<u>Wykład V</u> Mechanika kwantowa

<u>Rozkład wektora stanu na stany bazy</u>

<u>Rozkład wektora w bazie</u>

Mamy wektor ψ i zbiór wektorów bazy $\{\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \ldots\}$. Wektor ψ można zapisać jako kombinację liniową wektorów bazy tzn.

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_i c_i \varphi_i(\mathbf{r}),$$

gdzie c_i są współczynnikami liczbowymi. Jeśli wektory należące do bazy numerowane są ciągłym indeksem α to sumę zastępujemy całką

$$\psi(\mathbf{r}) = \int d\alpha\, c(\alpha) \varphi_\alpha(\mathbf{r}).$$

<u>Baza ortonormalna</u>

Dyskretną bazę $\{\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \ldots\}$ nazywamy ortonormalną, jeśli

$$(\varphi_i, \varphi_j) = \delta^{ij} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases}.$$

Ciągłą bazę $\{\varphi_\alpha\}$ nazywamy ortonormalną jeśli $(\varphi_\alpha, \varphi_{\alpha'}) = \delta(\alpha - \alpha')$

<u>Dygresja matematyczna - funkcja delta Diraca</u>

Funkcję delta Diraca definiują dwie równości

$$\begin{cases} \int d\alpha\, \delta(\alpha) = 1, \\ \int d\alpha\, \delta(\alpha)\, f(\alpha) = f(0), \end{cases}$$

gdzie $f(\alpha)$ jest dowolną funkcją, a obszar całkowania obejmuje $\alpha = 0$.

<u>Rozkład wektora w bazie ortonormalnej</u>

Gdy baza $\{\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \ldots\}$ jest ortonromalna współczynniki c_i rozkładu $\psi = \sum_i c_i \varphi_i$ znajdujemy obliczając $(\varphi_j, \psi) = \sum_i c_i (\varphi_j, \varphi_i) = \sum_i c_i\, \delta^{ij} = c_j$

<u>Konsekwencje warunku unormowania</u>

Jeśli wektor $\psi = \sum_i c_i \varphi_i$ jest unormowany, a baza $\{\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \ldots\}$ ortonormalna, to

$$1 = (\psi, \psi) = \left(\sum_i c_i\, \varphi_i\, , \sum_j c_j \varphi_j \right) = \sum_i c_i^* \sum_j c_j (\varphi_i, \varphi_j) = \sum_{i,j} c_i^* c_j \delta^{ij} = \sum_i |c_i|^2.$$

$|c_i|^2$ - ma interpretację prawdopodobieństwa, że cząstka opisywana funkcją falową ψ znajduje się w stanie odpowiadającym funkcji φ_i.

Wykład V cd. Mechanika kwantowa

Rozkład funkcji falowej na fale płaskie i transformacja Fouriera[1]

Niech funkcje $\varphi_\alpha(\mathbf{r})$ będą falami płaskimi $\varphi_\mathbf{p}(\mathbf{r})$, wtedy

$$\psi(\mathbf{r}) = \int d^3p\; c(\mathbf{p})\varphi_\mathbf{p}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}\int d^3p\; e^{i\frac{\mathbf{pr}}{\hbar}} c(\mathbf{p}) \;.$$

Gdy wprowadzimy nową zmienną - wektor falowy $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$, otrzymujemy

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{\hbar^3}{\sqrt{V}}\int d^3k\; e^{i\mathbf{kr}} c(\hbar\mathbf{k}) \;.$$

Definiując nową funkcję $\tilde{\psi}(\mathbf{k}) \equiv \frac{(2\pi\hbar)^3}{\sqrt{V}} c(\hbar\mathbf{k})$, rozkład funkcji $\psi(\mathbf{r})$ na funkcje własne operatora pędu przybiera postać (odwrotnej) transformacji Fouriera:

$$\psi(\mathbf{r}) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\; e^{i\mathbf{kr}}\tilde{\psi}(\mathbf{k}) \;.$$

Dygresja matematyczna - transformacja Fouriera

Transformacja Fouriera $\psi(\mathbf{r})$ zdefiniowana jest jako: $\tilde{\psi}(\mathbf{k}) = \int d^3r\; e^{-i\mathbf{kr}}\, \psi(\mathbf{r})$.

Transformacja odwrotna ma postać: $\psi(\mathbf{r}) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\; e^{i\mathbf{kr}}\tilde{\psi}(\mathbf{k})$

Zakładamy tutaj, że odpowiednie całki istnieją.

Jeśli funkcja $\psi(\mathbf{r})$ jest unormowana, tzn. $\int d^3r\left|\psi(\mathbf{r})\right|^2 = 1$, to $\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\left|\tilde{\psi}(\mathbf{k})\right|^2 = 1$.

Funkcja $\tilde{\psi}(\mathbf{k})$ jest określana jako funkcja falowa w przestrzeni wektorów falowych, a $\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\left|\tilde{\psi}(\mathbf{k})\right|^2$ ma interpretację prawdopodobieństwa, że cząstce opisywanej funkcją falową $\psi(\mathbf{r})$ odpowiada wektor falowy z zakresu $(\mathbf{k}, \mathbf{k}+d\mathbf{k})$.

Jeśli wprowadzimy funkcję $\tilde{\varphi}(\mathbf{p}) \equiv \tilde{\psi}(\mathbf{p}/\hbar)$, to jest ona funkcją falową w przestrzeni pędów, a $\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\left|\tilde{\varphi}(\mathbf{p})\right|^2$ jest prawdopodobieństwem, że cząstka opisywana funkcją falową $\psi(\mathbf{r})$ ma pęd z zakresu $(\mathbf{p}, \mathbf{p}+d\mathbf{p})$.

[1] Jean Baptiste Joseph Fourier 1768-1830

Wykład V cd. Mechanika kwantowa

Pomiar w mechanice kwantowej
(interpretacja kopenchaska)

- Wynikiem pomiaru obserwabli (wielkości obserwowalnej), której odpowiada operator $\hat{A}$, może być tylko wartość własna operatora $\hat{A}$.

- Jeśli stan ψ, na którym dokonujemy pomiaru, jest stanem własnym operatora $\hat{A}$ z wartością własną a $\left(\hat{A}\psi = a\psi\right)$, to jedynym możliwym wynikiem pomiaru jest wartość własna a.

- Jeśli stan ψ, na którym dokonujemy pomiaru, nie jest stanem własnym operatora $\hat{A}$, to określenie wyniku pomiaru wymaga rozłożenia stanu ψ na wektory bazy $\{\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \ldots\}$, będące stanami własnymi operatora $\hat{A}$ $\left(\hat{A}\varphi_i = a_i\varphi_i\right)$. Ponieważ obserwablom odpowiadają operatory hermitowskie, można przyjąć, że baza $\{\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \ldots\}$ jest ortonormalna, a rozkład stanu ψ w bazie $\{\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \ldots\}$ ma postać $\psi = \sum_i c_i\varphi_i$, gdzie $c_i = (\varphi_i, \psi)$ oraz $\sum_i |c_i|^2 = 1$. Dokonując pomiaru na stanie ψ obserwabli, której odpowiada operator $\hat{A}$, otrzymujemy wynik a_i z prawdopodobieństwem $|c_i|^2$.

- Średnim wynikiem wielu pomiarów przeprowadzonych na tym samym stanie ψ jest średnia wartość operatora $\hat{A}$ w stanie ψ czyli $\left\langle \hat{A} \right\rangle_\psi \equiv (\psi, \hat{A}\psi) = \sum_i a_i |c_i|^2$.

Komutujące i niekomutujące obserwable

Jeśli mamy do czynienia z dwoma obserwablami, powiedzmy $\hat{A}$ i $\hat{B}$, należy rozróżniać sytuację, gdy operatory wzajemnie komutuję i kiedy nie komutują.

Dygresja matematyczna – komutujące i niekomutujące operatory

Mówimy, że operatory $\hat{A}$ i $\hat{B}$ komutują, jeśli dla dowolnego wektora ψ należącego do przestrzeni, w której operatory działają, zachodzi

$$\hat{A}\hat{B}\psi = \hat{B}\hat{A}\psi .$$

Komutatorem operatorów $\hat{A}$ i $\hat{B}$ nazywamy operator $[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$. Gdy operatory komutują ich komutator znika.

Przykład 1

Operatory pędu $\hat{\mathbf{p}} \equiv -i\hbar\nabla$ i energii kinetycznej $\hat{T} \equiv \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2\Delta}{2m}$ wzajemnie komutują, gdyż pochodne obliczamy w dowolnej kolejności.

Wykład V cd. Mechanika kwantowa

Przykład 2

Operatory i-tej składowej pędu $\hat{p}_i \equiv -i\hbar\nabla_i$ oraz j-tej składowej położenia $\hat{r}_j \equiv r_j$ wzajemnie komutują, gdy $i \neq j$, natomiast nie komutują, jeśli $i = j$, co można zapisać jako

$$[\hat{p}_i, \hat{r}_j] = -i\hbar\delta^{ij}.$$

Wynik łatwo sprawdzić obliczając komutator x-owej składowej pędu i x-owej składowej położenia

$$[\hat{p}_x, \hat{x}] = \hat{p}_x\hat{x} - \hat{x}\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}x + i\hbar x\frac{\partial}{\partial x} = -i\hbar.$$

Dygresja matematyczna – wektory własne komutujących operatorów

Komutujące operatory mają wspólny zbiór wektorów własnych. Zachodzi bowiem twierdzenie: jeśli wektor ψ jest wektorem własnym operatora $\hat{A}$ ($\hat{A}\psi = a\psi$, gdzie a jest liczbą), to ψ jest również wektorem własnym operatora $\hat{B}$, jeśli $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$. Twierdzenie łatwo udowodnić przy dodatkowym upraszczającym założeniu, że ψ jest jedynym wektorem własnym operatora $\hat{A}$ o wartości własnej a. Wówczas mamy

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

A zatem wektor $\hat{B}\psi$ jest wektorem własnym operatora $\hat{A}$ z wartością własną a. Ponieważ założyliśmy, że ψ jest jedynym wektorem własnym operatora $\hat{A}$ o wartości własnej a, to wektor ψ może się różnić od $\hat{B}\psi$ jedynie o stałą, którą oznaczymy jako b. Mamy więc $\hat{B}\psi = b\psi$. Czyli ψ jest również wektorem własnym operatora $\hat{B}$ z wartością własną b, co należało udowodnić.

- Jeśli dokonujemy pomiaru dwóch obserwabli $\hat{A}$ i $\hat{B}$, które wzajemnie komutują, w stanie ψ, który jest jednocześnie stanem własnym $\hat{A}$ i $\hat{B}$ z wartościami własnymi a i b, to wynikiem pomiaru będą wartości a i b.

- Jeśli dokonujemy pomiaru obserwabli $\hat{A}$ i $\hat{B}$, które wzajemnie nie komutują, stan ψ, na którym wykonujemy pomiar, nie może być jednocześnie stanem własnym $\hat{A}$ i $\hat{B}$. Jeśli ten stan jest stanem własnym obserwabli $\hat{A}$ z wartością własną a, to wynik pomiaru obserwabli $\hat{A}$ będzie a. Aby określić natomiast wynik pomiaru obserwabli $\hat{B}$, trzeba stan ψ rozłożyć w bazie stanów własnych operatora $\hat{B}$ i uzyskamy wtedy całe widmo możliwych wyników pomiaru obserwabli $\hat{B}$.

- Jeśli obserwable nie komutują, nie możemy znać dokładnie wyników ich pomiarów, co jest treścią zasady nieoznaczoności.