Twierdzenie Ehrenfesta

Zakładamy, że f. falowa zbiega w $\pm\infty$ do zera odpowiednio szybko. $\bigwedge_{m,n} \lim_{x\to\pm\infty} x^m \partial_x^n \psi = 0$

Policzymy najpierw $\langle -i\hbar\partial_x\rangle = \int \psi^*(x)(-i\hbar\partial_x)\psi dx$

$$= -i\hbar \int dx \int dk' e^{-ik'x} \tilde{\psi}^*(k')\, \partial_x \int dk\, e^{ikx} \tilde{\psi}(k)$$

$$= +\int dx \int dk' e^{-ik'x} \tilde{\psi}^*(k') \int dk\, \hbar k\, \tilde{\psi}(k) e^{ikx}$$

$$= \int dk dk'\, \delta(k-k')\, \hbar k\, \tilde{\psi}^*(k')\psi(k) = \int dp \frac{|\psi(p)|^2}{\hbar} \cdot p$$

$$= \langle p\rangle$$

Teraz $\frac{d}{dt}\langle x(t)\rangle = \int dx \cdot x\, \partial_t\, \psi^*(x,t)\psi(x,t)$

$$= \int dx \cdot x\, \partial_t \rho(x,t) = \int dx \cdot x \left(\partial_t \psi^*(x,t)\psi + \psi^* \partial_t \psi(x,t)\right)$$

używając równanie Schrödingera możemy zamienić pochodne po czasie na pochodne po x

$$= \frac{i\hbar}{2m} \int dx \cdot x \left(\psi^* \partial_x^2 \psi - \psi \partial_x^2 \psi^*\right) =$$

$$= \frac{i\hbar}{2m} \int dx\, x\, \partial_x \left(\psi^* \partial_x \psi - \psi \partial_x \psi^*\right) = \text{całk. przez części}$$

$$= \frac{-i\hbar}{2m} \int dx \left(\psi^* \partial_x \psi - \underbrace{\psi \partial_x \psi^*}_{\text{przez części}}\right) =$$

$$= \frac{1}{m} \int dx\, \psi^* \left(-i\hbar \partial_x \psi\right) = \frac{\langle p\rangle}{m}$$

$$\frac{d}{dt}\langle p\rangle = -i\hbar\int dx \{\partial_t(\psi^*\partial_x\psi) =$$

1) $$= -i\hbar\int dx\{\partial_t\psi^*\partial_x\psi + \psi^*\partial_x\partial_t\psi\} =$$

2) $$= -\int dx\left(\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V\right\}\psi^*\partial_x\psi - \psi^*\partial_x\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V(x)\right)\psi\right)$$

3) $$= \int dx\{V(x)\psi^*\partial_x\psi - \psi^*\partial_x(V(x)\psi)\} =$$

$$= \langle -\partial_x V\rangle$$

wszystkie inne wyrazy się kasują:

- w linii 2 wyrazy z pochodnymi (bez potencjału)
- w linii 3

$$\psi^*\partial_x(V(x)\psi) = \psi^*(\partial_x V)\psi + \psi^* V(x)\partial_x\psi$$

Otrzymaliśmy analog ~~twierdzenie~~ równanie Newtona $\frac{d}{dt}\langle p_x\rangle = \langle -\partial_x V\rangle = \langle F_x\rangle$

Zapisaliśmy to w 1D ale uogólnienie na 3D jest automatyczne.

Dla oscylatora harmonicznego

$$V = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

$$\partial_x V = m\omega^2 x$$

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{\langle p\rangle}{m} \qquad \frac{d}{dt}\langle p\rangle = m\omega^2\langle x\rangle$$

i mamy pełną ~~ekscl~~ analogię z ruchem klasycznym

Interpretacja algebraiczna.

Struktura mechaniki kwantowej: operatory funkcja falowa, wartości średnie — mają strukturę przestrzeni Hilberta, strukturę algebraiczną

ψ ozn $|\psi\rangle$ wektor w przestrzeni Hilberta

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \int \varphi^*(x)\,\psi(x)\,dx$$ — ~~ile~~ iloczyn skalarny

$$\langle\varphi|\hat{O}|\psi\rangle$$ — element macierzowy operatora

$$\int \varphi^*(x)\,\hat{O}\,\psi(x)\,dx$$

Stacjonarne r. Schrödingera 3.3.1

Dynamikę układów kwantowych opisuje równanie Schrödingera

$$i\hbar \partial_t \psi = \hat{H}\psi = (T+V)\psi = \left(-\frac{\hbar^2 \partial_x^2}{2m} + V(x)\right)\psi$$

Porownanie fizyki klasycznej i kwantowej

1 mechanika klasyczna

$$\text{początkowe położenia i pędy} \xrightarrow[\text{Newtona}]{\text{równanie}} \text{końcowe pot. i pędy}$$

2. mechanika kwantowa

$$\underset{\text{f. falowa w } t=0}{\psi(x,t=0)} \xrightarrow[\text{r. Schrödingera}]{} \psi(x,t)$$

Jaki ma sens stacjonarne równ. $\hat{H}\psi = E\psi$?
Jaki mają sens ψ spełniające to równanie ?

Zakładamy $\psi(x,t) = u(x) f(t)$
procedura poniższa nazywa się rozdzieleniem zmiennych i będzie jeszcze stosowana

$$i\hbar(\partial_t f)\cdot u = (\hat{H}u) f(t) \quad (*)$$

zakładamy, że $\hat{H}(t) = const$, hamiltonian nie zależy „explicite" od czasu. Dzielę $(*)$ przez ψ

$$E = const = \frac{i\hbar \partial_t f(t)}{f(t)} = \frac{\hat{H} u(x)}{u(x)}$$

$(**)$ $\hat{H}u = Eu$ $\qquad f = e^{-iEt/\hbar}$

$\hat{H}$ jest operatorem hermitowskim, zatem $E \in \mathbb{R}$

$(**)$ równanie własne operatora $\hat{H}$

Istnieje komplet wartości własnych E_k oraz baza wektorów własnych $u_k(x)$

$$\hat{H} u_k(x) = E_k u_k$$

Uwagi: k nie musi być wskaźnikiem dyskretnym

$\{u_k\}$ jest bazą zatem $\hat{\psi} = \sum_k a_k u_k(x)$

a_k – współczynniki zespolone, ψ dowolny stan.

- Jeśli znamy dla jakiegoś $\hat{H}$ bazę stanów własnych to znamy jego ewolucję.

$$\psi(x, t_0) = \sum a_k u_k(x) \rightarrow \psi(x,t) = \sum a_k \underbrace{e^{-\frac{iE_k t}{\hbar}}}_{\text{czynnik fazowy}} u_k(x)$$

Można wprowadzić operator ewolucji czasowej.

$$\mathcal{U}(t_0,t)\psi(x,t_0) = \psi(x,t)$$

$$i\hbar \partial_t \mathcal{U}(t,t_0)\psi(x,t_0) = \hat{H}\mathcal{U}(t_0 t)\psi(x,t_0)$$

to równanie musi być spełnione dla dowolnego $\psi(x,t_0)$. Zatem

$$i\hbar \partial_t \hat{\mathcal{U}}(t,t_0) = \hat{H}\hat{\mathcal{U}} \quad \text{r. macierzowe}$$

rozwiązanie

$$H = e^{-i\hat{H}t/\hbar}$$

$$\psi(x,t) = \mathcal{U}(t_0 t)\psi(x,t_0) = \hat{\mathcal{U}}(t_0 t)\sum a_i u_i(x)$$

$$= e^{-i\hat{H}t_0/\hbar}\sum a_i u_i = \sum a_i \exp(-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar)\, u_i$$

$$= \sum a_i \exp(-iE_i(t-t_0)/\hbar)\, u_i(x)$$

ewolucja sprowadza się do dopisania fazy!