze opisać rzeczywistość. Dlaczego tak uważamy? Zwróć uwagę, że mówienie o "byciu jednocześnie w sprzecznych, z klasycznego punktu widzenia, stanach" wrzuca do jednego worka stany takie jak $\varphi_0 + \varphi_1$ i $\varphi_0 - \varphi_1$. Ale z punktu widzenia mechaniki kwantowej te stany są tak samo różne jak stany φ_0 i φ_1 – tzn. są to także stany ortogonalne, które mogą tworzyć bazę. A więc ten półklasyczny opis stanu kwantowego jest zupełnie do niczego, skoro nie był w stanie uchwycił tak ważnego faktu. Prawda jest taka, że nie można zrozumieć superpozycji posługując się klasycznymi intuicjami, trzeba po prostu zaakceptować, że mamy tu do czynienia z czymś zupełnie nowym i niepojętym dla naszych klasycznych mózgów. Jedyne co możemy zrobić to się zwyczajnie do tego przyzwyczaić.

Przykładem układu, który można opisać jako kubit jest przesławny kot-zombie pana Schrödingera, który miał znajdować się w superpozycji dwóch stanów: "kot żywy" i "kot martwy" (bit 0, bit 1). Schrödinger wymyślił swojego kota-zombie aby pokazać dziwność mechaniki kwantowej; głównie chodziło mu o barwne zilustrowanie szczególnej roli *pomiaru* w procesie przejście ze świata kwantów do świata klasycznego. Być może sobie przypominasz, że Schrödinger zawsze dokańczał swoją historię mówiąc, że jego nieumarły kot był zombie tylko do momentu otwarcia pudła, w którym kreatura była uwięziona. Po otwarciu wieka, opowiada Schrödinger, okazywało się, że z prawdopodobieństwem $|c_0|^2$ kot jest martwy, a z prawdopodobieństwem $|c_1|^2$ kot jest żywy (i nie chce pożreć naszych mózgów!). Otwarcie pudła w tej historyjce jest *pomiarem*, który niszczy superpozycję i redukuje stan kwantowy do jednego ze stanów bazowych (tzw. kolaps stanu kwantowego):

$$\Psi_{\text{kubit}} = c_0\varphi_0 + c_1\varphi_1 \xrightarrow{\text{pomiar}} \begin{cases} \varphi_0 \ , & \text{z prawdopodobieństwem } |c_0|^2 \\ \varphi_1 \ , & \text{z prawdopodobieństwem } |c_1|^2 \end{cases} \tag{19}$$

II. ILOCZYN SKALARNY

A. Definicja

Przejdziemy teraz do zdefiniowania pojęcia długości wektora stanu (*normy*) i pojęcia rzutu jednego wektora stanu na drugi (*"przekrycie"* stanów).

Iloczynem skalarnym nazywamy odwzorowanie $\langle\cdot|\cdot\rangle : V \times V \to \mathbb{C}$, które ma następujące własności:

1. Symetria

$$\langle\Phi|\Psi\rangle = \langle\Psi|\Phi\rangle^* \tag{20}$$

2. Biliniowość:

$$\langle\Phi|a\Psi + b\Psi'\rangle = a\langle\Phi|\Psi\rangle + b\langle\Phi|\Psi'\rangle, \tag{21}$$

z symetrii wynika, że

$$\langle a\Psi + b\Psi'|\Phi\rangle = a^*\langle\Psi|\Phi\rangle + b^*\langle\Psi'|\Phi\rangle \tag{22}$$

3. Dodatnio określony:

$$\langle\Psi|\Psi\rangle \geqslant 0, \tag{23}$$

przy czym

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = 0 \Leftrightarrow \Psi = 0. \tag{24}$$

Zespolona przestrzeń wektorowa z iloczynem skalarnym nazywa się przestrzenią Hilberta, za zwyczaj oznaczaną $\mathcal{H}$.

Norma — norma wektora stanu jest zdefiniowana jako

$$||\Psi|| \equiv \sqrt{\langle\Psi|\Psi\rangle}. \tag{25}$$

Z własności (23) iloczynu skalarnego wynika, że norma jest nie ujemną liczbą rzeczywistą i jest równa zero tylko dla wektora zerowego.

Wektory ortogonalne — jeśli iloczyn skalarny dwóch wektorów stanu znika, mówimy, że te wektory są do siebie *ortogonalne*:

$$(\Psi \text{ jest ortogonalny do } \Phi) \Leftrightarrow \langle\Psi|\Phi\rangle = 0 \tag{26}$$

Baza ortonormalna — bazę złożoną z wektorów wzajemnie ortogonalnych, które mają normę równą 1 nazywamy bazą ortonormalną:

$$\{\varphi_i\}_{i=1,2,\ldots,N} \ : \ \langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = \delta_{ij}, \tag{27}$$

gdzie

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 \ , \ i = j \\ 0 \ , \ i \neq j \end{cases} \tag{28}$$

W mechanice kwantowej zawsze będziemy używać baz ortonormalnych!
Przykłady —

1. Przestrzeń Hilberta o skończonym wymiarze. Wybieramy bazę ortonormalną: $\{\varphi_i\}_{i=1,\dots,N}$. Niech stany Ψ i Φ mają następujące rozkłady w tej bazie

$$\Psi = \sum_{i=1}^{N} c_i \varphi_i = \begin{bmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_N \end{bmatrix}, \quad \Phi = \sum_{i=1}^{N} d_i \varphi_i = \begin{bmatrix} d_1 \\ \vdots \\ d_N \end{bmatrix} \tag{29}$$

Iloczyn skalarny miedzy stanami Ψ i Φ definiujemy jako:

$$\langle \Psi | \Phi \rangle = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} c_i^* d_j \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle \tag{30}$$

W mechanice kwantowej nie używamy innych baz niż bazy ortonormalne, więc $\langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \delta_{i\,j}$

$$\langle \Psi | \Phi \rangle = \sum_{i=1}^{N} c_i^* d_i, \tag{31}$$

co możemy zapisać jako mnożenie dwóch macierzy:

$$\langle \Psi | \Phi \rangle = \Psi^\dagger \Phi = [c_1^*, \dots, c_N^*] \begin{bmatrix} d_1 \\ \vdots \\ d_N \end{bmatrix}, \tag{32}$$

gdzie $\Psi^\dagger = (\Psi^*)^T = (\Psi^T)^*$ nazywa się *sprzężeniem hermitowskim.*

2. Przestrzeń funkcji falowych. Iloczyn skalarny w takiej przestrzeni jest zdefiniowany przez całkę:

$$\langle \psi | \phi \rangle = \int_V \psi^*(\vec{x}) \phi(\vec{x}) d\vec{x}, \tag{33}$$

gdzie V to cała przestrzeń konfiguracyjna układu. N.p., dla układu, którego ruch jest ograniczony do jednego wymiaru dostaniemy

$$\langle \psi | \phi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \phi(x) dx, \tag{34}$$

Zadania

Zadanie 2: Udowodnij nierówność Cauchy'ego - Schwartz'a

$$|\langle \Psi | \Phi \rangle| \leqslant ||\Psi|| \, ||\Phi||. \tag{35}$$

Rozwiązanie —
Rozważmy wektor

$$\chi = \langle \Phi | \Psi \rangle \Phi - \langle \Phi | \Phi \rangle \Psi. \tag{36}$$

Obliczamy normę χ:

$$\begin{aligned} \langle \chi | \chi \rangle = \langle \Phi | \Psi \rangle^* \langle \Phi | \chi \rangle - ||\Phi||^2 \langle \Psi | \chi \rangle = |\langle \Phi | \Psi \rangle|^2 ||\Phi||^2 - ||\Phi||^2 |\langle \Phi | \Psi \rangle|^2 + \\ - ||\Phi||^2 |\langle \Phi | \Psi \rangle|^2 + ||\Phi||^4 ||\Psi||^2 = ||\Phi||^2 (||\Phi||^2 ||\Psi||^2 - |\langle \Phi | \Psi \rangle|^2) \geqslant 0. \end{aligned} \tag{37}$$

Ale $||\Phi||^2 > 0$, więc

$$||\Phi||^2 ||\Psi||^2 - |\langle \Phi | \Psi \rangle|^2 \geqslant 0 \Rightarrow |\langle \Phi | \Psi \rangle| \leqslant ||\Phi|| \, ||\Psi||. \tag{38}$$

Zadanie 3: Udowodnij, że ortogonalne wektory są liniowo niezależne.

Rozwiązanie—

Rozważmy zbiór wektorów $\{\Psi_1, \Psi_2, \ldots, \Psi_N\}$. Mamy pokazać, że jeśli

$$\langle \Psi_i | \Psi_j \rangle = 0\,, \quad \text{dla } i \neq j, \tag{39}$$

to jedynym rozwiązaniem równania

$$\sum_{i=1}^{N} c_i \Psi_i = 0 \tag{40}$$

jest $c_1 = \ldots = c_N = 0$. W tym celu bierzemy stronami iloczyn skalarny równania (39) z Ψ_1:

$$\langle \Psi_1 | \sum_{i=1}^{N} c_i \Psi_i \rangle = 0 \tag{41}$$

$$\sum_{i=1}^{N} c_i \langle \Psi_1 | \Psi_i \rangle = 0 \tag{42}$$

$$c_1 ||\Psi_1||^2 = 0, \tag{43}$$

ale $||\Psi_1|| > 0$, więc $c_1 = 0$. Powtarzamy procedurę z kolejnymi Ψ_i i dostajemy, że każdy kolejny $c_i = 0$.

Zadanie 4: Oblicz iloczyn skalarny między funkcjami falowymi $\varphi_k(x) = (2\pi)^{-1/2} \exp(-ikx)$.

Rozwiązanie —

$$\langle \varphi_k | \varphi_{k'} \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-i(k-k')x} = \delta(k - k'), \tag{44}$$

skorzystaliśmy z wyniku zadania 3 z poprzednich ćwiczeń. Tak więc warunek ortonormalności bazy nieprzeliczalnej wyraża się wzorem (44).

Zadanie 5: Wyraź współczynniki rozkładu wektora w bazach ortonormalnych

1. $B_{\text{disc}} = \{\varphi_i\}_{i=1,\ldots,N}$
2. $B_{\text{cont}} = \{\varphi_k\}_{k \in \mathbb{R}}$

Rozwiązanie —

Ad. 1: Rozpisujemy wektor Ψ w bazie

$$\Psi = \sum_{i=1}^{N} c_i \varphi_i, \tag{45}$$

obliczamy iloczyn skalarny Ψ z j-tym wektorem bazowym:

$$\langle \varphi_j | \Psi \rangle = \sum_{i=1}^{N} c_i \langle \varphi_j | \varphi_i \rangle = \sum_{i=1}^{N} c_i \delta_{ji} = c_j, \tag{46}$$

a więc

$$c_j = \langle \varphi_j | \Psi \rangle. \tag{47}$$

Ad. 2: Rozpisujemy funkcję falową ψ w bazie

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(k) \varphi_k(x) dk, \tag{48}$$

obliczamy iloczyn skalarny $\psi(x)$ z funkcją bazową $\varphi_{k'}(x)$:

$$\begin{aligned}\langle\varphi_{k'}|\psi\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dk \left(\int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi_{k'}^*(x)\varphi_k(x)\right) c(k) = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dk \delta(k-k')c(k) = c(k'),\end{aligned} \tag{49}$$

a więc

$$c(k) = \langle\varphi_k|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_k^*(x)\psi(x)dx \tag{50}$$

B. Interpretacja fizyczna iloczynu skalarnego

Liczbę zespoloną $\langle\Psi|\Phi\rangle$ nazywamy *amplitudą prawdopodobieństwa* dla zajścia procesu: układ przeszedł ze stanu Φ do stanu Ψ. Moduł kwadrat amplitudy prawdopodobieństwa interpretujemy jako prawdopodobieństwie zajścia tego procesu. Sprzężenie zespolone amplitudy prawdopodobieństwa opisuje proces zachodzący w przeciwnym kierunku, bo $\langle\Psi|\Phi\rangle^* = \langle\Psi|\Phi\rangle$.

$\langle\Psi|\Psi\rangle$, czyli norma stanu Ψ, nie jest interpretowana jako amplituda prawdopodobieństwa, gdyż nie opisuje on żadnego procesu. Jednakże, zgodnie z probabilistyczną interpretacją mechaniki kwantowej, kety opisujące fizyczne stany muszą być unormowane do jedności ($\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$).