Podstawy mechaniki kwantowej

Pytania na kolokwium

15 czerwca 2025

Lista 1

1. Jaka jest różnica między przestrzenią Hilberta a przestrzenią fizyczną?

Przestrzeń Hilberta to abstrakcyjna, zespolona przestrzeń wektorowa z iloczynem skalarnym, która jest kompletna względem normy indukowanej przez ten iloczyn. Przestrzeń fizyczna natomiast to rzeczywista przestrzeń, w której istnieją obiekty fizyczne — np. przestrzeń trójwymiarowa, w której mogą znajdować się cząstki. Przestrzeń Hilberta opisuje możliwe stany kwantowe, a przestrzeń fizyczna lokalizację i ewolucję obiektów w klasycznym sensie.

2. Czym jest operator liniowy w mechanice kwantowej?

Operator liniowy $\hat{A}$ to odwzorowanie działające na wektory przestrzeni Hilberta postaci

$$\hat{A}:\, \mathcal{D}(\hat{A}) \subseteq \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}, \qquad \hat{A}\Big(\alpha\,|\psi\rangle + \beta\,|\phi\rangle\Big) = \alpha\,\hat{A}\,|\psi\rangle + \beta\,\hat{A}\,|\phi\rangle\,,$$

dla wszystkich $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ i $|\psi\rangle\,, |\phi\rangle \in \mathcal{D}(\hat{A})$, gdzie $\mathcal{D}(\hat{A})$ to dziedzina operatora $\hat{A}$.

3. Zdefiniuj operator hermitowski.

Operator (samosprzężony) Hermitowski $\hat{H}$ spełnia

$$\langle\phi|\hat{H}|\psi\rangle = \Big\langle\hat{H}\phi\Big|\psi\Big|,\Big\rangle \qquad \forall\ |\psi\rangle\,, |\phi\rangle \in \mathcal{D}(\hat{H}),$$

czyli $\hat{H} = \hat{H}^\dagger$, gdzie $H^\dagger$ to sprzężenie hermitowskie operatora $\hat{H}$. W bazie dyskretnej oznacza to równość macierzy z jej sprzężeniem hermitowskim: $H_{ij} = H^*_{ji}$.

4. Jakie wielkości fizyczne odpowiadają operatorom hermitowskim?

Każdej mierzalnej wielkości fizycznej przypisujemy operator Hermitowski.

- energia – hamiltonian $\hat{H}$,
- pęd $\hat{\mathbf{p}}$,
- położenie $\hat{\mathbf{r}}$,
- moment pędu i spin $\hat{\mathbf{L}}$,
- spin $\hat{\mathbf{S}}$
- liczba cząstek $\hat{N}$,
- itd

Hermitowskość gwarantuje, że wyniki pomiaru (wartości własne) są rzeczywiste, a odpowiadające im wektory własne tworzą bazę przestrzeni stanów.

5. Czym są wartości własne i wektory własne w kontekście pomiarów kwantowych?

Dla operatora $\hat{A}$ równanie

$$\hat{A}\,|a_n\rangle = a_n\,|a_n\rangle$$

definiuje pary $(a_n, |a_n\rangle)$ zwane odpowiednio wartościami własnymi i wektorami własnymi. W kontekście pomiarów: a to możliwy wynik pomiaru obserwabli reprezentowanej przez $\hat{A}$, a $|a\rangle$ to stan własny układu, w którym pomiar tej wielkości zawsze da wynik a.

6. Jakie jest fizyczne znaczenie iloczynu skalarnego w przestrzeni Hilberta?

Iloczyn skalarny $\langle\phi|\psi\rangle$ dostarcza amplitudę przejścia (nakładania) między stanami $|\psi\rangle$ i $|\phi\rangle$. Jego moduł podniesiony do kwadratu daje prawdopodobieństwo znalezienia układu w stanie $|\phi\rangle$, jeśli przygotowano go w stanie $|\psi\rangle$,

$$P_{\psi\to\phi} = |\,\langle\phi|\psi\rangle\,|^2.$$

Iloczyn skalarny pozwala również definiować normę ($\|\psi\|^2 = \langle\psi|\psi\rangle$, normalizowaną do jedności), ortogonalność ($\langle\phi|\psi\rangle = 0$) oraz projekcje stanów.

7. Wyjaśnij znaczenie normalizacji stanów kwantowych.

Normalizacja oznacza, że całkowite prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w całej przestrzeni wynosi 1:

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

Nieunormowane stany można znormalizować, dzieląc je przez pierwiastek z ich normy:

$$\psi_{\text{norm}} = \frac{\psi}{\sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}}.$$

8. Co oznacza, że dwa stany kwantowe są ortogonalne?

Dwa stany ψ_1 i ψ_2 są ortogonalne, gdy ich iloczyn skalarny jest zerowy:

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0.$$

Oznacza to, że są całkowicie rozróżnialne (np. stany własne różnych wartości własnych hermitowskiego operatora).

9. Wyjaśnij pojęcie superpozycji stanów.

Superpozycja to sytuacja, w której stan jest kombinacją liniową innych stanów:

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

Prawdopodobieństwo zależy od interferencji tych składników.

10. Jakie są relacje komutacyjne operatorów położenia i pędu?

Operatory $\hat{x}$ i $\hat{p}$ spełniają relację:

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

Jest to podstawa zasady nieoznaczoności Heisenberga dla położenia i pędu.

11. Co oznacza, że dwa operatory komutują?

Operatory $\hat{A}$ i $\hat{B}$ komutują, jeśli:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0.$$

Wówczas mają wspólne stany własne i można je zmierzyć jednocześnie z dowolną precyzją.

12. Czym jest pełny układ bazowy w przestrzeni Hilberta?

To zbiór ortonormalnych stanów, w którym każdy inny stan można przedstawić jako ich kombinację liniową:

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i|i\rangle.$$

13. Co to jest operator unitarny?

Operator liniowy w przestrzeni Hilberta, który zachowuje iloczyn skalarny.

14. Jak transformacje unitarne zachowują prawdopodobieństwo?

Transformacja unitarna U spełnia $U^\dagger U = I$, więc zachowuje iloczyn skalarny:

$$\langle\psi|\psi\rangle \xrightarrow{U} \langle\psi|U^\dagger U|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle.$$

Ponieważ norma wektora stanu (a więc suma wszystkich prawdopodobieństw) pozostaje 1, każda amplituda przejścia $|\langle\phi|\psi\rangle|^2$ również się nie zmienia – stąd prawdopodobieństwa są zachowane.

15. Wyjaśnij ewolucję czasową za pomocą operatora ewolucji.

Ewolucja czasowa stanu układu kwantowego $|\psi(t)\rangle$ jest opisywana przez operator ewolucji $U(t_2, t_1)$, który propaguje stan z czasu t_1 do t_2, zgodnie z zależnością

$$|\psi(t+\Delta t)\rangle \;=\; U\Big(t+\Delta t,\, t\Big)\,|\psi(t)\rangle.$$

16. Wyjaśnij pojęcie stanów stacjonarnych.

Stany stacjonarne to rozwiązania równania Schrödingera, w których funkcja falowa może być rozdzielona na część zależną od współrzędnych przestrzennych oraz część zależną od czasu,

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r})\, f(t)$$

i opisują dozwolone poziomy energetyczne układu.

17. Czym jest pakiet falowy?

Pakiet falowy to zbiór fal, który można opisać funkcją falową $\Psi(x,t)$ w postaci całki po różnych pędach:

$$\Psi(x,t) \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p_x)\, e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x - Et)}\, \mathrm{d}p_x,$$

gdzie $\phi(p_x)$ jest funkcją określającą kształt pakietu falowego. Przykładem jest pakiet Gaussowski, dla którego $\phi(p_x)$ ma kształt funkcji Gaussa.

18. Co oznacza transformacja Fouriera funkcji falowej i jakie ma znaczenie fizyczne?

Transformacja Fouriera funkcji falowej pozwala na przejście z reprezentacji w przestrzeni położenia $\Psi(x,0)$ do reprezentacji w przestrzeni pędu $\phi(p_x)$ i odwrotnie, co umożliwia jednoczesne opisanie stanu cząstki zarówno w kategoriach położenia, jak i pędu:

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

$$\Psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p_x)\, e^{\frac{i}{\hbar}p_x x}\, \mathrm{d}p_x.$$

19. Wyjaśnij zjawisko tunelowania kwantowego.

Źródło: Notatki.pdf, rozdz. 5 §5.3; Wikipedia *Quantum tunnelling*.

Opis zjawiska. Jeżeli cząstka (np. elektron) o energii E zbliża się do skończonej bariery potencjału wysokości V_0 i szerokości a, klasyczna fizyka przewiduje całkowite odbicie, gdy $E < V_0$. W mechanice kwantowej funkcja falowa $\psi(x)$ przenika barierę i maleje wykładniczo:

$$\psi(x) \propto e^{-\kappa x}, \qquad \kappa = \sqrt{\tfrac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}.$$

Współczynnik transmisji dla bariery jednorodnej ($\kappa a \gg 1$):

$$T \simeq e^{-2\kappa a},$$

co wyjaśnia działanie STM, α-rozpadu i prądów Josephsona.

Co oznacza co?

- m – masa cząstki,
- $\hbar$ – zredukowana stała Plancka,
- V_0, a – wysokość i szerokość bariery,
- κ – współczynnik tłumienia w barierze,
- T – prawdopodobieństwo przejścia (transmisji), z $R + T = 1$.

20. Wyjaśnij transformację Fouriera między przestrzenią położeń a pędu.

Źródło: Notatki.pdf, rozdz. 2 §2.2; Wikipedia *Momentum space*.

Pakiet falowy opisany w przestrzeni położeń $\Psi(x)$ i pędu $\phi(p)$ łączy para transformat:

$$\boxed{\Psi(x) = \tfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int \phi(p)\, e^{\frac{i}{\hbar}px} dp}, \qquad \boxed{\phi(p) = \tfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int \Psi(x)\, e^{-\frac{i}{\hbar}px} dx}.$$

Dla dowolnego t:

$$\Psi(x,t) = \tfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int \phi(p)\, e^{\frac{i}{\hbar}(px - E(p)t)} dp, \qquad E(p) = \tfrac{p^2}{2m}.$$

Symbole: x – położenie, p – pęd, $\hbar$ – stała Plancka z kreską. Nieoznaczoność $\Delta x\, \Delta p \geq \hbar/2$ wynika z tej pary transformacji.

21. Czym są stany swobodne i związane?

Źródło: Notatki.pdf, rozdz. 4; Griffiths *Introduction to QM*, ch. 2.

Swobodne: $V(x) = 0$, $\psi_k = e^{\pm ikx}$, $E = \hbar^2 k^2/2m > 0$ – widmo ciągłe.

Związane: cząstka uwięziona; normalizacja $\Rightarrow$ dyskretne $E_n < 0$. W studni nieskończonej szerokości a: $E_n = \hbar^2\pi^2 n^2/2ma^2$.

Rozproszone: $E > 0$ przy skończonym potencjale – fala padającą, odbita i transmitowana.

Symbole: $k = \sqrt{2mE}/\hbar$, $n = 1, 2, \ldots$, a – szerokość studni.

22. Jakie są warunki ciągłości dla funkcji falowej i jej pochodnych?

Źródło: Notatki.pdf, rozdz. 3 §3.1.

Dla skończonego, skokowego potencjału $V(x)$ na granicy x_0:

$$\psi(x_0^-) = \psi(x_0^+), \qquad \psi'(x_0^-) = \psi'(x_0^+).$$

Dla bariery nieskończonej: $\psi = 0$ na krawędzi, pochodna może skakać.

23. Co to jest operator momentu pędu?

Źródło: Wikipedia *Angular momentum operator*; Cohen-Tannoudji, vol. 1, ch. 7.

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar(\mathbf{r} \times \nabla),$$
$$\hat{L}_x = -i\hbar(y\partial_z - z\partial_y), \quad \hat{L}_y = -i\hbar(z\partial_x - x\partial_z), \quad \hat{L}_z = -i\hbar(x\partial_y - y\partial_x).$$

Symbole: $\mathbf{r} = (x, y, z)$, ∇ – operator nabla.

24. Jakie są relacje komutacyjne dla składników momentu pędu?

Źródło: Wikipedia *Angular momentum operator*; Sakurai *Modern QM*, §3.3.

Składowe nie komutują:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z, \quad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x, \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y.$$

Całkowity moment $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ komutuje z każdą składową: $[\hat{L}^2, \hat{L}_i] = 0$.

Konsekwencje:

- Można jednocześnie diagonalizować $\hat{L}^2$ i $\hat{L}_z$.
- Wartości własne: $\hat{L}^2|l,m\rangle = \hbar^2 l(l+1)|l,m\rangle$, $\hat{L}_z|l,m\rangle = \hbar m|l,m\rangle$.
- Liczby kwantowe: $l = 0, 1, 2, \ldots$ oraz $m = -l, \ldots, l$.

25. Jakie są wartości własne L^2 i L_z?

$$L^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm},$$
$$L_z Y_{lm} = \hbar m Y_{lm},$$

gdzie:

- $Y_{lm}(\theta, \phi)$ – sferyczna funkcja harmoniczna,
- $\hbar$ – zredukowana stała Plancka, $\hbar = \frac{h}{2\pi}$,
- $l \in \{0, 1, 2, \ldots\}$ – główna (orbitalna) liczba kwantowa,
- $m \in \{-l, -l+1, \ldots, l\}$ – magnetyczna liczba kwantowa.

26. Jaki jest związek między funkcjami Y_{lm} a momentem pędu?

Funkcje $Y_{lm}(\theta, \phi)$ to sferyczne funkcje harmoniczne. Są funkcjami własnymi operatorów momentu pędu. Funkcje Y_{lm} opisują część kątową funkcji falowej w układach sferycznie symetrycznych, np. w atomie wodoru.

27. Co to jest obrót w przestrzeni i jak działa na funkcje falowe?

Obrót w przestrzeni to transformacja układu współrzędnych (lub funkcji) polegająca na obróceniu obiektów względem punktu (zwykle początku układu współrzędnych) o pewien kąt wokół wybranej osi. Stan układu opisuje funkcja falowa $\psi(\vec{r})$. Obrót przestrzeni wpływa na sposób, w jaki ta funkcja jest rozłożona w przestrzeni.

28. Co to jest moment własny (spin)?

Moment własny, czyli **spin**, to wewnętrzna, kwantowa forma momentu pędu cząstki. Spin jest cechą wrodzoną cząstki i nie wynika z jej ruchu w przestrzeni. Opisywany jest operatorem $\vec{S}$. Na przykład cząstka w eksperymencie Sterna-Gerlacha ma spin $s = 1$, więc może przyjmować trzy stany spinu: $m_s = -1, 0, +1$.

29. Jakie są wartości dozwolone dla spinu cząstki?

Spin cząstki, może przyjmować wartości:

$$s \in \left\{0, \tfrac{1}{2}, 1, \tfrac{3}{2}, 2, \ldots\right\}.$$

30. Czym są macierze Pauliego?

Macierze Pauliego to zestaw trzech specjalnych macierzy 2×2, oznaczanych zwyczajowo jako σ_x, σ_y oraz σ_z. Stanowią one podstawę do opisu operatorów spinu dla cząstek o spinie $\frac{1}{2}$. Mają postać:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Pozwalają na opis stanów spinu i ich transformacji, m.in. w eksperymentach Stern-Gerlacha czy przy analizie obrotów kwantowych.

31. Zdefiniuj operator spinowy S.

Operator spinowy S to operator kwantowomechaniczny, który opisuje wewnętrzny moment pędu cząstki (np. elektronu).

32. Co to jest doświadczenie Stern-Gerlacha i co pokazuje?

Doświadczenie polegało na przepuszczeniu wiązki atomów srebra przez niejednorodne pole magnetyczne i obserwacji obrazu wiązki na ekranie (np. kliszy). Wyniki pokazały, że moment pędu (dokładnie spin) przyjmuje wartości skwantowane — strumień się rozdziela na dwie wiązki, co odpowiada dwu stanom spinu (+1/2 lub -1/2).

33. Co to znaczy, że spin nie ma klasycznego odpowiednika?

Spin to wewnętrzna własność cząstek, która nie znajduje odzwierciedlenia w jakimś ruchu obrotowym czy obrocie ładunku, tak jak moment pędu orbitalnego. Nie można sobie go wyobrazić jak kręcącą się kulkę — to wielkość czysto kwantowa

34. Jakie są stany własne atomu wodoru?

Stany własne atomu wodoru to rozwiązania równania Schrödingera dla elektronu w polu kulombowskim jądra (protonu). Mają one ścisłą analityczną postać i są scharakteryzowane przez trzy liczby kwantowe

35. Jakie są liczby kwantowe w atomie wodoru?

wyróżniamy trzy liczby kwantowe:

- n – główna liczba kwantowa ($n = 1, 2, 3, \dots$);
- l – orbitalna liczba kwantowa ($l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$;

- m_l – magnetyczna liczba kwantowa ($m_l = -l, -(l+1), \ldots, l-1, l$);

36. Wyjaśnij degenerację poziomów energetycznych w atomie wodoru.

sytuacja, gdy kilka różnych stanów kwantowych ma tę samą energię. W przypadku atomu wodoru, stany o tym samym numerze powłoki głównej (n), ale różniących się liczbami kwantowymi orbitalnymi (l) i magnetycznymi (ml), mogą mieć tę samą energię w idealnym modelu atomu

37. Na czym polega zakaz Pauliego?

odpowiedź

38. Czym jest symetria permutacji fermionów i bozonów?

odpowiedź

39. Czym jest model Bohra?

odpowiedź

40. Czym jest energia jonizacji?

odpowiedź

41. Czym jest efekt fotoelektryczny?

odpowiedź

Lista 2

42. Na czym polega katastrofa ultrafioletowa?

Eksperyment Stefana-Boltzmanna (1878) badał promieniowanie cieplne emitowane przez ciało doskonale czarne. Ciało doskonale czarne to wyidealizowane ciało fizyczne pochłaniające całkowicie padające na nie promieniowanie elektromagnetyczne, niezależnie od temperatury tego ciała, kąta padania i widma padającego promieniowania. Według klasycznej teorii (prawo Rayleigha-Jeansa), ciało doskonale czarne powinno emitować coraz więcej energii w miarę wzrostu częstotliwości promieniowania. To prowadzi do absurdu – przy wysokich częstotliwościach (w zakresie nadfioletu i wyżej) energia promieniowania dąży do nieskończoności. Taki efekt nie występuje w rzeczywistości. Obserwacje eksperymentalne pokazały, że natężenie promieniowania nie rośnie w nieskończoność. Zgodnie z klasyczną fizyką, każda z nieskończonej liczby możliwych drgań wnęki ciała czarnego powinna otrzymywać pewną ilość energii. W rezultacie całkowita energia promieniowania miałaby być nieskończona – co jest fizycznie niemożliwe.

Katastrofa nadfioletowa była jednym z pierwszych dowodów, że klasyczna fizyka nie wystarcza do opisu zjawisk mikroświata. Jej rozwiązanie zapoczątkowało mechanikę kwantową.

43. Jakie są eksperymentalne dowody tego, że światło istnieje, się emituje oraz jest absorbowane porcjami (kwantami)?

Efekt fotoelektryczny (Hertz, Lenard, Einstein — 1887-1905) to jedno z najważniejszych i najwcześniejszych zjawisk potwierdzających, że światło oddziałuje z materią w sposób kwantowy.

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

- Elektrony są emitowane tylko wtedy, gdy częstotliwość światła przekracza pewną wartość progową, niezależnie od jego natężenia.
- Energia kinetyczna wybitych elektronów zależy od częstotliwości, a nie od intensywności światła.
- Nie obserwuje się opóźnienia czasowego emisji nawet przy bardzo słabym świetle, jeśli tylko ma ono odpowiednią częstotliwość.

Einstein sformułował wzór efektu fotoelektrycznego

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

gdzie W to funkcja pracy metalu (zależna od rodzaju metalu). Dowodzi to kwantyzacji: Elektron absorbuje energię światła w całości – nie stopniowo, lecz jednorazowo, jako pojedynczy kwant (foton).

44. Przedyskutuj zjawisko interferencji fal

Zjawisko interferencji fal polega na nakładaniu się dwóch lub więcej fal w przestrzeni, prowadzącym do wzmocnienia lub osłabienia amplitudy fali wypadkowej w danym punkcie.

W roku 1801 Thomas Young przeprowadził eksperyment, przepuszczając przez szczeliny światło. Przez dwie szczeliny przechodziła tak zwana fala płaska, poruszająca się w kierunku ekranu. W sensie optyki klasycznej albo termodynamiki klasycznej, możemy powiedzieć, że przykładowo światło słoneczne jest taką falą płaską. Ta fala płaska przechodzi przez szczeliny, a następnie dalej jako fala płaska przemieszcza się w kierunku oddalonego ekranu. Co zobaczymy na ekranie? Na ekranie zobaczymy coś niespodziewanego - będzie to obraz interferencyjny.

- Amplituda fali – wektor zależny od położenia w przestrzenii oraz od czasu:

$$A(\overline{r}, t)$$

- Intensywność światła

$$I = |A|^2$$

- Zasada superpozycji – aby obliczyć amplitudę całkowitą musimy zsumować amplitudy fal pochodzących z obu szczelin (z obu źródeł):

$$\overline{A}(\overline{r}, t) = \overline{A}_1(\overline{r}, t) + \overline{A}_2(\overline{r}, t)$$

- Intensywność całkowita ma postać

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

Człon $A_1 A_2^* + A_1^* A_2$ jest odpowiedzialny za interferencję. Obraz widoczny na ekranie jest spowodowany superpozycją fal pochodzących z obu szczelin.

45. Czym są pakiety falowe? Problem normalizacji, przekształcenia pomiędzy przestrzenią położenia oraz przestrzenią pędu.

Pakiet falowy to reprezentacja cząstki jako superpozycji fal o różnych długościach fali. Wyraża się poprzez transformatę Fouriera jako suma fal płaskich.

W jednym wymiarze:

$$\Psi(x, t) = (2\pi\hbar)^{-\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(p) \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(px - E(p)t)} \mathrm{d}p,$$

gdzie wyrażenie pod całką to fala płaska, a $\phi(p)$ to funkcja określająca pakiet falowy.

W mechanice kwantowej funkcja falowa musi spełniać warunek normalizacji:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, t)|^2 \mathrm{d}x = 1,$$

co oznacza, że całkowite prawdopodobieństwo znalezienia cząstki gdziekolwiek = 1.

Problem w tym, że fala płaska jest nienormalizowalna, bo jej wartość jest stała na całej osi x, nie da się jej sprowadzić do jednostkowego prawdopodobieństwa.

Rozwiązanie: Używamy pakietów falowych, czyli superpozycji fal płaskich o różnych p, które są lokalizowane w przestrzeni i dają się znormalizować.

Reprezentacja pędowa jest transformatą Fouriera funkcji falowej w położeniu:

$$\phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) \mathrm{e}^{-\frac{ipx}{\hbar}} \mathrm{d}x.$$

Funkcja falowa wyraża się więc przez odwrotną transformatę Fouriera reprezentacji pędowej:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(p) \mathrm{e}^{\frac{ipx}{\hbar}} \mathrm{d}p.$$

46. Stany kwantowe, operatory oraz równanie Schrödingera w interpretacji Feynmana

(z różnych źródeł, fiszek fishcards, chatu, notatek) **Stan kwantowy** to matematyczny opis systemu kwantowego, który zawiera wszystkie informacje o jego właściwościach. *Podstawowe elementy stanu kwantowego:*

- *Funkcja falowa* $\Psi(\mathbf{r}, t)$ lub ogólniej wektor stanu $|\psi\rangle$ w przestrzeni Hilberta.
- *Przestrzeń Hilberta* $\mathcal{H}$ – zespolona przestrzeń wektorowa z iloczynem skalarnym, w której żyją wektory stanu.

Rodzaje stanów:

- Stan czysty
- Stan mieszany *Superpozycja* to możliwość istnienia jednocześnie w wielu stanach bazowych

Operatory Operator to matematyczny obiekt, który działa na funkcje falowe i odpowiada za pomiar wielkości fizycznych. Amplitudę że przejdziemy ze stanu $+S$ do $0R$ możemy zapisać jako

$$a = \langle\ 0R|\ldots\rangle\langle\ \ldots|\ldots\rangle\ldots\langle\ \ldots|\ldots\rangle\langle\ \ldots|+S\rangle = \langle\ 0R|A|+S\rangle$$

gdzie A to są różne operacje związane ze zbiorem urządzeń. Przez $\hat{A}$ będziemy oznaczać operator generalny. Możemy też zapisać macierz operatora $\hat{A}$. Niech $|+S\rangle$, $|0S\rangle$, $|-S\rangle$ będą stanami naszej bazy. Wtedy mamy

	$+$	0	$-$
$+$	$\langle\ +\|\hat{A}\|+\rangle$	$\langle\ +\|\hat{A}\|0\rangle$	$\langle\ +\|\hat{A}\|-\rangle$
0	$\langle\ 0\|\hat{A}\|+\rangle$	$\langle\ 0\|\hat{A}\|0\rangle$	$\langle\ 0\|\hat{A}\|-\rangle$
$-$	$\langle\ -\|\hat{A}\|+\rangle$	$\langle\ -\|\hat{A}\|0\rangle$	$\langle\ -\|\hat{A}\|-\rangle$

Powyższe nazywamy macierzą operatora $\hat{A}$ w bazie takiej jak wyżej podanej. Dajemy też czapkę nad operatorem aby zawsze było wiadomo że chodzi nam o operator, ale nie zawsze trzeba to pisać. Operator nigdy nie jest zależny od bazy ale macierz operatora zawsze jest w jakiejś bazie. *Najważniejsze operatory w mechanice kwantowej*

1. **Operator Hamiltona** $\hat{H}$
   Opisuje całkowitą energię układu i steruje jego ewolucją czasową.
2. **Operator położenia** $\hat{x}$
   Przypisuje wartość położenia cząstki.
3. **Operator pędu** $\hat{p}$
   Odpowiada wartości pędu, w reprezentacji położenia jest operatorem różniczkowym.

4. **Operatory spinowe** $\hat{S}_i$ (np. $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$)
   Opisują własności spinowe cząstek, np. spinu 1/2.

5. **Operator projekcji** $\hat{P}$
   Rzutuje stan na podprzestrzeń odpowiadającą określonej wartości pomiaru.

6. **Operator unitarny** $\hat{U}$
   Opisuje ewolucję jednostkową i zmiany baz wektorów stanu.

7. **Operator gęstości** ρ
   Opisuje stan mieszany i statystyczny układ kwantowy.

Równanie Schrödingera w interpretacji Feynmana nie wiem o co tu chodzi w notatkach jest jedynie coś nazwane „Eksperyment S-G w interpretacji Feynmana". Wkleje to ponizej ale nie wiem czy o to chodzi. Eksperyment z dwoma szczelinami. Prawdopodobieństwo, że elektron ze stanu S przejdzie do stanu X
[Stan X] $\leftarrow$ [Stan S] $= |\langle X|S\rangle|^2$ będziemy nazywać amplitudą. Amplitudę ze stanu S do stanu X możemy w tym przypadku zapisać dwojako, w postaci $\langle X|1\rangle, \langle 1|S\rangle$ jako przejścia ze stanu S do stanu 1 a następnie ze stanu 1 do stanu X, oraz analogicznie w postaci $\langle X|2\rangle, \langle 2|S\rangle$. Przepiszemy, korzystając z tych oznaczeń zasadę superpozycji. Jeżeli chcemy przejść ze stanu S do stanu X, to będziemy to zapisywać jako sumę amplitud $\langle X|S\rangle = \langle X|1\rangle\langle 1|S\rangle + \langle X|2\rangle\langle 2|S\rangle$. Jeżeli chcemy zapisać prawdopodobieństwo, to musimy obliczyć z tego moduł do kwadratu i obliczyć to wszystko w liczbach zespolonych $|\langle X|S\rangle|^2 = |[...]|^2$. *Pytanie* co oznacza superpozycja? Jeżeli chcemy obliczyć amplitudę, to jest to suma poszczególnych amplitud. Amplituda S do Z jest superpozycją przejścia przez szczeliny.

47. Twierdzenie Ehrenfesta

(notatki str. 27)

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{1}{m}\int \psi^* \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi \, d\vec{r} = \frac{1}{m}\langle \hat{p}_x\rangle.$$

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{p}_x\rangle = -\left\langle \frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle.$$

Powyższe dwa równania stanowią treść twierdzenia Ehrenfesta i pokazują, że średnie wartości położenia i pędu w mechanice kwantowej zmieniają się zgodnie z klasycznymi równaniami ruchu.

48. Obserwable, równanie Schrödingera, zależne oraz niezależne od czasu, własne stany, własne energie

Obserwable: W mechanice kwantowej **obserwabla** (ang. observable) to fizyczna wielkość, którą można zmierzyć eksperymentalnie, np. położenie, pęd, energia czy spin. Każdej obserwabli odpowiada hermitowski operator $\hat{A}$ działający na funkcje falowe przestrzeni

Hilberta. Wartość średnia obserwabli $\hat{A}$ w stanie opisanym funkcją falową $\psi(\vec{r},t)$ dana jest przez wyrażenie:

$$\langle \hat{A} \rangle = \int \psi^*(\vec{r},t)\hat{A}\psi(\vec{r},t)\, d\vec{r}.$$

Operator $\hat{A}$ musi być hermitowski, aby wartości średnie $\langle \hat{A} \rangle$ były liczbami rzeczywistymi, zgodnie z wymaganiami eksperymentu:

$$\langle \hat{A} \rangle \in \mathbb{R}.$$

Dla hermitowskiego operatora $\hat{A}$ zachodzi również

$$\langle \hat{A} \rangle = \int \psi^*(\hat{A}\psi)\, d\vec{r} = \int (\hat{A}\psi)^*\psi\, d\vec{r}.$$

Przykłady obserwabli:

- Średnia wartość położenia:

$$\langle \hat{\vec{r}} \rangle = \int \psi^*(\vec{r},t)\vec{r}\psi(\vec{r},t)\, d\vec{r}.$$

- Średnia wartość funkcji $f(\vec{r},t)$:

$$\langle f(\vec{r},t) \rangle = \int \psi^*(\vec{r},t)f(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t)\, d\vec{r}.$$

- Średnia wartość pędu (w reprezentacji położeniowej, po transformacji Fouriera):

$$\langle \vec{p} \rangle = \int \psi^*(\vec{r},t)\left(-i\hbar\vec{\nabla}\right)\psi(\vec{r},t)\, d\vec{r}.$$

Równanie Schrödingera zależne od czasu:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r},t) = \hat{H}\,\Psi(\mathbf{r},t), \tag{1}$$

gdzie hamiltonian dla jednej cząstki w potencjale $V(\mathbf{r},t)$ ma postać:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \;+\; V(\mathbf{r},t). \tag{2}$$

Poniżej zestawienie znaczenia poszczególnych symboli:

$\Psi(\mathbf{r},t)$ funkcja falowa cząstki, zależna od współrzędnych przestrzennych $\mathbf{r}$ i czasu t.

i jednostka urojona, spełniająca $i^2 = -1$.

$\hbar$ stała Plancka podzielona przez 2π, $\hbar = \frac{h}{2\pi}$.

$\frac{\partial}{\partial t}$ pochodna cząstkowa względem czasu t.

$\hat{H}$ operator Hamiltona, opisujący energię całkowitą układu.

m masa cząstki.

∇^2 operator Laplace'a

$V(\mathbf{r}, t)$ potencjał, w którym porusza się cząstka; może zależeć od położenia $\mathbf{r}$ i czasu t.

Równanie Schrödingera niezależne od czasu:

$$\hat{H}\,\psi(\mathbf{r}) = E\,\psi(\mathbf{r}),$$

gdzie

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\nabla^2 + V(\mathbf{r}).$$

Znaczenie symboli:

$\hat{H}$ operator Hamiltona (energia całkowita układu),

$\psi(\mathbf{r})$ funkcja własna (stacjonarna funkcja falowa),

E wartość własna (energia stanu),

$\hbar$ zredukowana stała Plancka ($\hbar = h/(2\pi)$),

∇^2 operator Laplace'a $\left(\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$,

$V(\mathbf{r})$ potencjał zależny od położenia $\mathbf{r}$.

własności własne energii własne Funkcje własne operatora Hamiltona $\hat{H}$, oznaczane jako $\psi_E(\vec{r})$, spełniają równanie Schrödingera $\hat{H}\psi_E = E\psi_E$, gdzie E jest odpowiadającą im wartością własną, interpretowaną jako energia stanu. Zakładamy, że funkcje $\psi_E(\vec{r})$ są unormowane

$$\int \psi_E^*(\vec{r})\psi_E(\vec{r})\,d\vec{r} = 1,$$

oraz ortogonalne względem siebie dla różnych wartości energii

$$\int \psi_E^*(\vec{r})\psi_{E'}(\vec{r})\,d\vec{r} = 0 \quad \text{dla } E \neq E'.$$

Dla $E \neq E'$ całka musi być równa zeru, czyli funkcje własne odpowiadające różnym wartościom energii są ortogonalne.

Z faktu, że operator Hamiltona jest hermitowski, wynika również, że jego funkcje własne tworzą pełną bazę przestrzeni Hilberta. Oznacza to, że każdą funkcję falową $\Psi(\vec{r}, t)$ można przedstawić jako kombinację liniową funkcji własnych Hamiltonianu

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_E C_E(t)\psi_E(\vec{r}),$$

gdzie suma biegnie po wszystkich stanach odpowiadających różnym energiom, w tym zdegenerowanym.

49. Proste zagadnienia: swobodna cząstka

Rozwiązanie równania Schrödingera dla swobodnej cząstki to fale płaskie o postaci $\Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$, gdzie k jest wektorem falowym związanym z energią kinetyczną cząstki. Energia jest zawsze nieujemna, a funkcje falowe muszą być ograniczone, co wymusza rzeczywiste wartości k.

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

gdzie:

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

$k \in \mathbb{R}$, bo inaczej mamy rozbieżne $\psi(x)$.
$E >= 0$, bo $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar^2}$, a $2m > 0$, $\hbar > 0$.

Natomiast E wyraża się wzorem:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

50. Proste zagadnienia: potencjał w kształcie schodków, bariery, studni kwadratowej

Szukamy rozwiązania równania Schrödingera dla ustalonych postaci potencjału niezależnego od czasu $V(x)$. Rozwiązujemy w tym celu równanie

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x).$$

Potencjał schodkowy

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ V_0, & x \geq 0. \end{cases}$$

Rozwiążemy równanie osobno dla $x < 0$ i $x > 0$, a na końcu połączymy te rozwiązania tak, by mogło służyć do opisu ruchu cząstek między obszarami.

Dla $x < 0$ mamy równanie $\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0$, którego rozwiązaniem ogólnym jest

$$\psi_1(x) = A\mathrm{e}^{ik_1 x} + B\mathrm{e}^{-ik_1 x}, \text{ gdzie } k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}.$$

Dla $x > 0$ mamy równanie $\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) + \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}\psi(x) = 0$, którego rozwiązaniem ogólnym jest

$$\psi_2(x) = C\mathrm{e}^{ik_2 x} + D\mathrm{e}^{-ik_2 x}, \text{ gdzie } k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}.$$

Rozwiązanie zależeć będzie zatem od tego, po której stronie wysokości schodka jest E.

1. Jeśli $0 < E < V_0$, to mamy

$$\psi_2(x) = C\mathrm{e}^{-\kappa x} + D\mathrm{e}^{\kappa x}, \text{ gdzie } \kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}.$$

   Ponieważ drugi składnik rośnie nieograniczenie wraz ze wzrostem x, musi zachodzić $D = 0$. Stałe A, B i C możemy wyznaczyć z warunków ciągłości:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0), \quad \psi_1'(0) = \psi_2'(0).$$

   Mamy więc

$$A + B = C, \quad ik_1(A - B) = -\kappa C$$

   Otrzymaliśmy układ dwóch równań liniowych na trzy nieznane zespolone amplitudy. Wyznaczymy A i B w zależności od C.

$$A = \frac{k_1 + i\kappa}{2k_1}C, \quad B = \frac{k_1 - i\kappa}{2k_1}C.$$

   Wynika stąd, że

$$\frac{B}{A} = \mathrm{e}^{i\alpha}, \quad \alpha = 2\arctan\left(-\sqrt{\frac{V_0}{E} - 1}\right).$$

   Fala odbita różni się od fali padającej przesunięciem fazowym α, co wpływa na interferencję i kształt fali stojącej w obszarze $x < 0$. Współczynnik odbicia to

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = |\mathrm{e}^{i\alpha}|^2 = 1,$$

   a zatem zachodzi całkowite odbicie od schodka i nie ma przenikania do obszaru o wyższym potencjale.

2. Jeśli $E > V_0$, to $D = 0$. Jest tak, ponieważ D odpowiada amplitudzie fali biegnącej od prawej do lewej, natomiast dla $x > 0$ nie ma możliwości odbicia, ponieważ potencjał jest stały (nie ma kolejnej bariery). Pozostałe stałe wyznaczamy z warunków ciągłości:

$$A + B = C, \quad ik_1(A - B) = ik_2C,$$

   a zatem mamy

$$B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}A, \quad C = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}A.$$

   Współczynniki odbicia i przejścia to

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2 = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}}{1 + \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}}\right)^2,$$

$$T = \frac{k_2}{k_1}\frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{4\sqrt{1 + \frac{V_0}{E}}}{\left(1 - \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}\right)^2}.$$

3. Jeśli $E < 0$, równanie nie ma rozwiązań. Być może wymaga to dodatkowego wyjaśnienia, ale nie wiem jak ono dokładnie brzmi.

Bariera potencjału

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x \leq 0, \\ V_0, & 0 < x < a, \\ 0, & x \geq a \end{cases}$$

Przypadek energii ujemnej wykluczamy tak jak w poprzednim przykładzie. Musimy więc znów rozważyć dwa przypadki: $0 < E < V_0$ oraz $E > V_0$.

Zaczniemy od pierwszego z nich. Ponownie znajdujemy rozwiązanie ogólne równania Schrödingera na wszystkich trzech przedziałach.

$$\psi(x) = \begin{cases} A\mathrm{e}^{ikx} + B\mathrm{e}^{-ikx}, & x < 0, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \\ C\mathrm{e}^{ikx}, & x > a, \\ F\mathrm{e}^{\kappa x} + G\mathrm{e}^{-\kappa x}, & 0 < x < a, \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}. \end{cases}$$

Zauważmy, że nie ma składnika $D\mathrm{e}^{-ikx}$, ponieważ w obszarze $x > a$ spotkamy tylko to, co przeszło przez barierę — nie będzie tam więc cząstek poruszających się „w lewo”.

Stałe ponownie możemy wyznaczyć z warunków ciągłości $\psi(x)$ i $\psi'(x)$ w 0 i a. Można pokazać, że

$$R = \frac{1}{1 + \frac{4E(V_0 - E)}{V_0^2 \sinh^2(\kappa a)}}, \quad T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2 \sinh^2(\kappa a)}{4E(V_0 - E)}}.$$

Jeżeli zaś $E > V_0$, to

$$\psi(x) = \begin{cases} A\mathrm{e}^{ikx} + B\mathrm{e}^{-ikx}, & x < 0, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \\ C\mathrm{e}^{ikx}, & x > a, \\ F\mathrm{e}^{ik'x} + G\mathrm{e}^{-ik'x}, & 0 < x < a, \quad k' = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}. \end{cases}$$

Prowadzi to do następujących wzorów na współczynniki odbicia i przejścia:

$$R = \frac{1}{1 + \frac{4E(E - V_0)}{V_0^2 \sin^2(k'a)}}, \quad T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2 \sin^2(k'a)}{4E(E - V_0)}}.$$

Studnia kwadratowa:

Nieskończona studnia potencjału to model idealizowany, w którym cząstka jest całkowicie uwięziona między nieprzekraczalnymi barierami potencjału.

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| < a, \\ \infty, & |x| \geq a. \end{cases}$$

Funkcja falowa musi zerować się na granicach studni i poza nią, ponieważ cząstka nie może znajdować się poza nieskończonymi barierami:

$$\psi(x) = 0 \text{ dla } |x| \geq a.$$

Wewnątrz studni równanie Schrödingera opisuje swobodną cząstkę, ale z nałożonymi warunkami brzegowymi wymuszającymi dyskretną strukturę stanów energetycznych

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) = E\psi(x), & |x| < a \\ \psi(a) = \psi(-a) = 0, & \text{warunki brzegowe.} \end{cases}$$

Rozwiązaniem ogólnym równania jest funkcja

$$\psi(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx), \qquad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar^2}.$$

Uwzględnienie warunków brzegowych prowadzi do układu

$$\begin{cases} A\cos(ka) & = 0, \\ B\sin(ka) & = 0. \end{cases}$$

Ponieważ cos i sin nie mogą być jednocześnie zerami, otrzymujemy dwie klasy rozwiązań, co odpowiada symetrii funkcji falowej względem środka studni.

Przypadek I:

$$\begin{cases} B = 0 \\ \cos(ka) = 0 \end{cases} \implies \begin{cases} B = 0 \\ k = k_n = n\frac{\pi}{2a}, n = 1, 3, 5, \ldots \end{cases}$$

Mamy więc $\psi_n(x) = A_n\cos(k_n x)$. Normalizacja funkcji falowej wymusza $A_n = \frac{1}{\sqrt{a}}$:

$$\int_{-a}^{a} |\psi(x)|^2 \mathrm{d}x = 1 \implies A_n^2 \int_{-a}^{a} \cos^2(k_n x)\mathrm{d}x = 1 \implies A_n^2 a = 1 \implies A_n = \frac{1}{\sqrt{a}}$$

Przypadek II:

$$\begin{cases} A = 0 \\ \sin(ka) = 0 \end{cases} \implies \phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}}\sin(k_n x), \quad n = 2, 4, 6, \ldots.$$

Spektrum energii jest dyskretne i rośnie z kwadratem liczby kwantowej n, co oznacza, że cząstka może zajmować tylko określone poziomy energetyczne.

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n^2,$$

gdzie $L = 2a$ jest szerokością studni. Wartości k_n są ściśle powiązane z poziomami energii i określają kształt funkcji falowej w studni.

51. Proste zagadnienia: oscylator harmoniczny

Szukamy rozwiązań równania

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) + \frac{1}{2}kx^2\psi(x) = E\psi(x).$$

Wbrew nazwie podsekcji, rozwiązanie go nie jest prostym zagadnieniem. Okazuje się, że istnieje rodzina rozwiązań postaci

$$\psi_n(x) = N_n H_n(\alpha x) \mathrm{e}^{-\frac{(\alpha x)^2}{2}},$$

gdzie $\alpha = \sqrt[4]{\frac{km}{\hbar}}$, H_n to wielomiany Hermite'a, natomiast N_n jest stałą normującą, równą $\sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^n n!}}$.

Odpowiadają im wartości własne postaci $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \sqrt{\frac{k}{m}}$. Dla innych wartości energii funkcja falowa zmierza do nieskończoności przy $|x| \to \infty$.

52. Formalizm mechaniki kwantowej, postulaty

1. Postulat I: Wektor stanu

   W każdej chwili czasu t stan układu fizycznego jest określony przez wektor $|\psi(t)\rangle$ należący do pewnej przestrzeni Hilberta $\mathcal{H}$.

2. Postulat II: obserwable

   Każdej mierzalnej wielkości fizycznej $\mathcal{A}$ odpowiada obserwabla $\hat{A}$ działająca w $\mathcal{H}$ (operator hermitowski).

3. Postulat III: wyniki pomiarów — wartości własne obserwabli

   Jedynym dopuszczalnym wynikiem pomiaru wielkości fizycznej $\mathcal{A}$ może być któraś z wartości własnych obserwabli $\hat{A}$.

4. Postulat IV: prawdopodobieństwo wyników pomiarowych

   Prawdopodobieństwo tego, że w wyniku pomiaru wielkości fizycznej $\mathcal{A}$ w układzie opisanym wektorem stanu $|\psi\rangle$ otrzymamy wartość własną a_n wynosi $|\langle\phi_n|\psi\rangle|^2$, gdzie $|\phi_n\rangle$ jest wektorem własnym odpowiadającym wartości własnej a_n.

5. Postulat V: redukcja (kolaps) wektora stanu

   Jeśli w układzie fizycznym opisanym stanem $|\psi\rangle$ dokonamy pomiaru wielkości fizycznej $\mathcal{A}$ otrzymując a_n, jedną z wartości własnych obserwabli $\hat{A}$, to po pomiarze stanem układu jest unormowany rzut stanu $|\psi\rangle$ na (unormowany) wektor własny $|\phi_n\rangle$ odpowiadający zmierzonej wartości własnej.

   $$|\psi\rangle \xrightarrow{\text{pomiar } a_n} |\phi_n\rangle \frac{\langle\phi_n|\psi\rangle}{\sqrt{|\langle\phi_n|\psi\rangle|^2}}.$$

   Innymi słowy mówimy, że w wyniku pomiaru następuje redukcja (kolaps) stanu $|\psi\rangle$ do stanu $|\phi_n\rangle$.

6. Postulat VI: ewolucja w czasie — równanie Schrödingera

   Stan $|\psi(t)\rangle$ układu fizycznego ewoluuje w czasie zgodnie z równaniem Schrödingera

   $$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle,$$

   gdzie hamiltonian $\hat{H}(t)$ jest obserwablą odpowiadającą całkowitej energii układu.

53. Klasy i własności operatorów. Komutatory

W mechanice kwantowej operatory reprezentują obserwowalne wielkości fizyczne, takie jak pozycja czy pęd. Operatory działają na przestrzeni stanów (np. w przestrzeni Hilberta) i mogą mieć różne własności: być hermitowskie (samosprzężone), jednostkowe czy projekcyjne. Hermitowskie operatory odpowiadają mierzalnym wartościom rzeczywistym.

Klasa operatorów określa ich charakter (np. ograniczone, nieograniczone). Ważnym pojęciem są komutatory operatorów

$$[A, B] = AB - BA.$$

Jeśli

$$[A, B] = 0,$$

to operatory się komutują, co oznacza, że można jednocześnie mierzyć odpowiadające im wielkości z pełną precyzją. Niezerowy komutator wskazuje na fundamentalne ograniczenia pomiarowe, jak w przypadku zasady nieoznaczoności Heisenberga.

54. Zasada nieoznaczoności Heisenberga

Zasada nieoznaczoności Heisenberga wyraża fundamentalne ograniczenie precyzji, z jaką można jednocześnie znać wartości pewnych par wielkości fizycznych, np. położenia $\hat{x}$ i pędu $\hat{p}$. Formalnie wyraża się to nierównością

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

gdzie Δx i Δp to odchylenia standardowe pomiarów operatorów położenia i pędu, a $\hbar$ to zredukowana stała Plancka.

Ta zasada wynika z faktu, że operatory położenia i pędu nie komutują, tzn.

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

co implikuje, że nie istnieje wspólny zbiór własnych wektorów obu operatorów, a więc nie można jednocześnie przypisać im dokładnych wartości.

55. Operator momentu pędu, uogólniony operator momentu pędu, operator spinu: własne funkcje i wartości

Operator momentu pędu $\hat{\mathbf{L}} = (\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z)$ opisuje moment pędu orbitalnego cząstki. Składowe operatora spełniają następujące relacje komutacyjne:

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{L}_k,$$

gdzie ϵ_{ijk} to symbol Levi-Civity, a $i, j, k \in \{x, y, z\}$.

Operator kwadrat momentu pędu $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ oraz składowa $\hat{L}_z$ mają wspólny układ własnych funkcji $|l,m\rangle$, dla których zachodzą własności:

$$\hat{L}^2|l,m\rangle = \hbar^2 l(l+1)|l,m\rangle, \quad \hat{L}_z|l,m\rangle = \hbar m|l,m\rangle,$$

gdzie $l = 0, 1, 2, \ldots$, a $m = -l, -l+1, \ldots, l$.

Uogólniony operator momentu pędu $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$ łączy moment pędu orbitalny $\hat{\mathbf{L}}$ oraz spin $\hat{\mathbf{S}}$.

Operator spinu $\hat{\mathbf{S}}$ opisuje wewnętrzny moment pędu cząstek, niezwiązany z ruchem orbitalnym. Składowe spinu również spełniają relacje komutacyjne analogiczne do momentu pędu:

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{S}_k.$$

Dla spinu s (np. $s = \frac{1}{2}$ dla elektronu), własne wartości operatorów $\hat{S}^2$ i $\hat{S}_z$ są:

$$\hat{S}^2|s,m_s\rangle = \hbar^2 s(s+1)|s,m_s\rangle, \quad \hat{S}_z|s,m_s\rangle = \hbar m_s|s,m_s\rangle,$$

gdzie $m_s = -s, -s+1, \ldots, s$.

Własne funkcje momentu pędu i spinu tworzą bazę przestrzeni stanów kwantowych, na której można opisywać stan cząstki z uwzględnieniem zarówno ruchu orbitalnego, jak i spinu.

56. Atom wodoru: stany własne oraz energie własne

Atom wodoru opisuje równanie Schrödingera z potencjałem Coulomba:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r},$$

gdzie m to masa elektronu, e ładunek elementarny, a r odległość elektronu od jądra.

Stany własne $|n,l,m\rangle$ są jednocześnie własnymi funkcjami operatorów:

$$\hat{H}|n,l,m\rangle = E_n|n,l,m\rangle,$$

$$\hat{L}^2|n,l,m\rangle = \hbar^2 l(l+1)|n,l,m\rangle,$$

$$\hat{L}_z|n,l,m\rangle = \hbar m|n,l,m\rangle,$$

gdzie liczby kwantowe przyjmują wartości

$$n = 1, 2, 3, \ldots, \quad l = 0, 1, \ldots, n-1, \quad m = -l, -l+1, \ldots, l.$$

Energia własna jest określona wzorem:

$$E_n = -\frac{me^4}{2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2}\frac{1}{n^2} = -\frac{13.6\,\mathrm{eV}}{n^2}.$$

Energia zależy wyłącznie od głównej liczby kwantowej n, co prowadzi do degeneracji poziomów energetycznych względem liczb l i m.

57. Własności funkcji falowych bozonów oraz fermionów

W mechanice kwantowej funkcje falowe bozonów i fermionów różnią się symetrią względem zamiany dwóch identycznych cząstek:

- **Bozony** mają symetryczne funkcje falowe, tzn. przy zamianie cząstek

$$\Psi(\ldots, \mathbf{r}_i, \ldots, \mathbf{r}_j, \ldots) = +\Psi(\ldots, \mathbf{r}_j, \ldots, \mathbf{r}_i, \ldots).$$

- **Fermiony** mają antysymetryczne funkcje falowe, tzn.

$$\Psi(\ldots, \mathbf{r}_i, \ldots, \mathbf{r}_j, \ldots) = -\Psi(\ldots, \mathbf{r}_j, \ldots, \mathbf{r}_i, \ldots).$$

Antysymetria funkcji falowej fermionów prowadzi do zasady Pauliego wykluczania, która zabrania zajmowania tego samego stanu kwantowego przez dwie identyczne fermiony.

Symetria funkcji falowej bozonów pozwala na zajmowanie tego samego stanu kwantowego przez wiele cząstek, co jest podstawą efektów takich jak kondensacja Bosego-Einsteina.