

Wykład VII

Podstawy fizyki kwantowej

Rozkład wektora stanu na stany bazy

Rozkład wektora w bazie

Mamy wektor ψ i zbiór wektorów bazy $\{\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \dots\}$. 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

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

Baza ortonormalna

Dyskretną bazę $\{\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \dots\}$ 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 $(\varphi_\alpha, \varphi_{\alpha'}) = \delta(\alpha - \alpha')$

Dygresja matematyczna - funkcja delta Diraca

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 $\alpha = 0$.

Rozkład wektora w bazie ortonormalnej

Gdy baza $\{\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \dots\}$ jest ortonormalna, współczynniki c_i rozkładu $\psi = \sum_i c_i \varphi_i$

znajdujemy obliczając $(\varphi_j, \psi) = \sum_i c_i (\varphi_j, \varphi_i) = \sum_i c_i \delta^{ij} = c_j$

Konsekwencje warunku unormowania

Jeśli wektor $\psi = \sum_i c_i \varphi_i$ jest unormowany, a baza $\{\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \dots\}$ 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 VII cd.

Podstawy fizyki kwantowej

Rozkład funkcji falowej na fale płaskie i transformacja Fouriera

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

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

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

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

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:

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

Dygresja matematyczna - transformacja Fouriera

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

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

Zakładamy tutaj, że odpowiednie całki istnieją.

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

Funkcja $\tilde{\psi}(\mathbf{k})$ jest określana jako funkcja falowa w przestrzeni wektorów falowych, a $\frac{d^3 k}{(2\pi)^3} |\tilde{\psi}(\mathbf{k})|^2$ 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 $\frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} |\tilde{\varphi}(\mathbf{p})|^2$ jest prawdopodobieństwem, że cząstka opisywana funkcją falową $\psi(\mathbf{r})$ ma pęd z zakresu $(\mathbf{p}, \mathbf{p} + d\mathbf{p})$.

Pomiar w mechanice kwantowej

(interpretacja kopenhaska)

- 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 ($\hat{A}\psi = a\psi$), 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 $\{\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \dots\}$, będące stanami własnymi operatora \hat{A} ($\hat{A}\varphi_i = a_i\varphi_i$). Ponieważ obserwabliom odpowiadają operatory hermitowskie, można przyjąć, że baza $\{\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \dots\}$ jest ortonormalna, a rozkład stanu ψ w bazie $\{\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \dots\}$ 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 $\langle \hat{A} \rangle_\psi \equiv (\psi, \hat{A}\psi) = \sum_i a_i |c_i|^2$.

Komutujące i niekomutujące obserwabli

Jeśli mamy do czynienia z dwoma obserwabliami, powiedzmy \hat{A} i \hat{B} , należy rozróżnić sytuację, gdy operatory wzajemnie komutują 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 VII cd.

Podstawy fizyki kwantowej

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 obserwabli nie komutują, nie możemy znać dokładnie wyników ich pomiarów, co jest treścią zasady nieoznaczoności.