Wydział Fizyki

POLITECHNIKA WARSZAWSKA

Fizyka 2
Operatory i funkcja falowa

Dr inż. Monika Petelczyc

monika.petelczyc@pw.edu.pl

pok. 136, Gmach Fizyki

Matematyczne ujęcie mechaniki kwantowej.

Feynman: **Jeżeli ktoś uważa, że rozumie mechanikę kwantową, to właśnie oznacza, że nie ma o niej pojęcia.**

Murray Gell-Man: **Mechanika kwantowa to tajemnicza dyscyplina, której nikt nie rozumie, którą jednak potrafimy się posługiwać.**

ZACZYNAMY posługiwać się prawdopodobieństwem.

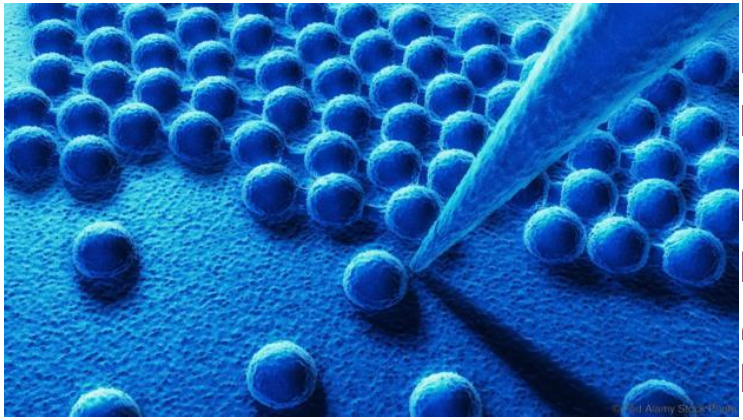
Świat mikroskopowy

A. **Pomiar wielkości fizycznej** (akt obserwacji zaburza układ, który obserwujemy). Nie wszystkie wielkości fizyczne są mierzalne jednocześnie. Im dokładniejszy jest pomiar położenia tym mniej dokładny jest pomiar pędu (prędkości) cząstki (wkrótce poznamy zasadę nieoznaczoności Heisenberga.

B. Wynik pomiaru pojawia się z określonym **prawdopodobieństwem**, tj. dokonując serii pomiarów, możemy otrzymać znacząco różniące się wyniki w krótkich odstępach czasu.

C. **Świat mikroskopowy** składa się z wielu obiektów, a czasem interesuje nas tylko opis pojedynczej cząstki(!). W obu przypadkach posłużymy się funkcją stanu, która w sensie matematycznym jest związana z rozkładem prawdopodobieństwa.

Za [1]



Funkcja stanu ψ

- Fizyka: aby opisać układ zbudowany z N cząsteczek, musimy określić ich położenia, co nam daje 3N argumentów dla naszej funkcji stanu. O ile ich sformułowanie można uznać za wykonalne, to ich rozwiązanie już nie.
- Matematyka: zamiast klasycznych równań, oczekujemy, że małej przestrzeni dV znajdziemy nasz obiekt. **Oczekujemy**, czyli wprowadzamy język probabilistyki:

$$\rho = |\psi|^2$$

Znalezienie cząstki „gdziekolwiek” musi być zagwarantowane (pewne):

$$\int |\psi|^2 \, \mathrm{dV} = 1$$

Cechy funkcji FALOWEJ

A. Spełnia zasadę superpozycji. Gdy funkcje ψ_1 oraz ψ_2 opisują ten sam układ w różnym stanie, to ich KOMBINACJA liniowa opisuje ten sam układ, ale w innym stanie:

$$\psi_3 = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$$

B. Pomiar w sensie statystycznym:

W wyniku pomiaru wielkości F możemy otrzymać z pewnym prawdopodobieństwem dopuszczalne wartości f. Nazywamy je wartościami WŁASNYMI wielkości fizycznej. Cały zestaw (zbiór) tych wartości nazywamy WIDMEM, które może być dyskretne jak i ciągłe. Dyskretne indeksujemy i zapisujemy f_n.
Każdej wartości własnej odpowiada inna UNORMOWANA funkcja własna.

Cechy funkcji falowej

- Z kombinacji liniowej mamy

$$\psi = \sum_n a_n \psi_n$$

- Zbiór funkcji własnych stanowi układ zupełny funkcji bazowych w przestrzeni zbioru wszystkich możliwych funkcji falowych układu (czyli jakby każdy wektor w przestrzeni trójwymiarowej można skonstruować z kombinacji liniowej wersorów)
- Współczynniki rozwinięcia będą określały prawdopodobieństwo odpowiednich wartości własnych, takich że:

$$1 = \sum_n |a_n|^2$$

Funkcja falowa cd.

Funkcję falową możemy teraz przedstawić:

$$1 = \sum_n a_n{}^* a_n = \int \psi^* \psi dV = \int \sum_n a_n{}^* \psi_n{}^* \psi dV = \sum_n a_n{}^* \int \psi_n{}^* \psi dV$$

Musi zachodzić:

$$a_n = \int \psi_n{}^* \psi dV$$

Wartość oczekiwana

- Postulujemy, chociaż można to wyprowadzić w analitycznie z własności funkcji falowych, że wartość średnia (OCZEKIWANA) określonej wielkości (w domyśle fizycznej) dana jest następującym wzorem:

$$\bar{f} = \int \psi^* \hat{F} \psi dV$$

$$\int \psi^* \hat{F} \psi dV$$

$$= \sum_n a_n{}^* a_n f_n = \sum_n \int \psi^* \psi_n a_n f_n dV = \int \psi^* \sum_n a_n f_n \psi_n dV$$

$$\boldsymbol{\int \psi^* \hat{F} \psi dV = \int \psi^* \sum_n a_n f_n \psi_n dV}$$

$$\boldsymbol{\hat{F}\psi = \sum_n a_n f_n \psi_n}$$

Co to jest $\hat{A}$?

$$\hat{F}\psi=\sum_n a_n f_n \psi_n$$

$$\boldsymbol{\hat{F}\psi_n=f_n\psi_n}$$

- Powyższe równanie znane jest jako zagadnienie własne operatora $\hat{F}$.
- Wielkości $\hat{F}$ przypisaliśmy w ten sposób operator, którego wartości własne f_n są rozwiązaniami równania własnego.
- Operator to działanie, które jednej funkcji przyporządkowuje inną: $\boldsymbol{F\psi}=\phi$
- Operatory, które opisują wielkości fizyczne muszą spełniać specjalne właściwości.

Operator hermitowski

H1: Najważniejszą cechą jest fakt, że w wyniku eksperymentu uzyskujemy wartość rzeczywistą, dlatego oczekujemy wartości własnych w takiej postaci. W konsekwencji rzeczywiste muszą być również wartości oczekiwane! Musi zatem zachodzić:

$$\bar{f} = \int \psi^* \hat{F} \psi dV = \bar{f}^* = \left(\int \psi^* \hat{F} \psi dV \right)^*$$

Ta własność powoduje, że musi zachodzić, **samosprzężoność:**

$$\left(\int {\psi_1}^* \hat{F} \psi_2 dV \right)^* = def = \int {\psi_2}^* \hat{F}^+ \psi_1 dV$$

Operatory wielkości fizycznych

H2: Funkcje własne operatora hermitowskiego odpowiadające różnym wartościom własnym są ortogonalne.

H3: Jeżeli dwa operatory mają taki sam układ funkcji własnych, to oznacza, że są przemienne.

H3a. Jeżeli operatory są przemienne, to mają taki sam układ funkcji własnych.

H3b. Równoczesny pomiar dwóch wielkości fizycznych jest możliwy tylko wtedy, gdy ich operatory są przemienne.

Komutator

- Przemienność operatorów definiujemy poprzez komutator (oznaczany nawiasem prostokątnym). Znikanie komutatora oznacza przemienność:

$$\left[\hat{A},\hat{B}\right]=\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}=0$$

- W ogólności jednak ta różnica bywa różna od zera. KOLEJNOŚĆ DZIAŁAŃ W MECHANICE KWANTOWEJ JEST ISTOTNA.

Komentarze do wartości własnych. Widmo ciągłe.

Zbiór wartości własnych nazwaliśmy widmem. UWAGA:

U1:jest możliwa sytuacja, w której jednej wartości własnej odpowiada wiele funkcji własnych. Wówczas mówimy o ZDEGENEROWANEJ WARTOŚCI WŁASNEJ. Dla cząstki swobodnej widmo energii jest ciągłe (wykażemy to na następnym wykładzie!)

U2: Skwantowanie wartości własnych może być konsekwencją periodycznych warunków brzegowych. W przypadku okresu periodyczności rosnącego do nieskończoności z widma dyskretnego przejdziemy w widmo quasiciągłe.

U3: W przypadku widma ciągłego sumowanie zastępujemy całkowaniem.

U4: Normowanie stanów dyskretnych wymaga delty Kroneckera $\delta_{i,j}$, natomiast normowanie stanów ciągłych delty Diraca.

Odnośniki

[1] http://www.bbc.com/earth/story/20151120-how-do-we-know-that-things-are-really-made-of-atoms

[2] FOTON 130, Jesień 2015, s. 61-62

[3] AK. Wóblewski, JA. Zakrzewski „Wstęp do fizyki” t.1

[4] IP. Herman Physics of the human body, Springer 2008