

Podstawy mechaniki kwantowej

Notatki z wykładu

24 marca 2025

Spis treści

| | | |
|----------|---------------------------------------------------|----------|
| 1 | Historia powstania fizyki kwantowej | 2 |
| 1.1 | Zapomnijmy o mechanice klasycznej | 2 |
| 1.2 | Promieniowanie ciała doskonale czarnego | 2 |
| 1.3 | Prawo Rayleigha-Jeansa | 2 |
| 1.4 | Teoria kwantowa Plancka | 3 |
| 1.5 | Efekt fotoelektryczny | 3 |
| 1.6 | Widma atomowe i model Bohra | 4 |
| 2 | Funkcja falowa | 5 |
| 2.1 | Eksperyment z dwoma szczelinami | 5 |
| 2.2 | Eksperyment ze światłem | 5 |
| 2.3 | Proste zagadnienie | 5 |
| 2.4 | Funkcja falowa swobodnego elektronu | 6 |
| 3 | Wykład 3 | 7 |
| 3.1 | Światło jako fala | 7 |
| 3.2 | Elektron jako fala | 7 |
| 3.3 | Interpretacja fali elektronowej | 7 |
| 3.4 | Fala de Broglie'a | 8 |
| 3.5 | Fala płaska | 8 |
| 3.6 | Pakiety falowe | 9 |
| 3.7 | Pakiet Gaussowski | 9 |
| 3.8 | Ewolucja w czasie | 10 |
| 3.9 | Para czas/energia | 11 |
| 3.10 | Równanie Schrödingera | 11 |

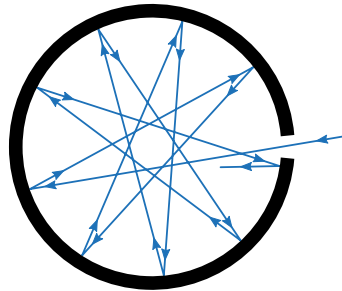
1 Historia powstania fizyki kwantowej

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 σ to stała Stefana-Boltzmann.

Całkowita moc promieniowania to

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

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

W 1893 Wien zauważył, że spektralna gęstość promieniowania nie zależy od λ i T osobno, ale od ich iloczynu λT

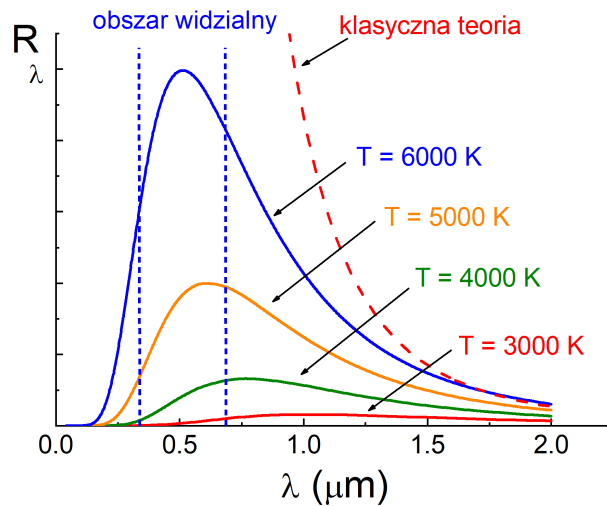
$$\rho(\lambda, T) = \lambda^{-5} f(\lambda T).$$

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 λ 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.

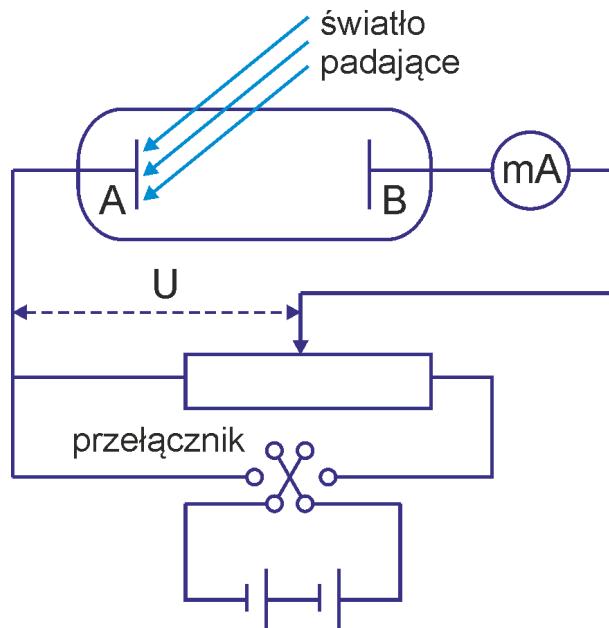
Z tego wyrażenia Planck otrzymał rozkład promieniowania w funkcji długości fali, który ma postać

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

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:

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

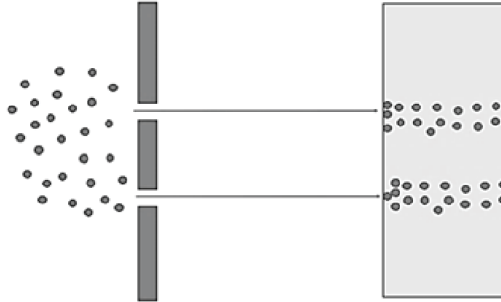
Rydberg sformułował bardziej ogólny wzór:

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

2 Funkcja falowa

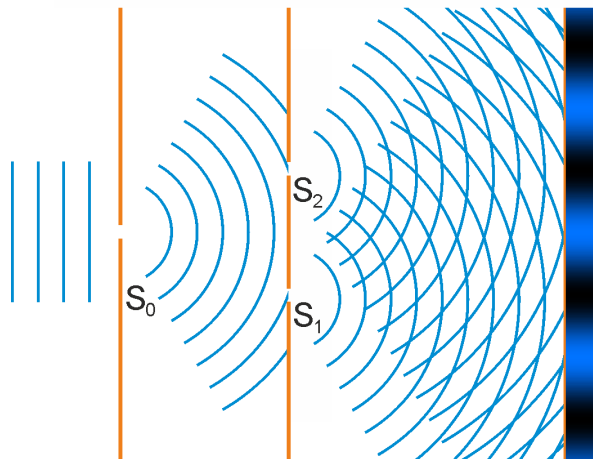
2.1 Eksperyment z dwoma szczelinami

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:

$$\begin{aligned} r_1^2 - r_2^2 &= 2xd \\ r_1 - r_2 &\approx \frac{xd}{D} \end{aligned}$$

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:

$$\begin{aligned} \Psi &= \Psi_A + \Psi_B \\ P &\sim |\Psi_A + \Psi_B|^2 \end{aligned}$$

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:

$$\begin{aligned} \Psi &= c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2 \\ \Psi_1 &= |\Psi_1| e^{i\alpha_1} \\ \Psi_2 &= |\Psi_2| e^{i\alpha_2} \end{aligned}$$

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 Wykład 3

Ciało czarne, gdy jest zimne, pochłania wszystkie barwy (światło), ale gdy jest bardzo podgrzane, to świeci na białą. Słońce jest ciałem czarnym.

3.1 Światło jako fala

Przykład dla dwóch szczelin:

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

Natężenie światła wyraża się wzorem:

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

3.2 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.

$|\Psi(\Sigma, t)|^2$ jest **prawdopodobieństwem** znalezienia cząstki w danym obszarze przestrzeni w danym czasie. Przy czym: 0 - brak cząstki, 1 - jakaś cząstka została zarejestrowana.

Obowiązuje zasada superpozycji (tak jak dla światła):

$$\Psi = \Psi_A + \Psi_B \quad P \sim |\Psi_A + \Psi_B|^2 \neq |\Psi_A|^2 + |\Psi_B|^2$$

3.3 Interpretacja fali elektronowej

Mamy jeden elektron, tzn. mamy jeden sygnał, że w danym czasie go zaobserwujemy. Prawdopodobieństwo, że w całej przestrzeni znajdziemy elektron jest równe 1.

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

Wyrażenie może być ciągłe (np. dla fali) lub dyskretne. Szukamy znormalizowanej funkcji Ψ , tzn. Ψ dzielimy/mnożymy, aby uzyskać 1.

Zasada superpozycji:

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

To definiuje interferencję.

3.4 Fala de Broglie'a

$$E = h\nu, \quad E = \hbar\omega$$
$$p = \frac{h}{\lambda}, \quad p = \hbar k, \quad k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

Gdzie:

- E to energia,
- ν to częstotliwość,
- λ to długość fali,
- p to pęd cząstki,
- k jest wektorem, który opisuje kierunek i długość fali.

3.5 Fala płaska

Równanie fali płaskiej:

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

Można również zapisać jako:

$$\Psi = A \exp\left(\frac{i}{\hbar}(p_x x - E(p_x)t)\right)$$

- W zależności od położenia rzeczywista część to cosinus i to jest zwykła fala.
- Najprostszy obiekt jaki możemy mieć.
- Stojąca fala może się zdarzyć, że nie będzie płaska.
- Stojąca jednowymiarowa fala jest płaska.
- Kierunek przestrzeni może być dowolny, nie musi to być x .

Dla trzech wymiarów zapisujemy:

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

Pęd jest opisany jako:

$$\vec{p} \equiv \hbar \vec{k}$$

Dużym problemem jest całka po całej przestrzeni, bo jest nieskończona.

$$\partial_x: -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Psi = p_x \Psi,$$

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

Operator pędu:

$$\vec{P}_0 = -i\hbar \vec{\nabla}$$

3.6 Pakiety falowe

Zamiast jednej fali zbiór fal (jesteśmy w jednym wymiarze):

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

Wyrażenie pod całką to **fala płaska**, a $\phi(p_x)$ to funkcja określająca pakiet falowy.

Rozważmy $t = 0$, wtedy funkcję falową w przestrzeni położenia ma postać:

$$\Psi(x, 0) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(p_x) e^{\frac{i}{\hbar}p_x x} dp_x$$

Funkcję falową w przestrzeni pędu 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.

Niech $\Psi'(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{\frac{i}{\hbar}p_x x}$, wtedy:

$$\begin{aligned} \phi(p_x) &= (2\pi\hbar)^{-1/2} \int e^{\frac{-ip_x x}{\hbar}} \cdot e^{\frac{ip'_x x}{\hbar}} dx \\ &= (2\pi\hbar)^{-1/2} \int e^{\frac{i(p'_x - p_x)x}{\hbar}} dx \\ &= \delta(p'_x - p_x) \end{aligned}$$

Fala na przykład po wrzuceniu kamienia do wody to superpozycja różnych częstotliwości.

$$\int |\delta(p'_x - p_x)|^2 dp_x = \delta(0)$$

3.7 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 Δp_x oznacza szerokość pakietu, a p_0 to środek pakietu.

$$\int |\phi(p_x)|^2 dp_x = 1 = |C|^2 \pi^{1/2} (\Delta p_x)$$

Stąd:

$$C = \pi^{-\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{\Delta p_x}}$$

$$\int e^{-\alpha/\mu^2} e^{-\beta\mu^2} d\mu = \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{\frac{1/2}{\exp}} \frac{\beta^2}{4\alpha}$$

$$\begin{aligned}
\Psi(x) &= (2\pi\hbar)^{-1/2} \int e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x - E(p_x)t)} \phi(p_x) dp_x \\
&= \dots \\
&= \pi^{-1/4} \hbar^{-1/2} (\Delta p_x)^{-1/2} e^{\frac{ip_0 x}{\hbar}} e^{-(\Delta p_x)^2 x^2 / 2\hbar^2}
\end{aligned}$$

$$\left(\frac{(\Delta p_x)^2}{\hbar^2}\right) = \frac{1}{(\Delta x)^2} \quad \Delta x \Delta p_x = \hbar$$

- Jeśli pakiet jest dobrze zlokalizowany (wąski) w przestrzeni, to jest źle zlokalizowany w przestrzeni pędu.
- Jeśli jest nieskończenie szeroki to nie znajdziemy elektronu.

3.8 Ewolucja w czasie

Energia wyrażona przez pęd:

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

Funkcja falowa w czasie:

$$\begin{aligned}
\Psi(x, t) &= (2\pi\hbar)^{-1/2} \int e^{i \frac{p_x x - E(p_x)t}{\hbar}} \phi(p_x) dp_x \\
&= \pi^{-\frac{1}{4}} \left[\frac{\frac{\Delta p_x}{\hbar}}{1 + i \frac{(\Delta p_x)^2 t}{m\hbar}} \right] \exp \left[\frac{\frac{ip_0 x}{\hbar} - \left(\frac{\Delta p_x}{\hbar}\right)^2 \frac{x^2}{2} - \frac{ip_0 t}{2x\hbar}}{1 + i \frac{(\Delta p_x)^2 t}{m\hbar}} \right] \\
|\Psi(x, t)|^2 &= \pi^{-\frac{1}{2}} \left[\frac{\frac{\Delta p_x}{\hbar}}{\left[1 + i \frac{(\Delta p_x)^4 t^2}{m^2 \hbar^2}\right]^{\frac{1}{2}}} \right] \exp \left[\frac{-\left(\frac{\Delta p_x}{\hbar}\right)^2 (x - Vgt)^2}{1 + \frac{(\Delta p_x)^4 t^4}{m^2 \hbar^2}} \right]
\end{aligned}$$

Prędkość grupowa:

$$Vg = \frac{p_0}{m}$$

Rozważamy szczególny przypadek.

$$\Delta x(t) = \frac{\hbar}{\Delta p_x} \underbrace{\left[1 + \frac{(\Delta p_x)^4}{m^2 \hbar^2} t^2\right]}_B^{1/2}$$

Zawsze $B \geq 1$.

$$\Delta x \Delta p = \hbar B$$

Nierówność Heisenberga:

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

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

Interpretacja x to błąd wymiaru.

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

$$\Delta z \Delta p_z \geq \hbar$$

3.9 Para czas/energia

Transformata Fouriera:

$$\begin{cases} \Psi(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int G(\omega) e^{-i\omega t} d\omega \\ G(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \Psi(t) e^{i\omega t} dt \end{cases}$$

Stąd

$$\Delta\omega\Delta t \geq 1$$

Związek nieoznaczoności:

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

Zależność energii od częstotliwości:

$$E = \hbar\omega$$

3.10 Równanie Schrödingera

Motywacja: chcemy znaleźć równanie, które będzie opisywało ewolucję fali.

$$\begin{cases} \Psi_1 - \text{rozwiązanie} \\ \Psi_2 - \text{rozwiązanie} \end{cases} \Rightarrow c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2 - \text{rozwiązanie}$$

Rozwiązanie równania Schrödingera jest liniowe. Ψ musi posiadać pierwszą pochodną.

Fala płaska:

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

$$\frac{\partial}{\partial x} - i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Psi = p_x \Psi \xrightarrow{\frac{\partial}{\partial x}} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2} \Psi = -\frac{2mE}{\hbar^2} \Psi$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{-iE\Psi}{\hbar}$$

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

Interpretacja:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \sim p_x \Rightarrow \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \sim E_{\text{kin}}$$

Gdy dodamy potencjał $V(x, t)$:

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

Gdy $V(x, t) = 0$ to mamy rozwiązanie. W trzech wymiarach:

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

Jest to równanie Schrödingera.