VIII Mechanika falowa Schrödingera (operatory, postulaty).

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

Powyższe równanie, zwane równaniem Schrödingera, spełnia wszystkie cztery założenia o postaci kwantowego równania falowego.

Postulaty równania Schrödingera

Zakładamy, że każda obserwowana własność reprezentowana jest przez operator. Takie własności mierzalne zwane są **obserwablami.**

Operatory działają na funkcje, które reprezentują stany układu i są nazywane funkcjami stanu (funkcjami falowymi).

1. Jedynymi możliwymi wynikami obserwacji operatora $\hat{A}$ są odpowiednie wartości własne operatora (najpierw obserwabli trzeba przyporządkować odpowiedni operator, a później wyliczyć jego wartości własne).

2. Wynikiem obserwacji operatora $\hat{A}$ wykonanej na układzie w stanie własnym $\varphi_n(x)$ jest na pewno wartość własna a_n.

3. Wartość średnia obserwacji $\hat{A}$ powtarzanych na zbiorze układów, z których każdy znajduje się w dowolnym stanie $\varphi(x)$ wyraża się wzorem

$$\bar{a}=\frac{\int_{-\infty}^{\infty}\varphi^*(x)\hat{A}\varphi(x)dx}{\int_{-\infty}^{\infty}\varphi^*(x)\cdot\varphi(x)dx}$$

Diarc wymyślił swoją własną notację :

$$\bar{a}=\frac{\langle\varphi|\hat{A}|\varphi\rangle}{\langle\varphi|\varphi\rangle}$$ zapis operatorowy

4. Przedstawienie Schrödingera

$$\hat{x} \rightarrow x \qquad \hat{r} = [\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}] \rightarrow [x, y, z] = r$$

$$\hat{p}_X \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \qquad \hat{p}_y \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}, \qquad \hat{p}_z \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial z},$$

zatem $\hat{p} = -i\hbar \cdot \nabla$, $\hat{p}\hat{p} = \hat{p}^2 = -\hbar^2 \nabla^2$

$$\hat{E} \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

5. $E = E_K + E_P = \dfrac{p^2}{2m} + V(x) \quad \Rightarrow$ 1D: $\dfrac{-\hbar^2}{2m} \dfrac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$

3D: $\dfrac{-\hbar^2}{2m} \left(\dfrac{\partial^2}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2}{\partial y^2} + \dfrac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V(x, y, z) = \dfrac{\hat{p}^2}{2m} + V(x, y, z)$

6. $-\dfrac{\hbar^2}{2m} \dfrac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi(x,t) + V(x,t)\varphi(x,t) = i\hbar \dfrac{\partial}{\partial t} \varphi(x,t) \quad \Rightarrow$ W 3D operatorowo : $\left[\dfrac{\hat{p}^2}{2m} + V(r,t)\right]\varphi(r,t) = \hat{E}\varphi(r,t)$

7. **równanie Schrödingera** (wynika z dwóch poprzednich).

Definiuje się następujący operator : $\hat{H} = \dfrac{\hat{p}^2}{2m} + V(r,t)$

zwany „ hamiltonianem” , wtedy równanie Schrödingera da się nawet zapamiętać!

$$\hat{H}\varphi(\vec{r},t) = \hat{E}\varphi(\vec{r},t)$$

Relacja między pędem a energią też w końcu jest widoczna.

8. Interpretacja Borna: gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w punkcie x, w chwili t jest równa kwadratowi wartości bezwzględnej funkcji falowej

$$P(x,t) = |\varphi(x,t)|^2$$

Należy podkreślić, że nie możemy się spodziewać, aby równanie Schrödingera zachowywało swoją ważność w odniesieniu do cząstek poruszających się z relatywistycznymi prędkościami. Zakładaliśmy bowiem, aby było ono zgodne z klasycznym wyrażeniem na energię, które przestaje być słuszne dla dużych prędkości. Równanie to także nie uwzględnia przypadku kreacji i anihilacji par – zakłada stałą liczbę cząstek obdarzonych masą.

Równanie Schrödingera jest zależne od przestrzeni i czasu. Można go uprościć, jeżeli potencjał nie zależy od czasu:

$$V(x,t)=V(x)$$
$$\varphi(x,t)=\varphi_1(x)\cdot\varphi_2(t)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\varphi_1(x)}{\partial x^2}\varphi_2(t)+V(x)\varphi_1(x)\varphi_2(t)=i\hbar\varphi_1(x)\frac{\partial\varphi_2(t)}{\partial t}$$

$$i\hbar\varphi_1(x)\frac{d\varphi_2(t)}{dt}=E\varphi_1(x)\varphi_2(t)$$

$$i\hbar\frac{d\varphi_2(t)}{dt}=E\varphi_2(t)\Leftrightarrow\hat{E}\varphi_2=E\varphi_2$$ Rozwiązując równanie własne ...

$$\frac{d\varphi_2(t)}{dt}=\frac{E}{i\hbar}\varphi_2(t)$$

$$\frac{d\varphi_2(t)}{\varphi_2(t)}=\frac{E}{i\hbar}dt$$

$$\ln\varphi_2(t)=\frac{E}{i\hbar}t$$

$$\varphi_2(t)=\exp\left[\frac{-iE}{\hbar}t\right]$$ ... znajdujemy funkcję własną operatora $\hat{E}$

Równanie Schrödingera niezależne od czasu:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi_1(x)}{dx^2}+V(x)\varphi_1(x)=E\varphi_1(x)$$

Niezależnie od czasu równanie Schrödingera jest równaniem własnym operatora energii

$$\hat{E}\cdot\varphi(x)=E\varphi(x)$$

gdzie:

$$\hat{E}=-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2}{dx^2}+V(x)$$

E i $\varphi(x)$ są to wartości i funkcje własne powyższego równania własnego.