

Podstawy fizyki kwantowej i budowy materii

prof. dr hab. Aleksander Filip Żarnecki

Zakład Cząstek i Oddziaływań Fundamentalnych
Instytut Fizyki Doświadczalnej



Wykład 7
21 listopada 2016

- 1 Pomiary paczek falowych
- 2 Operatory
- 3 Równanie Schrödingera
- 4 Twierdzenie Ehrenfesta

1 Pomiary paczek falowych

2 Operatory

3 Równanie Schrödingera

4 Twierdzenie Ehrenfesta

Funkcję falową **cząstki swobodnej** możemy zawsze przedstawić jako superpozycję stanów o ciągłym rozkładzie wektora falowego ($k = \frac{p}{\hbar}$):

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(k) e^{i(kx - \omega t)} dk$$

Rozkład w “**przestrzeni pędów**” (wektora falowego) $\varphi(k)$ jest związany z rozkładem przestrzennym $\psi(x, t)$ poprzez transformatę Fouriera:

$$\varphi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, t) e^{-ikx} dx$$

Wybór chwili czasu t wpływa tylko na fazę $\varphi(k)$

Cząstkę swobodną przedstawiamy jako superpozycję fal harmonicznycch:

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = A e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad \text{w 3-D}$$

$$\Psi_k(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)} \quad \text{jednowymiarowa}$$

Funkcje te nie są unormowane (A nie jest dobrze zdefiniowane!) ale są **ortogonalne**. Dlatego możemy je wykorzystywać jako **funkcje bazowe**.

Cząstkę swobodną przedstawiamy jako superpozycję fal harmonicznych:

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = A e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad \text{w 3-D}$$

$$\Psi_k(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)} \quad \text{jednowymiarowa}$$

Funkcje te nie są unormowane (A nie jest dobrze zdefiniowane!) ale są **ortogonalne**. Dlatego możemy je wykorzystywać jako **funkcje bazowe**.

W przypadku jednowymiarowym:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_k^*(x, t) \Psi_{k'}(x, t) dx = 2\pi |A|^2 \delta(k - k')$$

gdzie: $\delta(x)$ - tzw. funkcja delta Diraca. Dla dowolnej funkcji $f(x)$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx f(x) \delta(x - x_0) = f(x_0)$$

Gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w danym miejscu (i w danej chwili czasu) dana jest przez **kwadrat amplitudy** funkcji falowej:

$$p(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \Psi^*(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t)$$

Dla jednowymiarowej funkcji falowej:

$$p(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 = \Psi^*(x, t) \Psi(x, t)$$

Interpretacja probabilistyczna

Gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w danym miejscu (i w danej chwili czasu) dana jest przez **kwadrat amplitudy** funkcji falowej:

$$p(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \Psi^*(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t)$$

Dla jednowymiarowej funkcji falowej:

$$p(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 = \Psi^*(x, t) \Psi(x, t)$$

Gęstość prawdopodobieństwa $p(x, t)$ ma wszelkie własności “klasycznych” rozkładów prawdopodobieństwa! (np. błędów pomiarowych)

Warunek normalizacji:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1$$

Możliwe wyniki

Jeśli mamy cząstkę (stan) opisaną paczką falową $\Psi(x, t)$, w chwili t dokonujemy pomiaru położenia cząstki x .

Zakładamy, że błędy pomiarowe są pomijalne.

W wyniku pomiaru możemy otrzymać tylko taką wartość x , dla której

$$p(x, t) > 0$$

Pomiar położenia

Możliwe wyniki

Jeśli mamy cząstkę (stan) opisaną paczką falową $\Psi(x, t)$, w chwili t dokonujemy pomiaru położenia cząstki x .

Zakładamy, że błędy pomiarowe są pomijalne.

W wyniku pomiaru możemy otrzymać tylko taką wartość x , dla której

$$p(x, t) > 0$$

Wartość oczekiwana

Wartością oczekiwaną pomiaru nazywamy **wartość średnią** mierzonej wielkości wynikającą z **rozkładu prawdopodobieństwa** $p(x, t)$:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x p(x, t) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) x \Psi(x, t) dx$$

wartość średnia nie musi być wartością najbardziej prawdopodobną (odpowiadającą maksimum $p(x, t)$) !

Funkcje położenia

W podobny sposób możemy wyrazić oczekiwany wynik pomiaru dowolnej wielkości zależnej od położenia $f = f(x)$:

$$\langle f \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) p(x, t) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) f(x) \Psi(x, t) dx$$

Przykładowo, wariancja rozkładu położenia:

$$\text{Var}(x) = \sigma_x^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) (x - \langle x \rangle)^2 \Psi(x, t) dx$$

σ_x jest tu odchyleniem standardowym pomiaru położenia

Aby wyznaczać oczekiwane wartości innych wielkości fizycznych powinniśmy znać ich rozkłady gęstości prawdopodobieństwa.

Rozkład pędu

Znając postać paczki falowej cząstki swobodnej $\psi(x, t)$ możemy wyznaczyć rozkład wektora falowego:

$$\varphi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, t) e^{-ikx} dx$$

Aby wyznaczać oczekiwane wartości innych wielkości fizycznych powinniśmy znać ich rozkłady gęstości prawdopodobieństwa.

Rozkład pędu

Znając postać paczki falowej cząstki swobodnej $\psi(x, t)$ możemy wyznaczyć rozkład wektora falowego:

$$\varphi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, t) e^{-ikx} dx$$

Oczekiwana wartość pędu

Możemy więc wyznaczyć również wartość oczekiwaną:

$$\langle p \rangle = \langle \hbar k \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(k) \hbar k \varphi(k) dk$$

Aby wyznaczać oczekiwane wartości innych wielkości fizycznych powinniśmy znać ich rozkłady gęstości prawdopodobieństwa.

Rozkład pędu

Znając postać paczki falowej cząstki swobodnej $\Psi(x, t)$ możemy wyznaczyć rozkład wektora falowego:

$$\varphi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, t) e^{-ikx} dx$$

Oczekiwana wartość pędu

Możemy więc wyznaczyć również wartość oczekiwaną:

$$\langle p \rangle = \langle \hbar k \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(k) \hbar k \varphi(k) dk$$

Czy możemy wyznaczyć $\langle p \rangle$ bezpośrednio z $\Psi(x, t)$?

Oczekiwana wartość pędu

Wstawiając wyrażenie na $\varphi(k)$ do wzoru na wartość oczekiwaną:
wszystkie całki od $-\infty$ do $+\infty$

$$\begin{aligned}\langle p \rangle &= \int dk \varphi^*(k) \hbar k \varphi(k) \\ &= \frac{1}{2\pi} \int dk \int dx' \Psi^*(x', t) e^{ikx'} \hbar k \int dx \Psi(x, t) e^{-ikx}\end{aligned}$$

Oczekiwana wartość pędu

Wstawiając wyrażenie na $\varphi(k)$ do wzoru na wartość oczekiwaną:
wszystkie całki od $-\infty$ do $+\infty$

$$\begin{aligned}\langle p \rangle &= \int dk \varphi^*(k) \hbar k \varphi(k) \\ &= \frac{1}{2\pi} \int dk \int dx' \Psi^*(x', t) e^{ikx'} \hbar k \int dx \Psi(x, t) e^{-ikx}\end{aligned}$$

Czynnik $\hbar k$ możemy wciągnąć pod ostatnią całkę i wykorzystać wzór na całkowanie przez części: $k e^{-ikx} = \frac{\partial}{\partial x} (i e^{-ikx})$

$$\int dx \Psi(x, t) \hbar k e^{-ikx} = \left[\Psi(x, t) i \hbar e^{-ikx} \right]_{-\infty}^{+\infty} - i \hbar \int dx \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) e^{-ikx}$$

Oczekiwana wartość pędu

Wstawiając wyrażenie na $\varphi(k)$ do wzoru na wartość oczekiwaną:
wszystkie całki od $-\infty$ do $+\infty$

$$\begin{aligned}\langle p \rangle &= \int dk \varphi^*(k) \hbar k \varphi(k) \\ &= \frac{1}{2\pi} \int dk \int dx' \Psi^*(x', t) e^{ikx'} \hbar k \int dx \Psi(x, t) e^{-ikx}\end{aligned}$$

Czynnik $\hbar k$ możemy wciągnąć pod ostatnią całkę i wykorzystać wzór na całkowanie przez części: $k e^{-ikx} = \frac{\partial}{\partial x} (i e^{-ikx})$

$$\int dx \Psi(x, t) \hbar k e^{-ikx} = \left[\Psi(x, t) i \hbar e^{-ikx} \right]_{-\infty}^{+\infty} - i \hbar \int dx \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) e^{-ikx}$$

przy czym pierwszy człon znika, bo funkcja falowa powinna zniknąć w $\pm\infty$

Oczekiwana wartość pędu

Otrzymujemy wzór na wartość oczekiwaną:

$$\langle p \rangle = \frac{1}{2\pi} \int dk \int dx' \Psi^*(x', t) e^{ikx'} \int dx \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) e^{-ikx}$$

Oczekiwana wartość pędu

Otrzymujemy wzór na wartość oczekiwaną:

$$\langle p \rangle = \frac{1}{2\pi} \int dk \int dx' \Psi^*(x', t) e^{ikx'} \int dx \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) e^{-ikx}$$

Po zamianie kolejności całkowania:

$$\langle p \rangle = \frac{1}{2\pi} \int dx' \Psi^*(x', t) \int dx \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) \int dk e^{ik(x'-x)}$$

Oczekiwana wartość pędu

Otrzymujemy wzór na wartość oczekiwaną:

$$\langle p \rangle = \frac{1}{2\pi} \int dk \int dx' \Psi^*(x', t) e^{ikx'} \int dx \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) e^{-ikx}$$

Po zamianie kolejności całkowania:

$$\langle p \rangle = \frac{1}{2\pi} \int dx' \Psi^*(x', t) \int dx \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) \int dk e^{ik(x'-x)}$$

Całka po dk daje nam deltę Diraca:

$$\langle p \rangle = \int dx' \Psi^*(x', t) \int dx \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) \delta(x' - x)$$

Oczekiwana wartość pędu

Otrzymujemy wzór na wartość oczekiwaną:

$$\langle p \rangle = \frac{1}{2\pi} \int dk \int dx' \Psi^*(x', t) e^{ikx'} \int dx \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) e^{-ikx}$$

Po zamianie kolejności całkowania:

$$\langle p \rangle = \frac{1}{2\pi} \int dx' \Psi^*(x', t) \int dx \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) \int dk e^{ik(x'-x)}$$

Całka po dk daje nam deltę Diraca:

$$\langle p \rangle = \int dx' \Psi^*(x', t) \int dx \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) \delta(x' - x)$$

Co ostatecznie prowadzi do: (po wycałkowaniu po dx')

$$\langle p \rangle = \int dx \Psi^*(x, t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t)$$

Oczekiwana wartość pędu

Otrzymaliśmy wzór:

$$\langle p \rangle = \int dx \Psi^*(x, t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t)$$

który określa oczekiwaną wartość pędu dla dowolnej paczki falowej.

Oczekiwana wartość pędu

Otrzymaliśmy wzór:

$$\langle p \rangle = \int dx \Psi^*(x, t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t)$$

który określa oczekiwaną wartość pędu dla dowolnej paczki falowej.

Wzór ten można też “zgadnąć” zauważając, że dla fali harmoniczej:

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi_k = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} A e^{i(kx - \omega t)} = \frac{\hbar}{i} ik A e^{i(kx - \omega t)} = \hbar k \Psi_k$$

Oczekiwana wartość pędu

Otrzymaliśmy wzór:

$$\langle p \rangle = \int dx \Psi^*(x, t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t)$$

który określa oczekiwaną wartość pędu dla dowolnej paczki falowej.

Wzór ten można też “zgadnąć” zauważając, że dla fali harmoniczej:

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi_k = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} A e^{i(kx - \omega t)} = \frac{\hbar}{i} ik A e^{i(kx - \omega t)} = \hbar k \Psi_k$$

czyli działanie $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ “wyciąga” pęd z funkcji falowej Ψ_k

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi_k = p \Psi_k$$

Uwaga: to działa tylko dla fal o określonym pędzie, więcej za chwilę...

Stan stacjonarny

Stan którego rozkład gęstości prawdopodobieństwa **nie zmienia się w czasie** musi mieć ustaloną energię. Możemy zapisać jako:

$$\Psi_E(x, t) = \psi(x) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

Stan stacjonarny

Stan którego rozkład gęstości prawdopodobieństwa **nie zmienia się w czasie** musi mieć ustaloną energię. Możemy zapisać jako:

$$\Psi_E(x, t) = \psi(x) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

Podobnie jak w przypadku fal harmoniczych, działanie $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ “wyciąga” energię z funkcji falowej stanu stacjonarnego

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x, t) = E\Psi(x, t)$$

Stan stacjonarny

Stan którego rozkład gęstości prawdopodobieństwa **nie zmienia się w czasie** musi mieć ustaloną energię. Możemy zapisać jako:

$$\Psi_E(x, t) = \psi(x) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

Podobnie jak w przypadku fal harmoniczych, działanie $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ “wyciąga” energię z funkcji falowej stanu stacjonarnego

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x, t) = E\Psi(x, t)$$

Oczekiwana wartość energii

Dowolną funkcję falową możemy przedstawić jako superpozycję (ortogonalnych) stanów stacjonarnych. Prowadzi to do zależności:

$$\langle E \rangle = \int dx \Psi^*(x, t) i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t)$$

- 1 Pomiary paczek falowych
- 2 Operatory**
- 3 Równanie Schrödingera
- 4 Twierdzenie Ehrenfesta

Wartości oczekiwane

Dla różnych wielkości fizycznych, które możemy chcieć zmierzyć w doświadczeniu otrzymaliśmy bardzo podobne wyrażenia na wartości oczekiwane:

$$\langle x \rangle = \int dx \Psi^*(x, t) x \Psi(x, t)$$

$$\langle p \rangle = \int dx \Psi^*(x, t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t)$$

$$\langle E \rangle = \int dx \Psi^*(x, t) i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t)$$

Wartości oczekiwane

Dla różnych wielkości fizycznych, które możemy chcieć zmierzyć w doświadczeniu otrzymaliśmy bardzo podobne wyrażenia na wartości oczekiwane:

$$\langle x \rangle = \int dx \Psi^*(x, t) x \Psi(x, t)$$

$$\langle p \rangle = \int dx \Psi^*(x, t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t)$$

$$\langle E \rangle = \int dx \Psi^*(x, t) i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t)$$

W ogólnym przypadku obserwabli O :

$$\langle O \rangle = \int dx \Psi^*(x, t) \hat{O} \Psi(x, t)$$

gdzie \hat{O} nazywamy operatorem obserwabli O

Operatory

Możemy więc zdefiniować operatory:

	obserwabla O	operator \hat{O}
położenie	x	x
pęd	p	$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$
energia całkowita	E	$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$

Aby uzyskać informację o rozkładzie danej zmiennej w określonym stanie Ψ działamy na ten stan odpowiednim operatorem

Operatory

Możemy więc zdefiniować operatory:

	obserwabla O	operator \hat{O}
położenie	x	x
pęd	p	$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$
energia całkowita	E	$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$
energia kinetyczna	$E_{kin} = \frac{p^2}{2m}$	$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$

Aby uzyskać informację o rozkładzie danej zmiennej w określonym stanie Ψ działamy na ten stan odpowiednim operatorem

Zapis symboliczny

Stan opisany funkcją falową $\Psi(x, t)$ zapisujemy symbolicznie jako $|\Psi\rangle$

Operator \hat{O} w działaniu na ten stan: $\hat{O} |\Psi\rangle$

Stan sprzężony (odpowiadający funkcji $\Psi^*(x, t)$): $\langle\Psi|$

Zapis symboliczny

Stan opisany funkcją falową $\Psi(x, t)$ zapisujemy symbolicznie jako $|\Psi\rangle$

Operator \hat{O} w działaniu na ten stan: $\hat{O} |\Psi\rangle$

Stan sprzężony (odpowiadający funkcji $\Psi^*(x, t)$): $\langle\Psi|$

Wartość oczekiwana dla O :

$$\langle O \rangle = \int dx \Psi^*(x, t) \hat{O} \Psi(x, t) \equiv \langle\Psi|\hat{O}|\Psi\rangle$$

gdzie złożenie stanów typu $\langle | i | \rangle$ oznacza całkowanie

Zapis symboliczny

Stan opisany funkcją falową $\Psi(x, t)$ zapisujemy symbolicznie jako $|\Psi\rangle$

Operator \hat{O} w działaniu na ten stan: $\hat{O}|\Psi\rangle$

Stan sprzężony (odpowiadający funkcji $\Psi^*(x, t)$): $\langle\Psi|$

Wartość oczekiwana dla O :

$$\langle O \rangle = \int dx \Psi^*(x, t) \hat{O} \Psi(x, t) \equiv \langle\Psi|\hat{O}|\Psi\rangle$$

gdzie złożenie stanów typu $\langle | i | \rangle$ oznacza całkowanie

W ogólnym przypadku:

$$\langle\Psi|\hat{O}|\Psi'\rangle \equiv \int dx \Psi^*(x, t) \hat{O} \Psi'(x, t)$$

Zapis symboliczny

Stan opisany funkcją falową $\Psi(x, t)$ zapisujemy symbolicznie jako $|\Psi\rangle$

Operator \hat{O} w działaniu na ten stan: $\hat{O} |\Psi\rangle$

Stan sprzężony (odpowiadający funkcji $\Psi^*(x, t)$): $\langle\Psi|$

Wartość oczekiwana dla O :

$$\langle O \rangle = \int dx \Psi^*(x, t) \hat{O} \Psi(x, t) \equiv \langle\Psi|\hat{O}|\Psi\rangle$$

gdzie złożenie stanów typu $\langle | i | \rangle$ oznacza całkowanie

W ogólnym przypadku:

$$\langle\Psi|\hat{O}|\Psi'\rangle \equiv \int dx \Psi^*(x, t) \hat{O} \Psi'(x, t)$$

Warunek normalizacji funkcji falowej można zapisać jako:

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$$

W ogólnym przypadku, w wyniku działania operatora \hat{O} na stan $|\Psi\rangle$ otrzymamy inny (i nie koniecznie unormowany) stan.

Stany własne

Jeśli wynik działania operatora \hat{O} - liczba rzeczywista

$$\hat{O} |\Psi\rangle = o |\Psi\rangle$$

to stan $|\Psi\rangle$ nazywamy **stanem własnym** operatora \hat{O} ,
zaś wartość o - **wartością własną** operatora.

Operatory

W ogólnym przypadku, w wyniku działania operatora \hat{O} na stan $|\Psi\rangle$ otrzymamy inny (i nie koniecznie unormowany) stan.

Stany własne

Jeśli wynik działania operatora o - liczba rzeczywista

$$\hat{O} |\Psi\rangle = o |\Psi\rangle$$

to stan $|\Psi\rangle$ nazywamy **stanem własnym** operatora \hat{O} ,
zaś wartość o - **wartością własną** operatora.

Przykład

Fale harmoniczne są stanami własnymi operatora pędu:

$$\hat{p} |\Psi_k\rangle = \hbar k |\Psi_k\rangle$$

Stany stacjonarne są stanami własnymi energii:

$$\hat{E} |\Psi_E\rangle = \hbar\omega |\Psi_E\rangle$$

Stany własne

Są “kluczem” do rozwiązywania zagadnień mechaniki kwantowej

Jeśli w jakimś zagadnieniu wartość O jest zachowana to stan układu można przedstawić jako superpozycję stanów własnych \hat{O}

$$|\Psi\rangle = \sum_i A_i |\Psi_{o_i}\rangle$$

Stany własne o różnych wartościach własnych są ortogonalne.

Stany własne

Są “kluczem” do rozwiązywania zagadnień mechaniki kwantowej

Jeśli w jakimś zagadnieniu wartość O jest zachowana to stan układu można przedstawić jako superpozycję stanów własnych \hat{O}

$$|\Psi\rangle = \sum_i A_i |\Psi_{o_i}\rangle$$

Stany własne o różnych wartościach własnych są ortogonalne.

Jeśli dokonujemy pomiaru obserwabli O to uzyskać możemy wyłącznie wyniki odpowiadające wartościom własnym operatora \hat{O} .
Prawdopodobieństwo zmierzenia wartości o_i :

$$p(o_i) = |A_i|^2$$

Jest to uogólnienie własności omówionych poprzednio dla pomiaru energii.

- 1 Pomiary paczek falowych
- 2 Operatory
- 3 **Równanie Schrödingera**
- 4 Twierdzenie Ehrenfesta

Chcialibyśmy znaleźć metodę wyznaczania funkcji falowej w różnych zagadnieniach. Historycznie głównym problemem do rozwiązania były **widma atomowe**, czyli problem ruchu elektronu w polu jądra.

Jakie równanie powinna spełniać funkcja falowa?

Równanie Schrödingera

Chcialibyśmy znaleźć metodę wyznaczania funkcji falowej w różnych zagadnieniach. Historycznie głównym problemem do rozwiązania były **widma atomowe**, czyli problem ruchu elektronu w polu jądra.

Jakie równanie powinna spełniać funkcja falowa?

Założenia

- równanie powinno być zgodne z postulatami de Broigle'a

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad \nu = \frac{E}{h}$$

Równanie Schrödingera

Chcialibyśmy znaleźć metodę wyznaczania funkcji falowej w różnych zagadnieniach. Historycznie głównym problemem do rozwiązania były **widma atomowe**, czyli problem ruchu elektronu w polu jądra.

Jakie równanie powinna spełniać funkcja falowa?

Założenia

- równanie powinno być zgodne z postulatami de Broigle'a

$$p = \hbar k \quad E = \hbar \omega$$

Równanie Schrödingera

Chcialibyśmy znaleźć metodę wyznaczania funkcji falowej w różnych zagadnieniach. Historycznie głównym problemem do rozwiązania były **widma atomowe**, czyli problem ruchu elektronu w polu jądra.

Jakie równanie powinna spełniać funkcja falowa?

Założenia

- równanie powinno być zgodne z postulatami de Broigle'a

$$p = \hbar k \quad E = \hbar \omega$$

- równanie powinno być liniowe w Ψ
 superpozycja rozwiązań powinna również być dobrym rozwiązaniem

Równanie Schrödingera

Chcialibyśmy znaleźć metodę wyznaczania funkcji falowej w różnych zagadnieniach. Historycznie głównym problemem do rozwiązania były **widma atomowe**, czyli problem ruchu elektronu w polu jądra.

Jakie równanie powinna spełniać funkcja falowa?

Założenia

- równanie powinno być zgodne z postulatami de Broigle'a

$$p = \hbar k \quad E = \hbar \omega$$

- równanie powinno być liniowe w Ψ
superpozycja rozwiązań powinna również być dobrym rozwiązaniem
- równanie powinno być zgodne z klasycznym wyrażeniem na energię

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

Energia potencjalna

Przyjmujemy, że cząstka porusza się w jednowymiarowym potencjale $V(x)$.

Energia potencjalna cząstki zależy tylko od położenia x .

Tak jak dla dowolnej funkcji położenia:

$$\langle V \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \Psi^*(x, t) V(x) \Psi(x, t)$$

Energia potencjalna

Przyjmujemy, że cząstka porusza się w jednowymiarowym potencjale $V(x)$.

Energia potencjalna cząstki zależy tylko od położenia x .

Tak jak dla dowolnej funkcji położenia:

$$\langle V \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \Psi^*(x, t) V(x) \Psi(x, t)$$

Mozemy więc przyjąć, że operator energii potencjalnej

$$\hat{V} = V(x)$$

Równanie Schrödingera

Energia potencjalna

Przyjmujemy, że cząstka porusza się w jednowymiarowym potencjale $V(x)$.

Energia potencjalna cząstki zależy tylko od położenia x .

Tak jak dla dowolnej funkcji położenia:

$$\langle V \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \Psi^*(x, t) V(x) \Psi(x, t)$$

Możemy więc przyjąć, że operator energii potencjalnej

$$\hat{V} = V(x)$$

Operator Hamiltona Hamiltonian

Suma energii kinetycznej i potencjalnej:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{E}_{kin} + \hat{V} \\ \hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \end{aligned}$$

Energia całkowita

Zależne od czasu równanie Schrödingera otrzymujemy przyjmując, że dozwolony stan układu powinien spełniać klasyczną zależność

$$E = E_{kin} + V(x)$$

Energia całkowita

Zależne od czasu równanie Schrödingera otrzymujemy przyjmując, że dozwolony stan układu powinien spełniać klasyczną zależność

$$E = E_{kin} + V(x)$$

Oznacza to, że odpowiednie operatory powinny tak samo działać na $|\Psi\rangle$:

$$\hat{H} |\Psi\rangle \equiv (\hat{E}_{kin} + \hat{V}) |\Psi\rangle = \hat{E} |\Psi\rangle$$

Energia całkowita

Zależne od czasu równanie Schrödingera otrzymujemy przyjmując, że dozwolony stan układu powinien spełniać klasyczną zależność

$$E = E_{kin} + V(x)$$

Oznacza to, że odpowiednie operatory powinny tak samo działać na $|\Psi\rangle$:

$$\hat{H} |\Psi\rangle \equiv (\hat{E}_{kin} + \hat{V}) |\Psi\rangle = \hat{E} |\Psi\rangle$$

Podstawiając postaci poszczególnych operatorów dostajemy:

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

Zależne od czasu równanie Schrödingera $|\Psi\rangle = \Psi(x, t)$

Cząstka swobodna

Dla cząstki swobodnej otrzymujemy (przyjmując $V(x) \equiv 0$)

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

Cząstka swobodna

Dla cząstki swobodnej otrzymujemy (przyjmując $V(x) \equiv 0$)

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

Równanie to jest spełnione dla fali harmoniczej

$$\Psi_k(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)}$$

jeśli

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (ik)^2 \Psi_k(x, t) = i\hbar (-i\omega) \Psi_k(x, t)$$

Cząstka swobodna

Dla cząstki swobodnej otrzymujemy (przyjmując $V(x) \equiv 0$)

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

Równanie to jest spełnione dla fali harmoniczej

$$\Psi_k(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)}$$

jeśli

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (ik)^2 \Psi_k(x, t) = i\hbar (-i\omega) \Psi_k(x, t)$$

czyli

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \hbar\omega$$

$$\frac{p^2}{2m} = E$$

cząstka nierelatywistyczna

Cząstka swobodna

Dla cząstki swobodnej otrzymujemy (przyjmując $V(x) \equiv 0$)

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

Równanie to jest spełnione dla fali harmonicznnej

$$\Psi_k(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)}$$

przyjmując związek dyspersyjny

$$\omega(k) = \frac{\hbar}{2m} k^2$$

Dowolna superpozycja fal harmonicznnych jest także rozwiązaniem równania Schrödingera (na mocy liniowości równania)

Zależne od czasu równanie Schrödingera w 3-D

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x) \right] \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t)$$

Operator Laplace'a (laplasjan): $\Delta \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$

Zależne od czasu równanie Schrödingera w 3-D

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x) \right] \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t)$$

Operator Laplace'a (laplasjan): $\Delta \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$

Jest to równanie różniczkowe, które pozwala nam policzyć ewolucję dowolnej paczki falowej w czasie.

Pod warunkiem, że wyjściowa funkcja falowa $\Psi(\vec{r}, t = t_0)$ jest ciągła (wraz z pochodną) i ograniczona do obszaru skończonych wartości $V(x)$

Zależne od czasu równanie Schrödingera w 3-D

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x) \right] \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t)$$

Operator Laplace'a (laplasjan): $\Delta \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$

Jest to równanie różniczkowe, które pozwala nam policzyć ewolucję dowolnej paczki falowej w czasie.

Pod warunkiem, że wyjściowa funkcja falowa $\Psi(\vec{r}, t = t_0)$ jest ciągła (wraz z pochodną) i ograniczona do obszaru skończonych wartości $V(x)$

Ale nie jest zbyt użyteczne do szukania rozwiązań...

Stany stacjonarne

Jeśli szukamy rozwiązania w postaci stanu stacjonarnego

$$\Psi_E(x, t) = \psi(x) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

korzystamy z faktu, że stany stacjonarne są stanami własnymi \hat{E}

$$\hat{E} \Psi_E = E \Psi_E$$

Stany stacjonarne

Jeśli szukamy rozwiązania w postaci stanu stacjonarnego

$$\Psi_E(x, t) = \psi(x) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

korzystamy z faktu, że stany stacjonarne są stanami własnymi \hat{E}

$$\hat{E} \Psi_E = E \Psi_E$$

Nasze równanie przyjmuje teraz postać

$$\hat{H} |\Psi\rangle \equiv \left(\hat{E}_{kin} + \hat{V} \right) |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle$$

Równanie Schrödingera

Stany stacjonarne

Jeśli szukamy rozwiązania w postaci stanu stacjonarnego

$$\Psi_E(x, t) = \psi(x) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

korzystamy z faktu, że stany stacjonarne są stanami własnymi \hat{E}

$$\hat{E} \Psi_E = E \Psi_E$$

Nasze równanie przyjmuje teraz postać

$$\hat{H} |\Psi\rangle \equiv \left(\hat{E}_{kin} + \hat{V} \right) |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle$$

Podstawiając postaci poszczególnych operatorów dostajemy:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} |\Psi\rangle + V(x) |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle$$

Niezależne od czasu równanie Schrödingera

Równanie niezależne od czasu

Dla stanów stacjonarnych możemy wyeliminować zależność od czasu. Otrzymujemy równanie opisujące rozkład przestrzenny paczki falowej:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi(x) = E \psi(x)$$

Równanie niezależne od czasu

Dla stanów stacjonarnych możemy wyeliminować zależność od czasu. Otrzymujemy równanie opisujące rozkład przestrzenny paczki falowej:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi(x) = E \psi(x)$$

Dla problemu trójwymiarowego:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

Równanie Schrödingera

Równanie niezależne od czasu

Dla stanów stacjonarnych możemy wyeliminować zależność od czasu. Otrzymujemy równanie opisujące rozkład przestrzenny paczki falowej:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi(x) = E \psi(x)$$

Dla problemu trójwymiarowego:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

Równanie to pozwala nam znaleźć stany stacjonarne, czyli **stany własne energii** w zadanym potencjale. Wartości własne energii definiują dostępne **poziomy energetyczne** cząstki.

- 1 Pomiary paczek falowych
- 2 Operatory
- 3 Równanie Schrödingera
- 4 Twierdzenie Ehrenfesta

Schrödinger przedstawił swoją teorię w roku 1926.

Nie od razu została ona zaakceptowana!

Były inne, konkurencyjne podejścia (np. teoria Heisenberga)

Schrödinger przedstawił swoją teorię w roku 1926.

Nie od razu została ona zaakceptowana!

Były inne, konkurencyjne podejścia (np. teoria Heisenberga)

Twierdzenie Ehrenfesta 1927

Dla rozwiązań równania Schrödingera wartości oczekiwane powinny spełniać klasyczne zależności dynamiki:

$$\frac{d}{dt}\langle x \rangle = \frac{1}{m}\langle p \rangle$$

$$\frac{d}{dt}\langle p \rangle = \left\langle -\frac{d}{dx}V(x) \right\rangle = \langle F(x) \rangle$$

Równania te są “**prawie**” równoważne równaniom Newtona...

Równanie Schrödingera

Schrödinger przedstawił swoją teorię w roku 1926.

Nie od razu została ona zaakceptowana!

Były inne, konkurencyjne podejścia (np. teoria Heisenberga)

Twierdzenie Ehrenfesta 1927

Dla rozwiązań równania Schrödingera wartości oczekiwane powinny spełniać klasyczne zależności dynamiki:

$$\frac{d}{dt}\langle x \rangle = \frac{1}{m}\langle p \rangle$$

$$\frac{d}{dt}\langle p \rangle = \left\langle -\frac{d}{dx}V(x) \right\rangle = \langle F(x) \rangle$$

Równania te są “**prawie**” równoważne równaniom Newtona... Jednak

$$\left\langle -\frac{d}{dx}V(x) \right\rangle \neq -\frac{d}{dx}V(\langle x \rangle)$$

Przybliżenie klasyczne

Gdy cząstka porusza się w potencjale, który zmienia się na odległościach znacznie większych od rozmiarów paczki falowej:

$$\left\langle -\frac{d}{dx} V(x) \right\rangle \approx -\frac{d}{dx} V(\langle x \rangle)$$

Przybliżenie klasyczne

Gdy cząstka porusza się w potencjale, który zmienia się na odległościach znacznie większych od rozmiarów paczki falowej:

$$\left\langle -\frac{d}{dx}V(x) \right\rangle \approx -\frac{d}{dx}V(\langle x \rangle)$$

Wtedy otrzymujemy “klasyczne” równanie ruchu dla wartości oczekiwanej położenia:

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle = -\frac{d}{dx}V(\langle x \rangle) = F(\langle x \rangle)$$

Przybliżenie klasyczne

Gdy cząstka porusza się w potencjale, który zmienia się na odległościach znacznie większych od rozmiarów paczki falowej:

$$\left\langle -\frac{d}{dx}V(x) \right\rangle \approx -\frac{d}{dx}V(\langle x \rangle)$$

Wtedy otrzymujemy “klasyczne” równanie ruchu dla wartości oczekiwanej położenia:

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle = -\frac{d}{dx}V(\langle x \rangle) = F(\langle x \rangle)$$

⇒ w granicy klasycznej równanie Schrödingera daje rozwiązania zgodne z mechaniką Newtona

Nowe efekty pojawiają się, gdy mamy do czynienia z potencjałem zmiennym na skalach subatomowych...