Ciągła zmienna losowa

Wiemy już, że dla dyskretnej zmiennej losowej **moment zwykły *k*-tego rzędu** ma postać:

$$\langle x^k \rangle = \sum_{i=1}^{n} {x_i}^k \, p_i$$

Dla ciągłej zmiennej losowej definicja **momentu zwykły *k*-tego rzędu** jest podobna

$$\langle x^k \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x^k \, \rho(x) dx$$

gdzie $\rho(x)$ to **funkcja gęstości prawdopodobieństwa** – funkcja opisująca rozkład prawdopodobieństwa i spełniająca warunki:

$$\rho(x) \geq 0$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x) dx = 1$$

Pierwszy warunek oznacza, że funkcja gęstości prawdopodobieństwa jest zawsze nieujemna, a drugi warunek, że jest unormowana do jedności.

Problem. Proszę unormować funkcję gęstości prawdopodobieństwa $\rho(x) = constans$, która jest określona na przedziale $[a, b]$.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} cdx = \int_{-\infty}^{a} cdx + \int_{a}^{b} cdx + \int_{b}^{+\infty} cdx = \int_{a}^{b} cdx = 1 \;\rightarrow\; [cx]_a^b = 1 \;\rightarrow\; cb - ca = 1$$

$$\downarrow$$

$$c(b-a) = 1 \;\rightarrow\; c = \frac{1}{b-a}$$

Problem. Proszę wyznaczyć odchylenie standardowe Δx dla funkcji gęstości prawdopodobieństwa $\rho(x) = constans$, która jest określona na przedziale $[a, b]$.

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x\,\rho(x)dx = \int_{a}^{b} \frac{x}{b-a}dx = \frac{1}{b-a}\int_{a}^{b} x\,dx = \left[\frac{x^2}{2(b-a)}\right]_a^b = \frac{b^2}{2(b-a)} - \frac{a^2}{2(b-a)}$$

$$\downarrow$$

$$\langle x \rangle = \frac{b^2 - a^2}{2(b-a)} = \frac{(b-a)(b+a)}{2(b-a)} = \frac{a+b}{2}$$

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2\,\rho(x)dx = \frac{1}{b-a}\int_{a}^{b} x^2\,dx = \left[\frac{x^3}{3(b-a)}\right]_a^b = \frac{b^3}{3(b-a)} - \frac{a^3}{3(b-a)}$$

$$\downarrow$$

$$\langle x^2 \rangle = \frac{b^3 - a^3}{3(b-a)} = \frac{(b-a)(b^2+ab+a^2)}{3(b-a)} = \frac{b^2+ab+a^2}{3}$$

W związku z tym, wariancja $(\Delta x)^2$ wynosi $\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$

$$(\Delta x)^2 = \frac{b^2+ab+a^2}{3} - \left(\frac{a+b}{2}\right)^2 = \frac{b^2+ab+a^2}{3} - \frac{a^2+2ab+b^2}{4}$$

$$(\Delta x)^2 = \frac{4b^2 + 4ab + 4a^2}{12} - \frac{3a^2 + 6ab + 3b^2}{12} = \frac{b^2 - 2ab + a^2}{12} = \frac{(b-a)^2}{12}$$

A odchylenie standardowe Δx

$$\Delta x = \sqrt{\frac{(b-a)^2}{12}} = \frac{b-a}{\sqrt{12}} = \frac{b-a}{2\sqrt{3}}$$

Przejście <u>fizyka klasyczna → mechanika kwantowa</u> jest proste: polega na zamianie mierzalnej wielkości fizycznej A (**obserwabla**) na odpowiadający jej **operator** $\hat{A}$, tzn. $A \rightarrow \hat{A}$. Następnie, dla otrzymanego operatora $\hat{A}$ należy zapisać **równanie własne** $\hat{A}\psi = a\psi$, gdzie ψ to obiekt matematyczny zwany **funkcją falową**. Przyjmijmy, że funkcja falowa ψ jest rzeczywista i pomnóżmy równanie własne (lewostronnie) przez ψ

$$\psi\hat{A}\psi = \psi a\psi$$

Otrzymane równanie całkujemy obustronnie

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi\hat{A}\psi = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi a\psi = a\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^2 \quad \rightarrow \quad a = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi\hat{A}\psi \cdot \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^2\right)^{-1}$$

Gdy obserwablą jest położenie x cząstki: $x \rightarrow \hat{x} = x\,\cdot$

$$a = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi x\psi \cdot \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^2\right)^{-1} = \int_{-\infty}^{+\infty} x\psi^2 \cdot \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^2\right)^{-1}$$

Jeżeli kwadrat funkcji falowej ψ^2 zinterpretujemy jako gęstość prawdopodobieństwa ρ znalezienia cząstki w określonym miejscu przestrzeni, tzn. $\psi^2 \to \rho$ otrzymamy klasyczną def. wartości średniej (moment zwykły pierwszego rzędu)!

$$a = \int_{-\infty}^{+\infty} x\rho(x) \cdot \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x) \right)^{-1} = \langle x \rangle$$

W związku z tym moment zwykły k-tego rzędu powinien być zdefiniowany jako:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi \hat{A}^k \psi \cdot \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^2 \right)^{-1}$$

Problem. Rozważmy cząstkę która może poruszać się w obrębie odcinka o długości L, którego początek znajduje się w punkcie $x = 0$. Nie wiemy jednak jaka funkcja falowa ψ opisuje nasz układ. Jedno jest pewne – cząstka nie może opuścić odcinka, a więc prawdopodobieństwo ρ spotkania cząstki na krańcach odcinka jest zerowe ($\rho = 0$), a więc: $\psi(0) = \psi(L) = 0$, ponieważ $\rho = \psi^2$. Zauważmy, że funkcja falowa $\psi_a = x$ spełnia zadane **warunki brzegowe** jedynie połowicznie. Podobnie jest w przypadku funkcji falowej $\psi_b = L - x$. Jednak już ich iloczyn spełnia warunki brzegowe: $\psi_c = \psi_a \psi_b = x(L - x)$. Ponieważ

$$\int_{-\infty}^{+\infty} {\psi_c}^2 = \int_{-\infty}^{0} {\psi_c}^2 + \int_{0}^{L} {\psi_c}^2 + \int_{L}^{+\infty} {\psi_c}^2 = \int_{0}^{L} {\psi_c}^2 \neq 1$$

należy dokonać normalizacji funkcji ψ_c, a więc pomnożyć ją przez pewną stałą N (**stała normalizacyjna**, ang. *normalization constant*) tak aby

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (N\psi_c)^2 = \int_0^L (N\psi_c)^2 = 1$$

$$\downarrow$$

$$N^2 \int_0^L {\psi_c}^2 = 1 \quad \rightarrow \quad N^2 = \left(\int_0^L {\psi_c}^2\right)^{-1} \quad \rightarrow \quad N = \pm\sqrt{\left(\int_0^L {\psi_c}^2\right)^{-1}}$$

Uwaga! Znak przy stałej normalizacyjnej nie jest istotny.

$$\int_0^L {\psi_c}^2 = \int_0^L [x(L-x)]^2 = \int_0^L x^2(L^2 - 2Lx + x^2) = \int_0^L (x^2L^2 - 2Lx^3 + x^4)$$

$$\downarrow$$

$$\int_0^L {\psi_c}^2 = L^2 \int_0^L x^2 - 2L\int_0^L x^3 + \int_0^L x^4 = \left[\frac{L^2x^3}{3} - \frac{2Lx^4}{4} + \frac{x^5}{5}\right]_0^L = \left[\frac{L^2x^3}{3} - \frac{Lx^4}{2} + \frac{x^5}{5}\right]_0^L$$

$$\downarrow$$

$$\int_0^L {\psi_c}^2 = \frac{L^5}{3} - \frac{L^5}{2} + \frac{L^5}{5} = \frac{10L^5}{30} - \frac{15L^5}{30} + \frac{6L^5}{30} = \frac{L^5}{30}$$

W związku z tym

$$N = \pm\sqrt{\left(\frac{L^5}{30}\right)^{-1}} = \pm\sqrt{\frac{30}{L^5}}$$

Znormalizowana funkcja falowa ma postać

$$\psi_c = \pm\sqrt{\frac{30}{L^5}}x(L-x)$$

I możemy przystąpić do wyznaczenia momentu zwykłego pierwszego i momentu zwykłego drugiego rzędu w oparci o ogólną formułę:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi \hat{A}^k \psi \cdot \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^2\right)^{-1}$$

W naszym przypadku drugi człon podcałkowy jest równy jedności. Ponieważ mamy swobodę wybierając znak stałej normalizacyjnej przyjmijmy, że jest dodatnia.

$$\langle x\rangle = \int_0^L \psi\hat{x}^1\psi = \int_0^L \sqrt{\frac{30}{L^5}}x(L-x)\,x\sqrt{\frac{30}{L^5}}x(L-x) = \frac{30}{L^5}\int_0^L x^3(L-x)^2$$

$$\langle x\rangle = \frac{30}{L^5}\cdot\frac{L^6}{60} = \frac{L}{2}$$

$$\langle x^2\rangle = \int_0^L \psi\hat{A}^2\psi = \int_0^L \sqrt{\frac{30}{L^5}}x(L-x)\,x^2\sqrt{\frac{30}{L^5}}x(L-x) = \frac{30}{L^5}\int_0^L x^4(L-x)^2$$

$$\langle x^2\rangle = \frac{30}{L^5}\cdot\frac{2L^7}{105} = \frac{4}{7}L^2$$

Wariancja i odchylenie standardowe położenia cząstki wynoszą zatem:

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \frac{4L^2}{7} - \left(\frac{L}{2}\right)^2 = \frac{9L^2}{28} \quad \rightarrow \quad \Delta x = \frac{3L}{2\sqrt{7}}$$

Gdy obserwablą jest **pęd** p cząstki

$$p \ \rightarrow \ \hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$$

$$\langle p \rangle = \int_0^L \psi \hat{p}^1 \psi = \int_0^L \sqrt{\frac{30}{L^5}} x(L-x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right) \sqrt{\frac{30}{L^5}} x(L-x)$$

$$\downarrow$$

$$\langle p \rangle = -\frac{30i\hbar}{L^5} \int_0^L x(L-x) \frac{d}{dx} x(L-x)$$

$$\frac{d}{dx}(xL - x^2) = L - 2x$$

$$\langle p \rangle = -\frac{30i\hbar}{L^5} \int_0^L (xL - x^2)(L - 2x) = 0$$

$$\langle p^2 \rangle = \int_0^L \psi \hat{p}^2 \psi = \int_0^L \sqrt{\frac{30}{L^5}} x(L-x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right)^2 \sqrt{\frac{30}{L^5}} x(L-x)$$

$$\downarrow$$

$$\langle p^2 \rangle = -\frac{30\hbar^2}{L^5}\int_0^L x(L-x)\ \frac{d^2}{dx^2}x(L-x) = \frac{60\hbar^2}{L^5}\cdot\frac{L^3}{6} = \frac{10\hbar^2}{L^2}$$

Wariancja i odchylenie standardowe pędu p cząstki wynoszą zatem:

$$(\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 = \langle p^2 \rangle = \frac{10\hbar^2}{L^2} \quad \rightarrow \quad \Delta p = \frac{\sqrt{10}\hbar}{L}$$

Zasada nieoznaczoności Heisenberga stwierdza, że

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

W naszym przypadku

$$\frac{3L}{2\sqrt{7}}\cdot\frac{\sqrt{10}\hbar}{L} \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\downarrow$$

$$3\left(\sqrt{\frac{10}{7}}\sim 1\right) \geq 1 \quad \rightarrow \quad 3 \geq 1$$

Co oznacza otrzymany wynik? Zaproponowana funkcja falowa ψ_c jest dobrym (ale nie optymalnym) wyborem. Dopasowywanie funkcji falowej do danego układu jest możliwe dzięki zasadzie nieoznaczoności (nieokreśloności) Heisenberga. Im lepsze dopasowanie, tym mniejsza wartość iloczynu $\Delta x \Delta p$. W idealnym przypadku nierówność słaba powinna przejść w równanie $1 = 1$. W kolejnym kroku możemy założyć, że poszukiwana funkcja falowa ma postać: $\psi_d = \psi_a \psi_c$ lub $\psi_d = \psi_b \psi_c$. Czy otrzymamy lepsze dopasowanie?