

Podstawy mechaniki kwantowej.

- a) Równanie Schrödingera zależne od czasu
- b) Probabilistyczna interpretacja funkcji falowej
- c) Zasada nieoznaczoności i probabilistyczny charakter przewidywań mechaniki kwantowej, paczka falowa
- d) Równanie Schrödingera niezależne od czasu
- e) Warunki, które musi spełniać funkcja falowa
- f) Stan stacjonarny.

Funkcja falowa dla cząstki swobodnej (na którą klasycznie nie działa siła czyli porusza się ona ze stałą prędkością i pędem)

Związek między własnościami korpuskularnymi cząstki E oraz p a jej własnościami falowymi ω , λ , k :

$$\lambda = \frac{h}{p} \Rightarrow p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2\pi} k = \hbar k$$

$$E = h\nu = \hbar\omega$$

p -pęd, $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ -liczba falowa, λ -długość fali, $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ (h -stała Plancka)

E -energia ν - częstość fali $\omega = 2\pi\nu$ -częstość kołowa

Dla opisu własności falowych takiej cząstki wprowadzamy funkcje falową przyjmującą wartości zespolone (czyli mającą część rzeczywistą i zespoloną) zależną od współrzędnych przestrzennych i czasu

$$\Psi = \Psi(\vec{r}, t) = \text{Re } \Psi(\vec{r}, t) + i \text{Im } \Psi(\vec{r}, t)$$

Załóżmy iż cząstka wykazująca własności falowe porusza się w obszarze stałego potencjału $V=0$ (na cząstkę w ujęciu klasycznym nie działa wówczas żadna siła, a jej energia potencjalna jest równa tożsamościowo zeru). Gdy cząstka ta porusza się w kierunku ustalonym przez zwrot osi Ox i ma energię E to odpowiadająca jej funkcja falowa wyraża się wzorem

$$\Psi = \Psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)} = A \cos(kx - \omega t) + iA \sin(kx - \omega t)$$

A -dowolna stała

$$e^{i\alpha} = \cos \alpha + i \sin \alpha$$

Gdy A jest liczba rzeczywista to część rzeczywista funkcji Ψ równa $\Psi_r = A \cos(kx - \omega t)$ opisuje fale płaską harmoniczną propagującą wzdłuż osi Ox

Równanie spełniane przez funkcję falową opisującą cząstkę swobodną poruszającą się w kierunku równoległym do osi Ox

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \quad (*)$$

Jednym z rozwiązań tego równania jest funkcja $\Psi = Ae^{i(kx - \omega t)}$ gdy spełnione jest równanie $\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ co można sprawdzić licząc pochodne

$$i^2 = -1$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i\omega Ae^{i(kx - \omega t)} = -i\omega \Psi$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = ikAe^{i(kx - \omega t)}$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = i^2 k^2 Ae^{i(kx - \omega t)} = -k^2 Ae^{i(kx - \omega t)} = -k^2 \Psi$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i\omega \Psi \Rightarrow$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = i\hbar \cdot (-i\omega \Psi) = \hbar \omega \Psi$$

$$i^2 = -1$$

Równanie

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \quad (*)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -k^2 \Psi \Rightarrow$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Psi$$

jest spełnione gdy

$$\hbar \omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Ponieważ $p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k$ oraz $E = \hbar \omega$ to relacja $\hbar \omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ jest równoważna relacji

$E = \frac{p^2}{2m}$ słusznej dla cząstki nierelatywistycznej obdarzonej masą gdy energia potencjalna $V=0$ czyli energia całkowita jest równa energii kinetycznej.

Funkcja $\Psi_r = A \cos(kx - \omega t)$ nie spełnia równania (*) lecz tylko równanie falowe

$$\frac{d^2 \Psi_r}{dx^2} - \frac{1}{v^2} \frac{d^2 \Psi_r}{dt^2} = 0$$

(v - prędkość fali) wówczas gdy

$$k^2 = \frac{\omega^2}{v^2}$$

co prowadzi do niepoprawnej relacji między energią i pędem (słusznej tylko dla fotonów dla których $v=c$, $E=pc$)

Uzyskanie poprawnej relacji między pędem i energią przy dodatkowym żądaniu by równanie falowe było liniowe wymaga zapostulowania go w postaci równania, którego rozwiązaniem jest funkcja falowa zespolona. Liniowość równania zapewnia iż suma dwóch funkcji będących jego rozwiązaniem jest także jego rozwiązaniem, co pozwala na uzyskanie opisu zjawisk interferencji czy dyfrakcji fal materii.

W przypadku ruchu w przestrzeni trójwymiarowej w potencjale $V=0$ równanie

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

przyjmuje postać

$$\Psi = \Psi(\vec{r}, t)$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi$$

$$\Delta = \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Operator Laplace'a

W przypadku ruchu w obszarze o $V \neq 0$ w tym w szczególności potencjale zależnym od położenia (w którym klasycznie na cząstkę działa siła) należy równanie uzupełnić o dodatkowy człon

Potencjał, w którym porusza się cząstka, równy jej energii potencjalnej

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

Powyższe równanie opisujące cząstkę nierelatywistyczną o niezerowej masie zostało sformułowane przez Erwina Schrödingera w 1926 roku, przy czym w ogólnym przypadku $\Psi(x, t) \neq Ae^{i(kx - \omega t)}$

Interpretacja Borna funkcji falowej

Kwadrat modułu funkcji falowej $\rho = |\Psi|^2 = \Psi^* \Psi$ jest miarą prawdopodobieństwa znalezienia cząstki kwantowej w danym miejscu w danej chwili czasu. Wielkość tą po odpowiednim unormowaniu funkcji falowej określa się jako gęstość prawdopodobieństwa przy czym prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w danej chwili t w elemencie objętości dV jest równe $|\Psi|^2 dV$

(widać analogie do fali elektromagnetycznej o amplitudzie natężenia pola elektrycznego E_0 , w przypadku której prawdopodobieństwo znalezienia fotonu w elemencie objętości dV jest proporcjonalne do $E_0^2 dV$)

Prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w całym obszarze jest równe 1 (pewność).

Wynika z tego warunek normalizacji funkcji falowej

$$\int_V |\Psi|^2 dV = 1$$

W przestrzeni jednowymiarowej

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1$$

Fale de Broglie'a są „**falami prawdopodobieństwa**”,

Uwaga:

Znajomość funkcji falowej pozwala ponadto na określenie prawdopodobieństwa uzyskania określonych wyników w pomiarze różnych wielkości fizycznych na cząstce znajdującej się w stanie kwantowym specyfikowanym przez postać funkcji falowej

Wielkość proporcjonalną do gęstości prawdopodobieństwa ρ znalezienia cząstki w określonym punkcie przestrzeni dla fali danej wzorem $\Psi = Ae^{i(kx-\omega t)}$ określa formuła

$$\rho = |\Psi|^2 = \Psi^* \Psi = A^* e^{-i(kx-\omega t)} A e^{i(kx-\omega t)} = A^* A = |A|^2 = \text{const}$$

Funkcji tej nie można unormować w standardowy sposób tak by

$$\int_V \rho dV = \int_V |\Psi|^2 dV = 1$$

Gęstość prawdopodobieństwa jest stała w przestrzeni i w czasie. Nie posiadamy żadnej informacji o położeniu cząstki. Za to posiadamy pełną informację o jej pędzie $p_x = \hbar k$ i energii $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$.

Do opisu cząstki o której położeniu coś wiemy trzeba wykorzystywać funkcję falową dla której pęd nie jest ściśle określony.

Zasada nieoznaczoności Heisenberga w przestrzeni jednowymiarowej

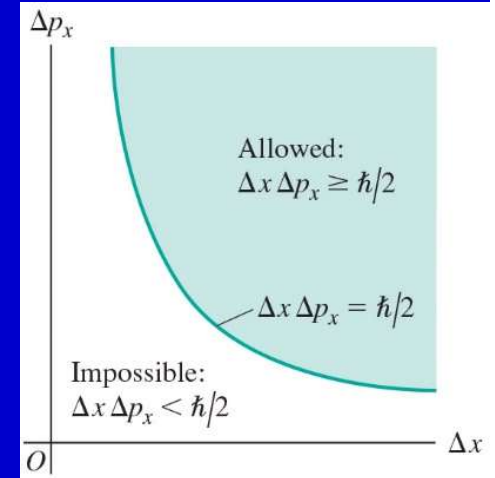
Iloczyn nieoznaczoności (niepewności) pomiaru pędu i pomiaru położenia cząstki nie może być mniejszy od połowy stałej Plancka h dzielonej przez 2π

$$\Delta p_x \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

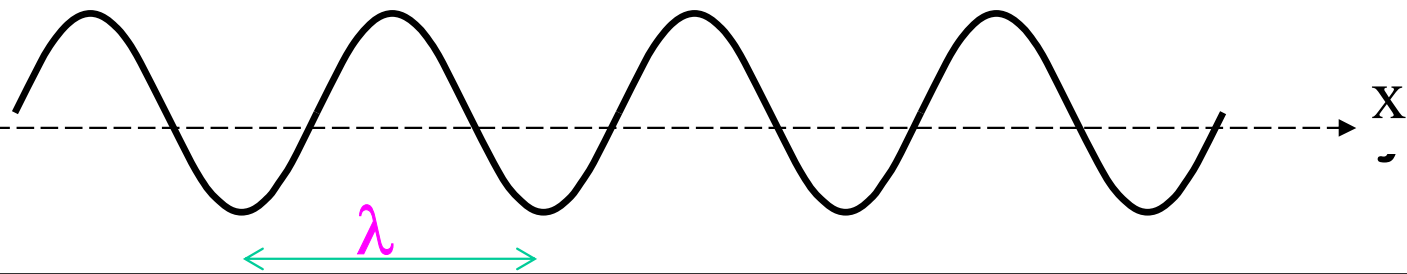
Im znamy dokładniej pęd cząstki tym posiadamy mniejszą informację dotyczącą jej położenia

Jeżeli znamy dokładnie pęd cząstki $p_x = \hbar k_x$, $\Delta p_x = 0$ to znamy długość odpowiadającą jej zespolonej fali płaskiej harmoniczej $\lambda = h/p_x$, której kwadrat modułu jest stały w całej przestrzeni. Nie możemy wówczas powiedzieć, gdzie choćby w przybliżeniu znajduje się cząstka. Położenie cząstki jest nieokreślone $\Delta x = \infty$. Zasada nieoznaczoności wiąże się z korpuskularno-falową naturą materii i tym że jednocześnie możemy analizować tylko jedną z tych dwóch właściwości materii (komplementarność)



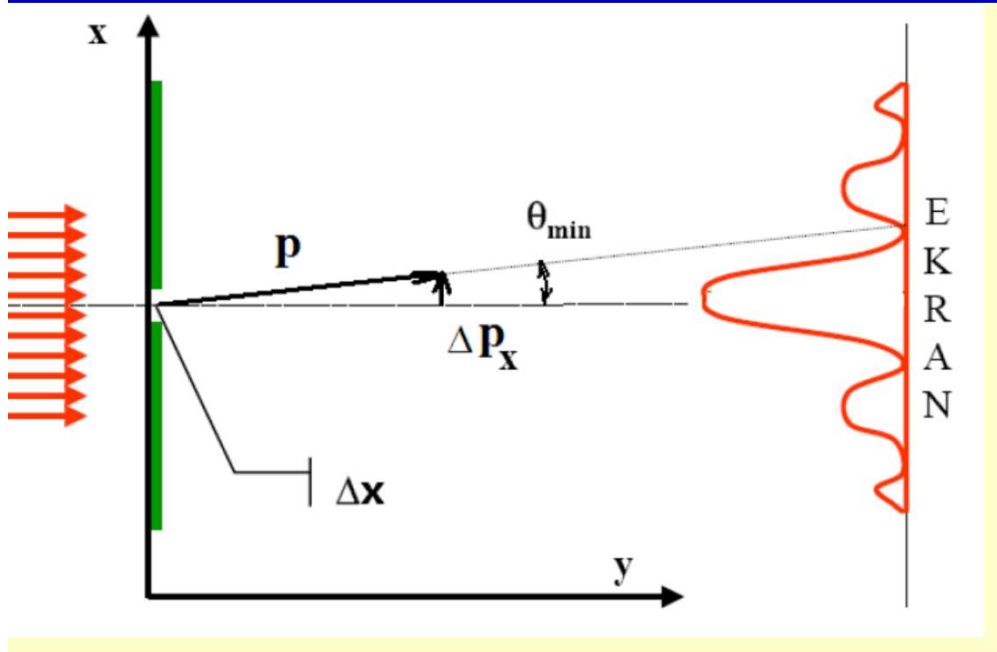
Dla
ustalonego
czasu

$\text{Re } \Psi$



Związek zasady nieoznaczoności z falową naturą cząstek

Cząstka, której odpowiada długość fali λ , padając na szczelinę o szerokości Δx ma pęd skierowany wzdłuż osi y o wartości $p_y = p = h/\lambda$, składowa $p_x = 0$, po przejściu przez szczelinę w wyniku dyfrakcji pojawia się składowa p_x .



Z klasycznej teorii dyfrakcji wynika iż położenie pierwszego minimum dyfrakcyjnego odpowiada kątowi $\theta_{\min}$ określonemu równaniem

$$\Delta x \sin(\theta_{\min}) = \lambda \rightarrow \sin(\theta_{\min}) = \frac{\lambda}{\Delta x}$$

Δx jest miarą nieoznaczoności x -owej składowej położenia cząstki w momencie przechodzenia cząstki przez szczelinę

Jeżeli cząstka pojawia się na ekranie w punkcie odpowiadającym kątowi $\theta > \theta_{\min}$ to musi mieć składową pędu

$$|p_x| > p \sin(\theta_{\min}) = \frac{h}{\lambda} \sin(\theta_{\min}) = \frac{h}{\Delta x}$$

Ponieważ większość cząstek pojawia się na ekranie w punktach dla których $\theta \leq |\theta_{\min}|$ to można przyjąć iż nieoznaczoność tej składowej pędu cząstki Δp_x jest co do rzędu wielkości równa

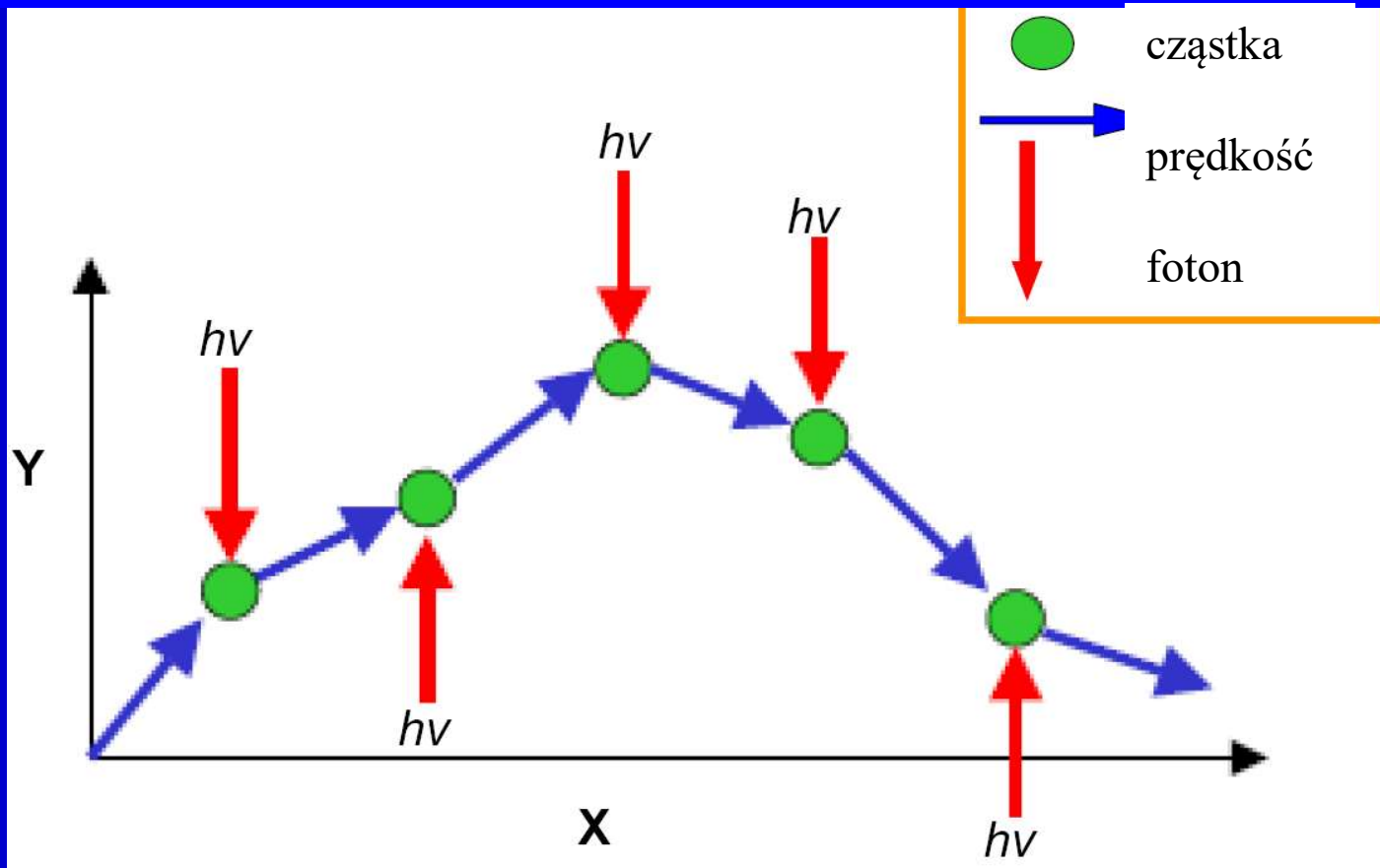
$$\Delta p_x = \frac{h}{\Delta x}$$

Widać iż iloczyn nieoznaczoności położenia i pędu spełnia relacje

$$\Delta x \Delta p_x = h > \frac{\hbar}{2}$$

Łwiązek zasady nieoznaczoności z pomiarami

Nie możemy wyznaczyć jednocześnie tej samej składowej położenia i pędu cząstki kwantowej (np. elektronu). Jeśli chcielibyśmy wyznaczyć położenie cząstki to musielibyśmy oświetlić ją, czyli bombardować ją fotonami o energii $h\nu$ i pędzie o wartości $p=h\nu/c=h/\lambda$ gdzie $\nu(\lambda)$ - częstość (długość) fali elektromagnetycznej. Powoduje to jednak oddziaływanie cząstki z fotonem prowadzące do zmiany jej pędu, której nie możemy dokładnie wyznaczyć eksperymentalnie. Im częstość użytego światła jest większa czyli długość fali jest mniejsza tym dokładniej określamy położenie cząstki, za to tracimy w większym stopniu informacje wcześniejszą o jej pędzie. Uniemożliwia to dokładne wyznaczenie toru ruchu cząstki.



Zasada nieoznaczoności Heisenberga dla położenia i pędu (w przestrzeni 3-wymiarowej)

Nie można jednocześnie wyznaczyć tych samych składowych położenia i pędu cząstki z dowolną dokładnością.

Iloczyny nieoznaczoności (niepewności wyznaczenia) tych wielkości spełniają zależności

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta y \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta z \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}$$

Zasada nieoznaczoności nie nakłada ograniczeń na pomiar różnych składowych wektorów wodzącego i pędu cząstki

Nieoznaczoność pomiaru wielkości A czyli ΔA można utożsamiać z odchyleniem standardowym serii złożonej z wielu wyników pomiarów tej wielkości przeprowadzonych na identycznych cząstkach kwantowych.

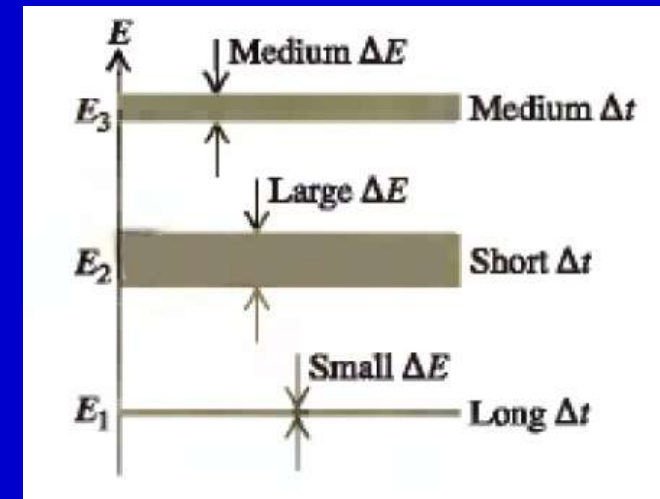
Zasada nieoznaczoności dla energii i czasu

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

Zasada ta wiąże ze sobą np. nieoznaczoność energii cząstki z czasem przez jaki cząstka w tym stanie się znajduje. Wynika z niej ograniczona dokładność pomiaru energii gdy czas trwania pomiaru jest skończony.

Z zasady tej wynika m.in. skończona naturalna szerokość spektralna linii widmowych emitowanego promieniowania (węższa dla światła emitowanego przez laser). Ponieważ czas przebywania przez atom w stanie wzbudzonym jest skończony, to energia tego stanu, jak i energia fotonu będącego nośnikiem promieniowania emitowanego przez atom znajdujący się przed emisją promieniowania w tym stanie oraz sama częstotliwość promieniowania nie jest ściśle określona. Nieoznaczoność energii stanu wzbudzonego jest odwrotnie proporcjonalna do czasu przebywania w stanie wzbudzonym.



Probabilistyczny charakter przewidywań mechaniki kwantowej

Z zasady nieoznaczoności dla położenia i pędu wynika iż nie można określić wszystkich wielkości potrzebnych do deterministycznego wyznaczenia zachowania się cząstki kwantowej w przyszłości (nawet w przypadku gdyby ewolucja ta podlegała prawom klasycznym gdy do wyznaczenia ruchu ciała niezbędna jest znajomość jej położenia i pędu w chwili początkowej).

Mimo iż równanie Schrödingera pozwala opisać w sposób deterministyczny ewolucję funkcji falowej opisującej stan kwantowy cząstki to znajomość tej funkcji nie pozwala na deterministyczne określenie wyników większości pomiarów wielkości fizycznych charakteryzujących według mechaniki klasycznej stan cząstki.

Wyniki pomiarów tych wielkości można dla cząstki kwantowej określić tylko w sposób probabilistyczny.

Ponadto sam pomiar wprowadza pewną "nieprzewidywalność" co do dalszego zachowania się cząstki modyfikując stan kwantowy w którym cząstka się znajduje w sposób zależny od nieprzewidywalnego w sposób deterministyczny wyniku pomiaru.

Wielkość proporcjonalną do gęstości prawdopodobieństwa ρ dla fali danej wzorem

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

określa formuła

$$\rho = |\Psi|^2 = \Psi^* \Psi = A^* e^{-i(kx - \omega t)} A e^{i(kx - \omega t)} = A^* A = |A|^2 = \text{const}$$

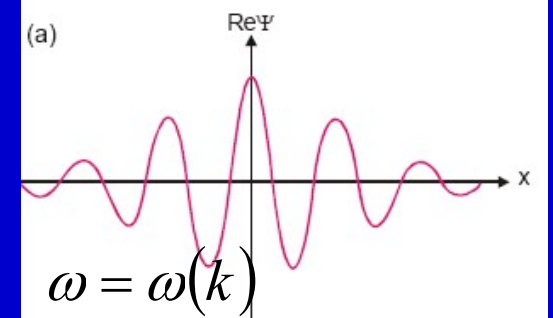
Fali rozważanej nie można unormować tak by $\int_V \rho dV = \int_V |\Psi|^2 dV = 1$

Problem taki pojawia się często wtedy rozważamy ruch cząstki w obszarze nieskończonym i rozwiązujemy go gdy jest to niezbędne np. ograniczając obszar w którym porusza się cząstka i zakładając iż nie modyfikuje to postaci funkcji falowej, lub też wprowadzamy inny sposób normalizacji funkcji falowej.

Dla rozważanej płaskiej fali harmoniczej posiadamy pełną informacje o pędzie cząstki i nie posiadamy żadnej informacji o położeniu cząstki. Zwykle posiadamy częściową informację o pędzie i położeniu cząstki. Do opisu takiej cząstki możemy wykorzystać fale będącą superpozycją - złożeniem wielu fal płaskich o różnych wartościach energii i pędu - paczkę falową, którą możemy unormować. Analiza zachowania cząstki opisywanej przy pomocy paczki falowej jest jednak z punktu matematycznego trudniejsza niż cząstki opisanej falą płaską.

Paczka falowa

$$\Psi(x, t) = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} dk A(k) \exp(i(kx - \omega t))$$



Paczkę falową stanowi superpozycja fal płaskich, taka iż moduł funkcji falowej posiada wyraźne maksimum. Liczby falowe k tych fal mogą np. pochodzić z pewnego skończonego przedziału wokół wartości k_0 lub też można przyjąć iż $\Delta k = \infty$. $A(k)$ dobieramy tak by gęstość prawdopodobieństwa posiadała wyraźne maksimum. W przypadku cząstki opisanej paczką falową posiadamy większą informację o położeniu cząstki, za to maleje wiedza o pędzie (i energii) cząstki. Wielkości te nie są jednoznacznie określone (przejaw zasady nieoznaczoności).

Gdy cząstka porusza się w obszarze stałego potencjału $V=0$ to zakładamy iż pomiędzy energią i pędem cząstki zachodzi klasyczna relacja $E = \frac{p^2}{2m}$ z której wynika poniższa relacja pomiędzy liczbą falową k i częstością kołową ω

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{\frac{p^2}{2m}}{\hbar} = \frac{p^2}{2m\hbar} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

Prędkość fazowa fali zależy od k i dla fali o wektorze

$$\text{falowym } k_0 \text{ jest różna od prędkości cząstki } V_f = \frac{\omega}{k_0} = \frac{E}{\hbar k_0} = \frac{\hbar k_0}{2m} = \frac{p}{2m}$$

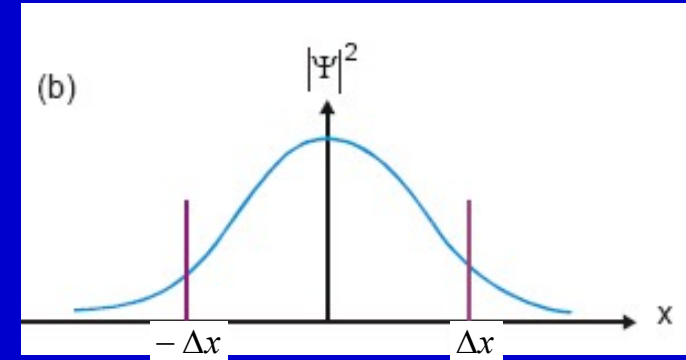
Prędkość przemieszczania się maksimum modułu funkcji falowej zachodzi z prędkością grupową $V_g = \frac{d\omega}{dk}(k = k_0) = \frac{\hbar k_0}{m} = \frac{\langle p \rangle}{m}$ równą klasycznej prędkości

cząstki o pędzie $p = \langle p \rangle = \hbar k_0$

Gaussowska paczka falowa

Dla paczki gaussowskiej gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w przestrzeni i gęstość prawdopodobieństwa dla pomiaru pędu cząstki jest opisana funkcją gaussowską. Warunki te są spełnione gdy unormowaną funkcję falową dla chwili $t=0$ przyjmie się w postaci

$$\Psi(x, t = 0) = \frac{1}{(2\pi(\Delta x)^2)^{1/4}} \exp\left(-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2} + ik_0 x\right)$$



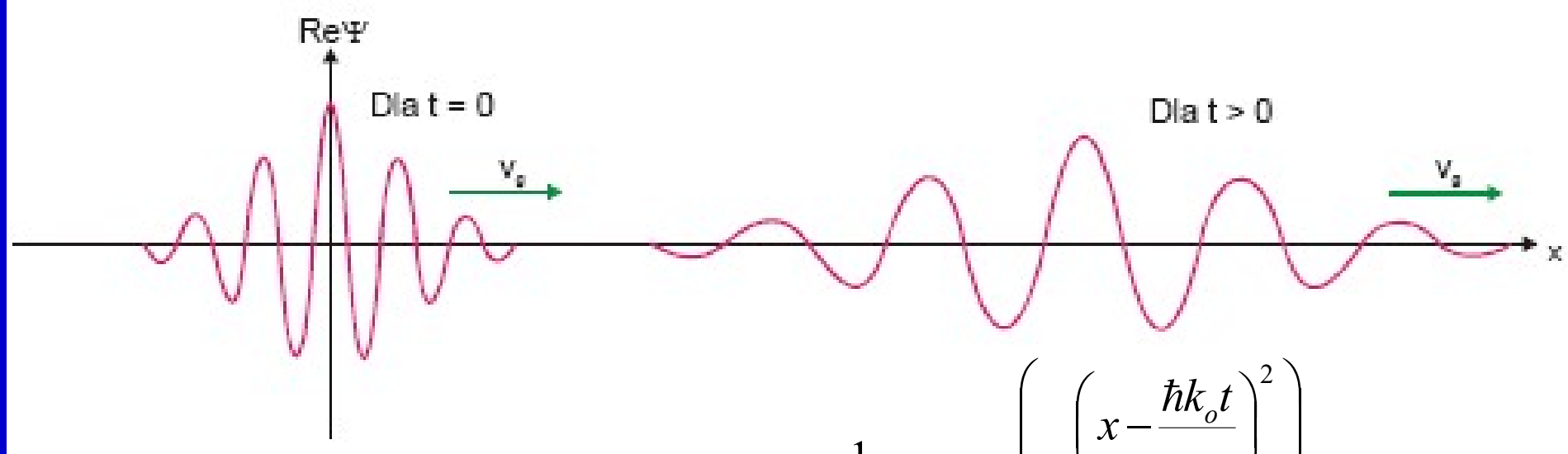
Wówczas

$$\rho(x, t = 0) = |\Psi(x, t = 0)|^2 = \frac{1}{(2\pi(\Delta x)^2)^{1/2}} \exp\left(-\frac{x^2}{2(\Delta x)^2}\right)$$

Funkcję tą unormowano tak by iż gęstość prawdopodobieństwa spełniała warunek

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \rho dx = 1$$

Wartości oczekiwane położenia w chwili czasu $t=0$ i pędu takiej cząstki są równe $\langle x \rangle = 0$ oraz $\langle p \rangle = \hbar k_0$. Wartości oczekiwane są średnimi wynikami pomiarów przeprowadzonych na wielu identycznych cząstkach kwantowych. Można pokazać iż nieoznaczoności pomiaru położenia i pędu cząstki opisanej powyższą funkcją są równe $\Delta x = \Delta x$ oraz $\Delta p_x = \frac{\hbar}{2\Delta x}$ odpowiednio czyli $\Delta x \cdot \Delta p_x = \frac{\hbar}{2}$



Po czasie t

$$\rho(x,t) = |\Psi(x,t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta x(t)} \exp \left[-\frac{\left(x - \frac{\hbar k_0 t}{m} \right)^2}{2(\Delta x(t))^2} \right]$$

Położenie maksimum funkcji przesuwa się w prawo z prędkością klasycznej cząstki o pędzie $\langle p \rangle = \hbar k_0$ ale szerokość krzywej Gaussa rośnie

z czasem $\Delta x(t) = \Delta x \sqrt{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 (\Delta x)^4}}$ i po czasie $t = \frac{2\sqrt{3}m(\Delta x)^2}{\hbar}$ rośnie 2 razy

(paczka falowa się rozplywana tym szybciej im bardziej paczka była w chwili początkowej zlokalizowana na skutek różnic prędkości fazowych fal tworzących paczkę)

1) Dla $m=1\text{g}$, $\Delta x = 1\text{mm}$ $t \approx 10^{25}\text{s}$ wiek Wszechświata $t \approx 10^{17}\text{s}$)

2) Dla $m=9,1 \cdot 10^{-31}\text{kg}$, $\Delta x = 10^{-10}\text{m}$ $t \approx 10^{-16}\text{s}$ traci sens pojęcie toru

Równanie Schrödingera zależne od czasu

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

$$\Psi = \Psi(\vec{r}, t) \quad \text{-funkcja falowa}$$

$$\Delta = \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

$$V = V(\vec{r}, t) \quad \text{-potencjał}$$

Równanie to określa ewolucję w czasie funkcji falowej wprowadzonej dla opisu cząstki nierelatywistycznej o masie m .

Narzuca ona też warunki na wartości tej funkcji w sąsiednich punktach przestrzeni dla ustalonej chwili czasu.

Jeżeli występujący w równaniu Schrödingera potencjał V nie zależy jawnie od czasu, $V = V(\vec{r})$ to rozwiązanie równania Schrödingera można poszukiwać w postaci:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) f(t)$$

Po wstawieniu do równania Schrödingera otrzymujemy

$$-\frac{\hbar^2}{2m} f(t) \Delta \psi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \psi(\vec{r}) f(t) = i\hbar \psi(\vec{r}) \frac{\partial f(t)}{\partial t}$$

Po podzieleniu równania stronami przez $\psi(\vec{r})f(t)$ otrzymujemy :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta \psi(\vec{r})}{\psi(\vec{r})} + V(\vec{r}) = i\hbar \frac{1}{f(t)} \frac{\partial f(t)}{\partial t}$$

Obie strony powyższego równania zależą od innych zmiennych

Dokonałmy rozdzielenia zmiennych. Równanie powyższe jest spełnione wówczas gdy obie jego strony są równe stałej, która jak zobaczymy dalej jest równa energii cząstki.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta \psi(\vec{r})}{\psi(\vec{r})} + V(\vec{r}) = i\hbar \frac{1}{f(t)} \frac{\partial f(t)}{\partial t} = \text{const} = E$$

A zatem

$$i\hbar \frac{\partial f(t)}{\partial t} = E f(t)$$

$$i\hbar \frac{df(t)}{dt} = E f(t)$$

$$\frac{df}{f} = -\frac{iE}{\hbar} dt$$

$$\ln f = -\frac{iE}{\hbar} t + \ln(\text{const})$$

Część zależna
od czasu
funkcji falowej

$$f(t) = \text{const} \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)$$

Porównanie z funkcją falową opisującą cząstkę poruszającą się w obszarze $V=0$ w kierunku wyznaczonym przez zwrot osi OX

$$\Psi = A e^{i(kx - \omega t)} = A e^{i(kx - Et/\hbar)} = A e^{ikx} e^{-iEt/\hbar}$$

uzasadnia oznaczenie $\text{const}=E$

Część zależna od zmiennych przestrzennych funkcji falowej spełnia tzw. **równanie Schrödingera niezależne od czasu**

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta \psi(\vec{r})}{\psi(\vec{r})} + V(\vec{r}) = E$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

W przestrzeni jednowymiarowej

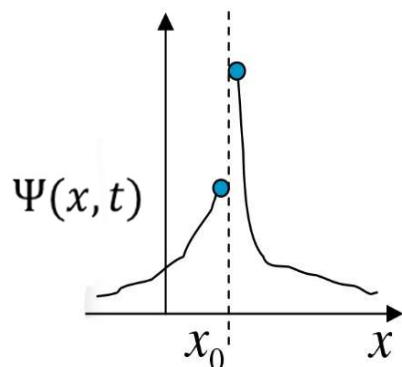
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x) \psi(x) = E \psi(x)$$

Dodatkowe warunki nałożone na funkcje falową

Funkcja opisująca cząstkę kwantową musi być **skończona, jednoznaczna i ciągła** w całym obszarze. W przypadku gdy potencjał nie zmienia się o wielkość nieskończoną to również pierwsze pochodne tej funkcji po zmiennych przestrzennych muszą być funkcjami ciągłymi, co wynika z powyższego równania. Warunki te wprowadzają dodatkowe ograniczenia na postać funkcji falowej i mogą prowadzić do ograniczenia możliwych wartości energii cząstki do wartości dyskretnych gdy ruch cząstki jest ograniczony w przestrzeni.

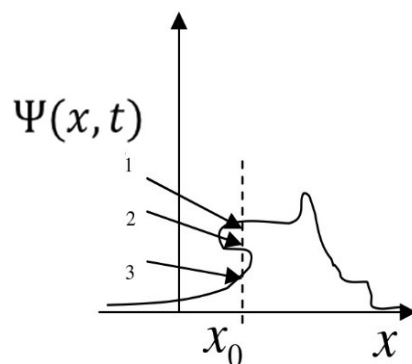
Niedozwolona funkcja falowa

- funkcja nieciągła



Prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w okolicy x_0 zależy od kierunku, z którego się zbliżamy - błąd

- funkcja niejednoznaczna



Gęstość prawdopodobieństwa w x_0 nie jest jednoznaczna a powinna być

- funkcja osiągająca wartość nieskończona dla skończonego przedziału (x_0, x_0+dx) Prawdopodobieństwo znalezienia cząstki

- w tym przedziale nieskończone $\int_{x_0}^{x_0+dx} |\Psi(x, t)|^2 dx = \infty$

Często do warunków, które musi spełniać funkcja falowa dodajemy warunek unormowania $\int_V |\Psi|^2 dV = 1$

Tym niemniej funkcjami niespełniającymi tego warunku posługujemy się gdy analizujemy sytuacje w której ruch cząstki nie jest w ogóle ograniczony w przestrzeni i/lub chcemy zanalizować sytuacje w której cząstka ta ma niektóre wielkości (np. pęd) ściśle określone (co stanowi idealizacje). Posługujemy się też nimi do przedstawienia unormowanej funkcji falowej jako ich kombinacji w celu określenia prawdopodobieństwa uzyskania konkretnych wartości tych wielkości w pomiarze.

Stan stacjonarny

Pokazaliśmy iż rozwiązanie równania Schrödingera zależnego od czasu

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

z potencjałem nie zależnym jawnie od czasu $V = V(\vec{r})$ można zapisać w postaci

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) \exp\left(-i \frac{Et}{\hbar}\right)$$

gdzie $\psi(\vec{r})$ spełnia równanie niezależne od czasu

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

W takim stanie zwanym stanem stacjonarnym energia jest ustalona $E = \text{const}$ oraz gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w przestrzeni nie zależy od czasu

$$\rho = |\Psi_n(\vec{r}, t)|^2 = \psi^*(\vec{r}) \exp\left(i \frac{Et}{\hbar}\right) \psi(\vec{r}) \exp\left(-i \frac{Et}{\hbar}\right) = |\psi(\vec{r})|^2$$

Ogólne rozwiązanie równania Schrödingera zależnego od czasu gdy potencjał od czasu nie zależy

Rozwiązanie ogólne może być liniową kombinacją (superpozycją) rozwiązań znalezionych poprzednio odpowiadających dozwolonym energiom $E=E_n$

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_n \psi_n(\vec{r}) \exp\left(-i \frac{E_n t}{\hbar}\right) = \sum_n \psi_n(\vec{r}) \exp(-i \omega_n t)$$

gdzie $\omega_n = \frac{E_n}{\hbar}$

$\psi_n(\vec{r})$ spełnia równanie Schrödingera niezależne od czasu z energią E_n

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi_n(\vec{r}) + V(\vec{r}) \psi_n(\vec{r}) = E_n \psi_n(\vec{r})$$

Gdy brak jest ograniczenia na dozwolone energie cząstki w ogólnym rozwiązaniu suma po liczbie n indeksującej rozwiązanie równania niezależnego od czasu przechodzi w całkę po energii lub wielkości zależnej jednoznacznie od energii. Z sytuacją taką mamy do czynienia w przypadku paczki falowej gdzie funkcja wyraża się jako całkę po liczbie falowej k .

W przypadku stanu o nieustalonej energii opisanego za pomocą sumy lub całki gęstość znalezienia cząstki w przestrzeni zależy od czasu

Przykładowe pytania opisowe

1)

- a) Sformułować zasadę nieoznaczoności Heisenberga dla położenia i pędu oraz energii i czasu. Podać przykłady wskazujące na zgodność opisu obiektów lub zjawisk kwantowych z zasadą Heisenberga
- b) Rozważyć cząstkę swobodną o masie m i energii E opisaną poniższą funkcją falową

$$\Psi(x, t) = A \exp(ikx - i\omega t) \text{ gdzie } \omega = \frac{E}{\hbar}, k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Co można powiedzieć o pędzie tej cząstki? Czemu równa jest nieoznaczoność pomiaru pędu dla tej cząstki? Czy można wyróżnić punkty w przestrzeni w których występuje podwyższona gęstość prawdopodobieństwa znalezienia tej cząstki? Jaka musi być nieoznaczoność położenia tej cząstki ażeby była spełniona zasada nieoznaczoności?

- 2) Czym jest paczka falowa? Z jaką wielkością opisującą paczkę falową można powiązać prędkość poruszania się w obszarze stałego potencjału cząstki opisywanej taką paczką? Dlaczego paczka taka z upływem czasu się rozplywa w trakcie jej propagacji i jakie może mieć to implikacje przy opisywaniu ruchu cząstki przy wykorzystaniu paczki falowej? Jaki wpływ na szybkość rozplywania się paczki gausowskiej ma jej szerokość?
- 3) Sformułować w ogólnej postaci równanie Schrödingera zależne i niezależne od czasu. Wyjaśnić znaczenie wszystkich symboli pojawiających się w tych równaniach.
- 4) Jaki stan kwantowy nazywamy stacjonarnym? Co można powiedzieć o gęstości prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w określonym punkcie przestrzeni w tym stanie? Jaka wielkość opisująca stan cząstki jest zawsze jednoznacznie określona w tym stanie.

Przykładowe pytania testowe

1) Które z poniższych równań jest równaniem Schrödingera zależnym od czasu

a) $i\hbar \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right] \Psi$

b) $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right] \Psi$

c) $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = [\nabla + V] \Psi$

d) $i\hbar \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla + V \right] \Psi ?$

(gdzie $\Delta = \nabla^2$). Zaznaczyć poprawną odpowiedź

2) Wiemy iż cząstka poruszająca się w przestrzeni jednowymiarowej opisana jest zespoloną funkcją falową $\Psi(x, t)$. Jak można określić dla chwili czasu t gęstość prawdopodobieństwa znalezienia tej cząstki w punkcie o współrzędnej x ?

a) $\rho = \Psi^2$

b) $\rho = \Psi^* \Psi$

c) $\rho = |\Psi|^2$

d) $\rho = |\Psi|$

e) $\rho = |\Psi|^2 x$

(Ψ^* oznacza funkcję sprzężoną w sposób zespolony do funkcji Ψ)

Zaznaczyć wszystkie poprawne odpowiedzi.

Jaki warunek musi spełniać funkcja falowa aby opisywana wybranymi wzorami wielkość naprawdę reprezentowała gęstość prawdopodobieństwa

a) $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi| dx = 1$

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

c) $|\Psi| < 1$

d) funkcja falowa musi przyjmować wartości rzeczywiste

Zaznaczyć właściwą odpowiedź.

- 3) Zasada nieoznaczoności Heisenberga wprowadza ograniczenie na możliwość jednoczesnego dokładnego pomiaru
- a) tych samych składowych wektorów wodzącego i pędu cząstki
 - b) różnych składowych wektorów wodzącego i pędu cząstki
 - c) różnych składowych wektora wodzącego cząstki
 - d) różnych składowych wektora pędu cząstki
 - e) energii cząstki podczas pomiaru trwającego skończony czas

Zaznaczyć wszystkie poprawne stwierdzenia.

Czy można wyznaczyć dokładnie tor cząstki kwantowej?

4) Które z poniższych twierdzeń dotyczących paczki falowej są prawdziwe?

- a) Cząstka opisana paczką falową ma ściśle określone położenie.
- b) Cząstka opisana paczką falową ma ściśle określony pęd.
- c) Nie można jednocześnie określić dokładnie pędu i położenia cząstki opisanego paczką falową.
- d) W czasie ewolucji paczki falowej opisującej cząstkę swobodną maleje dokładność z jaką możemy przewidzieć wynik pomiaru położenia tej cząstki.
- e) Paczka falowa porusza się z prędkością grupowa równą prędkości klasycznej cząstki, z która można związać ta paczkę.
- f) Paczka falowa porusza się z prędkością fazową równą prędkości klasycznej cząstki, z która można związać ta paczkę.

5) Rozważamy funkcję falową opisującą cząstkę kwantową poruszającą się w obszarze potencjału przyjmującego we wszystkich punktach przestrzeni skończone wartości. Które z podanych niżej twierdzeń dotyczących własności tej funkcji są twierdzeniami prawdziwymi?

- a) Wartości tej funkcji muszą być liczbami rzeczywistymi.
- b) Funkcja ta nie może osiągać wartości nieskończonych.
- c) Funkcja ta musi być funkcją ciągłą swoich argumentów przestrzennych.
- d) Funkcja ta musi być funkcją jednoznaczną.
- e) Funkcja ta w żadnym punkcie przestrzeni nie może przyjmować wartości równej zero.
- f) Pierwsza pochodna tej funkcji po każdej ze zmiennych przestrzennych musi być funkcją ciągłą.

6) Znamy rozwiązanie równania Schrödingera niezależnego od czasu

$$-\frac{\hbar}{2m}\Delta\psi_n(\vec{r})+V(\vec{r})\psi_n(\vec{r})=E_n\psi_n(\vec{r})$$

Które z poniższych stwierdzeń dotyczących właściwości stanu stacjonarnego w jakim znajduje się cząstka kwantowa są stwierdzeniami prawdziwymi?

- a) w stanie stacjonarnym funkcja falowa opisująca cząstkę kwantową nie zależy od czasu
- b) w stanie stacjonarnym gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w przestrzeni nie zależy od czasu
- c) w stanie stacjonarnym znana jest energia cząstki
- d) w stanie stacjonarnym znane jest położenie cząstki
- e) w stanie stacjonarnym funkcja falowa opisująca cząstkę stanowi superpozycję co najmniej dwóch funkcji będących rozwiązaniem równania Schrödingera niezależnego od czasu o różnych energiach
- f) w stanie stacjonarnym funkcje falową opisującą cząstkę kwantową można

wyrazić wzorem $\psi(\vec{r},t)=\psi_n(\vec{r})\exp\left(-\frac{iE_nt}{\hbar}\right)$

- g) w stanie stacjonarnym funkcje falową opisującą cząstkę kwantową można wyrazić wzorem $\psi(\vec{r},t)=\psi_n(\vec{r})\exp\left(-\frac{E_nt}{\hbar}\right)$

- h) w stanie stacjonarnym funkcje falową opisującą cząstkę kwantową można wyrazić wzorem $\psi(\vec{r},t)=\sum_n c_n(t)\psi_n(\vec{r})\exp\left(-\frac{iE_nt}{\hbar}\right)$ w którym co najmniej dwa współczynniki c_n są różne od zera