

Wybrane zagadnienia formalizmu matematycznego mechaniki kwantowej

- 1) Operatory.
- 2) Równanie własne dla operatorów, związek wartości własnych z wynikami pomiarów i funkcji własnych z opisem stanu układu po pomiarze.
- 3) Probabilistyczne przewidywanie wyników pomiarów wielkości fizycznych, wartość oczekiwana, nieoznaczoność pomiaru wielkości fizycznej, redukcja funkcji falowej w trakcie pomiaru
- 4) Możliwość jednoczesnego wyznaczenia różnych wielkości fizycznych, komutator operatorów.
- 5) Sformułowanie praw mechaniki przy wykorzystaniu wektorów stanu, reprezentacje macierzowe operatorów.

Funkcja stanu (funkcja falowa)

Stan układu kwantowego określa funkcja stanu (funkcja falowa), której argumentami 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 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.

Funkcję tę normujemy z dokładnością do stałej o module 1 tak by

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

Ewolucje w czasie funkcji $\Psi(\vec{r}, t)$ 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 A , która można mierzyć (obserwabi) przyporządkowujemy liniowy operator hermitowski $\hat{A}$, stanowiący odwzorowanie określające sposób przekształcania funkcji należących do przestrzeni w której określamy funkcje stanów układu kwantowego.

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 spełnia on równość:

$$\int_{R^3} \psi_2^* \hat{A} \psi_1 d^3 r = \left(\int_{R^3} \psi_1^* \hat{A} \psi_2 d^3 r \right)^*$$

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 $\hat{\vec{r}} = \hat{x}\vec{i} + \hat{y}\vec{j} + \hat{z}\vec{k} = \vec{r} = x\vec{i} + y\vec{j} + z\vec{k}$

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

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

gradient
↙

Działanie jego składowych w układzie kartezjańskim na dowolną funkcję zależną od współrzędnych przestrzennych można opisać wzorem

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

W przestrzeni jednowymiarowej operator ten ma tylko jedną składową

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

Operator ten jest zawsze hermitowski w działaniu na funkcje

spełniające relacje $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \psi(x, y, z) = \lim_{y \rightarrow \pm\infty} \psi(x, y, z) = \lim_{z \rightarrow \pm\infty} \psi(x, y, z) = 0$
(dowód w dodatku 1)

Operator pędu jest także hermitowski w działaniu na funkcje $\psi(x, y, z) = A \exp(i(k_x x + k_y y + k_z z))$ dla rzeczywistych k_x, k_y, k_z

Operator Hamiltona (hamiltonian) dla pojedynczej cząstki

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

m -masa cząstki

laplasjan

Energia potencjalna
cząstki o masie m

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

W reprezentacji położeniowej we współrzędnych kartezjańskich

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

W przestrzeni jednowymiarowej

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

Jest to operator związany z całkowitą energią cząstki

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)

Operatory wielkości fizycznych mających odpowiedniki w mechanice klasycznej

Operatory wielkości fizycznych mających swoje klasyczne odpowiedniki wyrażające się przez funkcje zależne od położenia i pędu cząstki tworzymy przez zastąpienie składowych wektorów wodzącego i pędu przez operatory tych wielkości, przy czym powstałe operatory muszą być operatorami hermitowskimi.

Równanie własne dla operatorów

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

wartość własna a_n

Funkcja własna odpowiadająca (należąca do) wartości własnej a_n

W wyniku działania operatora na funkcję własną otrzymujemy tą samą funkcję 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 warunku na dozwolone wartości własne. Zbiór wartości własnych operatora (widmo wartości własnych) może być zbiorem dyskretnym jak i ciągłym.

Równanie własne dla operatorów, degeneracja

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

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

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.

Rozważmy funkcję $\psi = A \sin(kx)$

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

W celu sprawdzenia działamy na nią operatorem pędu

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

Nie jest to funkcja własna operatora pędu.

2) Czy jest ona funkcją własną operatora Hamiltona

gdy potencjał $V=0$ i $\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$?

W celu sprawdzenia działamy na tą funkcję tym operatorem

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

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

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

Operator Hamiltona a równanie Schrödingera

Równanie własne dla operatora Hamiltona dla pojedynczej cząstki kwantowej to równanie Schrödingera niezależne od czasu

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

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

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

Możliwe wyniki 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, przy czym po dokonaniu pomiaru układ znajdzie się w stanie opisanym funkcją własną odpowiadającą wartości własnej otrzymanej w wyniku pomiaru.

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

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

(dowód w dodatku 2)

- 3) 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.**

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

spełniają warunek ortonormalności

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

4) Dla operatorów o ciągłym widmie wartości własnych (np. operatora pędu), których nie można unormować warunek ortonormalności zapisuje się w przestrzeni 1DIM w postaci

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx = \delta(m - n) \quad (m \text{ i } n \text{ przyjmują wartości ze zbioru ciągłego})$$

gdzie delta Diraca δ spełnia własności

$$\delta(x - x_0) = \begin{cases} \infty & \text{dla } x = x_0 \\ 0 & \text{dla } x \neq x_0 \end{cases}; \quad \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0) dx = 1; \quad \int_{-\infty}^{\infty} F(x) \delta(x - x_0) dx = F(x = x_0)$$

$$\delta(x - x_0) = \frac{1}{2\pi} \lim_{k \rightarrow \infty} \int_{-k}^k \exp(ik(x - x_0)) dk$$

Dyskusje zagadnienia własnego dla operatora pędu o ciągłym widmie wartości własnych zamieszczono w dodatku 3 .

Zupełność układu funkcji własnych operatora hermitowskiego

Funkcje stanu układu fizycznego $\Psi(\vec{r}, t)$ z pewnej przestrzeni funkcyjnej można zawsze zapisać w postaci liniowej kombinacji funkcji własnych operatorów hermitowskich, które w tej przestrzeni działają $\psi_{ni}(\vec{r})$

Założmy że znamy układ ortonormalnych funkcji własnych oraz odpowiadające im wartości własne a_n operatora $\hat{A}$ spełniające równanie własne

$$\hat{A} \psi_{ni}(\vec{r}) = a_n \psi_{ni}(\vec{r}) \quad (i=1, \dots, f; f\text{-krotność degeneracji})$$

Wówczas

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_{n,i} c_{n,i}(t) \psi_{ni}(\vec{r}) \quad \left(\begin{array}{l} \text{W przestrzeni 1 wymiarowej} \\ \Psi(x, t) = \sum_{n,i} c_{n,i}(t) \psi_{ni}(x) \end{array} \right)$$

Dla operatora o ciągłym widmie wartości własnych suma w powyższych wzorach zamienia się na całkę.

Współczynniki $c_{n,i}$ można określić ze wzoru

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

(całka przykrywania funkcji falowych)

$$\left(c_{n,i}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{ni}^*(x) \Psi(x, t) dx \right)$$
$$\int_{R^3} d^3 r = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz$$

Dowód:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_{n', i'} c_{n', i'}(t) \psi_{n' i'}(\vec{r})$$

Z warunku ortonormalności

$$\int_{R^3} \psi_{ni}^*(\vec{r}) \psi_{n' i'}(\vec{r}) d^3 r = \delta_{n' n} \delta_{i' i}$$

$$\int_{R^3} \psi_{ni}^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r}, t) d^3 r = \sum_{n', i'} c_{n', i'}(t) \int_{R^3} \psi_{ni}^*(\vec{r}) \psi_{n' i'}(\vec{r}) d^3 r = \sum_{n', i'} c_{n', i'}(t) \delta_{n' n} \delta_{i' i} = c_{n, i}(t)$$

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 $\hat{A}$ spełniający równ. $\hat{A} \psi_{ni} = a_n \psi_{ni}$

jest równe $P(A = a_n) = \sum_{i=1}^f |c_{n,i}(t)|^2$ gdzie $c_{n,i}(t) = \int_{R^3} \psi_{ni}^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r}, t) d^3r$

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

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_n c_n(t) \psi_n(\vec{r}) \qquad \hat{A} \psi_n = a_n \psi_n$$

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

$$P(A = a_n) = |c_n(t)|^2$$

(brak sumowania po i czyli różnych funkcjach własnych należących do tej samej wartości własnej)

Można pokazać iż zawsze $\sum_n P(A = a_n) = 1$ gdy $\int_{R^3} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r = 1$ (dodatek 4)

Redukcja funkcji falowej

Jeżeli w wyniku pomiaru wielkości fizycznej reprezentowanej przez operator $\hat{A}$, uzyskano wartość a_n to układ po pomiarze znalazł się w stanie własnym operatora $\hat{A}$ reprezentującego tę wielkość fizyczną o wartości własnej a_n i nastąpiła redukcja funkcji falowej opisana poniższym wzorem

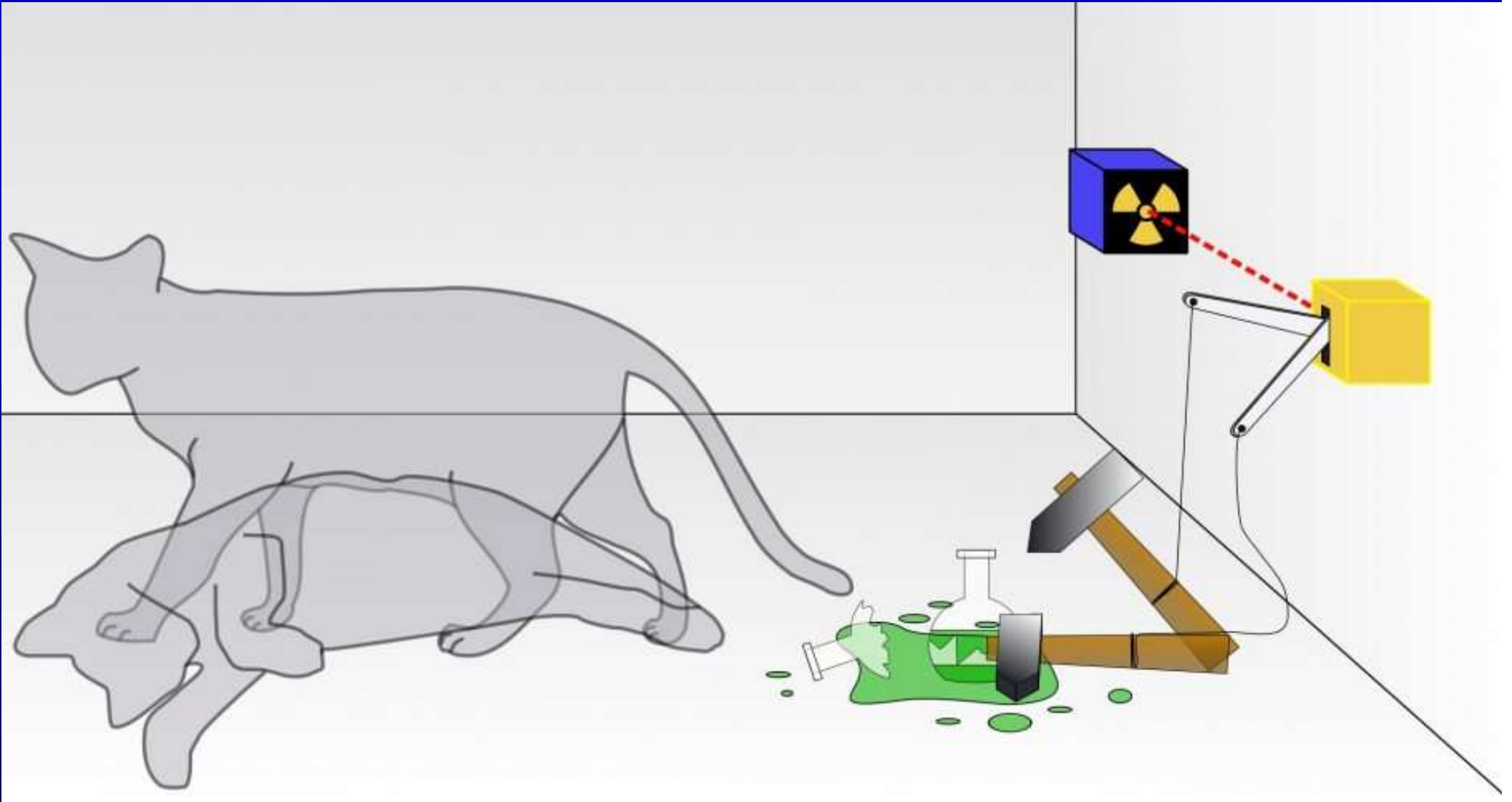
$$\Psi(\vec{r}) = \sum_{n',i} c_{n',i} \psi_{n'i}(\vec{r}) \longrightarrow \Psi(\vec{r}) = \sum_i c_{n,i} \psi_{ni}(\vec{r})$$
$$\hat{A} \psi_{ni} = a_n \psi_{ni}$$

Przy braku degeneracji

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_n c_n \psi_n(\vec{r}) \longrightarrow \Psi(\vec{r}) = \psi_n(\vec{r})$$

Oznacza to iż następny pomiar wielkości reprezentowanej przez operator $\hat{A}$ przeprowadzony natychmiast po pierwszym da ten sam wynik (w obecności jak i przy braku degeneracji). Słowo natychmiast ma znaczenie w przypadku gdy $\psi_n(\vec{r})$ nie jest funkcją własną operatora Hamiltona, gdyż wówczas ewolucja tej funkcji w czasie opisana przez równanie Schrödingera zależne od czasu w ogólności prowadzi do zmiany postaci tej funkcji tak iż przestaje być ona funkcją własną.

Kot Schrödingera



Wartość oczekiwana operatora

Zakładamy iż mamy bardzo dużo układów znajdujących się w jednakowym stanie opisanym unormowaną funkcją falową

$$\Psi(\vec{r}, t) \quad (\text{spełniającą warunek} \quad \int_{R^3} |\Psi(r, t)|^2 d^3r = 1)$$

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

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

W przestrzeni jednowymiarowej

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

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

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

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 $P(A = a_n) = 1$

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

W dowolnym stanie opisanym unormowaną funkcją własną $\psi_n(\vec{r})$ spełniającą równanie własne $\hat{A}\psi_n(\vec{r}) = a_n\psi_n(\vec{r})$ zachodzi bowiem

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle &= \int_{R^3} \psi_n^*(\vec{r}) \hat{A} \psi_n(\vec{r}) d^3r = \int_{R^3} \psi_n^*(\vec{r}) a_n \psi_n(\vec{r}) d^3r = \\ &= a_n \int_{R^3} \psi_n^*(\vec{r}) \psi_n(\vec{r}) d^3r = a_n \end{aligned}$$

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

Dowód (operatory odpowiadające realnym wielkościom fizycznym nie zawierają różniczkowania po czasie)

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{A} \rangle &= \int_{R^3} \Psi^*(\vec{r}, t) \hat{A} \Psi(\vec{r}, t) d^3 r = \int_{R^3} d^3 r \left(\sum_{n', i'} c_{n', i'}^*(t) \psi_{n' i'}^*(\vec{r}) \right) \hat{A} \left(\sum_{n, i} c_{n, i}(t) \psi_{n i}(\vec{r}) \right) = \\
 &= \int_{R^3} d^3 r \sum_{n', i'} c_{n', i'}^*(t) \psi_{n' i'}^*(\vec{r}) \sum_{n, i} c_{n, i}(t) \hat{A} \psi_{n i}(\vec{r}) = \int_{R^3} d^3 r \sum_{n', i'} c_{n', i'}^*(t) \psi_{n' i'}^*(\vec{r}) \sum_{n, i} c_{n, i}(t) a_n \psi_{n i}(\vec{r}) = \\
 &= \sum_{n', i'} c_{n', i'}^*(t) \sum_{n, i} c_{n, i}(t) a_n \int_{R^3} \psi_{n' i'}^*(\vec{r}) \psi_{n i}(\vec{r}) d^3 r = \sum_{n, i} \sum_{n', i'} c_{n', i'}^*(t) c_{n, i}(t) a_n \delta_{n' n} \delta_{i' i} = \\
 &= \sum_{n, i} |c_{n, i}(t)|^2 a_n = \sum_n P(A = a_n) a_n \qquad P(A = a_n) = \sum_{i=1}^f |c_{n, i}(t)|^2
 \end{aligned}$$

Dla operatora położenia $\hat{x} = x$, będącego operatorem o ciągłym widmie wartości własnych, relacja analogiczna do zapisanej powyżej ma w przestrzeni jednowymiarowej postać:

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{x} \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \hat{x} \Psi(x, t) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) x \Psi(x, t) dx = \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} x \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) dx = \int_{-\infty}^{\infty} x \rho(x, t) dx
 \end{aligned}$$

$\rho = \Psi^*(x, t) \Psi(x, t)$ - gęstość
prawdopodobieństwa
znalezienia cząstki w punkcie x

Gęstości prawdopodobieństwa można też wprowadzić dla innych operatorów o ciągłym widmie wartości własnych.

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 $\Psi(\vec{r})$

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

gdzie

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

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

W stanie $\Psi = \psi_n$ opisanym funkcją własną operatora $\hat{A}$ spełniającą równanie własne $\hat{A} \psi_n(\vec{r}) = a_n \psi_n(\vec{r})$ mamy $\Delta A = 0$ gdyż

$$\langle \hat{A}^2 \rangle = \int_{R^3} \psi_n^* \hat{A}^2 \psi_n d^3 r = \int_{R^3} \psi_n^* \hat{A} a_n \psi_n d^3 r = a_n \int_{R^3} \psi_n^* \hat{A} \psi_n d^3 r = a_n^2 \int_{R^3} \psi_n^* \psi_n d^3 r = a_n^2$$

$$\langle \hat{A} \rangle = \int_{R^3} \psi_n^* \hat{A} \psi_n d^3 r = \int_{R^3} \psi_n^* a_n \psi_n d^3 r = a_n \int_{R^3} \psi_n^* \psi_n d^3 r = a_n$$

Przykład Jakie wartości i z jakim prawdopodobieństwem można uzyskać w wyniku pomiaru energii cząstki w nieskończonej studni potencjału opisanej funkcją falową :

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

Określić wartość oczekiwaną operatora Hamiltona dla tej cząstki.

Cząstka porusza się w jednowymiarowej studni kwantowej o potencjale:

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



Dla rozważanej w zadaniu studni potencjału

a) wartości własne operatora Hamiltona są równe

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

b) funkcje własne operatora Hamiltona

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

Funkcje te spełniają warunek ortonormalności:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n'}^*(x) \psi_n(x) dx = \delta_{n'n} = \begin{cases} 1 & \text{gdy } n' = n \\ 0 & \text{gdy } n' \neq n \end{cases} \quad \text{Dowód w dodatku 5}$$

1) Widmo wartości własnych operatora Hamiltona jest dyskretne, gdyż energia cząstki może przyjmować tylko dyskretne wartości. Sytuacja taka zachodzi wówczas gdy ruch cząstki jest ograniczony w przestrzeni.

2) Widmo wartości własnych jest niezdegenerowane gdyż każdej energii odpowiada tylko jedna niezależna liniowo funkcja własna.

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

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

choć prawdopodobieństwo uzyskania części z nich może być równe zero.

Zakładamy, iż w chwili czasu $t=0$ cząstka opisana jest funkcją falową:

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

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

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

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

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

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

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

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

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: $\psi(x) = A \sqrt{\frac{L}{2}} [2\psi_1(x) + \psi_3(x)]$.

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

W rozważanym przykładzie warunek normowania przyjmuje postać

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

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

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

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:

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

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

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)

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

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

W wyniku pomiaru energii cząstki możemy otrzymać tylko wartości

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

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

Widać, iż suma obu prawdopodobieństw jest równa 1.

Wartość oczekiwana operatora Hamiltona jest równa

$$\langle \hat{H} \rangle = P(E = E_1) E_1 + P(E = E_3) E_3 = \frac{4}{5} \cdot \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} + \frac{1}{5} \cdot 9 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = \frac{13}{5} \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

Wartości tej nie można otrzymać w pojedynczym pomiarze, ale można ją otrzymać jako średnią z wielu pomiarów energii cząstek znajdujących się w analiz. stanie kwantowym

Możliwość jednoczesnego pomiaru dwóch wielkości fizycznych

Można jednocześnie dokonać pomiaru dwóch wielkości fizycznych jeżeli operatory reprezentujące te wielkości fizyczne mają wspólny układ funkcji własnych tzn. dowolną funkcję stanu układu można przedstawić w postaci kombinacji wspólnych funkcji własnych obu operatorów.

Założmy dla uproszczenia iż oba operatory mają niezdegenerowane widmo wartości własnych

$$\hat{A} \psi_n = a_n \psi_n, \quad \hat{B} \psi_n = b_n \psi_n$$

(jednoczesny pomiar obu wielkości jest możliwy również gdy występuje degeneracja).

Po uzyskaniu w wyniku pomiaru wielkości reprezentowanej przez operator $\hat{A}$ wartości a_n układ znajdzie się w stanie własnym tego operatora odpowiadającym tej wartości własnej $\Psi = \sum_{n'} c_{n'} \psi_{n'} \rightarrow \Psi = \psi_n$

Ponieważ ψ_n jest też funkcją własną operatora $\hat{B}$ to po pomiarze wielkości reprezentowanej przez operator $\hat{B}$ (dającym wartość b_n) stan układu nie ulegnie zmianie. Powtórny natychmiastowy pomiar wielkości fizycznej reprezentowanej przez operator $\hat{A}$ musi dać w wyniku wartość a_n .

Gdyby funkcja ψ_n nie była funkcją własną operatora $\hat{B}$ to po pomiarze wielkości związanej z tym operatorem układ znajduje się w stanie opisanym funkcją własną operatora $\hat{B}$, która nie jest funkcją własną operatora $\hat{A}$, co powoduje iż natychmiastowy pomiar wielkości fizycznej związanej z operatorem $\hat{A}$ może dać różne wyniki.

Komutator a jednoczesny pomiar dwóch wielkości fizycznych

Możemy dokonać jednoczesnego pomiaru wielkości fizycznych reprezentowanych przez operatory $\hat{A}, \hat{B}$ gdy operatory te komutują ze sobą czyli ich komutator jest równy zeru $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$,
gdyż wówczas operatory te mają wspólny układ funkcji własnych (elementy dowodu w dodatku 6)

Komutator dwóch operatorów

W ogólności komutator operatorów $\hat{A}, \hat{B}$ jest operatorem danym wzorem

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

Licząc komutator staramy się zastąpić go prostszym operatorem , którego działanie na dowolną funkcję (należącą do przestrzeni w której on działa) ma taki sam skutek jak działanie operatora danego wzorem określonym jako różnica iloczynów operatorów $\hat{A}, \hat{B}$ określonych w odwrotnej kolejności. W pewnych przypadkach komutator może redukować się do stałej

Gdy $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ to mówimy że operatory $\hat{A}, \hat{B}$ komutują ze sobą czyli wynik działania ich iloczynu na dowolna funkcje nie zależy od kolejności ich w iloczynie

Przykład wyznaczenia komutatora

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

Powyższy komutator możemy zapisać w postaci

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

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

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

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

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

Przykład wyznaczenia komutatora

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

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

$$\begin{aligned} \left[\hat{x}, \hat{p}_y \right] \Psi(x, y, z, t) &= x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \Psi(x, y, z, t) - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} (x \Psi(x, y, z, t)) = \\ &= \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} \Psi(x, y, z, t) - x \frac{\partial}{\partial y} \Psi(x, y, z, t) \right) = 0 \end{aligned}$$

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

Wybrane ważne komutatory

$$\left[\hat{x}_j, \hat{p}_k \right] = i\hbar \delta_{jk} = \begin{cases} i\hbar & \text{gdy } j = k \\ 0 & \text{gdy } j \neq k \end{cases} \quad \begin{aligned} \hat{x}_1 &= \hat{x}, \hat{x}_2 = \hat{y}, \hat{x}_3 = \hat{z} \\ \hat{p}_1 &= \hat{p}_x, \hat{p}_2 = \hat{p}_y, \hat{p}_3 = \hat{p}_z \end{aligned}$$
$$\left[\hat{x}_j, \hat{x}_k \right] = 0 \quad \left[\hat{p}_j, \hat{p}_k \right] = 0$$

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

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

Zespół wszystkich hermitowskich operatorów (odpowiadających różnym wielkościom fizycznym) mających wspólny zupełny układ funkcji własnych stanowi układ zupełny komutujących (przemiennych) operatorów, gdyż komutator dowolnych dwóch z tych operatorów jest równy zeru. Zespół ten wyznacza wszystkie wielkości fizyczne, które można jednocześnie zmierzyć. Często wspólne funkcje własnych tych operatorów indeksujemy (oznaczamy) przy wykorzystaniu liczb kwantowych wyznaczających wartości własne operatorów wchodzących w skład tego układu

Wyznaczenie wartości oczekiwanych i nieoznaczoności pomiaru położenia i pędu dla cząstki opisanej paczką gaussowską przedstawiono w dodatku 7.

Uogólnienie zasady nieoznaczoności Heisenberga przedstawiono w dodatku 8.

Problem zależności od czasu wartości oczekiwanych operatorów zawarto w dodatkach 9 i 10. Pokazano tam iż

1) Obowiązuje poniższa relacja

$$\frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle$$

dotycząca wartości oczekiwanej dowolnego operatora nie zależącego jawnie od czasu. Wynika z niej iż wartość oczekiwana operatora nie zależącego jawnie od czasu, którego komutator z operatorem Hamiltona jest równy zero, nie zależy od czasu

2) W stanie stacjonarnym wartość oczekiwana dowolnego operatora nie zależącego jawnie od czasu nie zależy od czasu

Uwagi dodatkowe

W przestrzeni jednowymiarowej w której $\hat{p} = \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ oraz $\hat{V} = V(x)$

dla operatora pędu otrzymujemy $[\hat{p}, \hat{H}] = \left[\hat{p}, \frac{\hat{p}^2}{2m} \right] + [\hat{p}, \hat{V}] = -i\hbar \frac{\partial V}{\partial x}$

gdyż

$$\left[\hat{p}, \frac{\hat{p}^2}{2m} \right] = -\frac{1}{2m} [\hat{p}^2, \hat{p}] = -\frac{1}{2m} (\hat{p}[\hat{p}, \hat{p}] + [\hat{p}, \hat{p}]\hat{p}) = 0$$

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

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

$$[\hat{p}, \hat{V}]\psi(x) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (V(x)\psi(x)) + V(x)i\hbar \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} = -i\hbar \frac{\partial V}{\partial x} \psi \longrightarrow [\hat{p}, \hat{V}] = -i\hbar \frac{\partial V}{\partial x}$$

a zatem $\frac{d\langle \hat{p} \rangle}{dt} = -\left\langle \frac{d\hat{V}}{dx} \right\rangle$ Otrzymujemy relacje odpowiadającą klasycznej mechanice zgodnie z którą $\frac{dp}{dt} = -\frac{dV}{dx} = F_w$

Podobnie dla operatora położenia otrzymujemy

$$[\hat{x}, \hat{H}] = \left[\hat{x}, \frac{\hat{p}^2}{2m} \right] + [\hat{x}, \hat{V}] = -\frac{1}{2m} [\hat{p}^2, \hat{x}] = -\frac{1}{2m} (\hat{p}[\hat{p}, \hat{x}] + [\hat{p}, \hat{x}]\hat{p}) =$$

$$= \frac{1}{2m} (\hat{p}[\hat{x}, \hat{p}] + [\hat{x}, \hat{p}]\hat{p}) = \frac{2i\hbar}{2m} \hat{p} = \frac{i\hbar}{m} \hat{p}$$

$$\frac{d\langle \hat{x} \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{x}, \hat{H}] \rangle = \frac{\langle \hat{p} \rangle}{m}$$

Otrzymujemy relacje odpowiadającą klasycznej mechanice

$$\frac{dx}{dt} = \text{predkosc} = \frac{p}{m}$$

Sformułowanie mechaniki kwantowej w języku wektorów stanu (materiał fakultatywny)

Dotychczas przyjmowaliśmy iż stan kwantowy układu w określonej chwili czasu opisujemy przy wykorzystaniu funkcji zależnych od zmiennych przestrzennych.

Operatory zaś były reprezentowane przez operacje (zawierające np. różniczkowanie) wyrażające się przez te współrzędne

Była to tak zwana reprezentacja położeniowa mechaniki kwantowej. Oprócz niej stosujemy często reprezentację pędową lub różne reprezentacje macierzowe.

W ogólnym przypadku stan układu kwantowego możemy reprezentować przez wektor stanu z wektorowej przestrzeni zwanej przestrzenią Hilberta. Tak więc funkcjom stanu będą odpowiadać wektory stanu $|\Psi\rangle$ (zwane ketami)

$$\Psi(\vec{r}, t) \rightarrow |\Psi\rangle$$

Funkcjom do nich sprzężonym odpowiadają wektory z przestrzeni dualnej $\langle \Psi |$ (zwane bra) $\Psi^*(\vec{r}, t) \rightarrow \langle \Psi |$

W przestrzeni Hilberta musi być określony iloczyn skalarny wektorów zwany iloczynem wewnętrznym (oznaczany dla wektorów $\langle \psi_1 |$ oraz $|\psi_2 \rangle$ symbolem $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$) oraz przestrzeń ta musi być zupełna

Własności iloczynu wewnętrznego

$$\langle \psi | \psi \rangle \geq 0 \quad \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle^*$$

$$\langle \psi | c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 \rangle = c_1 \langle \psi | \psi_1 \rangle + c_2 \langle \psi | \psi_2 \rangle$$

$$\langle c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 | \psi \rangle = c_1^* \langle \psi_1 | \psi \rangle + c_2^* \langle \psi_2 | \psi \rangle$$

Warunek normowania wektorów z przestrzeni Hilberta:

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = 1 \quad (\text{w reprezentacji położeniowej } \int_{R^3} \Psi^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) d^3 r = 1)$$

Równanie własne dla operatora $\hat{A}$

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

$$(\hat{A} \psi_{ni}(\vec{r}) = a_n \psi_{ni}(\vec{r}))$$

Wektor własny

Warunek ortonormalności wektorów własnych operatora $\hat{A}$

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{n,m} \quad \left(\int_{R^3} \psi_n^*(\vec{r}) \psi_m(\vec{r}) d^3 r = \delta_{n,m} \right)$$

Wartość oczekiwana operatora

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle \quad \left(\langle \hat{A} \rangle = \int_{R^3} \Psi^*(\vec{r}) \hat{A} \Psi(\vec{r}) d^3 r \right)$$

Relacja , której spełnienie gwarantuje iż operator $\hat{A}$ jest hermitowski

$$\langle \psi_2 | \hat{A} | \psi_1 \rangle = \langle \psi_1 | \hat{A} | \psi_2 \rangle^* \quad \left(\int_{R^3} \psi_2^* \hat{A} \psi_1 d^3 r = \left(\int_{R^3} \psi_1^* \hat{A} \psi_2 d^3 r \right)^* \right)$$

Ponieważ przestrzeń Hilberta jest zupełna to dowolny wektor stanu z przestrzeni Hilberta można zapisać w postaci kombinacji liniowej ortonormalnych wektorów własnych hermitowskiego operatora $\hat{A}$ odpowiadającego mierzonej wielkości fizycznej

$$| \Psi \rangle = \sum_{n,i} c_{n,i} | \psi_{ni} \rangle$$

w reprezentacji
położeniowej $\rightarrow$

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_{n,i} c_{n,i} \psi_{ni}(\vec{r})$$

$$\langle \Psi | = \sum_{n,i} c_{n,i}^* \langle \psi_{ni} |$$

$$\Psi^*(\vec{r}) = \sum_{n,i} c_{n,i}^* \psi_{ni}^*(\vec{r})$$

Prawdopodobieństwo otrzymania wartości a_n w pomiarze wykonanym na układzie znajdującym się w stanie opisanym unormowanym wektorem stanu $|\Psi\rangle$

$$P_n = \sum_{i=1}^f |c_{ni}|^2 \quad f\text{-krotność degeneracji}$$

Współczynniki c_{ni} można określić licząc iloczyn wewnętrzny.

$$c_{ni} = \langle \psi_{ni} | \Psi \rangle \quad \left(c_{ni} = \int_{R^3} \psi_{ni}^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) d^3 r \right)$$

Współczynniki te stanowią reprezentacje wektora stanu $|\Psi\rangle$ w bazie utworzonej przez wektory własne operatora $\hat{A}$ podobnie jak składowe b_x, b_y, b_z stanowią reprezentacje wektora

$$\vec{b} = b_x \vec{i} + b_y \vec{j} + b_z \vec{k}$$

w przestrzeni trójwymiarowej w układzie kartezjańskim, w którym wektorami bazowymi są wersory $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ określające kierunek i zwrot osi Ox, Oy, Oz układu współrzędnych.

$$\text{Widać iż zachodzi } |\Psi\rangle = \sum_{n,i} c_{n,i} |\psi_{ni}\rangle = \sum_{n,i} \langle \psi_{ni} | \Psi \rangle |\psi_{ni}\rangle = \sum_{n,i} |\psi_{ni}\rangle \langle \psi_{ni} | \Psi \rangle$$

$$\text{A zatem } \sum_{n,i} |\psi_{ni}\rangle \langle \psi_{ni}| = \hat{I} \quad \text{jest operatorem jednostkowym}$$

Równanie własne dla operatora położenia (operatora o ciągłym widmie wartości własnych) (przypadek jednowymiarowy)

$$\hat{x}|\psi_{x_0}\rangle = x_0|\psi_{x_0}\rangle \qquad \hat{x}\delta(x-x_0) = x_0\delta(x-x_0)$$

Przedstawienie wektora stanu w postaci kombinacji wektorów własnych operatora położenia

$$|\Psi\rangle = \int dx_0 c(x_0) |\psi_{x_0}\rangle \qquad \Psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(x_0) \delta(x-x_0) dx_0 = c(x)$$

$c(x) = \Psi(x)$ to funkcja stanu reprezentująca wektor stanu $|\Psi\rangle$ w reprezentacji położeniowej. Stanowi ona ciągły zbiór współczynników $c(x_0) = \langle \psi_{x_0} | \Psi \rangle$ określonych dla każdego x_0 stanowiących reprezentację wektora stanu w bazie utworzonej z wektorów własnych operatora położenia

Reprezentacja macierzowa operatorów oraz wektorów stanu (mat. fak.)

Dowolny wektor stanu (ket) $|\Psi\rangle$ można przedstawić jako kombinację ortonormalnych wektorów stanu $|\psi_m\rangle$ dowolnego operatora hermitowskiego $\hat{A}$ spełniających równanie własne $\hat{A}|\psi_m\rangle = a_m|\psi_m\rangle$ mającą postać

$$|\Psi\rangle = \sum_m c_m |\psi_m\rangle \quad m=i,n$$

Współczynniki $c_m = \langle \psi_m | \Psi \rangle$ stojące w powyższym wzorze reprezentują wektor stanu $|\Psi\rangle$ w reprezentacji utworzonej w bazie wektorów własnych operatora $\hat{A}$

Do reprezentowania tego wektora można wykorzystać macierz kolumnową (generalnie o nieskończonym wymiarze) utworzoną z tych współczynników

$$|\Psi\rangle = \begin{bmatrix} c_1 \\ \dots \\ c_3 \\ \dots \\ c_f \end{bmatrix} \quad (f\text{- liczba niezależnych wektorów własnych operatora } \hat{A} \text{ w zasadzie często } f=\infty)$$

Wektor bra z przestrzeni dualnej $\langle \Psi | = \sum_m c_m^* \langle \psi_m |$

reprezentujemy w postaci macierzy wierszowej $\langle \Psi | = [c_1^* \quad \dots \quad c_3^* \quad \dots \quad c_f^*]$

utworzonej z współczynników $c_m^* = \langle \psi_m | \Psi \rangle^* = \langle \Psi | \psi_m \rangle$

Iloczyn wewnętrzny odpowiada mnożeniu macierzy np.

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = [c_1^* \quad \dots \quad c_3^* \quad \dots \quad c_f^*] \cdot \begin{bmatrix} c_1 \\ \dots \\ c_3 \\ \dots \\ c_f \end{bmatrix} = |c_1|^2 + \dots + |c_f|^2$$

gdyż

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \Psi \rangle &= \sum_{m,m'} (\langle \Psi | \psi_m \rangle \langle \psi_m |) (\langle \psi_{m'} | \langle \psi_{m'} | \Psi \rangle) = \sum_{m,m'} (c_m^* \langle \psi_m |) (c_{m'} \langle \psi_{m'} |) = \sum_{m,m'} c_m^* c_{m'} \langle \psi_m | \psi_{m'} \rangle = \\ &= \sum_{m,m'} c_m^* c_{m'} \delta_{mm'} = \sum_m c_m^* c_m = \sum_m |c_m|^2 \end{aligned}$$

$\sum_m |\psi_m \rangle \langle \psi_m| = \sum_{m'} |\psi_{m'} \rangle \langle \psi_{m'}| = \hat{I}$

Operatory reprezentujemy jako macierze kwadratowe. Np operator $\hat{B}$ w reprezentacji utworzonej w bazie wektorów własnych operatora $\hat{A}$ reprezentujemy przez

$$\begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} & \dots & B_{1f} \\ B_{21} & B_{22} & \dots & B_{2f} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ B_{f1} & B_{f2} & \dots & B_{ff} \end{bmatrix}$$

Przy czym liczby tworzące macierz reprezentująca operator $\hat{B}$ można w zasadzie określić jako

$$B_{kl} = \langle \psi_k | \hat{B} | \psi_l \rangle \quad \left(B_{kl} = \int_{R^3} \psi_k^* \hat{B} \psi_l d^3 r \right)$$

W przypadku operatora hermitowskiego zachodzi $B_{ji} = B_{ij}^*$

Działaniu operatora na wektor stanu (ket) odpowiada mnożenie macierzy kwadratowej przez macierz kolumnową, w wyniku czego otrzymujemy macierz kolumnową reprezentującą nowy wektor stanu powstały w wyniku działania operatora na ten wektor stanu .

Np. przy obliczeniu współczynników $\tilde{c}_n$ tworzących macierz kolumnową reprezentującą wektor $|\tilde{\Psi}\rangle = \hat{B}|\Psi\rangle$ powstały w wyniku działania operatora $\hat{B}$ na $|\Psi\rangle$ w bazie wektorów własnych $|\psi_n\rangle$

operatora $\hat{A}$ otrzymujemy

$$\tilde{c}_n = \langle \psi_n | \tilde{\Psi} \rangle = \langle \psi_n | \hat{B} | \Psi \rangle = \sum_m \langle \psi_n | \hat{B} (|\psi_m\rangle \langle \psi_m | \Psi \rangle) = \sum_m \langle \psi_n | \hat{B} | \psi_m \rangle \langle \psi_m | \Psi \rangle$$

$\sum_m |\psi_m\rangle \langle \psi_m| = \hat{I}$

$$\sum_m \langle \psi_n | \hat{B} | \psi_m \rangle \langle \psi_m | \Psi \rangle = \sum_m B_{nm} c_m$$

Iloczyn n -tego wiersza macierzy kwadratowej reprezentującej $\hat{B}$ przez macierz kolumnową reprezentującą $|\Psi\rangle$

$$|\tilde{\Psi}\rangle = \hat{B}|\Psi\rangle \Leftrightarrow \begin{bmatrix} \tilde{c}_1 \\ \dots \\ \tilde{c}_3 \\ \dots \\ \tilde{c}_f \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} & \dots & B_{1f} \\ B_{21} & B_{22} & \dots & B_{2f} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ B_{f1} & B_{f2} & \dots & B_{ff} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} c_1 \\ \dots \\ c_3 \\ \dots \\ c_f \end{bmatrix}$$

Wartości własne i wektory własne operatorów można określić znajdując wartości własne i wektory własne macierzy reprezentujących te operatory.

W reprezentacji utworzonej w bazie wektorów własnych danego operatora macierz reprezentująca ten operator jest diagonalna i na diagonalu znajdują się wartości własne tego operatora

Element stojący na przecięciu n -tego wiersza i m -tej kolumny macierzy reprezentującej operator $\hat{A}$ w bazie wektorów własnych tego operatora jest bowiem równy

$$A_{nm} = \langle \psi_n | \hat{A} | \psi_m \rangle = a_m \langle \psi_n | \psi_m \rangle = a_m \delta_{mn}$$

Określenie wartości oczekiwanej operatora $\hat{B}$ w stanie opisanym wektorem $|\Psi\rangle$

$$\langle \hat{B} \rangle = \langle \Psi | \hat{B} | \Psi \rangle =$$

$$= \begin{bmatrix} c_1^* & \dots & c_3^* & \dots & c_f^* \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} & \dots & B_{1f} \\ B_{21} & B_{22} & \dots & B_{2f} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ B_{f1} & B_{f2} & \dots & B_{ff} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} c_1 \\ \dots \\ c_3 \\ \dots \\ c_f \end{bmatrix}$$

$$\sum_m |\psi_m\rangle \langle \psi_m| = \sum_{m'} |\psi_{m'}\rangle \langle \psi_{m'}| = \hat{I}$$

$$\langle \Psi | \hat{B} | \Psi \rangle = \sum_{m,m'} (\langle \Psi | \psi_m \rangle \langle \psi_m |) \hat{B} (|\psi_{m'}\rangle \langle \psi_{m'} | \Psi \rangle) =$$

$$\sum_{m,m'} \langle \Psi | \psi_m \rangle \langle \psi_m | \hat{B} | \psi_{m'} \rangle \langle \psi_{m'} | \Psi \rangle = \sum_{m,m'} c_m^* B_{mm'} c_{m'}$$

Zadanie rachunkowe 1. Jakie wartości i z jakim prawdopodobieństwem można uzyskać w wyniku pomiaru energii cząstki poruszającej się w nieskończonej studni potencjału danej wzorem

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



jeżeli stan cząstki jest opisany funkcją falową dana poniższym wzorem :

$$\Psi(x, t = 0) = \psi(x) = \begin{cases} A \left[3 \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right) + \sin\left(\frac{5\pi}{L}x\right) \right] & \text{dla } 0 \leq x \leq L \\ 0 & \text{dla } x < 0 \text{ lub } x > L \end{cases}$$

Określić wartość oczekiwaną operatora Hamiltona dla tej cząstki.

Zadanie rachunkowe 2 Dokonać obliczeń komutatora $[\hat{x}, \hat{p}_x]$ gdzie:

$\hat{x}$ - operator x -owej składowej wektora wodzącego cząstki

$\hat{p}_x$ - operator x -owej składowej wektora pędu cząstki.

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) Znamy układ ortonormalnych funkcji własnych operatora $\hat{A}$ spełniających równanie własne:

$$\hat{A}\psi_n(\vec{r}) = a_n\psi_n(\vec{r}) \quad (n=1,2,3,\dots)$$

Co można powiedzieć o wartości oczekiwanej operatora $\hat{A}$ w przypadku gdy układ znajduje się w stanie własnym operatora $\hat{A}$ odpowiadającym wartości własnej a_1 ?

a) Wartość oczekiwana $\langle \hat{A} \rangle$ nie jest równa żadnej z wartości własnych tego operatora.

b) Wartość oczekiwana jest równa wartości własnej a_1 czyli $\langle \hat{A} \rangle = a_1$.

c) Wartość oczekiwana jest równa kwadratowi wartości własnej a_1 czyli $\langle \hat{A} \rangle = a_1^2$.

d) Wartość oczekiwana $\langle \hat{A} \rangle$ jest równa średniej arytmetycznej wszystkich wartości własnych tego operatora.

e) Wartość oczekiwana można wyznaczyć ze wzoru $\langle \hat{A} \rangle = \int_R |\psi_1|^2 d^3r$.

Zaznaczyć poprawną odpowiedź.

5) Znamy układ ortonormalnych funkcji własnych operatora $\hat{A}$ spełniających równanie własne:

$$\hat{A}\psi_n(\vec{r}) = a_n\psi_n(\vec{r}) \quad (n=1,2,3,\dots)$$

Wiemy, iż widmo wartości własnych tego operatora jest dyskretne i nie jest zdegenerowane. Zakładamy, iż cząstka kwantowa znajduje się w stanie opisanym funkcją falową $\Psi(\vec{r},t)$, przy czym funkcja ta jest unormowana tzn. $\int \Psi^*\Psi d^3r = 1$. Które z poniższych wzorów można wykorzystać do określenia wartości oczekiwanej operatora $\hat{A}$ dla cząstki znajdującej się w stanie opisanym funkcją falową $\Psi(\vec{r},t)$?

a) $\langle \hat{A} \rangle = \int \Psi^* \hat{A} \Psi d^3r$

b) $\langle \hat{A} \rangle = \int \hat{A} \Psi^* \Psi d^3r$

c) $\langle \hat{A} \rangle = \sum_n P(A = a_n) a_n$

gdzie $P(A = a_n)$ -prawdopodobieństwo otrzymania wartości a_n w pomiarze

d) $\langle \hat{A} \rangle = \sum_n P(A = a_n) a_n^2$

gdzie $P(A = a_n)$ -prawdopodobieństwo otrzymania wartości a_n w pomiarze

e) $\langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{N} \sum_n a_n$ gdzie N – liczba różnych wartości własnych tego operatora.

Sumowanie w powyższych wzorach obejmuje wszystkie możliwe wartości własne operatora $\hat{A}$

Zaznaczyć wszystkie poprawne odpowiedzi.

6) Założyć, iż znamy układ ortonormalnych funkcji własnych operatora $\hat{A}$ spełniających równanie własne:

$$\hat{A}\psi_n(\vec{r}) = a_n\psi_n(\vec{r}) \quad (n=1,2,3,\dots)$$

Przyjąć, iż widmo wartości własnych tego operatora nie jest zdegenerowane.

Jakie wartości i z jakim prawdopodobieństwem można otrzymać w wyniku pomiaru wielkości fizycznej odpowiadającej operatorowi $\hat{A}$ dla cząstki opisywanej unormowaną funkcją falową $\Psi(\vec{r})$?

a) wartość równą jednej z wartości własnych a_n z prawdopodobieństwem równym

$$P(A = a_n) = \left| \int_{R^3} \psi_n^* \Psi d^3r \right|^2$$

b) wartość równą jednej z wartości własnych a_n z prawdopodobieństwem równym

$$P(A = a_n) = \left| \int_{R^3} \psi_n^* \Psi d^3r \right|^2$$

c) wartość równą jednej z wartości własnych a_n z prawdopodobieństwem równym

$$P(A = a_n) = |c_n|^2$$

gdzie c_n współczynnik stojący przy funkcji ψ_n we wzorze $\Psi = \sum_i c_i \psi_i$

d) wartość równą jednej z wartości własnych a_n z prawdopodobieństwem równym

$$P(A = a_n) = c_n$$

gdzie c_n współczynnik stojący przy funkcji ψ_n we wzorze $\Psi = \sum_i c_i \psi_i$

e) wartość równą jednej z wartości własnych a_n z prawdopodobieństwem równym

$$P(A = a_n) = \int_R d^3r |\psi_n|^2$$

f) wartości dane wzorem $\int_R |\psi_n|^2 d^3r$ z prawdopodobieństwem równym $|c_n|^2$

Zaznaczyć wszystkie poprawne odpowiedzi spośród podanych powyżej.

7) Założyć, iż znamy układ ortonormalnych funkcji własnych operatora $\hat{A}$ spełniających równanie własne:

$$\hat{A}\psi_n(\vec{r}) = a_n\psi_n(\vec{r}) \quad (n=1,2,3,\dots)$$

Przyjąć, iż widmo wartości własnych tego operatora nie jest zdegenerowane.

Ponadto wiadomo iż stan cząstki przed pomiarem był opisany funkcją falową $\Psi(\vec{r})$, zaś w wyniku pomiaru wielkości fizycznej, której odpowiada operator $\hat{A}$ uzyskano wartość a_n .

W jakim stanie znajdzie się opisywana cząstka zaraz po takim pomiarze?

- a) w stanie opisanym funkcją $\Psi(\vec{r})$ opisującą stan cząstki tuż przed pomiarem
- b) w stanie opisanym funkcją własną $\psi_n(\vec{r})$
- c) w stanie opisanym jedną z funkcji własnych operatora $\hat{A}$ różną od funkcji $\psi_n(\vec{r})$
- d) w stanie, którego nie można określić w oparciu o przedstawione w pytaniu informacje

Zaznaczyć poprawną odpowiedź spośród podanych powyżej.

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

- a) Wartości własne operatora hermitowskiego są rzeczywiste.
- b) Wartości własne operatora hermitowskiego są zawsze dodatnie.
- c) Możliwymi wynikami pomiarów wielkości fizycznych są tylko wartości własne operatorów związanych z tymi wielkościami fizycznymi.
- d) Wartość oczekiwana dowolnego operatora jest zawsze równa jednej z wartości własnych tego operatora.
- e) Funkcje własne operatora hermitowskiego o niezdegenerowanym widmie wartości własnych są zawsze ortogonalne do siebie.
- f) Funkcje własne operatora hermitowskiego o niezdegenerowanym widmie wartości własnych przyjmują zawsze wartości rzeczywiste

9) 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 mają wspólny układ funkcji własnych.
- c) Operatory $\hat{A}$ i $\hat{B}$ mają wspólny układ funkcji własnych gdy komutator tych operatorów jest równy zeru.
- d) Istnieje możliwość dokładnego jednoczesnego określenia pędu i położenia cząstki kwantowej.

10) Podać które z poniższych komutatorów są równe zeru

a) $[\hat{x}, \hat{p}_x]$

b) $[\hat{p}_x, \hat{p}_y]$

c) $[\hat{x}, \hat{p}_y]$

d) $[\hat{x}, \hat{y}]$

13) Określić spełnienie której z poniższych relacji zapewnia to iż funkcja ψ_m jest funkcją własną operatora $\hat{A}$

a) $\hat{A}\psi_m = a_m \psi_m$

b) $\hat{A}^2 \psi_m = a_m \psi_m$

c) $\hat{A}\psi_m = a_m \psi_m^2$

d) $\hat{A}\psi_m^2 = a_m \psi_m$

Jakiej wartości własnej odpowiada ta funkcja własna?

14) Wiadomo iż zachodzą poniższe relacje

$$\hat{A}\psi_{n1} = a_{n1} \psi_{n1} \quad \hat{A}\psi_{n2} = a_{n2} \psi_{n2} \quad \hat{A}\psi_{n3} = a_{n3} \psi_{n3}$$

przy czym $a_{n1}=a_{n2} \neq a_{n3}$ a funkcje $\psi_{n1}, \psi_{n2}, \psi_{n3}$ są liniowo niezależne

Czy widmo wartości własnych operatora $\hat{A}$ jest zdegenerowane?
Które z powyższych funkcji są na pewno ortogonalne do siebie?
Zapisać warunek ortogonalności które one spełniają?

Dodatki (wyłącznie dla osób zainteresowanych)

Dodatek 1 Sprawdzenie tego iż operator pędu jest hermitowski

Operator $\hat{p}_x$ jest hermitowski w działaniu na funkcje ψ_1, ψ_2 gdy

$$\int_{R^3} \psi_2^*(\vec{r}) \hat{p}_x \psi_1(\vec{r}) d^3 r = \left(\int_{R^3} \psi_1^*(\vec{r}) \hat{p}_x \psi_2(\vec{r}) d^3 r \right)^*$$

Przekształcamy prawą stronę powyższego równania

$$\begin{aligned} \left(\int_{R^3} \psi_1^*(\vec{r}) \hat{p}_x \psi_2(\vec{r}) d^3 r \right)^* &= \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\psi_1^*(x, y, z) (\hat{p}_x \psi_2(x, y, z)) \right]^* = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_1(x, y, z) (\hat{p}_x \psi_2(x, y, z))^* = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_1(x, y, z) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi_2(x, y, z)}{\partial x} \right)^* = \\ &= -\frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_1(x, y, z) \frac{\partial \psi_2^*(x, y, z)}{\partial x} = \\ &= -\frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} dy \left[\boxed{\psi_1(x, y, z) \psi_2^*(x, y, z)} \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \psi_1(x, y, z)}{\partial x} \psi_2^*(x, y, z) dx \right] = \\ &\quad \text{(całkowanie przez części)} \quad \searrow 0 \quad \text{gdy} \quad \lim_{x \rightarrow \pm \infty} \psi_i(x, y, z) = 0 \end{aligned}$$

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

$$i^* = -i$$

$$\left(\frac{\hbar}{i} \right)^* = -\frac{\hbar}{i}$$

$$\left(\int_{R^3} \psi_1^*(\vec{r}) \hat{p}_x \psi_2(\vec{r}) d^3 r \right)^* = \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\partial \psi_1(x, y, z)}{\partial x} \psi_2^*(x, y, z) =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_2^*(x, y, z) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi_1(x, y, z)}{\partial x} = \int_{R^3} \psi_2^*(\vec{r}) \hat{p}_x \psi_1(\vec{r}) d^3 r$$

Pokazaliśmy iż w działaniu na funkcje takie iż $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \psi(x, y, z) = 0$

$$\int_{R^3} \psi_2^*(\vec{r}) \hat{p}_x \psi_1(\vec{r}) d^3 r = \left(\int_{R^3} \psi_1^*(\vec{r}) \hat{p}_x \psi_2(\vec{r}) d^3 r \right)^* =$$

A zatem operator $\hat{p}_x$ jest operatorem hermitowskim w działaniu na takie funkcje.

Można pokazać analogicznie iż w działaniu na funkcje spełniające warunki $\lim_{y \rightarrow \pm\infty} \psi(x, y, z) = \lim_{z \rightarrow \pm\infty} \psi(x, y, z) = 0$

również pozostałe składowe operatora pędu są hermitowskie

Operator pędu jest także hermitowski w działaniu na funkcje $\psi(x, y, z) = A \exp(i(k_x x + k_y y + k_z z))$ dla rzeczywistych k_x, k_y, k_z co można sprawdzić bezpośrednio.

Dodatek 2. Dowód tego iż wartości własne operatora hermitowskiego są rzeczywiste a funkcje własne należące do różnych wartości własnych są ortogonalne do siebie

$$\hat{A} \psi_n(\vec{r}) = a_n \psi_n(\vec{r})$$

Mnożymy lewostronnie obie strony powyższego równania przez $\psi_m^*(\vec{r})$ i całkujemy obustronnie

$$\int_{R^3} \psi_m^*(\vec{r}) \hat{A} \psi_n(\vec{r}) d^3 r = a_n \int_{R^3} \psi_m^*(\vec{r}) \psi_n(\vec{r}) d^3 r$$

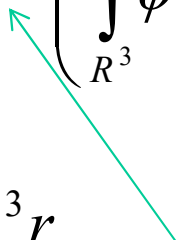
Korzystając z własności operatora hermitowskiego

$$\int_{R^3} \psi_2^* \hat{A} \psi_1 d^3 r = \left(\int_{R^3} \psi_1^* \hat{A} \psi_2 d^3 r \right)^*$$

lewą stronę równania można przedstawić następująco

$$\begin{aligned} \int_{R^3} \psi_m^*(\vec{r}) \hat{A} \psi_n(\vec{r}) d^3 r &= \left(\int_{R^3} \psi_n^*(\vec{r}) \hat{A} \psi_m(\vec{r}) d^3 r \right)^* = \left(\int_{R^3} \psi_n^*(\vec{r}) a_m \psi_m(\vec{r}) d^3 r \right)^* = \\ &= a_m^* \left(\int_{R^3} \psi_n^*(\vec{r}) \psi_m(\vec{r}) d^3 r \right)^* = a_m^* \int_{R^3} \psi_m^*(\vec{r}) \psi_n(\vec{r}) d^3 r \end{aligned}$$

$\hat{A} \psi_m(\vec{r}) = a_m \psi_m(\vec{r})$



Otrzymujemy
$$a_m^* \int_{R^3} \psi_m^*(\vec{r}) \psi_n(\vec{r}) d^3 r = a_n \int_{R^3} \psi_m^*(\vec{r}) \psi_n(\vec{r}) d^3 r \quad (*)$$

Ad 1) Przyjmijmy iż $n=m$ czyli

$$a_n^* \int_{R^3} \psi_n^*(\vec{r}) \psi_n(\vec{r}) d^3 r = a_n \int_{R^3} \psi_n^*(\vec{r}) \psi_n(\vec{r}) d^3 r$$

Wynika z powyższego równania iż $a_n^* = a_n$ czyli wartości własne operatora hermitowskiego są rzeczywiste.

Ad 2) Równanie (*) można zapisać w postaci

$$(a_m^* - a_n) \int_{R^3} \psi_m^*(\vec{r}) \psi_n(\vec{r}) d^3 r = 0$$

Uwzględniając to iż wartości własne są rzeczywiste otrzymujemy

$$(a_m - a_n) \int_{R^3} \psi_m^*(\vec{r}) \psi_n(\vec{r}) d^3 r = 0$$

Gdy $a_m \neq a_n$ to z powyższego równania wynika iż

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

Funkcje własne należące do różnych wartości własnych są ortogonalne.

Dodatek 3 Zagadnienie własne dla operatora pędu

Równanie własne:

$$\hat{p} \psi_k = \hbar k \psi_k$$

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

wartość własna

Funkcja własna odpowiadająca
wartości własnej $\hbar k$:

$$\psi_k(x) = A \exp(ikx)$$

gdyż
$$\hat{p} \psi_k = -i\hbar \frac{\partial \psi_k}{\partial x} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial (A \exp(ikx))}{\partial x} = \frac{\hbar}{i} \cdot ikA \exp(ikx) = \hbar k \psi_k$$

Funkcje te tworzą układ ortonormalny $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{k'}^*(x) \psi_k(x) dx = \delta(k' - k)$ gdy $A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$

Uwagi

- 1) Widmo wartości własnych operatora pędu jest niezdegenerowane, bo wszystkie funkcje własne należące do tej samej wartości własnej są liniowo zależne.
- 2) Liczba k ($p = \hbar k$) może być dowolną liczbą rzeczywistą (zarówno dodatnią jak i ujemną). Operator którego wartości własne są dowolnymi liczbami rzeczywistymi ma tzw. ciągłe widmo wartości własnych. Operator pędu ma ciągłe widmo wartości własnych.
- 3) Gdy ograniczamy liczbę k do wartości dodatnich to ujemne wartości własne operatora pędu możemy wyrazić w postaci $-\hbar k$ a odpowiadające im funkcje własne mają postać $\psi_{-k}(x) = A \exp(-ikx)$

Dodatek 4. Dowód relacji $\sum_n P(A = a_n) = 1$

$P(A = a_n)$ prawdopodobieństwo uzyskania wartości a_n w pomiarze wielkości reprezentowanej przez operator $\hat{A}$ gdy układ przed pomiarem znajduje się w stanie opisanym funkcją

$\Psi(\vec{r}, t)$ unormowaną tak iż $\int_{R^3} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r = 1$

$$P(A = a_n) = \sum_{i=1}^f |c_{n,i}(t)|^2 \quad \text{gdzie} \quad c_{n,i}(t) = \int_{R^3} \psi_{ni}^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r}, t) d^3r \quad \hat{A} \psi_{ni}(\vec{r}) = a_n \psi_{ni}(\vec{r})$$

Można pokazać iż zawsze $\sum_n P(A = a_n) = 1$

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_{n,i} c_{n,i}(t) \psi_{ni}(\vec{r}) \Rightarrow$$

$$1 = \int_{R^3} \Psi^*(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) d^3r = \int_{R^3} d^3r \sum_{n',i'} c_{n',i'}^*(t) \psi_{n'i'}^*(\vec{r}) \sum_{n,i} c_{n,i}(t) \psi_{ni}(\vec{r}) =$$

$$= \sum_{n',i'} c_{n',i'}^* \sum_{n,i} c_{n,i} \int_{R^3} \psi_{n'i'}^*(\vec{r}) \psi_{ni}(\vec{r}) d^3r = \sum_{n,i} \sum_{n',i'} c_{n',i'}^* c_{n,i} \delta_{n'n} \delta_{i'i} =$$

$$= \sum_{n,i} |c_{n,i}(t)|^2 = \sum_n P(A = a_n) \quad \int_{R^3} \psi_{n'i'}^*(\vec{r}) \psi_{ni}(\vec{r}) d^3r = \delta_{n'n} \delta_{i'i}$$

Dodatek 5. Sprawdzenie ortogonalności funkcji własnych operatora Hamiltona dla cząstki w jednowymiarowej nieskończonej studni

potencjału $V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ 0 & 0 < x < L \\ \infty & x > L \end{cases}$ gdy $\begin{cases} x < 0 \\ 0 < x < L \\ x > L \end{cases}$ Funkcje własne

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

Trzeba pokazać iż $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \psi_m(x) dx = 0$ gdy $n \neq m$

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \psi_m(x) dx &= \frac{2}{L} \int_0^L \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \sin\left(\frac{m\pi}{L}x\right) dx = \\ &= \frac{1}{L} \int_0^L \cos\left(\frac{(n-m)\pi}{L}x\right) dx - \frac{1}{L} \int_0^L \cos\left(\frac{(n+m)\pi}{L}x\right) dx = \\ &= \frac{1}{(n-m)\pi} \sin\left(\frac{(n-m)\pi}{L}x\right) \Big|_0^L - \frac{1}{(n+m)\pi} \sin\left(\frac{(n+m)\pi}{L}x\right) \Big|_0^L = 0 \end{aligned}$$

Funkcje te stanowią układ ortonormalny gdyż dodatkowo dzięki unormowaniu zachodzi

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \psi_n(x) dx = \frac{2}{L} \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx = 1$$

Dodatek 6. Dowody twierdzeń wiążących zerowanie się komutatora operatorów z istnieniem układu wspólnych funkcji własnych tych operatorów

1) Jeżeli dwa operatory mają wspólny zupełny układ funkcji własnych, tak iż każdą funkcję stanu opisującą układ kwantowy można przedstawić w postaci kombinacji liniowej wspólnych funkcji własnych tych operatorów to komutator tych operatorów jest równy zeru $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$

2) Jeżeli komutator operatorów reprezentujących dwie wielkości fizyczne jest tożsamościowo równy zeru czyli zachodzi $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$ to istnieje wspólny zupełny układ funkcji własnych operatorów reprezentujących obie te wielkości.

Ad 1)

Założmy iż znamy wspólny układ funkcji własnych operatorów

$\hat{A}$ oraz $\hat{B}$, który będziemy indeksować pojedynczą liczbą n
(w przypadku degeneracji może być tak iż $a_n = a_m$ i (lub) $b_n = b_m$
dla $n \neq m$)

$$\hat{A}\psi_n = a_n\psi_n \qquad \hat{B}\psi_n = b_n\psi_n$$

W stanie opisanym dowolną z tych funkcji oznaczoną przez ψ_n
zachodzi zatem

$$\begin{aligned} (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\psi_n &= \hat{A}\hat{B}\psi_n - \hat{B}\hat{A}\psi_n = \hat{A}b_n\psi_n - \hat{B}a_n\psi_n = \\ &= b_n\hat{A}\psi_n - a_n\hat{B}\psi_n = b_na_n\psi_n - a_nb_n\psi_n = 0 \end{aligned}$$

Ponieważ dowolną funkcję stanu Ψ można przedstawić w postaci

$$\Psi = \sum_n c_n \psi_n \quad \text{to} \quad (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\Psi = \sum_n c_n (\hat{A}\hat{B}\psi_n - \hat{B}\hat{A}\psi_n) = 0$$

Ponieważ powyższa relacja zachodzi dla dowolnej funkcji Ψ

to komutator $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$

Ad 2) (dowód w przypadku gdy widmo wartości własnych operatorów nie jest zdegenerowane, a zatem każdej wartości własnej odpowiada jedna niezależna liniowo funkcja własna)

Z założenia wiemy iż zachodzi $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ czyli $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$

Znamy funkcję własną ψ_n operatora $\hat{A}$ spełniającą równanie własne : $\hat{A}\psi_n = a_n\psi_n$ (*)

W wyniku działania na obie strony równania (*) operatorem $\hat{B}$ otrzymujemy $\hat{B}\hat{A}\psi_n = a_n\hat{B}\psi_n$

Uwzględniając to iż $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$ mamy $\hat{A}\hat{B}\psi_n = a_n\hat{B}\psi_n$

A zatem $\hat{B}\psi_n$ jest również funkcją własną operatora $\hat{A}$ odpowiadającą wartości własnej a_n .

Z uwagi na brak degeneracji może różnić się od funkcji ψ_n tylko stałą, którą oznaczymy przez b_n : $\hat{B}\psi_n = b_n\psi_n$

$$\hat{B}\psi_n = b\psi_n$$

Z powyższego równania wynika iż ψ_n jest więc także funkcją własną operatora $\hat{B}$ odpowiadającą wartości własnej b .

Ponieważ wniosek końcowy nie zależy od wyboru funkcji własnej operatora $\hat{A}$ a zatem każda z funkcji własnych operatora $\hat{A}$ jest także funkcją własną operatora $\hat{B}$.

Analogicznie zakładając brak degeneracji widma wartości własnych operatora $\hat{B}$ można pokazać iż każda z funkcji własnych operatora $\hat{B}$ jest także funkcją własną operatora $\hat{A}$.

A zatem oba operatory mają wspólny zupełny układ funkcji własnych.

Uwaga:

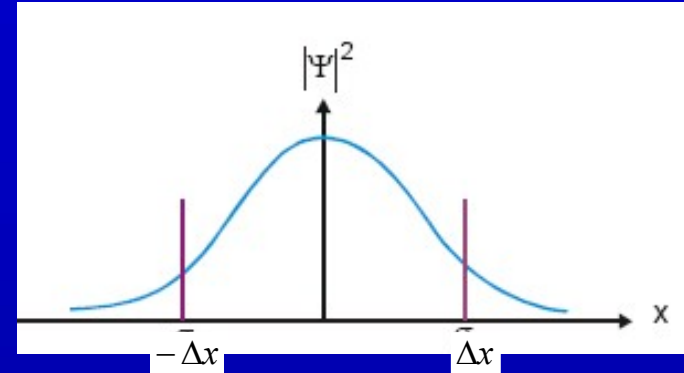
Można pokazać iż również wtedy gdy rozważane operatory mają zdegenerowane widmo wartości własnych (czyli tej samej wartości własnej odpowiadają przynajmniej dwie liniowo niezależne funkcje własne) to zawsze można znaleźć układ zupełny ortonormalnych wspólnych funkcji własnych dla obu operatorów (choć nie każda z funkcji własnych jednego z operatorów jest funkcją własną drugiego).

Dodatek 7 Nieoznaczoności położenia i pędu

cząstki opisanej paczką gaussowską

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

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



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

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

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

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

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

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

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

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

Obliczenia

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

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

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

a -stała

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

Funkcja spełnia warunek normowania

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

Całka z funkcji nieparzystej

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

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

$$\begin{aligned}
\langle \hat{p} \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \hat{p} \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta x}} \right)^{1/2} \exp\left(-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2} - ik_0 x \right) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \left(\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta x}} \right)^{1/2} \exp\left(-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2} + ik_0 x \right) \right) dx \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta x}} \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2} - ik_0 x \right) \left(-\frac{x}{2(\Delta x)^2} + ik_0 \right) \exp\left(-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2} + ik_0 x \right) dx = \\
&= -\frac{1}{2\sqrt{2\pi}(\Delta x)^3} \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} x \exp\left(-\frac{x^2}{2(\Delta x)^2} \right) dx + \hbar k_0 \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta x}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{x^2}{2(\Delta x)^2} \right) dx = \\
&= \hbar k_0 \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta x}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{x^2}{2(\Delta x)^2} \right) dx = \hbar k_0
\end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned}
\langle \hat{p}^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \hat{p}^2 \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta x} \right)^{1/2} \exp\left(-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2} - ik_0 x \right) \cdot (-\hbar^2) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta x} \right)^{1/2} \exp\left(-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2} + ik_0 x \right) \right) dx = \\
\langle \hat{p}^2 \rangle &= -\frac{\hbar^2}{\sqrt{2\pi}\Delta x} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2} - ik_0 x \right) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(-\frac{x}{2(\Delta x)^2} + ik_0 \right) \exp\left(-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2} + ik_0 x \right) \right] dx = \\
\langle \hat{p}^2 \rangle &= -\frac{\hbar^2}{\sqrt{2\pi}\Delta x} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2} - ik_0 x \right) \cdot \left(-\frac{1}{2(\Delta x)^2} + \left(-\frac{x}{2(\Delta x)^2} + ik_0 \right) \right) \exp\left(-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2} + ik_0 x \right) dx = \\
\langle \hat{p}^2 \rangle &= \frac{\hbar^2}{\sqrt{2\pi}\Delta x} \frac{1}{2(\Delta x)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{x^2}{2(\Delta x)^2} \right) dx - \frac{\hbar^2}{\sqrt{2\pi}\Delta x} \frac{1}{4(\Delta x)^4} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp\left(-\frac{x^2}{2(\Delta x)^2} \right) dx + \\
&+ \frac{\hbar^2}{\sqrt{2\pi}\Delta x} \frac{ik_0}{(\Delta x)^2} \int_{-\infty}^{\infty} x \exp\left(-\frac{x^2}{2(\Delta x)^2} \right) dx + (\hbar k_0)^2 \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta x} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{x^2}{2(\Delta x)^2} \right) dx = \\
\langle \hat{p}^2 \rangle &= \frac{\hbar^2}{2(\Delta x)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) dx - \frac{\hbar^2}{\sqrt{2\pi}\Delta x} \frac{1}{4(\Delta x)^4} \frac{\sqrt{\pi} 2\sqrt{2}(\Delta x)^3}{2} + 0 + (\hbar k_0)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) dx = \\
&= \frac{\hbar^2}{2(\Delta x)^2} - \frac{\hbar^2}{4(\Delta x)^2} + 0 + (\hbar k_0)^2 = \frac{\hbar^2}{4(\Delta x)^2} + (\hbar k_0)^2
\end{aligned}$$

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

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

Wykorzystując fakt iż operator pędu jest operatorem hermitowskim w działaniu na funkcje takie iż $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \psi(x) = 0$ (do których należy funkcja rozpatrywana w zadaniu) to możemy

policzyć także wartość oczekiwaną operatora $\hat{p}^2$ prościej

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{p}^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \hat{p}^2 \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{p} \psi(x))^* \hat{p} \psi(x) dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta x}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \left(\exp\left(-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2} + ik_0 x\right) \right) \right]^* \cdot \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \left(\exp\left(-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2} + ik_0 x\right) \right) dx = \\
 &= \frac{\hbar^2}{\sqrt{2\pi\Delta x}} \int_{-\infty}^{\infty} \left(-\frac{x}{2(\Delta x)^2} + ik_0 \right) \left(\exp\left(-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2} + ik_0 x\right) \right)^* \cdot \left(-\frac{x}{2(\Delta x)^2} + ik_0 \right) \left(\exp\left(-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2} + ik_0 x\right) \right) dx = \\
 &= \frac{\hbar^2}{\sqrt{2\pi\Delta x}} \int_{-\infty}^{\infty} \left(-\frac{x}{2(\Delta x)^2} - ik_0 \right) \left(\exp\left(-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2} - ik_0 x\right) \right) \cdot \left(-\frac{x}{2(\Delta x)^2} + ik_0 \right) \left(\exp\left(-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2} + ik_0 x\right) \right) dx = \\
 &= \frac{\hbar^2}{\sqrt{2\pi\Delta x}} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{x^2}{4(\Delta x)^4} + k_0^2 \right) \left(\exp\left(-\frac{x^2}{2(\Delta x)^2}\right) \right) dx = \\
 &= \frac{\hbar^2}{\sqrt{2\pi\Delta x}} \frac{1}{4(\Delta x)^4} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp\left(-\frac{x^2}{2(\Delta x)^2}\right) dx + (\hbar k_0)^2 \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta x}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{x^2}{2(\Delta x)^2}\right) dx = \\
 &= \frac{\hbar^2}{\sqrt{2\pi\Delta x}} \frac{1}{4(\Delta x)^4} \frac{\sqrt{\pi} 2\sqrt{2}(\Delta x)^3}{2} + (\hbar k_0)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) dx = \frac{\hbar^2}{4(\Delta x)^2} + (\hbar k_0)^2
 \end{aligned}$$

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

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

Dodatek 8 Uogólnienie zasady nieoznaczoności (nierówność Heisenberga)

Dla cząstki znajdującej się w stanie opisanym funkcją falową Ψ iloczyn nieoznaczoności wielkości fizycznych reprezentowanych przez hermitowskie operatory $\hat{A}$ i $\hat{B}$ spełnia relacje

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle \hat{C} \rangle|$$

gdzie

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

-wartość oczekiwana operatora $\hat{C}$

określonego jako komutator $\hat{C} = [\hat{A}, \hat{B}]$

operatorów $\hat{A}$ i $\hat{B}$ określona w stanie Ψ

Zgodność z zasadą nieoznaczoności dla operatorów x-owych składowych położenia i pędu

$$\hat{C} = [\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$$

$$|\langle \hat{C} \rangle| = \hbar$$

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

Dodatek 9 Zależność od czasu wartości oczekiwanej operatora $\hat{A}$ nie zależącego jawnie od czasu ($\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 0$) $\langle \hat{A} \rangle$

$$\frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle \quad \text{gdzie} \quad [\hat{A}, \hat{H}] = \hat{A}\hat{H} - \hat{H}\hat{A}$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r) \text{-operator Hamiltona}$$

Wartość oczekiwana operatora $\hat{A}$ nie zależącego jawnie od czasu dla którego $\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 0$ nie ulega zmianie w czasie gdy operator ten

komutuje z operatorem Hamiltona $[\hat{A}, \hat{H}] = 0$

Wniosek: Wartość oczekiwana operatora Hamiltona nie zależącego jawnie od czasu (średnia wartość energii układu kwantowego) nie ulega zmianie w czasie gdyż $[\hat{H}, \hat{H}] = 0 \Rightarrow \frac{d\langle \hat{H} \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{H}] \rangle = 0$

Dowód relacji

$$\frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle$$

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

$$\begin{aligned} \frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt} &= \int_{R^3} d^3 r \left(\frac{\partial \Psi^*(\vec{r}, t)}{\partial t} \hat{A} \Psi(\vec{r}, t) + \Psi^*(\vec{r}, t) \hat{A} \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} + \Psi^*(\vec{r}, t) \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) \right) d^3 r = \\ &= \int_{R^3} d^3 r \left(\frac{\partial \Psi^*(\vec{r}, t)}{\partial t} \hat{A} \Psi(\vec{r}, t) + \Psi^*(\vec{r}, t) \hat{A} \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} \right) + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle \end{aligned}$$

Z równania Schrödingera zależnego od czasu wynika iż: $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi$

czyli $\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \Psi$

Z równania do niego sprzężonego w sposób zespolony wynika iż: $-i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = (\hat{H} \Psi)^*$

czyli $\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} (\hat{H} \Psi)^*$

Otrzymujemy
$$\frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \int_{R^3} \left(-(\hat{H} \Psi)^* \hat{A} \Psi + \Psi^* \hat{A} \hat{H} \Psi \right) d^3 r + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle$$

Ponieważ $\hat{H}$ jest operatorem hermitowskim to

$$\int_{R^3} (\hat{H}\Psi)^* \hat{A}\Psi d^3r = \left(\int_{R^3} (\hat{A}\Psi)^* \hat{H}\Psi d^3r \right)^* = \int_{R^3} \Psi^* \hat{H}(\hat{A}\Psi) d^3r = \int_{R^3} \Psi^* \hat{H}\hat{A}\Psi d^3r$$

A zatem

$$\begin{aligned} \frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} \int_{R^3} \left(-\Psi^* \hat{H}\hat{A}\Psi + \Psi^* \hat{A}\hat{H}\Psi \right) d^3r + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle = \\ &= \frac{1}{i\hbar} \int_{R^3} \left(\Psi^* [\hat{A}, \hat{H}] \Psi \right) d^3r + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle \stackrel{\frac{\partial \hat{A}}{\partial t}=0}{=} \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle \end{aligned}$$

Dodatek 10. Niezależność od czasu wartości oczekiwanej operatora nie zależącego jawnie od czasu oraz gęstości prawdopodobieństwa w stanie stacjonarnym

Jeżeli $\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 0$, a układ kwantowy znajduje się w stanie własnym operatora Hamiltona o ustalonej energii (stanie stacjonarnym) czyli

$$\Psi = \psi_n \exp(-iE_n t / \hbar) \quad \text{gdzie} \quad \hat{H}\psi_n = E_n \psi_n$$

to wówczas $\frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt} = 0$ czyli wartość oczekiwana operatora nie

zależy od czasu.

Można powiązać to także z tym iż w stanie stacjonarnym nie zależy od czasu prawdopodobieństwo otrzymania w pomiarze różnych wartości wielkości reprezentowanej przez ten operator. W stanie stacjonarnym w szczególności od czasu nie zależy gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w przestrzeni (od której zależy wartość oczekiwana operatora położenia) gdyż

$$\rho = |\Psi|^2 = \Psi^* \Psi = \psi_n^* \exp(iE_n t / \hbar) \psi_n \exp(-iE_n t / \hbar) = \psi_n^* \psi_n$$

Dowód

Ponieważ $\hat{H}\psi_n(\vec{r},t)=E_n\psi_n(\vec{r},t)$ to z równania

$$\frac{d\langle\hat{A}\rangle}{dt}=\frac{1}{i\hbar}\int_{R^3}\left(-\left(\hat{H}\Psi\right)^*\hat{A}\Psi+\Psi^*\hat{A}\hat{H}\Psi\right)d^3r+\left\langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right\rangle \quad (\text{dodatek 9}) \quad \text{wynika iż}$$

$$\begin{aligned}\frac{d\langle\hat{A}\rangle}{dt}&=\frac{1}{i\hbar}\int_{R^3}\left(-\left(\hat{H}\psi_n\exp(-iE_nt/\hbar)\right)^*\hat{A}\psi_n\exp(-iE_nt/\hbar)+\psi_n^*\exp(iE_nt/\hbar)\hat{A}\hat{H}\psi_n\exp(-iE_nt/\hbar)\right)d^3r+\left\langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right\rangle=\\&=\frac{1}{i\hbar}\int_{R^3}\left(-E_n\psi_n^*\exp(iE_nt/\hbar)\hat{A}\psi_n\exp(-iE_nt/\hbar)+\psi_n^*\exp(iE_nt/\hbar)\hat{A}E_n\psi_n\exp(-iE_nt/\hbar)\right)d^3r+\left\langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right\rangle=\\&=\frac{E_n}{i\hbar}\int_{R^3}\left(-\psi_n^*\hat{A}\psi_n+\psi_n^*\hat{A}\psi_n\right)d^3r+\left\langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right\rangle=\left\langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right\rangle\end{aligned}$$

$$\text{Gdy} \quad \frac{\partial\hat{A}}{\partial t}=0 \quad \text{to} \quad \frac{d\langle\hat{A}\rangle}{dt}=0$$