Podstawy fizyki kwantowej i budowy materii

prof. dr hab. Aleksander Filip Żarnecki

Zakład Cząstek i Oddziaływań Fundamentalnych
Instytut Fizyki Doświadczalnej

Wykład 7
13 listopada 2017

Wykład 7

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

Wykład 7

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

Paczka falowa

Funkcje falową cząstki swobodnej możemy zawsze przedstawić jako superpozycję stanów o ciąglym 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 $\varphi(k)$

Paczka falowa

Cząstkę swobodną przedstawiamy jako superpozycję fal harmonicznych:

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

$$\Psi_{k}(x,t) = A\, e^{i\left(k\, x-\omega\, t\right)} \quad \text{jednowymiarowa}$$

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

Paczka falowa

Cząstkę swobodną przedstawiamy jako superpozycję fal harmonicznych:

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

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

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

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

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

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

Interpretacja probabilistyczna

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

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

Dla jednowymiarowej funkcji falowej:

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

Interpretacja probabilistyczna

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

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

Dla jednowymiarowej funkcji falowej:

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

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

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

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 prawdpodobieństwa $p(x,t)$:

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

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 $f = f(x)$:

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

Przykladowo, wariancja rozkładu położenia:

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

σ_x jest tu odchyleniem standardowym pomiaru położenia

Pomiar pędu

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:

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

Pomiar pędu

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:

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

Pomiar pędu

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:

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

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 $+\infty$

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

Oczekiwana wartość pędu

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

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

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

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

Oczekiwana wartość pędu

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

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

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

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

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

Oczekiwana wartość pędu

Otrzymujemy wzór na wartość oczekiwaną:

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

Oczekiwana wartość pędu

Otrzymujemy wzór na wartość oczekiwaną:

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

Po zamianie kolejności całkowania:

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

Oczekiwana wartość pędu

Otrzymujemy wzór na wartość oczekiwaną:

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

Po zamianie kolejności całkowania:

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

Całka po dk daje nam deltę Diraca:

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

Oczekiwana wartość pędu

Otrzymujemy wzór na wartość oczekiwaną:

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

Po zamianie kolejności całkowania:

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

Całka po dk daje nam deltę Diraca:

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

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

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

Oczekiwana wartość pędu

Otrzymaliśmy wzór:

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

który określa oczekiwaną wartość pędu dla dowolnej paczki falowej.

Oczekiwana wartość pędu

Otrzymaliśmy wzór:

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

który określa oczekiwaną wartość pędu dla dowolnej paczki falowej.

Wzór ten można też "zgadnąć" zauważając, że dla fali harmonicznej:

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

Oczekiwana wartość pędu

Otrzymaliśmy wzór:

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

który określa oczekiwaną wartość pędu dla dowolnej paczki falowej.

Wzór ten można też "zgadnąć" zauważając, że dla fali harmonicznej:

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

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:

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

Stan stacjonarny

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

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

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

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

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 harmonicznych, 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:

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

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:

$$\begin{aligned}
\langle x \rangle &= \int dx\, \Psi^\star(x,t)\quad x\quad \Psi(x,t) \\
\langle p \rangle &= \int dx\, \Psi^\star(x,t)\, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\, \Psi(x,t) \\
\langle E \rangle &= \int dx\, \Psi^\star(x,t)\, i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\, \Psi(x,t)
\end{aligned}$$

Wartości oczekiwane

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

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

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

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

W ogólnym przypadku obserwabli O:

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

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 $\Psi^\star(x,t)$): $\langle\Psi|$

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 $\Psi^\star(x,t)$): $\langle\Psi|$

Wartość oczekiwana dla O:

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

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 $\Psi^\star(x,t)$): $\langle\Psi|$

Wartość oczekiwana dla O:

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

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

W ogólnym przypadku:

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

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 $\Psi^\star(x,t)$): $\langle\Psi|$

Wartość oczekiwana dla O:

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

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

W ogólnym przypadku:

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

Warunek normalizacji funkcji falowej można zapisać jako:

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

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.

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 wartosciach 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 wartosciach 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

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?

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 Broiglie'a

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

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 Broiglie'a

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

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 Broiglie'a

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

- 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 Broiglie'a

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

- 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:

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

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:

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

Możemy więc przyjąć, że operator energii potencjalnej

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

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:

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

Możemy więc przyjąć, że operator energii potencjalnej

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

Operator Hamiltona Hamiltonian

Suma energii kinetycznej i potencjalnej:

$$\hat{H} = \hat{E}_{kin} + \hat{V}$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

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 $|\Psi\rangle$:

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

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 $|\Psi\rangle$:

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

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 $\quad |\Psi\rangle = \Psi(x,t)$

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 harmonicznej

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

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 harmonicznej

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

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 harmonicznej

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

przyjmując związek dyspersyjny

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

Dowolna superpozycja fal harmonicznych 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

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

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 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

Równanie Schrödingera

Schrödinger przedstawił swoją teorię w roku 1926.

Nie od razu została ona zaakceptowana!

Były inne, konkurencyjne podejścia (np. teoria Heisenberga)

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 rozwiazań 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 rozwiazań 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:

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

$\Rightarrow$ 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...