Wybrane zagadnienia formalizmu matematycznego mechaniki kwantowej

Funkcja stanu (funkcja falowa)

Stan układu kwantowego może być określony poprzez podanie funkcji stanu (funkcji falowej) opisującej ten układ. Argumentami tej funkcji mogą być współrzędne przestrzenne $\vec{r}_i$ (określające położenie) i spinowe s_i określające rzut spinu na wyróżniony kierunek) cząstek wchodzących w skład badanego układu. Przy pominięciu w zapisie zależności funkcji stanu od zmiennych spinowych funkcję tą w przypadku układu złożonego z pojedynczej cząstki można zapisać w postaci $\Psi(\vec{r},t)$. Funkcja ta musi być ciągła (wraz z pierwszą pochodną po zmiennych przestrzennych gdy potencjał nie doznaje nieskończonego skoku), jednoznaczna oraz skończona. Funkcje ta normujemy z dokładnością do stałej o module 1 tak by

$$\int_{R^3} \left|\Psi(\vec{r},t)\right|^2 d^3r = 1.$$

Ewolucje w czasie funkcji stanu układu złożonego z pojedynczej cząstki o masie *m* opisuje równanie Schrödingera zależne od czasu $i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + V(\vec{r},t)\Psi$

gdzie $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$, $V(\vec{r},t)$ -potencjał (energia potencjalna)

W czasie pomiaru wielkości fizycznych opisujących stan układu kwantowego (oddziaływania układu kwantowego z układem klasycznym) zwykle następuje nieciągła zmiana funkcji stanu układu zależna od uzyskanego wyniku pomiaru .

Operator

Każdej wielkości fizycznej, która można mierzyć (obserwabli) przyporządkowujemy liniowy operator hermitowski, stanowiący odwzorowanie określające sposób przekształcania funkcji należących do przestrzeni w której określamy funkcje stanów układu kwantowego. (Fakt iż dana wielkość jest operatorem zaznaczamy umieszczając daszek nad symbolem tej wielkości. $\hat{A}$ -operator związany z wielkością fizyczną A)

Operator $\hat{A}$ jest liniowy jeżeli jego działanie na dowolną kombinację funkcji ψ_1, ψ_2 z rozpatrywanej przestrzeni daną wzorem $\psi = \lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2$ (λ_1, λ_2 -stałe dowolne)

można wyrazić wzorem $$\hat{A}\psi = \lambda_1\hat{A}\psi_1 + \lambda_2\hat{A}\psi_2$$

Operator jest hermitowski jeżeli dla dowolnych funkcji ψ_1, ψ_2 zależnych od współrzędnych przestrzennych należących do rozpatrywanej

przestrzeni spełniona jest relacja: $$\boxed{\int_{R^3}\psi_2^*\hat{A}\psi_1 d^3r = \left(\int_{R^3}\psi_1^*\hat{A}\psi_2 d^3r\right)^*}$$

Operator działa zawsze na funkcje stojącą na prawo od operatora. Gdy brak jest nawiasów zmieniających kolejność działań to najpierw wykonujemy działania stojące bardziej na prawo.

W ogólnym przypadku mnożenie operatorów **nie** jest przemienne czyli $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$

Operator położenia

Operator położenia ma postać $\hat{\vec{r}} = \hat{x}\vec{i} + \hat{y}\vec{j} + \hat{z}\vec{k} = \vec{r} = x\vec{i} + y\vec{j} + z\vec{k}$

A zatem działanie jego składowych w układzie kartezjańskim na dowolną funkcję zależną od współrzędnych przestrzennych sprowadza się do wykonania mnożenia

$$\hat{x}\psi(\vec{r}) = x\psi(\vec{r}) \qquad \hat{y}\psi(\vec{r}) = y\psi(\vec{r}) \qquad \hat{z}\psi(\vec{r}) = z\psi(\vec{r})$$

W przestrzeni jednowymiarowej operator ten ma tylko jedną składową

$$\hat{r} = \hat{x} = x \qquad \hat{x}\psi(x) = x\psi(x)$$

Operator ten jest operatorem hermitowskim

Operator pędu

Operator pędu ma postać

$$\hat{\vec{p}} = \hat{p}_x \vec{i} + \hat{p}_y \vec{j} + \hat{p}_z \vec{k} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \vec{i} - i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \vec{j} - i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \vec{k}$$

A zatem działanie jego składowych w układzie kartezjańskim na dowolną funkcję zależną od współrzędnych przestrzennych można opisać wzorem

$$\hat{p}_x \psi(\vec{r}) = -i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r})}{\partial x} \qquad \hat{p}_y \psi(\vec{r}) = -i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r})}{\partial y} \qquad \hat{p}_z \psi(\vec{r}) = -i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r})}{\partial z}$$

W przestrzeni jednowymiarowej operator ten ma tylko jedną składową

$$\hat{p} = \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \qquad \hat{p}_x \psi(x) = -i\hbar \frac{\partial \psi(x)}{\partial x}$$

Operator ten jest zawsze hermitowski w działaniu na funkcje

spełniające relacje $\lim\limits_{x \to \pm\infty} \psi(x,y,z) = \lim\limits_{y \to \pm\infty} \psi(x,y,z) = \lim\limits_{z \to \pm\infty} \psi(x,y,z) = 0$

Równanie własne dla operatorów

wartość własna a_n

$$\boxed{\hat{A}\,\psi_{ni} = a_n \psi_{ni}}$$

Funkcja własna odpowiadająca (należąca do) wartości własnej a_n

W wyniku działania operatora na funkcję własną otrzymujemy tą samą funkcje własną mnożoną przez stałą będącą wartością własną.

Układ kwantowy opisany przez funkcję własną operatora znajduje się w stanie własnym tego operatora.

Funkcje własne operatora muszą spełniać odpowiednie warunki nakładane na funkcje falowe (muszą być skończone, jednoznaczne i ciągłe zwykle wraz z pierwszą pochodną po zmiennych przestrzennych), co może skutkować nałożeniem dodatkowego warunku na dozwolone wartości własne. Zbiór wartości własnych operatora (widmo wartości własnych) może być zbiorem dyskretnym jak i ciągłym.

Wartości własne operatora hermitowskiego są zawsze rzeczywiste (informacje dodatkowe o funkcjach własnych operatora hermitowskiego w dodatku 1)

Rozważmy funkcję $\psi = A\sin(kx)$

1) Czy jest ona funkcją własną operatora pędu $\hat{p}_x = -i\hbar\dfrac{d}{dx}$?

W celu sprawdzenia działamy na nią operatorem pędu

$$\hat{p}_x\psi = -i\hbar\frac{dA\sin(kx)}{dx} = -i\hbar kA\cos(kx) \neq const\cdot\psi$$

Nie jest to funkcja własna operatora pędu

2) Czy jest ona funkcją własną operatora $\hat{H}_0 = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2}$?

W celu sprawdzenia działamy na tą funkcje tym operatorem

$$\hat{H}_0\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2A\sin(kx)}{dx^2} = \frac{\hbar^2k^2}{2m}A\sin(kx) = \frac{\hbar^2k^2}{2m}\psi$$

Jest ona funkcją własną operatora $\hat{H}_0 = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2}$

odpowiadającą wartości własnej $\dfrac{\hbar^2k^2}{2m}$

Równanie własne dla operatorów, degeneracja

$$\boxed{\hat{A}\psi_{ni} = a_n \psi_{ni}}$$

Do indeksowania funkcji własnych ψ_{ni} należących do tej samej wartości własnej a_n, użyliśmy indeksu i zmieniającego się w zakresie $i=1,\dots\dots,f$

f- krotność degeneracji= liczba liniowo niezależnych funkcji własnych odpowiadających tej samej wartości własnej.

Funkcje ψ oraz $\tilde{\psi}$ powiązane relacją $\tilde{\psi} = C\psi$ (C-stała) są od siebie liniowo zależne. Opisują one układ znajdujący się w tym samym stanie kwantowym . Mogą być one wyznaczone z dokładnością do stałej o module 1 po nałożeniu na funkcję warunku unormowania.

Funkcje są liniowo niezależne, jeżeli znikanie sumy $\sum_i c_{ni}\psi_{ni} = 0$ pociąga za sobą to iż wszystkie współczynniki c_{ni} są równe zeru.

Możliwe wyniku pomiaru w mechanice kwantowej

W wyniku pomiaru wielkości fizycznej reprezentowanej przez operator możemy otrzymać tylko wartości własne tego operatora, przy czym układ po pomiarze znajduje się w stanie opisanym przez funkcję własną (kombinację liniową funkcji własnych) odpowiadającą (odpowiadających) wartości własnej otrzymanej w wyniku pomiaru.
W szczególności jeśli przed pomiarem układ znajdował się w stanie będącym stanem własnym operatora $\hat{A}$ odpowiadającym wartości własnej a_n, to w wyniku pomiaru wielkości reprezentowanej przez ten operator otrzymamy na pewno wartość a_n.
W innym przypadku wynik pomiaru jest nieokreślony i można wyznaczyć tylko prawdopodobieństwa otrzymania różnych wartości własnych w pomiarze (dodatek 2), przy czym po dokonaniu pomiaru układ znajdzie się w stanie opisanym funkcją własną odpowiadająca wartości własnej otrzymanej w wyniku pomiaru.

Operator Hamiltona (hamiltonian) dla pojedynczej cząstki

$$\boxed{\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})}$$

Energia potencjalna cząstki o masie *m*

laplasjan

m-masa cząstki

We współrzędnych kartezjańskich

$$\hat{p}^2 = \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 = \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 + \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right)^2 + \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial z}\right)^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) = -\hbar^2\Delta$$

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

W przestrzeni jednowymiarowej

$$\boxed{\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)}$$

Operator Hamiltona –związek z mechaniką klasyczną

Wielkość określona wzorem

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r})$$

w mechanice klasycznej nosi nazwę funkcji Hamiltona i jest równa energii mechanicznej cząstki (*p*-klasyczny pęd cząstki)

W mechanice kwantowej wartościami własnymi operatora Hamiltona

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})$$

są dozwolone energie układu kwantowego

$$\hat{H}\psi_{ni} = E_n\psi_{ni}$$

Operator Hamiltona a równanie Schrödingera

Widać iż równanie własne dla operatora Hamiltona to równanie Schrödingera niezależne od czasu

$$\hat{H}\psi = E\psi \Leftrightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})\right]\psi = E\psi \qquad \psi = \psi(\vec{r})$$

Równanie Schrödingera zależne od czasu można zapisać wykorzystując operator Hamiltona w postaci

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})\right]\Psi \rightarrow i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi \qquad \Psi = \Psi(\vec{r},t)$$

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

Wartość oczekiwana operatora

Zakładamy iż mamy bardzo dużo układów znajdujących się w jednakowym stanie opisanym unormowaną funkcją falową $\Psi(\vec{r},t)$ (spełniającą warunek $\int_{R^3} |\Psi(r,t)|^2 d^3r = 1$)

Wartość średnia wyników pomiarów wielkości fizycznej reprezentowanej przez operator $\hat{A}$ na tych układach jest równa wartości oczekiwanej operatora $\hat{A}$ i może być określona ze wzoru

$$\boxed{\langle \hat{A} \rangle = \int_{R^3} \Psi^*(\vec{r},t)\hat{A}\Psi(\vec{r},t)d^3r}$$

W przestrzeni jednowymiarowej

$$\boxed{\langle \hat{A} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\hat{A}\Psi(x,t)dx}$$

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

Dla operatora pędu

$$\hat{p} = \hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$$

$$\langle \hat{p} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\hat{p}\Psi(x,t)dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}dx$$

W stanie własnym operatora $\hat{A}$ odpowiadającym wartości własnej a_n wartość oczekiwana tego operatora jest równa wartości własnej a_n, którą otrzymuje się w pomiarze z prawdopodobieństwem równym 1 $P\left(A = a_n\right) = 1$

$$P\left(A = a_m\right) = 0 \quad \text{dla} \quad m \neq n$$

W innych przypadkach jest ona średnią ważoną możliwych wyników pomiarów z wagami określonymi przez prawdopodobieństwa uzyskania tych wyników w pomiarze $\left\langle \hat{A} \right\rangle = \sum_n P(A = a_n) a_n$

Nieoznaczoność pomiaru wielkości fizycznej reprezentowanej przez operator $\hat{A}$ będący miarą rozrzutu wyników pomiaru tej wielkości wokół wartości średniej w stanie opisanym przez unormowaną funkcję falową $\Psi(\vec{r})$

$$\Delta A = \sqrt{\left\langle \hat{A}^2 \right\rangle - \left\langle \hat{A} \right\rangle^2}$$

gdzie

$$\left\langle \hat{A} \right\rangle = \int_{R^3} \Psi^* \hat{A} \Psi d^3 r$$

$$\left\langle \hat{A}^2 \right\rangle = \int_{R^3} \Psi^* \hat{A}^2 \Psi d^3 r$$

W stanie opisanym funkcją własną operatora $\hat{A}$ spełniającą równanie własne $\hat{A}\psi(\vec{r}) = a\psi(\vec{r})$ mamy ΔA=0 gdyż

$$\left\langle \hat{A}^2 \right\rangle = \int_{R^3} \psi^* \hat{A}^2 \psi d^3 r = \int_{R^3} \psi^* \hat{A} a \psi d^3 r = a \int_{R^3} \psi^* \hat{A} \psi d^3 r = a^2 \int_{R^3} \psi^* \psi d^3 r = a^2$$

$$\left\langle \hat{A} \right\rangle = \int_{R^3} \psi^* \hat{A} \psi d^3 r = \int_{R^3} \psi^* a \psi d^3 r = a \int_{R^3} \psi^* \psi d^3 r = a$$

Obliczenia nieoznaczoności położenia i pędu dla paczki gausowskiej w dodatku 3

Komutator dwóch operatorów

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

Gdy $\left[\hat{A},\hat{B}\right]=0$ to mówimy że operatory $\hat{A},\hat{B}$ komutują ze sobą

Komutator a jednoczesny pomiar dwóch wielkości fizycznych

Możemy dokonać jednoczesnego pomiaru wielkości fizycznych reprezentowanych przez te operatory $\hat{A},\hat{B}$ gdy operatory te komutują czyli $\left[\hat{A},\hat{B}\right]=0$, gdyż wówczas operatory te maja wspólny układ funkcji własnych (dla każdej wartości własnej jednego operatora można znaleźć funkcje własną będącą jednocześnie funkcją własną innych operatorów odpowiadających wielkościom fizycznym które można jednocześnie zmierzyć)

Przykład wyznaczenia komutatora

Z definicji $\left[\hat{x},\hat{p}_x\right]=\hat{x}\hat{p}_x-\hat{p}_x\hat{x}$

Powyższy komutator możemy zapisać w postaci

$$\left[\hat{x},\hat{p}_x\right]=x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}x$$

Działając powyższym operatorem na dowolną funkcję zależną od współrzędnych przestrzennych i czasu otrzymujemy

$$\left[\hat{x},\hat{p}_x\right]\Psi(x,y,z,t)=x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x,y,z,t)-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\left(x\Psi(x,y,z,t)\right)=$$

$$=\frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x,y,z,t)-\Psi(x,y,z,t)-x\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x,y,z,t)\right)=$$

$$=-\frac{\hbar}{i}\Psi(x,y,z,t)=i\hbar\Psi(x,y,z,t)$$

Wynika stąd iż $\left[\hat{x},\hat{p}_x\right]=i\hbar$

Podobnie można pokazać iż $\left[\hat{y},\hat{p}_y\right]=\left[\hat{z},\hat{p}_z\right]=i\hbar$

Przykład wyznaczenia komutatora

Z definicji $\left[\hat{x},\hat{p}_y\right]=\hat{x}\hat{p}_y-\hat{p}_y\hat{x}$

Powyższy komutator możemy zapisać w postaci

$$\left[\hat{x},\hat{p}_y\right]=x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}x$$

Działając powyższym operatorem na dowolną funkcję zależną od współrzędnych przestrzennych i czasu otrzymujemy

$$\left[\hat{x},\hat{p}_y\right]\Psi(x,y,z,t)=x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}\Psi(x,y,z,t)-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}\left(x\Psi(x,y,z,t)\right)=$$

$$=\frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y}\Psi(x,y,z,t)-x\frac{\partial}{\partial y}\Psi(x,y,z,t)\right)=0$$

Wynika stąd iż $\left[\hat{x},\hat{p}_y\right]=0$

Wybrane ważne komutatory

$$\left[\hat{x}_j,\hat{p}_k\right]=i\hbar\delta_{jk}=\begin{cases} i\hbar & gdy \quad j=k \\ 0 & gdy \quad j\neq k \end{cases}$$

$$\hat{x}_1=\hat{x},\hat{x}_2=\hat{y},\hat{x}_3=\hat{z}$$

$$\hat{p}_1=\hat{p}_x,\hat{p}_2=\hat{p}_y,\hat{p}_3=\hat{p}_z$$

$$\left[\hat{x}_j,\hat{x}_k\right]=0 \qquad \left[\hat{p}_j,\hat{p}_k\right]=0$$

Wniosek z obliczeń: Nie jest możliwy jednoczesny dokładny pomiar tej samej składowej pędu i położenia cząstki. Pomiar taki jest możliwy dla różnych składowych zarówno położenia jak i pędu.

Własności komutatora

$$\left[\hat{A},\hat{B}+\hat{C}\right]=\left[\hat{A},\hat{B}\right]+\left[\hat{A},\hat{C}\right]$$

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

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

$$\left[\hat{A}\hat{B},\hat{C}\right]=\hat{A}\left[\hat{B},\hat{C}\right]+\left[\hat{A},\hat{C}\right]\hat{B}$$

Przykładowe pytania opisowe

1) Jaką funkcję nazywamy funkcją własną operatora? Czym jest odpowiadająca tej funkcji wartość własna operatora? Jaki jest związek wartości własnych i funkcji własnych z pomiarami w mechanice kwantowej? Co oznacza to iż wartość własna jest zdegenerowana
2) Jak można określić wartość oczekiwana operatora? Jaki jest związek wartości oczekiwanej z wynikami pomiaru w mechanice kwantowej?
3) Zdefiniować komutator dwóch operatorów. Jaką wartość musi on przyjmować aby można było dokonać jednoczesnego pomiaru wielkości fizycznych reprezentowanych przez te operatory? Podać przykłady par wielkości, których w mechanice kwantowej nie można wyznaczyć jednocześnie z dowolną dokładnością oraz przykłady par wielkości, które można jednocześnie wyznaczyć.

Przykładowe pytania testowe

1) Czy wartości własne operatora Hamiltona $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V$ dla cząstki kwantowej są
   a) dozwolonymi wartościami energii jakie może posiadać cząstka kwantowa
   b) dozwolonymi wartościami pędu jakie może posiadać cząstka kwantowa
   c) dozwolonymi wartościami momentu pędu jakie może posiadać cząstka kwantowa
   d) możliwymi wynikami pomiaru położenia cząstki?

   Zaznaczyć poprawną odpowiedź.

2) Które z poniższych równań jest równoważne równaniu Schrödingera niezależnemu od czasu? **Zaznaczyć właściwe równanie spośród podanych poniżej.**

   a) $\hat{L}^2\psi = L^2\psi$

   b) $\hat{H}\psi = 0$

   c) $\frac{1}{2m}\hat{p}^2\psi = 0$

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

   gdzie $\hat{H}$ –operator Hamiltona, $\hat{p}^2$ - operator kwadratu pędu, $\hat{L}^2$ -operator kwadratu momentu pędu, *m*-masa cząstki, *E*- energia cząstki

3) Które z poniższych równań jest równoważne równaniu Schrödingera zależnemu od czasu? **Zaznaczyć właściwe równanie spośród podanych poniżej.**

   a) $\hat{H}\Psi = \hbar\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2}$

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

   c) $\hat{p}^2\psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$

   d) $\hat{L}^2\Psi = \hbar^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2}$

   gdzie $\hat{H}$ –operator Hamiltona, $\hat{p}^2$ - operator kwadratu pędu, $\hat{L}^2$ -operator kwadratu momentu pędu

4) **Zaznaczyć wszystkie poprawne stwierdzenia spośród podanych poniżej.**

a) Istnieje możliwość jednoczesnego dokładnego wyznaczenia wartości wielkości fizycznych, którym odpowiadają operatory $\hat{A}$ i $\hat{B}$, gdy komutator tych operatorów jest różny od zera.

b) Istnieje możliwość jednoczesnego dokładnego wyznaczenia wartości wielkości fizycznych, którym odpowiadają operatory $\hat{A}$ i $\hat{B}$, gdy operatory te maja wspólny układ funkcji własnych.

c) Operatory $\hat{A}$ i $\hat{B}$ maja wspólny układ funkcji własnych gdy komutator tych operatorów jest równy zeru.

d) Istnieje możliwość dokładnego jednoczesnego określenia pędu i położenia cząstki kwantowej.

Dodatki dla zainteresowanych

Dodatek 1 Wartości własne i funkcje własne operatora hermitowskiego

1) Wartości własne operatora hermitowskiego są rzeczywiste .
2) Funkcje własne operatora hermitowskiego należące do różnych wartości własnych są ortogonalne tzn. gdy

$$\hat{A}\psi_n(\vec{r}) = a_n\psi_n(\vec{r}) \qquad \hat{A}\psi_m(\vec{r}) = a_m\psi_m(\vec{r}) \qquad a_m \neq a_n$$

to zachodzi relacja $$\int_{R^3} \psi_m^*(\vec{r})\psi_n(\vec{r})d^3r = 0$$

3) Funkcje ortogonalne unormowane tak iż $\int_{R^3} \psi_n^*(\vec{r})\psi_n(\vec{r})d^3r = 1$

spełniają warunek ortonormalności

$$\int_{R^3} \psi_m^*(\vec{r})\psi_n(\vec{r})d^3r = \delta_{m,n} = \begin{cases} 1 & gdy \quad n = m \\ 0 & gdy \quad n \neq m \end{cases}$$

$\delta_{m,n}$ -delta Kroneckera

4) Funkcje własne należące do tej samej wartości własnej w ogólności nie muszą być ortogonalne. Gdy jednak występuje *f*-krotna degeneracja czyli istnieje *f* niezależnych liniowo funkcji własnych odpowiadających tej samej wartości własnej to zawsze można utworzyć z nich *f* liniowo niezależnych funkcji własnych należących do tej wartości własnej wzajemnie do siebie ortogonalnych. Wynika z tego iż dla każdego operatora hermitowskiego można znaleźć zbiór funkcji własnych spełniających warunek ortogonalności (lub ortonormalności po ich unormowaniu)

Dodatek 2. Prawdopodobieństwo uzyskania różnych wartości w pomiarze wielkości fizycznej

Jeżeli układ znajduje się w stanie opisanym unormowaną funkcją falową $\Psi(\vec{r},t)$ (spełniającą warunek $\int_{R^3} |\Psi(\vec{r},t)|^2 d^3r = 1$)

to prawdopodobieństwo uzyskania wartości a_n w pomiarze wielkości reprezentowanej przez operator $\hat{A}$

jest równe $\boxed{P(A = a_n) = \sum_{i=1}^{f} |c_{n,i}(t)|^2}$ gdzie

$$c_{n,i}(t) = \int_{R^3} \psi^*_{ni}(\vec{r}) \Psi(\vec{r},t) d^3r$$

$$\hat{A}\psi_{ni} = a_n \psi_{ni}$$

ψ_{ni} -zbiór funkcji własnych tworzących układ funkcji ortonormalnych (dodatek 1)

Wiadomo też iż $\Psi(\vec{r},t) = \sum_{n',i'} c_{n',i'}(t) \psi_{n'i'}(\vec{r})$ (suma po wszystkich funkcjach własnych)

Można pokazać iż $\sum_n P(A = a_n) = 1$ gdy $\int_{R^3} |\Psi(\vec{r},t)|^2 d^3r = 1$

Gdy widmo wartości własnych operatora $\hat{A}$ nie jest zdegenerowane to

$$\boxed{P(A = a_n) = |c_n(t)|^2}$$

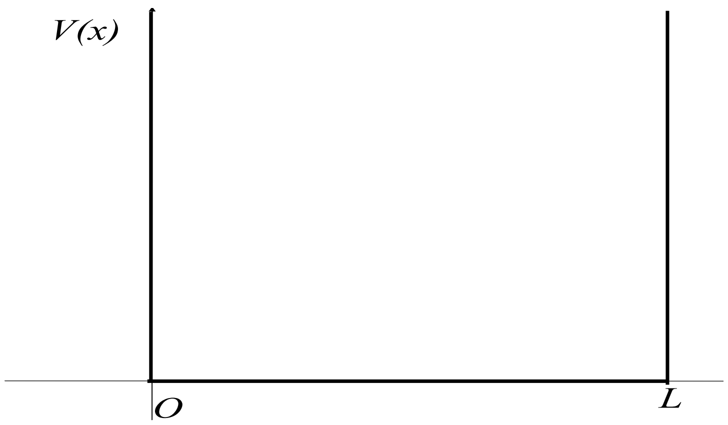
$$\boxed{c_n(t) = \int_{R^3} \psi^*_n(\vec{r}) \Psi(\vec{r},t) d^3r}$$

$$\hat{A}\psi_n = a_n \psi_n$$

Przykład przewidywania wyników pomiaru energii

Cząstka porusza się w jednowymiarowej studni kwantowej o potencjale:

$$V(x)=\begin{cases}\infty & \\ 0 \quad \text{gdy} & \\ \infty & \end{cases}\begin{cases} x<0 \\ 0<x<L \\ x>L\end{cases}$$



Dla rozważanej w zadaniu studni potencjału

a) wartości własne operatora Hamiltona są równe

$$E_n=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}n^2 \qquad n=1,2,3,4,.....$$

b) funkcje własne operatora Hamiltona

$$\psi_n(x)=\begin{cases}\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) & dla \quad 0\le x\le L \\ 0 \quad dla \quad x<0 & \text{lub} \quad x>L\end{cases} \qquad \text{n=1,2,3,.......}$$

Funkcje te spełniają warunek ortonormalności:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{n'}^{*}(x)\psi_n(x)dx=\delta_{n'n}=\begin{cases}1 & gdy \quad n'=n \\ 0 & gdy \quad n'\neq n\end{cases}$$

Widmo wartości własnych nie jest zdegenerowane. Ponadto ze względu na ograniczenie problemu do jednego wymiaru $\int_{R^3} d^3r \rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} dx$

W wyniku pomiaru energii cząstki można uzyskać potencjalnie tylko wartości równe energiom stanów własnych operatora Hamiltona,

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}n^2 \qquad n=1,2,3,4,.....$$

choć prawdopodobieństwo uzyskania części z nich może być równe zeru.
Zakładamy, iż w chwili czasu t=0 cząstka opisana jest funkcją falową:

$$\Psi(x,t=0)=\psi(x)=\begin{cases} A\left[2\sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)+\sin\left(\frac{3\pi}{L}x\right)\right] & gdy \quad 0\le x\le L \\ 0 \quad gdy \quad x<0 \quad \text{lub} \quad x>L \end{cases}$$

Żeby określić prawdopodobieństwo uzyskania tych wartości w pomiarze energii E_n stosujemy wzór dla przypadku operatora o widmie dyskretnym niezdegenerowanym:

$$P(E=E_n)=|c_n|^2 \tag{1}$$

gdzie c_n jest współczynnikiem stojącym przy $\psi_n(x)$ w przedstawieniu funkcji falowej jako liniowej kombinacji ortonormalnych funkcji własnych operatora Hamiltona

$$\psi(x)=\sum_{n'} c_{n'}\psi_{n'}(x) \tag{2}$$

$$\psi_{n'}(x)=\begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n'\pi}{L}x\right) & dla \quad 0\le x\le L \\ 0 \quad dla \quad x<0 \quad \text{lub} \quad x>L \end{cases}$$

Żeby można było stosować wzór (1) należy unormować funkcję $\psi(x)$ tak by

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \qquad (3)$$

co zapewnia to, iż suma prawdopodobieństw uzyskania wszystkich dozwolonych wartości energii jest równa 1.
W ogólnym przypadku wartość współczynnika c_n można określić ze wzoru

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\psi(x)dx \qquad (4)$$

W zadaniu rozważanym jednakże nie jest niezbędne stosowanie tego wzoru z uwagi na to, iż łatwo jest w omawianym zadaniu zapisać bezpośrednio $\psi(x)$ w postaci wzoru (2).
Łatwo można zauważyć, iż $\psi(x)$ jest kombinacją funkcji $\psi_1(x)$ oraz $\psi_3(x)$ i można ją zapisać w postaci: $\psi(x) = A\sqrt{\frac{L}{2}}\left[2\psi_1(x) + \psi_3(x)\right]$.

$$\psi_{n'}(x) = \left\{ \begin{array}{lll} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n'\pi}{L} x\right) & dla & 0 \le x \le L \\ 0 \quad dla \quad x < 0 & \text{lub} & x > L \end{array} \right\}$$

$$\psi(x) = \left\{ \begin{array}{lll} A\left[2\sin\left(\frac{\pi}{L} x\right) + \sin\left(\frac{3\pi}{L} x\right)\right] & dla & 0 \le x \le L \\ 0 \quad dla \quad x < 0 & \text{lub} & x > L \end{array} \right\}$$

W rozważanym przykładzie warunek normowania przyjmuje postać

$$|A|^2 \frac{L}{2} \int_{-\infty}^{\infty} (2\psi_1 + \psi_3)^* (2\psi_1 + \psi_3) dx = 1 \tag{5}$$

Lewą stronę powyższego równania (5) możemy łatwo obliczyć

$$|A|^2 \frac{L}{2} \int_{-\infty}^{\infty} (2\psi_1 + \psi_3)^* (2\psi_1 + \psi_3) dx = |A|^2 \frac{L}{2} \left[4 \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \psi_1 dx + 2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \psi_3 dx + 2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi_3^* \psi_1 dx + \int_{-\infty}^{\infty} \psi_3^* \psi_3 dx \right].$$

Z ortonormalności unormowanych funkcji własnych rozważanego Hamiltonianu wynika, iż

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \psi_1 dx = 1 \ , \ \int_{-\infty}^{\infty} \psi_3^* \psi_1 dx = 0 \ , \ \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \psi_3 dx = 0 \ , \ \int_{-\infty}^{\infty} \psi_3^* \psi_3 dx = 1$$

Z równania (5) wynika więc warunek: $5|A|^2 \frac{L}{2} = 1$, czyli $|A|^2 = \frac{2}{5L}$ i stałą A można przyjąć np. w postaci $A = \sqrt{\frac{2}{5L}}$.

Unormowana funkcja falowa może być zapisana w postaci:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{5}} [2\psi_1(x) + \psi_3(x)].$$

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{5}}\left[2\psi_1(x) + \psi_3(x)\right].$$

Wynika z powyższego zapisu, iż jedyne niezerowe współczynniki w kombinacji liniowej (2) są w rozważanym przypadku równe $c_1 = \frac{2}{\sqrt{5}}$ oraz $c_3 = \frac{1}{\sqrt{5}}$.

Te same wartości można otrzymać posługując się równaniem (4)

Np. $c_1 = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x)\psi(x)dx = \frac{1}{\sqrt{5}}\left[2\int_{-\infty}^{\infty}\psi_1^*\psi_1 dx + \int_{-\infty}^{\infty}\psi_1^*\psi_3 dx\right] = \frac{2}{\sqrt{5}}$

$$c_2 = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2^*(x)\psi(x)dx = \frac{1}{\sqrt{5}}\left[2\int_{-\infty}^{\infty}\psi_2^*\psi_1 dx + \int_{-\infty}^{\infty}\psi_2^*\psi_3 dx\right] = 0$$

W wyniku pomiaru energii cząstki możemy otrzymać tylko wartości

1) $E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$ z prawdopodobieństwem $P(E = E_1) = |c_1|^2 = \frac{4}{5}$

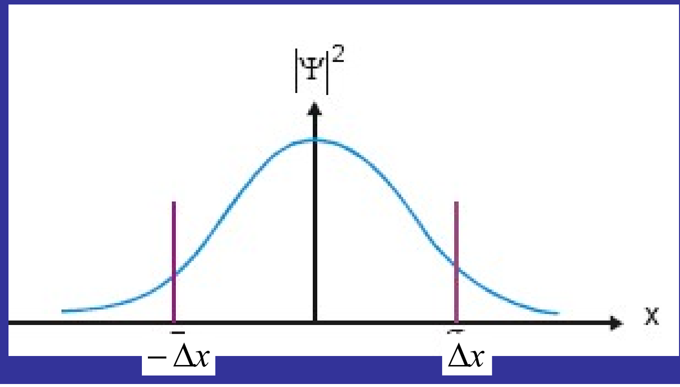
2) $E_3 = 9\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$ z prawdopodobieństwem $P(E = E_3) = |c_3|^2 = \frac{1}{5}$.

Widać, iż suma obu prawdopodobieństw jest równa 1.

Dodatek 3 Nieoznaczoności położenia i pędu cząstki opisanej paczką gaussowską

$$\psi(x)=\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta x}\right)^{1/2}\exp\left(-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2}+ik_0x\right)$$

$$\rho(x)=|\psi(x)|^2=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta x}\exp\left(-\frac{x^2}{2(\Delta x)^2}\right)$$



$$\langle\hat{x}\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^* x\psi dx=\int_{-\infty}^{\infty}x|\psi|^2dx=\int_{-\infty}^{\infty}x\rho(x)dx=0$$

$$\langle\hat{p}_x\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\hat{p}_x\psi dx=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial x}dx=\hbar k_0$$

$$\langle\hat{x}^2\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^* x^2\psi dx=\int_{-\infty}^{\infty}x^2|\psi|^2dx=\int_{-\infty}^{\infty}x^2\rho(x)dx=(\Delta x)^2$$

$$\langle\hat{p}_x^2\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\hat{p}_x^2\psi dx=-\hbar^2\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\frac{d^2\psi}{dx^2}dx=(\hbar k_0)^2+\frac{\hbar^2}{4(\Delta x)^2}$$

$$\Delta x=\sqrt{\langle\hat{x}^2\rangle-\langle\hat{x}\rangle^2}=\Delta x$$

$$\Delta p_x=\sqrt{\langle\hat{p}_x^2\rangle-\langle\hat{p}_x\rangle^2}=\frac{\hbar}{2\Delta x}$$

$$\Delta x\Delta p_x=\frac{\hbar}{2}$$ Minimalna wartość iloczynu zgodna z zasadą nieoznaczoności

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

Obliczenia

$$\psi(x) = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta x}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2} + ik_0 x\right)$$

$$\rho(x) = |\psi(x)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta x} \exp\left(-\frac{x^2}{2(\Delta x)^2}\right)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ax^2)dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x)dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta x} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{x^2}{2(\Delta x)^2}\right)dx = 1$$

Funkcja spełnia warunek normowania

$$\langle \hat{x} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\hat{x}\psi(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} x\rho(x)dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta x} \int_{-\infty}^{\infty} x \exp\left(-\frac{x^2}{2(\Delta x)^2}\right)dx = 0$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp(-ax^2)dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{a^3}}$$

Całka z funkcji nieparzystej

$$\langle \hat{x}^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\hat{x}^2\psi(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} x^2\rho(x)dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta x} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp\left(-\frac{x^2}{2(\Delta x)^2}\right)dx = (\Delta x)^2$$

$$\langle \hat{p} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\hat{p}\psi(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta x}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2} - ik_0 x\right)\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\left(\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta x}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2} + ik_0 x\right)\right)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta x}\frac{\hbar}{i}\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2} - ik_0 x\right)\left(-\frac{x}{2(\Delta x)^2} + ik_0\right)\exp\left(-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2} + ik_0 x\right)dx =$$

$$= -\frac{1}{2\sqrt{2\pi}(\Delta x)^3}\frac{\hbar}{i}\int_{-\infty}^{\infty} x\exp\left(-\frac{x^2}{2(\Delta x)^2}\right)dx + \hbar k_0 \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta x}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{x^2}{2(\Delta x)^2}\right)dx =$$

$$= \hbar k_0 \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta x}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{x^2}{2(\Delta x)^2}\right)dx = \hbar k_0$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ax^2)dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

$$\left\langle \hat{p}^2 \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\hat{p}^2\psi(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta x}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2} - ik_0 x\right)\cdot\left(-\hbar^2\right)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta x}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2} + ik_0 x\right)\right)dx =$$

$$\left\langle \hat{p}^2 \right\rangle = -\frac{\hbar^2}{\sqrt{2\pi}\Delta x}\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2} - ik_0 x\right)\cdot\frac{\partial}{\partial x}\left[\left(-\frac{x}{2(\Delta x)^2} + ik_0\right)\left(\exp\left(-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2} + ik_0 x\right)\right)\right]dx =$$

$$\left\langle \hat{p}^2 \right\rangle = -\frac{\hbar^2}{\sqrt{2\pi}\Delta x}\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2} - ik_0 x\right)\cdot\left(-\frac{1}{2(\Delta x)^2} + \left(-\frac{x}{2(\Delta x)^2} + ik_0\right)^2\right)\exp\left(-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2} + ik_0 x\right)dx =$$

$$\left\langle \hat{p}^2 \right\rangle = \frac{\hbar^2}{\sqrt{2\pi}\Delta x}\frac{1}{2(\Delta x)^2}\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{x^2}{2(\Delta x)^2}\right)dx - \frac{\hbar^2}{\sqrt{2\pi}\Delta x}\frac{1}{4(\Delta x)^4}\int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp\left(-\frac{x^2}{2(\Delta x)^2}\right)dx +$$

$$+\frac{\hbar^2}{\sqrt{2\pi}\Delta x}\frac{ik_0}{(\Delta x)^2}\int_{-\infty}^{\infty} x\exp\left(-\frac{x^2}{2(\Delta x)^2}\right)dx + (\hbar k_0)^2\frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta x}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{x^2}{2(\Delta x)^2}\right)dx =$$

$$\left\langle \hat{p}^2 \right\rangle = \frac{\hbar^2}{2(\Delta x)^2}\int_{-\infty}^{\infty}\rho(x)dx - \frac{\hbar^2}{\sqrt{2\pi}\Delta x}\frac{1}{4(\Delta x)^4}\frac{\sqrt{\pi}\,2\sqrt{2}(\Delta x)^3}{2} + 0 + (\hbar k_0)^2\int_{-\infty}^{\infty}\rho(x)dx =$$

$$= \frac{\hbar^2}{2(\Delta x)^2} - \frac{\hbar^2}{4(\Delta x)^2} + 0 + (\hbar k_0)^2 = \frac{\hbar^2}{4(\Delta x)^2} + (\hbar k_0)^2$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\exp(-ax^2)dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}x^2\exp(-ax^2)dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{a^3}}$$

Wykorzystując fakt iż operator pędu jest operatorem hermitowskim w działaniu na funkcje takie iż $\lim_{x\to\pm\infty}\psi(x)=0$ (do których należy funkcja rozpatrywana w zadaniu) to możemy policzyć także wartość oczekiwaną operatora $\hat{p}^2$ prościej

$$\left\langle \hat{p}^2 \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\hat{p}^2\psi(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty}(\hat{p}\,\psi(x))^*\,\hat{p}\psi(x)dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta x}\int_{-\infty}^{\infty}\left[\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\left(\exp\left(-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2}+ik_0x\right)\right)\right]^*\cdot\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\left(\exp\left(-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2}+ik_0x\right)\right)dx =$$

$$=\frac{\hbar^2}{\sqrt{2\pi}\Delta x}\int_{-\infty}^{\infty}\left(-\frac{x}{2(\Delta x)^2}+ik_0\right)^*\left(\exp\left(-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2}+ik_0x\right)\right)^*\cdot\left(-\frac{x}{2(\Delta x)^2}+ik_0\right)\left(\exp\left(-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2}+ik_0x\right)\right)dx=$$

$$=\frac{\hbar^2}{\sqrt{2\pi}\Delta x}\int_{-\infty}^{\infty}\left(-\frac{x}{2(\Delta x)^2}-ik_0\right)\left(\exp\left(-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2}-ik_0x\right)\right)\cdot\left(-\frac{x}{2(\Delta x)^2}+ik_0\right)\left(\exp\left(-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2}+ik_0x\right)\right)dx=$$

$$=\frac{\hbar^2}{\sqrt{2\pi}\Delta x}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{x^2}{4(\Delta x)^4}+k_0^2\right)\left(\exp\left(-\frac{x^2}{2(\Delta x)^2}\right)\right)dx=$$

$$=\frac{\hbar^2}{\sqrt{2\pi}\Delta x}\frac{1}{4(\Delta x)^4}\int_{-\infty}^{\infty}x^2\exp\left(-\frac{x^2}{2(\Delta x)^2}\right)dx+(\hbar k_0)^2\frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta x}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{x^2}{2(\Delta x)^2}\right)dx=$$

$$=\frac{\hbar^2}{\sqrt{2\pi}\Delta x}\frac{1}{4(\Delta x)^4}\frac{\sqrt{\pi}\,2\sqrt{2}(\Delta x)^3}{2}+(\hbar k_0)^2\int_{-\infty}^{\infty}\rho(x)dx=\frac{\hbar^2}{4(\Delta x)^2}+(\hbar k_0)^2$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\exp(-ax^2)dx=\sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}x^2\exp(-ax^2)dx=\frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{a^3}}$$