Podstawy mechaniki kwantowej

Pytania na kolokwium

15 czerwca 2025

Lista 1

1.	Jaka jest różnica między przestrzenią Hilberta a przestrzenią fizyczną?		
odpowiedź			
2.	Czym jest operator liniowy w mechanice kwantowej?		
odpowiedź			
3.	Zdefiniuj operator hermitowski.		
odpowiedź			
4.	Jakie wielkości fizyczne odpowiadają operatorom hermitowskim?		
odpowiedź			
5.	Czym są wartości własne i wektory własne w kontekście pomiarów kwantowych?		
odj	powiedź		
6.	Jakie jest fizyczne znaczenie iloczynu skalarnego w przestrzeni Hilberta?		

- 7. Wyjaśnij znaczenie normalizacji stanów kwantowych.
- $odpowied\acute{z}$

 $odpowied\acute{z}$

8.	Co oznacza, że dwa stany kwantowe są ortogonalne?				
odpowiedź					
9.	Wyjaśnij pojęcie superpozycji stanów.				
odpo	odpowiedź				
10.	Jakie są relacje komutacyjne operatorów położenia i pędu?				
odpowiedź					
11.	Co oznacza, że dwa operatory komutują?				
odpowiedź					
12.	Czym jest pełny układ bazowy w przestrzeni Hilberta?				
odpo	owiedź				
13.	Co to jest operator unitarny?				
odp	owiedź				
14.	Jak transformacje unitarne zachowują prawdopodobieństwo?				
odp	owiedź				
15.	Wyjaśnij ewolucję czasową za pomocą operatora ewolucji.				
odpo	owiedź				
16.	Wyjaśnij pojęcie stanów stacjonarnych.				
odpowiedź					
17.	Czym jest pakiet falowy?				
odp	owiedź				

18.	Co oznacza transformacja Fouriera funkcji falowej i jakie ma znaczenie fizyczne?			
odpo	odpowiedź			
19.	Wyjaśnij zjawisko tunelowania kwantowego.			
odpowiedź				
20.	Wyjaśnij transformację Fouriera między przestrzenią położeń a pędu.			
odpo	wiedź			
21.	Czym są stany swobodne i związane?			
odpo	wiedź			
22.	Jakie są warunki ciągłości dla funkcji falowej i jej pochodnych?			
odpo	wiedź			
23.	Co to jest operator momentu pędu?			
odpowiedź				
24.	Jakie są relacje komutacyjne dla składników momentu pędu?			
odpowiedź				
25.	Jakie są wartości własne L^2 i L_z ?			
odpo	wiedź			
26.	Jaki jest związek między funkcjami Y_{lm} a momentem pędu?			
odpo	wiedź			
27.	Co to jest obrót w przestrzeni i jak działa na funkcje falowe?			

odpowiedź

28.	Co to jest moment własny (spin)?			
odpowiedź				
29.	Jakie są wartości dozwolone dla spinu cząstki?			
odpo	odpowiedź			
30.	Czym są macierze Pauliego?			
odpo	odpowiedź			
31.	Zdefiniuj operator spinowy S .			
odpo	owiedź			
32.	Co to jest doświadczenie Stern-Gerlacha i co pokazuje?			
odpo	owiedź			
33.	Co to znaczy, że spin nie ma klasycznego odpowiednika?			
odpo	owiedź			
34.	Jakie są stany własne atomu wodoru?			
odpowiedź				
35.	Jakie są liczby kwantowe w atomie wodoru?			
odpo	owiedź			
36.	Wyjaśnij degenerację poziomów energetycznych w atomie wodoru.			
odpowiedź				
37.	Na czym polega zakaz Pauliego?			
odpo	owiedź			

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?		
odpo	owiedź		
Lista 2			
42.	Na czym polega katastrofa ultrafioletowa?		
odpowiedź			
43.	Jakie są eksperymentalne dowody tego, że światło istnieje, się emituje oraz jest absorbowane porcjami (kwantami)?		
odpowiedź			
44.	Przedyskutuj zjawisko interferencji fal		
odpowied $\acute{\mathbf{z}}$			
45.	Czym są pakiety falowe? Problem normalizacji, przekształcenia pomiędzy przestrzenią położenia oraz przestrzenią pędu.		
odpowiedź			
46.	Stany kwantowe, operatory oraz równanie Schrödingera w interpretacji Feynmana		

odpowiedź

47. Twierdzenie Ehrenfesta

odpowiedź

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

odpowiedź

49. Proste zagadnienia: swobodna cząstka

odpowiedź

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

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

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

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$
, 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

$$\psi_2(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x}$$
, 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

$$\psi_2(x) = Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x}$$
, gdzie $\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$.

6

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

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

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 stad, że

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

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

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

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

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

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.

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & x < 0, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \\ Ce^{ikx}, & x > a, \\ Fe^{\kappa x} + Ge^{-\kappa x}, & 0 < x < a, \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}. \end{cases}$$

Zauważmy, że nie ma składnika De^{-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

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & x < 0, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \\ Ce^{ikx}, & x > a, \\ Fe^{ik'x} + Ge^{-ik'x}, & 0 < x < a, \quad k' = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}. \end{cases}$$

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.

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

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

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

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:

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

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

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

Przypadek II:

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

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

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

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

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

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

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
$$m_s = -s, -s + 1, ..., s$$
.

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

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

Energia własna jest określona wzorem:

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

Energia zależy wyłącznie od głównej liczby kwantowej n, co prowadzi do degeneracji poziomów energetycznych względem liczbl 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

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

• 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.