



Równanie Schrodingera, podstawy mechaniki kwantowej

Funkcja falowa

- Jak matematycznie opisać własności falowe materii? Czym są fale materii?
- Własności falowe materii (cząstek, układów cząstek) opisuje matematycznie pewna **funkcja falowa**

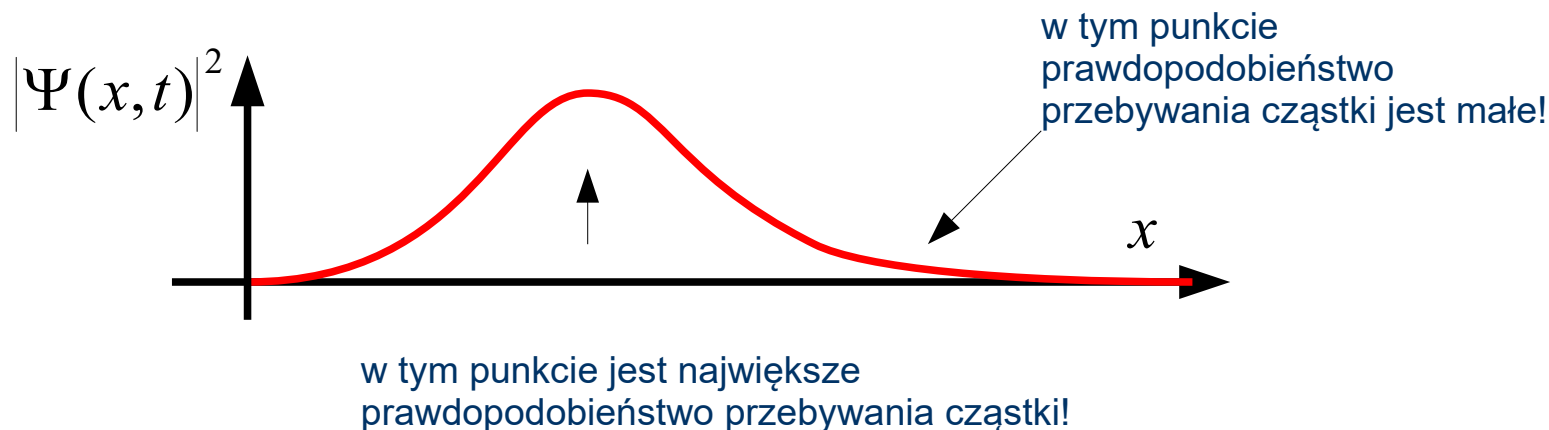
$$\Psi(x, t)$$

Tutaj upraszczamy i rozpatrujemy funkcję falową zależną tylko od jednej współrzędnej przestrzennej (ruch w jednym wymiarze)

- Funkcja falowa ma własności
 - zależy ona od współrzędnych przestrzennych i czasu
 - jest funkcją zespoloną
 - nie ma jednoznacznej interpretacji fizycznej (jest pewnym modelem zachowań falowych opisywanych obiektów)
- Ale moduł funkcji falowej ma interpretację fizyczną !!!
 - *Jeśli w pewnej chwili czasu t przeprowadza się pomiar położenia cząstki, z którą związana jest funkcja falowa $\Psi(x, t)$, to prawdopodobieństwo $P(x, t)dx$ tego, że cząstka znajdzie się pomiędzy współrzędną x a $x+dx$ jest wyrażone kwadratem modułu funkcji falowej*

$$P(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 dx = \Psi(x, t) \cdot \Psi(x, t)^* dx$$

Funkcja falowa - interpretacja



- Wniosek: w mechanice kwantowej cząstka nie ma „jednoznacznego” położenia!!! Możemy mówić tylko o pewnym prawdopodobieństwie że cząstka przebywa w danym punkcie.
- Ale musimy przyjąć, że cząstka gdzieś w przestrzeni jest, więc jeśli obliczając prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w całej przestrzeni powinniśmy otrzymać:

warunek normalizacji

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x, t) \cdot \Psi(x, t)^* dx = 1$$

Jak znaleźć funkcję falową ?

Równanie Schrödingera dla poruszającej się cząstki

- Dla cząstki poruszającej się w polu sił o energii potencjalnej $V(\mathbf{x}, t)$ funkcja falowa musi spełniać następujące równanie Schrödingera

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

liczba urojona, stała Planck'a / 2π funkcja falowa, masa operator Laplace'a, energia pot. cząstki

- To równanie jest postulatem (nie da się go wyprowadzić ściśle z innych praw fizyki)
- Rozwiązując to równanie dostajemy funkcje falowe, które zawierają dane-informacje dotyczące stanu tej cząstki (np. gdzie może się znajdować, jaki może mieć pęd)
- W mechanice kwantowej stan cząstki określa się podając funkcję falową, która jest wielkością zespoloną, określoną w dowolnej chwili czasu t i we wszystkich punktach przestrzeni
- Mechanika kwantowa daje nam narzędzie matematyczne do opisu zjawisk zachodzących w obiektach skali atomowej.

Stacjonarne równanie Schrödingera dla poruszającej się cząstki

Często energia potencjalna cząstki $V(x,t)$ nie zależy od czasu, wtedy równanie S. upraszcza się i nazywa się **stacjonarnym r. S.** Wtedy funkcję falową można przedstawić, jako iloczyn oddzielnych funkcji zależnych od x i od t

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\phi(t)$$

Wstawiając do r. S. można wykazać, że część zależna od czasu przyjmuje charakterystyczną zależność:

$$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

część „przestrzenna”

część zależna od czasu

Przy wyznaczaniu części zależnej od czasu wykorzystuje się fakt, że funkcja ta oscyluje z częstotliwością odpowiadającą częstocie fali materii zaproponowanej przez de Broigle’a

energia cząstki związana jest z
częstotliwością funkcji falowej

$$E = \hbar\omega \longrightarrow \omega = E/\hbar$$

Równanie S. dla części „przestrzennej” ma postać :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right] \psi(x) = E \psi(x)$$

masa cz.

energia potencjalna

energia cząstki

Warunki, które musi spełniać funkcja falowa

Równanie S. dla części „przestrzennej” ma postać :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right] \psi(x) = E \psi(x)$$

masa cz. energia potencjalna energia cząstki

Nie wszystkie rozwiązania r. Schrödinger'a są dobre.

Narzucamy pewne warunki na funkcje falowe własne (i ich pochodne).

Funkcje falowe i ich pochodne muszą być :

1. skończone (tzn. $\rightarrow 0$ dla $+\infty$ i $-\infty$, aby spełniony był warunek normalizacji)
2. jednoznaczne (dla określonego x musi być jedna wartość funkcji)
3. i ciągłe

Operatory w mechanice kwantowej

W mechanice kwantowej stan cząstki określa się podając funkcję falową, która jest wielkością zespoloną, określoną w dowolnej chwili czasu t i we wszystkich punktach przestrzeni.

W mechanice kwantowej własnościom mechanicznym (pęd, moment pędu, energia) przypisuje się specjalne operatory matematyczne:

Table 6-1 Some quantum-mechanical operators

Symbol	Physical quantity	Operator
$f(x)$	Any function of x —e.g., the position x , the potential energy $V(x)$, etc.	$f(x)$
p_x	x component of momentum	$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$
p_y	y component of momentum	$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}$
p_z	z component of momentum	$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}$
E	Hamiltonian (time independent)	$\frac{p_{op}^2}{2m} + V(x)$
E	Hamiltonian (time dependent)	$i \hbar \frac{\partial}{\partial t}$
E_k	kinetic energy	$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$
L_z	z component of angular momentum	$-i \hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$

Operatory w mechanice kwantowej

Table 6-1 Some quantum-mechanical operators

Symbol	Physical quantity	Operator
$f(x)$	Any function of x —e.g., the position x , the potential energy $V(x)$, etc.	$f(x)$
p_x	x component of momentum	$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$
p_y	y component of momentum	$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}$
p_z	z component of momentum	$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}$
E	Hamiltonian (time independent)	$\frac{p_{op}^2}{2m} + V(x)$
E	Hamiltonian (time dependent)	$i \hbar \frac{\partial}{\partial t}$
E_k	kinetic energy	$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$
L_z	z component of angular momentum	$-i \hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$

Np. średnią wartość pędu dla cząstki wyznacza się w sposób:

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi dx$$

Np. średnią wartość kwadratu pędu:

$$\langle p^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi dx$$

Ponieważ klasycznie energię kinetyczną zapisujemy: $E = p^2/2m$

jej operator definiujemy jako:

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

Wyrażenie $\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right]$ oznacza operator energii całkowitej (tzw. „hamiltonian”).

Dlatego stacjonarne r. S. można zapisać w formie:

$$H_{op} \psi(x) = E \psi(x)$$

→ operator
 ← wartość „własna” operatora

Cząstka poruszająca się w stałym potencjale

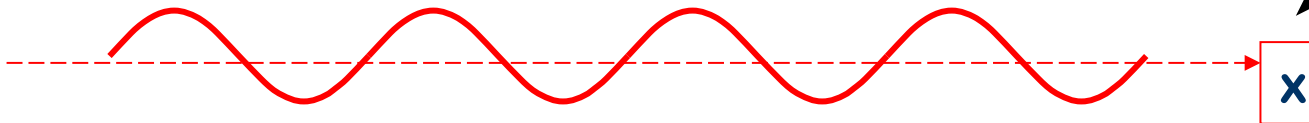
Założmy na początku, że $V = 0$
(cząstka jest swobodna)
wtedy

Proponujemy rozwiązanie (funkcje własne) typu

Podstawiając to do równania S. otrzymamy
warunek symbol k równy jest :

Funkcję falową cząstki można więc zapisać
(uwzględniając zależność od czasu)

Rozwiązanie to przypomina falę biegnącą w kierunku x



tak wygląda fala płaska
 E – energia cząstki
 k – wektor falowy
 p – pęd cząstki $= \hbar k / (2\pi)$

Możliwe jest też, że cząstka poruszać się będzie w
kierunku przeciwnym

Rozwiązaniem może być też kombinacja

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x) = E \psi(x)$$

$$\psi(x) = A e^{ikx}$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\Psi(x) = A e^{ikx} e^{-\frac{E}{\hbar}t}$$

$$\Psi(x) = B e^{-ikx} e^{-\frac{E}{\hbar}t}$$

$$\Psi(x) = A e^{ikx} e^{-\frac{E}{\hbar}t} + B e^{-ikx} e^{-\frac{E}{\hbar}t}$$

Cząstka poruszająca się w stałym potencjale

Stałe A i B można spróbować wyznaczyć z warunku normalizacji

Jaka jest gęstość prawdopodobieństwa ?

$$P(x,t) = \Psi(x,t) \cdot \Psi(x,t)^* dx = A^* e^{-i(kx - \frac{E}{\hbar}t)} A e^{i(kx - \frac{E}{\hbar}t)} = A^* A$$

Jak znormalizować tę funkcję?

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x,t) \cdot \Psi(x,t)^* dx = A^* A \int_{-\infty}^{+\infty} dx = 1 \quad \Rightarrow \quad A^* A = 0$$

???

coś jest nie tak,

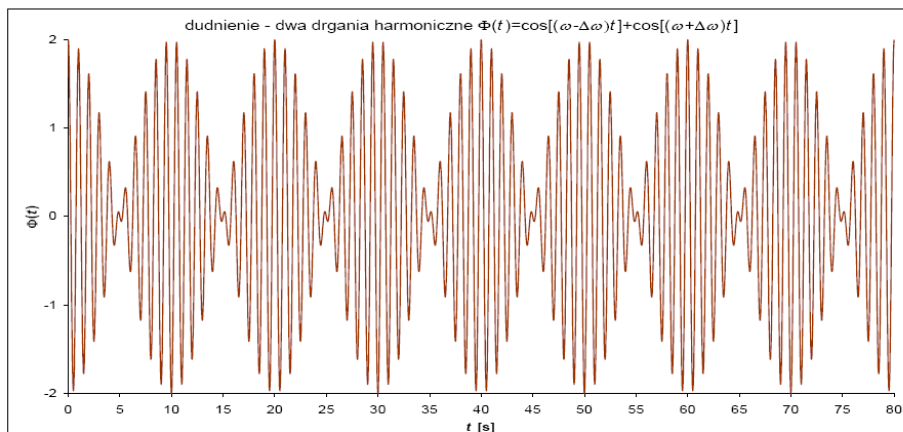
Cząstka może być wszędzie z jednakowym prawdopodobieństwem

Wy tłumaczenie:

Przyjęto nierealistyczną postać funkcji falowej – nieskończenie rozciągłą falę

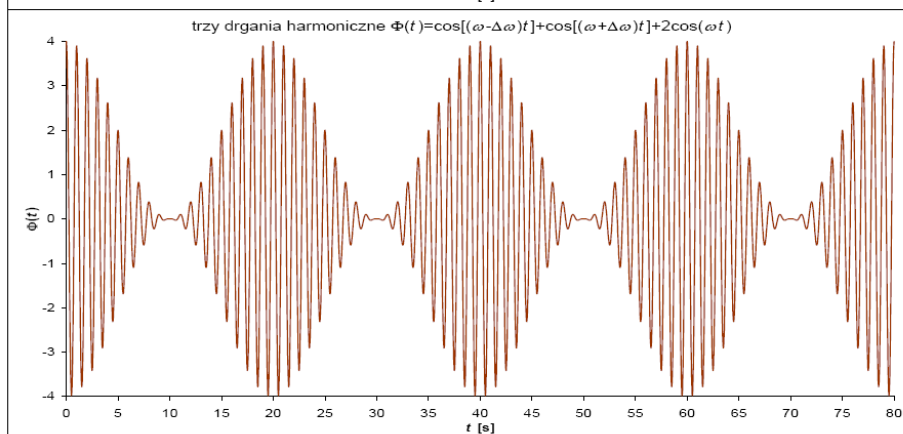
Funkcja falowa powinna mieć raczej kształt „paczki falowej” – złożenie wielu fal płaskich o różnych wektorach falowych k

Okazuje się że „paczka falowa” jest też rozwiązaniem r. S.

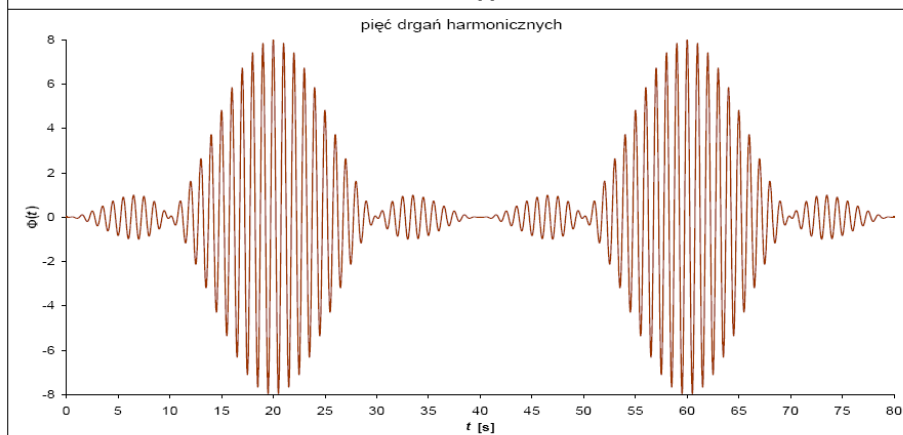


Składanie drgań harmoniczných o mało różniących się częstościami:

1) Dwa drgania - dudnienia



2) Trzy drgania wygaszenie co drugiej paczki drgań



3) Pięć drgań - wyraźnie rozdzielone paczki drgań

W przypadku paczki falowej można

określić dwie prędkości:

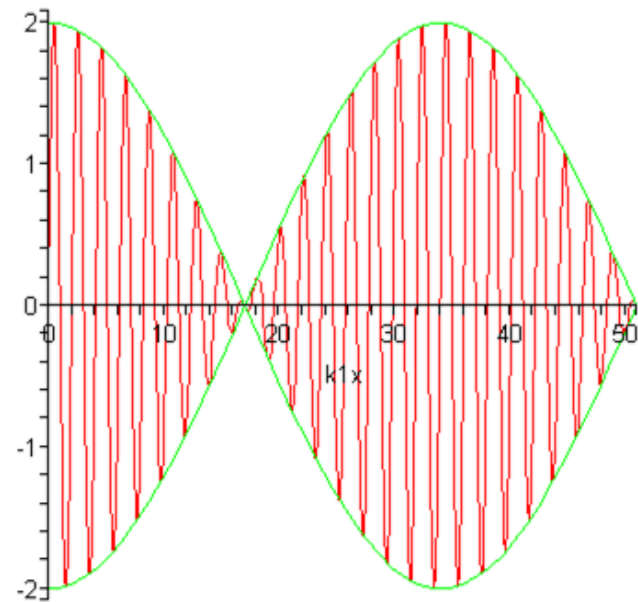
Prędkość fazową dla każdej składowej :

$$v_f = \frac{\omega}{k}$$

Prędkość grupową, która odpowiada

poruszaniu się „obwiedni” :

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}$$



Falowe właściwości materii

Hipoteza de Broglie'a $\lambda = \frac{h}{p}$

Cząstka o masie m poruszająca się z prędkością znacznie mniejszą od prędkości światła $v \ll c$

pęd $p = mv = \frac{h}{\lambda} = \hbar k$

energia kinetyczna $E_K = \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

Prędkość fazowa

$$v_f = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} = \frac{mv^2}{2mv} = \frac{v}{2}$$

Prędkość grupowa

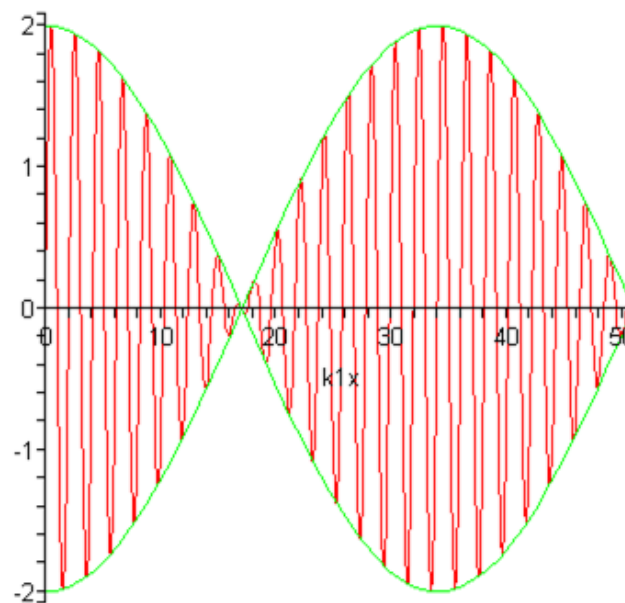
$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d}{dk} \left(\frac{\hbar k^2}{2m} \right) = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} = v$$

Prędkość grupową, odpowiada prędkości poruszania się cząstki:

Fotony

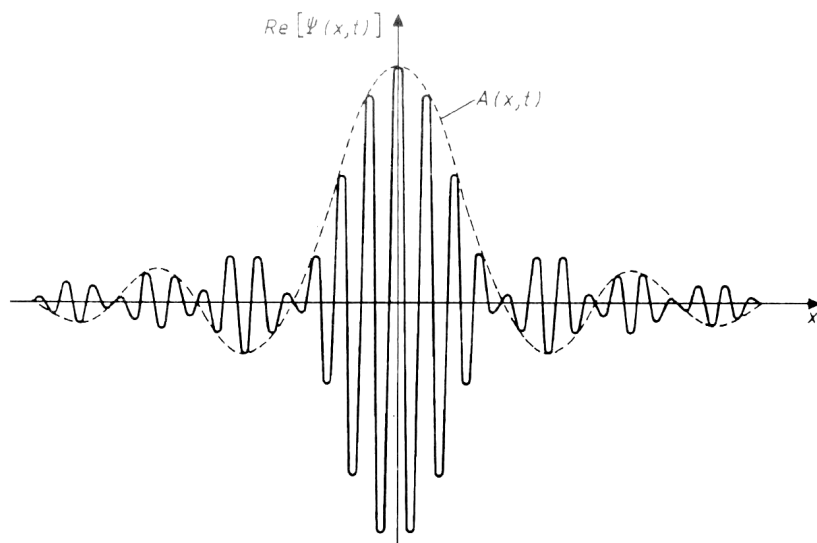
energia $E = h\nu = \hbar\omega$

pęd $p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$



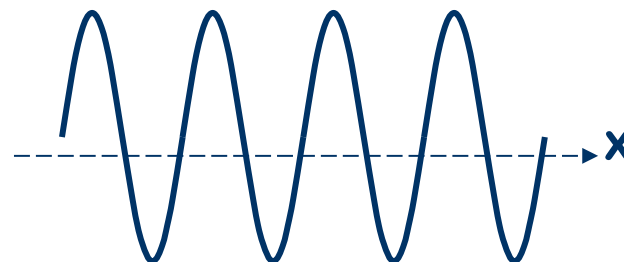
Cząstka poruszająca się w stałym potencjale

Paczka falowa



- położenie cząstki bardziej lokalizowane
- nie znana dokładna wielkość wektora falowego k (bliżej nieokreślony jest pęd p)

Fala płaska

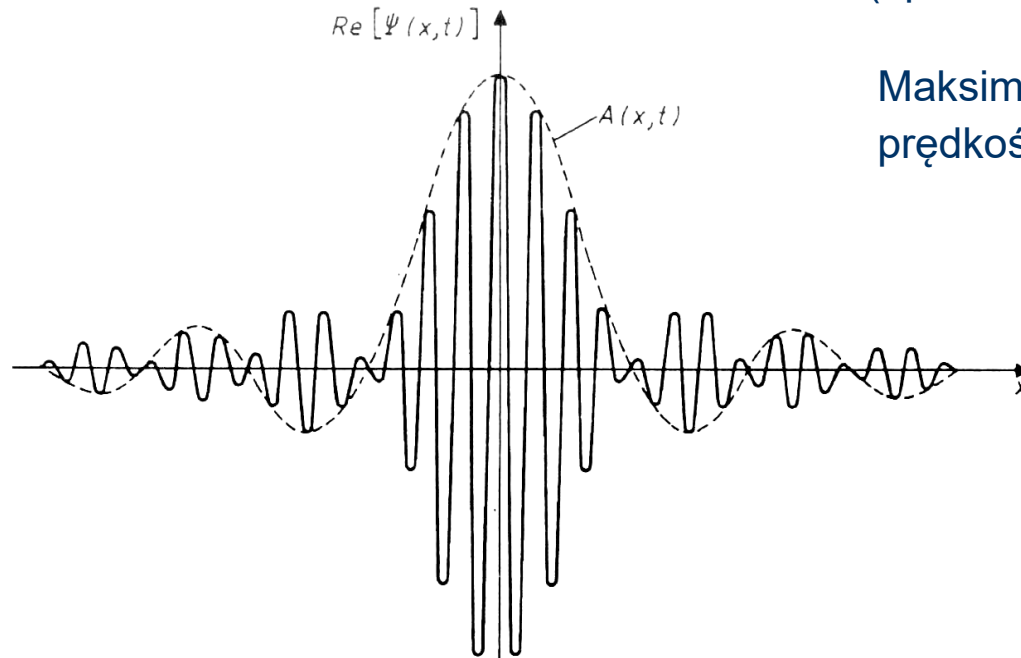


- położenie cząstki nieokreślone
- znana dokładna wielkość k
więc pęd cząstki znany jest dokładnie
 $p = \hbar k / (2\pi) = \hbar / (\lambda 2\pi)$

Paczka falowa ?

Jest złożeniem wielu fal o różnych wektorach falowych k

(np. w zakresie $k - \Delta k < k < k + \Delta k$)



Maksimum pakietu porusza się z prędkością cząstki v_{cz}

Paczka falowa spełnia warunek, że cząstka powinna być choć w przybliżeniu zlokalizowana, ale jej pęd (który jest związany z wektorem falowym k) nie jest dokładnie określony – zawiera się w zakresie

$$p - \Delta p < p < p + \Delta p)$$

ponieważ $p = \hbar k$

Zasada nieoznaczoności Heisenberga

W 1927 Heisenberg odkrył, że ta niepewność co do określenia pędu i położenia cząstek ma zasadnicze znaczenie w fizyce kwantowej

Jeśli pomiar położenia cząstki jest wykonany z dokładnością Δx i jednocześnie można zmierzyć pęd cząstki w kierunku x z dokładnością Δp to iloczyn tych wielkości nie może być mniejszy niż $h/4\pi$

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{1}{2} \hbar$$

Niemożliwe jest jednoczesne dokładne wyznaczenie położenia i pędu cząstki

Podobnie jest także w przypadku, kiedy chcemy „lokalizować” cząstkę w czasie Δt wówczas zakres częstości fal materii musi być $\Delta \omega$ i taki, że $\Delta \omega \Delta t \sim 1$. Ponieważ z częstością związana jest energia cząstki to :

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{1}{2} \hbar$$

Jeśli chcemy określić energię cząstki w czasie Δt to nie możemy tego zrobić dokładnie...

Zasada nieoznaczoności Heisenberga

Piłka o masie 50g porusza się z prędkością 30.0 m/s. Jeśli prędkość mierzona jest z dokładności 0.10% jaka jest minimalna niepewność pomiaru położenia piłki

Piłka jest obiektem nie-relatywistycznym. Zatem jej pęd $p = mv$ i jego niepewność pomiarowa wynosi

Dane:

$v = 30 \text{ m/s}$
 $\Delta v = 0.10\%$
 $m = 50.0 \text{ g}$

$$\begin{aligned}\Delta p &= m(\Delta v) = m(\delta v \cdot v) \\ &= (50.0 \times 10^{-2} \text{ kg})(1.0 \times 10^{-3} \cdot 30 \text{ m/s}) = 1.5 \times 10^{-2} \text{ kg} \cdot \text{m/s}\end{aligned}$$

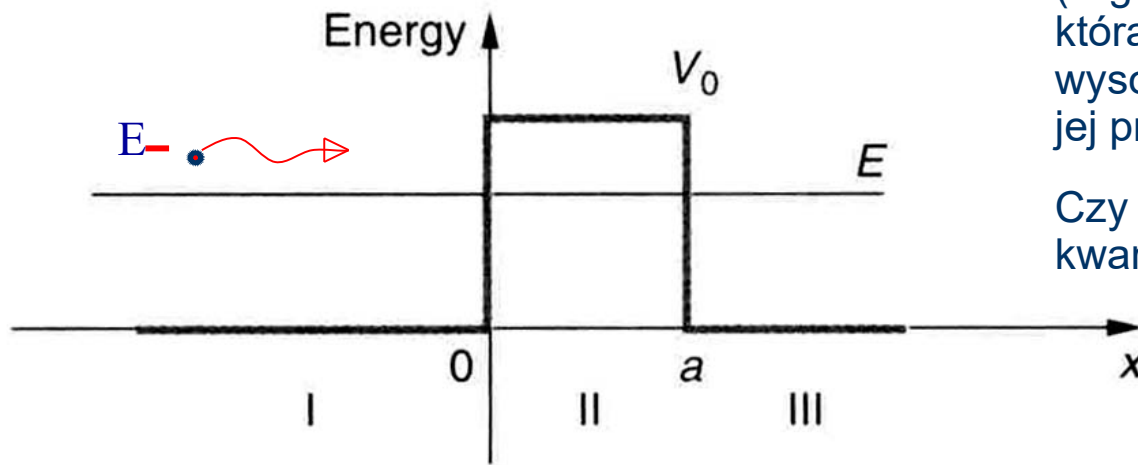
szukane:

$\Delta x = ?$

$$\Delta x \geq \frac{h}{4\pi(\Delta p)} = \frac{6.63 \times 10^{-24} \text{ J} \cdot \text{s}}{4\pi(1.5 \times 10^{-3} \text{ kg} \cdot \text{m/s})} = 3.5 \times 10^{-32} \text{ m}$$

Przykład : Częstka „przechodząca” przez barierę

Rozważamy ruch cząstki w polu o potencjale przedstawionym w postaci bariery (przy czym $V_0 > E$)



(Wg mech. klasycznej np. kulka która pędzi na przeszkodę o dużej wysokości. Kulka nie jest w stanie jej przeskoczyć).

Czy tak samo jest w mechanice kwantowej?

ZAŁOŻENIA

Dla każdego z obszarów konstruujemy równanie

dla obszaru $x < 0$ i $x > a$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x) = E \psi(x)$$

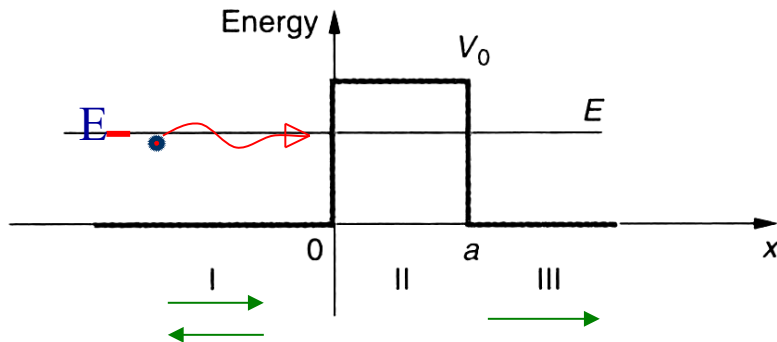
dla obszaru $0 < x < a$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x) = (E - V_0) \psi(x)$$

Bariera potencjału

ZAŁOŻENIA

Rozwiązania poszukujemy w postaci funkcji



fala padająca fala odbita

$$\psi_I(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad \text{dla } x < 0$$

$$\psi_{II}(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x} \quad \text{dla } 0 < x < a$$

$$\psi_{III}(x) = Fe^{ik_1x} + Ge^{-ik_1x} \quad \text{dla } x > a$$

Trzeba uwzględnić fakt, że w obszarze $x > a$ nie powinno być fali odbitej, zatem $G=0$

gdzie k daje się wyznaczyć jako

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

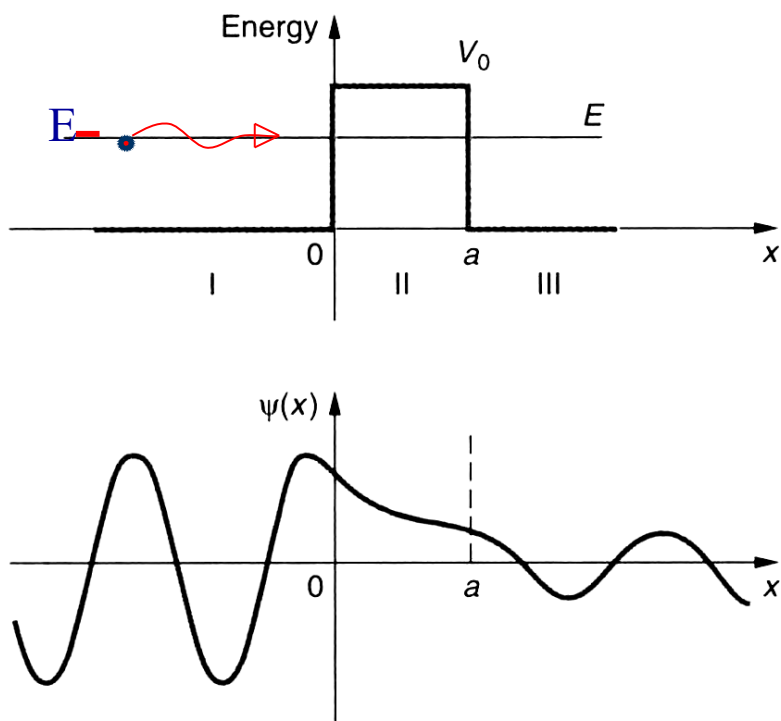
$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$$

Uwaga! Mimo że stwierdziliśmy, że fala płaska niezbyt dobrze opisuje cząstkę (lepsza jest paczka falowa) to jednak dla uproszczenia nadal próbujemy to rozwiązanie - przecież paczka falowa jest kombinacją pewnej liczby fal płaskich, zatem i dla paczki falowej tok rozumowania będzie bardzo podobny.

Bariera potencjału

ZAŁOŻENIA

Aby wyznaczyć stałe A,B,C,D należy wykorzystać warunki zszycia funkcji własnych i ich pochodnych



$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$$

$$\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a)$$

$$\frac{d\psi_I(0)}{dx} = \frac{d\psi_{II}(0)}{dx}$$

$$\frac{d\psi_{II}(a)}{dx} = \frac{d\psi_{III}(a)}{dx}$$

Te 4 równania dają możliwość wyznaczenia stałych A,B,C,D,F.

Parametry A,B,C,F nie są równe 0

Bariera potencjału

WNIOSKI

Okazuje się że istnieje pewne prawdopodobieństwo przejścia cząstki przez barierę potencjału, pomimo że energia cząstki jest mniejsza od wysokości bariery!

Możliwość przechodzenia przez barierę maleje ze wzrostem szerokości bariery.

Współczynniki “przejścia” przez barierę jest proporcjonalny do

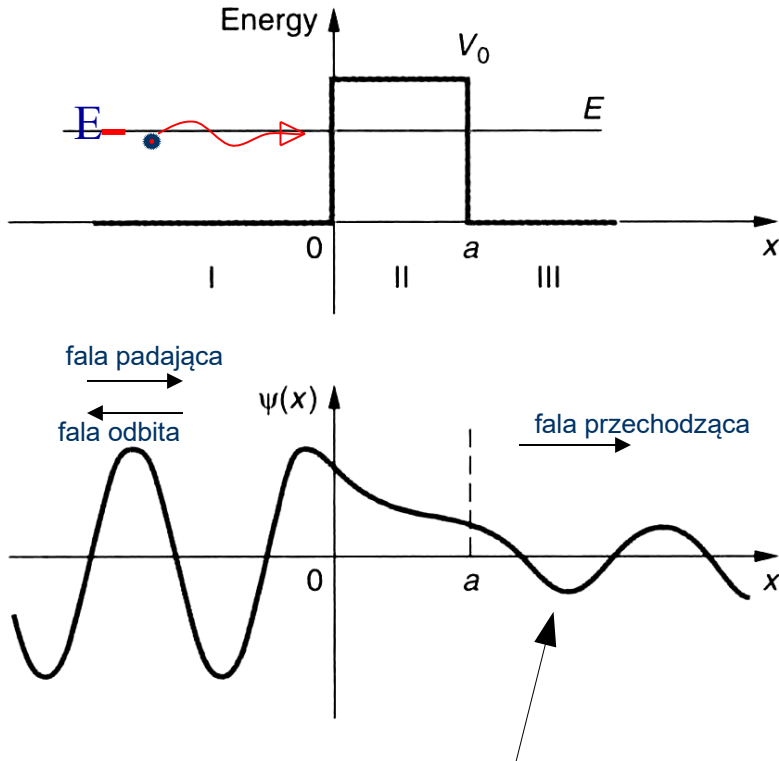
$$T \approx e^{-2k_2 a} \approx e^{\frac{-4\pi\sqrt{2m(V_0-E)}}{h}a}$$

Zależy więc od **m** masy, różnicy (**V-E**) oraz szerokości bariery **a**

(współ. T wyznacza się jako stosunek kwadratu amplitud fali przechodzącej do fali padającej na barierę $T \approx F^2/A^2$)

Jest to efekt czysto kwantowy, sprzeczny z fizyką klasyczną.

Zjawisko to nosi nazwę
przenikania przez barierę lub
zjawiska tunelowego



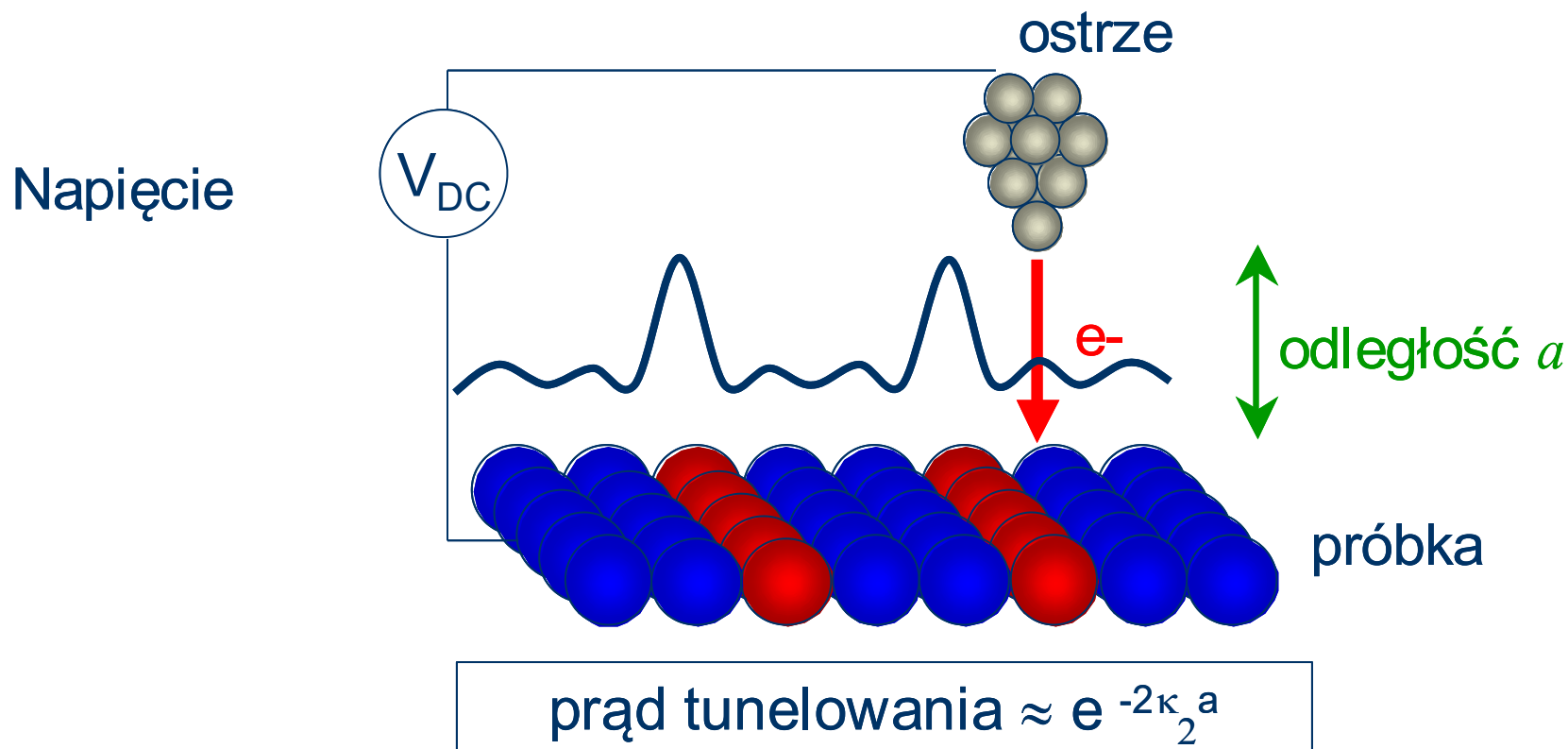
Funkcja falowa (a więc także jej moduł) nie zanika za barierą (jest „słabsza”, ale istnieje skończone prawdopodobieństwo znalezienia cząstki poza barierą)



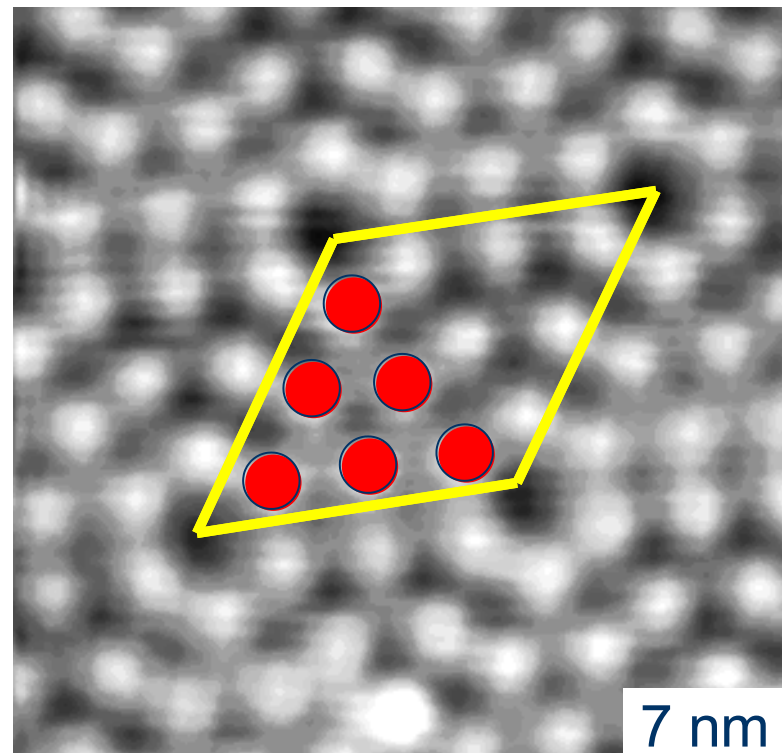
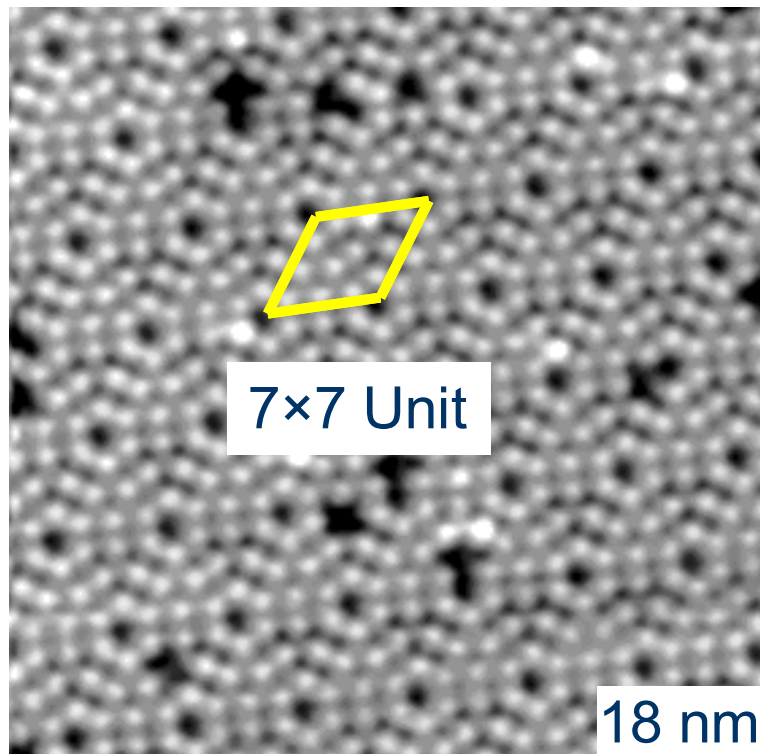
Pytanie?

- ♦ Czym różni się mechanik samochodowy od mechanika kwantowego ?
- ♦ Mechanik kwantowy potrafi wjechać samochodem do garażu nie otwierając bramy!

Skaningowy mikroskop tunelowy



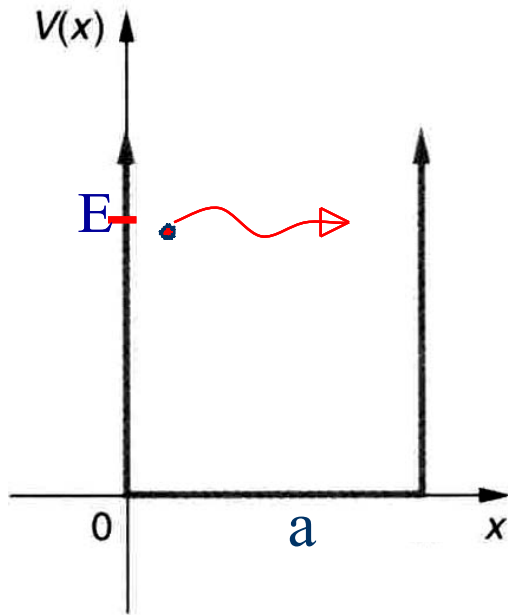
Skaningowy mikroskop tunelowy



● = atom

Przykład : Częstka w studni potencjału

Mamy studnię potencjału o nieskończonej głębokości



$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{dla } 0 < x < a \\ \infty & \text{dla } x \leq 0 \text{ i } x \geq a \end{cases}$$

Fizycznie odpowiada to sytuacji gdy cząstka zamknięta jest w studni o doskonale odbijających ściankach, np. elektron uwięziony w pewnym obszarze o wielkości a

ZAŁOŻENIA

Ponieważ $V(x) = \infty$ dla $x > a$ i $x < 0$ to funkcje własne muszą być równe 0

$$\psi(x) = 0 \text{ dla } x > a \text{ i } x < 0$$

Wewnątrz studni równanie S. ma postać

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x) = E \psi(x)$$

Cząstka w studni potencjału

Rozwiązania tego równania są opisane funkcją

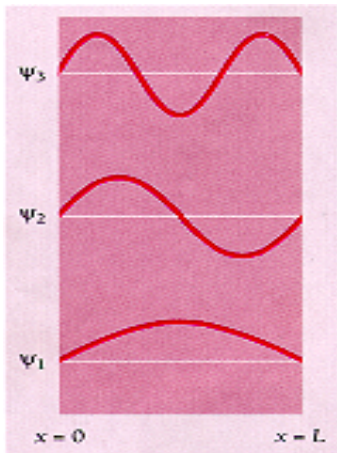
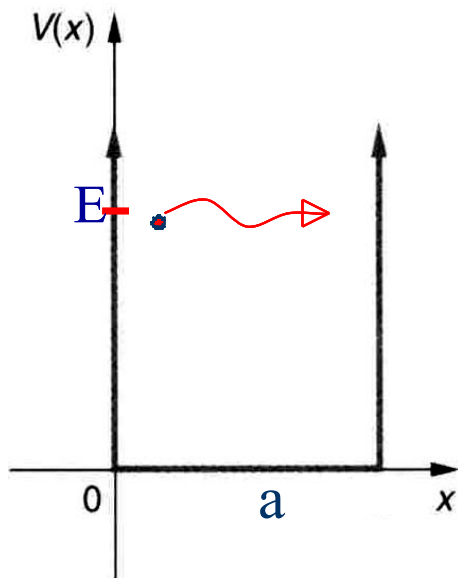
$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad \text{gdzie} \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Z warunków brzegowych i ciągłości funkcji wynika

$$0 = A + B \quad \text{czyli} \quad A = -B$$

zatem

$$\psi(x) = A(e^{ikx} - e^{-ikx}) = C \sin(kx) = C_n \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$



przybiera postać funkcji stojącej.

Możemy dopuścić tylko takie wartości

Zatem mamy tu bardzo ważny wniosek.

ENERGIA JEST SKWANTOWANA!

$n=1,2,3\dots$

$$k_n a = n \pi$$

$$E_n = \frac{n^2 \hbar^2}{8ma^2}$$

Cząstka w studni potencjału - wnioski

ENERGIA JEST KWANTOWANA!

Cząstka może mieć tylko określone energie →

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8ma^2}$$

(jej energia nie może przyjmować dowolnych wartości)

Każdej energii odpowiada pewna funkcja falowa



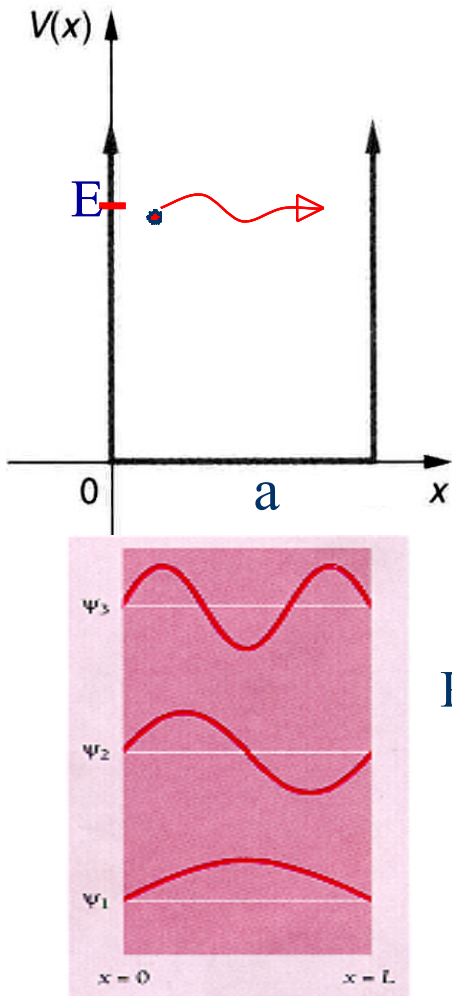
$$\psi(x) = C_n \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

$$k_n a = n\pi$$

$$n=1,2,3\dots$$

Po przeprowadzonej normalizacji:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$



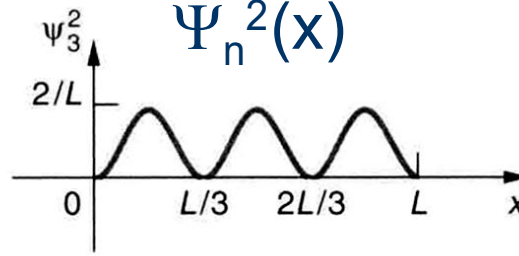
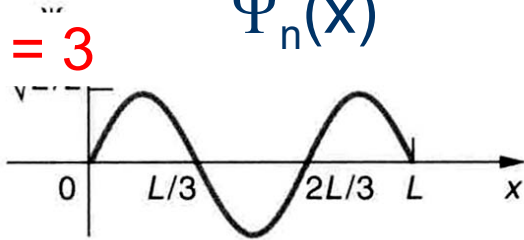
Cząstka w studni potencjału - wnioski

$\Psi_n(x)$

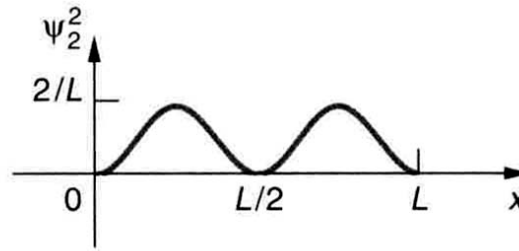
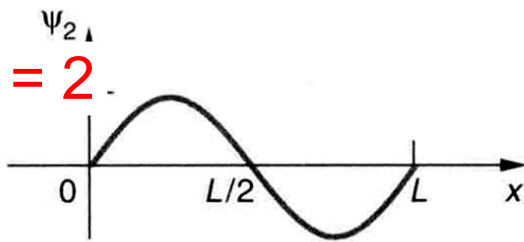
$\Psi_n^2(x)$

Energia kwantowana

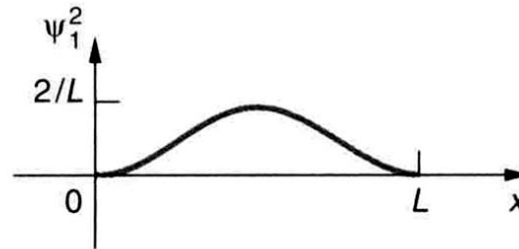
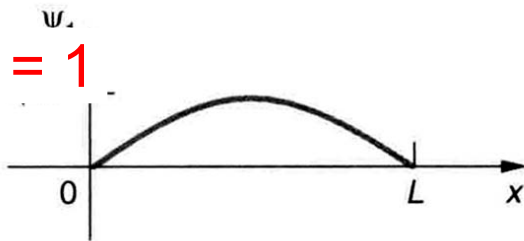
$n = 3$



$n = 2$

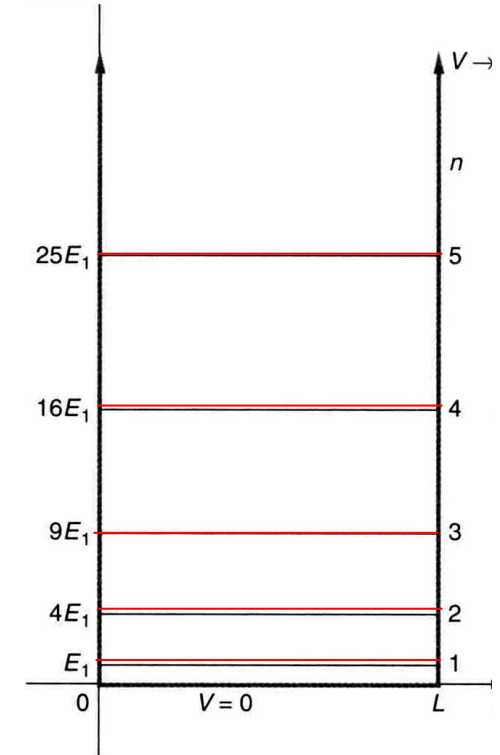


$n = 1$



postać funkcji falowej dla studni potencjału

gęstość prawdopodobieństwa
znalezienia cząstki



„poziomy energetyczne” cząstka
ma tylko określone energie

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8ma^2} = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$$

Znaczenie: np. Jeśli elektron będzie uwięziony w dość małym obszarze to będzie miał tylko “dyskretne” wartości energii. Tak np. jest w atomie gdzie elektron wiązany jest siłą elektrostatyczną z jądrem atomowym

Studnia potencjału o skończonych wymiarach

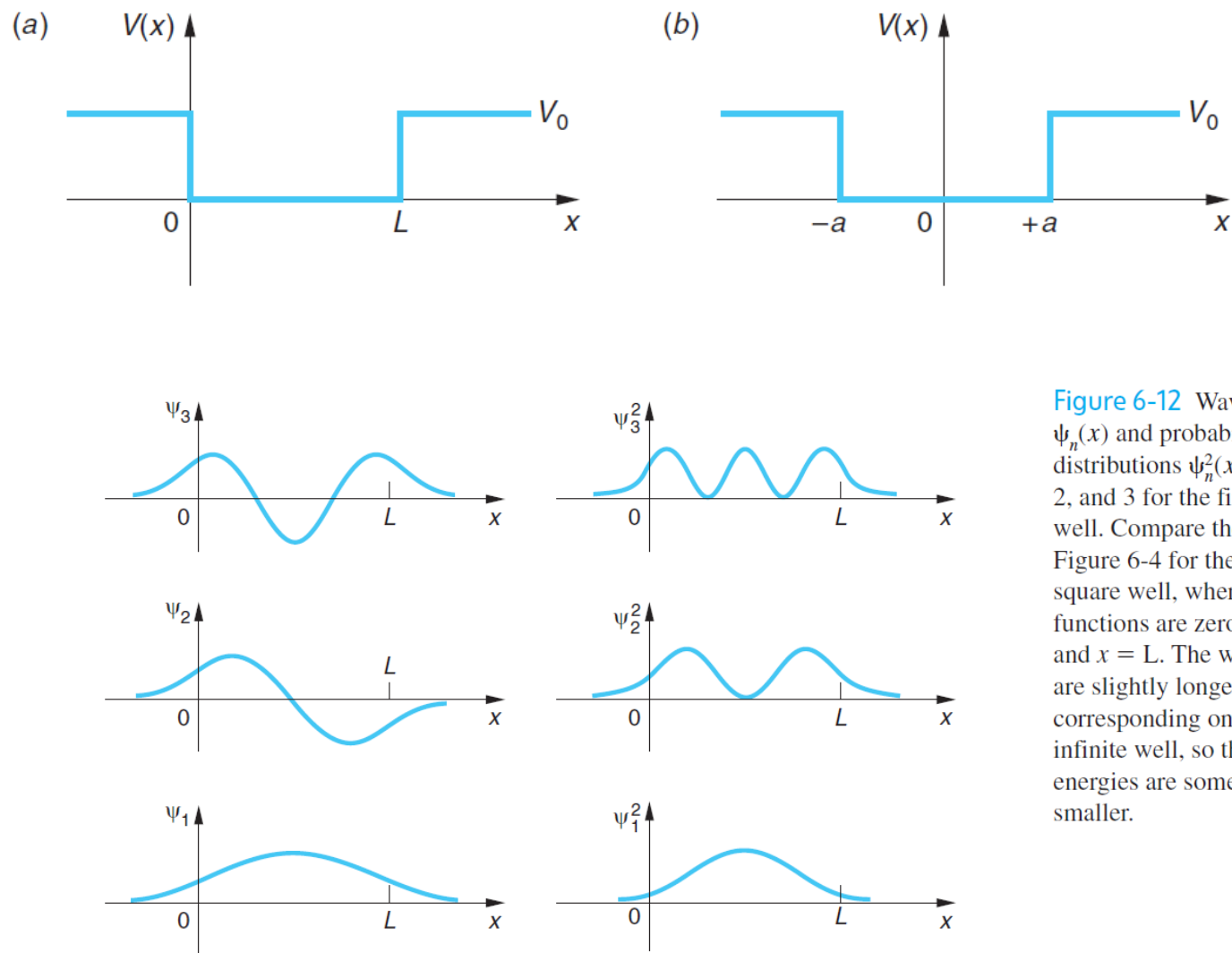


Figure 6-12 Wave functions $\psi_n(x)$ and probability distributions $\psi_n^2(x)$ for $n = 1, 2$, and 3 for the finite square well. Compare these with Figure 6-4 for the infinite square well, where the wave functions are zero at $x = 0$ and $x = L$. The wavelengths are slightly longer than the corresponding ones for the infinite well, so the allowed energies are somewhat smaller.