Wykład IV Podstawy fizyki kwantowej

Podstawy mechaniki kwantowej

Funkcja falowa

Klasyczny opis punktu materialnego - cząstki - polega na określeniu jej trajektorii - funkcji $\mathbf{r}(t)$; opis kwantowy wymaga podania funkcji położenia i czasu o wartościach zespolonych tzw. funkcji falowej $\psi(t,\mathbf{r})$.

Zasada superpozycji

Klasyczna cząstka może się poruszać zwykle w danym układzie po różnych trajektoriach $\mathbf{r}_1(t), \mathbf{r}_2(t), \mathbf{r}_3(t), \ldots$, jednak faktyczny ruch odbywa się tylko po jednej z nich. Jeśli natomiast możliwe są różne stany kwantowe danej cząstki opisywane przez $\psi_1(t,\mathbf{r}), \psi_2(t,\mathbf{r}), \psi_3(t,\mathbf{r}), \ldots$, to zgodnie z zasadą superpozycji możliwy jest również stan cząstki będący superpozycją tych stanów opisywany funkcją $\psi(t,\mathbf{r}) = c_1\psi_1(t,\mathbf{r}) + c_2\psi_2(t,\mathbf{r}) + c_3\psi_3(t,\mathbf{r}) + \ldots$, gdzie $c_1, c_2, c_3, \ldots$ są współczynnikami liczbowymi.

Zasada superpozycji jest automatycznie spełniona poprzez postulat, że funkcje falowe (stany) danej cząstki tworzą przestrzeń wektorową nad ciałem liczb zespolonych zwaną przestrzenią stanów.

Dygresja matematyczna - przestrzeń wektorowa

Przestrzeń wektorowa V nad ciałem liczbowym K to zbiór (jego elementy nazywa się wektorami), w którym określone jest dodawanie wektorów i mnożenie ich przez liczbę. Wektory tworzą grupę przemienną (abelową) ze względu na dodawanie tzn.

$\forall \psi_1, \psi_2, \psi_3 \in V \quad (\psi_1 + \psi_2) + \psi_3 = \psi_1 + (\psi_2 + \psi_3)$ - łączność dodawania

$\exists 0 \in V \ \ \forall \psi \in V \quad (\psi + 0) = \psi = (0 + \psi)$ - istnienie wektora zerowego

$\forall \psi \in V \ \ \exists \psi' \in V \quad \psi + \psi' = \psi' + \psi = 0, \quad \psi' \equiv -\psi$ - istnienie wektora przeciwnego do danego

$\forall \psi_1, \psi_2 \in V \quad \psi_1 + \psi_2 = \psi_2 + \psi_1$ - przemienność dodawania

Mnożenie wektora przez liczbę spełnia zaś warunki:

$\forall a \in K \ \ \forall \psi_1, \psi_2 \in V \quad a(\psi_1 + \psi_2) = a\psi_1 + a\psi_2$ - liniowość mnożenia

$\forall a, b \in K \ \ \forall \psi \in V \quad (a+b)\psi = a\psi + b\psi$

$\forall a, b \in K \ \ \forall \psi \in V \quad a(b\psi) = (ab)\psi$

$1 \in K \ \forall \psi \in V \quad 1\psi = \psi$

<u>Wykład IV cd.</u> Podstawy fizyki kwantowej

<u>Interpretacja Borna funkcji falowej</u>

Funkcja falowa nie ma bezpośredniej interpretacji, natomiast kwadrat modułu funkcji falowej $|\psi(t,\mathbf{r})|^2$ ma interpretację <u>gęstości prawdopodobieństwa</u> znalezienia cząstki w punkcie $\mathbf{r}$ w momencie czasu t, czyli $|\psi(t,\mathbf{r})|^2 d^3r$ jest prawdopodobieństwem znalezienia cząstki w infinitezymalnie małej objętości d^3r wokół punktu $\mathbf{r}$ w momencie czasu t.

Ponieważ prawdopodobieństwo znalezienia cząstki gdziekolwiek jest równe jedności więc

$$\boxed{\int d^3r\, |\psi(t,\mathbf{r})|^2 = 1}$$

<u>Funkcje falowe są unormowane do jedności.</u>

<u>Iloczyn skalarny funkcji falowych</u>

$$(\psi,\varphi) \equiv \int d^3r\, \psi^*(t,\mathbf{r})\varphi(t,\mathbf{r})$$

$(\psi,\psi) = \int d^3r\, \psi^*(t,\mathbf{r})\psi(t,\mathbf{r}) = \int d^3r\, |\psi(t,\mathbf{r})|^2$ - kwadrat długość długości wektora ψ

Jeśli $(\psi,\varphi) = 0$, to mówimy, że ψ i φ są do siebie <u>ortogonalne</u>.

<u>Dygresja matematyczna - iloczyn skalarny</u>

Iloczyn skalarny do odwzorowanie $V \times V \to K$ spełniające własności

1) $\forall \psi_1,\psi_2,\psi_3 \in V \quad (\psi_1,\psi_2+\psi_3) = (\psi_1,\psi_2)+(\psi_1,\psi_3)$,
2) $\forall a \in K \ \forall \psi_1,\psi_2 \in V \quad (\psi_1,a\psi_2) = a(\psi_1,\psi_2)$,
3) $\forall \psi_1,\psi_2 \in V \quad (\psi_1,\psi_2) = (\psi_2,\psi_1)^*$,
4) $\forall \psi \in V \quad (\psi,\psi) \geq 0 \quad \wedge \quad (\psi,\psi) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \psi = 0$.

1) + 2) + 3) $\forall \psi_1,\psi_2,\psi_3 \in V \ \forall a,b \in K \quad (a\psi_1 + b\psi_2,\psi_3) = a^*(\psi_1,\psi_2) + b^*(\psi_2,\psi_3)$

3) $\forall \psi \in V \quad (\psi,\psi) = (\psi,\psi)^* \in R$

<u>Obserwable</u>

Mierzalnym wielkościom fizycznym - obserwablom - odpowiadają <u>hermitowskie operatory liniowe</u> działające w przestrzeni stanów.

<u>Dygresja matematyczna - hermitowski operator liniowy</u>

Operator $\hat{A}$ jest liniowy, jeśli

$$\forall \psi_1,\psi_2 \in V \quad \hat{A}(\psi_1+\psi_2) = \hat{A}\psi_1 + \hat{A}\psi_2,$$

$$\forall \psi \in V \ \forall c \in K \quad \hat{A}(c\psi) = c\hat{A}\psi.$$

Operator $\hat{A}$ jest hermitowski, jeśli $\forall \psi_1,\psi_2 \in V \quad (\psi_1,\hat{A}\psi_2) = (\hat{A}\psi_1,\psi_2)$.

Wykład IV cd. Podstawy fizyki kwantowej

Dygresja matematyczna - wektory własne i wartości własne operatora

Jeśli $\exists\psi \in V\ \psi \neq 0\ \exists a \in K$ $\boxed{\hat{A}\psi = a\psi}$

to ψ nazywamy wektorem własnym operatora $\hat{A}$, a a wartością własną operatora $\hat{A}$.

Dygresja matematyczna - wektory i wartości własne operatora hermitowskiego

1) Wartości własne operatora hermitowskiego są rzeczywiste

Dowód Niech ψ będzie wektorem własnym operatora hermitowskiego $\hat{A}$, wtedy

1) $(\psi, \hat{A}\psi) = (\psi, a\psi) = a(\psi,\psi)$,

2) $(\psi, \hat{A}\psi) = (\hat{A}\psi,\psi) = (a\psi,\psi) = a^*(\psi,\psi)$ - korzystam z faktu, że $\hat{A}$ jest hermitowski

1) + 2) $a = a^* \quad \Rightarrow \quad a \in R$.

2) Wektory własne operatora hermitowskiego odpowiadające różnym wartościom własnym są wzajemnie ortogonalne.

Dowód Niech ψ_1,ψ_2 będą wektorami własnymi operatora hermitowskiego $\hat{A}$ odpowiadającymi wartościom własnym a_1, a_2 przy czym $a_1 \neq a_2$. Wtedy

1) $(\psi_1, \hat{A}\psi_2) = (\psi_1, a_2\psi_2) = a_2(\psi_1,\psi_2)$

2) $(\psi_1, \hat{A}\psi_2) = (\hat{A}\psi_1, \psi_2) = (a_1\psi_1,\psi_2) = a_1(\psi_1,\psi_2)$

1) + 2) $a_2(\psi_1,\psi_2) = a_1(\psi_1,\psi_2) \quad \Rightarrow \quad (\psi_1,\psi_2) = 0$.

3) Wektory własne operatora hermitowskiego tworzą bazę ortogonalną przestrzeni wektorowej.

Dygresja matematyczna - baza i baza ortogonalna, liniowa niezależność wektorów

Bazą przestrzeni wektorowej nazywamy maksymalnie liczny zbiór wektorów liniowo niezależnych $\{\varphi_1,\varphi_2,\varphi_3,\ldots\}$, który rozpina całą przestrzeń tzn. każdy wektor ψ należący do tej przestrzeni może być zapisany jako kombinacja liniowa wektorów bazowych czyli $\psi = c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2 + c_3\varphi_3 + \ldots$, gdzie $c_1, c_2, c_3, \ldots$ są współczynnikami liczbowymi.

Wektory należące do danego zbioru $\{\psi_1,\psi_2,\psi_3,\ldots\}$ nazywamy liniowo niezależnymi, jeśli żadnego z nich nie da się przedstawić jako kombinacja liniowa pozostałych.

Bazę $\{\varphi_1,\varphi_2,\varphi_3,\ldots\}$ nazywamy ortogonalną, jeśli $(\varphi_i,\varphi_j) = 0$ dla $i \neq j$.

Bazę $\{\varphi_1,\varphi_2,\varphi_3,\ldots\}$ nazywamy ortonormalną, jeśli $(\varphi_i,\varphi_j) = \delta^{ij} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases}$, czyli wektory bazy są wzajemnie ortogonalne i mają jednostkową długość $(\varphi_i,\varphi_i) = 1$.

Wykład IV cd. Podstawy fizyki kwantowej

Operator pędu

$\hat{\mathbf{p}} \equiv -i\hbar\nabla = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right)$; operator pędu jest hermitowski

Dowód

$$(\psi_1, \hat{p}_x\psi_2) = \int d^3r\,\psi_1^*(t,\mathbf{r})\,\hat{p}_x\psi_2(t,\mathbf{r}) = -i\hbar\int dx\,dy\,dz\,\psi_1^*(t,\mathbf{r})\frac{\partial}{\partial x}\psi_2(t,\mathbf{r})$$

całkując przez części mamy

$$-i\hbar\int dx\,dy\,dz\,\psi_1^*(t,\mathbf{r})\frac{\partial}{\partial x}\psi_2(t,\mathbf{r}) = -i\hbar\underbrace{\int dy\,dz\,\psi_1^*(t,\mathbf{r})\psi_2(t,\mathbf{r})\Big|_{x=-\infty}^{x=\infty}}_{=0} + i\hbar\int dx\,dy\,dz\left(\frac{\partial}{\partial x}\psi_1^*(t,\mathbf{r})\right)\psi_2(t,\mathbf{r})$$

$$= \int dx\,dy\,dz\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi_1(t,\mathbf{r})\right)^*\psi_2(t,\mathbf{r}) = (\hat{p}_x\psi_1, \psi_2)$$

Czyli $(\psi_1, \hat{p}_x\psi_2) = (\hat{p}_x\psi_1, \psi_2)$. Wyraz brzegowy znika, gdyż zakładamy, że funkcja falowa znika w nieskończoności, czego wymaga warunek unormowania funkcji falowej.

Funkcje własne operatora pędu

$$\hat{\mathbf{p}}\varphi(\mathbf{r}) = \mathbf{p}\varphi(\mathbf{r}) \quad \Rightarrow \quad -i\hbar\nabla\varphi(\mathbf{r}) = \mathbf{p}\varphi(\mathbf{r})$$

$$\begin{cases} -i\hbar\dfrac{\partial\varphi(\mathbf{r})}{\partial x} = p_x\varphi(\mathbf{r}) \quad \Rightarrow \quad \varphi(\mathbf{r}) \sim e^{i\frac{p_x x}{\hbar}} \\ -i\hbar\dfrac{\partial\varphi(\mathbf{r})}{\partial y} = p_y\varphi(\mathbf{r}) \quad \Rightarrow \quad \varphi(\mathbf{r}) \sim e^{i\frac{p_y y}{\hbar}} \\ -i\hbar\dfrac{\partial\varphi(\mathbf{r})}{\partial z} = p_z\varphi(\mathbf{r}) \quad \Rightarrow \quad \varphi(\mathbf{r}) \sim e^{i\frac{p_z z}{\hbar}} \end{cases}$$

$$\varphi(\mathbf{r}) = Ae^{i\frac{p_x x}{\hbar}}e^{i\frac{p_y y}{\hbar}}e^{i\frac{p_z z}{\hbar}} = Ae^{i\frac{p_x x + p_y y + p_z z}{\hbar}} = Ae^{i\frac{\mathbf{pr}}{\hbar}}$$ - fala płaska

A - stała normalizacyjna

Widmo operatora

Widmem operatora nazywamy zbiór jego wartości własnych. Widmo może być dyskretne, gdy wartości własne numerowane są liczbami naturalnymi, lub ciągłe, gdy wartości własne numerowane są liczbami rzeczywistymi.

Równanie na wektory i wartości własne operatora pędu ma postać $\hat{\mathbf{p}}\varphi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \mathbf{p}\varphi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$, gdzie wartość własna $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$ należy do R^3 i w sposób ciągły przebiega ten zbiór. Jest więc to przypadek widma ciągłego.

<u>Wykład IV cd.</u> Podstawy fizyki kwantowej

<u>Normalizacja fal płaskich</u>

$$\begin{cases} \varphi(\mathbf{r}) = Ae^{i\frac{\mathbf{pr}}{\hbar}} \\ \varphi^*(\mathbf{r}) = A^*e^{-i\frac{\mathbf{pr}}{\hbar}} \end{cases} \Rightarrow \quad |\varphi(\mathbf{r})|^2 = \varphi(\mathbf{r})\varphi^*(\mathbf{r}) = |A|^2$$

$$\int d^3r\, |\psi(t,\mathbf{r})|^2 = \int d^3r\, |A|^2 = |A|^2 \int d^3r = |A|^2 V = 1$$

V - objętość makroskopowego „pudełka", w którym normalizujemy funkcję falową. Zakładając, że $A \in R$ mamy $A = \frac{1}{\sqrt{V}}$ i ostatecznie falę płaską zapisujemy jako

$$\boxed{\varphi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\frac{\mathbf{pr}}{\hbar}}}$$

<u>Cząstka falą</u>

Rozważmy $\mathbf{p} = (p_x, 0, 0)$, wtedy fala płaska ma postać

$$\varphi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\frac{p_x x}{\hbar}} = \frac{1}{\sqrt{V}} \left(\cos\left(\frac{p_x x}{\hbar}\right) + i \sin\left(\frac{p_x x}{\hbar}\right) \right).$$

Fala płaska jako funkcja x jest okresowa z okresem odpowiadającym długości fali λ, którą znajdujemy z warunku $\frac{p_x \lambda}{\hbar} = 2\pi$. Stąd $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p_x} = \frac{h}{p_x}$, co zgadza się z hipotezą de Broglie'a.

<u>Lokalizacja w przestrzeni i pędzie - zasada nieoznaczoności</u>

Fali płaskiej $\varphi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$ odpowiada ściśle określony pęd $\mathbf{p}$, więc cząstka jest doskonale zlokalizowana w przestrzeni pędu. Natomiast gęstość prawdopodobieństwa znalezienie cząstki w danym punkcie $\mathbf{r}$ wynosi $|\varphi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})|^2 = \frac{1}{V}$, więc cząstka może z tym samym prawdopodobieństwem znajdować w dowolnym miejscu - jest całkowicie zdelokalizowana. Taka sytuacja jest konsekwencją <u>zasady nieoznaczoności</u> wymagającą, aby $\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$. Ponieważ $\Delta p_x = 0$ więc $\Delta x = \infty$.