

1. Równanie Schrödingera

Skoro cząstki mają mieć własności falowe, muszą być opisywane równaniem falowym

1926. E. Schrödinger proponuje równanie różniczkowe, które ma opisywać propagację fal materii: (tu w 1 wymiarze)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x, t) \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \quad \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

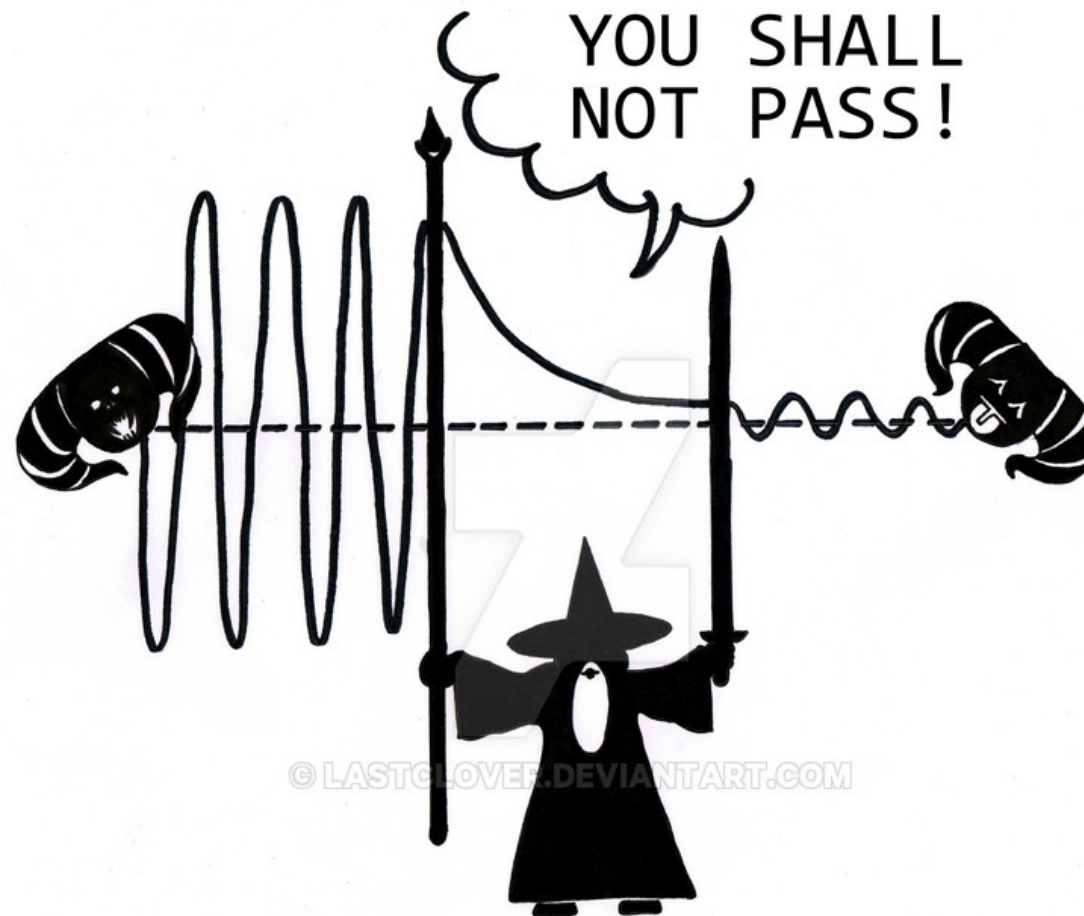
Jest to słynne równanie Schrödingera [zależne od czasu], które możemy zapisać w postaci operatorowej:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(x, t)$$

gdzie $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t)$ jest operatorem (różniczkowym) energii całkowitej układu (hamiltonianem). Formalizm ten jest analogiczny do formalizmu Hamiltona w mechanice klasycznej (alternatywa do równań Newtona)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t)$$

en.kinetyczna + en. potencjalna



Gandalf was unaware of Quantum tunnelling!

powered by Young Minds Naples

2. Postulaty mechaniki kwantowej i wynikające z nich cechy stanów kwantowych

1. Każdy układ fizyczny jest opisany przez unormowany wektor stanu należący do przestrzeni Hilberta. W reprezentacji położeniowej wektor stanu przyjmuje postać funkcji falowej, która opisuje gęstość prawdopodobieństwa znalezienia danego układu w danym stanie.
2. Każdej wielkości fizycznej A (energia, pęd, położenie) odpowiada **operator hermitowski** $\hat{A}$ działający w danej przestrzeni Hilberta
3. **Wartość własna** operatora (opisująca daną wielkość fizyczną) jest liczbą **rzeczywistą** (cecha operatorów hermitowskich)
4. Wynikiem pomiaru danej wielkości fizycznej na układzie kwantowym może być **jedynie wartość własna** operatora tej wielkości fizycznej
5. Jeżeli układ znajduje się w stanie Ψ będącym stanem **własnym** operatora $\hat{A}$ wykonując pomiar wielkości opisanej operatorem $\hat{A}$ zawsze uzyskamy tę samą wartość własną (np. pomiar energii elektronu krążącego po orbicie w stanie podstawowym atomu wodoru zawsze da $E = -13.6 \text{ eV}$).

2. Postulaty mechaniki kwantowej i wynikające z nich cechy stanów kwantowych

6. Jeśli układ **nie znajduje się w stanie własnym** danego operatora, to seria pomiarów wielkości A na identycznie przygotowanych stanach da rozkład wyników o **wartości średniej**:

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{\int \Psi^*(r) \hat{A} \Psi(r) dV}{\int \Psi^*(r) \Psi(r) dV}$$

czynniki normujące wzór jak dla średniej liczonej dla ciągłego rozkładu prawdopodobieństwa

7. Prawdopodobieństwo **uzyskania** w wyniku pomiaru w stanie Ψ wielkości A o **konkretnej wartości** a_1 opisywanej funkcją własną ϕ_{a_1} wynosi (zakładamy unormowane funkcje):

$$p(A = a_1) = |\langle \phi_{a_1} | \Psi \rangle|^2 = \left| \int \phi_{a_1}^*(r) \Psi(r) dV \right|^2$$

8. Dwie wielkości fizyczne są **współmieralne**, jeśli **komutator** ich operatorów $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$. A i B mają wówczas **wspólny układ** wektorów/funkcji własnych.

2. Postulaty mechaniki kwantowej i wynikające z nich cechy stanów kwantowych

9. Ewolucję czasową stanu kwantowego opisuje zależne od czasu równanie Schrödingera:

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

3. Funkcja falowa

Interpretacja probabilistyczna (Max Born)

Rozwiązanie RS dla danego układu fizycznego (np. elektron w atomie) daje nam funkcję falową oraz energię danego stanu kwantowego rozważanego układu.

„Wystarczy” rozwiązać RS

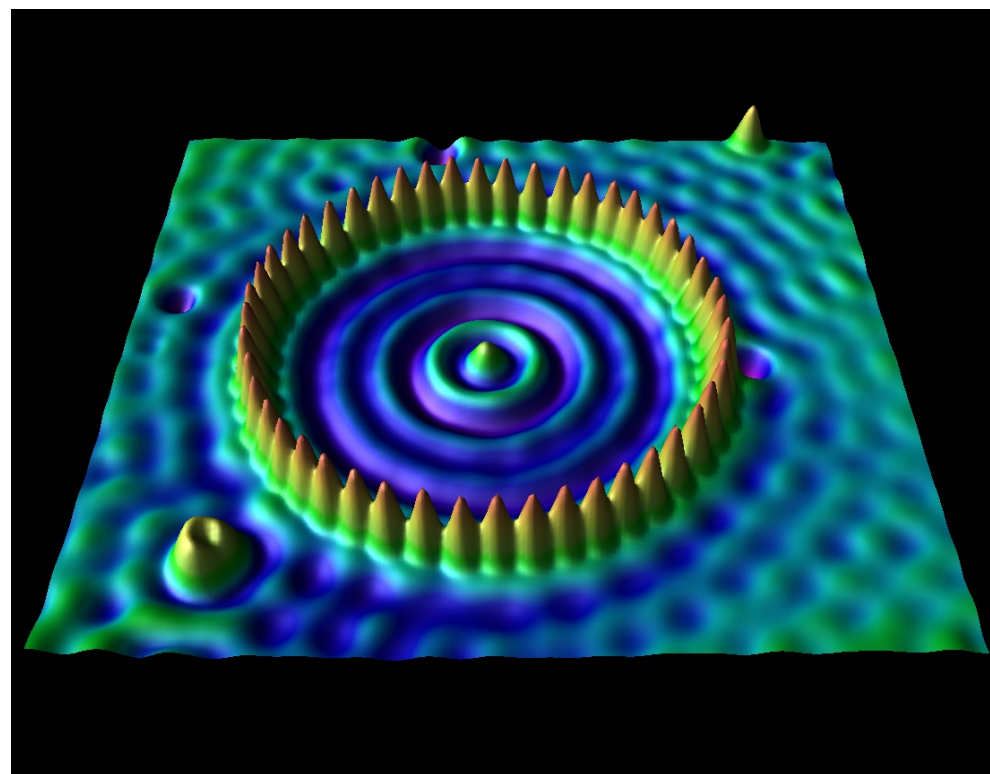
Czym jest funkcja falowa? Kwadrat modułu to **gęstość prawdopodobieństwa** P znalezienia cząstki w danym obszarze

$$P(x, t) dx = \Psi^*(x, t)\Psi(x, t) dx = |\Psi(x, t)|^2 dx$$

Prawdopodobieństwo, że cząstka jest gdziekolwiek = 1 (unormowanie f. falowej).

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*\Psi dx = 1$$

F. falowa musi być więc ciągła (z ciągłą pochodną) i skończona (normowalna).

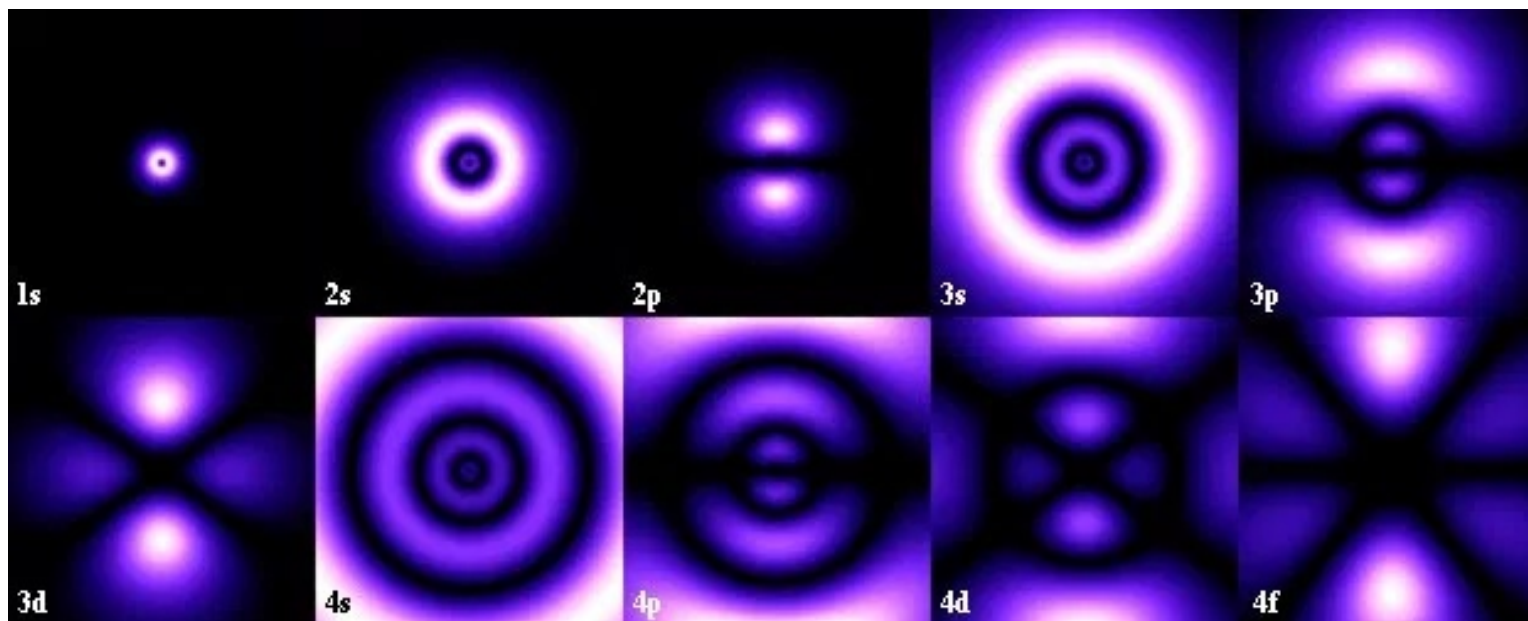


48 atomów żelaza na powierzchni Cu
 Falowe zachowanie elektronów
 obraz z STM © IBM Almaden Visualization Lab

3. Funkcja falowa

Interpretacja probabilistyczna (Max Born)

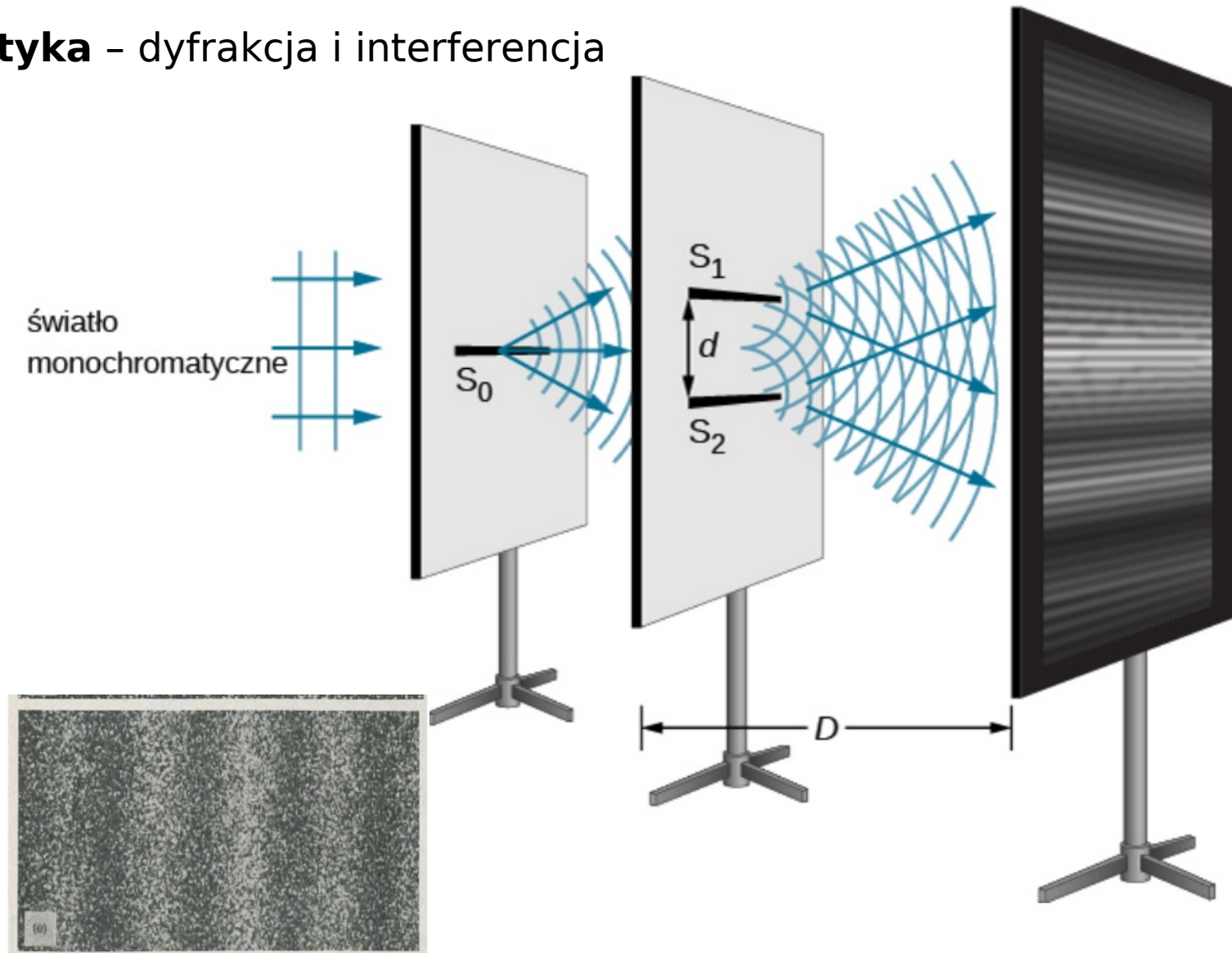
Przykład: rozkład gęstości prawdopodobieństwa elektronu w atomie wodoru



3.2 Interferencja elektronów

Eksperyment typu dośw. Younga z optyki
(dyfrakcja na 2 szczelinach)

Przypominam - optyka – dyfrakcja i interferencja
światła



Podobny efekt
jeśli przepuścimy
wiązkę elektronów

3.2 Interferencja elektronów

Eksperyment typu dośw. Younga z optyki
(dyfrakcja na 2 szczelinach)

Przepuszczenie wiązki elektronów przez 2 szczeliny = obraz dyfrakcyjny. A może to właściwość wiązki?

NIE - eksperyment z dyfrakcją pojedynczych e⁻

Przez 2 szczeliny przenika w danym momencie tylko 1 elektron. Interferuje “sam ze sobą” - własność falowa dotyczy **pojedynczej cząstki**

Demonstration of single-electron buildup of an interference pattern

A. Tonomura, J. Endo, T. Matsuda, and T. Kawasaki
Advanced Research Laboratory, Hitachi, Ltd., Kokubunji, Tokyo 185, Japan

H. Ezawa
Department of Physics, Gakushuin University, Mejiro, Tokyo 171, Japan

(Received 17 December 1987; accepted for publication 22 March 1988)

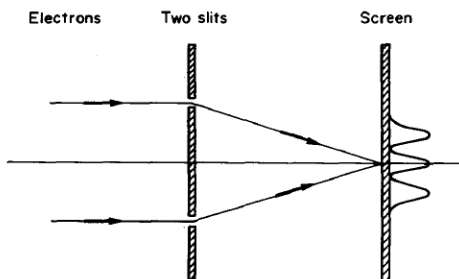
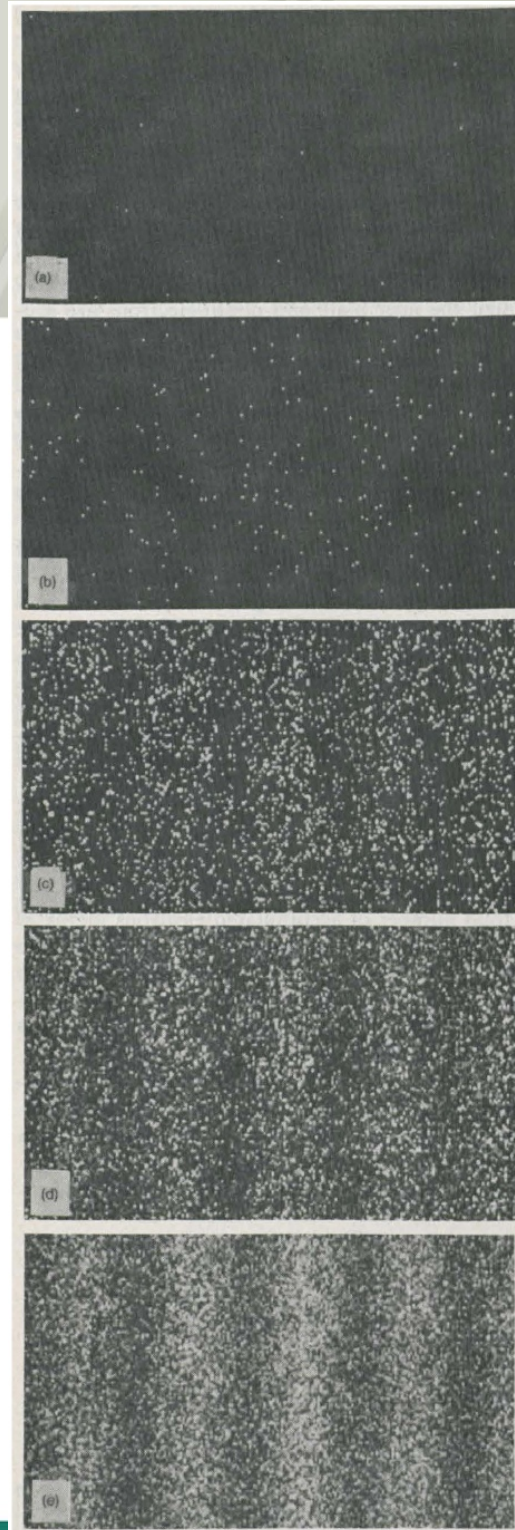


Fig. 5. Buildup of the electron interference pattern. The central field of view, $\frac{1}{3}$ width and $\frac{1}{3}$ length, of the whole field of the detector plane is shown here. The picture extends similarly to the whole field: (a) Number of electrons = 10; (b) Number of electrons = 100; (c) Number of electrons = 3000; (d) Number of electrons = 20 000; and (e) Number of electrons = 70 000.





Erwin Schrödinger
1881-1961



Max Born
(1882-1970)
ur. we Wrocławiu



Werner Heisenberg
1901-1976