Mechanika Kwantowa R 2021/2022

Kacper Cybiński

25 marca 2022

Organizacja wykładu

1. Dwa kolokwia - po 30 pkt
2. Egzamin - 40 pkt

Łącznie 100 pkt, progi punktowe:

$$45 - 55 = 3, 55 - 65 = 3.5, 65 - 75 = 4, 75 - 85 = 4.5, 85 - 95 = 5, 95 - 100 = 5!$$

Egzamin ustny (zmiana oceny co najwyżej o 0.5)
Serie domowe dobrowolne (ale na pewno pomogą napisać dobrze kolokwia!)
Strona wykładu
Polecane podręczniki:

- L. Schiff *Mechanika Kwantowa (obszerna)*
- R. Liboff *Wprowadzenie do Mechaniki Kwantowej (mniej obszerna)*
- L. Susskind *Quantum Mechanics (Do ogarnięcia koncepcyjnego)*

Lecture 1

Krótka historia fizyki i wstęp do kwantów

1.1 Krótka historia fizyki

- **Arystoteles** - Jeden absolutny układ odniesienia, więc nie ma sensu pojęcie *obserwatora*
- **Newton** - Ciała, a więc i układy odniesienia (obserwatorzy inercjalni) są liczne, oraz mogą się poruszać między sobą. Siła, czas, przestrzeń są wciąż pojęciami absolutnymi.
- **Teoria względności** - Ruch, czas, przestrzeń, masa są zależne od obserwatora. Obserwator nie musi być inercjalny. Mówimy o *Uoperacyjnieniu pojęć zasadniczych*.
- **Teoria Kwantowa** - Okazuje się, że cały zestaw wielkości fizycznych służących do opisu świata zależy od tego jaki jest kontekst pomiarowy, tj. od relacji obserwatora z innymi elementami otaczającego go świata. *Czyli po raz pierwszy uwzględniamy fakt, że opisujemy wszechświat w którym sami istniejemy, czyli opisujemy ten układ* **od środka**.

Prezentacja o historii fizyki wg Witkacego

1.2 Hipoteza Kwantu

Co doprowadziło do wniosków, że energię trzeba skwantować?

1.2.1 Ciało Doskonale Czarne

Paradoks polegał na tym, że z ciała doskonale czarnego powinniśmy mieć zabójcze promieniowanie gamma itp, a go nie było IRL. And here comes the *Max Planck*.
Planck zapostulował, że przekaz energii odbywa się za pomocą całkowitych wartośći (Kwant Energii)
Zdefiniował to jako:

$$E = h \cdot \nu = \hbar \cdot \omega \tag{1.1}$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}, \omega = 2\pi\nu$$

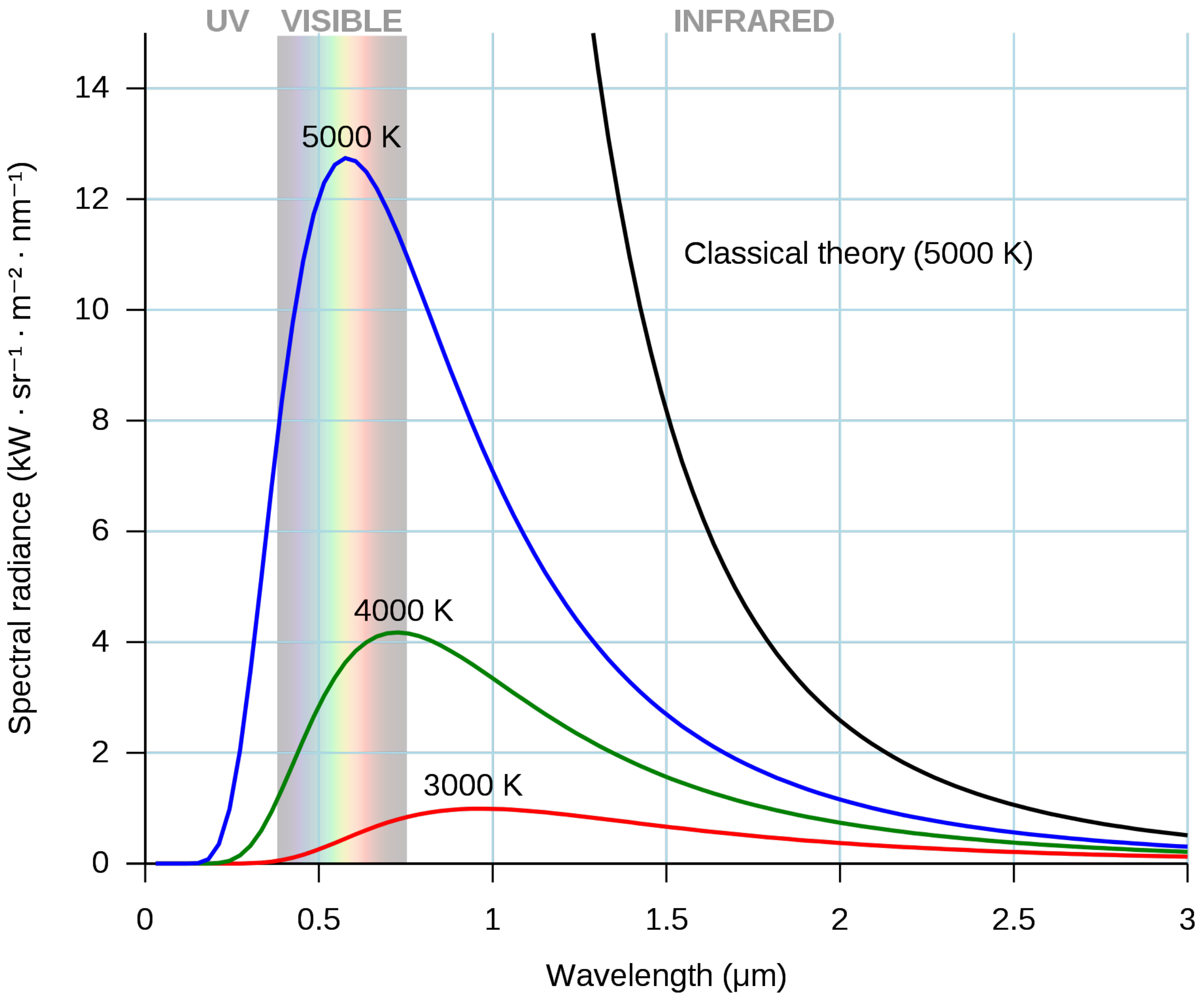
gdzie h - Stała Plancka, $h = 6.2626070150 \cdot 10^{-34} J \cdot s$, ν - częstotliwość promieniowania

1.2.2 Efekt Fotoelektryczny

1.2.3 Analiza pól EM

Analiza pól $\mathcal{E}$ i B w odniesieniu do sześcianu z przewodnika prowadzi do wniosku, że energia ”porcji promieniowania”transformuje się jak

$$\frac{\mathcal{E}'}{\mathcal{E}} = \frac{\sqrt{1 - \frac{u}{c}}}{\sqrt{1 + \frac{u}{c}}}$$



Rysunek 1.1: Wykres promieniowania ciała doskonale czarnego

gdzie u - promieniowanie. Transformuje się to analogicznie do częstotliwości w efekcie Dopplera $\implies E \sim \nu$
Rozkład energii będzie nam opisywać Rozkład Boltzmanna, czyli rozkład prawdopodobieństwa zaobserwowania stanu Energetycznego, dany wzorem:

$$p(E_i) \sim e^{-\frac{E_i}{kT}}$$

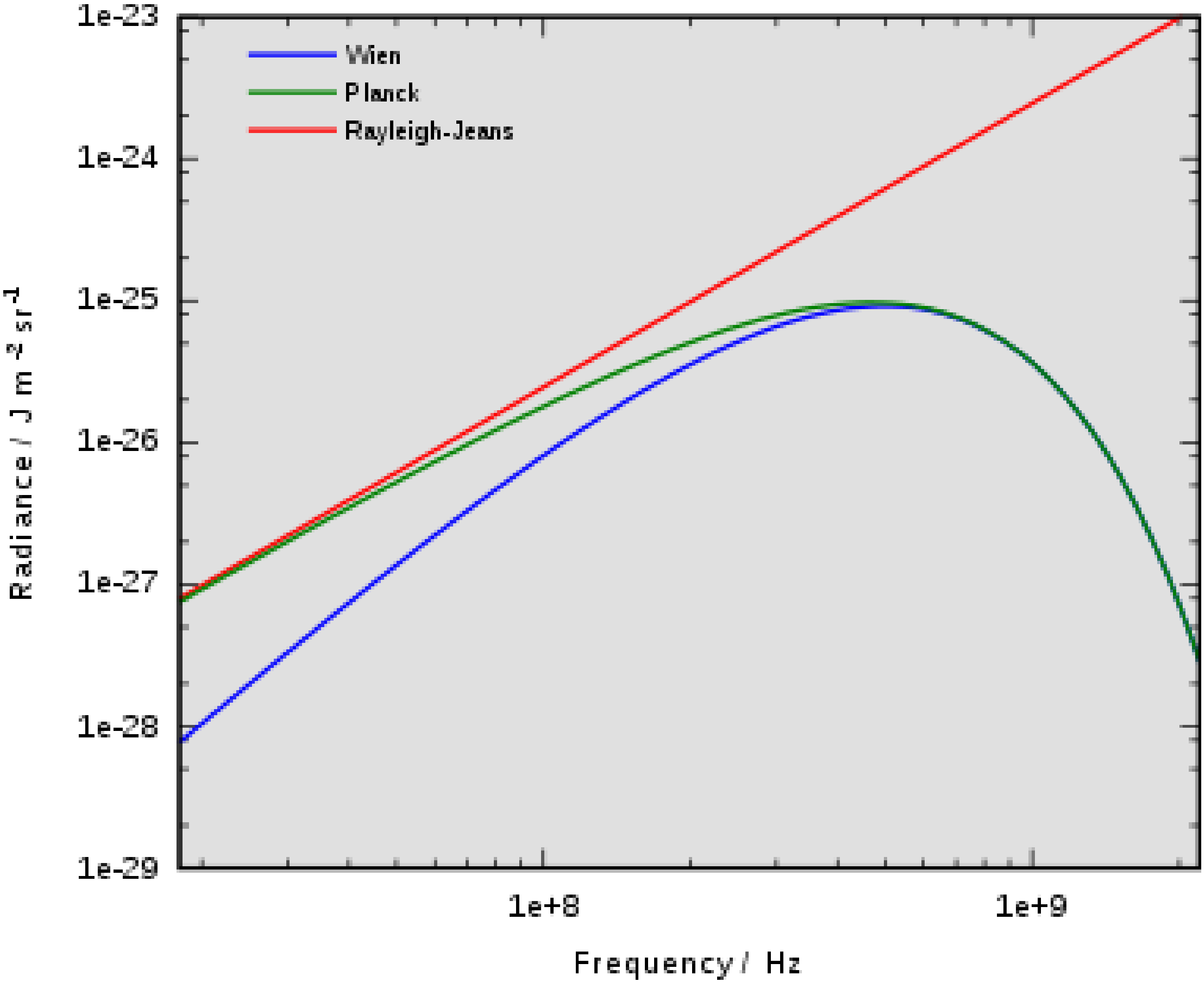
co w przypadku rozkładu ciągłego daje nam zasadę ekwipartycji, ale dla dużych wartości energii się rozbiega z doświadczenie.

1.3 Skutki skwantowania energii

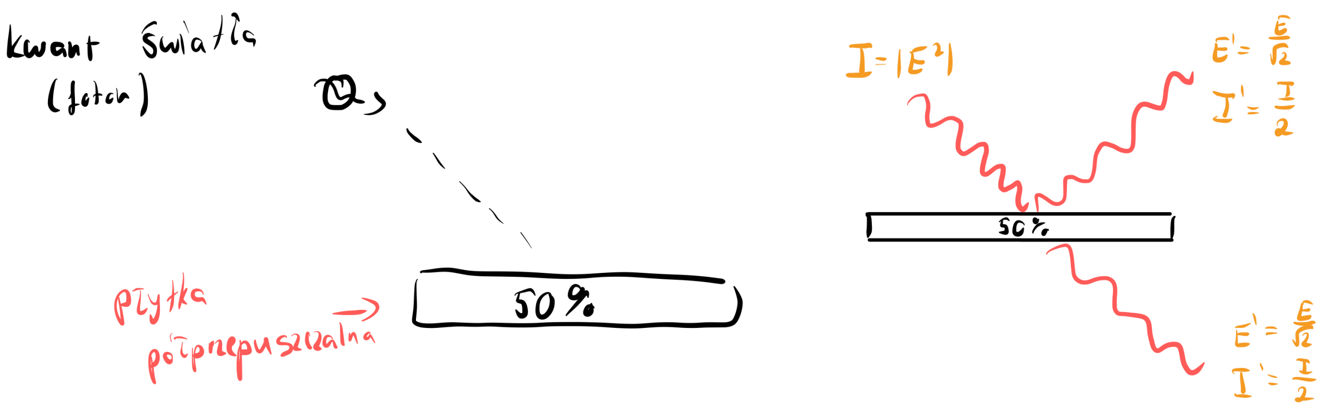
Przede wszystkim skutkiem jest indeterminizm.

Teoria parametrów ukrytych - Teoria, że w kwantach energii występują nierejestrowane przez nas parametry, które jednakowoż zawsze determinują rozróżnienie kwantów energii. Parafrazując Drażana, dodawanie fotonom(kwantom) "włosów", ógonów"itp - elementów rozróżniających je.

Jeśli jednak nie chcemy dodawać fotonom 'włosów', ani 'ogonów' i chcielibysmy, żeby wszystkie fotony były "identyczne"to aby odtworzyć zachowanie klasyczne w granicy (podział natężenia 50%), to



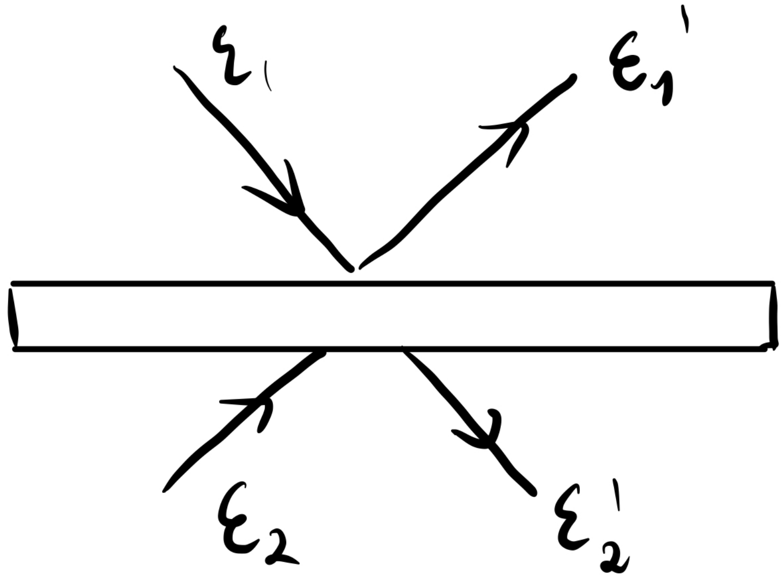
Rysunek 1.2: Porównanie hipotezy Plancka z prawem Rayleigha-Jeansa i rozkładem Wiena. Further reading o 'Katastrofie w nadfiolecie' na Wikipedii o ciele doskonale czarnym



Rysunek 1.3: Demonstracja działania płytki półprzepuszczalnej.

musimy uznać, ze foton zachowuje się niedeterministycznie, tj. wprowadzić element probabilistyczny. Wtedy z prawdopodobieństwem 50% każdy foton przechodzi lub odbija się.
Kiedy patrzymy na płytkę światłodzielącą (Rysunek 1.4), to możemy przedstawiać bieg promienia w niej jako superpozycję fal (zapis macierzowy).

$$\begin{bmatrix} \mathcal{E}_1' \\ \mathcal{E}_2' \end{bmatrix} = B \begin{bmatrix} \mathcal{E}_1 \\ \mathcal{E}_2 \end{bmatrix} \implies \begin{bmatrix} \mathcal{R}_1 & \mathcal{T}_2 \\ \mathcal{T}_1 & \mathcal{R}_2 \end{bmatrix}$$



Rysunek 1.4: Demonstracja działania płytki światłodzielącej (*Beam Splitter*).

Gdzie $\mathcal{E}_1' = \mathcal{R}1\mathcal{E}_1 + \mathcal{T}_2\mathcal{E}_2$. Chcemy, żeby **energia była zachowana**

$$\implies |\mathcal{E}_1|^2 + |\mathcal{E}_2|^2 = |\mathcal{E}_1'|^2 + |\mathcal{E}_2'|^2$$

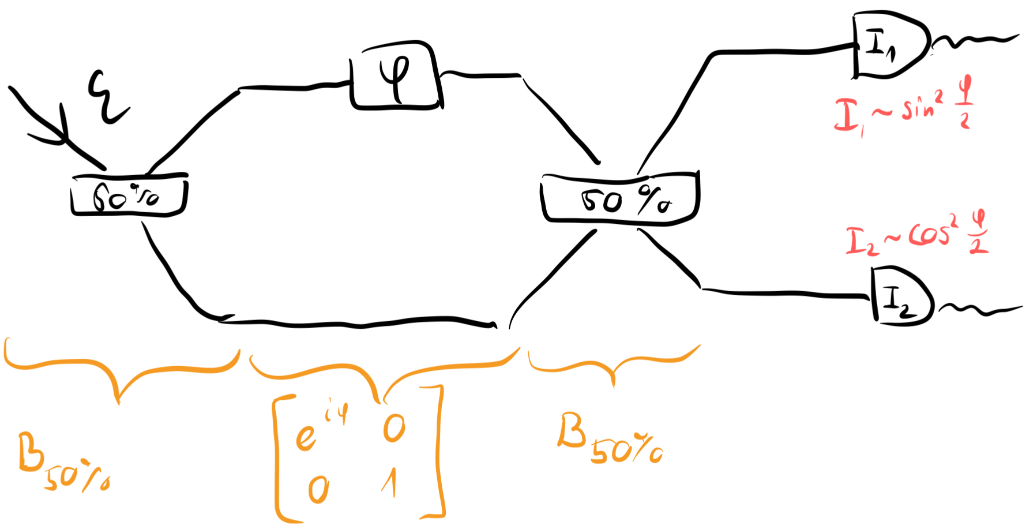
Co możemy też tłumaczyć jako zachowanie długości wektora $\begin{bmatrix} \mathcal{E}_1' \\ \mathcal{E}_2' \end{bmatrix}$, czyli macierz B jest macierzą **Unitarną**, tj. $B \cdot B^\dagger = 1$.

$$BB^\dagger = \begin{bmatrix} \mathcal{R}_1^* & \mathcal{T}_1^* \\ \mathcal{T}_2^* & \mathcal{R}_2^* \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathcal{R}_1 & \mathcal{T}_2 \\ \mathcal{T}_1 & \mathcal{R}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} |\mathcal{R}_1|^2 + |\mathcal{T}_1|^2 & \mathcal{R}_1^*\mathcal{T}_2 + \mathcal{T}_1^* R_2 \\ \mathcal{R}_1\mathcal{T}_2^* + \mathcal{T}_1 R_2^* & |\mathcal{R}_2|^2 + |\mathcal{T}_2|^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

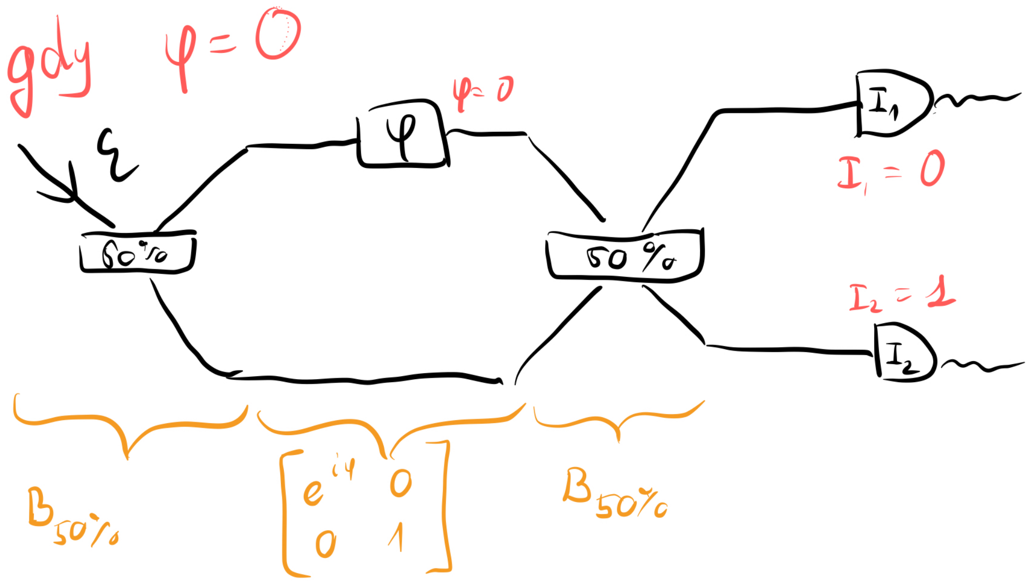
Wynika stąd, że $|\mathcal{R}_1|^2 = |\mathcal{R}_2|^2 = R$ - współczynnik odbicia natężenia, a $|\mathcal{T}_1|^2 = |\mathcal{T}_2|^2 = T$ - współczynnik transmisji natężenia, gdzie $R + T = 1$.
W związku z tym też ogólnie mówiąc np.$B = \begin{bmatrix} \sqrt{R} & \sqrt{T} \\ -\sqrt{T} & \sqrt{R} \end{bmatrix}$, a $B_{50\%} = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$. Tj. $B \in \mathcal{U}(2)$

1.4 Superpozycja

Pokażemy zjawisko interferencji w sensie kwantowym patrząc na kanoniczny przykład - Interferometr Macha-Zehndera, widoczny na Rysunku 1.5. Rozpatrujemy od teraz falę padającą postaci $\begin{bmatrix} \mathcal{E} \\ 0 \end{bmatrix}$.
Teraz aby zrozumieć jak w takim układzie zachowuje się foton musimy odejść od klasycznego myślenia, że leci on jakąś drogą, a musimy przejść do myślenia o jego drodze jako **nieokreślonej**, tj. do momentu wykonania pomiaru (wejścia w interakcję z nim) podąża on jednocześnie wszyskimi możliwymi dla siebie trajektoriami, tym samym przyjmując właściwości falowe. Da to efekt jak ten widoczny na Rysunku 1.6.
Od teraz ten stan 'obierania wszystkich możliwości na raz' przez foton będziemy określać jako stan fotonu oznaczany $|\Psi\rangle$. Tłumaczy się to na funkcję gęstości prawdopodobieństwa znalezienia fotonu w jego możliwych trajektoriach.
W szczególności w opisywanym wyżej przypadku stan $|\Psi\rangle$ będzie opisywany przez **superpozycję** stanów 1 i 2 odpowiadających pójściem drogą odpowiednio górną i dolną, tj. $|\Psi\rangle = \begin{bmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{bmatrix}$ gdzie Ψ_i



Rysunek 1.5: Schemat konstrukcji Interferometru Macha-Zehndera wraz z podpisem macierzami Jonesa



Rysunek 1.6: Schemat konstrukcji Interferometru Macha-Zehndera wraz z podpisem macierzami Jonesa w przypadku zerowej zmiany fazy, tj. w szczególności dla jednego fotonu

- aplituda prawdopodobieństwa obrania ścieżki i, a $p_i = |\Psi_i|^2$ - prawdopodobieństwo, że foton leci i-tą trajektorią.

$$|\Psi\rangle = \Psi_1 |1\rangle \oplus \Psi_2 |2\rangle \tag{1.2}$$

Gdzie znakiem $\oplus$ oznaczamy dodawanie fal. Ta operacja to Superpozycja. Warto też zanotować, że skoro $|\Psi_i| = p_i$ to ich suma musi się dodawać do 1

$$\sum_i |\Psi_i|^2 = 1$$

(*innymi słowy prawdopodonbieństwo znalezienia fotonu w całej przestrzeni zdarzeń jest 1*)
Dla zbudowania intuicji na ten moment możemy sobie utożsamiać tę funkcję pradopodobieństwa z obserwowanym natężeniem światła:

$$|\Psi_i|^2 \sim |\mathcal{E}_i|^2 \sim I_i$$

1.5 Hipoteza De Broigle'a

Side note 1: W naszych rozważaniach nie będzie mieć znaczenia faza całkowita, znaczenie będzie mieć tylko faza względna między ramionami, tj. $\mathcal{E}_i \to e^{i\xi}\mathcal{E}_i$. Innymi słowy, 'globalna faza' nie istnieje!.

Wyszliśmy w naszych dywagacjach od myślenia o fotonach jako o obiektach falowych, ale nie można zapomnieć o tym, że fotony mają również właściwości korpuskularne, więc sugeruje to, że dla materii też to powinno działać. W związku z tym Hipoteza De Broigle'a odpowiadać nam będzie za opisanie 'fal materii', gdzie ich długość fali to będzie:

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

Co dla światła ma interpretację:

$$p = \frac{E}{c} = \frac{h \cdot \mu}{c} = \frac{h}{\lambda}$$

Gdzie E - Energia.

Further reading:

- Notatki Demko do tego wykładu
- Zadanka na ćwiczenia 1
- Zadanka na ćwiczenia 2

Lecture 2

Stany i pomiary kwantowe

2.1 Stany i pomiary kwantowe

W tym wykładzie zajmiemy się powoli formalizowaniem intuicji nabywanej na poprzednim wykładzie. Zdefiniujmy $|i\rangle$ - pewne stany rozróżnialne (istnieje pomiar dający róne wyniki dla różnych stanów).

Zasada superpozycji

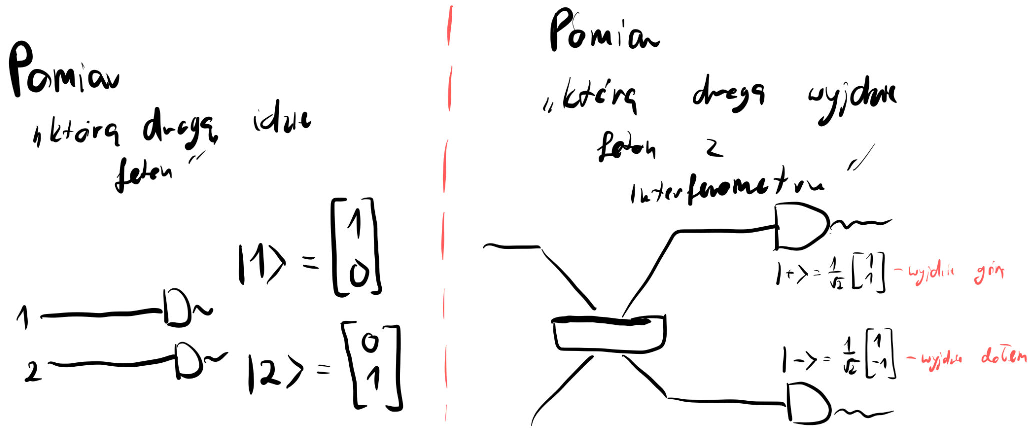
Jeśli $|1\rangle$ i $|2\rangle$ są dopuszczalnymi stanami układu, to "$|1\rangle \oplus |2\rangle$"[1] też musi być dopuszczalnym stanem układu

Matematyczna struktura odpowiednia dla superpozycji to:

- Przestrzeń Hilberta $\mathcal{H}$ nad $\mathcal{C}$
- $\mathcal{H}$ - przestrzeń wektorowa nad $\mathcal{C}$ z iloczynem skalarnym $\langle\Psi|\phi\rangle$, $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}^2$, zupełna[3]
- Uwaga: każda skończenie wymiarowa przestrzeń Hilberta ($\dim \mathcal{H} = d$) jest izomorficzna z $\mathcal{C}^d$.

Stan Kwantowy: Niech $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$, $\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$. Uwaga: $|\Psi\rangle \overset{\mathrm{F}}{\equiv} e^{i\xi}|\Psi\rangle \implies |\Psi\rangle \overset{\mathrm{F}}{\equiv} z \cdot |\Psi\rangle$[4]
Stanem kwantowym nazwiemy też promień w przestrzeni Hilberta $\mathcal{H}$
Pomiary kwantowe: W przestrzeni Hilberta $\mathcal{H}$ bierzemy sobie wektory $|a_i\rangle \in \mathcal{H}$, tworzące bazę ortonormalną w $\mathcal{H}$. Bedzie to zespół rozróżnialnych stanów różniących się pewną obserwowalną wielkością ficzyną A. Czyli przyjmujemy:
$|a_i\rangle$ - mają dobrze określoną wartośc wielkości fizycznej A. Zawsze jak je mierzymy to dostajemy a_i. Innymi słowy, jak mamy kilka wielkości fizycznych $A, B, C, \ldots$, to w ogólności nie będziemy mogli znaleźć jednej bazy ortonormalnej $|a_i, b_i, c_i, \ldots\rangle$. Jest to esencja mechaniki kwantowej, że różne wielkości fizyczne związane są z różnymi, niekompatybilnymi wobec siebie bazami, które opisują każdą z osobna.[5]

[2] wektor reprezentuje stan
[3] każdy ciąg Cauchy zbiega do elementu $\mathcal{H}$
[4] Symbol $\overset{\mathrm{F}}{\equiv}$ oznacza 'w interpretacji fizycznej ...'
[5] Czyli pomiar$\neq$zaglądanie do garnka /sprawdzanie stanu który jest zdeterminowany/



Rysunek 2.1: Porównanie podejść myślenia o kwantu - deterministyczny i niedeterministyczny

Postulat pomiarowy

Jeśli $|\Psi\rangle$ jest dowolnym stanem, na którym chcemy zmierzyć wielkość fizyczną A, z którą stowarzyszona jest baza $\{|a_i\rangle\}$. Możemy napisać:

$$|\Psi\rangle = \sum_i \alpha_i |a_i\rangle$$

Wtedy uzyskany wynik a_i z prawdopodobieństwem $p_i = |\alpha_i|^2 = |\langle a_i|\Psi\rangle|^2$. Tym samym stan po pomiarze ma dobrze określone wielkości a_i, tj. jest $|\Psi\rangle = |a_i\rangle$.

Czyli też jak już raz dokonamy pomiaru na stanie kwantowym to on już nie wróci do możliwości interferencji, i za każdym kolejnym pomiarem już będziemy obserwować ten sam stan, tj. zacznie się zachowywać jakby był klasyczny.
Obserwabla: Z pomiarem wielkości A ($\{|a_i\rangle\}$) stowarzyszamy operator

$$\hat{A} = \sum_i a_i |a_i\rangle\langle a_i|$$

gdzie $\hat{A}$ jest operatorem Hermitowskim[6] czyli w szczególności mając $\hat{A}$ możemy też znaleźć $\{|a_i\rangle\}$ robiąc rozkład własny.

Crash course z notacji Diraca:
ket:

$$|a\rangle = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \mathbf{v}$$

bra:

$$\langle a| = |a\rangle^\dagger = \left[a_1, a_2, \cdots, a_n\right]^* = \mathbf{v}^\dagger$$

[6]Operator hermitowski - $A^\dagger = A$

Czyli jak je połączymy dostajemy **braket**:

$$\langle a|b\rangle = \left[a_1, a_2, \cdots, a_n\right]^* \cdot \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} = \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}^* = liczba^7$$

Zaś z kolei jak pomnożymy w odwrotnej koleności mamy **ketbra**:

$$|a\rangle\langle b| = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} \cdot \left[a_1, a_2, \cdots, a_n\right]^* = M \in M(\mathcal{C})_n^n$$

co rozumiemy też jako operator rzutowy.

Obserwable jest wygodniej liczyć jako wartości oczekiwane z jakichś rozkłądów prawdopodobieństw:

$$\langle A\rangle = \sum_i p_i a_i = \sum_i |\langle a_i|\Psi\rangle|^2 \cdot a_i$$

Gdzie wiemy, że człon $|\langle a_i|\Psi\rangle|^2$ możemy rozpisać jako:

$$|\langle a_i|\Psi\rangle|^2 = |\langle \Psi|a_i\rangle|^2 = \langle \Psi|a_i\rangle \langle a_i|\Psi\rangle = \langle \Psi| \quad |a_i\rangle\langle a_i| \quad |\Psi\rangle$$

W związku z tym możemy dalej rozpisać $\langle A\rangle$ jako:

$$\langle A\rangle = \langle \Psi| \quad \sum_i a_i |a_i\rangle\langle a_i| \quad |\Psi\rangle =^8 \langle \Psi|\hat{A}|\Psi\rangle$$

Further reading:

- Notatki Demko do wykładu
- Zadania na ćwiczenia 2
- Rozwiązania z ćwiczeń 2

[7] Iloczyn skalarny

[8] $\sum_i a_i |a_i\rangle\langle a_i| = \hat{A}$

Lecture 3

Ewolucja stanów kwantowych i Hamiltonian

3.1 Ewolucja stanów kwantowych

Będziemy brać teraz pod uwagę tylko **układy izolowane**! Tutaj rozumiemy, że Układ izolowany - układ który nie oddziaływuje z otoczeniem i brak pomiarów.
Formalnie napiszemy, że (póki co bez żadnych założeń) $|\Psi(0)\rangle$ - stan w chwili początkowej, $|\Psi(t)\rangle$ - stan po czasie. Teraz chcemy wiedzieć, jaki będzie $|\Psi(t)\rangle$? Otóż:

$$|\Psi(0)\rangle = (U)(t)[|\Psi(0)\rangle]$$

Tj. tak jak w mechanice klasycznej - założymy, że nasza ewolucja w czasie jest odwracalna. Wynika z tego, że

- **stany rozróżnialne**[1] **muszą pozostać rozróżnialne.** Możemy na to patrzeć jako na **zachowanie informacji**.
$$\langle\Psi(0)|\Psi(0)\rangle = 0, \quad \langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle = 0$$
- Stopień rozróżnialności tych stanów zależeć będzie od ich iloczynu skalarnego. Chcemy, żeby pozostał on stały
$$\implies \langle\Psi(0)|\Psi(0)\rangle = \langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle$$

Fakt: $U(t)$ jest liniowe.
Sprawdźmy go. Także rozważmy

$$|\xi\rangle = U(t)[a\,|\Psi(0)\rangle + b\,|\Psi(0)\rangle] - aU(t)[|\Psi(0)\rangle] - bU(t)[|\Psi(0)\rangle]$$

Teraz obliczmy:

$$\begin{aligned}\langle\xi|\xi\rangle = {} & (U(t)[a\,|\Psi(0)\rangle + b\,|\Psi(0)\rangle])^\dagger(U(t)[a\,|\Psi(0)\rangle + b\,|\Psi(0)\rangle] - aU(t)[|\Psi(0)\rangle] - bU(t)[|\Psi(0)\rangle]) \\ & - (aU(t)[|\Psi(0)\rangle])^\dagger(-||-) \\ & - (aU(t)[|\Psi(0)\rangle])^\dagger(-||-)\end{aligned}$$

Czyli $(U(t)\,|\Psi\rangle)^\dagger(U(t)\,|\Psi\rangle) = \langle\Psi|\Psi\rangle = 0$, bo można 'usunąć' wszystkie $U(t)$. Wynika z tego, że $U(t)$ **jest liniowe.**
Wnioski: $U(t)$ jest liniowa (w skończenie wymiarowych przestrzeniach reprezentowanych przez macierz[2]) i zachowuje iloczyn skalarny.

$$\implies |\Psi(0)\rangle = U(t)\cdot|\Psi(0)\rangle$$

[1] Ortogonalne
[2] Bo $(AB)^\dagger = A^\dagger B^\dagger$

Teraz ciągnąc to rozumowanie dalej:

$$\forall_{|\Psi(0)\rangle,|\varphi(0)\rangle} = \langle\Psi(0)|\varphi(0)\rangle = \langle\Psi(0)|U^\dagger(t)U(t)|\varphi(0)\rangle = \langle\Psi(0)|\varphi(0)\rangle$$

Wynikać z tego będzie, że $U(t)^\dagger U(t) = 1$. Wiedząc, że pracujemy w skończenie wymiarowej przestrzeni wnioskujemy, że $U(t)$ jest **Unitarne**. Oznacza to też, że $U^{-1}(t) = U(t)^\dagger$. Teraz fizycznym argumentem, że $U^{-1}(t)$ istnieje będzie to, że powinno być $U^{-1}(t) = U(-t)$.

Idziemy dalej. Wiemy, że $U(t=0) = \mathbb{1}$. Rozważmy pierwsze (liniowe) rozwinięcie $U(t)$ w czasie:

$$U(dt) = \mathbb{1} + \left(-\frac{i}{\hbar}H\,\mathrm{d}t + O(\mathrm{d}t^2)\right)$$

$$1 = U(\mathrm{d}t)^\dagger U(\mathrm{d}t) = \left(\mathbb{1} + \frac{i}{\hbar}H^\dagger\,\mathrm{d}t + O(\mathrm{d}t^2)\right)\left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}H^\dagger\,\mathrm{d}t + O(\mathrm{d}t^2)\right) = \mathbb{1} + \frac{i}{\hbar}(H^\dagger - H)\,\mathrm{d}t + O(\mathrm{d}t^2)$$

Czyli widzimy, że $H^\dagger = H$ - jest Hermitowskie.

$$|\Psi(\mathrm{d}t)\rangle = U(\mathrm{d}t)\,|\Psi(0)\rangle = |\Psi(0)\rangle - \frac{i}{\hbar}H\,\mathrm{d}t\,|\Psi(0)\rangle + O(\mathrm{d}t^2) = |\Psi(0)\rangle + \left.\frac{\mathrm{d}\,|\Psi(t)\rangle}{\mathrm{d}t}\right|_{t=0} + \mathcal{O}\big(\mathrm{d}t^2\big)$$

$$\left.\frac{\mathrm{d}\,|\Psi(t)\rangle}{\mathrm{d}t}\right|_{t=0} = -\frac{i}{\hbar}H\,|\Psi(0)\rangle \implies i\hbar\left.\frac{\mathrm{d}\,|\Psi(t)\rangle}{\mathrm{d}t}\right|_{t=0} = H\,|\Psi(0)\rangle$$

Ale zamiast pisać $|\Psi(\mathrm{d}t)\rangle = U(\mathrm{d}t)\,|\Psi(0)\rangle$ można ogólniej powiedzieć: $|\Psi(t+\mathrm{d}t)\rangle = U(\mathrm{d}t)\,|\Psi(t)\rangle$. Dostajemy krypto Równanie Schrödingera:

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}\,|\Psi(t)\rangle}{\mathrm{d}t} = H\,|\Psi(t)\rangle \tag{3.1}$$

(Krypto, bo nie znamy natury H)

3.2 Argument za naturą fizyczną H

Rozważmy obserwablę A i jej wartość oczekiwaną na stanie $|\Psi(t)\rangle$. Wtedy:

$$\langle A\rangle_t = \langle\Psi(t)|A|\Psi(t)\rangle$$

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\,\langle A\rangle_t}{\mathrm{d}t} &= \frac{\mathrm{d}\,\langle\Psi(t)|}{\mathrm{d}t}A\,|\Psi(t)\rangle + \langle\Psi(t)|A|\Psi(t)\rangle = \frac{i}{\hbar}\,\langle\Psi(t)|H\cdot A - A\cdot H|\Psi(t)\rangle \\ &= \frac{i}{\hbar}\,\langle\Psi(t)|[H,A]|\Psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar}\,\langle\Psi(t)|[A,H]|\Psi(t)\rangle\end{aligned}$$

Jeśli wybierzemy $A = H \implies \frac{\mathrm{d}\langle H\rangle}{\mathrm{d}t} = 0$ czyli H jest związany z wielkością fizyczną zachowaną w czasie ewolucji $\implies$ w pierwsza myśl, że ma coś wspólnego z energią.

Analogia z Mechaniką Klasyczną

$$A(q,p), \quad \frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t} = \{A, H\} = \sum_i \frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}q_i}\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}p_i} - \frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}p_i}\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}q_i}$$

Formalna recepta wiążąca mechanikę klasyczną z kwantową:

$$\{\cdot,\cdot\} \to = -\frac{i}{\hbar}[\cdot,\cdot]$$

Jest to dodatkowy argument na to, że H ma coś wspólnego z energią.

To teraz dochodzimy do równań:

$$\frac{\mathrm{d}\,|\Psi(t)\rangle}{\mathrm{d}t} = -\frac{i}{\hbar}H\,|\Psi(t)\rangle \implies |\Psi(t)\rangle = U(t)\,|\Psi(()\rangle\, 0)$$

Gdzie $U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}H\cdot t}$ Gdzie wreszcie piszemy, że H - Hamiltonian.

3.3 Wyznaczenie ewolucji stanu w praktyce

Mamy H, robimy jego rozkład własny, tj. $H = \sum_k {E_k}^3\,|E_k\rangle\langle E_k|$. $H\,|E_k\rangle = E_k\,|E_k\rangle$
Jeśli:
$|\Psi(0)\rangle = |E_k\rangle\,,\quad$ stan o dobrze określonej energii
$|\Psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}H\cdot t}\,|E_k\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_k\cdot t}\,|E_k\rangle$
Czyli energia stanu o dobrze określonej energii zmienia tylko globalną fazę, czyli fizycznie stan się nie zmienia.
Ogólnie jeśli mamy dowolny stan początkowy $|\Psi(0)\rangle$, to możemy go rozłożyć w bazie $\{|E_k\rangle\}$. W takim razie widzimy, że zajdzie:
$|\Psi(0)\rangle = \sum_k {c_k}^4\,|E_k\rangle$, z liniowości $|\Psi(t)\rangle = \sum_k c_k U(t)\,|E_k\rangle = \sum_k c_k e^{-\frac{i}{\hbar}E_k\cdot t}\,|E_k\rangle$
Uogólnienie W modelach gdy H zależy jawnie od czasu (czyli de facto bierzemy układ izolowany) możemy te układy wciąż opisywać jakby były izolowane, ale musimy dopuścić $H = H(t)$. Wtedy jedyna zmiana jaka się pojawia, to:

$$\frac{\mathrm{d}\,|\Psi(t)\rangle}{\mathrm{d}t} = -\frac{i}{\hbar}H(t)\,|\Psi(()\rangle\, t) \implies U(t) \approx e^{-\frac{i}{\hbar}(t-\Delta t)\Delta t}\ldots e^{-\frac{i}{\hbar}(\Delta t)\Delta t}e^{-\frac{i}{\hbar}(0)\Delta t}$$

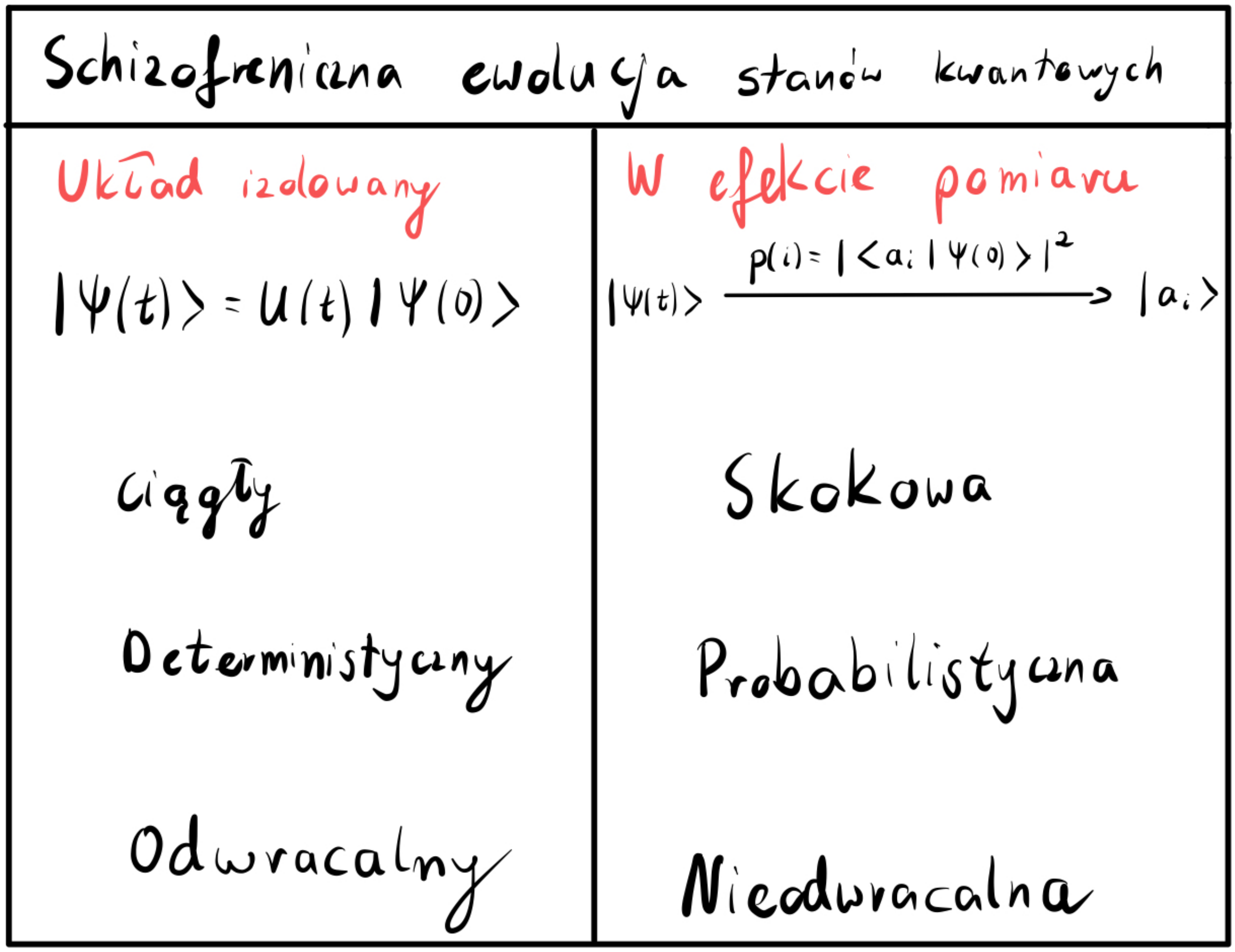
$$U(t) \approx \begin{cases} U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t H(t)\mathrm{d}t}, & \text{jeśli H(t) komutują ze sobą w różnych chwilach czasu} \\ U(t) = \tau^5\left[e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t H(t)\mathrm{d}t},\right] \end{cases}$$

[3] Wartości własne (energie)
[4] $c_k = \langle E_k|\Psi(0)\rangle$

Lecture 4

Równanie Schrodingera (na koszulkach)

4.1 Schizofreniczna Ewolucja



Rysunek 4.1: Schizofreniczna Ewolucja

4.2 Kwantowy Efekt Zenona (z Elei)

Formułował wiele paradoksów - miał dobrą intuicję. Jeden z bardziej znanych - **paradoks strzały**
Paradoks strzały - Skoro strzała w każdej chwili spoczywa, to ruch jest niemożliwy.
Rozważmy układ kwantowy, którego ewolucja jest opisana Hamiltonianem $\mathcal{H}$.

- Stan początkowy $|\Psi(0)\rangle$ nie będzie stanem własnym $\mathcal{H}$ (żeby ewoluował nietrywialnie).

- Wtedy ewolucja po czasie t: $|\Psi(t)\rangle = e^{-\frac{i\mathcal{H}t}{\hbar}}|\Psi(0)\rangle$ i sprawdzamy, czy układ wciąż jest w stanie $|\Psi(0)\rangle$ [1]

- Prawdopodobieństwo, że stan pozostał niezmieniony:
$p(t) = |\langle\Psi(0)|\Psi(t)\rangle|^2 = \langle\Psi(0)|\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)|\Psi(0)\rangle = \langle\Psi(0)|e^{-\frac{i\mathcal{H}t}{\hbar}}|\Psi(0)\rangle = \langle\Psi(0)|e^{\frac{i\mathcal{H}t}{\hbar}}|\Psi(0)\rangle$
Wtedy po rozwinięciu dla małych t [2]:

$$p(t) = 1 + t\cdot\left[\langle\Psi(0)|-\frac{i\mathcal{H}}{\hbar}|\Psi(0)\rangle\langle\Psi(0)|\Psi(0)\rangle + \langle\Psi(0)|\Psi(0)\rangle\langle\Psi(0)|\frac{i\mathcal{H}}{\hbar}|\Psi(0)\rangle\right] +$$
$$- t^2\cdot\left[\langle\Psi(0)|\frac{\mathcal{H}^2}{\hbar^2}|\Psi(0)\rangle\langle\Psi(0)|\Psi(0)\rangle + \frac{1}{2}\langle\Psi(0)|\Psi(0)\rangle\langle\Psi(0)|\frac{\mathcal{H}^2}{\hbar^2}|\Psi(0)\rangle - \langle\Psi(0)|\frac{\mathcal{H}}{\hbar}|\Psi(0)\rangle\langle\Psi(0)|\frac{\mathcal{H}}{\hbar}|\Psi\right.$$
$$= 1 + \frac{t^2}{\hbar^2}\underbrace{\left(\langle\Psi(0)|\mathcal{H}^2|\Psi(0)\rangle - \langle\Psi(0)|\mathcal{H}|\Psi(0)\rangle^2\right)}_{\Delta^2\mathcal{H}^3} + \mathcal{O}\left(t^3\right)$$

  Czyli wyobrażamy sobie, że mierzymy stan coraz częściej, czyli n razy co czas $\frac{t}{n}$, pytamy jakie jest prawdopodobieństwo , że we wszystkich n pomiarach okaże się, że stan pozostaje $|\Psi(0)\rangle$

- Czyli finalnie to prawdopodobieństwo, to: $p_n = \left(|\langle\Psi(0)|\Psi(t)\rangle|^2\right)^n = \left[1 - \frac{\Delta^2\mathcal{H}}{\hbar^2}(\frac{t}{n})^2 + \mathcal{O}(t^3)\right]^n$
$p_n \overset{n\to\infty}{\approx} 1 - \frac{\Delta^2\mathcal{H}t^2}{\hbar^2}\cdot\frac{1}{n}\mathcal{O}\left(\frac{1}{n^2}\right) \overset{n\to\infty}{\approx} 1$

- Rozumiemy to tak, że bardzo częsty pomiar 'zamraża' ewolucję stanu.

4.3 Równanie Schrodingera (na koszulkach)

Nierelatywistyczna, punktowa cząstka kwantowa mogąca się poruszać w przestzeni. Dla uproszczenia myślimy na razie o 1D.
Jeśli przestrzeń byłaby fundamentalnie zdyskretyzowana, tj. x_i[4] $\in \{\ldots, -2\Delta, -\Delta, 0, \Delta, 2\Delta, \ldots\}$, $|x_i\rangle$ - stany położeniowe (rozróżnialne) reprezentujące, że cząstka znajduje się w punkcie x_i.
Ogólny stan: $|\Psi\rangle = \sum_i \Psi_i|x_i\rangle$, $\quad \sum_i|\Psi_i|^2 = 1, \quad \langle x_i|x_j\rangle = \delta_{ij}$
Wygodnie jest rozważyć granicę **ciągłą**:

$$|\Psi\rangle = \int \mathrm{d}x\,\Psi(x)\,|x\rangle$$

Gdzie $|\Psi(x)|^2$ - gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w punkcie x.
Skoro chcemy, żeby $\langle\Psi|\Psi\rangle = 1^{(i)} \implies \int \mathrm{d}x\,|\Psi(x)|^2 = 1^{(ii)}$. Czyli:
$\langle\Psi|\Psi\rangle = \int \mathrm{d}x\,\Psi^*(x)\langle x|\int \mathrm{d}x\,\Psi(x')\,|x'\rangle \implies \int \mathrm{d}x\,\mathrm{d}x'\,\Psi^*(x)\Psi(x)\langle x|x'\rangle \overset{(i),(ii)}{\implies} \langle x|x'\rangle = \delta(x-x')$[5].
Funkcja falowa - funkcja gęstości prawdopodobieństwa $\Psi(x)$ o amplitudzie $|\Psi(x)|^2$. Jest ona reprezentacją położeniową stanu $|\Psi\rangle$
Zauważmy: $|Psi\rangle = \int \mathrm{d}x\,\Psi\,|x\rangle$, $|\varphi\rangle = \int \mathrm{d}x'\,\varphi(x')\,|x'\rangle$

$$\langle\Psi|\varphi\rangle = \int \mathrm{d}x\,\mathrm{d}x'\,\Psi^*(x)\varphi(x')\underbrace{\langle x|x'\rangle}_{\delta(x-x')} = \int \mathrm{d}x\,\Psi^*(x)\varphi(x)$$

[1] Czyli wykonujemy pomiar w bazie ortonormalnej, której jednym z wektorów jest $|\Psi(0)\rangle$
[2] $e^x \approx 1 + x + \frac{x^2}{2} + \mathcal{O}(x^3)$
[3] Stan ewoluuje 'tym szybciej' im ma większą ma wariancję $\mathcal{H}$
[4] Dopuszczalne położenia
[5] Czyli o $|x\rangle$ można myśleć jako o pewnej bazie ortogonalnej, ale nie unormowanej, bo $\langle x|x\rangle = \infty$

Możemy teraz zdefiniować operator (Obserwabla Położenia):

$$\hat{x} = \int \mathrm{d}x \, x \, |x\rangle\langle x| \,, \quad \hat{x}\,|x\rangle - \int \mathrm{d}x' \, x' \, |x'\rangle\langle x'| \, |x\rangle = x\,|x\rangle$$

Teraz zauważmy, że warunkiem zupełności bazy będą: (Fakt) $\underbrace{\int \mathrm{d}x \, |x\rangle\langle x|}_{C} = \mathbb{1}$

(Dowód) Weźmy dwa dowolne $|x'\rangle \,, |x''\rangle$

$$\langle x'|C|x''\rangle = \int \mathrm{d}x \, \langle x'|x\rangle \underbrace{\langle x|x''\rangle}_{\delta(x-x'')} = \langle x'|x''\rangle = \langle x'|\mathbb{1}|x''\rangle \implies C = 1 \quad \square$$

Czyli:

$$|\Psi\rangle = \int \mathrm{d}x' \, \Psi x' \, |x'\rangle \implies \Psi(x) = \langle x|\Psi\rangle$$

Pamiętamy, że $i\hbar \frac{\mathrm{d}|\Psi(t)\rangle}{\mathrm{d}t} = \mathcal{H}\,|\Psi(t)\rangle$. Teraz żeby napisać $\mathcal{H}$ kwantowo potrzebujemy $\hat{p}$

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad \text{kwantowo} \quad \rightarrow \hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$$

Operator Pędu:
Intuicja falowa (świetlna), fale płaskie (stany o dobrze określonej energii i pędzie)

$$\Psi(x,t) \sim e^{i(kx-\omega t)}$$

Hipoteza Plancka/ De Broigle'a $E = \hbar\omega$, $p = \frac{h}{\lambda} = \hbar \cdot k$
żeby $\hat{p}\Psi(x,t) = p\Psi(x,t) = \hbar k \Psi(x,t)$ trzeba wziąć $\hat{p} = \frac{\hbar}{i}$

Further reading:

- Notatki Demko do wykładu
- Zadania na ćwiczenia 3
- Rozwiązania z ćwiczeń 3

Lecture 5

Równanie Schrödingera, propagator i całki po trajektoriach et al.

5.1 Powtórka z poprzedniego wykładu

5.1.1 Reprezentacja położeniowa a pędowa

W reprezentacji położeniowej:

$$\hat{x}\,|x\rangle = x\,|x\rangle\,, \quad \hat{x}\,|\Psi\rangle = \hat{x}\int \mathrm{d}x\,\Psi(x)\,|x\rangle = \int \mathrm{d}x\,\Psi(x)\hat{x}\,|x\rangle = \int \mathrm{d}x\,\underbrace{\Psi(x)x}_{1}\,|x\rangle$$

Czyli widzimy, że zachodzi $|\Psi\rangle \xrightarrow{\hat{x}} \hat{x}\,|\Psi\rangle \equiv \Psi(x) \to x\cdot|\Psi\rangle$
Zachodzi również:

- $\{\cdot,\cdot\} \to -\frac{i}{\hbar}[\cdot,\cdot]$
- $[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar\cdot\mathbb{1}$
- $[\hat{x},\hat{p}]\,|\Psi\rangle = i\hbar\,|\Psi\rangle$ w reprezentacji położeniowej.
- $(x\cdot\hat{p} - \hat{p}\cdot x)\Psi(x) = i\hbar\Psi(x)$
  $x\,\underbrace{\hat{p}[\Psi(x)]}_{2} - \hat{p}[x\cdot\Psi(x)] = i\hbar\Psi(x)$

5.2 Równanie Schrödingera

Równanie Schrödingera

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x) + V(x)\Psi(x,t) \tag{5.1}$$

[1] Efektywne działanie $\hat{x}$ w reprezentacji położeniowej
[2] Działanie $\hat{p}$ w reprezentacji położeniowej

Wiemy, że ogólnie ewolucję liczymy:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_k \langle E_k|\Psi(0)\rangle \, e^{-\frac{iE_kt}{\hbar}} \, |E_k\rangle$$
$$\langle x|\Psi(x)\rangle = \sum_k e^{-\frac{iE_kt}{\hbar}} \, \langle E_k|\Psi(0)\rangle \, \langle x|E_k\rangle$$
$$\Psi(x) = \sum_k \langle E_k|\Psi(0)\rangle \, e^{-\frac{iE_kt}{\hbar}} \, \underbrace{\phi_{E_k}(x)}_{3}$$

Czyli wystarczy zmienić $\phi_{E_k}(x)$ i E_k, żeby znaleźć ewolucję $\hat{\mathcal{H}}[\phi_{E_k}(x)] = E_k\phi_{E_k}(x)$ co daje nam:

Równanie Schrödingera bez czasu

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\right]\phi_{E_k}(x) = E_k\phi_{E_k}(x) \tag{5.2}$$

Ta niezależna od czasu reprezentacja równania schrödingera de facto jest problemem szukania stanów własnych Hamiltonianu. Czyli rozwiązując ewolucję Hamiltonianu w czasie najpierw rozwiązujemy problem znajdywania stanów, a dopiero potem szukamy jego ewolucji czasowej, tj zgodnie z równaniem (5.1).

5.2.1 Cząstka swobodna

Gdzie dla cząstki swobodnej wygląda to tak, że $V(x) = 0$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\Psi(x) = E\Psi(x)$$
$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\Psi(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2}\Psi(x)$$

Gdzie rozwiązania to kombinacje liniowe $e^{\pm i\frac{2mE}{\hbar^2}}$ tj. Fale płaskie będące jednocześnie stanami własnymi $\hat{p}$

$$\implies \hat{p}e^{ipx/\hbar} = \frac{\hbar}{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}e^{ipx/\hbar} = p \cdot e^{ipx/\hbar}$$

Czyli będziemy rozkładać na stany własne w reprezentacji pędowej:

$$\Psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ipx/\hbar}, \quad p = \pm\sqrt{2mE}$$

Wtedy widzimy, że ewolucja prosta:

$$\Psi_p(x,t) = \Psi_p(x)e^{-\frac{iEt}{\hbar}} = \Psi_p(x)e^{-\frac{ip^2t}{2m\hbar}}$$

Czyli ewolucja ogólnego stanu:

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int \mathrm{d}p \, \underbrace{\langle p|\Psi(0)\rangle}_{4} \cdot e^{-\frac{ipx}{\hbar}-\frac{ip^2t}{2m\hbar}}$$

[3] Funkcja falowa stanu własnego $\hat{\mathcal{H}}$ (stan stacjonarny)

[4] Rozkład na stany własne pędu= $\tilde{\Psi}(p,0)$ - reprezentacja pędowa

5.3 Historia rozwoju Mechaniki Kwantowej

Były dwie szkoły ~~Falenicka i Otwocka~~ Heisenberga i Schrödingera:

- Schrödinger - Mechanika falowa opis poprzez funkcje falowe.
- Heisenberg - Mechanika Macierzowa, opis poprzez obserwable

5.4 Obraz Schrödingera i obraz Heisenberga

Obraz Schrödingera:
$|\Psi\rangle = U(t)\,|\Psi(0)\rangle\,, \quad U(t) = e^{-\frac{i\mathcal{H}t}{\hbar}}$. Jeśli liczymy wartość oczekiwaną obserwabli w czasie t: $\langle A\rangle_t = \langle\Psi(t)|\hat{A}|\Psi(t)\rangle = \langle\Psi(0)|U^\dagger(t)\hat{A}U(t)|\Psi(0)\rangle$
Możemy jednak spojrzeć na to jak na sytuację, gdzie stan układu nam się nie zmienia, a zmieniają się obserwable. Daje nam to:
Obraz Heisenberga:
$\left|\Psi^{(H)}(t)\right\rangle = |\Psi(0)\rangle\,, \quad \hat{A}^{(H)} := U^\dagger(t)\hat{A}U(t), \quad \langle A\rangle_t = \langle\Psi(0)|A^{(H)}(t)|\Psi(0)\rangle$
Ewolucja obserwabli jest opisana przez równanie Heisenberga:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{A}^{(H)}(t) = \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U^\dagger(t)\right)\hat{A}U(t) + U^\dagger(t)\hat{(A)}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U(t) = \frac{i}{\hbar}\left[U^\dagger(t)\hat{\mathcal{H}}\hat{A}U(t) - U^\dagger\hat{A}\hat{\mathcal{H}}U(t)\right] = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{\mathcal{H}}\hat{A}^{(H)} - \hat{A}^{(H)}\hat{\mathcal{H}}\right]$$

Czyli finalnie dostajemy:

Równanie Heisenberga

$$\frac{\mathrm{d}\hat{A}^{(H)}(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{\mathcal{H}}, \hat{A}^{(H)}(t)\right] \tag{5.3}$$

Further reading:

- Notatki Demko do wykładu
- Zadania na ćwiczenia 4
- Tu będą Rozwiązania z ćwiczeń 4

5.5 Propagator i całki po trajektoriach

Ewolucja w reprezentacji położeniowej:

$$\overbrace{\langle x|\Psi(t)\rangle}^{\Psi(x,t)} = \sum_k e^{-\frac{iE_k(t-t_0)}{\hbar}}\langle E_k|\underbrace{\mathbb{1}}_{\int \mathrm{d}x_0|x_0\rangle\langle x_0|}|\Psi(t_0)\rangle\langle x|E_k\rangle = \int \mathrm{d}x_0 \sum_k e^{-\frac{iE_k(t-t_0)}{\hbar}}\underbrace{\langle E_k|x_o\rangle}_{\phi_k^*(x_0)}\overbrace{\langle x_0|\Psi(t_0)\rangle}^{\Psi(x_0,t_0)}\underbrace{\langle x|E_k\rangle}_{\phi_k(x)}$$

$$\Psi(x,t) = \int \mathrm{d}x_0\left(\sum_k \phi_k(x)\phi_k^*(x_0)e^{-\frac{iE_k(t-t_0)}{\hbar}}\right)\Psi(x_0,t_0)$$

Propagator

Możemy powiedzieć, że $K(x,t,x_0,t_0)$ to **Propagator**

$$K(x,t,x_0,t_0) = \sum_k \!\!\!\!\!\!\!\!\int \phi_k(x)\phi_k^*(x_0)e^{-\frac{iE_k(t-t_0)}{\hbar}} \tag{5.4}$$

Jak można łatwo zauważyć, propagator kwacze jak kaczka, chodzi jak kaczka, wygląda jak kaczka, więc jest to szukana **Funkcja Greena**[5].

Ważna własność propagatora:

$$K(x,t_0,x_0,t_0) = \sum_k \!\!\!\!\!\!\!\!\int \phi_k(x)\phi_k^*(x_0)^6 = \delta(x-x_0)$$

Przykład: Propagator cząstki swobodnej

$$K(x,t,x_0,t_0) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int \mathrm{d}p\, e^{\frac{ipx}{\hbar}-\frac{i(t-t_0)}{2m\hbar}p^2}$$

Co mając w głowie **bardzo przyjemną własność matematyczną**:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\, e^{-ax^2+bx} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}e^{\frac{b^2}{4a}} \quad \text{co działa nawet dla liczb zespolonych, gdy} \quad \mathrm{Re}(a)\geq 0$$

Dostajemy:

$$K(x,t,x_0,t_0) \overset{\mathrm{Re}(a)=0^7}{=} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar|y-y_0|}}e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m(x-x_0)^2}{2|t-t_0|}}$$

[5] Oh no... PTSD activated

[6] Pamiętamy, że $\sum_k \phi_k(x)\phi_k^*(x) = \sum_k \langle x|E_k\rangle\langle E_k|x\rangle = \langle x|\delta(x-x_0)|x_0\rangle$

[7] W sensie dystrybucyjnym

Lecture 6

Propagator et al.

6.1 Ad Propagator

Kolejna ciekawa obserwacja:

$$U^1(t-t_0) = U(t-t_1)U(t_1-t_0)$$

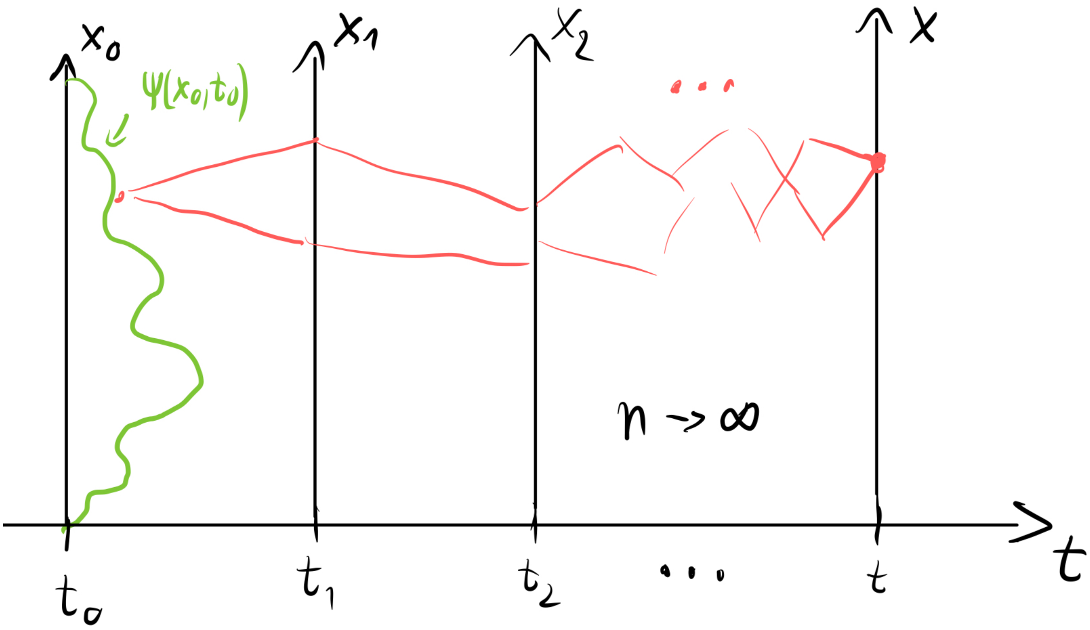
Teraz zapisując to na propagatorach dostajemy:

$$\Psi(x,t) = \int \mathrm{d}x_0\,\mathrm{d}x_1\, K(x,t,x_0,t_0)K(x_1,t_1,x_0,t_0)\Psi(x,t)$$

To teraz możemy zagęścić atmosferę (t_k):

$$\Psi(x,t) = \int \mathrm{d}x_0\,\mathrm{d}x_1\,\mathrm{d}x_2 \ldots K(x,t,x_n,t_n)K(x_n,t_n,x_{n-1},t_{n-1})\ldots K(x_1,t_1,x_0,t_0)$$

Teraz przechodzimy do granicy z $n \to \infty$ mamy de facto śumowanie”po wszystkich drogach jakimi porusza się cząstka, trochę jak Zasada Huygensa dla optyki. Twochę jak przechodzenie z reprezentacji położeniowej na pędową.



Rysunek 6.1: Sumowanie po drogach dla cząstki kwantowej, liczona na propagatorach. Wyraża to też Feynmannowska Całka po trajektoriach

[1] $U(t)$ jak w Sekcji 5.4

6.2 Całka po trajektoriach

Wprowadzone do Mechaniki Kwantowej przez Feynmanna, jest to inny sposób na wyprowadzenie propagatora.
Zauważamy:

$$K(x,t,x_0,t_0) = \sum\!\!\!\!\!\!\int_{x(\tau)^2, x(t_0)=x_0, x(t)=t} f[x(\tau)]$$

Intuicja: wiemy, że klasyczna trajektoria $\bar{x}(\tau)$ ekstremalizuje działanie:

$$S[x(\tau)] = \int_{t_0}^{t} \mathrm{d}\tau\, L(\dot{x}(\tau), x(\tau)), \quad L(\dot{x}, x) = \frac{m\dot{x}^2}{2} - V(x)$$

Gdzie L - Lagrangian. Weźmy więc

$$f[x(\tau)] = e^{\frac{iS[x(\tau)]}{\hbar}}$$

Dzięki temu w pobliżu trajektorii klasycznej będzie konstruktywna interferencja tych amplitud które sumujemy. Chcemy uzyskać taki efekt, żeby to się zgadzało z obserwowanym światem - zachowującym się klasycznie na skali makro.
Wniosek: Wynika z tego fakt, że możemy wyprowadzić Mechanikę Kwantową wyprowadzić z Mechaniki Klasycznej!
Chcemy pokazać, że tak skonstruowany propagator daje nam $\Psi(x,t)$ spełniającą równanie Schrödingera. Rozważamy teraz infintezymalny czas $4 = t_0 + \epsilon$, $K(x, t_0+\epsilon, x_0, t_0) \overset{\epsilon \to 0}{\approx}$ const.,

$$e^{1/\hbar \epsilon L(\frac{x-x_0}{\epsilon}, \frac{x+x_0}{2})}$$

Wtedy przeewoluowana funkcja falowa:

$$\Psi(x, t_0+\epsilon) = const. \int \mathrm{d}x_0\, \Psi(x_0, t) e^{\frac{1}{\hbar}\left(\frac{m(x-x_0)^2}{2\epsilon} - \epsilon V\left(\frac{x+x_0}{2}\right)\right)}$$

Niech $\eta = x - x_0$, które jest małe i będziemy chcieli je rozwijać w ϵ i η, przy czym wkład do wyrażenia dadzą tylko $\eta \sim \sqrt{\epsilon}$. Wtedy:

$$\Psi(x,t_0) + \epsilon \frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)\bigg|_{t=t_0} \approx -const \int \mathrm{d}\eta\, e^{\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon}} \left[\Psi(x,t_0) - \eta\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x,t_0)\frac{\eta^2}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi\right]\left[1 - \frac{i\epsilon}{\hbar}V(x-\frac{\eta}{2})\right]$$

Pamiętajac o takiej przyjemnej własności:

$$\int \mathrm{d}x\, x^n e^{-ax^2} = \begin{cases} 0 & \text{dla nieparzystych} \\ \frac{\sqrt{\pi}}{2^{n/2}} \cdot \frac{(n-1)!!}{a^{(n+1)/2}} & \text{dla parzystych} \end{cases}$$

$$\Psi(x,t_0) + \epsilon \frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)\bigg|_{t=t_0} \approx -const\left[\Psi(x,t_0)\cdot\sqrt{\frac{\pi}{\frac{-im}{2\hbar\epsilon}}} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t_0)\cdot\frac{\sqrt{\pi}}{2}\left(\frac{-2\hbar\epsilon}{im}\right)^{\frac{3}{2}}\right]\left[1 - \frac{i\epsilon}{\hbar}V(x)\right]$$

W najniższym rzędzie w ϵ:

$$\Psi(x,t_0) = -const\Psi(x,t_0)\sqrt{\frac{2\pi\hbar\epsilon}{-im}}$$

Co pozwala nam wyznaczyć stałą *const*. Będzie ona miała interpretację miary przy całkach po trajektoriach.

$$\Longrightarrow$$

Zmierzamy do równania Schrödingera. Dopisz potem z ostatnich paru minut wykładu

[2] Trajektoria

Lecture 7

Zasady nieoznaczoności

7.1 Off to propagator once more

Jak pamiętamy propagator zdefiniowaliśmy jak w równaniu (5.4), tj.

$$K(x,t,x_0,t_0) = const\sum_{x(\tau)} e^{iS[x(\tau)]} = \int D[x(\tau)]e^{iS[x(\tau)]} \quad \text{, gdzie} \quad S[x(\tau)] = \int_{t_0}^{t} \mathrm{d}\tau\, L(\dot{x}(\tau), x(\tau))^1$$

Weźmy sobie przykład, kwantowy oscylator harmoniczny:

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \quad L = \frac{m\dot{v}^2}{2} - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

Z tym, że zdefiniujmy sobie:

$$x(\tau) = \bar{x}(\tau) + y(\tau), \quad \begin{matrix} \bar{x}(t_0) = x_0 & y(t_0) = 0 \\ \bar{x}(t) = x & y(t) = t \end{matrix}$$

Wtedy nasz Lagrangian przyjmuje postać:

$$L = \frac{m(\bar{x}+y)^2}{2} - \frac{1}{2}m\omega^2(\bar{x}+y)^2 = \frac{m\dot{\bar{x}}^2}{2} - \frac{1}{2}m\omega^2\bar{x}^2 + \frac{m\dot{y}^2}{2} - \frac{1}{2}m\omega^2 y^2 + m\dot{\bar{x}}\dot{y} - m\omega^2\bar{x}y$$

Dlatego działanie by wyglądało:

$$S[x(\tau)] = S[x(\tau)] + S[y(\tau)] + \underbrace{\int_{t_0}^{t} \mathrm{d}\tau\, m\dot{\bar{x}}\dot{y} - m\omega^2\bar{x}y}_{\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t()\underbrace{[-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(m\ddot{\bar{x}} - m\omega^2\bar{x})]}_{=0^2} y}$$

Odwołujemy się tu do wyprowadzenia równań Eulera-Lagrange'a:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\mathrm{d}L}{\mathrm{d}\dot{x}} - \frac{\partial L}{\partial x} = 0, \quad \int_{t_0}^{t} \mathrm{d}\tau\, \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\delta\dot{x} + \frac{\partial L}{\partial x}\delta\dot{x} = {}^3 \int \mathrm{d}\tau \underbrace{\left[\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right) + \frac{\partial L}{\partial x}\right]}_{=0} \delta x$$

Czyli efektywnie sobie rozdzielamy trajektorię klasyczną (do której w granicy skali makro będzie zbiegać nasza trajektoria) od trajektorii kwantowej, do której stosujemy całkę po trajektoriach

$$K(x,t,x_0,t_0) = \exp\left(i\int_{t_0}^{t} \mathrm{d}\tau\, L(\dot{\bar{x}}, \bar{x})\right) \cdot \int D[y(\tau)] \exp\left(i\int_{t_0}^{t} \mathrm{d}\tau\, L(\dot{y}, y)\right)$$

[1] Gdzie $x(t_0) = x_0$ i $x(t) = x$

[2] Klasyczne równanie ruchu

[3] Przez części

Czyli:

$$K(x,t,x_0,t_0) = f(t,t_0)\exp\left(i\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}\tau\, L(\dot{\bar{x}},\bar{x})\right)^4$$

Gdzie klasyczna trajektoria oscylatora harmonicznego wygląda:

$$\bar{x}(\tau) = \bar{x}(t_0)\cos(\omega\tau - t_0) + \frac{\dot{\bar{x}}(t_0)}{\omega}\sin(\omega\tau - t_0), \quad \dot{\bar{x}}(\tau) = -\omega\bar{x}(t_0)\sin(\omega\tau - t_0) + \dot{\bar{x}}(t_0)\cos(\omega\tau - t_0)$$

A działanie:

$$S[\bar{x}(\tau)] = \int_{t_0}^{t}\mathrm{d}\tau\left(\frac{m\dot{\bar{x}}^2(\tau)}{2} - \frac{1}{2}m\omega^2\bar{x}^2(\tau)\right) = \cdots = h(\bar{x}(t_0),\dot{\bar{x}}(t_0),t,t_0)$$

Co po wyrażeniu $\dot{x}(t_0)$ poprzez $\bar{x}(t_0) = x_0$ i $\bar{x}(t) = x$:

$$\implies \dot{\bar{x}}(t_0) = \frac{\bar{x}(t) - \bar{x}(t_0)\cos\omega(t-t_0)}{\sin\omega(t-t_0)}\cdot\omega = \omega\cdot\frac{x - x_0\cos\omega(t-t_0)}{\sin\omega(t-t_0)}$$

Co po wstawieniu do h daje:

$$S[\bar{x}(\tau)] = \frac{m\omega}{2\sin\left[\omega(t-t_0)\right]}\left[(x^2+x_0^2)\cos\omega(t-t_0) - 2xx_0\right]$$

I wstawieniu wyżej:

$$K(x,t,x_0,t_0) = f(t,t_0)\exp\left(\frac{m\omega}{2\sin\left[\omega(t-t_0)\right]}\left[(x^2+x_0^2)\cos\omega(t-t_0) - 2xx_0\right]\right)$$

Zaś aby wyznaczyć $f(t,t_0)$ wystarczy przepropagować dowolny stan (np. gaussowski) i należy nałożyć watunek zachowania normalizacji. Tym sposobem uciekamy od problemu całki po trajektoriach i dostajemy wynik:

$$f(t,t_0) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin\omega(t-t_0)}}$$

Co po wzięciu $\omega \to 0$ powinno nam odtworzyć propagator dla cząstki swobodnej:

$$K_{\omega=0}(x,t,x_0,t_0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t-t_0)}}$$

7.2 Zasada niezoaczoności Heisenberga-Robertsona

Przypomnijmy sobie paczkę Gaussowską:

$$\Psi(x) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{\frac{1}{4}}}e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2}+\frac{ip_0x}{\hbar}}$$

A na ćwiczeniach wyszło nam dla paczki Gaussowskiej:

$$\Delta^2 x = \sigma^2$$
$$\Delta^2 p = \tfrac{\hbar^2}{4\sigma^2}$$

Czyli im lepiej określone położenie, tym gorzej określony pęd. Daje to znaną postać Zasady nieoznaczoności Heisenberga:

$$\Delta^2 x\Delta^2 p \geq \frac{\hbar^2}{4} \tag{7.1}$$

Co jest szczególnym przypadkiem zasady sformułowanej dla dowolnych dwóch niekomutujących obserwabli $\hat{A},\hat{B}$ i stanu $|\Psi\rangle$.

[4] Działanie na klasycznej trajektorii, zależność tylko od x, x_0

7.2.1 Twierdzenie

$$\underbrace{\Delta^2 A}_{\langle\Psi|\hat{A}^2|\Psi\rangle - \langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle^2} \cdot \Delta^2 B \geq \frac{1}{4}|\underbrace{\langle[A,B]\rangle}_{\langle\Psi|[A,B]|\Psi\rangle}|$$

W szczególności"

$$\hat{A} = \hat{x}, \quad \hat{B} = \hat{p}, \quad [\hat{x},\hat{p}] = i\hbar \implies \Delta^2 x \Delta^2 p \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

Czyli stan Gaussowski wysyca zasadę nieoznaczoności

7.2.2 Dowód

Niech:

$$\begin{matrix} \hat{A}' = \hat{A} - \left\langle \hat{A} \right\rangle \cdot \mathbb{1} \\ \hat{B}' = \hat{B} - \langle B \rangle \cdot \mathbb{1} \end{matrix} \implies \begin{matrix} \left\langle \hat{A}' \right\rangle = 0 & \Delta^2 A' = \Delta^2 A \\ \left\langle \hat{B}' \right\rangle = 0 & \Delta^2 B' = \Delta^2 B \end{matrix}$$

Teraz zdefiniujmy sobie operator $\hat{F} = \hat{A}' + i\lambda \hat{B}', \lambda \in \mathbb{R}$.
Rozważmy $F^\dagger F$ - ten operator (jest on **Dowolny**) jest hermitowski i dodatni, bo $\forall_{|\Psi\rangle} \langle\Psi|F^\dagger F|\Psi\rangle \geq 0$
W związku z tym możemy sobie zapisać:

$$\begin{gathered} \langle\Psi|(\hat{A}' - i\lambda\hat{B}')(\hat{A}' + i\lambda\hat{B}')|\Psi\rangle \geq 0 \\ \forall_{|\Psi\rangle} \left\langle \hat{A}'^2 + \lambda^2 \hat{B}'^2 + i\lambda(\hat{A}'\hat{B}' - \hat{B}'\hat{A}') \right\rangle \geq 0 \end{gathered}$$

Co daje nam:

$$\begin{gathered} \Delta^2 A' + \lambda^2 \Delta^2 B' + i\lambda \langle [A', B'] \rangle \geq 0 \\ \Delta^2 A + \lambda^2 \Delta^2 B + i\lambda \langle [A, B] \rangle \geq 0 \end{gathered}$$

Co jest prawdziwe dla dowolnej λ, czyli $\Delta = b^2 - 4ac \leq 0$, co daje:

$$\underbrace{\Bigg(\underbrace{i \overbrace{\langle [A,B] \rangle}^{\text{czysto urojone}}}_{\text{czysto rzeczywiste}} \Bigg)^2}_{dodatnie} - 4\Delta^2 A \Delta^2 B \leq 0$$

Czyli pamiętając, że $\langle [A,B] \rangle^* = -\langle [A,B] \rangle$ finalnie dostajemy dowód na nierówność:

$$\Delta^2 A \Delta^2 B \geq \frac{1}{4} |\langle [A,B] \rangle| \tag{7.2}$$

Z tym, że mamy nie myśleć o tym jak Heisenberg, że pomiar jednego zaburza drugie, a że nie ma stanów kwantowych w których wariancje obu obserwabli są jednocześnie małe.

Lecture 8

Zasady nieoznaczoności C.D.

Na ostatnim wykładzie wyprowadzilliśmy sobie ogólną zasadę nieoznaczoności Heisenberga - Robertsona. Ma postać jak w równaniu (7.2):

$$\Delta^2 A \Delta^2 B \geq \frac{1}{4} |\langle [A, B] \rangle|$$

8.1 Jednoczesny pomiar komutujących obserwabli

Fakt: Jeśli $[A, B] = 0$, to możliwy jest jednoczesny pomiar $\hat{A}$ i $\hat{B}$.
Dowód: Chcemy pokazać, że istnieje baza ortonormalna $\{|a_i, b_j\rangle\}$ taka, że $\hat{A}|a_i, b_j\rangle = a_i |a_i, b_j\rangle$, $\hat{B}|a_i, b_j\rangle = b_j |a_i, b_j\rangle$ (Wspólna baza wektorów własnych $\hat{A}$ i $\hat{B}$.)
Niech $|a_i\rangle |a_2\rangle$ będą wektorami własnymi $\hat{A}$, wtedy: $\begin{matrix} \hat{A}|a_1\rangle = a_1 |a_1\rangle \\ \hat{A}|a_2\rangle = a_2 |a_2\rangle \end{matrix}$. Ale wtedy wiemy też, że $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = 0$, czyli:

$$\begin{aligned} \langle a_1 | \left[\hat{A}, \hat{B}\right] | a_2 \rangle &= 0 \\ \langle a_1 | \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} | a_2 \rangle &= 0 \\ \underbrace{\langle a_1 | \hat{A}\hat{B} | a_2 \rangle}_{\langle a_1 | a_1} - \underbrace{\langle a_1 | \hat{B}\hat{A} | a_2 \rangle}_{a_2 | a_2 \rangle} &= 0 \end{aligned}$$

Czyli:

$$(a_1 - a_2) \langle a_1 | \hat{B} | a_2 \rangle = 0$$

I dzieje się tak dla dowolnych $|a_i\rangle$. Jeśli wszystkie a_i są od siebie różne (Czyli $\hat{A}$ nie jest zdegenerowane) to mamy:

$$(a_i - a_j) \langle a_i | \hat{B} | a_j \rangle = 0 \implies \langle a_i | \hat{B} | a_j \rangle = \delta_{ij} \langle a_i | \hat{B} | a_i \rangle$$

Czyli dostajemy, że $\hat{B}$ jest diagonalny w bazie własnej $\hat{A}$.
Jeśli mamy degenerację, czyli $\forall i \in S_a, a_i = a \implies$ B ma postać **blokowo diagonalną**, z każdym blokiem nad podprzestrzenią $\mathcal{H}_a = \langle |a_i\rangle, |a_j\rangle \rangle$, a operator $\hat{A}$ nad przestrzenią $\mathcal{H}_a$ działa jak $a \cdot \mathbb{1}_{\mathcal{H}_a}$.
Czyli wynika z tego, że Możemy ramach bloku zdiagonalizować $\hat{B}$ nie zmieniając postaci $\hat{A}$ (Bo $U_a \mathbb{1}_{\mathcal{H}_a} U^\dagger = \mathbb{1}_{\mathcal{H}_a}$).
Czyli istnieje baza własna $|a_i, b_j\rangle$ taka, że $\begin{matrix} \hat{A}|a_i, b_j\rangle = a_i |a_i, b_j\rangle \\ \hat{B}|a_i, b_j\rangle = b_j |a_i, b_j\rangle \end{matrix}$
Wniosek: Jeśli mamy więcej komutujących obserwabli $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \ldots$, to możemy skonstruować bazę $|a_i, b_j, c_k, \ldots\rangle$ taką, że $\begin{matrix} \hat{A}|a_i, b_j, c_k, \ldots\rangle = a_i |a_i, b_j, c_k, \ldots\rangle \\ \hat{B}|a_i, b_j, c_k, \ldots\rangle = b_j |a_i, b_j, c_k, \ldots\rangle \\ \hat{C}|a_i, b_j, c_k, \ldots\rangle = c_k |a_i, b_j, c_k, \ldots\rangle \\ \ldots \end{matrix}$ Definicja: Jak wartości własne jednocznacznie identyfikują jako wektor $|a_i, b_j, c_k, \ldots\rangle$ Zdj od Krzyśka

8.2 Jednoczesny pomiar niekomutujących obserwabli (?)

Niech $[A, B] \neq 0$, to nie istnieje baza własna. Dowód a.a.

Gdyby istniała baza ortogonalna $\begin{matrix} \hat{A}\,|a_i, b_j\rangle = a_i\,|a_i, b_j\rangle \\ \hat{B}\,|a_i, b_j\rangle = b_j\,|a_i, b_j\rangle \end{matrix} \implies \langle a_i, b_j| \left[\hat{A}, \hat{B}\right] |a'_i, b'_j\rangle = (a_i b_j - a_{i'} b_{j'})\delta_{jj'}\delta_{ii'}$ $= 0 \implies \left[\hat{A}, \hat{B}\right] = 0$ sprzeczność.

Niemniej, mimo to można pytać się o jednoczesny (ale rozmyty) pomiar niekomutujących obserwabli, np.$\hat{x}, \hat{p}$. Intuicja:

$$\Psi_{x_0,p_0} = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{\frac{1}{4}}} \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2} + \frac{ip_0 x}{\hbar}\right)$$

$$\langle \hat{x} \rangle = x_0, \quad \Delta^2 x = \sigma^2$$

$$\langle \hat{p} \rangle = p_0, \quad \Delta^2 p = \frac{\hbar}{4\sigma^2}$$

Ten stan ma jednoznacznie określone położenie i pęd najlepiej jak się da, bo:

$$\Delta^2 x \Delta^2 p = \frac{\hbar^2}{4}$$

(Czyli wysyca zasadę nieoznaczoności Heisenberga-Robertsona), gdzie $|x_0, p_0\rangle$ - stan odpowiadajacy Ψ_{x_0,p_0}. Czyli moglibyśmy stworzyć śiatkęśtanów o w miarę dobrze określonych $\hat{x}$ i $\hat{p}$, który byłyby prawie ortogonalne i moglibysmy to traktować jako bazę pomiarową.
Jeśli tak myślimy, to dostajemy wynik mówiący o położeniu cząstki z precyzją $\delta^2 x = \sigma^2$, $\delta^2 p = \frac{\hbar^2}{4\sigma^2}$.
Jeśli mamy jakiś stan $|\phi\rangle$, którego w ten sposób mierzymy położenia z rozrzutem

$$\Delta^2 x' = \underbrace{\Delta^2}_{1} x + \underbrace{\delta^2}_{2} x, \Delta^2 p' = \Delta^2 p + \delta^2 p$$

Możemy teraz napisać zasadę nieoznaczoności dla łącznego pomiaru$\hat{x}, \hat{p}$ (tak jak chciał Heisenberg).

$$\Delta^2 x' \Delta^2 p' = \underbrace{\Delta^2 x \Delta^2 p}_{\geq \frac{\hbar^2}{4}} + \underbrace{\delta^2 x \delta^2 p}_{\geq \frac{\hbar^2}{4}} + \Delta^2 x \delta^2 p + \delta^2 x \Delta^2 p \geq \frac{\hbar^2}{4} + \frac{\hbar^2}{4} \underbrace{\left(\frac{\Delta^2 x}{\delta^2 x} + \frac{\delta^2 x}{\Delta^2 x}\right)}_{x + \frac{1}{x} \geq 2}$$

Co daje nam finalnie:

$$\Delta^2 x' \Delta^2 p' \geq \hbar^2 \tag{8.1}$$

8.3 Zasada niezoznaczoności czas-energia Dodaj indeks

$\hat{\mathcal{H}}$ - operator energii, ale nie mamy operatora czasu $\hat{t}$, czyli nie możemy używać zasady nieoznaczoności Heisenberga-Robertsona, ale spodziewamy się, że coś podobnego powinno być, bo szybkość ewolucji stanów jest związana z rozrzutem Energii $(\Delta^2 \mathcal{H})$

[1]Wariancja dla idealnego pomiaru położenia
[2]Wariancja rozmycia 'linijki' którą mierzymy

Spis treści

Spis rysunków

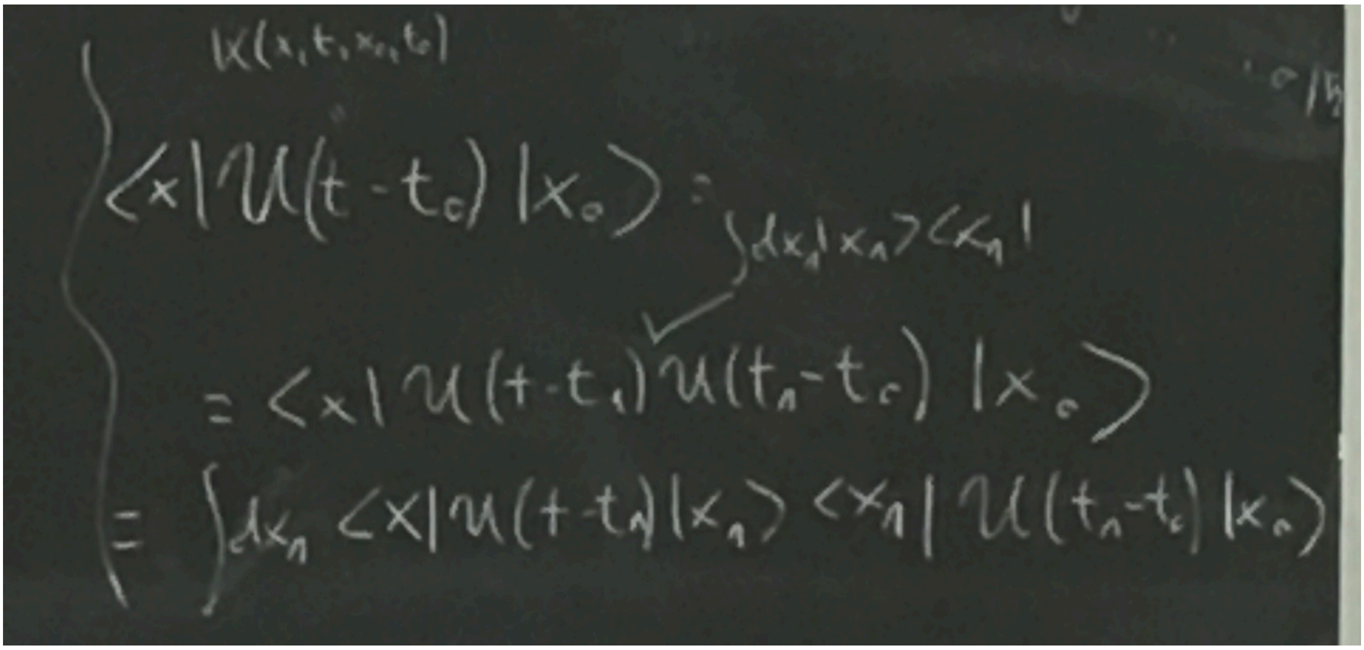
Indeks

Załączniki

Dodatek A

Długaśne wyprowadzenia wzorów

A.1 Lecture 6



Załącznik A.1: Uzasadnienie dla unitarnego operatora