

# Podstawy mechaniki kwantowej

Notatki z wykładu

24 marca 2025

## Spis treści

<b>1</b>	<b>Historia powstania fizyki kwantowej</b>	<b>3</b>
1.1	Zapomnijmy o mechanice klasycznej . . . . .	3
1.2	Promieniowanie ciała doskonale czarnego . . . . .	3
1.3	Prawo Rayleigha-Jeansa . . . . .	3
1.4	Teoria kwantowa Plancka . . . . .	4
1.5	Efekt fotoelektryczny . . . . .	4
1.6	Widma atomowe i model Bohra . . . . .	5
<b>2</b>	<b>Funkcja falowa</b>	<b>6</b>
2.1	Eksperyment z dwoma szczelinami . . . . .	6
2.2	Eksperyment ze światłem . . . . .	6
2.3	Proste zagadnienie . . . . .	6
2.4	Funkcja falowa swobodnego elektronu . . . . .	7
<b>3</b>	<b>Stany kwantowe</b>	<b>8</b>
3.1	Właściwości światła . . . . .	8
3.2	Światło jako fala . . . . .	8
3.3	Elektron jako fala . . . . .	8
3.4	Interpretacja funkcji falowej . . . . .	8
3.5	Zasada superpozycji . . . . .	8
3.6	Interpretacja fali elektronowej . . . . .	8
3.7	Zasada superpozycji w mechanice kwantowej . . . . .	9
3.8	Fala de Broglie'a . . . . .	9
3.9	Fala płaska . . . . .	9
3.10	Najprostszy obiekt fali . . . . .	9
3.11	Opis 3D . . . . .	9
3.12	Operator pędu i energii . . . . .	10
3.13	Pakiety falowe . . . . .	10
3.13.1	Transformacja Fouriera . . . . .	10
3.13.2	Interpretacja . . . . .	10
3.13.3	Energia fali . . . . .	10
3.13.4	Własności pakietów falowych . . . . .	10
3.14	Pakiet Gaussowski . . . . .	11
3.14.1	Normalizacja . . . . .	11
3.14.2	Pakiet w przestrzeni rzeczywistej . . . . .	11
3.14.3	Interpretacja . . . . .	11

3.15	Ewolucja w czasie . . . . .	11
3.16	Niepewność i interferencja . . . . .	12
3.16.1	Para czas-energia . . . . .	12
3.17	Równanie Schrödingera . . . . .	12
3.17.1	Motywacja . . . . .	12
3.17.2	Fala płaska . . . . .	12
3.17.3	Równanie Schrödingera z potencjałem . . . . .	12

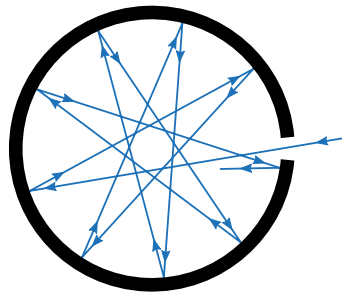
# 1 Historia powstania fizyki kwantowej

## 1.1 Zapomnijmy o mechanice klasycznej

Związek z nią będzie jasny, kiedy pójdziemy głębiej w teorię.

## 1.2 Promieniowanie ciała doskonale czarnego

Eksperyment Stefana-Boltzmann (1878) badał promieniowanie cieplne emitowane przez ciało doskonale czarne. Ciało doskonale czarne to obiekt, który pochłania całe promieniowanie i emituje je zgodnie z temperaturą.



Rysunek 1: Ciało doskonale czarne. Źródło: Wikipedia

Pokazano, że całkowita energia wypromieniowywana przez takie ciało jest proporcjonalna do czwartej potęgi jego temperatury absolutnej

$$R(T) = \sigma T^4,$$

gdzie  $R$  to moc promieniowania na jednostkę powierzchni,  $T$  to temperatura w kelwinach, a  $\sigma$  to stała Stefana-Boltzmann.

Całkowita moc promieniowania to

$$R(T) = \int_0^\infty \rho(\lambda, T) d\lambda,$$

gdzie  $\lambda$  to długość fali, a  $\rho(\lambda, T)$  to spektralna funkcja rozkładu.

W 1893 Wien zauważył, że spektralna gęstość promieniowania nie zależy od  $\lambda$  i  $T$  osobno, ale od ich iloczynu  $\lambda T$

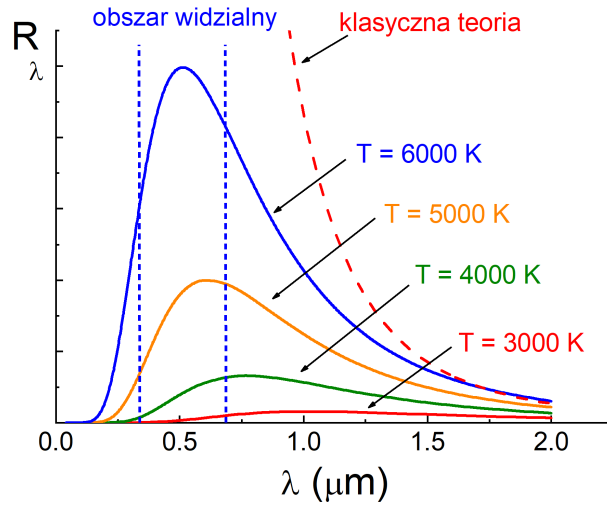
$$\rho(\lambda, T) = \lambda^{-5} f(\lambda T).$$

## 1.3 Prawo Rayleigha-Jeansa

W klasycznej elektrodynamice, promieniowanie elektromagnetyczne opisane jako fale stojące daje rozkład energii w funkcji długości fali. Liczba takich fal o długości od  $\lambda$  do  $\lambda + d\lambda$  to

$$\rho(\lambda, T) = \frac{8\pi}{\lambda^4} \cdot \bar{\epsilon},$$

gdzie  $\bar{\epsilon}$  to średnia energia takiej fali. Wzór ten jest dokładny dla długich fal, ale prowadzi do problemu z „katastrofą ultrafioletową” przy krótkich falach, co zostało skorygowane przez teorię kwantową Plancka.



Rysunek 2: Widmo promieniowania ciała doskonale czarnego w wybranych temperaturach.  
Źródło: *e-Fizyka*, AGH

## 1.4 Teoria kwantowa Plancka

W 1900 roku Planck zaproponował, że ciała emitują światło w postaci kwantów ( $\epsilon = n\epsilon_0$ )

$$\bar{\epsilon} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n\epsilon_0 \exp\left(-\frac{n\epsilon_0}{kT}\right)}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{n\epsilon_0}{kT}\right)} = \dots = \frac{\epsilon_0}{\exp\left(\frac{\epsilon_0}{kT}\right) - 1},$$

gdzie  $\epsilon_0 = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$  jest energią jednego kwantu promieniowania.

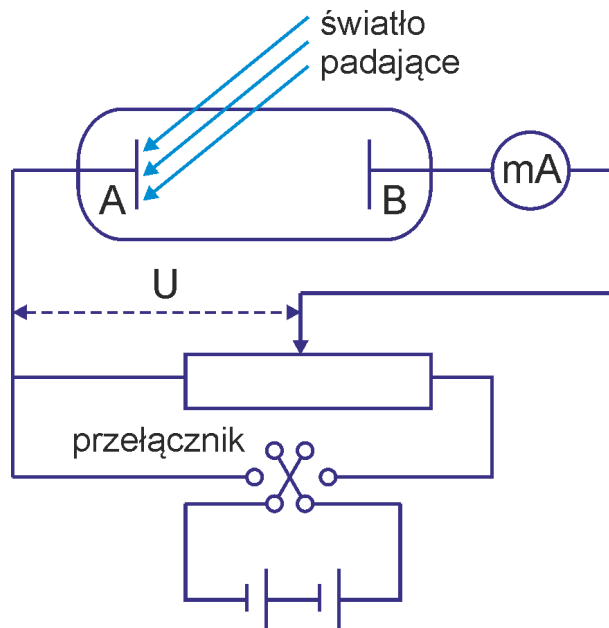
Z tego wyrażenia Planck otrzymał rozkład promieniowania w funkcji długości fali, który ma postać

$$\beta(\lambda, T) = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \cdot \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{k\lambda T}\right) - 1},$$

Wzór ten zgadza się z wynikami eksperymentalnymi, eliminując problem „katastrofy ultrafioletowej”.

## 1.5 Efekt fotoelektryczny

Efekt fotoelektryczny to zjawisko emisji elektronów z powierzchni metalu pod wpływem padającego na niego światła.



Rysunek 3: Układ do obserwacji zjawiska fotoelektrycznego. Źródło: *e-Fizyka*, AGH

W 1900 roku doświadczenia Lenarda wykazały, że energia elektronów zależy od częstotliwości światła, a nie jego intensywności. Einstein sformułował wzór efektu fotoelektrycznego

$$\frac{1}{2}mv_{\max}^2 = h\nu - W,$$

gdzie  $W$  to funkcja pracy metalu (zależna od rodzaju metalu).

## 1.6 Widma atomowe i model Bohra

Newton (1660) badał rozszczepienie światła. Melvill (1755) odkrył, że różne pierwiastki mają charakterystyczne linie widmowe. Kirchhoff (1855) zauważył, że widmo zależy od typu atomu i istnieją zarówno widma emisyjne, jak i absorpcyjne.

Balmer (1885) podał wzór:

$$\lambda = C \cdot \frac{n^2}{n^2 - 4}.$$

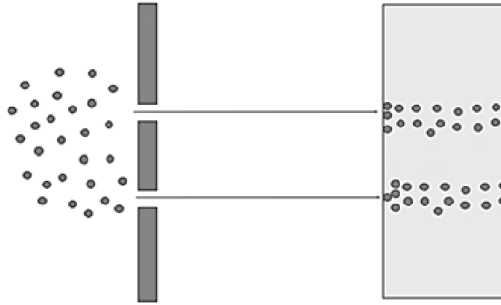
Rydberg sformułował bardziej ogólny wzór:

$$\tilde{\nu} = R_H \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right).$$

## 2 Funkcja falowa

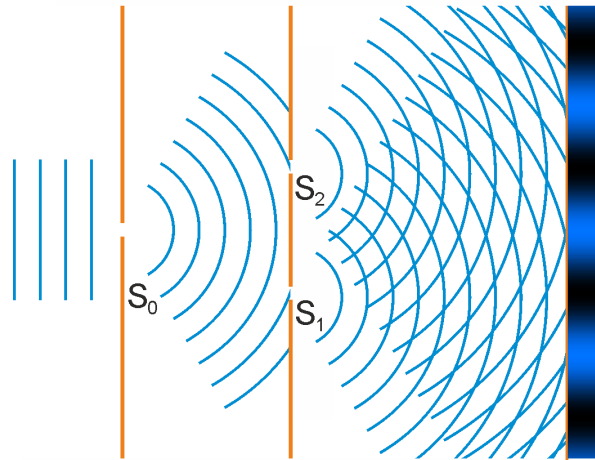
### 2.1 Eksperyment z dwoma szczelinami

Eksperyment z dwoma szczelinami to doświadczenie, w którym światło przechodzi przez dwie szczeliny i na ekranie za nimi pojawia się interferencja.



Rysunek 4: Eksperyment z dwoma szczelinami. Źródło: Ranjbar, Vahid. (2023)

### 2.2 Eksperyment ze światłem



Rysunek 5: Eksperyment z dwoma szczelinami. Źródło: e-Fizyka, AGH

Amplituda światła:  $A(\vec{r}, t)$

Intensywność światła:  $I = |A|^2$

$$I = |A_1|^2 + |A_2|^2 + A_1 A_2^* + A_1^* A_2$$

Jest to skutek superpozycji.

### 2.3 Proste zagadnienie

Amplitudy w dwóch miejscach:

$$A_1 = a_1 \exp[i(\omega t - kr_1 + \delta_1)]$$

$$A_2 = a_2 \exp[i(\omega t - kr_2 + \delta_2)]$$

Niech  $a_1 = a_2 = a$  i  $\delta_1 = \delta_2$ . Dla dużych odległości ( $D \gg d$ ), fale są płaskie:

$$r_1^2 = D^2 + \left(x + \frac{d}{2}\right)^2$$

$$r_2^2 = D^2 + \left(x - \frac{d}{2}\right)^2$$

Stąd:

$$r_1^2 - r_2^2 = 2xd$$

$$r_1 - r_2 \approx \frac{xd}{D}$$

Intensywność końcowa:

$$\begin{aligned} I &= (a \cdot e^{i\omega t})^2 \cdot [e^{-ikr_1} + e^{-ikr_2}] \\ &= 2a^2 (\cos(kr_1 - kr_2) + 1) \\ &= 2a^2 (1 + \cos(k(r_1 - r_2))) \\ &= 2a^2 \left(1 + \cos\left(\frac{2\pi}{x} \cdot \frac{xd}{D}\right)\right) \end{aligned}$$

## 2.4 Funkcja falowa swobodnego elektronu

$e^- \sim$  fala (formalna definicja później)

Niech  $\Psi(x, y, z, t) \sim A(\vec{z}, t)$ .

$|\Psi|^2 = P$  – „Intensywność” fali elektronowej, prawdopodobieństwo znalezienia elektronu w tej chwili w danym miejscu.

Dla dwóch funkcji falowych:

$$\Psi = \Psi_A + \Psi_B$$

$$P \sim |\Psi_A + \Psi_B|^2$$

Prawdopodobieństwo znalezienia elektronu w danej przestrzeni = 1. Zatem

$$\int |\Psi(z, t)|^2 dz = 1.$$

Funkcja falowa znormalizowana do jedynki. Funkcja falowa jest całkowalna kwadratowo.

Superpozycja:

$$\Psi = c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2$$

$$\Psi_1 = |\Psi_1| e^{i\alpha_1}$$

$$\Psi_2 = |\Psi_2| e^{i\alpha_2}$$

Stąd:

$$|\Psi|^2 = |c_1 \Psi_1|^2 + |c_2 \Psi_2|^2 + 2 \operatorname{Re} [c_1 c_2 \Psi_1 \Psi_2 e^{i\alpha_1 - \alpha_2}]$$

## 3 Stany kwantowe

### 3.1 Właściwości światła

Czarne ciało, gdy jest zimne, pochłania wszystkie barwy światła, ale gdy jest bardzo podgrzane, to świeci na biało.

Światło jest systemem **anonymnym**.

### 3.2 Światło jako fala

$$A(\vec{r}, t) = A_1(\vec{r}, t) + A_2(\vec{r}, t)$$

Natężenie światła wyraża się wzorem:

$$I(\vec{r}, t) = |A(\vec{r}, t)|^2$$

### 3.3 Elektron jako fala

Elektron również może być zapisany jako fala:

$$\Psi(x, y, z, t) \sim A(\vec{r}, t)$$

gdzie  $A(\vec{r}, t)$  jest amplitudą fali elektronowej.

### 3.4 Interpretacja funkcji falowej

$$|\Psi(x, y, z, t)|^2$$

jest **prawdopodobieństwem** znalezienia cząstki w danym obszarze przestrzeni w danym czasie.

Dodatkowo: -  $D$  - bok -  $\lambda$  - puls częsta -  $\lambda$  - złota zanieczyszczona

### 3.5 Zasada superpozycji

Obowiązuje zasada superpozycji (tak jak dla światła):

$$\Psi = \Psi_A + \Psi_B$$

ale:

$$|\Psi_A + \Psi_B|^2 \neq |\Psi_A|^2 + |\Psi_B|^2$$

### 3.6 Interpretacja fali elektronowej

Mamy jeden elektron, tzn. mamy jeden sygnał, więc w danym obszarze go zaobserwujemy.

Przyjmujemy, że w całej przestrzeni znalezienie elektronu jest równe 1, ponieważ mamy dokładnie jeden elektron:

$$\int |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV = 1$$

Szukamy znormowanej zadanej funkcji  $\Psi$ , tzn. dzielimy każdą funkcję przez jej normę, aby uzyskać 1.



### 3.7 Zasada superpozycji w mechanice kwantowej

$$\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$$

$$\Psi_1 = |\Psi_1|e^{i\delta_1}$$

$$\Psi_2 = |\Psi_2|e^{i\delta_2}$$

$$|\Psi|^2 = c_1^2|\Psi_1|^2 + c_2^2|\Psi_2|^2 + 2\operatorname{Re}(c_1c_2^*|\Psi_1||\Psi_2|e^{i(\delta_1-\delta_2)})$$

To definiuje interferencję.

### 3.8 Fala de Broglie'a

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

$$p = \frac{h}{\lambda}, \quad p = \hbar k$$

Gdzie: -  $E$  to energia, -  $\nu$  to częstotliwość, -  $\lambda$  to długość fali, -  $p$  to pęd cząstki.

### 3.9 Fala płaska

Równanie fali płaskiej:

$$\Psi(x, y, z, t) = A \exp(i(kx - \omega t))$$

Można również zapisać jako:

$$\Psi = A \exp\left(\frac{i}{\hbar}(px - Et)\right)$$

### 3.10 Najprostszy obiekt fali

- Stojąca fala może się zdarzyć, że nie będzie płaska. - Stojąca jednowymiarowa fala jest płaska. - Warunek brzegowy przestrzeni może być dobrany na nasz typ układu.

### 3.11 Opis 3D

Dla trzech wymiarów zapisujemy:

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

Pęd jest opisany jako:

$$p^2 = \hbar^2 k^2$$

## 3.12 Operator pędu i energii

Operator pędu w kierunku  $x$ :

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

Operator energii:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = E\Psi$$

Operator pędu w trzech wymiarach:

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar \nabla$$

## 3.13 Pakiety falowe

Zapiszmy jednowymiarową falę cząstki:

$$\Psi(x, t) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int \phi(p_x) e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x - Et)} dp_x$$

Jest to **fala płaska**.

### 3.13.1 Transformacja Fouriera

Funkcję falową w przestrzeni  $p_x$  możemy zapisać jako:

$$\phi(p_x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int e^{-\frac{i}{\hbar}p_x x} \Psi(x) dx$$

Jest to transformata Fouriera.

### 3.13.2 Interpretacja

Funkcja  $\phi(p_x)$  opisuje rozkład prawdopodobieństwa w przestrzeni pędu.

$$\int dp_x |\phi(p_x)|^2 = 1$$

co oznacza, że prawdopodobieństwo znalezienia danej wartości  $p_x$  jest znormalizowane.

### 3.13.3 Energia fali

Energia kinetyczna:

$$E = \frac{p_x^2}{2m}$$

### 3.13.4 Własności pakietów falowych

- Fala po rozmyciu, w którym kontrolujemy szerokość, to **superpozycja różnych częstotliwości**. - Determinuje interferencję oraz precyzję pomiaru.

### 3.14 Pakiet Gaussowski

Funkcja  $\phi(p_x)$  dla pakietu Gaussowskiego ma postać:

$$\phi(p_x) = C \exp\left(-\frac{(p_x - p_0)^2}{2(\Delta p_x)^2}\right)$$

gdzie  $\Delta p_x$  oznacza niepewność pędu.

#### 3.14.1 Normalizacja

$$\int |\phi(p_x)|^2 dp_x = 1$$

Współczynnik normalizacyjny:

$$C = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/4}(\Delta p_x)^{1/2}}$$

#### 3.14.2 Pakiet w przestrzeni rzeczywistej

$$\Psi(x) = \left(\frac{1}{\pi(\Delta x)^2}\right)^{1/4} e^{-\frac{x^2}{2(\Delta x)^2}}$$

Związek nieoznaczoności Heisenberga:

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

#### 3.14.3 Interpretacja

- Jeśli pakiet jest dobrze zlokalizowany (krótki) w przestrzeni, to jest źle zlokalizowany w przestrzeni pędu. - Dla podstawowego stanu nie uwzględniamy elektronów.

### 3.15 Ewolucja w czasie

Energia wyrażona przez pęd:

$$E = \frac{p_x^2}{2m}$$

Funkcja falowa w czasie:

$$\Psi(x, t) = (2\pi\hbar)^{-1/4} e^{ip_0 x/\hbar} e^{-iEt/\hbar}$$

Niepewności pędu i położenia:

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

Szczególny przypadek:

$$\Delta X \cdot C = \frac{\hbar}{2} p_x$$

Niepewność Heisenberga:

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar$$

To jest grube przybliżenie, ponieważ rzeczywistość wymaga bardziej dokładnych obliczeń.

### 3.16 Niepewność i interferencja

Jeśli suponować interferencję, to będzie wymiarowana z elektronem i obiektem.

Niepewności:

$$\Delta y \Delta p_y \geq \hbar$$

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar$$

#### 3.16.1 Para czas-energia

Transformata Fouriera:

$$\Psi(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int g(\omega) e^{-i\omega t} d\omega$$

Związek nieoznaczoności:

$$\Delta t \Delta E \geq \hbar$$

Zależność energii od częstotliwości:

$$E = \hbar\omega$$

Graficzna ilustracja nieoznaczoności czasu i energii pokazuje, że krótkie impulsy prowadzą do szerokiego rozkładu częstotliwości.

### 3.17 Równanie Schrödingera

#### 3.17.1 Motywacja

Chcemy znaleźć równanie, które będzie opisywało ewolucję fali.

Własności funkcji falowej:

- Jeśli  $\Psi_1$  i  $\Psi_2$  są rozwiązaniami, to kombinacja liniowa  $c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$  również jest rozwiązaniem.
- $\Psi(x, t)$  jest funkcją zespoloną.

#### 3.17.2 Fala płaska

$$\Psi(x, t) = Ae^{i(px-Et)/\hbar}$$

Podstawiając zależności:

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

Dla swobodnej cząstki:

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

#### 3.17.3 Równanie Schrödingera z potencjałem

W obecności potencjału  $V(x, t)$  równanie przyjmuje postać:

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