

Wykład 10, 11 i 12

Mechanika Kwantowa

Maciej J. Mrowiński

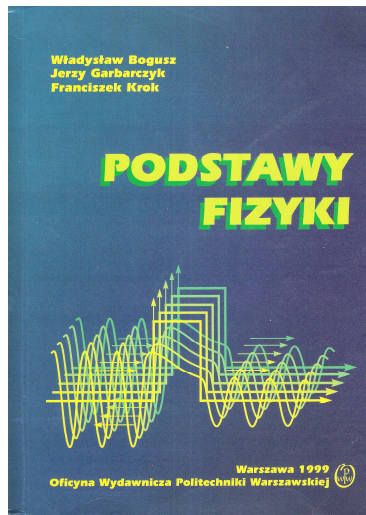
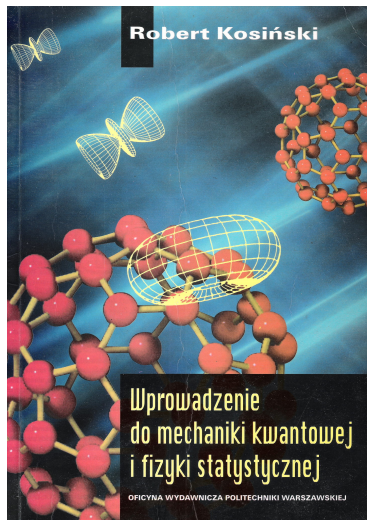
`mrow@if.pw.edu.pl`

Wydział Fizyki
Politechnika Warszawska

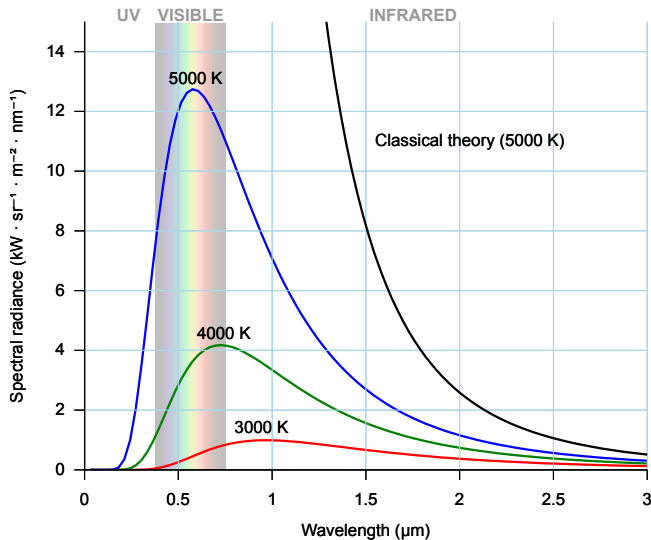
23 maja 2019



Literatura



Promieniowanie ciała doskonale czarnego

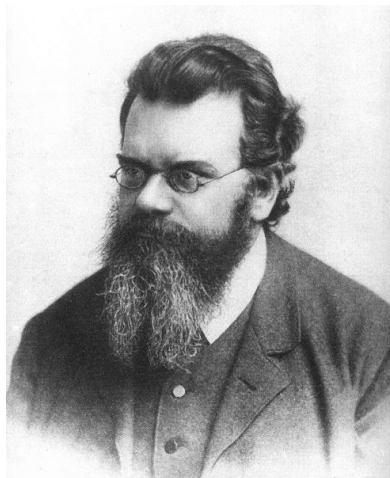


Ludwig Boltzmann (1844 - 1906) i Josef Stefan (1835 - 1893)

Stefan - 1879, Boltzmann - 1884:

$$\int_0^{\infty} \rho(\nu, T) d\nu = \sigma T^4$$

gdzie σ - stała Stefana-Boltzmannna.



Ludwig Boltzmann (1844 - 1906) i Josef Stefan (1835 - 1893)

Stefan - 1879, Boltzmann - 1884:

$$\int_0^{\infty} \rho(\nu, T) d\nu = \sigma T^4$$

gdzie σ - stała Stefana-Boltzmannna.



Wilhelm Carl Werner Otto Fritz Franz Wien (1864 – 1928)

1893:

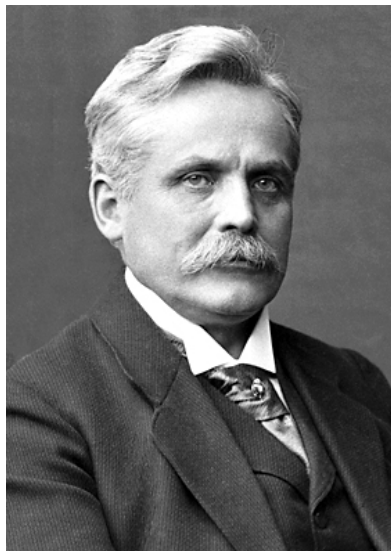
$$\rho(\nu, T) = \nu^3 f(\nu/T)$$

1896:

$$f(\nu/T) = \alpha e^{-\beta\nu/T}$$

co prowadzi do

$$\rho(\nu, T) = \nu^3 \alpha e^{-\beta\nu/T}$$



Max Planck (1858 – 1947)

1900 - prawo empiryczne:

$$\rho(\nu, T) = A\nu^3 / (\alpha e^{B\nu/T} - 1)$$

i wyznaczone na gruncie fizyki
statystycznej:

$$\rho(\nu, T) = (8\pi\nu^2/c^3)[h\nu/(e^{h\nu/kT}-1)]$$

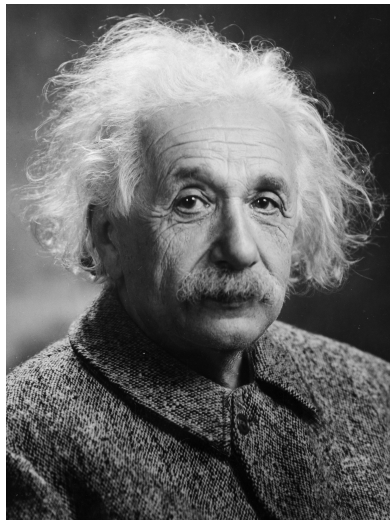


Początek nowej mechaniki

„A new scientific truth does not triumph by convincing its opponents and making them see the light, but rather because its opponents eventually die, and a new generation grows up that is familiar with it.”

— Max Planck

Albert Einstein (1879 – 1955)



Albert Einstein (1879 – 1955)

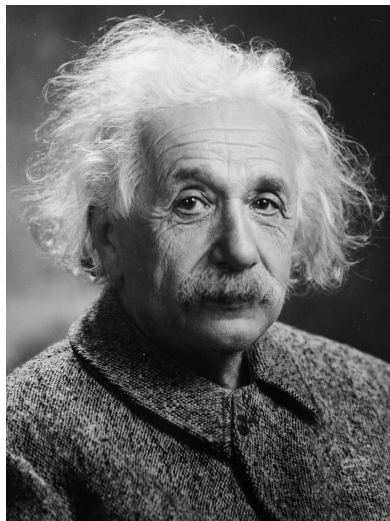
„Tymczasem wydaje mi się, że obserwacje «promieniowania ciała doskonale czarnego», fotoluminescencji, produkcji promieniowania katodowego przez światło ultrafioletowe i innych zjawisk związanych z emisją lub przemianą światła możemy łatwiej zrozumieć, jeżeli założymy, iż rozkład energii światła w przestrzeni jest nieciągły. Zgodnie z przyjętymi tu założeniami, gdy promień światła rozchodzi się ze źródła punktowego, energia nie jest rozłożona w sposób ciągły w coraz większej objętości, lecz ma postać skończonej liczby kwantów energii, które są zlokalizowane w określonych punktach przestrzeni, poruszają się, nie ulegając podziałowi, i mogą być absorbowane lub emitowane tylko w całości.”

— Albert Einstein, 1905

Albert Einstein (1879 – 1955)

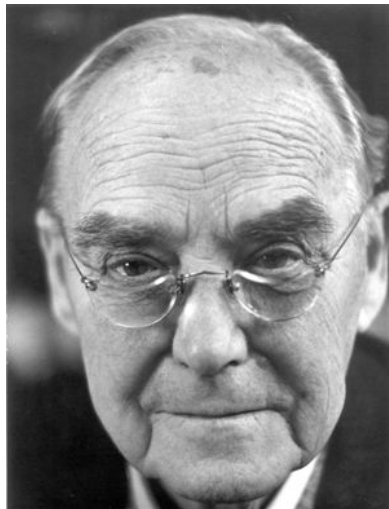
„Nie można zaprzeczyć, że istnieje wiele danych dotyczących promieniowania świadczących o tym, że światło posiada pewne podstawowe własności, które można zrozumieć znacznie lepiej z punktu widzenia Newtonowskiej teorii emisji, niż z punktu widzenia teorii falowej. Dlatego moim zdaniem kolejne stadium rozwoju fizyki teoretycznej dostarczy nam teorii światła będącej połączeniem teorii falowej i teorii emisji.”

— Albert Einstein, 1909



Sir Geoffrey Ingram Taylor (1886 – 1975)

1909 - eksperyment z dwiema szczelinami dla słabego źródła światła:



Louis-Victor-Pierre-Raymond, 7e duc de Broglie (1892 – 1987)

„Byłem przekonany, że dualizm falowo-korpuskularny odkryty przez Einsteina w jego teorii kwantów światła jest własnością ogólną, dotyczącą całego świata fizycznego i wydawało mi się oczywiste, że propagacja fali jest związana z ruchem każdej cząstki - fotonu, elektronu, protonu i innych.”

— Louis Broglie

1924 - fale materii:

$$p = \frac{h}{\lambda} = h\tilde{\nu}$$



Erwin Schrödinger (1887 - 1961)

1926 - równanie nowej mechaniki:

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

gdzie $\Psi = \Psi(x, t)$ to funkcja falowa,
a $V = V(x)$ to potencjał.



Werner Heisenberg (1901 – 1976)

1925 - mechanika macierzowa

„Im dłużej pracuję z fizycznymi składnikami teorii Schrödingera, tym bardziej wydaje mi się ona obrzydliwa.”

— Werner Heisenberg o Schrödingrze

„W moim odczuciu skomplikowane metody algebraiczne, które sprawiają, że wyobrażenie sobie problemu jest niemożliwe, są denerwujące, prawie że odrażające.”

— Erwin Schrödinger o Heisenbergu



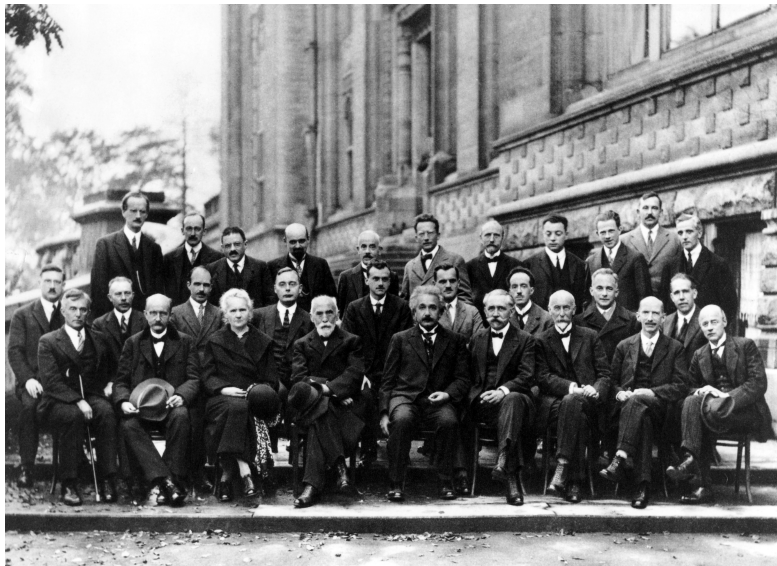
Max Born (1882 - 1970)

„Po raz kolejny pomysł Einsteina naprowadził mnie na właściwy trop. Starał się on wyjaśnić dualność cząstek - kwantów światła - i fal, interpretując kwadrat optycznej amplitudy fali jako gęstość prawdopodobieństwa występowania fotonów. Tę koncepcję można by zastosować dla funkcji falowej Ψ - $|\Psi|^2$ powinien reprezentować gęstość prawdopodobieństwa dla elektronów (albo innych cząstek).”

— Max Born



Bruksela, 1927



Postulat o funkcji falowej

Mechanika klasyczna:

- Cząstki w mechanice klasycznej opisujemy podając ich pędy p i położenia x .

Mechanika kwantowa

- W mechanice kwantowej pełną informację o układzie zawiera funkcja falowa Ψ .
- Interpretacja probabilistyczna funkcji Ψ - $|\Psi|^2$ to gęstość prawdopodobieństwa: $|\Psi|^2 dx$ to prawdopodobieństwo tego, że znajdziemy cząstkę w przedziale $[x, x + dx]$.

Funkcja falowa

Własności funkcji falowej:

- Unormowanie

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi|^2 dx = 1$$

- Funkcja falowa musi zanikać w nieskończoności.
- Ciągłość - funkcja Ψ musi być ciągła.
- Ciągłość pochodnej - pochodna funkcji Ψ musi być ciągła, jeżeli potencjał jest skończony.

Postulat o operatorach

Mechanika klasyczna:

- W podejściu klasycznym badamy wielkości fizyczne takie jak np. pęd i położenie.
- Wiele wielkości fizycznych (np. energia kinetyczna) to funkcje pędu i położenia: $\Omega(p, x)$

Mechanika kwantowa

- W mechanice kwantowej mierzalnym wielkościom fizycznym odpowiadają operatory.
- Operator położenia: $\hat{X} = x$.
- Operator pędu: $\hat{P} = -i\hbar \frac{d}{dx}$.
- Jeżeli jakaś wielkość fizyczna jest funkcją pędu i położenia, to odpowiada jej operator

$$\Omega(p, x) \rightarrow \hat{\Omega} = \Omega(\hat{P}, \hat{X})$$

Postulat o równaniu Schrödingera

Mechanika klasyczna:

- W mechanice klasycznej położeni i pęd powiązane są z potencjałem przez równanie Newtona:

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{dV}{dx}$$

Mechanika kwantowa

- W mechanice kwantowej analogią równania Newtona jest równanie Schrödingera.
- Każda funkcja falowa musi spełniać równanie Schrödingera.

Równanie Schrödingera

- Równanie Schrödingera ma następującą postać:

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

co można zapisać przy pomocy hamiltonianu jako

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi$$

Równanie Schrödingera - stany stacjonarne

- Rozwiązań równania Schrödingera można poszukiwać w postaci (stany stacjonarne): $\Psi(x, t) = \psi(x)T(t)$
- Rozwiązaniem części zależnej od czasu jest:

$$T(t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

- Aby uzyskać część rozwiązania zależną od położenia należy rozwiązać niezależne od czasu równanie Schrödingera:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V\psi = E\psi$$

co można zapisać przy pomocy hamiltonianu jako

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

- Niezależne od czasu równanie Schrödingera jest równaniem (zagadnieniem) własnym dla operatora energii całkowitej.

Stany stacjonarne - superpozycja stanów

- Superpozycja stanów stacjonarnych jest rozwiązaniem równania Schrödingera:

$$\Psi(x, t) = \sum_n c_n \psi_n(x) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}$$

Postulat o średniej

- Jeżeli układ znajduje się w stanie Ψ , wówczas średnia z pomiaru wielkości fizycznej, której odpowiada operator $\hat{A}$, to:

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{A} \Psi dx$$

- **Równoważny powyższemu postulat o pomiarze:** Jeżeli pewnej wielkości fizycznej odpowiada operator $\hat{A}$, który ma funkcje własne $a_i(x)$ i wartości własne α_i , wówczas w wyniku pomiaru tej wielkości fizycznej w układzie znajdującym się w stanie Ψ możemy uzyskać jedynie jedną z wartości własnych tego operatora z prawdopodobieństwem:

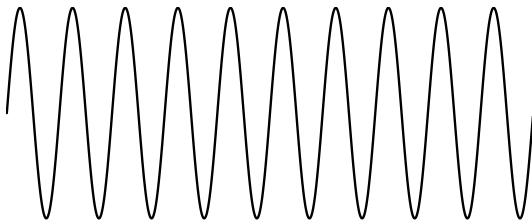
$$p(\alpha_i) = \left| \int_{-\infty}^{\infty} a_i(x)^* \Psi(x) dx \right|^2$$

Zasada nieoznaczoności

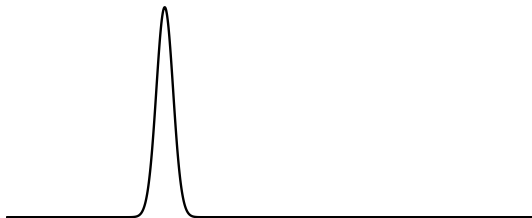
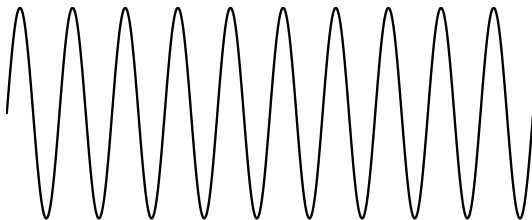
$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}$$

Wniosek: nie ma takiego stanu kwantowego, w którym pęd i położenie byłyby dobrze określone.

Zasada nieoznaczoności



Zasada nieoznaczoności



Twierdzenie Ehrenfesta (Paul Ehrenfest 1880 - 1933)

- można pokazać, że

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

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{p} \rangle = - \langle \nabla V(\mathbf{r}) \rangle$$

- czyli inaczej

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle \mathbf{r} \rangle = - \langle \nabla V(\mathbf{r}) \rangle$$

- przypomnijmy sobie równanie Newtona

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = - \nabla V(\mathbf{r})$$



Twierdzenie Ehrenfesta (Paul Ehrenfest 1880 - 1933)

- można pokazać, że

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

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{p} \rangle = - \langle \nabla V(\mathbf{r}) \rangle$$

- czyli inaczej

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle \mathbf{r} \rangle = - \langle \nabla V(\mathbf{r}) \rangle$$

- przypomnijmy sobie równanie Newtona

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = - \nabla V(\mathbf{r})$$



Twierdzenie Ehrenfesta (Paul Ehrenfest 1880 - 1933)

- można pokazać, że

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

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{p} \rangle = - \langle \nabla V(\mathbf{r}) \rangle$$

- czyli inaczej

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle \mathbf{r} \rangle = - \langle \nabla V(\mathbf{r}) \rangle$$

- przypomnijmy sobie równanie Newtona

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = - \nabla V(\mathbf{r})$$



Interpretacja Kopenhaska

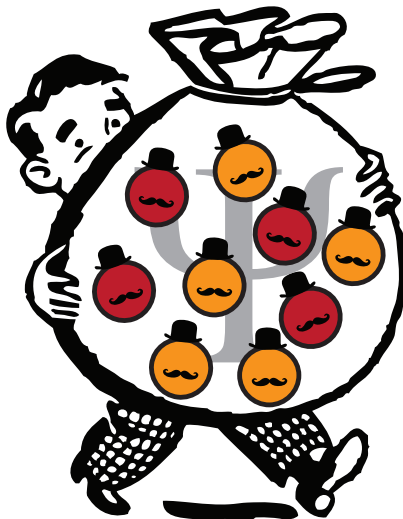


$$\Psi = \Psi + \Psi$$

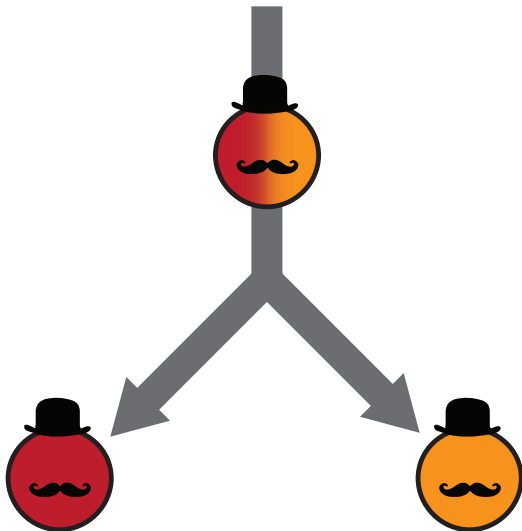
Co z tym kotem?



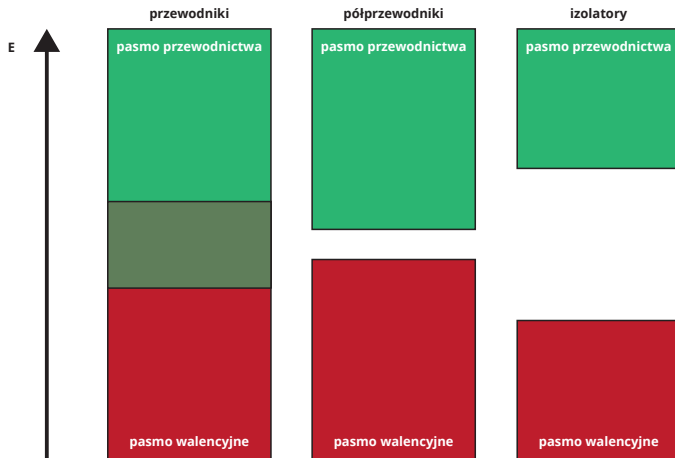
Interpretacja statystyczna



Interpretacja wielu światów



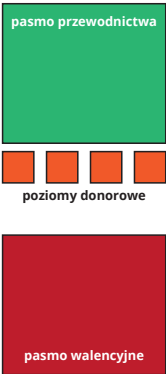
Przewodnictwo



Półprzewodniki

półprzewodnik typu n

pasmo przewodnictwa



poziomy donorowe

pasmo walencyjne

półprzewodnik typu p

pasmo przewodnictwa



poziomy akceptorowe



pasmo walencyjne

Prąd prawdopodobieństwa

- w jednym wymiarze gęstość prądu prawdopodobieństwa zdefiniowana jest jako

$$j(x, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right)$$

- dla funkcji falowej

$$\Psi(x, t) = Ae^{\pm ikx - i\omega t}$$

mamy

$$j(x, t) = \pm \frac{\hbar k}{m} |A|^2$$

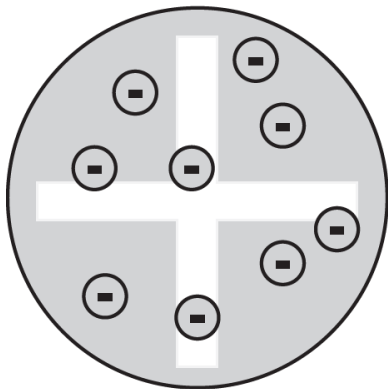
- dla funkcji falowej

$$\Psi(x, t) = Ae^{\pm kx - i\omega t}$$

mamy

$$j(x, t) = 0$$

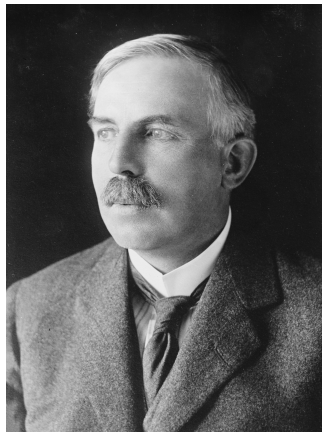
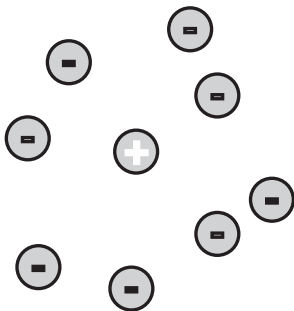
Model J. J. Thomsona (1904; sir Joseph John Thomson 1856 – 1940)



„ciasto z rodzynkami”



Model Rutherford (1911; Ernest Rutherford 1871 – 1937)



Model atomu według Bohra (1915; Niels Bohr 1885 – 1962)

Postulat I

W układzie jądra z elektronami istnieją stany, zwane stacjonarnymi, w których (wbrew zwykłej elektrodynamice) nie dochodzi do promieniowania.



Model atomu według Bohra (1915; Niels Bohr 1885 – 1962)

Postulat II

Dynamiką w stanach stacjonarnych rządzi mechanika Newtonowska, która jednak nie obowiązuje podczas przejść z jednego stanu stacjonarnego do drugiego.



Model atomu według Bohra (1915; Niels Bohr 1885 – 1962)

Postulat III

Każdej emisji lub absorpcji energii towarzyszy przejście między dwoma stanami stacjonarnymi. Częstotliwość ν promieniowania związanego z tymi przejściami powiązana jest z energiami A_i i A_j stanów stacjonarnych w następujący sposób:

$$h\nu = A_i - A_j$$



Model atomu według Bohra (1915; Niels Bohr 1885 – 1962)

Postulat IV

Możliwe stany stacjonarne układu składającego się z elektronu krążącego wokół jądra są określone przez równanie:

$$T = \frac{1}{2}nhf$$

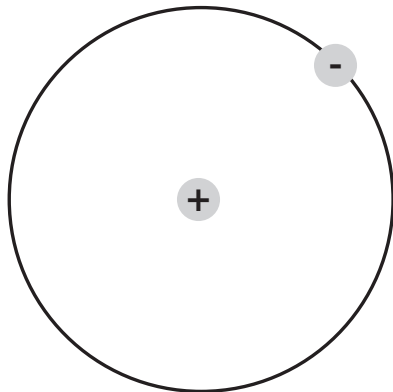
gdzie T to średnia energia kinetyczna, f to częstotliwość obrotu, a n to liczba całkowita.
(alternatywnie $L = n\hbar$, gdzie L - moment pędu)



Atom wodoru według mechaniki kwantowej

Dla atomu wodoru należy rozwiązać równanie Schrödingera z potencjałem Coulombowskim:

$$V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$



Atom wodoru według mechaniki kwantowej

Pełna postać rozwiązania:

$$\psi_{nlm} = \sqrt{\left(\frac{2}{na}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} e^{-r/na} \left(\frac{2r}{na}\right)^l \left[L_{n-l-1}^{2l+1}(2r/na)\right] Y_l^m(\theta, \phi)$$

Atom wodoru według mechaniki kwantowej

Pełna postać rozwiązania:

$$\psi_{nlm} = \sqrt{\left(\frac{2}{na}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} e^{-r/na} \left(\frac{2r}{na}\right)^l \left[L_{n-l-1}^{2l+1}(2r/na)\right] Y_l^m(\theta, \phi)$$

Rozwiązanie zależy od trzech liczb kwantowych: n , l , m

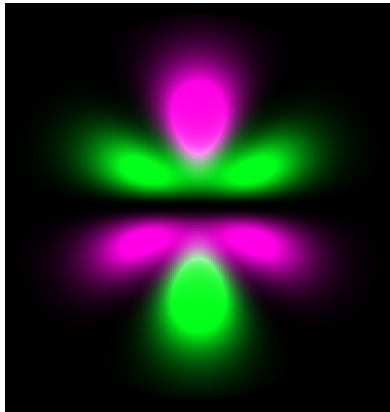
$$\psi = \psi_{nlm}(\mathbf{r})$$

Atom wodoru według mechaniki kwantowej

- n - główna liczba kwantowa ($n = 1, 2, \dots$). Określa energię:

$$E_n = - \left[\frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \right] \frac{1}{n^2}$$

Wraz ze wzrostem n rośnie średnia odległość elektronu od jądra.



Atom wodoru według mechaniki kwantowej

- l - poboczna liczba kwantowa ($l = 0, 1, \dots, n - 1$). Określa kwadrat momentu pędu

$$\hbar^2 l(l + 1)$$

- m - magnetyczna liczba kwantowa ($m = -l, -l + 1, \dots, l - 1, l$). Określa składową momentu pędu w kierunku Z

$$\hbar m$$

