

CAS TEXTBOOKS 3

Centrum Studiów Zaawansowanych Politechniki Warszawskiej
Warszawa

Leszek Adamowicz

Mechanika kwantowa
- na skróty od klasyki do współczesności

Leszek Adamowicz

Redaktor merytoryczny: **Stanisław Janeczko**

Skład redakcji: **Małgorzata Zielińska**

Projekt graficzny i skład okładki: **Małgorzata Zielińska**

DTP: **Fixpoint Krzysztof Rudnik**

© Copyright by Centrum Studiów Zaawansowanych Politechniki Warszawskiej,
Warszawa 2022

Informacje o innych wydawnictwach tej serii dostępne pod adresem www.csz.pw.edu.pl

ISBN: 978-83-61993-20-9

Wydrukowano w Polsce

Spis treści

Przedmowa.....	13
1. Wstęp	17
1.1. Jak pojawiły się kwanty?	17
1.2. Fotony	19
1.3. Pomiar polaryzacji fotonu	22
1.4. Fale materii	24
1.5. Analogie optyczno-mechaniczne	25
1.6. Zadania.....	28
2. Podstawowe pojęcia	30
2.1. Równanie Schrödingera.....	30
2.2. Funkcja falowa	34
2.3. Gęstość prądu prawdopodobieństwa	35
2.4. Funkcje własne i wartości własne	37
2.5. Wartości oczekiwane	37
2.6. Nieokreśloność położenia i pędu.....	39
2.7. Przykłady i zadania	41
3. Proste zastosowania jednowymiarowe	44
3.1. Cząstka swobodna	44
3.2. Potencjał odcinkowo stały	48
3.3. Próg potencjału	50
3.4. Amplituda odbicia i transmisji	53
3.5. Bariera potencjału.....	56
3.6. Macierz rozpraszania i macierz transferu	58
3.7. Nieskończenie głęboka studnia potencjału	62
3.8. Studnia o skończonej głębokości	64
3.9. Numeryczne rozwiązywanie równania Schrödingera	67
3.9.1. Oscylator harmoniczny	68
3.9.2. Atom wodoru	71
3.10. Przykłady i zadania	76
4. Narzędzia matematyczne.....	90

4.1.	Przestrzeń funkcyjna	90
4.2.	Baza funkcji ortogonalnych	91
4.3.	Relacja zupełności.....	92
4.4.	Inne bazy.....	92
4.5.	Notacja Diraca	93
4.6.	Przykłady i zadania	95
5.	Formalizm	97
5.1.	Wektor stanu	97
5.2.	Podstawowe własności operatorów	100
5.3.	Reprezentacje operatorów	102
5.4.	Operatory hermitowskie	102
5.5.	Inne operatory	103
5.6.	Operatory i wielkości fizyczne	106
5.7.	Nierówność Heisenberga	110
5.8.	Ewolucja wielkości fizycznych	111
5.9.	Zasada nieokreśloności dla energii i czasu	115
5.10.	Stany mieszane	116
5.11.	Operator gęstości	118
5.12.	Moment pędu	121
5.12.1.	Własności komutacyjne.....	121
5.12.2.	Wektory własne i wartości własne.....	124
5.13.	Moment pędu i kwadrat pędu	127
5.14.	Przykłady i zadania	129
6.	Rozwiązywanie analityczne	140
6.1.	Równanie i szereg hipergeometryczny	140
6.2.	Równanie i szereg hipergeometryczny konfluentny	141
6.3.	Oscylator harmoniczny	142
6.4.	Atom wodoropodobny	145
6.5.	Przykłady i zadania	154
7.	Symetria w układach kwantowych.....	164
7.1.	Transformacje symetrii	164
7.2.	Transformacje dyskretne	165
7.3.	Transformacje ciągłe	168
7.4.	Symetria cechowania.....	170
7.5.	Przykład.....	173
8.	Spin	177
8.1.	Nowa wielkość fizyczna	177
8.2.	Operator spinu.....	179
8.3.	Transformacja obrotu.....	182
8.4.	Wektory własne.....	183
8.5.	Operator gęstości	184



8.6.	Precesja spinu w polu magnetycznym	186
8.7.	Spin w równowadze termodynamicznej	188
8.8.	Spin jako kubit	189
9.	Metody przybliżone	194
9.1.	Rachunek zaburzeń bez czasu	194
9.1.1.	Brak degeneracji	195
9.1.2.	Warunek stosowalności rachunku zaburzeń	197
9.1.3.	Degeneracja	198
9.2.	Rachunek zaburzeń z czasem	200
9.3.	Metoda wariacyjna	203
9.4.	Przykłady i zadania	206
10.	Układy wielu cząstek	216
10.1.	Układ dwóch cząstek	216
10.2.	Układ wielu cząstek	218
10.3.	Degeneracja wymiany	220
10.4.	Symetria przestawień	221
10.5.	Wektory stanu dwóch cząstek	223
10.6.	Operatory symetryzacji i antysymetryzacji	225
10.7.	Konsekwencje postulatu symetryzacji	225
10.8.	Bozony i statystyka Bosego–Einsteina	227
10.9.	Fermiony i statystyka Fermiego–Diraca	229
10.10.	Atom helu	231
10.11.	Przykłady	235
11.	Rozpraszanie cząstek	241
11.1.	Rozpraszanie elastyczne i przekrój czynny	241
11.2.	Stacjonarne stany rozproszeniowe	243
11.3.	Postać asymptotyczna i amplituda rozpraszania	244
11.4.	Przekrój czynny i amplituda rozpraszania	245
11.5.	Całkowe równanie rozpraszania	246
11.6.	Przybliżenie Borna	248
11.7.	Przykład	250
12.	Relatywistyczne równanie falowe	253
12.1.	Sformułowanie relatywistyczne	253
12.2.	Równanie Diraca	255
12.3.	Równanie Diraca w postaci współzmienniczej	258
12.4.	Gęstość prawdopodobieństwa	260
12.5.	Równanie Diraca dla cząstki spoczywającej	261
12.6.	Cząstka w polu siły centralnej i moment pędu	262
12.7.	Cząstka w polu elektromagnetycznym	264
12.8.	Granica nierelatywistyczna	267
12.9.	Oddziaływanie spin-orbita	269



A.	Wybrane wyniki fizyki klasycznej	273
A.1.	Sformułowanie wariacyjne mechaniki	273
A.2.	Zasada Fermata	278
A.3.	Równanie falowe	279
A.4.	Efekty falowe	281
A.5.	Równanie ciągłości	283
A.6.	Prądy w ograniczonej objętości	285
A.7.	Promieniowanie ciała doskonale czarnego	288
A.8.	Szczególne teoria względności	293
B.	Uzupełnienia matematyczne	301
B.1.	Przykłady operatorów różniczkowych	301
B.1.1.	Współrzędne kartezjańskie	301
B.1.2.	Współrzędne sferyczne	301
B.2.	Transformacja Fouriera	303
B.3.	Funkcja delta Diraca i funkcja skokowa Heaviside'a	304
B.4.	Często spotykane całki	308
B.5.	Analogie ze zwykłą przestrzenią	312
B.6.	Metoda rozdzielania zmiennych	314
C.	Operatory	316
C.1.	Operatory liniowe	316
C.2.	Przykład operatora momentu pędu	317
C.3.	Różne komutatory ze składowymi operatora momentu pędu	318
C.4.	Podstawowe własności operatorów hermitowskich	320
C.5.	Operatory przemienne	322
C.6.	Zmiana reprezentacji operatora	324
C.7.	Ślad operatora	325
C.8.	Operator gęstości dla stanu czystego	326
C.9.	Reprezentacja położeniowa i pędowa	328
D.	Procedury numeryczne	333
D.1.	Metoda Rungego–Kutty	333
D.2.	Obliczenia numeryczne w programie <i>Mathematica</i>	333
D.3.	Obliczenia symboliczne w programie <i>Mathematica</i>	336
E.	Metoda algebry operatorów	338
E.1.	Oscylator harmoniczny	338
E.1.1.	Wartości własne	338
E.1.2.	Stan podstawowy	340
E.1.3.	Funkcja falowa	341
E.2.	Atom wodoru	342
E.2.1.	Równanie radialne w postaci operatorowej	342
E.2.2.	Rozwiązywanie równania radialnego	344
E.2.3.	Wektor Rungego–Lenza	345



F.	Zaburzenia i stany nierównowagi	353
F.1.	Rachunek zaburzeń z czasem	353
F.1.1.	Przybliżenie pierwszego rzędu	355
F.1.2.	Przybliżenie drugiego rzędu	356
F.2.	Reakcja na zaburzenie	357
F.2.1.	Układ wieloelektronowy w równowadze	358
F.2.2.	Odpowiedź ośrodka na zaburzenie równowagi	359
F.2.3.	Odpowiedź elektronów na zaburzenie równowagi	360
G.	Splątanie i nierówność Bella	362
G.1.	Paradoks EPR	363
G.2.	Nierówność Bella	366
G.3.	Kwantowe przetwarzanie informacji	369
H.	Reprezentacja liczb obsadzeń	374
H.1.	Operatory połowe	374
H.2.	Operator \hat{N}	375
H.3.	Wektory własne operatora \hat{N}	377
H.4.	Związek z układem wielu cząstek	380
H.5.	Opis elektronów w kryształach i zjawisko ferromagnetyzmu	383
	Bibliografia	389
	Książki	389
	Artykuły	390
	Spis rysunków	392
	Spis tablic	397
	Indeks	398
	Stałe fizyczne w różnych jednostkach i kilka ważnych wzorów	404



*Pamięci Wszystkich, którzy przyczynili się
do umocnienia fizyki na Politechnice Warszawskiej, w szczególności
Szczepana Szczęniowskiego, Wojciecha Rubinowicza,
Grzegorza Białkowskiego i Jana Petykiewicza*

Przedmowa

Próba czasu wypadła dla mechaniki kwantowej pomyślnie, plasując ją obok mechaniki Newtona, elektrodynamiki Maxwella i teorii względności Einsteina na czele teorii fizycznych. Można powiedzieć, że mechanika kwantowa stanowi podstawę opisu i wyjaśniania wszystkich otaczających nas zjawisk, którymi tradycyjnie zajmuje się nie tylko fizyka, lecz również chemia, biologia i inne nauki przyrodnicze. Mechanice kwantowej przypadła, nieprzewidywana przez jej twórców, rola narzędzia do ilościowego opisu właściwości mechanicznych, elektrycznych, magnetycznych i chemicznych – zarówno naturalnych, jak i sztucznie wytwarzanych materiałów na podstawie struktury elektronowej atomów. Można tu wymienić przemysłowe wytwarzanie niewystępujących w przyrodzie sztucznych obiektów typu kropek kwantowych, nanodrutów, nanorurek i struktur warstwowych o grubościach kontrolowanych rozmiarami atomów, odkrywanie nowych stanów materii skondensowanej, kryształy czasowe, jak też próby budowy komputerów kwantowych. Do wszystkich tych osiągnięć przyczyniła się znajomość mechaniki kwantowej jako metody obliczeniowej.

Technologia otrzymywania nanostruktur, nazywana obecnie – nanotechnologią, ma charakter interdyscyplinarny. Przedrostek *nano*, znak rozpoznawczy świata nanotechnologii, pochodzi od greckiego słowa *νάνος* i oznacza karzełka. Jednostką długości w tym świecie małych rozmiarów jest nanometr ($1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$). Docelowo przedmiotem technologii w skali *nano* jest budowa jak najmniejszych struktur z atomów, obejmująca prawie cały układ okresowy pierwiastków. Dzięki temu wytworzono tworzywa i materiały o najróżniejszych zastosowaniach, o nowych właściwościach. Otrzymano na przykład biomateriały, materiały samoczyszczące, bakteriobójcze, chroniące przed wysoką temperaturą i nadmiernym promieniowaniem słonecznym. Podjęto produkcję nanomaszyn-robotów, motorów molekularnych i całych ich systemów. Mechanika kwantowa pomaga wykorzystywać istniejące cząsteczki i projektować nowe, badać struktury białkowe dla potrzeb biologii molekularnej i zastosowań farmaceutycznych. Rekordowo małe rozmiary urządzeń nanotechnologicznych pozwalają gęściej upakować elementy czynne, zwiększyć szybkość działania i ograniczyć zużycie energii.

Ten niespotykany rozwój technologiczny jest udziałem setek tysięcy uczonych i inżynierów. Zaowocował on ogromnym rozwojem cywilizacji technicznej o zasięgu światowym, jaki miał miejsce w ostatnim stuleciu i trwa nadal. Uważa się, że żyjemy w czasach Rewolucji Kwantowej, która poprzedza nadejście Drugiej Rewolucji Kwantowej z zupełnie nowymi urządzeniami wykorzystującymi mechanikę kwantową [38].

Po upływie stu lat od powstania mechaniki kwantowej mniej istotne wydaje się dzisiaj pytanie: O czym to jest? Częściej w odniesieniu do mechaniki kwantowej słyszy się skrót myślowy *do it yourself* – *DIY* – rozpowszechniony w Internecie – oznaczający ideę zrobienia czegoś samodzielnie. Idea ta objawia się w różny sposób w zależności od posiadanej wiedzy, narzędzi obliczeniowych, pomiarowych czy technologicznych.

Podstawowa wiedza w zakresie fizyki kwantowej wzbudza zainteresowanie w mediach społecznościowych. Wiarygodny i odpowiedzialny sposób przekazu wiedzy na temat mechaniki kwantowej może stanowić ważny element kształtowania społecznego odbioru nauki i przeciwdziałania spadkowi zaufania do niej. Godna polecenia jest niepozorna książeczka *My First Book of Quantum Physics*, której polskie tłumaczenie nosi tytuł *Fizyka kwantowa i jej tajemnice* [21]. Jest ona adresowana do najmłodszych odbiorców, przekazując im w czytelnej grafice i krótkich opisach nie tylko historię, ale również przemyślany obraz fizyki kwantowej, nadający się do odtworzenia – ze stosownymi uściśleniami i uzupełnieniami – na różnych poziomach nauczania, poczynając od szkoły podstawowej, a na wyższej uczelni kończąc. Obecną książkę można traktować jako kontynuację przekazywania wiedzy o mechanice kwantowej w uściślonej formie bez stawiania czytelnikowi szczególnych wymagań wykraczających poza fizykę ogólną i analizę matematyczną na poziomie podstawowym.

Mechanika kwantowa jest szeroko rozgałęzioną nauką w stanie ciągłego rozwoju. Powstają nowe sformułowania w tej dziedzinie, nie mówiąc o interpretacjach. W nauczaniu przedmiotu pojawia się potrzeba dopasowania do określonych wymagań i oczekiwań. Jest to zadanie dość trudne mimo istnienia wielu, często znakomicie opracowanych książek. W obecnej książce dokonano zabiegu wydobywania z mechaniki kwantowej jej istotnych fragmentów w sposób nienaruszający ogólnej struktury tej gałęzi wiedzy oraz udostępnienia jej czytelnikowi posiadającemu jedynie podstawową wiedzę w zakresie fizyki ogólnej i matematyki. Odnośniki do literatury są zredukowane do osobistych upodobań autora i mają wskazywać możliwe ścieżki rozszerzania wiedzy zawartej w tej książce.

Pierwowzorem obecnej książki jest podręcznik *Mechanika kwantowa. Formalizm i zastosowania* [2] z 2005 roku napisany z myślą o studentach Politechniki Warszawskiej. Dodajmy, że powstawał on w latach 70. ubiegłego wieku, kiedy to nauczanie mechaniki kwantowej studentów uczelni technicznych uważane



było za zbyt cenne dla przyszłych inżynierów. Stąd powściągliwa forma, która z perspektywy upływu lat wydaje się zaletą.

Od tego czasu rola i znaczenie mechaniki kwantowej jako najdokładniejszej metody opisu mikroświata wzrosła niepomniernie. Sam szkielet mechaniki kwantowej od przeszło stu lat pozostaje niezmienny, jednak wiedza związana z zastosowaniami powiększyła się do niebywałych rozmiarów.

Obecne wydanie książki różni się od poprzedniego zwiększonym zakresem poruszonych problemów mechaniki kwantowej (podrozdział 3.6, dodatki C.3, E.2, F.2 i H.5) oraz kilkudziesięcioma nowymi przykładami i zadaniami, które powinny uatrakcyjnić zdobywanie i utrwalenie podstawowej wiedzy w zakresie fizyki kwantowej. Usunięto zauważone błędy oraz zmieniono niektóre wyprowadzenia. Problemy interpretacyjne, eksponowane w licznych książkach poświęconych mechanice kwantowej, zostały ograniczone do niezbędnego minimum jako nieistotne z punktu widzenia zastosowań. Niektóre sugestie zmian w metodach nauczania mechaniki kwantowej⁽¹⁾ znalazły swoje odbicie w dodatku E.2. Panuje powszechna zgoda, iż ważnym etapem w opanowaniu mechaniki kwantowej jest samodzielne rozwiązywanie zadań. Obecne wydanie dostarcza nowych możliwości w tym zakresie, a jego celem jest nie tylko zapoznanie studentów z podstawami mechaniki kwantowej, lecz również zachęcenie do samodzielnego jej wykorzystywania, głównie w problematyce fizyki materii skondensowanej.

Układ książki jest następujący. Rozdziały 1, 2 i 3 zawierają minimum wiedzy o mechanice kwantowej, które powinno zaspokoić doraźne potrzeby studentów różnych specjalności zainteresowanych przede wszystkim jej wykorzystaniem do celów wynikających z ich specjalizacji. Dalsza część książki stawia przed czytelnikiem większe wymagania i jest polecana studentom zainteresowanym głębszym zrozumieniem tej dziedziny, w szczególności tym, którzy są dociekliwi, wrażliwi na precyzję sformułowań oraz doznania estetyczne i piękno struktury wiedzy podstawowej. Rozdziały 4 i 5 obejmują niezbędny aparat matematyczny i sformułowanie postulatów mechaniki kwantowej konieczne do korzystania z następnych rozdziałów zawierających wprowadzenie do problematyki związanej z kwantowym opisem jednej i wielu cząstek na wyższym poziomie w stosunku do trzech pierwszych rozdziałów. W rozdziale 6 przedstawiono rozwiązywanie analityczne problemu oscylatora harmonicznego i atomu wodoru, wsparte przykładami i zadaniami. Dodatek E zawiera podejście operatorowe do tych dwóch problemów, niewymagające wiedzy o funkcjach specjalnych. W rozdziale 7 są opisane korzyści wpływające z symetrii przy poszukiwaniu rozwiązań równania Schrödingera (przykład 7.1). Problematykę spinu przedstawiono w rozdziale 8, uwzględniając jego rolę w informatyce kwantowej. Rozdział 9 poświęcono najważniejszym metodom przybliżonym z przykładami i zadaniami. Uszczegółowioną kontynu-

⁽¹⁾ <https://www.edx.org/course/quantum-mechanics-for-everyone>



ację tego rozdziału stanowi dodatek F. Problematyka wielu jednakowych cząstek stanowi treść rozdziału 10. Rozdział 11 dotyczy rozpraszania cząstek. Ostatni rozdział, 12, zawiera relatywistyczne rozszerzenie mechaniki falowej prowadzące do równania Diraca i sprzężenia spin-orbita.

Osiem dodatków (A–H) zawiera wybrane wyniki fizyki klasycznej, uzupełnienia matematyczne i rozszerzenia problematyki niektórych rozdziałów. Liczne zadania i szczegółowo rozwiązane przykłady oraz dodatki wskazują drogę do samodzielnego wykorzystywania teorii kwantów. Nagrodą za włożony wysiłek będzie możliwość śledzenia treści bieżącej literatury naukowej, gdzie wykorzystywana jest mechanika kwantowa, bez poczucia zagubienia w używanych tam sformułowaniach i metodach obliczeniowych.

Wykorzystane zostały uwagi krytyczne i sugestie, które napłynęły po ukazaniu się pierwszego wydania tej książki. Pragnę tu szczególnie podziękować Włodzimierzowi Jaskólskiemu z Uniwersytetu Mikołaja Kopernika oraz Włodzimierzowi Salejdzie [*Postępy Fizyki* 58 (4), 180–181 (2007)] z Instytutu Fizyki Politechniki Wrocławskiej za szczegółowe recenzje, które przyczyniły się do ulepszenia tej książki.

Istotną zachętą do przygotowania obecnego wydania było życzliwe zainteresowanie Stanisława Janeczki, Dyrektora Centrum Studiów Zaawansowanych Politechniki Warszawskiej. Wyrażam nadzieję, że książka zapisze się pozytywnie w rozległej działalności wydawniczej Centrum, którego podstawowym celem od chwili powstania jest podnoszenie jakości kształcenia i badań naukowych na Politechnice Warszawskiej.

Wszelkie uwagi krytyczne przyjmę z wdzięcznością i pokorą.

Leszek Adamowicz

Kontakt: leszek.adamowicz@pw.edu.pl

Warszawa, Styczeń 2022

