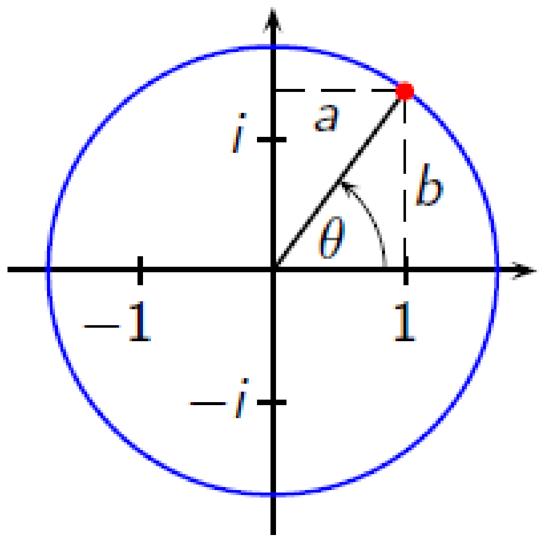
Podstawy Fizyki

dla Informatyki

Stanisław Drożdż
Katedra Informatyki PK

Liczby zespolone



Płaszczyzna liczb zespolonych

Definicje

Liczba zespolona z ma postać:
$z = a + ib$,
gdzie a, b są rzeczywiste,
i jest liczbą urojoną: $i^2 = -1$

z^* — liczba sprzężona do z:
$z^* = a - ib$

Wartość bezwzględna liczby z:
$|z| = \sqrt{z\, z^*}$

- $|z|^2 = (a+ib)(a-ib) = a^2 + b^2$
- Postać geometryczna:
  $z = |z|(\cos\theta + i\sin\theta) = |z|e^{i\theta}$

  np. pierwiastki liczby -1:
  $i = e^{i\pi/2}, \qquad -i = e^{-i\pi/2}$

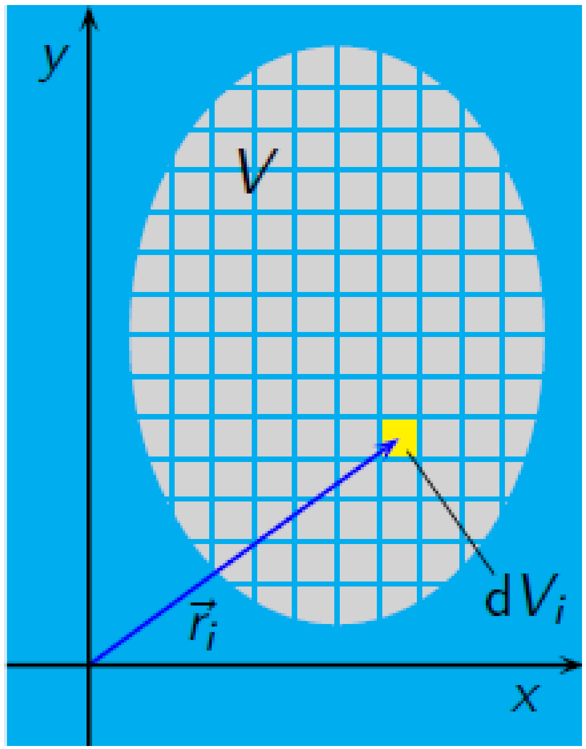
Funkcja falowa

- Fale materii opisywane są przez funkcję falową $\Psi(\vec{r}, t)$, która jest zwykle funkcją zespoloną.
- Funkcja Ψ nie ma zatem bezpośredniego sensu fizycznego, natomiast

> **Interpretacja Maxa Borna:**
>
> Prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w małej objętości $\mathrm{d}V$ wokół punktu $\vec{r}$ jest równe $|\Psi(\vec{r}, t)|^2 \,\mathrm{d}V$.

- Funkcja $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$ jest gęstością prawdopodobieństwa.

Normalizacja funkcji falowej



- Prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w dopuszczalnej przestrzeni V jest równe jedności

$$\sum_i |\Psi(\vec{r}_i, t)|^2 \mathrm{d}V_i = 1.$$

Jest to tzw. normalizacja Ψ do jedności.

- W granicy $dV_i \to 0$ otrzymujemy całkę objętościową (potrójną):

$$\lim_{\mathrm{d}V_i \to 0} \sum_i |\Psi|^2 \mathrm{d}V_i = \iiint_V |\Psi|^2 \mathrm{d}V.$$

Równanie Schrödingera

- Fale materii spełniają równanie falowe wprowadzone przez Erwina Schrödingera w 1926 r.

Równanie falowe dla cząstki o masie m:

$$\mathscr{H}\psi(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t),$$

$$\text{gdzie} \quad \mathscr{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\vec{r},t).$$

- $\mathscr{H}$ jest operatorem całkowitej energii cząstki, zwany Hamiltonianem.
- $-\hbar^2\nabla^2/(2m)$ — operator energii kinetycznej cząstki.
- $\vec{p} = -i\hbar\nabla$ — operator pędu cząstki $(E_k = p^2/2m)$.
- $\nabla = \hat{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x} + \hat{\mathrm{j}}\frac{\partial}{\partial y} + \hat{\mathrm{k}}\frac{\partial}{\partial z}, \quad \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$

Rozdzielenie zmiennych $\vec{r}$ i t

Metoda rozdzielenia zmiennych:

Jeśli energia potencjalna nie zależy jawnie od czasu, to rozwiązania równania Schrödingera szukamy w postaci:

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

- Wtedy równanie Schrödingera można przekształcić do postaci:

$$i\hbar \frac{1}{f(t)} \frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\psi(\vec{r})} \mathscr{H}(\vec{r})\psi(\vec{r}).$$

- Ta równość jest spełniona jeśli funkcje po prawej i lewej stronie są równe pewnej stałej E !

Zależność czasowa funkcji falowej

- Zatem

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t} = Ef(t) \quad \text{oraz} \quad \mathscr{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}).$$

- Równanie dla funkcji $f(t)$ możemy zapisać w formie

$$\frac{1}{f}\,\mathrm{d}f = -i\frac{E}{\hbar}\,\mathrm{d}t.$$

- Całkując obustronnie mamy:

$$\int \frac{1}{f}\,\mathrm{d}f = -i\frac{E}{\hbar}\int \mathrm{d}t\,,$$

$$\ln f = -i\frac{E}{\hbar}t + C'.$$

Stąd $f(t) = \exp(C')\,\exp(-iEt/\hbar) = C\exp(-iEt/\hbar)$.

- $|f(t)|^2 = |C|^2 \;\Rightarrow\; |f(t)|^2$ nie zależy od czasu!

Niezależne od czasu równanie Schrödingera

- Rozwiązanie równania Schrödingera, gdy operator energii potencjalnej U nie zależy od czasu, przyjmuje postać:

  $$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r})\, C \exp(-iEt/\hbar) = \psi(\vec{r}) \exp(-iEt/\hbar),$$

  gdzie stałą C włączamy do definicji funkcji $\psi(\vec{r})$.

- Funkcja $\psi(\vec{r})$ spełnia

Niezależne od czasu równanie Schrödingera:

$$\mathscr{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}).$$

- Jest to tak zwane równanie własne dla operatora energii $\mathscr{H}$.
- E jest rzeczywistą wartością własną operatora $\mathscr{H}$.
- W fizyce kwantowej wartości własne są wartościami, które obserwujemy w doświadczeniach.