

$$\begin{array}{ll} \rho\varrho & \varrho\rho \\ \phi\varphi & \varphi\phi \end{array}$$

# Mechanika Kwantowa R 2021/2022

Kacper Cybiński

18 maja 2022

# Organizacja wykładu

1. Dwa kolokwia - po 30 pkt
2. Egzamin - 40 pkt

Łącznie 100 pkt, progi punktowe:

$$45 - 55 = 3, 55 - 65 = 3.5, 65 - 75 = 4, 75 - 85 = 4.5, 85 - 95 = 5, 95 - 100 = 5!$$

Egzamin ustny (zmiana oceny co najwyżej o 0.5)

Serie domowe dobrowolne (ale na pewno pomogą napisać dobrze kolokwia!)

[Strona wykładu](#)

Polecane podręczniki:

- L. Schiff *Mechanika Kwantowa (obszerna)*
- R. Liboff *Wprowadzenie do Mechaniki Kwantowej (mniej obszerna)*
- L. Susskind *Quantum Mechanics (Do ogarnięcia koncepcyjnego)*

# Lecture 1

## Krótką historią fizyki i wstęp do kwantów

### 1.1 Krótką historią fizyki

- **Arystoteles** - Jeden absolutny układ odniesienia, więc nie ma sensu pojęcie *obserwatora*
- **Newton** - Ciała, a więc i układy odniesienia (obserwatorzy inercjalni) są liczne, oraz mogą się poruszać między sobą. Siła, czas, przestrzeń są wciąż pojęciami absolutnymi.
- **Teoria względności** - Ruch, czas, przestrzeń, masa są zależne od obserwatora. Obserwator nie musi być inercjalny. Mówimy o *Uoperacyjnieniu pojęć zasadniczych*.
- **Teoria Kwantowa** - Okazuje się, że cały zestaw wielkości fizycznych służących do opisu świata zależy od tego jaki jest kontekst pomiarowy, tj. od relacji obserwatora z innymi elementami otaczającego go świata. *Czyli po raz pierwszy uwzględniamy fakt, że opisujemy wszechświat w którym sami istniejemy, czyli opisujemy ten układ od środka.*

Prezentacja o historii fizyki wg Witkacego

### 1.2 Hipoteza Kwantu

Co doprowadziło do wniosków, że energię trzeba skwantować?

#### 1.2.1 Ciało Doskonale Czarne

Paradoks polegał na tym, że z ciała doskonale czarnego powinniśmy mieć zabójcze promieniowanie gamma itp, a go nie było IRL. And here comes the *Max Planck*.

Planck zapostulował, że przekaz energii odbywa się za pomocą całkowitych wartości (**Kwant Energii**) Zdefiniował to jako:

$$E = h \cdot \nu = \hbar \cdot \omega \quad (1.1)$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}, \omega = 2\pi\nu$$

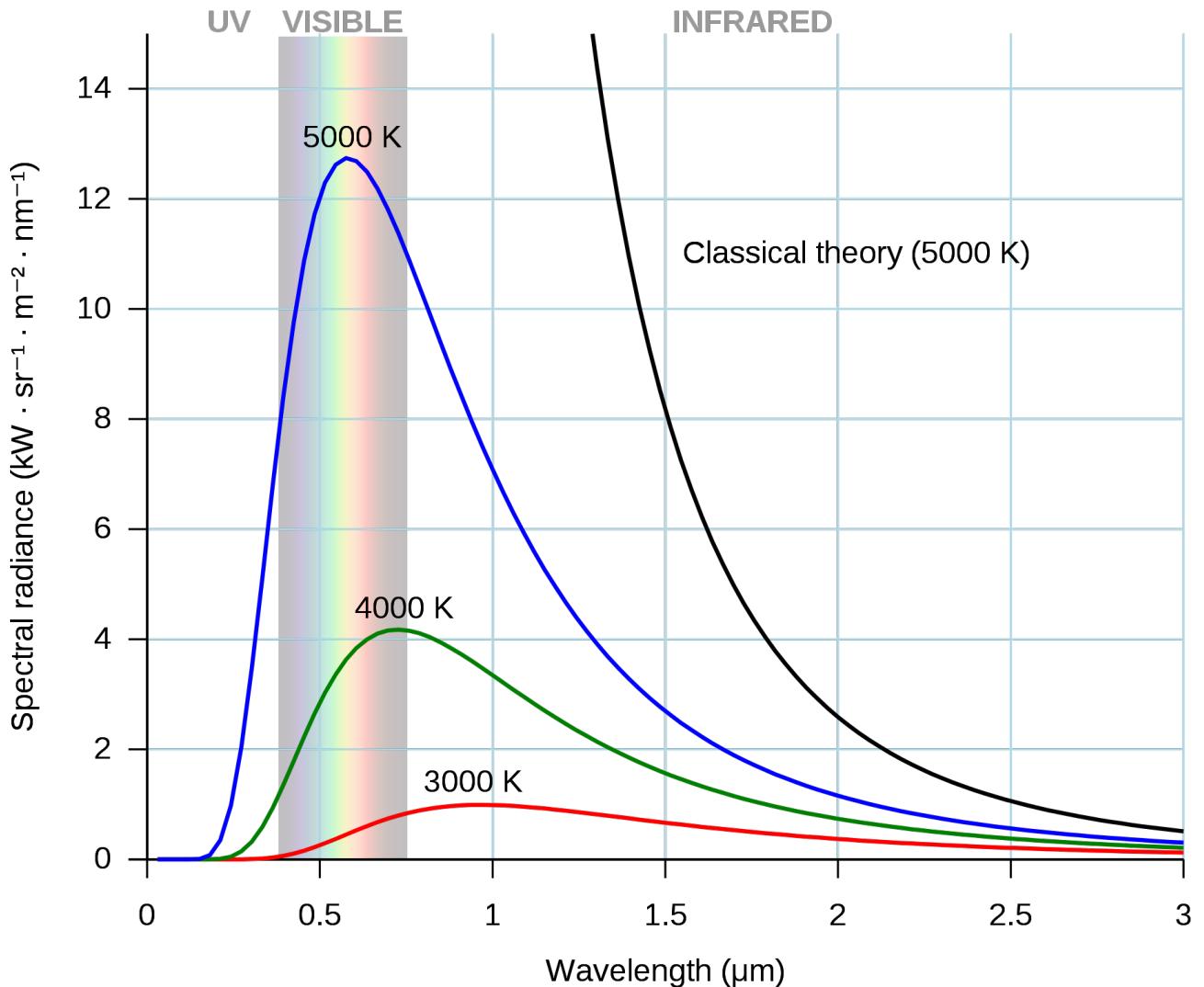
gdzie  $h$  - **Stała Plancka**,  $h = 6.2626070150 \cdot 10^{-34} J \cdot s$ ,  $\nu$  - częstotliwość promieniowania

#### 1.2.2 Efekt Fotoelektryczny

#### 1.2.3 Analiza pól EM

Analiza pól  $\mathcal{E}$  i  $B$  w odniesieniu do sześcianu z przewodnika prowadzi do wniosku, że energia "porcji promieniowania" transformuje się jak

$$\frac{\mathcal{E}'}{\mathcal{E}} = \frac{\sqrt{1 - \frac{u}{c}}}{\sqrt{1 + \frac{u}{c}}}$$



Rysunek 1.1: Wykres promieniowania ciała doskonale czarnego

gdzie  $u$  - promieniowanie. Transformuje się to analogicznie do częstotliwości w efekcie Dopplera  
 $\Rightarrow E \sim \nu$

Rozkład energii będzie nam opisywać [Rozkład Boltzmana](#), czyli rozkład prawdopodobieństwa zaobserwowania stanu Energetycznego, dany wzorem:

$$p(E_i) \sim e^{-\frac{E_i}{kT}}$$

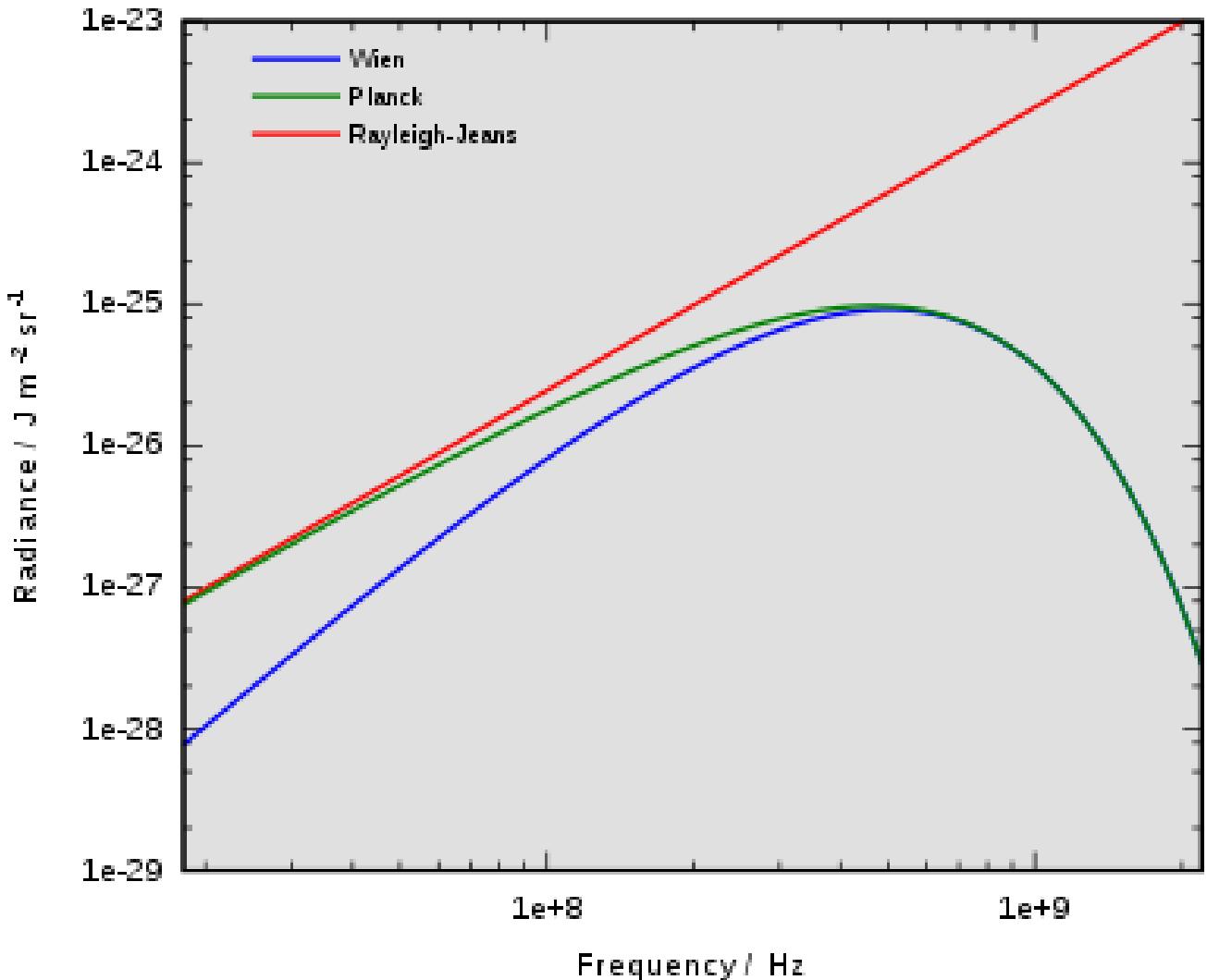
co w przypadku rozkładu ciągłego daje nam zasadę ekwipartycji, ale dla dużych wartości energii się rozbiega z doświadczeniem.

### 1.3 Skutki skwantowania energii

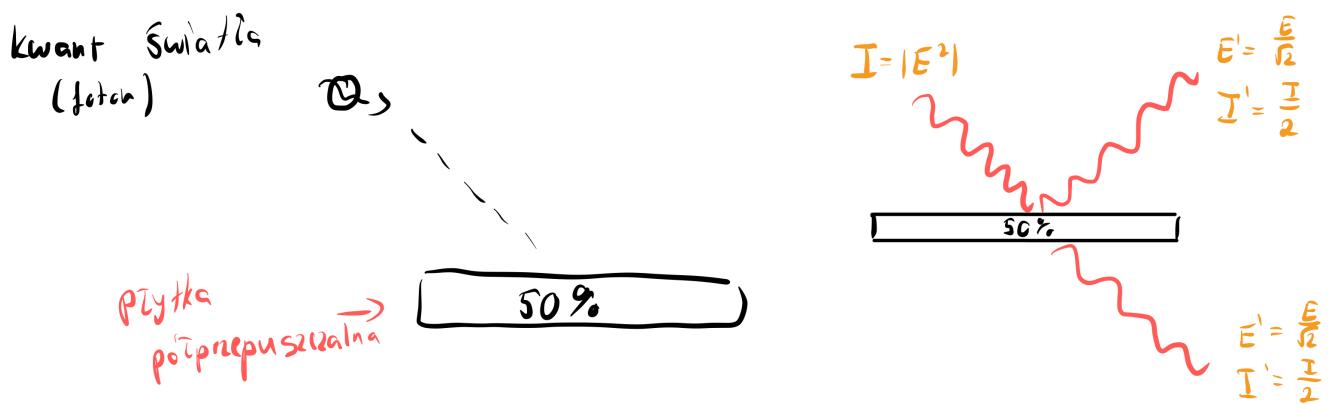
Przede wszystkim skutkiem jest [indeterminizm](#).

[Teoria parametrów ukrytych](#) - Teoria, że w kwantach energii występują nierejestrowane przez nas parametry, które jednakowoż zawsze determinują rozróżnienie kwantów energii. Parafraszując Drażana, dodawanie fotonom(kwantom) "włosów", "ogonów" itp - elementów rozróżniających je.

Jeśli jednak nie chcemy dodawać fotonom 'włosów', ani 'ogonów' i chcielibyśmy, żeby wszystkie fotony były "identyczne" to aby odtworzyć zachowanie klasyczne w granicy (podział natężenia 50%), to



Rysunek 1.2: Porównanie hipotezy Plancka z prawem Rayleigha-Jeansa i rozkładem Wiena. Further reading o 'Katastrofie w nadfiolecie' na [Wikipedii o ciele doskonale czarnym](#)

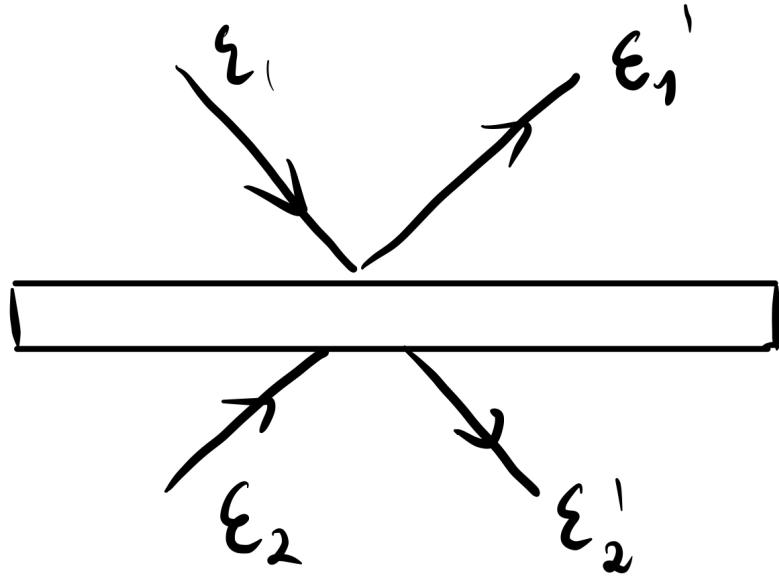


Rysunek 1.3: Demonstracja działania płytka półprzepuszczalnej.

musimy uznać, że foton zachowuje się niedeterministycznie, tj. wprowadzić element probabilistyczny. Wtedy z prawdopodobieństwem 50% każdy foton przechodzi lub odbija się.

Kiedy patrzymy na płytę światłodzielącą (Rysunek 1.4), to możemy przedstawić bieg promienia w niej jako superpozycję fal (zapis macierzowy).

$$\begin{bmatrix} \mathcal{E}'_1 \\ \mathcal{E}'_2 \end{bmatrix} = B \begin{bmatrix} \mathcal{E}_1 \\ \mathcal{E}_2 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} \mathcal{R}_1 & \mathcal{T}_2 \\ \mathcal{T}_1 & \mathcal{R}_2 \end{bmatrix}$$



Rysunek 1.4: Demonstracja działania płytka światłodzielającej (*Beam Splitter*).

Gdzie  $\mathcal{E}'_1 = \mathcal{R}_1 \mathcal{E}_1 + \mathcal{T}_2 \mathcal{E}_2$ . Chcemy, żeby **energia była zachowana**

$$\implies |\mathcal{E}_1|^2 + |\mathcal{E}_2|^2 = |\mathcal{E}'_1|^2 + |\mathcal{E}'_2|^2$$

Co możemy też tłumaczyć jako zachowanie długości wektora  $\begin{bmatrix} \mathcal{E}'_1 \\ \mathcal{E}'_2 \end{bmatrix}$ , czyli macierz  $B$  jest macierzą **Unitarną**, tj.  $B \cdot B^\dagger = 1$ .

$$BB^\dagger = \begin{bmatrix} \mathcal{R}_1^* & \mathcal{T}_1^* \\ \mathcal{T}_2^* & \mathcal{R}_2^* \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathcal{R}_1 & \mathcal{T}_2 \\ \mathcal{T}_1 & \mathcal{R}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} |\mathcal{R}_1|^2 + |\mathcal{T}_1|^2 & \mathcal{R}_1^* \mathcal{T}_2 + \mathcal{T}_1^* \mathcal{R}_2 \\ \mathcal{R}_1 \mathcal{T}_2^* + \mathcal{T}_1 \mathcal{R}_2^* & |\mathcal{R}_2|^2 + |\mathcal{T}_2|^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Wynika stąd, że  $|\mathcal{R}_1|^2 = |\mathcal{R}_2|^2 = R$  - współczynnik odbicia natężenia, a  $|\mathcal{T}_1|^2 = |\mathcal{T}_2|^2 = T$  - współczynnik transmisji natężenia, gdzie  $R + T = 1$ .

W związku z tym też ogólnie mówiąc np.  $B = \begin{bmatrix} \sqrt{R} & \sqrt{T} \\ -\sqrt{T} & \sqrt{R} \end{bmatrix}$ , a  $B_{50\%} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$ . Tj.  $B \in \mathcal{U}(2)$

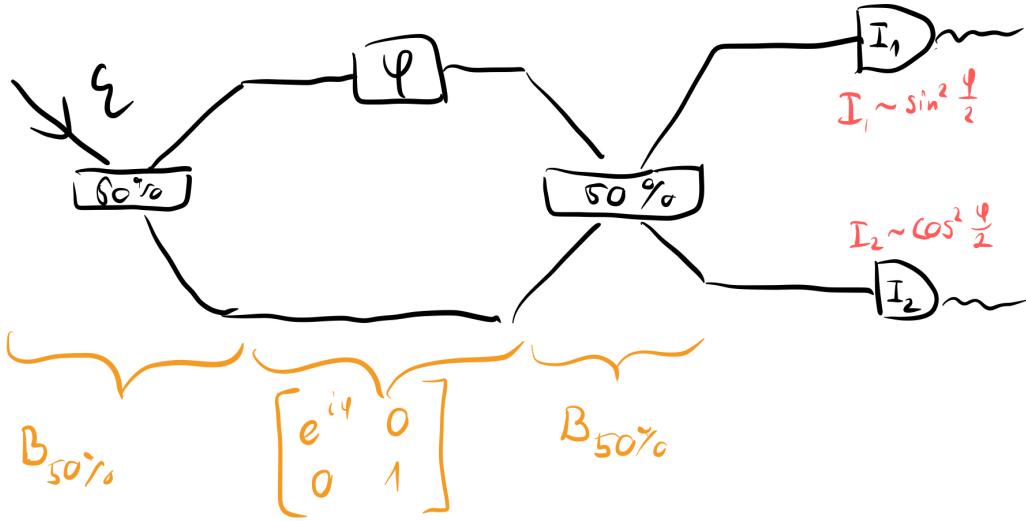
## 1.4 Superpozycja

Pokażemy zjawisko interferencji w sensie kwantowym patrząc na kanoniczny przykład - [Interferometr Macha-Zehndera](#), widoczny na Rysunku 1.5. Rozpatrujemy od teraz falę padającą postaci  $\begin{bmatrix} \mathcal{E} \\ 0 \end{bmatrix}$ .

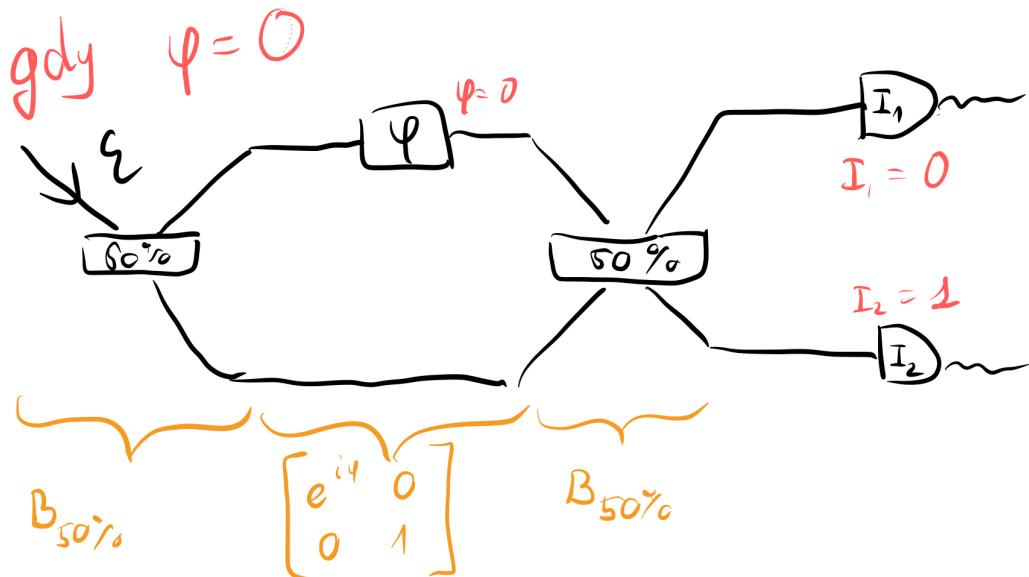
Teraz aby zrozumieć jak w takim układzie zachowuje się foton musimy odejść od klasycznego myślenia, że leci on jakąś drogą, a musimy przejść do myślenia o jego drodze jako **nieokreślonej**, tj. do momentu wykonania pomiaru (wejścia w interakcję z nim) podąża on jednocześnie wszystkimi możliwymi dla siebie trajektoriami, tym samym przyjmując właściwości falowe. Da to efekt jak ten widoczny na Rysunku 1.6.

Od teraz ten stan 'obierania wszystkich możliwości na raz' przez foton będziemy określać jako **stan fotonu** oznaczany  $|\Psi\rangle$ . Tłumaczy się to na funkcję gęstości prawdopodobieństwa znalezienia fotonu w jego możliwych trajektoriach.

W szczególności w opisywanym wyżej przypadku stan  $|\Psi\rangle$  będzie opisywany przez **superpozycję** stanów 1 i 2 odpowiadających pójściem drogą odpowiednio górną i dolną, tj.  $|\Psi\rangle = \begin{bmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{bmatrix}$  gdzie  $\Psi_i$



Rysunek 1.5: Schemat konstrukcji Interferometru Macha-Zehndera wraz z podpisem macierzami Jonesa



Rysunek 1.6: Schemat konstrukcji Interferometru Macha-Zehndera wraz z podpisem macierzami Jonesa w przypadku zerowej zmiany fazy, tj. w szczególności dla jednego fotonu

- amplituda prawdopodobieństwa obrania ścieżki  $i$ , a  $p_i = |\Psi_i|^2$  - prawdopodobieństwo, że foton leci i-tą trajektorią.

$$|\Psi\rangle = \Psi_1 |1\rangle \oplus \Psi_2 |2\rangle \quad (1.2)$$

Gdzie znakiem  $\oplus$  oznaczamy dodawanie fal. Ta operacja to **Superpozycja**. Warto też zanotować, że skoro  $|\Psi_i| = p_i$  to ich suma musi się dodawać do 1

$$\sum_i |\Psi_i|^2 = 1$$

(innymi słowy prawdopodobieństwo znalezienia fotonu w całej przestrzeni zdarzeń jest 1)

Dla zbudowania intuicji na ten moment możemy sobie utożsamiać tę funkcję prawdopodobieństwa z obserwowanym natężeniem światła:

$$|\Psi_i|^2 \sim |\mathcal{E}_i|^2 \sim I_i$$

## 1.5 Hipoteza De Broigle'a

*Side note 1:* W naszych rozważaniach nie będzie mieć znaczenia faza całkowita, znaczenie będzie mieć tylko faza względna między ramionami, tj.  $\mathcal{E}_i \rightarrow e^{i\xi} \mathcal{E}_i$ . Innymi słowy, 'globalna faza' nie istnieje!

Wyszliśmy w naszych dywagacjach od myślenia o fotonach jako o obiektach falowych, ale nie można zapomnieć o tym, że fotony mają również właściwości korpuskularne, więc sugeruje to, że dla materii też to powinno działać. W związku z tym [Hipoteza De Broigle'a](#) odpowiadać nam będzie za opisanie 'fal materii', gdzie ich długość fali to będzie:

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

Co dla światła ma interpretację:

$$p = \frac{E}{c} = \frac{h \cdot \mu}{c} = \frac{h}{\lambda}$$

Gdzie  $E$  - Energia.

Further reading:

- [Notatki Demko do tego wykładu](#)
- [Zadanka na ćwiczenia 1](#)
- [Zadanka na ćwiczenia 2](#)

# Lecture 2

## Stany i pomiary kwantowe

### 2.1 Stany i pomiary kwantowe

W tym wykładzie zajmiemy się powoli formalizowaniem intuicji nabywanej na poprzednim wykładzie. Zdefiniujmy  $|i\rangle$  - pewne stany rozróżnialne (istnieje pomiar dający różne wyniki dla różnych stanów).

#### Zasada superpozycji

Jeśli  $|1\rangle$  i  $|2\rangle$  są dopuszczalnymi stanami układu, to |1\rangle \oplus |2\rangle<sup>1</sup> też musi być dopuszczalnym stanem układu

Matematyczna struktura odpowiednia dla superpozycji to:

- Przestrzeń Hilberta  $\mathcal{H}$  nad  $\mathcal{C}$
- $\mathcal{H}$  - przestrzeń wektorowa nad  $\mathcal{C}$  z iloczynem skalarnym  $\langle \Psi | \varphi \rangle$ ,  $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}^2$ , zupełna<sup>3</sup>
- **Uwaga:** każda skończenie wymiarowa przestrzeń Hilberta ( $\dim \mathcal{H} = d$ ) jest izomorficzna z  $\mathcal{C}^d$ .

**Stan Kwantowy:** Niech  $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ ,  $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$ . **Uwaga:**  $|\Psi\rangle \stackrel{\text{F}}{=} e^{i\xi} |\Psi\rangle \implies |\Psi\rangle \stackrel{\text{F}}{=} z \cdot |\Psi\rangle$ <sup>4</sup>

Stanem kwantowym nazwiemy też promień w przestrzeni Hilberta  $\mathcal{H}$

**Pomiary kwantowe:** W przestrzeni Hilberta  $\mathcal{H}$  bierzemy sobie wektory  $|a_i\rangle \in \mathcal{H}$ , tworzące bazę ortonormalną w  $\mathcal{H}$ . Bedzie to zespół rozróżnialnych stanów różniących się pewną obserwowalną wielkością fizyczną  $A$ . Czyli przyjmujemy:

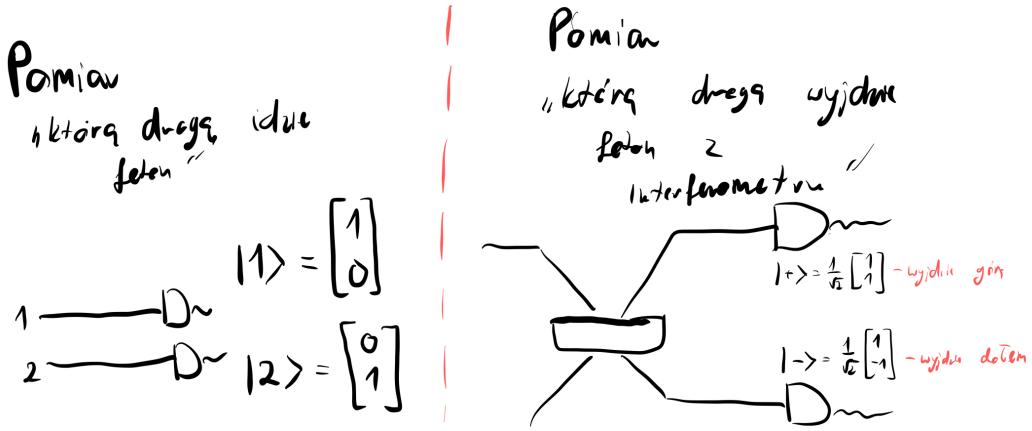
$|a_i\rangle$  - mają dobrze określoną wartość wielkości fizycznej  $A$ . Zawsze jak je mierzymy to dostajemy  $a_i$ . Innymi słowy, jak mamy kilka wielkości fizycznych  $A, B, C, \dots$ , to w ogólności nie będziemy mogli znaleźć jednej bazy ortonormalnej  $|a_i, b_i, c_i, \dots\rangle$ . Jest to esencja mechaniki kwantowej, że różne wielkości fizyczne związane są z różnymi, niekompatybilnymi wobec siebie bazami, które opisują każdą z osobna.<sup>5</sup>

<sup>2</sup>wektor reprezentuje stan

<sup>3</sup>każdy ciąg Cauchy zbiega do elementu  $\mathcal{H}$

<sup>4</sup>Symbol  $\stackrel{\text{F}}{=}$  oznacza 'w interpretacji fizycznej ...'

<sup>5</sup>Czyli pomiar ≠ zaglądanie do garnka /sprawdzanie stanu który jest zdeterminowany/



Rysunek 2.1: Porównanie podejść myślenia o kwantu - deterministyczny i niedeterministyczny

### Postulat pomiarowy

Jeśli  $|\Psi\rangle$  jest dowolnym stanem, na którym chcemy zmierzyć wielkość fizyczną  $A$ , z którą stowarzyszona jest baza  $\{|a_i\rangle\}$ . Możemy napisać:

$$|\Psi\rangle = \sum_i \alpha_i |a_i\rangle$$

Wtedy uzyskany wynik  $a_i$  z prawdopodobieństwem  $p_i = |\alpha_i|^2 = |\langle a_i | \Psi \rangle|^2$ . Tym samym stan po pomiarze ma dobrze określone wielkości  $a_i$ , tj. jest  $|\Psi\rangle = |a_i\rangle$ .

Czyli też jak już raz dokonamy pomiaru na stanie kwantowym to on już nie wróci do możliwości interferencji, i za każdym kolejnym pomiarem już będziemy obserwować ten sam stan, tj. zacznie się zachowywać jakby był klasyczny.

**Obserwabla:** Z pomiarem wielkości  $A$  ( $\{|a_i\rangle\}$ ) stwarzyszamy operator

$$\hat{A} = \sum_i a_i |a_i\rangle \langle a_i|$$

gdzie  $\hat{A}$  jest operatorem Hermitowskim<sup>6</sup> czyli w szczególności mając  $\hat{A}$  możemy też znaleźć  $\{|a_i\rangle\}$  robiąc rozkład własny.

*Crash course z notacji Diraca:*

**ket:**

$$|a\rangle = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \mathbf{v}$$

**bra:**

$$\langle a | = |a\rangle^\dagger = [a_1, a_2, \dots, a_n]^* = \mathbf{v}^\dagger$$

<sup>6</sup>Operator hermitowski -  $A^\dagger = A$

Czyli jak je połączymy dostajemy **braket**:

$$\langle a|b\rangle = [a_1, a_2, \dots, a_n]^* \cdot \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} = \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}^* = \text{liczba}^7$$

Zaś z kolei jak pomnożymy w odwrotnej kolejności mamy **ketbra**:

$$|a\rangle\langle b| = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} \cdot [a_1, a_2, \dots, a_n]^* = M \in M(\mathcal{C})_n^n$$

co rozumiemy też jako operator rzutowy.

---

Obserwacje jest wygodniej liczyć jako wartości oczekiwane z jakichś rozkładów prawdopodobieństw:

$$\langle A \rangle = \sum_i p_i a_i = \sum_i |\langle a_i | \Psi \rangle|^2 \cdot a_i$$

Gdzie wiemy, że człon  $|\langle a_i | \Psi \rangle|^2$  możemy rozpisać jako:

$$|\langle a_i | \Psi \rangle|^2 = |\langle \Psi | a_i \rangle|^2 = \langle \Psi | a_i \rangle \langle a_i | \Psi \rangle = \langle \Psi | a_i a_i^\dagger | \Psi \rangle$$

W związku z tym możemy dalej rozpisać  $\langle A \rangle$  jako:

$$\langle A \rangle = \langle \Psi | \sum_i a_i |a_i\rangle\langle a_i| | \Psi \rangle = {}^8\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle$$

Further reading:

- [Notatki Demko do wykładu](#)
- [Zadania na ćwiczenia 2](#)
- [Rozwiązania z ćwiczeń 2](#)

---

<sup>7</sup>Iloczyn skalarny

<sup>8</sup> $\sum_i a_i |a_i\rangle\langle a_i| = \hat{A}$

# Lecture 3

## Ewolucja stanów kwantowych i Hamiltonian

### 3.1 Ewolucja stanów kwantowych

Będziemy brać teraz pod uwagę tylko **układy izolowane!** Tutaj rozumiemy, że **Układ izolowany** - układ który nie oddziaływa z otoczeniem i brak pomiarów.

Formalnie napiszemy, że (póki co bez żadnych założeń)  $|\Psi(0)\rangle$  - stan w chwili początkowej,  $|\Psi(t)\rangle$  - stan po czasie. Teraz chcemy wiedzieć, jaki będzie  $|\Psi(t)\rangle$ ? Otóż:

$$|\Psi(0)\rangle = (U)(t)[|\Psi(0)\rangle]$$

Tj. tak jak w mechanice klasycznej - założymy, że nasza ewolucja w czasie jest odwracalna. Wynika z tego, że

- stany rozróżnialne<sup>1</sup> muszą pozostać rozróżnialne. Możemy na to patrzeć jako na **zachowanie informacji**.

$$\langle\Psi(0)|\Psi(0)\rangle = 0, \quad \langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle = 0$$

- Stopień rozróżnialności tych stanów zależyć będzie od ich iloczynu skalarnego. Chcemy, żeby pozostał on stały

$$\implies \langle\Psi(0)|\Psi(0)\rangle = \langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle$$

**Fakt:**  $U(t)$  jest liniowe.

Sprawdźmy go. Także rozważmy

$$|\xi\rangle = U(t)[a|\Psi(0)\rangle + b|\Psi(0)\rangle] - aU(t)[|\Psi(0)\rangle] - bU(t)[|\Psi(0)\rangle]$$

Teraz obliczmy:

$$\begin{aligned} \langle\xi|\xi\rangle &= (U(t)[a|\Psi(0)\rangle + b|\Psi(0)\rangle])^\dagger(U(t)[a|\Psi(0)\rangle + b|\Psi(0)\rangle] - aU(t)[|\Psi(0)\rangle] - bU(t)[|\Psi(0)\rangle]) \\ &\quad - (aU(t)[|\Psi(0)\rangle])^\dagger(-||-) \\ &\quad - (aU(t)[|\Psi(0)\rangle])^\dagger(-||-) \end{aligned}$$

Czyli  $(U(t)|\Psi\rangle)^\dagger(U(t)|\Psi\rangle) = \langle\Psi|\Psi\rangle = 0$ , bo można 'usunąć' wszystkie  $U(t)$ . Wynika z tego, że  $U(t)$  jest liniowe.

**Wnioski:**  $U(t)$  jest liniowa (w skończeniu wymiarowych przestrzeniach reprezentowanych przez macierze<sup>2</sup>) i zachowuje iloczyn skalarny.

$$\implies |\Psi(0)\rangle = U(t) \cdot |\Psi(0)\rangle$$

---

<sup>1</sup>Ortogonalne

<sup>2</sup>Bo  $(AB)^\dagger = A^\dagger B^\dagger$

Teraz ciągnąc to rozumowanie dalej:

$$\forall_{|\Psi(0)\rangle, |\phi(0)\rangle} = \langle\Psi(0)|\phi(0)\rangle = \langle\Psi(0)|U^\dagger(t)U(t)|\phi(0)\rangle = \langle\Psi(0)|\phi(0)\rangle$$

Wynikać z tego będzie, że  $U(t)^\dagger U(t) = 1$ . Wiedząc, że pracujemy w skończenie wymiarowej przestrzeni wnioskujemy, że  $U(t)$  jest **Unitarne**. Oznacza to też, że  $U^{-1}(t) = U(t)^\dagger$ . Teraz fizycznym argumentem, że  $U^{-1}(t)$  istnieje będzie to, że powinno być  $U^{-1}(t) = U(-t)$ .

Idziemy dalej. Wiemy, że  $U(t=0) = \mathbb{1}$ . Rozważmy pierwsze (liniowe) rozwinięcie  $U(t)$  w czasie:

$$U(dt) = \mathbb{1} + \left( -\frac{i}{\hbar} H dt + O(dt^2) \right)$$

$$1 = U(dt)^\dagger U(dt) = \left( \mathbb{1} + \frac{i}{\hbar} H^\dagger dt + O(dt^2) \right) \left( \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} H^\dagger dt + O(dt^2) \right) = \mathbb{1} + \frac{i}{\hbar} (H^\dagger - H) dt + O(dt^2)$$

Czyli widzimy, że  $H^\dagger = H$  - jest Hermitowskie.

$$\begin{aligned} |\Psi(dt)\rangle &= U(dt) |\Psi(0)\rangle = |\Psi(0)\rangle - \frac{i}{\hbar} H dt |\Psi(0)\rangle + O(dt^2) = |\Psi(0)\rangle + \frac{d|\Psi(t)\rangle}{dt} \Big|_{t=0} + \mathcal{O}(dt^2) \\ \frac{d|\Psi(t)\rangle}{dt} \Big|_{t=0} &= -\frac{i}{\hbar} H |\Psi(0)\rangle \implies i\hbar \frac{d|\Psi(t)\rangle}{dt} \Big|_{t=0} = H |\Psi(0)\rangle \end{aligned}$$

Ale zamiast pisać  $|\Psi(dt)\rangle = U(dt) |\Psi(0)\rangle$  można ogólniej powiedzieć:  $|\Psi(t+dt)\rangle = U(dt) |\Psi(t)\rangle$ . Dostajemy krypto [Równanie Schrödingera](#):

$$i\hbar \frac{d|\Psi(t)\rangle}{dt} = H |\Psi(t)\rangle \tag{3.1}$$

(Krypto, bo nie znamy natury  $H$ )

## 3.2 Argument za naturą fizyczną $H$

Rozważmy obserwable  $A$  i jej wartość oczekiwana na stanie  $|\Psi(t)\rangle$ . Wtedy:

$$\langle A \rangle_t = \langle \Psi(t) | A | \Psi(t) \rangle$$

$$\begin{aligned} \frac{d\langle A \rangle_t}{dt} &= \frac{d\langle \Psi(t) |}{dt} A |\Psi(t)\rangle + \langle \Psi(t) | A | \Psi(t) \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle \Psi(t) | H \cdot A - A \cdot H | \Psi(t) \rangle \\ &= \frac{i}{\hbar} \langle \Psi(t) | [H, A] | \Psi(t) \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle \Psi(t) | [A, H] | \Psi(t) \rangle \end{aligned}$$

Jeśli wybierzymy  $A = H \implies \frac{d\langle H \rangle}{dt} = 0$  czyli  $H$  jest związany z wielkością fizyczną zachowaną w czasie ewolucji  $\implies$  w pierwsza myśl, że ma coś wspólnego z energią.

### Analogia z Mechaniką Klasyczną

$$A(q, p), \quad \frac{dA}{dt} = \{A, H\} = \sum_i \frac{dA}{dq_i} \frac{dH}{dp_i} - \frac{dA}{dp_i} \frac{dH}{dq_i}$$

Formalna recepta wiążąca mechanikę klasyczną z kwantową:

$$\{\cdot, \cdot\} \rightarrow = -\frac{i}{\hbar} [\cdot, \cdot]$$

Jest to dodatkowy argument na to, że  $H$  ma coś wspólnego z energią.

To teraz dochodzimy do równań:

$$\frac{d|\Psi(t)\rangle}{dt} = -\frac{i}{\hbar} H |\Psi(t)\rangle \implies |\Psi(t)\rangle = U(t) |\Psi(0)\rangle$$

Gdzie  $U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H \cdot t}$  Gdzie wreszcie piszemy, że  $H$  - Hamiltonian.

### 3.3 Wyznaczenie ewolucji stanu w praktyce

Mamy  $H$ , robimy jego rozkład własny, tj.  $H = \sum_k E_k {}^3 |E_k\rangle\langle E_k|$ .  $H |E_k\rangle = E_k |E_k\rangle$   
Jeśli:

$|\Psi(0)\rangle = |E_k\rangle$ , stan o dobrze określonej energii

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} H \cdot t} |E_k\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} E_k \cdot t} |E_k\rangle$$

Czyli energia stanu o dobrze określonej energii zmienia tylko globalną fazę, czyli fizycznie stan się nie zmienia.

Ogólnie jeśli mamy dowolny stan początkowy  $|\Psi(0)\rangle$ , to możemy go rozłożyć w bazie  $\{|E_k\rangle\}$ . W takim razie widzimy, że zajdzie:

$$|\Psi(0)\rangle = \sum_k c_k {}^4 |E_k\rangle, \text{ z liniowości } |\Psi(t)\rangle = \sum_k c_k U(t) |E_k\rangle = \sum_k c_k e^{-\frac{i}{\hbar} E_k \cdot t} |E_k\rangle$$

**Uogólnienie** W modelach gdy  $H$  zależy jawnie od czasu (czyli de facto bierzemy układ izolowany) możemy te układy wciąż opisywać jakby były izolowane, ale musimy dopuścić  $H = H(t)$ . Wtedy jedyna zmiana jaka się pojawi, to:

$$\frac{d|\Psi(t)\rangle}{dt} = -\frac{i}{\hbar} H(t) |\Psi(0)\rangle \implies U(t) \approx e^{-\frac{i}{\hbar}(t-\Delta t)\Delta t} \dots e^{-\frac{i}{\hbar}(\Delta t)\Delta t} e^{-\frac{i}{\hbar}(0)\Delta t}$$

$$U(t) \approx \begin{cases} U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t H(t) dt}, & \text{jeśli } H(t) \text{ komutują ze sobą w różnych chwilach czasu} \\ U(t) = \tau^5 \left[ e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t H(t) dt}, \right] & \end{cases}$$

---

<sup>3</sup>Wartości własne (energie)

<sup>4</sup> $c_k = \langle E_k | \Psi(0) \rangle$

# Lecture 4

## Równanie Schrodingera (na koszulkach)

### 4.1 Schizofreniczna Ewolucja

Schizofreniczna ewolucja stanów kwantowych	
$U\hat{\psi}(t) = U(t)  \psi(0)\rangle$	W efekcie pomiaru $p(i) =  \langle a_i   \psi(0) \rangle ^2$ $ \psi(t)\rangle \xrightarrow{p(i)}  a_i\rangle$
Ciągły	Skokowa
Deterministyczny	Probabilistyczna
Odwracalny	Nieodwracalna

Rysunek 4.1: Schizofreniczna Ewolucja

### 4.2 Kwantowy Efekt Zenona (z Elei)

Formułował wiele paradoksów - miał dobrą intuicję. Jeden z bardziej znanych - **paradoks strzały** - Skoro strzała w każdej chwili spoczywa, to ruch jest niemożliwy.  
Rozważmy układ kwantowy, którego ewolucja jest opisana Hamiltonianem  $\mathcal{H}$ .

- Stan początkowy  $|\Psi(0)\rangle$  nie będzie stanem własnym  $\mathcal{H}$  (żeby ewoluował nietrywialnie).
- Wtedy ewolucja po czasie  $t$ :  $|\Psi(t)\rangle = e^{-\frac{i\mathcal{H}t}{\hbar}} |\Psi(0)\rangle$  i sprawdzamy, czy układ wciąż jest w stanie  $|\Psi(0)\rangle$ <sup>1</sup>
- Prawdopodobieństwo, że stan pozostał niezmieniony:  
 $p(t) = |\langle\Psi(0)|\Psi(t)\rangle|^2 = \langle\Psi(0)|\Psi(t)\rangle \langle\Psi(t)|\Psi(0)\rangle = \langle\Psi(0)|e^{-\frac{i\mathcal{H}t}{\hbar}}|\Psi(0)\rangle = \langle\Psi(0)|e^{\frac{i\mathcal{H}t}{\hbar}}|\Psi(0)\rangle$   
 Wtedy po rozwinięciu dla małych  $t$ <sup>2</sup>:

$$\begin{aligned} p(t) &= 1 + t \cdot \left[ \langle\Psi(0)| - \frac{i\mathcal{H}}{\hbar} |\Psi(0)\rangle \langle\Psi(0)|\Psi(0)\rangle + \langle\Psi(0)|\Psi(0)\rangle \langle\Psi(0)| \frac{i\mathcal{H}}{\hbar} |\Psi(0)\rangle \right] + \\ &- t^2 \cdot \left[ \langle\Psi(0)| \frac{\mathcal{H}^2}{\hbar^2} |\Psi(0)\rangle \langle\Psi(0)|\Psi(0)\rangle + \frac{1}{2} \langle\Psi(0)|\Psi(0)\rangle \langle\Psi(0)| \frac{\mathcal{H}^2}{\hbar^2} |\Psi(0)\rangle - \langle\Psi(0)| \frac{\mathcal{H}}{\hbar} |\Psi(0)\rangle \langle\Psi(0)| \frac{\mathcal{H}}{\hbar} |\Psi(0)\rangle \right] \\ &= 1 + \underbrace{\frac{t^2}{\hbar^2} (\langle\Psi(0)|\mathcal{H}^2|\Psi(0)\rangle - \langle\Psi(0)|\mathcal{H}|\Psi(0)\rangle^2)}_{\Delta^2\mathcal{H}^3} + \mathcal{O}(t^3) \end{aligned}$$

Czyli wyobrażamy sobie, że mierzymy stan coraz częściej, czyli n razy co czas  $\frac{t}{n}$ , pytamy jakie jest prawdopodobieństwo, że we wszystkich  $n$  pomiarach okaże się, że stan pozostaje  $|\Psi(0)\rangle$

- Czyli finalnie to prawdopodobieństwo, to:  $p_n = (|\langle\Psi(0)|\Psi(t)\rangle|^2)^n = \left[1 - \frac{\Delta^2\mathcal{H}}{\hbar^2}(\frac{t}{n})^2 + \mathcal{O}(t^3)\right]^n$   
 $p_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 1 - \frac{\Delta^2\mathcal{H}t^2}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{n} \mathcal{O}(\frac{1}{n^2}) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 1$
- Rozumiemy to tak, że bardzo częsty pomiar 'zamraża' ewolucję stanu.

### 4.3 Równanie Schrodingera (na koszulkach)

Nierelatywistyczna, punktowa cząstka kwantowa mogąca się poruszać w przestzeni. Dla uproszczenia myślimy na razie o 1D.

Jeśli przestrzeń byłaby fundamentalnie zdyskretyzowana, tj.  $x_i^4 \in \{\dots, -2\Delta, -\Delta, 0, \Delta, 2\Delta, \dots\}$ ,  $|x_i\rangle$  - stany położeniowe (roznialne) reprezentujące, że cząstka znajduje się w punkcie  $x_i$ .

Ogólny stan:  $|\Psi\rangle = \sum_i \Psi_i |x_i\rangle$ ,  $\sum_i |\Psi_i|^2 = 1$ ,  $\langle x_i | x_j \rangle = \delta_{ij}$

Wygodnie jest rozważyć granicę ciągłą:

$$|\Psi\rangle = \int dx \Psi(x) |x\rangle$$

Gdzie  $|\Psi(x)|^2$  - gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w punkcie  $x$ .

Skoro chcemy, żeby  $\langle\Psi|\Psi\rangle = 1^{(i)} \implies \int dx |\Psi(x)|^2 = 1^{(ii)}$ . Czyli:

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = \int dx \Psi^*(x) \langle x | \int dx \Psi(x') |x'\rangle \implies \int dx dx' \Psi^*(x) \Psi(x) \langle x | x' \rangle \xrightarrow{(i),(ii)} \langle x | x' \rangle = \delta(x - x')$$

**Funkcja falowa** - funkcja gęstości prawdopodobieństwa  $\Psi(x)$  o amplitudzie  $|\Psi(x)|^2$ . Jest ona reprezentacją położeniową stanu  $|\Psi\rangle$

Zauważmy:  $|Psi\rangle = \int dx \Psi |x\rangle$ ,  $|\phi\rangle = \int dx' \phi(x') |x'\rangle$

$$\langle\Psi|\phi\rangle = \int dx dx' \Psi^*(x) \phi(x') \underbrace{\langle x | x' \rangle}_{\delta(x-x')} = \int dx \Psi^*(x) \phi(x)$$

<sup>1</sup>Czyli wykonujemy pomiar w bazie ortonormalnej, której jednym z wektorów jest  $|\Psi(0)\rangle$

<sup>2</sup> $e^x \approx 1 + x + \frac{x^2}{2} + \mathcal{O}(x^3)$

<sup>3</sup>Stan ewoluje 'tym szybciej' im ma większą wariancję  $\mathcal{H}$

<sup>4</sup>Dopuszczalne położenia

<sup>5</sup>Czyli o  $|x\rangle$  można myśleć jako o pewnej bazie ortogonalnej, ale nie unormowanej, bo  $\langle x | x \rangle = \infty$

Możemy teraz zdefiniować operator (**Obserwabla Położenia**):

$$\hat{x} = \int dx x |x\rangle\langle x|, \quad \hat{x}|x\rangle - \int dx' x' |x'\rangle\langle x'| |x\rangle = x|x\rangle$$

Teraz zauważmy, że warunkiem zupełności bazy będą: (**Fakt**)  $\underbrace{\int dx |x\rangle\langle x|}_C = \mathbb{1}$

(**Dowód**) Weźmy dwa dowolne  $|x'\rangle, |x''\rangle$

$$\langle x'|C|x''\rangle = \int dx \langle x'|x\rangle \underbrace{\langle x|x''\rangle}_{\delta(x-x'')} = \langle x'|x''\rangle = \langle x'|\mathbb{1}|x''\rangle \implies C = 1 \quad \square$$

Czyli:

$$|\Psi\rangle = \int dx' \Psi x' |x'\rangle \implies \Psi(x) = \langle x|\Psi\rangle$$

Pamiętamy, że  $i\hbar \frac{d|\Psi(t)\rangle}{dt} = \mathcal{H}|\Psi(t)\rangle$ . Teraz żeby napisać  $\mathcal{H}$  kwantowo potrzebujemy  $\hat{p}$

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad \text{kwantowo} \quad \rightarrow \hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$$

### Operator Pędzu:

Intuicja falowa (świetlna), fale płaskie (stany o dobrze określonej energii i pędzie)

$$\Psi(x, t) \sim e^{i(kx - \omega t)}$$

Hipoteza Plancka/ De Broigla'a  $E = \hbar\omega$ ,  $p = \frac{\hbar}{\lambda} = \hbar \cdot k$   
żeby  $\hat{p}\Psi(x, t) = p\Psi(x, t) = \hbar k \Psi(x, t)$  trzeba wziąć  $\hat{p} = \frac{\hbar}{i}$

Further reading:

- [Notatki Demko do wykładu](#)
- [Zadania na ćwiczenia 3](#)
- [Rozwiązania z ćwiczeń 3](#)

# Lecture 5

## Równanie Schrödingera, propagator i całki po trajektoriach et al.

### 5.1 Powtórka z poprzedniego wykładu

#### 5.1.1 Reprezentacja położeniowa a pędowa

W reprezentacji położeniowej:

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle, \quad \hat{x}|\Psi\rangle = \hat{x} \int dx \Psi(x) |x\rangle = \int dx \Psi(x) \hat{x} |x\rangle = \int dx \underbrace{\Psi(x)x}_{1} |x\rangle$$

Czyli widzimy, że zachodzi  $|\Psi\rangle \xrightarrow{\hat{x}} \hat{x}|\Psi\rangle \equiv \Psi(x) \rightarrow x \cdot |\Psi\rangle$

Zachodzi również:

- $\{\cdot, \cdot\} \rightarrow -\frac{i}{\hbar}[\cdot, \cdot]$
- $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \cdot \mathbb{1}$
- $[\hat{x}, \hat{p}]|\Psi\rangle = i\hbar|\Psi\rangle$  w reprezentacji położeniowej.
- $(x \cdot \hat{p} - \hat{p} \cdot x)\Psi(x) = i\hbar\Psi(x)$   
 $x \underbrace{\hat{p}[\Psi(x)]}_{2} - \hat{p}[x \cdot \Psi(x)] = i\hbar\Psi(x)$

### 5.2 Równanie Schrödingera

#### Równanie Schrödingera

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x) + V(x)\Psi(x, t) \quad (5.1)$$

<sup>1</sup>Efektywne działanie  $\hat{x}$  w reprezentacji położeniowej

<sup>2</sup>Działanie  $\hat{p}$  w reprezentacji położeniowej

Wiemy, że ogólnie ewolucję liczymy:

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= \sum_k \langle E_k | \Psi(0) \rangle e^{-\frac{iE_k t}{\hbar}} |E_k\rangle \\ \langle x | \Psi(x) \rangle &= \sum_k e^{-\frac{iE_k t}{\hbar}} \langle E_k | \Psi(0) \rangle \langle x | E_k \rangle \\ \Psi(x) &= \sum_k \langle E_k | \Psi(0) \rangle e^{-\frac{iE_k t}{\hbar}} \underbrace{\varphi_{E_k}(x)}_3 \end{aligned}$$

Czyli wystarczy zmienić  $\varphi_{E_k}(x)$  i  $E_k$ , żeby znaleźć ewolucję  $\hat{\mathcal{H}}[\varphi_{E_k}(x)] = E_k \varphi_{E_k}(x)$  co daje nam:

### Równanie Schrödingera bez czasu

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \varphi_{E_k}(x) = E_k \varphi_{E_k}(x) \quad (5.2)$$

Znane skrótnie jako:

$$\hat{H} |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle \quad (5.3)$$

Ta niezależna od czasu reprezentacja równania schrödingera de facto jest problemem szukania stanów własnych Hamiltonianu. Czyli rozwiązuając ewolucję Hamiltonianu w czasie najpierw rozwiązujeśmy problem znajdywania stanów, a dopiero potem szukamy jego ewolucji czasowej, tj zgodnie z równaniem (5.1).

#### 5.2.1 Cząstka swobodna

Gdzie dla cząstki swobodnej wygląda to tak, że  $V(x) = 0$ :

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) &= E \Psi(x) \\ \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) &= -\frac{2mE}{\hbar^2} \Psi(x) \end{aligned}$$

Gdzie rozwiązania to kombinacje liniowe  $e^{\pm i \frac{2mE}{\hbar} x}$  tj. Fale płaskie będące jednocześnie stanami własnymi  $\hat{p}$

$$\Rightarrow \hat{p} e^{ipx/\hbar} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} e^{ipx/\hbar} = p \cdot e^{ipx/\hbar}$$

Czyli będziemy rozkładać na stany własne w reprezentacji pędowej:

$$\Psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}, \quad p = \pm\sqrt{2mE}$$

Wtedy widzimy, że ewolucja prosta:

$$\Psi_p(x, t) = \Psi_p(x) e^{-\frac{iEt}{\hbar}} = \Psi_p(x) e^{-\frac{ip^2 t}{2m\hbar}}$$

Czyli ewolucja ogólnego stanu:

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \underbrace{\langle p | \Psi(0) \rangle}_4 \cdot e^{-\frac{ipx}{\hbar} - \frac{ip^2 t}{2m\hbar}}$$

---

<sup>3</sup>Funkcja falowa stanu własnego  $\hat{\mathcal{H}}$  (stan stacjonarny)

## 5.3 Historia rozwoju Mechaniki Kwantowej

Były dwie szkoły Falenicka i Otwocka Heisenberga i Schrödingera:

- Schrödinger - Mechanika falowa opis poprzez funkcje falowe.
- Heisenberg - Mechanika Macierzowa, opis poprzez obserwable

## 5.4 Obraz Schrödingera i obraz Heisenberga

**Obraz Schrödingera:**

$|\Psi\rangle = U(t)|\Psi(0)\rangle$ ,  $U(t) = e^{-\frac{i\mathcal{H}t}{\hbar}}$ . Jeśli liczymy wartość oczekiwana obserwabli w czasie  $t$ :  $\langle A \rangle_t = \langle \Psi(t) | \hat{A} | \Psi(t) \rangle = \langle \Psi(0) | U^\dagger(t) \hat{A} U(t) | \Psi(0) \rangle$

Możemy jednak spojrzeć na to jak na sytuację, gdzie stan układu nam się nie zmienia, a zmieniają się obserwable. Daje nam to:

**Obraz Heisenberga:**

$|\Psi^{(H)}(t)\rangle = |\Psi(0)\rangle$ ,  $\hat{A}^{(H)} := U^\dagger(t) \hat{A} U(t)$ ,  $\langle A \rangle_t = \langle \Psi(0) | A^{(H)}(t) | \Psi(0) \rangle$

Ewolucja obserwabli jest opisana przez równanie Heisenberga:

$$\frac{d}{dt} \hat{A}^{(H)}(t) = \left( \frac{d}{dt} U^\dagger(t) \right) \hat{A} U(t) + U^\dagger(t) (\hat{A}) \frac{d}{dt} U(t) = \frac{i}{\hbar} \left[ U^\dagger(t) \hat{\mathcal{H}} \hat{A} U(t) - U^\dagger(t) \hat{A} \hat{\mathcal{H}} U(t) \right] = \frac{i}{\hbar} \left[ \hat{\mathcal{H}} \hat{A}^{(H)} - \hat{A}^{(H)} \hat{\mathcal{H}} \right]$$

Czyli finalnie dostajemy:

### Równanie Heisenberga

$$\frac{d\hat{A}^{(H)}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{A}^{(H)}(t)] \quad (5.4)$$

Further reading:

- Notatki Demko do wykładu
- Zadania na ćwiczenia 4
- Tu będą Rozwiązania z ćwiczeń 4

## 5.5 Propagator i całki po trajektoriach

Ewolucja w reprezentacji położeniowej:

$$\overbrace{\langle x | \Psi(t) \rangle}^{\Psi(x,t)} = \sum_k e^{-\frac{iE_k(t-t_0)}{\hbar}} \langle E_k | \underbrace{\mathbb{1}}_{\int dx_0 |x_0\rangle \langle x_0|} | \Psi(t_0) \rangle \langle x | E_k \rangle = \int dx_0 \sum_k e^{-\frac{iE_k(t-t_0)}{\hbar}} \underbrace{\langle E_k | x_0 \rangle}_{\varphi_k^*(x_0)} \overbrace{\langle x_0 | \Psi(t_0) \rangle}^{\Psi(x_0,t_0)} \underbrace{\langle x | E_k \rangle}_{\varphi_k(x)}$$

---

<sup>4</sup>Rozkład na stany własne pędu=  $\tilde{\Psi}(p, 0)$  - reprezentacja pędowa

$$\Psi(x, t) = \int dx_0 \left( \sum_k \varphi_k(x) \varphi_k^*(x_0) e^{-\frac{iE_k(t-t_0)}{\hbar}} \right) \Psi(x_0, t_0)$$

### Propagator

Możemy powiedzieć, że  $K(x, t, x_0, t_0)$  to **Propagator**

$$K(x, t, x_0, t_0) = \sum_k \varphi_k(x) \varphi_k^*(x_0) e^{-\frac{iE_k(t-t_0)}{\hbar}} \quad (5.5)$$

Jak można łatwo zauważyc, propagator kwacze jak kaczka, chodzi jak kaczka, wygląda jak kaczka, więc jest to szukana **Funkcja Greenna**<sup>5</sup>.

Ważna własność propagatora:

$$K(x, t_0, x_0, t_0) = \sum_k \varphi_k(x) \varphi_k^*(x_0)^6 = \delta(x - x_0)$$

**Przykład:** Propagator cząstki swobodnej

$$K(x, t, x_0, t_0) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp e^{\frac{ipx}{\hbar} - \frac{i(t-t_0)}{2m\hbar} p^2}$$

Co mając w głowie **bardzo przyjemną własność matematyczną**:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2+bx} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{4a}} \quad \text{co działa nawet dla liczb zespolonych, gdy } \operatorname{Re}(a) \geq 0$$

Dostajemy:

$$K(x, t, x_0, t_0) \stackrel{\operatorname{Re}(a)=0}{=} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar|y-y_0|}} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m(x-x_0)^2}{2|t-t_0|}}$$

---

<sup>5</sup>Oh no... PTSD activated

<sup>6</sup>Pamiętamy, że  $\sum_k \varphi_k(x) \varphi_k^*(x) = \sum_k \langle x | E_k \rangle \langle E_k | x \rangle = \langle x | \delta(x - x_0) | x_0 \rangle$

<sup>7</sup>W sensie dystrybucyjnym

# Lecture 6

## Propagator et al.

### 6.1 Ad Propagator

Kolejna ciekawa obserwacja:

$$U^1(t - t_0) = U(t - t_1)U(t_1 - t_0)$$

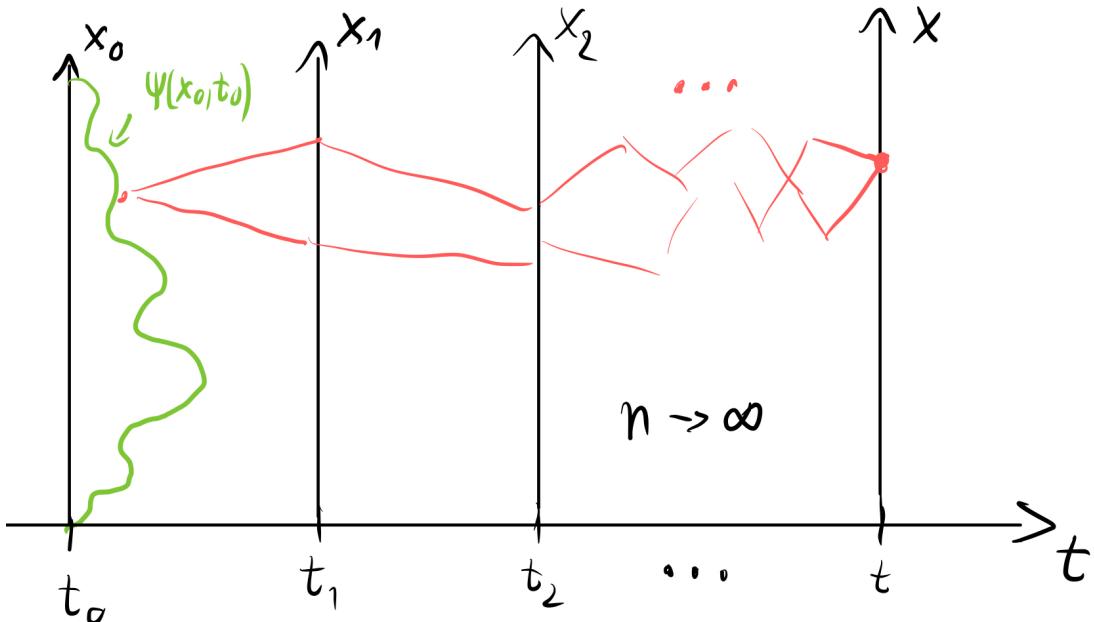
Teraz zapisując to na propagatorach dostajemy:

$$\Psi(x, t) = \int dx_0 dx_1 K(x, t, x_0, t_0)K(x_1, t_1, x_0, t_0)\Psi(x, t)$$

To teraz możemy zageścić atmosferę ( $t_k$ ):

$$\Psi(x, t) = \int dx_0 dx_1 dx_2 \dots K(x, t, x_n, t_n)K(x_n, t_n, x_{n-1}, t_{n-1}) \dots K(x_1, t_1, x_0, t_0)$$

Teraz przechodzimy do granicy z  $n \rightarrow \infty$  mamy de facto "śumowanie" po wszystkich drogach jakimi porusza się cząstka, trochę jak Zasada Huygenса dla optyki. Twochę jak przechodzenie z reprezentacji położeniowej na pędową.



Rysunek 6.1: Sumowanie po drogach dla cząstki kwantowej, liczona na propagatorach. Wyraża to też Feynmannowska Całka po trajektoriach

---

<sup>1</sup> $U(t)$  jak w Sekcji 5.4

## 6.2 Całka po trajektoriach

Wprowadzone do Mechaniki Kwantowej przez Feynmana, jest to inny sposób na wyprowadzenie propagatora.

Zauważamy:

$$K(x, t, x_0, t_0) = \sum_{x(\tau)^2, x(t_0)=x_0, x(t)=t} f[x(\tau)]$$

Intuicja: wiemy, że klasyczna trajektoria  $\bar{x}(\tau)$  ekstremalizuje działanie:

$$S[x(\tau)] = \int_{t_0}^t d\tau L(\dot{x}(\tau), x(\tau)), \quad L(\dot{x}, x) = \frac{m\dot{x}^2}{2} - V(x)$$

Gdzie  $L$  - Lagrangian. Weźmy więc

$$f[x(\tau)] = e^{\frac{iS[x(\tau)]}{\hbar}}$$

Dzięki temu w pobliżu trajektorii klasycznej będzie konstruktywna interferencja tych amplitud które sumujemy. Chcemy uzyskać taki efekt, żeby to się zgadzało z obserwowanym światem - zachowującym się klasycznie na skali makro.

**Wniosek:** Wynika z tego fakt, że możemy wyprowadzić Mechanikę Kwantową wyprowadzić z Mechaniki Klasycznej!

Chcemy pokazać, że tak skonstruowany propagator daje nam  $\Psi(x, t)$  spełniającą równanie Schrödingera. Rozważamy teraz infinitesimalny czas  $4 = t_0 + \epsilon$ ,  $K(x, t_0 + \epsilon, x_0, t_0) \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} \text{const.}$ ,

$$e^{1/\hbar \epsilon L(\frac{x-x_0}{\epsilon}, \frac{x+x_0}{2})}$$

Wtedy przeewoluowana funkcja falowa:

$$\Psi(x, t_0 + \epsilon) = \text{const.} \int dx_0 \Psi(x_0, t) e^{\frac{1}{\hbar} \left( \frac{(m(x-x_0))^2}{2\epsilon} - \epsilon V\left(\frac{x+x_0}{2}\right) \right)}$$

Niech  $\eta = x - x_0$ , które jest małe i będziemy chcieli je rozwijać w  $\epsilon$  i  $\eta$ , przy czym wkład do wyrażenia dadzą tylko  $\eta \sim \sqrt{\epsilon}$ . Wtedy:

$$\Psi(x, t_0) + \epsilon \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) \Big|_{t=t_0} \approx -\text{const} \int d\eta e^{\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon}} \left[ \Psi(x, t_0) - \eta \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t_0) \frac{\eta^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi \right] \left[ 1 - \frac{i\epsilon}{\hbar} V(x - \frac{\eta}{2}) \right]$$

Pamiętając o takiej przyjemnej własności:

$$\int dx x^n e^{-ax^2} = \begin{cases} 0 & \text{dla nieparzystych} \\ \frac{\sqrt{\pi}}{2^{n/2}} \cdot \frac{(n-1)!!}{a^{(n+1)/2}} & \text{dla parzystych} \end{cases}$$

$$\Psi(x, t_0) + \epsilon \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) \Big|_{t=t_0} \approx -\text{const} \left[ \Psi(x, t_0) \cdot \sqrt{\frac{\pi}{\frac{-im}{2\hbar\epsilon}}} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t_0) \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left( \frac{-2\hbar\epsilon}{im} \right)^{\frac{3}{2}} \right] \left[ 1 - \frac{i\epsilon}{\hbar} V(x) \right]$$

W najniższym rzędzie w  $\epsilon$ :

$$\Psi(x, t_0) = -\text{const} \Psi(x, t_0) \sqrt{\frac{2\pi\hbar\epsilon}{-im}}$$

Co pozwala nam wyznaczyć stałą  $\text{const.}$  Będzie ona miała interpretację miary przy całkach po trajektoriach.

⇒

Zmierzamy do równania Schrödingera. **Dopisz potem z ostatnich paru minut wykładu**

<sup>2</sup>Trajektoria

# Lecture 7

## Zasady nieoznaczoności

### 7.1 Off to propagator once more

Jak pamiętamy propagator zdefiniowaliśmy jak w równaniu (5.5), tj.

$$K(x, t, x_0, t_0) = \text{const} \sum_{x(\tau)} e^{iS[x(\tau)]} = \int D[x(\tau)] e^{iS[x(\tau)]}, \quad \text{gdzie} \quad S[x(\tau)] = \int_{t_0}^t d\tau L(\dot{x}(\tau), x(\tau))$$

Weźmy sobie przykład, [kwantowy oscylator harmoniczny](#):

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \quad L = \frac{m\dot{v}^2}{2} - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

Z tym, że zdefiniujmy sobie:

$$\begin{aligned} x(\tau) &= \bar{x}(\tau) + y(\tau), & \bar{x}(t_0) &= x_0 & y(t_0) &= 0 \\ && \bar{x}(t) &= x & y(t) &= t \end{aligned}$$

Wtedy nasz Lagrangian przyjmuje postać:

$$L = \frac{m(\bar{x} + y)^2}{2} - \frac{1}{2}m\omega^2(\bar{x} + y)^2 = \frac{m\dot{\bar{x}}^2}{2} - \frac{1}{2}m\omega^2\bar{x}^2 + \frac{m\dot{y}^2}{2} - \frac{1}{2}m\omega^2y^2 + m\dot{\bar{x}}\dot{y} - m\omega^2\bar{x}y$$

Dlatego działanie by wyglądało:

$$S[x(\tau)] = S[x(\tau)] + S[y(\tau)] + \underbrace{\int_{t_0}^t d\tau m\dot{\bar{x}}\dot{y} - m\omega^2\bar{x}y}_{\int_{t_0}^t dt \left[ \underbrace{-\frac{d}{dt} (m\ddot{\bar{x}} - m\omega^2\bar{x})}_{} \right] y} {}_{=0}^2$$

Odwołujemy się tu do wyprowadzenia równań Eulera-Lagrange'a:

$$\frac{d}{dt} \frac{dL}{dx} - \frac{\partial L}{\partial x} = 0, \quad \int_{t_0}^t d\tau \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \delta \dot{x} + \frac{\partial L}{\partial x} \delta x = {}^3 \int d\tau \left[ \underbrace{\left( -\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right)}_{=0} + \frac{\partial L}{\partial x} \right] \delta x$$

Czyli efektywnie sobie rozdzielimy trajektorię klasyczną (do której w granicy skali makro będzie zbiegać nasza trajektoria) od trajektorii kwantowej, do której stosujemy całkę po trajektoriach

$$K(x, t, x_0, t_0) = \exp \left( i \int_{t_0}^t d\tau L(\dot{\bar{x}}, \bar{x}) \right) \cdot \int D[y(\tau)] \exp \left( i \int_{t_0}^t d\tau L(\dot{y}, y) \right)$$

<sup>1</sup>Gdzie  $x(t_0) = x_0$  i  $x(t) = x$

<sup>2</sup>Klasyczne równanie ruchu

<sup>3</sup>Przez części

Czyli:

$$K(x, t, x_0, t_0) = f(t, t_0) \exp\left(i \int_{t_0}^t d\tau L(\dot{\bar{x}}, \bar{x})\right)^4$$

Gdzie klasyczna trajektoria oscylatora harmonicznego wygląda:

$$\bar{x}(\tau) = \bar{x}(t_0) \cos(\omega\tau - t_0) + \frac{\dot{\bar{x}}(t_0)}{\omega} \sin(\omega\tau - t_0), \quad \dot{\bar{x}}(\tau) = -\omega\bar{x}(t_0) \sin(\omega\tau - t_0) + \dot{\bar{x}}(t_0) \cos(\omega\tau - t_0)$$

A działanie:<sup>4</sup>

$$S[\bar{x}(\tau)] = \int_{t_0}^t d\tau \left( \frac{m\dot{\bar{x}}^2(\tau)}{2} - \frac{1}{2}m\omega^2\bar{x}^2(\tau) \right) = \dots = h(\bar{x}(t_0), \dot{\bar{x}}(t_0), t, t_0)$$

Co po wyrażeniu  $\dot{\bar{x}}(t_0)$  poprzez  $\bar{x}(t_0) = x_0$  i  $\bar{x}(t) = x$ :

$$\Rightarrow \dot{\bar{x}}(t_0) = \frac{\bar{x}(t) - \bar{x}(t_0) \cos \omega(t - t_0)}{\sin \omega(t - t_0)} \cdot \omega = \omega \cdot \frac{x - x_0 \cos \omega(t - t_0)}{\sin \omega(t - t_0)}$$

Co po wstawieniu do  $h$  daje:

$$S[\bar{x}(\tau)] = \frac{m\omega}{2 \sin [\omega(t - t_0)]} [(x^2 + x_0^2) \cos \omega(t - t_0) - 2xx_0]$$

I wstawieniu wyżej:

$$K(x, t, x_0, t_0) = f(t, t_0) \exp\left(\frac{m\omega}{2 \sin [\omega(t - t_0)]} [(x^2 + x_0^2) \cos \omega(t - t_0) - 2xx_0]\right)$$

Zaś aby wyznaczyć  $f(t, t_0)$  wystarczy przepropagować dowolny stan (np. gaussowski) i należy nałożyć wątek zachowania normalizacji. Tym sposobem uciekamy od problemu całki po trajektoriach i dostajemy wynik:

$$f(t, t_0) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin \omega(t - t_0)}}$$

Co po wzięciu  $\omega \rightarrow 0$  powinno nam odtworzyć propagator dla cząstki swobodnej:

$$K_{\omega=0}(x, t, x_0, t_0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t - t_0)}}$$

## 7.2 Zasada niezoaczoności Heisenberga-Robertsona

Przypomnijmy sobie paczkę Gaussowską:

$$\Psi(x) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{\frac{1}{4}}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2} + \frac{ip_0x}{\hbar}}$$

A na ćwiczeniach wyszło nam dla paczki Gaussowskiej:

$$\begin{aligned} \Delta^2 x &= \sigma^2 \\ \Delta^2 p &= \frac{\hbar^2}{4\sigma^2} \end{aligned}$$

Czyli im lepiej określone położenie, tym gorzej określony pęd. Daje to znaną postać [Zasady nieozaczoności Heisenberga](#):

$$\Delta^2 x \Delta^2 p \geq \frac{\hbar^2}{4} \tag{7.1}$$

Co jest szczególnym przypadkiem zasady sformułowanej dla dowolnych dwóch niekomutujących obserwabli  $\hat{A}, \hat{B}$  i stanu  $|\Psi\rangle$ .

---

<sup>4</sup>Działanie na klasycznej trajektorii, zależność tylko od  $x, x_0$

## 7.2.1 Twierdzenie

$$\underbrace{\Delta^2 A}_{\langle \Psi | \hat{A}^2 | \Psi \rangle - \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle^2} \cdot \Delta^2 B \geq \frac{1}{4} \left| \underbrace{\langle [A, B] \rangle}_{\langle \Psi | [A, B] | \Psi \rangle} \right|$$

W szczególności"

$$\hat{A} = \hat{x}, \quad \hat{B} = \hat{p}, \quad [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \implies \Delta^2 x \Delta^2 p \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

Czyli stan Gaussowski wysyca zasadę nieoznaczoności

## 7.2.2 Dowód

Niech:

$$\begin{aligned} \hat{A}' &= \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle \cdot \mathbb{1} & \langle \hat{A}' \rangle = 0 & \Delta^2 A' = \Delta^2 A \\ \hat{B}' &= \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle \cdot \mathbb{1} & \langle \hat{B}' \rangle = 0 & \Delta^2 B' = \Delta^2 B \end{aligned}$$

Teraz zdefiniujmy sobie operator  $\hat{F} = \hat{A}' + i\lambda \hat{B}', \lambda \in \mathbb{R}$ .

Rozważmy  $F^\dagger F$  - ten operator (jest on **Dowolny**) jest hermitowski i dodatni, bo  $\forall_{|\Psi\rangle} \langle \Psi | F^\dagger F | \Psi \rangle \geq 0$   
W związku z tym możemy sobie zapisać:

$$\begin{aligned} \langle \Psi | (\hat{A}' - i\lambda \hat{B}')(\hat{A}' + i\lambda \hat{B}') | \Psi \rangle &\geq 0 \\ \forall_{|\Psi\rangle} \langle \hat{A}'^2 + \lambda^2 \hat{B}'^2 + i\lambda(\hat{A}' \hat{B}' - \hat{B}' \hat{A}') \rangle &\geq 0 \end{aligned}$$

Co daje nam:

$$\begin{aligned} \Delta^2 A' + \lambda^2 \Delta^2 B' + i\lambda \langle [A', B'] \rangle &\geq 0 \\ \Delta^2 A + \lambda^2 \Delta^2 B + i\lambda \langle [A, B] \rangle &\geq 0 \end{aligned}$$

Co jest prawdziwe dla dowolnej  $\lambda$ , czyli  $\Delta = b^2 - 4ac \leq 0$ , co daje:

$$\underbrace{i \underbrace{\langle [A, B] \rangle}_{\substack{\text{czysto rzeczywiste} \\ \text{dodatnie}}}^2}_{\substack{\text{czysto urojone}}} - 4\Delta^2 A \Delta^2 B \leq 0$$

Czyli pamiętając, że  $\langle [A, B] \rangle^* = -\langle [A, B] \rangle$  finalnie dostajemy dowód na nierówność:

$$\Delta^2 A \Delta^2 B \geq \frac{1}{4} |\langle [A, B] \rangle| \tag{7.2}$$

Z tym, że mamy nie myśleć o tym jak Heisenberg, że pomiar jednego zaburza drugie, a że nie ma stanów kwantowych w których wariancje obu obserwabli są jednocześnie małe.

# Lecture 8

## Zasady nieoznaczoności C.D.

Na ostatnim wykładzie wyprowadziliśmy sobie ogólną zasadę nieoznaczoności Heisenberga - Robertsona. Ma postać jak w równaniu (7.2):

$$\Delta^2 A \Delta^2 B \geq \frac{1}{4} |\langle [A, B] \rangle|$$

### 8.1 Jednoczesny pomiar komutujących obserwabli

**Fakt:** Jeśli  $[A, B] = 0$ , to możliwy jest jednoczesny pomiar  $\hat{A}$  i  $\hat{B}$ .

**Dowód:** Chcemy pokazać, że istnieje baza ortonormalna  $\{|a_i, b_j\rangle\}$  taka, że  $\hat{A}|a_i, b_j\rangle = a_i |a_i, b_j\rangle$ ,  $\hat{B}|a_i, b_j\rangle = b_j |a_i, b_j\rangle$  (Wspólna baza wektorów własnych  $\hat{A}$  i  $\hat{B}$ ).

Niech  $|a_1\rangle |a_2\rangle$  będą wektorami własnymi  $\hat{A}$ , wtedy:  $\hat{A}|a_1\rangle = a_1 |a_1\rangle$ ,  $\hat{A}|a_2\rangle = a_2 |a_2\rangle$ . Ale wtedy wiemy też, że  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ , czyli:

$$\begin{aligned}\langle a_1 | [\hat{A}, \hat{B}] | a_2 \rangle &= 0 \\ \langle a_1 | \hat{A} \hat{B} - \hat{B} \hat{A} | a_2 \rangle &= 0 \\ \underbrace{\langle a_1 | \hat{A} \hat{B} | a_2 \rangle}_{\langle a_1 | a_1 \rangle} - \underbrace{\langle a_1 | \hat{B} \hat{A} | a_2 \rangle}_{\langle a_2 | a_2 \rangle} &= 0\end{aligned}$$

Czyli:

$$(a_1 - a_2) \langle a_1 | \hat{B} | a_2 \rangle = 0$$

I dzieje się tak dla dowolnych  $|a_i\rangle$ . Jeśli wszystkie  $a_i$  są od siebie różne (Czyli  $\hat{A}$  nie jest zdegenerowane) to mamy:

$$(a_i - a_j) \langle a_i | \hat{B} | a_j \rangle = 0 \implies \langle a_i | \hat{B} | a_j \rangle = \delta_{ij} \langle a_i | \hat{B} | a_i \rangle$$

Czyli dostajemy, że  $\hat{B}$  jest diagonalny w bazie własnej  $\hat{A}$ .

Jeśli mamy degenerację, czyli  $\forall i \in S_a, a_i = a \implies B$  ma postać **blokowo diagonalną**, z każdym blokiem nad podprzestrzenią  $\mathcal{H}_a = \langle |a_i\rangle, |a_j\rangle \rangle$ , a operator  $\hat{A}$  nad przestrzenią  $\mathcal{H}_a$  działa jak  $a \cdot \mathbb{1}_{\mathcal{H}_a}$ .

Czyli wynika z tego, że Możemy ramach bloku zdiagnozować  $\hat{B}$  nie zmieniając postaci  $\hat{A}$  (Bo  $U_a \mathbb{1}_{\mathcal{H}_a} U_a^\dagger = \mathbb{1}_{\mathcal{H}_a}$ ).

Czyli istnieje baza własna  $|a_i, b_j\rangle$  taka, że  $\hat{A}|a_i, b_j\rangle = a_i |a_i, b_j\rangle$ ,  $\hat{B}|a_i, b_j\rangle = b_j |a_i, b_j\rangle$

**Wniosek:** Jeśli mamy więcej komutujących obserwabli  $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots$ , to możemy skonstruować bazę  $\hat{A}|a_i, b_j, c_k, \dots\rangle = a_i |a_i, b_j, c_k, \dots\rangle$

$|a_i, b_j, c_k, \dots\rangle$  taką, że  $\hat{B}|a_i, b_j, c_k, \dots\rangle = b_j |a_i, b_j, c_k, \dots\rangle$ ,  $\hat{C}|a_i, b_j, c_k, \dots\rangle = c_k |a_i, b_j, c_k, \dots\rangle$  **Definicja:** Jak wartości własne jednoczyn-

nie identyfikują jako wektor  $|a_i, b_j, c_k, \dots\rangle$  **Zdj od Krzyśka**

## 8.2 Jednoczesny pomiar niekomutujących obserwabli (?)

Niech  $[A, B] \neq 0$ , to nie istnieje baza własna. Dowód a.a.

Gdyby istniała baza ortogonalna  $\hat{A}|a_i, b_j\rangle = a_i|a_i, b_j\rangle$   $\hat{B}|a_i, b_j\rangle = b_j|a_i, b_j\rangle \implies \langle a_i, b_j|[\hat{A}, \hat{B}]|a'_i, b'_j\rangle = (a_i b_j - a_{i'} b_{j'})\delta_{jj'}\delta_{ii'} = 0 \implies [\hat{A}, \hat{B}] = 0$  sprzeczność.

Niemniej, mimo to można pytać się o jednoczesny (ale rozmyty) pomiar niekomutujących obserwabli, np.  $\hat{x}, \hat{p}$ . Intuicja:

$$\Psi_{x_0, p_0} = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{\frac{1}{4}}} \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{4\sigma^2} + \frac{ip_0 x}{\hbar}\right)$$

$$\langle \hat{x} \rangle = x_0, \quad \Delta^2 x = \sigma^2$$

$$\langle \hat{p} \rangle = p_0, \quad \Delta^2 p = \frac{\hbar^2}{4\sigma^2}$$

Ten stan ma jednoznacznie określone położenie i pęd najlepiej jak się da, bo:

$$\Delta^2 x \Delta^2 p = \frac{\hbar^2}{4}$$

(Czyli wysyca zasadę nieoznaczoności Heisenberga-Robertsona), gdzie  $|x_0, p_0\rangle$  - stan odpowiadający  $\Psi_{x_0, p_0}$ . Czyli moglibyśmy stworzyć siatkę stanów o w miarę dobrze określonych  $\hat{x}$  i  $\hat{p}$ , który byłyby prawie ortogonalne i moglibyśmy to traktować jako bazę pomiarową.

Jeśli tak myślimy, to dostajemy wynik mówiący o położeniu cząstki z precyzją  $\delta^2 x = \sigma^2$ ,  $\delta^2 p = \frac{\hbar^2}{4\sigma^2}$ . Jeśli mamy jakiś stan  $|\varphi\rangle$ , którego w ten sposób mierzmy położenia z rozrzutem

$$\Delta^2 x' = \underbrace{\Delta^2 x}_1 + \underbrace{\delta^2 x}_2, \quad \Delta^2 p' = \Delta^2 p + \delta^2 p$$

Możemy teraz napisać zasadę nieoznaczoności dla łącznego pomiaru  $\hat{x}, \hat{p}$  (tak jak chciał Heisenberg).

$$\Delta^2 x' \Delta^2 p' = \underbrace{\Delta^2 x \Delta^2 p}_{\geq \frac{\hbar^2}{4}} + \underbrace{\delta^2 x \delta^2 p}_{\geq \frac{\hbar^2}{4}} + \Delta^2 x \delta^2 p + \delta^2 x \Delta^2 p \geq \frac{\hbar^2}{4} + \frac{\hbar^2}{4} \underbrace{\left(\frac{\Delta^2 x}{\delta^2 x} + \frac{\delta^2 x}{\Delta^2 x}\right)}_{x + \frac{1}{x} \geq 2}$$

Co daje nam finalnie:

$$\Delta^2 x' \Delta^2 p' \geq \hbar^2 \tag{8.1}$$

## 8.3 Zasada nieoznaczoności czas-energia Dodaj indeks

$\hat{\mathcal{H}}$  - operator energii, ale nie mamy operatora czasu  $\hat{t}$ , czyli nie możemy używać zasady nieoznaczoności Heisenberga-Robertsona, ale spodziewamy się, że coś podobnego powinno być, bo szybkość ewolucji stanów jest związana z rozrzutem Energii ( $\Delta^2 \mathcal{H}$ )

---

<sup>1</sup>Wariancja dla idealnego pomiaru położenia

<sup>2</sup>Wariancja rozmycia 'linijki' którą mierzmy

# Lecture 9

## Potencjał Kwadratowy

### 9.1 Off to zasady nieoznaczoności once more

Na ostatnim wykładzie sobie powiedzieliśmy, że jest zasada nieoznaczoności czas-energia. Mówimy sobie tutaj, że propagacja błędu jest **liniowa**, co pozwala nam na wyliczenie niepewności estymacji czasu na podstawie pomiaru  $\hat{A}$ . Wtedy niepewność pomiaru czasu naszego estymatora to:

$$\Delta^2 t = \frac{\Delta^2 \hat{A}}{\left| \frac{d\langle A \rangle_t}{dt} \right|^2}$$

Chcąc wyznaczyć niepewność czasu z zasady heisenberga-robertsona musimy użyć tricku, bo explikite nie da się stamtąd czasu wyznaczyć. Ale już dla dowolnej obserwabli której wartość oczekiwana zależy od czasu już to zadziała, więc to dokładnie robimy. Pamiętajaco tym, że  $|\Psi(t)\rangle = e^{-i\hat{\mathcal{H}}t/\hbar} |\Psi(0)\rangle$  możemy sobie zapisać:

$$\frac{d\langle \hat{A} \rangle_t}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{\mathcal{H}}] \rangle \quad (9.1)$$

Możemy teraz to wstawić do standardowej zasady nieoznaczoności (7.2), gdzie obserwabla  $\hat{B} = \hat{H}$ :

$$\Delta^2 t \geq \frac{1}{\left| \frac{d\langle A \rangle_t}{dt} \right|^2} \cdot \frac{\frac{1}{4} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle^2}{\Delta^2 H} \stackrel{(9.1)}{=} \frac{\hbar^2}{4\Delta^2 \hat{H}} \implies$$

Zasada nieoznaczoności czas-energia

$$\Delta^2 t \Delta^2 \hat{H} \geq \frac{\hbar^2}{4} \quad (9.2)$$

### 9.2 Kwantowy Oscylator Harmoniczny

Dla kwantowego oscylatora harmonicznego mamy Hamiltonian:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2$$

Co położeniowo by miało reprezentację:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2$$

Co aby rozwiązać musielibyśmy rozwiązać problem własny, tj. (5.3) co dało by nam energie własne  $E$  i odpowiadające im stany własne  $\Psi_E(x)$ . Rozwiązuając ten problem podejdzimy do tego algebraicznie. Zdefiniujemy sobie dwa operatory:

### Operatory kreacji i anihilacji

#### Operator kreacji

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( \hat{x} + \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right) \quad (9.3)$$

#### Operator anihilacji

$$\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( \hat{x} - \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right) \quad (9.4)$$

Mają one przyjemną własność taką, że  $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1^1$

Cytat z Demko: operator  $a$  jak knihilacji, a  $a^\dagger$  krzyż jak kreacji

Zauważamy teraz, że:

$$a\hat{a}^\dagger = \frac{m\omega}{2\hbar} \left( \hat{x} - \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right) \left( \hat{x} + \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right) = \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{x}^2 + \frac{\hat{p}^2}{2\hbar m\omega} - \frac{1}{2}$$

Czyli widzimy, że:

$$\hat{H} = \hbar\omega \left( \hat{a}\hat{a}^\dagger + \frac{1}{2} \right)$$

Co oznacza, że szukamy stanów własnych  $\hat{H}$ , co jest równoważne szukaniu stanów własnych  $\hat{a}\hat{a}^\dagger agger$ . W związku z tym możemy sobie oznaczyć  $\hat{n} = \hat{a}\hat{a}^\dagger agger$ .

#### 9.2.1 Szukanie stanów własnych i wartości własnych $\hat{n}$

Niech  $|n\rangle$  będzie stanem własnym  $\hat{n}$  o wartości własnej  $n$ :

$$\hat{n} |n\rangle = n |n\rangle$$

Teraz rozważmy sobie stan nieunormowany  $|\xi\rangle = \hat{a} |n\rangle$  i rozważmy działanie  $\hat{n}$  na  $|\xi\rangle$ . Dostaniemy, że:

$$\hat{n} |\xi\rangle = (n - 1) |\xi\rangle$$

Czyli  $\hat{a} |n\rangle$  jest też stanem własnym  $\hat{n}$  o wartości własnej  $(n - 1)$ .

W ten sposób stwierdzamy, że  $a^k |n\rangle$  będzie wektorem własnym nieunormowanym o wartości własnej  $n - k^2$  ( $k \in \mathbb{N}$ ).

---

<sup>1</sup>Patrz Wyprowadzenie A.2

<sup>2</sup>Patrz wyprowadzenie A.3

Spróbujmy je teraz unormować. Zauważmy, że  $\langle \xi | \xi \rangle = \langle n | \hat{a}^\dagger \hat{a} | n \rangle = n \langle n | n \rangle = n$ .

Oznacza to, że unormowany stan własny  $|n-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{a} |n\rangle$  itd. czyli  $|n-k\rangle = \frac{1}{\sqrt{n \cdot (n-1) \dots (n-k+1)}} a^k |n\rangle$

Ta konstrukcja urwała by się tylko jak  $n \in \mathbb{N}$ , bo dla  $\hat{a} |a\rangle = 0$ . W przeciwnym razie byśmy wygenerowali stany własne  $|n\rangle$  o dowolnie ujemnym  $n$ .

Ale zauważmy, że operator  $\hat{n} = \hat{a}\hat{a}^\dagger$  jest operatorem dodatnim, czyli nie może mieć wartości własnych ujemnych. Czyli jedyna możliwość to, że  $n \in \mathbb{N}$ . To oznacza, że mamy stan  $|0\rangle$  taki, że  $\hat{a} |0\rangle = 0$  i zauważamy, że  $|n-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{a} |n\rangle \implies \hat{a}^\dagger |n-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{a}^\dagger \hat{a} |n\rangle$  co oznacza, że

$$\hat{a}^\dagger |n-1\rangle = \sqrt{n} |n\rangle$$

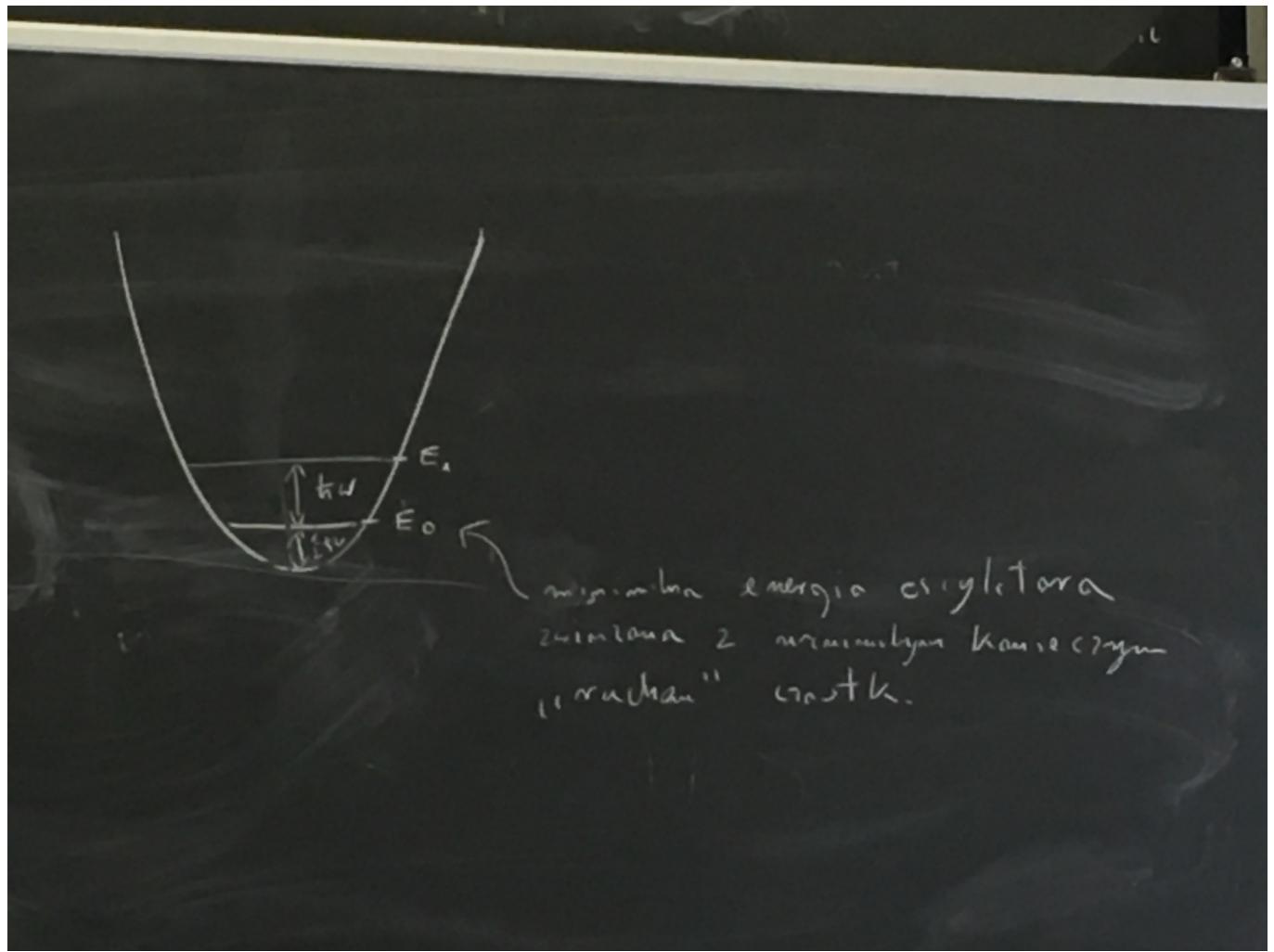
Co pokazuje działanie operatora kreacji, bo podnosi on wartość stałej normalizującej. Mamy również:  $|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{a}^\dagger |n-1\rangle$ ,  $|n+1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n+1}} \hat{a}^\dagger |n\rangle$

Widzimy teraz, że znając stan  $|0\rangle$  mamy wszystkie inne stany ze wzoru

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle$$

To są stany własne  $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \frac{1}{2}) = \hbar\omega(\hat{n} + \frac{1}{2})$  z energią  $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$

Teraz zobaczymy czym jest  $|0\rangle$



Rysunek 9.1: Rysunek studni potencjału dla kwantowego oscylatora harmonicznego Przerysuj i wstaw

Zapiszmy warunek  $\hat{a} |0\rangle$  w reprezentacji położeniowej:

$$\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( x + \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dx} \right) \Psi_0(x) = 0, \quad \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d\Psi}{dx} = -x\Psi, \quad \frac{1}{\Psi} \frac{d\Psi}{dx} = -\frac{m\omega}{\hbar} x = dx (\ln \Psi), \quad \ln \Psi = -\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 + C$$

Czyli stan podstawowy:

$$\Psi_0(x) = e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2+C} \approx A e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \stackrel{3}{=} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

Co daje nam Gaussa, o szerokości  $\sigma = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$  i fluktuacje  $\hat{x}, \hat{p}$  w stanie podstawowym:

$$\Delta^2 x = \frac{\hbar}{2m\omega}, \quad \Delta^2 p = \frac{\hbar m\omega}{2}$$

I z tych fluktuacji daleko dalej będą wynikać bardzo fundamentalne wnioski, np to, że w próżni nie może być absolutne 'nic', ponieważ i tak będą się kreować i anihilować pola  $E$  i  $B$ , żeby zasada nieoznaczości Heisenberga była spełniona.

---

<sup>3</sup>Normalizacja

# Lecture 10

## Prima Aprilis

### 10.1 W poprzednim odcinku...

Zdefiniowaliśmy stany energetyczne  $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ ,  $n \in 0, 1, 2, \dots$

Oraz operatory kreacji i anihilacji:  $|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle$ , tj.:

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad \hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$$

Definiując po drodze jeszcze, że  $\hat{a}|0\rangle = 0$ ,  $\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(\hat{x} + \frac{i\hat{p}}{m\omega})$

Zdefiniowalismy też stan podstawowy, który okazał się być funkcją Gaussa:

$$\Psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

### 10.2 Wyznaczanie kolejnych stanów $\Psi_n$

Znając stan podstawowy  $\Psi_0$  możemy sobie teraz zadać pytanie jak będą wyglądać kolejne stany wzbudzeń? Otóż stan  $n$ -ty zdefiniujemy jako:

$$\Psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left[ \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( x - \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dx} \right) \right]^n \left( \frac{m\omega}{\pi k} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

Teraz zmieńmy zmienne na  $q = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$  i po znormalizowaniu na nowo funkcji **Zdjęcie tego i rysunek stanów własnych** dostajemy:

$$\Psi'_n(q) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}n!2^n}} \underbrace{H_n}_{1} \left( q - \frac{d}{dq} \right)^n e^{-\frac{q^2}{2}} \quad (10.1)$$

Gdzie ten wielomian okazuje się być wzorem z nazwiskiej, czyli jest to Wielomian Hermite'a:

---

<sup>1</sup>Pewien wielomian od  $q$

## Wielomiany Hermite'a

$$H_n = e^{\frac{q}{2}} \left( q - \frac{d}{dq} \right)^n e^{-\frac{q^2}{2}} \quad (10.2)$$

W ogólności:

- dla n nieparzystych  $H_n$  - wielomian nieparzysty  $\Rightarrow \Psi_n(x) = -\Psi_n(-x)$  antysymetryczne
- dla n parzystych  $H_n$  - parzysty  $\Rightarrow \Psi_n(x) = \Psi_n(-x)$

### 10.2.1 Własności wielomianów Hermite'a

Pierwsze kilka tych wielomianów to:

$$\begin{aligned} H_0(q) &= 1 \\ H_1(q) &= 2q \\ H_2(q) &= 4q^2 - 2 \\ &\dots \end{aligned}$$

Dalej, z ortogonalności  $\Psi_n(x)$ :

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi_n(x)^* \Psi_m(x) = \delta_{n,m} \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} dq H_n(q) H_m(q) e^{-q^2} = \delta_{n,m}$$

Czyli Wielomiany Hermite'a też są ortogonalne!

## 10.3 Stany Koherentne

Chcielibyśmy znaleźć stany, które by w pewnym przybliżeniu reprezentowały klasyczny ruch w oscylatorze harmonicznym. Takie stany to właśnie **stany koherentne**.

**Definicja:** Stanem koherentnym nazywamy unormowane stany własne operatora anihilacji:

$$\hat{a} |\alpha\rangle = \alpha |\alpha\rangle$$

Widzimy z tego równania, że  $\alpha$  to wartość własna, która może być zespolona, a  $|\alpha\rangle$  to unormowany stan własny.

**Fakt:**

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$

**Dowód:**

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = e^{-|\alpha|^2} \sum_{n,m} \frac{(\alpha^*)^n}{\sqrt{n!}} \frac{\alpha^n}{\sqrt{m!}} \langle n | m \rangle = e^{-|\alpha|^2} \sum_n \frac{(\alpha^2)^n}{n!} = 1$$

Dowód definicji w Załączniku [Wstaw tam zdjęcie i tu referencję](#).

Dzięki temu, że  $|\alpha\rangle$  są stanami własnymi  $\hat{a}$ , łatwo liczyć  $\langle\hat{x}\rangle, \langle\hat{x}\rangle, \Delta^2x, \Delta^2p$ :

$$\begin{cases} \hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(\hat{x} + \frac{i\hat{p}}{m\omega}) \\ \hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(\hat{x} - \frac{i\hat{p}}{m\omega}) \end{cases} \implies \begin{aligned} \hat{x} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \\ \hat{p} &= \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\left(\frac{\hat{a} - \hat{a}^\dagger}{i}\right) \end{aligned}$$

Łatwo z tego teraz policzyć

$$\langle\hat{x}\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\langle\alpha|\hat{a} + \hat{a}^\dagger|\alpha\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\langle\alpha|\hat{a}|\alpha\rangle + \langle\alpha|\hat{a}^\dagger|\alpha\rangle) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\alpha + \alpha^*) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\operatorname{Re}(\alpha)$$

$$\langle\hat{p}\rangle = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\frac{1}{i}(\langle\alpha|\hat{a}|\alpha\rangle - \langle\alpha|\hat{a}^\dagger|\alpha\rangle) = \sqrt{2\hbar m\omega}\mathbb{1}m\alpha$$

Gdzie dla stanu koherentnego  $\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\langle x\rangle + i\frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}\langle p\rangle\right)$ . Pamiętając o przyjemnej własności, że  $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger, \mathbb{1}] = \mathbb{1} \implies \hat{a}\hat{a}^\dagger = \mathbb{1} - \hat{a}^\dagger\hat{a}$  liczymy sobie  $\Delta^2x$ :

$$\Delta^2x = \langle\alpha|\hat{x}^2|\alpha\rangle - \langle\alpha|\hat{x}|\alpha\rangle^2$$

Gdzie:

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{2m\omega}\langle\alpha|(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2|\alpha\rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega}\langle\alpha|\hat{a}^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} + (\hat{a}^\dagger)^2|\alpha\rangle = \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega}(\langle\alpha|\hat{a}^2|\alpha\rangle + \langle\alpha|(\hat{a}^\dagger)^2|\alpha\rangle + 1 + 2|\alpha|^2) = \frac{\hbar}{2m\omega}((\alpha + \alpha^*)^2 + 1) \end{aligned}$$

Co daje nam:

$$\Delta^2x = \frac{\hbar}{2m\omega}[4(\operatorname{Re}\alpha)^2 + 1] - \frac{2\hbar}{m\omega}(\operatorname{Re}\alpha)^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

Analogicznie dla pędów mamy:

$$\Delta^2p = \frac{\hbar m\omega}{2}$$

Czyli widzimy, że  $|\alpha\rangle$  jest stanem wysycającym zasadę nieoznaczoności:

$$\Delta^2x\Delta^2p = \frac{\hbar^2}{4}$$

Czyli jest to stan Gaussowski, bo:

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \quad \text{w reprezentacji położeniowej} \quad \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x + \frac{d}{dx}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\right)\Psi_\alpha(x) = \alpha\Psi(x)$$

Daje nam to:

$$\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\frac{d\Psi}{dx} = (\alpha\sqrt{2} - \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x)\Psi(x)$$

Przeliczając żeby potwierdzić, że to Gauss:

$$\frac{1}{\Psi}\frac{d\Psi}{dx} = \alpha \dots$$

[Dopisz od kogoś](#)

# Lecture 11

## Potencjał liniowy i przybliżenie WKB

Rozwiązałyśmy już oscylator harmoniczny (potencjał kwadratowy), to teraz możemy sobie zdefiniować **potencjał liniowy**, tj.:

$$V(X) = -\mathbf{F} \cdot \mathbf{x}$$

Szukamy teraz stanów własnych, więc rozwiązujeśmy równanie Schrödingera bez czasu:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} - F \cdot x \cdot \Psi(X) = E \cdot \Psi(x)$$

Chcemy teraz przejść sobie z tym do reprezentacji pędowej, tj. stronami to tranfourierujemy:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx \frac{d^2\Psi}{dx^2} e^{-\frac{ixp}{\hbar}} - F \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx x \Psi(x) e^{-\frac{ixp}{\hbar}} = E \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx \Psi(x) e^{-\frac{ixp}{\hbar}}}_{\tilde{\Psi}(p)}$$

Czyli całkując przez części i znikając wyrazy brzegowe dostajemy:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( -\frac{p^2}{\hbar^2} \right) \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx \Psi(x) e^{-\frac{ixp}{\hbar}}}_{\tilde{\Psi}(p)} - F \left( -\frac{\hbar}{i} \right) \frac{d}{dp} \left[ \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx \Psi(x) e^{-\frac{ixp}{\hbar}}}_{\tilde{\Psi}(p)} \right] = E \tilde{\Psi}(p)$$

Czyli teraz dostajemy:

$$\frac{p^2}{2m} \tilde{\Psi}(p) + \frac{F\hbar}{i} \frac{d}{dp} \tilde{\Psi}(p) = E \tilde{\Psi}(p)$$

Czyli dostaliśmy równanie pierwszego rzędu! Przekształcając dalej:

$$\frac{1}{\tilde{\Psi}} \frac{d\tilde{\Psi}}{dp} = \frac{i(E - \frac{p^2}{2m})}{F\hbar} \implies \ln \tilde{\Psi} = \frac{i}{F\hbar} \left( Ep - \frac{p^3}{6m} \right) + C, \quad \tilde{\Psi}(p) = A e^{\frac{i}{F\hbar} \left( Ep - \frac{p^3}{6m} \right)}$$

Wynika z tego, że **mamy rozwiązanie każdego E!** Czyli widmo Energii jest **ciągłe!**  
Spróbujmy to teraz znormalizować. Dostaniemy Deltę Diraca:

$$\int dp \tilde{\Psi}_E^*(p) \tilde{\Psi}_{E'}(p) = A^2 \int dp e^{\frac{i}{F\hbar} p(E' - E)} = A^2 2\pi F\hbar \delta(E' - E) \implies A = \frac{1}{\sqrt{2\pi F\hbar}}$$

Mamy tu również warunek zupełności:

$$\int dE \tilde{\Psi}_E^*(p) \tilde{\Psi}_E(p') = \delta(p' - p)$$

Co można sprawdzić:  $\int dE \frac{1}{2\pi F\hbar} e^{-\frac{i}{F\hbar}\left(Ep - \frac{p^3}{6m}\right)} e^{\frac{i}{F\hbar}\left(Ep' - \frac{p'^3}{6m}\right)} = \frac{1}{2\pi\hbar F} \int dE e^{\frac{iE}{F\hbar}(p'-p) + \frac{i}{6F\hbar m}(p^3 - p'^3)} = \delta(p - p')$

Po wróceniu do reprezentacji położeniowej:

$$\begin{aligned}\Psi_E(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \cdot \int dp \tilde{\Psi}(p) e^{\frac{ipx}{\hbar}} = \frac{1}{2\pi\hbar\sqrt{F}} \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{\frac{ip}{\hbar}(x + \frac{E}{F}) - \frac{ip^3}{6mF\hbar}} = \\ &= \frac{1}{\pi\hbar\sqrt{F}} \int_0^{\infty} dp \cos \left[ \frac{p}{\hbar} \left( x + \frac{E}{F} \right) - \frac{p^3}{6mF\hbar} \right]\end{aligned}$$

Czyli to, co zrobiliśmy, to rozwiązaliśmy [równanie Airy'ego](#) które ma postać:

$$\frac{d^2\Psi}{dy^2} - y\Psi = 0 \quad \text{, rozwiązaniem jest funkcja Airy'ego } A_i(y) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} ds \cos \left( sy + \frac{s^3}{3} \right)$$

Znane jest asymptotyczne zachowanie funkcji  $A_i(y)$ :

$$A_i(y) = \begin{cases} \frac{1}{2\sqrt{\pi}y^{\frac{1}{4}}} e^{-\frac{2}{3}y^{\frac{2}{3}}}, & y \rightarrow \infty \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}(-y)^{\frac{1}{4}}} \cos \left[ \frac{2}{3}(-y)^{\frac{2}{3}} - \frac{\pi}{4} \right], & y \rightarrow -\infty \end{cases}$$

Czyli wracając do  $x$ :

$$\Psi_E(x) \approx \begin{cases} \frac{A}{2(-(x+\frac{E}{F}))^{\frac{1}{4}}} e^{-\frac{2}{3}[-(x+\frac{E}{F})]^{\frac{2}{3}} \sqrt{\frac{2mF}{\hbar^2}}}, & x \rightarrow \infty \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}(x+\frac{E}{F})^{\frac{1}{4}}} \cos \left[ \frac{2}{3}(x+\frac{E}{F})^{\frac{2}{3}} \sqrt{\frac{2mF}{\hbar^2}} - \frac{\pi}{4} \right], & x \rightarrow -\infty \end{cases}$$

Gdzie bierzemy  $A = \left(\frac{\hbar^2}{2mF\pi^6}\right)^{\frac{1}{12}}$ . Rozumiemy to rozwiązanie tak, że **zmiany E są równoważne przesunięciu funkcji w x o  $\frac{E}{F}$ .**

**Wstaw rysunek z Goodnotes**

**Uwaga:** Robiąc transformację Fouriera zgubiliśmy jedno liniowo niezależne rozwiązanie (bo przeszliśmy z równania II rzędu na równanie I rzędu). Ogólniej należałoby rozważyć ogólną transformację całkową na płaszczyźnie zespolonej  $\Psi(x) = \int_C dz \tilde{\Psi}(z) e^{z \cdot x}$ , gdzie trans. Fouiera odpowiadałaby  $C_1 = [-i\infty, +i\infty]$  czyli biorąc inny kontur  $C$  dostalibyśmy liniowo niezależne rozwiązanie i rozwiązałybyśmy drugą funkcję Airy'ego:

$$B_i(y) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} ds e^{-\frac{s^3}{3} + sy} + \sin \left( \frac{s^3}{3} - sy \right)$$

Zaś asymptotyczne własności tej funkcji to:

$$B_i(y) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\pi}y^{\frac{1}{4}}} e^{\frac{2}{3}y^{\frac{2}{3}}}, & y \rightarrow \infty \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}(-y)^{\frac{1}{4}}} \cos \left[ \frac{2}{3}(-y)^{\frac{2}{3}} + \frac{\pi}{4} \right], & y \rightarrow -\infty \end{cases}$$

Rozwiązanie to odrzucamy tylko i wyłącznie kiedy mamy nieskończony potencjał bo idąc do nieskończoności ona wybucha. Kiedy potencjał jest skończony, to jest ona legitną funkcją bazową.

# Lecture 12

## Przybliżenie WKB

Notatki by Zuzia

## Przybliżenie WKB

Rozw. równania Schr. w granicy półklasycznej (w dowolnym potencjale).

Zapiszmy:

$$\psi(x,t) = \sqrt{S(x,t)} e^{iS(x,t)/\hbar} \quad \begin{matrix} \text{wstawiamy do} \\ i\hbar \partial_t \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \psi + V \psi \end{matrix}$$

$\nwarrow$  faza  
 $\uparrow$  gęstość prawdopodobieństwa

$$i\hbar(\partial_t \sqrt{S}) e^{iS/\hbar} - \sqrt{S} (\partial_t S) e^{iS/\hbar} = -\frac{1}{2m} \left[ \hbar^2 (\partial_x^2 \sqrt{S}) + 2i\hbar (\partial_x \sqrt{S})(\partial_x S) - \sqrt{S} (\partial_x S)^2 \right] e^{iS/\hbar} + V \sqrt{S} e^{iS/\hbar} + i\hbar \sqrt{S} (\partial_x^2 S)$$

Patrzmy na kolejne rzędy  $\hbar$ :

$$\text{Owy: } -\sqrt{S} \partial_t S = \sqrt{S} \frac{(\partial_x S)^2}{2m} + V \sqrt{S} \quad , \quad -\partial_t S = \frac{(\partial_x S)^2}{2m} + V \quad \text{równanie Hamiltona-Jacobiego}$$

Będziemy szukać stanów stacjonarnych (o określonej energii): ( $\partial_t S = 0$ )

$$\psi_E(x,t) = \sqrt{S(x)} e^{\frac{i}{\hbar} [S(x) - Et]} \quad -\partial_t S(x,t) = E$$

$$E - V(x) = \frac{(\partial_x S)^2}{2m}$$

$$\begin{aligned} \partial_x S &= \pm \sqrt{2m(E - V(x))} \\ S(x) &= \pm \int dx' \sqrt{2m(E - V(x'))} \end{aligned}$$

$$\text{Isty rząd: } 0 = -\frac{1}{2m} \left[ 2i\hbar \partial_x \sqrt{S} \partial_x S + i\hbar \sqrt{S} \partial_x^2 S \right]$$

$$\begin{aligned} 0 &= 2 \cdot \partial_x \sqrt{S} \cdot \partial_x S + \sqrt{S} \partial_x^2 S \quad \rightarrow \sqrt{S} \partial_x S = \text{const} \\ &\equiv \partial_x (\sqrt{S} \cdot \partial_x S) = 0 \quad \sqrt{S} = \frac{\text{const}}{\sqrt{2m(E - V(x))}} \quad \text{bierzemy tylko} \\ \text{Oznaczmy} \quad p(x) &= \sqrt{2m(E - V(x))} \quad \text{plus, bo} \quad \uparrow \text{moduł} \end{aligned}$$

$\uparrow$  klasyczny pęd cząstki

Czyli f. falowa:

$$\psi(x,t) = \frac{\text{const}}{\sqrt{p(x)}} e^{\frac{i}{\hbar} \left[ \int \partial_x p(x) - Et \right]}$$

Warunek uzasadniający przybliżenie WKB

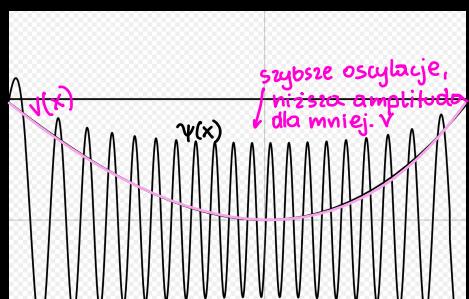
W równaniu pojawiały się wyrazy:

$$\hbar^2 \partial_x^2 \sqrt{S} + 2i\hbar \partial_x \sqrt{S} \partial_x S + i\hbar \sqrt{S} \partial_x^2 S - \sqrt{S} (\partial_x S)^2$$

chcielibyśmy, żeby:  $|\sqrt{S} (\partial_x S)^2| \gg |i\hbar \sqrt{S} \partial_x^2 S|$

$$p(x)^2 \gg \hbar \frac{dp(x)}{dx}$$

to mówi nam o skalach, na jakich widzimy zmianę pędu  $\left| \frac{p(x)}{\frac{dp(x)}{dx}} \right| \gg \left| \frac{\hbar}{p(x)} \right| = \lambda(x)$  dt. fali de Broglie'a



Rysunek 12.1: Notatki strona 1

Skala przestrzenna zmienności potencjału, która jest równa skali p. zmienności  $p(x) \gg$  długość fali de Broglie'a.

Ale nie będzie działało w punktach, gdzie  $E \approx V(x)$ . ← punkty powrotu

żeby użyć WKB do znalezienia stanów związanych w potencjatach, musimy jakoś poradzić sobie z punktami powrotu. (bo w nich  $\lambda(x) \rightarrow \infty$ )

**Uwaga:** Jeśli  $E \ll V(x)$  (w sensie \*), to WKB też można stosować. Wtedy:

$$p(x) = i\sqrt{|2m(E-V(x))|}$$

$$\psi(x,t) = \frac{\text{const}}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\frac{i}{\hbar} \left[ \frac{1}{2} \int_0^x dx \sqrt{2m(V(x)-E)} - E \cdot t \right]}$$

Przypomnijmy sobie asymptotyczne postacie rozwiązań dla  $V$  liniowego:

$$\psi_E(x) \approx \begin{cases} \frac{A}{2(-(x+\frac{E}{F}))^{1/4}} e^{-\frac{2}{3} \left[ (x+\frac{E}{F}) \right]^{3/2} \sqrt{\frac{2mF}{\hbar^2}}} & , \quad x \rightarrow -\infty \quad A = \left( \frac{\hbar^2}{2mF\pi^2} \right)^{1/12} \\ \frac{A}{(x+\frac{E}{F})^{1/4}} \cos \left[ \frac{2}{3} \left( x+\frac{E}{F} \right)^{3/2} \sqrt{\frac{2mF}{\hbar^2}} - \frac{\pi}{4} \right] & , \quad x \rightarrow +\infty \end{cases}$$

Co by było, gdybyśmy zastosowali WKB do liniowego? ( $V = -Fx$ )

$$p(x) = \sqrt{2m(E+Fx)}$$

$$\int_{-\frac{E}{F}}^x dx \sqrt{2m(E+Fx)} = \frac{\frac{2}{3} [2m(E+Fx)]^{3/2}}{2mF}$$

Czyli dostaniemy taką samą postać rozwiązań, jak ścisłe asymptotyczne rozwiązania.

To pozwoli nam użyć rozw. poten. liniowego,

żeby zzyć WKB po obu stronach punktu powrotu.

# Lecture 13

## Off to przybliżenie WKB once more

### 13.1 Zszywanie rozwiązań WKB

Biorąc  $p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}$ :

$$\begin{aligned}\Psi_I(x) &= \frac{A}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} dx' |p(x')|} \\ \Psi_{II}(x) &= \frac{B}{\sqrt{|p(x)|}} \cos \left( \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x dx' p(x') + \delta \right) \\ \Psi_{III}(x) &= \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x dx' |p(x')|}\end{aligned}$$

Co jest rozwiązaniami dla potencjału postaci na rysowanej na tablicy foto. Wiążąc to z tym co było na poprzednim wykładzie:

Zauważamy, że w punkcie powrotu możemy zszyć używając asymptotycznych postaci rozwiązań ( $A_i(y)$ ) w potencjale liniowym, które są (dla  $V(x) = -Fx$ ):

$$\Psi_E(x) = \begin{cases} \frac{A'}{2\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_x^{-E/F} dx' |p(x')|} \\ \frac{A'}{\sqrt{|p(x)|}} \cos \left[ \frac{1}{\hbar} \int_x^{-E/F} dx' p(x') - \frac{\pi}{4} \right] \end{cases}$$

Czyli zszywając  $\Psi_I$  i  $\Psi_{II}$  dostajemy  $A = \frac{B}{2}$ ,  $\delta = -\frac{\pi}{4}$

Aby zszyć  $\Psi_{II}$  i  $\Psi_{III}$  zapiszemy sobie  $\Psi_{II}$  inaczej:

$$\Psi'_{II}(x) = \frac{B'}{\sqrt{|p(x)|}} \cos \left( \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} dx' p(x') + \delta' \right)$$

Wynika z tego, że  $C = \frac{B'}{2}$ ,  $\delta' = -\frac{\pi}{4}$ . Pamiętamy jednak, że  $\Psi_{II}(x) = \Psi'_{II}(x)$  czyli daje nam to warunek, że:

$$\frac{B'}{\sqrt{|p(x)|}} \cos \left( \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} dx' p(x') - \frac{\pi}{4} \right) = \frac{B}{\sqrt{|p(x)|}} \cos \left( \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x dx' p(x') - \frac{\pi}{4} \right)$$

Teraz oznaczmy sobie  $z = \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' - \frac{\pi}{4}$  a  $\eta = \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} dx' p(x') - \frac{\pi}{4}$  co daje nam:

$$B \cos z = B' \left( \cos \left( \eta - \frac{\pi}{2} \right) \cos z - \sin \left( \eta - \frac{\pi}{2} \right) \sin(-z) \right)$$

$$B \cos z = B' \cos z \cos \left( \eta - \frac{\pi}{2} \right) + B' \sin z \sin \left( \eta - \frac{\pi}{2} \right) \implies \sin \left( \eta - \frac{\pi}{2} \right) = 0 \implies \eta = n\pi + \frac{\pi}{2}$$

Oraz

$$\frac{B}{B'} = \pm 1 \implies \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} dx' p(x') = n\pi + \frac{\pi}{2}$$

Podsumowując

### Warunek na energie $E_n$

$$\int_{x_1}^{x_2} dx' p(x') = \hbar \cdot \pi(n + \frac{1}{2}) = \frac{\hbar}{2}(n + \frac{1}{2})$$

gdzie  $n = 0, 1, 2 \dots$  daje nam warunek na dostępne energie  $E_n$  układu kwantowego.  
Alternatywnie można to zapisać jako:

$$\oint p(x) dx = \hbar(n + \frac{1}{2})$$

Co ma interpretację całki po zamkniętym konturze w przestrzeni fazowej pomiędzy punktami przestrzeni.

## 13.2 Wchodzimy w trzeci wymiar

Analogicznie jak w 1D, niech stan  $|\vec{r}\rangle$  oznacza stan cząstki zlokalizowanej w punkcie  $\vec{r} = (x, y, z)$ . Ogólny stan cząstki w 3D:

$$\Psi(x) = \int d^3\vec{r} \Psi(\vec{r}) |\vec{r}\rangle, \quad \int d^3\vec{r} |\Psi(\vec{r})|^2 = 1$$

Gdzie  $|\Psi(\vec{r})|^2$  to znowu gęstość prawdopodobieństwa w 3D znalezienia cząstki w punkcie  $\vec{r}$ . Teraz z tego, że

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = 1 \implies \langle \vec{r}' | \vec{r} \rangle = \delta^{(3)}(\vec{r}' - \vec{r}) = \delta(x - x')\delta(y - y')\delta(z - z')$$

Jest to analogicznie jak w 1D:

$$\Psi(x) = \langle \vec{r} | \Psi \rangle$$

Zaś operatory współrzędnych i pędów:

$$\begin{aligned} \hat{x} |\vec{r}\rangle &= x |\vec{r}\rangle & \hat{p}_x &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \\ \hat{y} |\vec{r}\rangle &= y |\vec{r}\rangle & \hat{p}_y &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \\ \hat{z} |\vec{r}\rangle &= z |\vec{r}\rangle & \hat{p}_z &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \end{aligned}$$

Zaś warunki komutacyjne:

$$\hat{x} = \hat{x}, \hat{y}, \hat{z}, \quad [\hat{x}_j, \hat{p}_k] = \hbar \delta_{jk}$$

### Równanie Schrödingera w 3D

$$\hat{H} = \frac{\sum_i \hat{p}_i^2}{2m} + V(\hat{\vec{r}})$$

Co w reprezentacji położeniowej da nam:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r})$$

## Równanie Schrödingera w 3D

Wersja z czasem:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}) \Psi(\vec{r}, t) \quad (13.1)$$

Wersja bez czasu:

$$E\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V\Psi \quad (13.2)$$

Równanie w 3D łatwo się rozwiązuje jeśli potencjał się separuje tj. jest postaci  $V(\vec{r}) = V_x(x) + V_y(y) + V_z(z)$  mamy:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_x(x) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + V_y(y) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_z(z) \right] \Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r})$$

Wtedy szukamy rozwiązań postaci  $\Psi(\vec{r}) = X(x)Y(y)Z(z)$ . Po podzieleniu przez  $\Psi$  dostajemy *Równania Schrödingera* gdzie każdy z kawałków będzie się równać jakiejś stałej:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{X} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_x(x) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{Y} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + V_y(y) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{Z} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_z(z) = E$$

Daje nam to 1D równania schródingera postaci:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{X} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_x(x) &= E_x \implies X_{n_x}(x), E_{n_x} \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{Y} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + V_y(y) &= E_y \implies Y_{n_y}(y), E_{n_y} \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{Z} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_z(z) &= E_z \implies Z_{n_z}(z), E_{n_z} \end{aligned}$$

Daje nam to pełen zestaw rozwiązań w 3D:

$$\Psi_{n_x, n_y, n_z}(\vec{r}) = X_{n_x}(x) \cdot Y_{n_y}(y) \cdot Z_{n_z}(z), \quad E_{n_x, n_y, n_z} = E_{n_x} + E_{n_y} + E_{n_z}$$

Dygresja: Wyprowadziliśmy iloczyn tensorowy, dający nam superpozycję rozłącznych przestrzeni nie mieszając ich ze sobą. **Zdjęcie**

# Lecture 14

## Cząstka w 3D, moment pędu

Przypominamy sobie równanie Schrödingera w 3D:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\delta\Psi + V\Psi = E\Psi$$

Teraz dla cząstki swobodnej w 3D, tj gdzie  $V = 0$ :

Rozwiązań to **fale płaskie**, tj. postaci:

$$|\mathbf{p}\rangle \equiv \varphi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{\frac{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}{\hbar}}, \quad E_{\mathbf{p}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$$

Bo pamiętamy, że  $|\Psi\rangle$  w reprezentacji położeniowej i pędowej wygląda **Jak na zdjęciu, wstaw.**

### 14.1 Moment pędu

Chcielibyśmy sobie zdefiniować kwantowy moment pędu. Spróbujmy czy zdaszkowanie wzoru klasycznego:

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$$

Aka sprawdzamy, czy komutują:

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{L}}_x &= \hat{y} \cdot \hat{p}_z - \hat{z} \cdot \hat{p}_y \\ \hat{\mathbf{L}}_y &= \hat{z} \cdot \hat{p}_x - \hat{x} \cdot \hat{p}_z \\ \hat{\mathbf{L}}_z &= \hat{x} \cdot \hat{p}_y - \hat{y} \cdot \hat{p}_x\end{aligned}$$

Otoż komutują i możemy sobie z tego wyciągnąć **związki komutacyjne**:

$$[\hat{\mathbf{L}}_i, \hat{\mathbf{L}}_j] = i\epsilon_{i,j,k} \hat{\mathbf{L}}_k$$

**Fakt (który będzie) z ćwiczeń:**

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{\mathbf{L}}_x^2 + \hat{\mathbf{L}}_y^2 + \hat{\mathbf{L}}_z^2$$

Co jest kwadratem całkowitego momentu pędu, którego komutator:

$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{L}}_i] = 0$$

*Opuszczam pisanie wektorków boldem i z daszkiem bo tak za dużo pisania. Do edycji w wersji finalnej W reprezentacji położeniowej:*

$$\begin{aligned} L_x &= \frac{\hbar}{i} \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ L_y &= \frac{\hbar}{i} \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ L_z &= \frac{\hbar}{i} \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \end{aligned}$$

Chcielibyśmy sobie tu przejść do współrzędnych sferycznych:

$$\begin{aligned} x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad \frac{\partial}{\partial x} &= \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad \frac{\partial}{\partial y} &= \frac{\partial r}{\partial y} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ z = r \cos \theta, \quad \frac{\partial}{\partial z} &= \frac{\partial r}{\partial z} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{aligned}$$

Czyli inaczej myśląc:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix} = A \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial r} \\ \frac{\partial}{\partial \theta} \\ \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{bmatrix}, \quad A = \begin{bmatrix} \sin \theta \cos \varphi & \frac{\cos \theta \cos \varphi}{r} & -\frac{\sin \theta}{r \sin \theta} \\ \sin \theta \sin \varphi & \frac{\cos \theta \sin \varphi}{r} & -\frac{\cos \theta}{r \sin \theta} \\ \cos \theta & \frac{\sin \theta}{r} & 0 \end{bmatrix}$$

Ale łatwiej o tym myśleć jako o:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial r} \\ \frac{\partial}{\partial \theta} \\ \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{bmatrix} = B \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix}, \quad B = A^{-1}$$

Dostajemy wtedy:

$$\begin{aligned} L_x &= -\frac{\hbar}{i} \left( \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ L_y &= \frac{\hbar}{i} \left( \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} i \cot \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ L_z &= \frac{\hbar}{i} \left( \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \end{aligned}$$

I teraz jeśli obliczymy sobie  $\widehat{\mathbf{L}}^2$ , to dostajemy:

$$\widehat{\mathbf{L}}^2 = \widehat{\mathbf{L}}_x^2 + \widehat{\mathbf{L}}_y^2 + \widehat{\mathbf{L}}_z^2 = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right]$$

Czyli widzimy, że ma to strukturę kątowej części laplasjanu we współrzędnych sferycznych

## 14.2 Potencjały sferyczne

Czyli bierzemy potencjały postaci:

$$V(\mathbf{r}) = V(r)$$

Oraz zapisujemy równanie schrödingera we współrzędnych sferycznych, gdzie laplasjan we współrzędnych sferycznych ma postać:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \partial_r(r^2 \partial_r) + \underbrace{\frac{1}{\sin \theta} \partial_\theta(\sin \theta \partial_\theta) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\varphi^2}_{=-\frac{\hat{L}^2}{\hbar^2}}$$

Czyli równanie Schrödingera ma postać:

$$\underbrace{\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \partial_r(r^2 \partial_r) + V(r) + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} \right]}_{\hat{H}} \Psi = E\Psi$$

Teraz obserwacja:

$$[\hat{H}, \hat{L}^2] = 0$$

Czyli możemy szukać stanów własnych  $\hat{H}$  w ramach stanów własnych  $\hat{L}^2$ , czyli możemy szukać rozwiązań postaci  $\Psi_E(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot Y(\theta, \varphi)$ , gdzie  $Y$  jest stanem własnym  $\hat{L}^2$ , tj.  $\hat{L}^2 Y = \lambda Y$ , gdzie  $\lambda$  to wartość własna odpowiadająca stanowi  $Y(\theta, \varphi)$ .

Wstawmy i dzielimy przez  $\Psi$ , mnożymy przez  $2mr^2$ . Dostajemy:

$$-\frac{\hbar^2}{R(r)} \partial_r(r^2 \partial_r R(r)) + 2mr^2[V(r) - E] + \underbrace{\frac{1}{Y} \hat{L}^2 Y}_{\lambda} = 0$$

Chcemy zrozumieć problem własny  $\hat{L}^2 Y = \lambda Y$ , korzystając z własności algebraicznych  $[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\epsilon_{i,j,k}\hat{L}_k$ . Ponieważ  $[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0$ , możemy szykać jednocześnie stanów własnych  $\hat{L}^2$  i  $\hat{L}_z$ . Niech  $|a, b\rangle$  będą takimi stanami własnymi:

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 |a, b\rangle &= a |a, b\rangle \\ \hat{L}_z |a, b\rangle &= b |a, b\rangle \end{aligned}$$

Zdefiniujmy:

$$\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$$

Możemy je technicznie nazwać operatorami drabinkowymi, bo będą coś opuszczać i podnosić. Zauważamy jakie są dla nich **związki komutacyjne**:

$$[\hat{L}_+, \hat{L}_-] = 2\hbar\hat{L}_z, \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] = \pm\hbar\hat{L}_\pm$$

Rozważmy:

$$\hat{L}_z (\hat{L}_\pm |a, b\rangle) = (\pm\hbar\hat{L}_\pm + \hat{L}_\pm\hat{L}_z) |a, b\rangle = \hat{L}_\pm(\pm\hbar + b) |a, b\rangle = (b \pm \hbar)\hat{L}_\pm |a, b\rangle$$

Czyli widzimy, że  $\hat{L}_\pm |a, b\rangle$  jest (nieunormowanym) wektorem własnym  $\hat{L}_z$  z wartością własną  $b \pm \hbar$ . Wiemy, że  $\hat{L}^2$  komutuje z  $\hat{L}_i \implies [\hat{L}^2, \hat{L}_\pm] = 0$

Czyli  $\hat{L}_\pm |a, b\rangle = \text{const.} \cdot |a, b \pm \hbar\rangle$

Chcemy teraz znaleźć jakieś ograniczenia na maksymalny i minimalny  $b$ , co nam pozwoli użyć skwantowania  $b$  i skońzoną liczbę dopuszczalnych wartości.

Rozważmy taki operator:

$$\hat{W} = \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 \geq 0 \quad \text{tj. jest to operator dodatni}$$

Przypomnienie, każdy operator Hermitowski jest dodatnio określony, tj. obłożone z obu stron dowolnym wektorem daje liczbę dodatnią. Pamiętamy, że  $\hat{L}^2 |a, b\rangle = a\hat{L}_\pm |a, b\rangle$ .

Daje nam to tutaj:

$$\langle a, b | \hat{W} |a, b\rangle \geq 0, \quad a - b^2 \geq 0 \implies a > 0, |b| \leq \sqrt{a}$$

Żeby to była prawda musi istnieć jakieś  $b_{max}$  i  $b_{min}$ , takie że:

$$\hat{L}_+ |a, b_{max}\rangle = 0, \quad \hat{L}_- |a, b_{min}\rangle = 0 \tag{14.1}$$

# Lecture 15

## Cząstka w 3D, moment pędu C.D.

Ciągnąc dalej zależności wypisane na ostatnim wykładzie , tj równanie (14.1) mamy:

$$L_- L_+ |a, b_{max}\rangle = 0$$

Gdzie wiemy, że:

$$L_- L_+ = (L_x - iL_y)(L_x + iL_y) = L_x^2 + L_y^2 - iL_y L_x + iL_x L_y = L_2 - L_z^2 + i[L_x, L_y] = L_2 - L_z^2 - \hbar L_z$$

Co daje nam:

$$(L_2 = L_z^2 - \hbar L_z) |a, b_{max}\rangle = 0 \implies (a - b_{max}^2 - \hbar b_{max}) |a, b_{max}\rangle = 0 \implies a = b_{max}^2 + \hbar b_{max}$$

Korzystając z drugiej zależności wypisanej jako równanie (14.1) mamy:

$$L_+ L_- |a, b_{min}\rangle = 0 \implies (L_2 - L_z^2 + \hbar L_z) |a, b_{min}\rangle = 0 \implies a = b_{min}^2 - \hbar b_{min}$$

Co po połączeniu tych dwóch wniosków daje nam zależność:

$$b_{max}^2 + \hbar b_{max} = b_{min}^2 - \hbar b_{min} \implies (b_{max} + b_{min})(b_{max} + \hbar - b_{min}) = 0$$

Ale jako, że przyjęliśmy, że  $b_{max} > b_{min}$ , to widzimy, że ta równość może się zerować  $\iff b_{max} = -b_{min}$

**Rysunek z Goodnotes** Czyli jak widać na rysunku, żeby ta drabinka nam się zgodziła, tj. urywała na  $b_{max}$  musi zachodzić:

$$b_{max} - b_{min} = n \cdot \hbar, \quad n \in \{0, 1, 2, \dots\} \implies 2b_{max} = n \cdot \hbar \implies b_{max} = \hbar \cdot \frac{n}{2} = \hbar \cdot j, \quad j \in \left\{0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots\right\}$$

Co daje nam:

$$a = \hbar^2 j(j + 1)$$

Podsumowując, stany własne to będą:

$$|a, b\rangle \xrightarrow[a=\hbar^2 j(j+1)]{b=\hbar m} |j, m\rangle, \quad j \in \left\{0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots\right\}, \quad m \in \{-j, -j + 1, \dots, j - 1, j\}$$

Co jawnie zapisując daje:

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 |j, m\rangle &= \hbar^2 j(j + 1) |j, m\rangle \\ \hat{L}_z |j, m\rangle &= \hbar m |j, m\rangle \end{aligned}$$

Pomyślmy o  $\hat{L}^2$  i  $\hat{L}_z$  jako operatorach/macierzach w przestrzeni rozpinanej przez  $|j, m\rangle$

$$\begin{aligned}\langle j', m' | \hat{L}^2 | j, m \rangle &= \delta_{jj'} \delta_{mm'} \hbar^2 j(j+1) \\ \langle j', m' | \hat{L}_z | j, m \rangle &= \delta_{jj'} \delta_{mm'} \hbar m\end{aligned}$$

Chcemy znaleźć postać operatora  $L_x$  i  $L_y$  w bazie  $|j, m\rangle$ . Pamiętając, że  $L_{\pm} |j, m\rangle = \underbrace{c_{j,m}^{\pm}}_1 |j, m \pm 1\rangle$

Chcemy wyznaczyć  $c_{j,m}^{\pm}$ . Biorąc normę stronami:

$$\begin{aligned}\langle j, m | L_{\pm}^\dagger L_{\pm} | j, m \rangle &= |c_{j,m}^{\pm}|^2 \\ \langle j, m | L^2 - L_z^2 \mp \hbar L_z | j, m \rangle &= |c_{j,m}^{\pm}|^2 \\ \implies \hbar^2 (j(j+1) - m^2 \mp m) &= \hbar^2 (j \mp m)(j \pm m + 1)\end{aligned}$$

Co daje nam:

$$L_{\pm} |j, m\rangle = \hbar \sqrt{(j \pm m)(j \pm m + 1)} |j, m \pm 1\rangle$$

Oraz:

$$\langle j', m' | L_{\pm} | j, m \rangle = \hbar \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \delta_{jj'} \delta_{m \pm 1, m'}$$

**Wstaw tu zdjęcie z dygresją o postaci tych macierzy**

Wynika z tego, że:

$$L_x = \frac{L_+ + L_-}{2}, \quad L_y = \frac{L_+ - L_-}{2i}$$

## 15.1 Wracamy do Schrödingera we współrzędnych sferycznych

$$\Psi(\mathbf{r}) = R(r)Y(\theta, \varphi)$$

Pamiętajmy, że chcieliśmy znaleźć  $Y(\theta, \varphi)$  - stany własne  $\hat{L}^2$ . Teraz już wiemy jakie wartości własne mogą być:  $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$  - stany własne  $|l, m\rangle$ . Daje nam to:

$$\hat{L}^2 Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad (15.1)$$

$$\hat{L}_z Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \hbar m Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad (15.2)$$

Teraz z równania (15.2) wynika nam:

$$\frac{\hbar}{i} \partial_{\varphi} Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \hbar m Y_{l,m}(\theta, \varphi) \implies Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \Theta_{l,m}(\theta) e^{im\varphi}$$

**Uwaga:**  $Y_{l,m}(\theta, \varphi) = Y_{l,m}(\theta, \varphi + 2\pi) \implies e^{2\pi im} = 1 \implies m$  jest całkowite  $\implies l$  jest całkowite (wykluczamy połówkowe momenty pędu). Opisuje nam to **Orbitalny Moment Pędu**.

Czyli szukamy rozwiązań  $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ ,  $l = 0, 1, 2, \dots$ ,  $m \in \{-l, l+1, \dots, l-1, l\}$ . Znajdzmy najpierw  $Y_{l,l}$ :

$$\begin{aligned}\hat{L}_+ Y_{l,l} &= 0 \implies -i\hbar e^{i\varphi} (i\partial_{\theta} - \cot \theta \partial_{\theta}) \Theta_{l,l}(\theta) e^{il\varphi} = 0 \\ &\quad -i\hbar e^{i\varphi} (i\partial_{\theta} - \cot \theta \partial_{\theta}) \Theta_{l,l}(\theta) e^{il\varphi} = 0\end{aligned} \quad (15.3)$$

Równanie (15.3) to **równanie Schrödingera we współrzędnych sferycznych dla części kątowej**. Co po rachunkach daje nam:

$$\begin{aligned}(i\partial_{\theta} - il \cot \theta) \Theta_{l,l} &= 0 \\ \frac{1}{\Theta_{l,l}} \frac{d\Theta_{l,l}}{d\theta} &= l \cot \theta \\ \Theta_{l,l} &= c_{l,l} (\sin \theta)^l \implies Y_{l,l} c_{l,l} \sin^l \theta e^{il\varphi}\end{aligned}$$

<sup>1</sup>Współczynnik wynikający z braku normalizacji

Pamiętamy, że chcemy normalizować te funkcje tak, aby:

$$\int d\varphi \sin \theta |Y(\theta, \varphi)|^2 = 1 \implies |c_{l,l}|^2 = \frac{(2l+1)(2l)!}{4\pi} \frac{1}{(2^l l!)^2}$$

Daje nam to:

$$Y_{l,l} = \overbrace{\frac{(-1)^l}{2^l l!}}^2 \sqrt{\frac{(2l+1)(2l)!}{4\pi}} \sin^l \theta e^{il\varphi}$$

Pozostałe  $Y_{l,l}$  znajdziemy działając ileś razy  $\hat{L}_- = \hbar e^{-i\varphi}(-\partial_\theta + i \cot \theta \partial_\varphi)$  i po normalizowaniu dostajemy ogólne wyrażenie:

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = (-1)^{(m+|m|)/2} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \cdot \frac{(l-|m|)}{l_{|m|}}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi} \quad (15.4)$$

Gdzie  $P_l^m$  to **stwarzyszony Wielomian Legendre'a**

---

<sup>2</sup>Konwencja znaku

# Lecture 16

## Wchodzą Harmoniki Sferyczne

Przepisz od kogoś pierwszą godzinę Zdefiniowaliśmy sobie funkcję falową

$$\Psi(\mathbf{r}) = R(\mathbf{r})Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad (16.1)$$

Ale teraz sobie nazywamy, że  $Y_{l,m}$  to **harmoniki sferyczne**. Przykładowe Harmoniki sferyczne:

$$Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1), \quad \begin{aligned} Y_{1,\pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi} \\ Y_{2,\pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi} \\ Y_{2,\pm 2} &= \mp \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi} \end{aligned}$$

Teraz jak wróćmy z tym do Równania Schrödingera z potencjałem sferycznie symetrycznym, to wiemy, że możemy szukać rozwiązań postaci jak w Równaniu (16.1) i dostajemy:

$$-\frac{\hbar^2}{R} \partial_r(r^2 \partial_r R) + 2mr^2(V(r) - E) + \underbrace{\frac{1}{Y} (L^2 Y)}^{\hbar^2 l(l+1)} = 0$$

Co sprowadza się do:

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2 R} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} R \right) + V(r) + \underbrace{\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}}_1 - E = 0 \quad (16.2)$$

---

### Przykłady

1. Cząstka swobodna ( $V(r) = 0$ ):

Wprowadźmy  $k$  takie, że  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ . To daje nam:

$$-\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} R \right) - k^2 r^2 + l(l+1) = 0$$

Co łatwo rozwiązać dla  $l = 0$ :

$$\begin{aligned} -\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} R \right) - k^2 r^2 &= 0 \\ -\frac{1}{Rr} \frac{d^2}{dr^2} (rR) - k^2 &= 0 \\ \frac{d^2}{dr^2} (rR) &= -k^2 (rR) \end{aligned}$$

---

<sup>1</sup>Element 'odśrodkowy' potencjału

Co daje nam:

$$R = A \frac{\sin kr}{r} + B \frac{\cos kr}{r}, \quad rR = A \sin kr + B \cos kr$$

Gdzie dla dowolnego  $k > 0$  to ma interpretację 'fal kulistych'

Ogólne rozwiązań dla dowolnego  $l$  to będzie:

$$\frac{d^2}{dr^2} R + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} R + \left( k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R = 0$$

Co po wprowadzeniu zmiennej  $\varrho = kr$  daje nam [kuliste równanie Bessela](#)

$$\frac{d^2}{d\varrho^2} R + \frac{2}{\varrho} \frac{d}{d\varrho} R + \left( 1 - \frac{l(l+1)}{\varrho^2} \right) R = 0 \quad (16.3)$$

Którego rozwiązaniem ku wielkiemu zdziwieniu naszemu są [kuliste funkcje Bessela](#):

$$R_l(\varrho) = A j_l(\varrho) + B n_l(\varrho)$$

Gdzie  $j_l$  i  $n_l$  to rozwiązania sferycznych funkcji Bessela postaci:

$$j_l(\varrho) = (\varrho)^l \left( \frac{1}{\varrho} \frac{d}{d\varrho} \right)^l \left( \frac{\sin \varrho}{\varrho} \right), \quad n_l(\varrho) = -(-\varrho)^l \left( \frac{1}{\varrho} \frac{d}{d\varrho} \right)^l \left( \frac{\cos \varrho}{\varrho} \right)$$

Dla małych  $\varrho$  zachowuje się to tak:

$$j_l(\varrho) \approx \frac{2^l l!}{(2l+1)!} \varrho^l, \quad n_l(\varrho) = -\frac{(2l)!}{2^l l!} \varrho^{-(l+1)}$$

**Podsumowując:**

$$\Psi_{k,l,m}(r, \theta, \varphi) = [A j_l(kr) + B n_l(kr)] Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad (16.4)$$

Gdzie:

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

2. Potencjał Coulombowski (myślimy o jednej cząstce w potencjale)

$$V(r) = -\frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Gdzie bierzemy:

- $q = ze$  - ładunek jądra
- Elektron  $e$

Wprowadzamy zmienne:

$$\varrho = \alpha r, \quad \alpha = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}$$

Teraz wstawiamy to do Równ. Schrödingera:

$$-\frac{4|E|}{\varrho^2} \frac{d}{d\varrho} \left( \varrho^2 \frac{d}{d\varrho} R \right) - \frac{ze^2}{\varrho^4 \pi \epsilon_0 \hbar} \sqrt{8m|E|\hbar^2} + \frac{4|E|l(l+1)}{\varrho^2} - E = 0$$

Co po wstawieniu parametru  $\lambda = \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar} \sqrt{\frac{m}{2E}}$  da nam:

$$\frac{1}{\varrho} \frac{d^2}{d\varrho^2} (\varrho R) + \left[ \frac{\lambda}{\varrho} - \frac{1}{4} - \frac{l(l+10)}{\varrho^2} \right] R = 0$$

# Lecture 17

## Wykład n+1

### 17.1 W poprzednim odcinku...

Wzięliśmy sobie potencjał Coulombowski:

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Gdzie bierzemy też:

$$\varrho = \alpha r, \quad \alpha = \sqrt{\frac{8m|E|}{\hbar^2}}$$

$$\lambda = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} \sqrt{\frac{m}{2|E|}}$$

Zaś równanie Schrödingera doprowadziliśmy do postaci:

$$\frac{1}{\varrho} \frac{d^2}{d\varrho^2}(\varrho R) + \left[ \frac{\lambda}{\varrho} - \frac{1}{4} - \frac{l(l+10)}{\varrho^2} \right] R = 0$$

### 17.2 Metoda Frobeniusa

**Zdjęcie** Zauważmy, że jak weźmiemy  $R(\varrho) = F(\varrho)e^{-\frac{1}{2}\varrho}$  to dostaniemy równanie na  $F(\varrho)$ :

$$\frac{d^2}{d\varrho^2}F + \left( \frac{2}{\varrho} - 1 \right) \frac{d}{d\varrho}F + \left[ \frac{\lambda - 1}{\varrho} - \frac{l(l+1)}{\varrho^2} \right] = 0$$

$$F(\varrho) = \varrho^2 \cdot L(\varrho), \quad L(\varrho) = \sum_{v=0} a_v \varrho^v, \quad a_0 \neq 0$$

$$\varrho^2 \frac{d^2}{d\varrho^2}L + \varrho[2(s+1) - \varrho] \frac{dL}{d\varrho} + [\varrho(\lambda - s - 1) + s(s+1) - l(l+1)]L = 0$$

W granicy  $\varrho \rightarrow \infty$ :

$$\frac{1}{\varrho} \frac{d^2}{d\varrho^2}(\varrho R) - \frac{1}{4}R = 0 \implies \frac{d^2}{d\varrho^2}(\varrho R) = \frac{1}{4}\varrho R \implies \varrho R = A e^{\frac{1}{2}\varrho} + B e^{-\frac{1}{2}\varrho}$$

Spójrzmy teraz w najniższym rzędzie  $\varrho$ : (zerowym); ( $\varrho = 0$ ):

$$s(s+1) - l(l+1) = 0 \implies s = l \vee s = -(l+1)$$

---

Dla małych  $\varrho \rightarrow 0$ :

$$R(\varrho) \sim \frac{1}{\varrho^l + 1}$$

Wtedy normalizacja części radialnej:

$$\int_0^\infty dr r^2 (R(\varrho))^2 = 1$$

Widzimy, że dla  $l \geq 1$  nie normalizuje się. Teoretycznie dla  $l = 0$  się normalizuje, ale wtedy  $R(\varrho) \approx \frac{1}{\varrho}$  dla małych  $\varrho$ .

Wtedy  $\Psi(r, \theta, \varphi) \xrightarrow{r \rightarrow 0} \frac{1}{r}$ , bo  $Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$  ale  $\Delta(1/r) \sim \delta^{(3)}(\mathbf{r})$ , więc nie może spełnić naszego równania Schrödingera, bo w  $V(\varrho)$  nie mamy żadnych  $\delta^{(3)}(r)$ .

---

Czyli bierzemy  $s = l$ :

$$\varrho^2 \frac{d^2 L}{d\varrho^2} + \varrho[2(l+1) - \varrho] \frac{dL}{d\varrho} + \varrho(\lambda - l - 1)L = 0$$

Wstawiając  $L = \sum_{v=0} a_v \varrho^v$ :

$$\begin{aligned} \varrho \sum_{v=0}^{\infty} a_v v(v-1) \varrho^{v-2} + [2(l+1) - \varrho] \sum_v a_v v \varrho^{v-1} + \sum_v (\lambda - l - 1) a_v \varrho^v &= 0 \\ \sum_{v=0}^{\infty} a_v \varrho^{v-1} [v(v-1) + 2(l+1)v] + \sum_v (\lambda - l - 1 - v) a_v \varrho^v &= 0 \\ \sum_{v=0}^{\infty} a_{v+1} \varrho^v [v(v+1) + 2(l+1)(v+1)] + (\lambda - l - 1 - v) a_v \varrho^v &= 0 \end{aligned}$$

Patrzmy na kolejne  $\varrho^v$ :

$$\frac{a_{v+1}}{a_v} = \frac{l+1+v-\lambda}{(v+1)(2l+2+v)}$$

Jeśli rekurencja nie urwie się, to dla  $v \rightarrow \infty$ :

$$\frac{a_{v+1}}{a_v} \xrightarrow{v \rightarrow \infty} \frac{1}{r} \implies a_v \sim \frac{1}{v!}$$

czyli  $F(\varrho) \xrightarrow{\varrho \rightarrow \infty} \varrho^k e^\varrho \implies R(\varrho) \sim \varrho^k e^\varrho e^{-\frac{1}{2}\varrho} \sim \varrho^k e^{\frac{1}{2}\varrho}$  czyli wybuchające rozwiązańe, które chcieliśmy odrzucić.

Wynika z tego, że aby znaleźć rozwiązanie znormalizowane, rekurencja musi się urwać:

$$l+1+v_{max}-\lambda=0 \implies \lambda=v_{max}+l+1=n \in \{1, 2, 3, \dots\}$$

Przypominamy sobie, że  $\lambda = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} \sqrt{\frac{m}{2|E|}}$ . Po wstawieniu  $E = -|E|$  daje nam to:

$$E_n = \frac{Z^2 e^4 m}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} = -R_0 \frac{Z^2}{n^2}$$

Gdzie

$$R_0 = \frac{me^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} = 13,6 \text{ eV}$$

to stała Rydberga, a  $n \in \{1, 2, 3, \dots\}$  to numeracja stanów.

Zaś czynnik normalizacyjny  $\alpha$ , który wcześniej ciągnęliśmy to:

$$\alpha = \sqrt{\frac{8m|E|}{\hbar^2}} = \frac{2 \cdot Z}{n \cdot a_0}, \quad a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = 0,52 \text{ \AA}$$

Gdzie wielkość  $a_0$  nazywamy **promieniem Bohra**.

Dla ustalonego  $n$  mogę mieć  $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$ . Rozwiązujeć rekurencję dla danego  $n$  i  $l$ , dostaniemy wielomian:

$$L_{n+l}^{2l+1}(\varrho) = \sigma_{m=0}^{n-l-1} (-1)^{m+2l+1} \frac{[(n+l)!]^2}{(n-l-1-m)!(2l+1+m)!m!} \varrho^m$$

Gdzie  $L_l^q(x)$  - **stwarzyszony wielomian Laguerre'a**

## 17.3 Podsumowując

**Stany własne:**

$$\begin{aligned} \Psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) &= R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\theta, \varphi) \\ R_{n,l}(r) &= N_{m,l} \left( \frac{2Zr}{na_0} \right) L_{n+l}^{2l+1} \left( \frac{2Zr}{na_0} \right) e^{-\frac{Zr}{na_0}} \\ N_{m,l} &= \left( \frac{2Z}{na_0} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n(n+l^3)}} \\ E_n &= -R_0 \frac{Z^2}{n^2} \end{aligned}$$

Gdzie  $n = 1, 2, 3, \dots$ ,  $l = 0, 1, \dots, n - 1$ ,  $m = -l, -l + 1, l$

**Atom wodoru to tak naprawdę problem dwóch ciał  $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$**  - Funkcja falowa protonu i elektronu

# Lecture 18

## Moment pędu jako generator grupy obrotów w 3D

Gruba obrotów w 3D to  $SO(3)$ . Właściwości:

- $R \in SO(3)$ , gdzie  $R$  - macierz rzeczywista
- $R^\dagger R = \mathbb{1}$  - co symbolizuje ortogonalność
- $\det R = 1$  - czyli wyrzucamy obicia.

Najważniejsze cechy:

- Obroty wokół różnych osi **nie komutują!**
- Żeby zrozumieć strukturę grupy, warto rozważyć infintezymalne obroty. Np.:

$$R_x(\varphi) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \varphi & -\sin \varphi \\ 0 & \sin \varphi & \cos \varphi \end{bmatrix}, \quad R_y(\varphi) = \begin{bmatrix} \cos \varphi & 0 & \sin \varphi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \varphi & 0 & \cos \varphi \end{bmatrix}, \quad R_z(\varphi) = \begin{bmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

- Rozważmy sobie dwa infintezymalne obroty o kąt  $\epsilon$  wokół osi  $x$ , potem  $y$  i odwrotnie. Obroty tworzą nam grupę Liego (z działaniem mnożenia), ale rozpatrując je jako macierze możemy właściwie patrzeć na to jak na Algebrę, tj mamy też działanie dodawania.

$$\begin{aligned} R_y(\epsilon)R_x(\epsilon) - R_x(\epsilon)R_y(\epsilon) &= \\ &= \begin{bmatrix} 1 - \frac{\epsilon^2}{2} & 0 & \epsilon \\ 0 & 1 & 0 \\ -\epsilon & 0 & 1 - \frac{\epsilon^2}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 - \frac{\epsilon^2}{2} & 0 \\ 0 & \epsilon & 1 - \frac{\epsilon^2}{2} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 - \frac{\epsilon^2}{2} & 0 \\ 0 & \epsilon & 1 - \frac{\epsilon^2}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 - \frac{\epsilon^2}{2} & 0 & \epsilon \\ 0 & 1 & 0 \\ -\epsilon & 0 & 1 - \frac{\epsilon^2}{2} \end{bmatrix} \\ &\stackrel{\mathcal{O}(\epsilon^2)}{=} \begin{bmatrix} 0 & \epsilon^2 & 0 \\ -\epsilon^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ &\stackrel{\mathcal{O}(\epsilon^2)}{=} \begin{bmatrix} 0 & \epsilon^2 & 0 \\ -\epsilon^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} - R_z(\epsilon^2) + \mathbb{1} \end{aligned} \tag{18.1}$$

Patrząc na to wyciągamy wniosek, że możemy zapisać:

$$R_i(\varphi) = e^{-i\varphi L_i/\hbar} \stackrel{\mathcal{O}(\varphi^2)}{\approx} \mathbb{1} - \frac{i\varphi L_i}{\hbar} - \frac{\varphi^2 L_i^2}{2\hbar^2}$$

Gdzie tak zdefiniowane  $L_i$  to generator obrotu.

Co po rozwinięciu daje:

$$\begin{aligned} & \left(1 - \frac{i\varphi L_y}{\hbar} - \frac{\varphi^2 L_y^2}{2\hbar^2}\right) \left(1 - \frac{i\varphi L_x}{\hbar} - \frac{\varphi^2 L_x^2}{2\hbar^2}\right) - \left(1 - \frac{i\varphi L_x}{\hbar} - \frac{\varphi^2 L_x^2}{2\hbar^2}\right) \left(1 - \frac{i\varphi L_y}{\hbar} - \frac{\varphi^2 L_y^2}{2\hbar^2}\right) \\ & \approx -\frac{\varphi^2}{\hbar^2} (L_y L_x - L_x L_y) \end{aligned}$$

Co pamiętając o własności:

$$-R_z(\epsilon^2) = \begin{bmatrix} -1 & \epsilon^2 & 0 \\ -\epsilon^2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

Oraz równaniu (18.1) dostaniemy:

$$-\frac{\varphi^2}{\hbar^2} (L_y L_x - L_x L_y) \stackrel{\mathcal{O}(\varphi^2)}{\approx} -\left(1 - \frac{iL_z\varphi^2}{\hbar}\right) + 1 \implies [L_x, L_y] = i\hbar L_z$$

Ogólnie dostalibyśmy:

$$[L_j, L_k] = i\hbar \epsilon_{jkl} L_l$$

**Wniosek:** Generatory grupy obrotów spełniają te same związki komutacyjne co operator momentu pędu

- Żeby opisać działanie obrotów na stany kwantowe potrzebujemy reprezentacje (unitarne) działające w przestrzeni Hilberta, gdzie 'żyją' stany kwantowe.

Reprezentacja grupy:

$$R \xrightarrow{\pi} \mathcal{U}_r$$

Gdzie  $\mathcal{U}$  to macierze unitarne nad przestrzenią Hilberta  $\mathcal{H}$ .

Muszą one spełniać warunki:

$$\begin{cases} \mathcal{U}_{R_1 \cdot R_2} = \mathcal{U}_{R_1} \cdot \mathcal{U}_{R_2} \\ \mathcal{U}_{R^{-1}} = \mathcal{U}_R^{-1} = \mathcal{U}_R^\dagger \end{cases}$$

### Przykład

Rozważmy funkcję falową  $\Psi(\mathbf{r})$  w 3D. Niech  $|\Psi\rangle_R = \mathcal{U}_R |\Psi\rangle$ , gdzie  $|\Psi\rangle_R$  to stan układu po obrocie R. Dostaniemy:

$$\Psi_R(\mathbf{r}) = \Psi(R^{-1}\mathbf{r})$$

Weźmy sobie infinitesimalny obrót wokół osi  $\mathbf{n}$  o kąt  $\epsilon$ . Wtedy w pierwszym rzędzie ruszamy się prostopadle do osi obrotu, czyli zapisalibyśmy to sobie jako:

$$R^{-1}\mathbf{r} \stackrel{\mathcal{O}(\epsilon)}{\approx} \mathbf{r} - \epsilon \mathbf{n} \times \mathbf{r}$$

Czyli:

$$\Psi_R(\mathbf{r}) = \Psi(\mathbf{r} - \epsilon \mathbf{n} \times \mathbf{r}) = \Psi(\mathbf{r}) - \epsilon (\mathbf{n} \times \mathbf{r}) \cdot \nabla \Psi(\mathbf{r}) = (1 - \epsilon (\mathbf{n} \times \mathbf{r}) \cdot \nabla) \Psi(\mathbf{r})$$

Co biorąc przyjemny związek  $(A \times B) \cdot C = A \cdot (B \times C)$ :

$$\Psi_R(\mathbf{r}) = [1 - \epsilon \mathbf{n} \cdot (\mathbf{r} \times \nabla)] \Psi(\mathbf{r})$$

Co podstawiając związek  $\hat{\mathbf{p}} = \frac{\hbar}{i} \nabla$  daje:

$$\left[1 - \frac{i\epsilon}{\hbar} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}})\right] \Psi(\mathbf{r}) \stackrel{\mathbf{L}=\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}}{=} \underbrace{\left[1 - \frac{i\epsilon}{\hbar} \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{L}}\right]}_{\mathcal{U}_R = \mathcal{U}_{\mathbf{n}(\epsilon)}} \Psi(\mathbf{r})$$

Gdzie:

$\mathcal{U}_R$  - reprezentacja obrotu  $R$  w przestrzeni Hilberta funkcji falowych w 3D

$\mathcal{U}_{\mathbf{n}}(\epsilon)$  - obrót wokół osi  $\mathbf{n}$  o  $\epsilon$ .

Daje to:

$$\mathcal{U}_{\mathbf{n}}(\varphi) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \frac{\varphi}{N} \mathbf{n} \cdot \mathbf{L} \right)^N = e^{-\frac{i}{\hbar} \varphi \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{L}}}$$

W szczególności obrót wokół osi  $z$  o kąt  $\varphi$ :

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_z(\phi) &= e^{-\frac{i}{\hbar} \phi \hat{\mathbf{L}}_z} = e^{\phi \frac{\partial}{\partial \varphi}} \\ \implies \Psi_R(r, \theta, \varphi) &= e^{-\phi \frac{\partial}{\partial \varphi}} \Psi(r, \theta, \varphi) = \sum_n \frac{(-\phi)^n (\frac{\partial}{\partial \varphi})^n}{n!} \Psi(r, \theta, \varphi) = \Psi(r, \theta, \varphi - \phi) \end{aligned}$$

Analogicznie dostaliśmy:

$$e^{-i \frac{\hat{p}_{x_0}}{\hbar}} = e^{-x_0 \frac{\partial}{\partial x}}$$

**Wniosek:** Każdą reprezentację grupy obrotów w przestrzeni Hilberta będzie można zapisać jako  $\mathcal{U}_{\mathbf{n}}(\varphi) = e^{-\frac{i}{\hbar} \varphi \mathbf{n} \cdot \mathbf{J}}$ , gdzie  $\mathbf{J}_i$  - operatory spełniające związek  $[\hat{\mathbf{J}}_j, \hat{\mathbf{J}}_k] = i\hbar \varepsilon_{jkl} \hat{\mathbf{J}}_l$

Znamy wszystkie możliwości  $J_i$ , w przestrzeniach o różnych wymiarach - dla danego ' $j$ ' mieliśmy przestrzeń  $\{|j, m\rangle, \text{ gdzie } m = -j, \dots, j\}$ .

Wymiar przestrzeni  $\mathcal{H}_j$ ,  $\dim \mathcal{H}_j = 2j + 1$

Znaleźliśmy reprezentacje **Algebry Liego** grupy obrotów ( $so(3)$ )

Mając reprezentacje  $so(3)$ , możemy użyć wyrażenia  $\mathcal{U}_{\mathbf{n}}(\varphi) = e^{-\frac{i\varphi \mathbf{n} \cdot \mathbf{L}}{\hbar}}$  żeby dostać reprezentację grupy  $SO(3)$ <sup>1</sup> **Przykład:**

- $j = 0, \quad \mathcal{H}_j = 1, \quad J_i = 0 \implies \mathcal{U}_{\mathbf{n}}(\varphi) = \mathbb{1}$
- $j = \frac{1}{2}, \quad \mathcal{H}_j = 2\{|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle\}$ . Teraz powstające macierze obrotów to:

$$J_z = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad J_x = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad J_y = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \implies J_i = \frac{\hbar}{2} \sigma_i$$

Gdzie  $\sigma_i$  jest **macierzą Pauliego**, zaś:

$$\mathcal{U}_{\mathbf{n}}(\varphi) = e^{-\frac{i\varphi}{\hbar} \cdot \mathbf{n} \cdot \frac{\hbar}{2} \sigma} = e^{-\frac{1}{2} i \varphi \mathbf{n} \cdot \sigma}$$

jest odpowiednio obrotem sfery Blocha!

**Uwaga:** Zauważmy, że da  $j = \frac{1}{2}$ :

$$\mathcal{U}_{\frac{1}{2}}(2\pi) = e^{-\frac{1}{2} i 2\pi \sigma_z} = e^{-i\pi \sigma_z} = \begin{bmatrix} e^{-i\pi} & 0 \\ 0 & e^{i\pi} \end{bmatrix} = -\mathbb{1}$$

Gdzie jeśli by to była reprezentacja  $SO(3)$  to powinniśmy dostać  $+\mathbb{1}$ , bo  $R = 1$  Wynika to z tego, że de facto znaleźliśmy wszystkie reprezentacje grupy  $SU(2)$ , która jest tzw. grupą nakrywającą grupę  $SO(3)$  i tylko dla całkowitych  $j$  mamy reprezentacje  $SO(3)$ , a dla połówkowych mamy reprezentacje  $SU(2)$  **Zdjęcie**

---

<sup>1</sup>Nie do końca precyzyjne

# Lecture 19

## Rachunek Zaburzeń

### 19.1 Dygresja o spinie $\frac{1}{2}$

Mamy sobie qubit, o spinie  $\frac{1}{2}$ , co daje stany  $\{|+\frac{1}{2}\rangle, |-\frac{1}{2}\rangle\}$ , gdzie bierzemy  $j = \frac{1}{2}$ ,  $m = \pm\frac{1}{2}$ .  
**Przepisz ze zdjęcia z pierwszej tablicy**

### 19.2 Rachunek Zaburzeń

Powiedzmy sobie, że Hamiltonian który rozważamy ma postać:

$$H = H_0 + V$$

Gdzie  $H_0$  potrafimy rozwiązać ścisłe, a  $V$  to jest małe zaburzenie. Stany własne  $H_0$  to będą:

$$H_0 |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle$$

A my chcemy znaleźć rozwiązanie:

$$(H_0 + \lambda V) |n\rangle = E_n |n\rangle \quad (19.1)$$

Gdzie  $\lambda$  to będzie parametr, który pozwoli śledzić rzędy rachunku. Finalnie go położymy  $\lambda = 1$ . Zakładamy, że widmo  $H_0$  jest nezdegenerowane (czyli, że  $E_n^{(i)}$  są różne). Szukamy rozwiązań rozwijając w szeregu with respect to  $\lambda$ :

$$\begin{aligned} |n\rangle &= |n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |n^{(2)}\rangle + \dots \\ E_n &= E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda E_n^{(2)} + \dots \end{aligned}$$

Wstawiamy to teraz do (19.1) i patrzymy na równanie w kolejnych rzędach  $\lambda$ .

$$\begin{aligned} (0) &\rightarrow (H_0 - E_n^{(0)}) |n^{(0)}\rangle = 0 \\ (1) &\rightarrow (H_0 - E_n^{(0)}) |n^{(1)}\rangle = (E_n^{(1)} - V) |n^{(0)}\rangle \\ (2) &\rightarrow (H_0 - E_n^{(0)}) |n^{(2)}\rangle = (E_n^{(1)} - V) |n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)} |n^{(0)}\rangle \end{aligned}$$

**Uwaga:** Dla wszystkich  $|n^{(i)}\rangle$  możemy zawsze dodać coś proporcjonalnego do  $|n^{(0)}\rangle$  tak, żeby mieć  $\langle n^{(0)} | n^{(i)} \rangle \stackrel{i \geq 1}{\equiv} 0$ . Poprawka na energię w  $k$ -tym rzędzie uzyskamy obkładając równanie ( $k$ ) z lewej strony stanem  $\langle n^{(0)} |$ . Daje nam to:

$$0 = -\langle n^{(0)} | V | n^{(k-1)} \rangle + E_n^{(k)}$$

Czyli po przekształceniu:

$$E_n^{(k)} = \langle n^{(0)} | V | n^{(k-1)} \rangle$$

Czyli w szczególności pierwsza poprawka:

$$E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | V | n^{(0)} \rangle$$

A teraz chcemy wiedzieć czym jest  $|n^{(1)}\rangle$ . Otóż:

$$|n^{(1)}\rangle = \sum_{k \neq n} a_k^{(n,1)} |k^{(0)}\rangle$$

A suma jest takiej postaci ponieważ założyliśmy, że  $\langle n^{(0)} | n^{(1)} \rangle = 0$ . Za to wektory  $|k^{(i)}\rangle$  są zdefiniowane jako baza własna Hamiltonianu, tj. takie, że:

$$H_0 |k^{(0)}\rangle = E_k^{(0)} |k^{(0)}\rangle$$

Teraz jak podstawimy to do równania na poprawkę (1):

$$\begin{aligned} (H_0 - E_n^{(0)}) \sum_{k \neq n} a_k^{(n,1)} |k^{(0)}\rangle &= (E_n^{(1)} - V) |n^{(0)}\rangle, \quad \text{obkadamy przez } |k^{(0)}\rangle \\ (E_k^{(0)} - E_n^{(0)}) a_k^{(n,1)} &= -\langle k^{(0)} | V | n^{(0)} \rangle \\ a_k^{(n,1)} &= \frac{\langle k^{(0)} | V | n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \end{aligned}$$

Teraz możemy znaleźć  $E_n^{(2)}$ :

$$E_n^{(2)} = \langle n^{(0)} | V | n^{(1)} \rangle = \langle n^{(0)} | V \sum_{k \neq n} \frac{\langle k^{(0)} | V | n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} |k^{(0)}\rangle = \sum_{k \neq n} \frac{|\langle k^{(0)} | V | n^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

Widzimy zatem, że jakby była degenracja to byłoby to problemem, bo mamy w mianowniku  $E_n^{(0)} - E_k^{(0)}$ .

### Intuicja dlaczego to jest problemem

Wyobraźmy sobie, że  $H_0 = E_0 \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ , weźmy sobie teraz jakieś zaburzenie  $V = \lambda \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \lambda(|+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|)$ ,  $|\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \pm |1\rangle)$ .

Z racji zdegenerowania nasz Hamiltonian  $H_0$  nie ma jednoznacznie określonych wektorów własnych bo to będzie dowolna kombinacja wektorów z tej przestrzeni

# Lecture 20

## Zaburzenie ciąg dalszy

Gdy mamy degenrację:

$$|n_i^{(0)}\rangle := |n_1^{(0)}\rangle, \dots, |n_g^{(0)}\rangle$$

Co oznacza, że  $|n^{(0)}\rangle$  muszą być wybrane jako wektory własne macierzy  $V_{ij}$  i wtedy odpowiednie wartości własne dają  $E_n^{(1)}$  co oznacza pierwszą poprawkę. Pamiętajmy również, że równania, które musimy spełnić w rachunku zaburzeń, to:

$$\begin{aligned} (H_0 - E_n^{(0)}) |n_i^{(0)}\rangle &= 0 \\ (H_0 - E_n^{(0)}) |n^{(1)}\rangle &= (E_n^{(1)} - V) |n^{(0)}\rangle \end{aligned}$$

Gdzie ogólny stan  $|n^{(0)}\rangle$  w postaci zdegenerowanej to:

$$|n^{(0)}\rangle = \sum_{i=1}^g a_i |n_i^{(0)}\rangle$$

Co po obłożeniu wektorem  $\langle n_j^{(0)} |$  daje nam:

$$\begin{aligned} \langle n_j^{(0)} | (E_n^{(1)} - V) a_i | n_i^{(0)} \rangle &= 0 \\ \forall_j \sum_{i=1}^g [E_n^{(1)} \delta_{ij} - \langle n_j^{(0)} | V | n_i^{(0)} \rangle] a_i &= 0 \end{aligned}$$

Co nam da:

$$\begin{aligned} |n^{(1)}\rangle &= \sum_{k \neq \{n_1, \dots, n_g\}} a_k^{(n,1)} |k^{(0)}\rangle \\ E_n^{(2)} &= \sum_{k \neq \{n_1, \dots, n_g\}} \frac{|\langle n^{(0)} | V | k^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \\ a_k^{(n,1)} &= \frac{\langle k^{(0)} | V | n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \end{aligned}$$

Co będzie ok, jeśli w 1-szym rzędzie usunie się degeneracja (czyli wartości własne  $E_n^{(1)}$  w ramach przestrzeni zdegenerowanej będą różne).

## 20.1 Metoda Wariacyjna

**Fakt:** Dla dobrego stanu  $|\tilde{O}\rangle$  zachodzi  $\langle \tilde{O}|H|\tilde{O}\rangle \geq E_0$  gdzie  $E_0$  to energia stanu podstawowego

Dowód:

$$\begin{aligned} |\tilde{O}\rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} a_n |n\rangle \\ H_n |n\rangle &= E_n |n\rangle \\ \langle \tilde{O}|H|\tilde{O}\rangle &= \sum_{n,m} a^* a \langle n|H|m\rangle = \sum_n |a_n|^n E_n \geq \sum_n |a_n|^2 E_0 = E_0 \end{aligned}$$

Metoda: Rozważamy sobie klasę stanów  $|\tilde{0}_\lambda\rangle$  gdzie  $\lambda$  - parametru stanu. Wiemy wtedy, że:

$$E_0 \leq \min_{\lambda} \frac{\langle \bar{O}_\lambda | H | \bar{O}_\lambda \rangle}{\langle \bar{O}_\lambda | \bar{O}_\lambda \rangle}$$

## 20.2 Dynamiczny rachunek zaburzeń

Zdefiniujmy sobie hamiltonian z zaburzeniem zmiennym w czasie:

$$H(t) = H_0 + V(t)$$

Gdzie  $H_0$  to Hamiltonian dla którego znamy rozwiązanie, a  $V(t)$  - zaburzenie zależne od czasu. Wtedy:

$$H_0 |n\rangle = E_n |n\rangle$$

### 20.2.1 Obraz Diraca (oddziaływania)

Jeśli stan w obrazie Schrödingera ewoluje jako:

$$|\Psi(t)\rangle = \tau \left[ e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' H(t')} \right] |\Psi(0)\rangle$$

Gdzie  $\tau$  symbolizuje uporządkowanie czasowe.

W obrazie Diraca:

$$|\Psi(t)\rangle_D := e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} |\Psi(t)\rangle$$

Co możemy rozumieć intuicyjnie jako 'usuwanie' ewolucji związanej z trywialnym Hamiltonianem  $H_0$ . Dostajemy też

$$\hat{A}_D := e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} \hat{A} e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t}$$

Dzięki temu mamy:

$$\langle \Psi(t) | \hat{A}_D | \Psi(t) \rangle_D = \langle \Psi(t) | e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} \hat{A} e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} | \Psi(t) \rangle = \langle \Psi(t) | \hat{A} | \Psi(t) \rangle$$

Przy czym zauważamy również, że:

$$i\hbar \frac{d}{dt} (\langle \Psi(t) \rangle_D) = i\hbar \frac{d}{dt} \left( e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} |\Psi(t)\rangle \right) = -H_0 e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} |\Psi(t)\rangle + i\hbar e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = -H_0 |\Psi(t)\rangle_D + e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} H(t) |\Psi(t)\rangle$$

Co daje nam finalnie wzór:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle_D = V_D(t) |\Psi(t)\rangle_D \quad (20.1)$$

# Lecture 21

## Zaburzenia w czasie

### 21.1 W poprzednim odcinku

Zdefiniowaliśmy sobie:

$$H = H_0 + \lambda V(t)$$

Oraz

$$|\Psi(t)\rangle_D = e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} |\Psi(t)\rangle, \quad |\Psi(t)\rangle_D = U_D(t) |\Psi(0)\rangle$$

Czyli mamy też:

$$A_D = e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} A e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}, \quad i\hbar \frac{dU_D(t)}{dt} = \lambda V_D(t) U_D(t)$$

Widzimy też, że:

$$U_D(t) = \underbrace{U_D^{(0)}}_{\text{Initial state}} + \lambda \left[ \underbrace{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' V_D(t')}_{U_D^{(1)}} \right] + \lambda^2 \left( -\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' V_D(t') V_D(t'') + \dots$$

---

Zazwyczaj w chwili  $t = 0$  będziemy również rozważać  $|\Psi(0)\rangle = |i\rangle$ , gdzie to  $i$  oznacza 'initial',  $H_0|i\rangle = E_i|i\rangle$ . Ewoluujemy przez czas  $t$  i chcemy wiedzieć jakie jest prawdopodobieństwo, że w wyniku zaburzenia  $V(t)$  układ znajdzie się w stanie  $|n\rangle$ . Zapiszmy:

$$\underbrace{|\Psi(t)\rangle_D}_{U_D(t)|i\rangle} = \sum_n c_n(t) |n\rangle, \quad \langle m | U_D(t) | i \rangle = \langle n | \Psi(t) \rangle_D = c_n(t)^{(0)} + \lambda c_n^{(1)}(t) + \lambda^2 c_n^{(2)}(t) + \dots$$

Zdjęcie objaśniające  $c_n^{(i)}$  Wstaw

### 21.2 Wracamy do obrazu Schrödingera

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t) |n\rangle = e^{-\frac{iH_0t}{\hbar}} |\Psi(t)\rangle_D = \sum_D \underbrace{c_n(t) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}}_{a_n} |n\rangle$$
$$\langle n | V_D(t') | m \rangle = \langle n | e^{\frac{iH_0 t'}{\hbar}} | m \rangle = e^{\frac{i(E_n - E_m)t'}{\hbar}} \langle n | V(t') | m \rangle$$

Gdzie kolejne elementy  $a^{(i)}$ :

$$a_n^{(0)} = \delta_{ni} e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}$$
$$a_n^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} \int dt' e^{-\frac{iE_n(t-t')}{\hbar}} \langle n | V(t') | i \rangle e^{-\frac{E_i t'}{\hbar}}$$
$$a_n^{(2)} = \sum_m \left( \frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' e^{-\frac{iE_n(t-t')}{\hbar}} \langle n | V(t') | m \rangle e^{-\frac{iE_m(t'-t'')}{\hbar}} \langle m | V(t'') | i \rangle e^{-\frac{E_i t''}{\hbar}}$$

Teraz prawdopodobieństwo przejścia to:

$$P_{i \rightarrow n}(t) |a_n(t)|^2 = |c_n(t)|^2$$

**Przykład:** Zaburzenie harmoniczne

$$\hat{V}(t) = 2 \cdot \hat{V} \cdot \sin(\omega t)$$

Liczymy:

$$a_n^{(1)}(t) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \langle n|V|i\rangle \underbrace{2 \int dt' \sin(\omega t') e^{\frac{it'(E_n - E_i)}{\hbar}}}_{A}$$

$$\text{Zaś } \omega_{ni} = \frac{(E_n - E_i)}{\hbar}$$

Teraz  $A$  policzymy też jako:

$$A = \dots = 2i \left[ e^{\frac{i(\omega_{ni} + \omega)t}{2}} \frac{\sin\left(\frac{\omega_{ni} + \omega}{2}t\right)}{\omega_{ni} + \omega} - e^{\frac{i(\omega_{ni} - \omega)t}{2}} \frac{\sin\left(\frac{\omega_{ni} - \omega}{2}t\right)}{\omega_{ni} - \omega} \right]$$

Duże amplitudy będą w okolicach  $\omega_{ni} = \pm\omega$ .

Jeśli  $\omega_{ni} = \omega$  (absorpcja) to dominujący człon w prawdopodobieństwie to

$$|a_n^{(1)}(t)| \approx \frac{4}{\hbar^2} |\langle n|V|i\rangle|^2 \frac{\sin^2\left(\frac{\omega_{ni} - \omega}{2}t\right)}{(\omega_{ni} - \omega)^2}$$

Czyli możemy wprowadzić sobie szybkość przejścia:

$$W_{i \rightarrow n} = \frac{2\pi}{\hbar^2} |\langle m|V|i\rangle|^2 \delta(\omega_{ni} - \omega)$$

Co jest znane jako **złota reguła Fermiego**

### 21.3 Twierdzenie Adiabatyczne

$H(t)$  - bardzo wolno zmienny w czasie i pytamy jak będzie ewoluował  $|\Psi(t)\rangle$ ?

Oznaczamy stany i energie własne w chwili  $t$  jako:  $H(t)|n(t)\rangle = E_n(t)|n(t)\rangle$ .

Dwolone rozwiązanie możemy zawsze zapisać jako:  $|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) e^{i\theta_n(t)} |n(t)\rangle$ ,  $\theta_n(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t dt' E_n(t')$ . Wstawmy sobie to teraz do równania Schrödingera:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = H(t) |\Psi(t)\rangle$$

Co daje dalej:

$$\begin{aligned} i\hbar \sum_n \left[ \dot{c}_n |n(t)\rangle - \cancel{\frac{i}{\hbar E_n(t)c_n(t)|n(t)\rangle}} + c_n(t) |\dot{n}(t)\rangle \right] e^{-\theta_n(t)} &= \cancel{\sum_n c_n(t) e^{\theta_n(t)} E_n(t)} |n\rangle \\ \sum_n \dot{c}_n e^{\theta_n(t)} |n(t)\rangle + c_n(t) e^{i\theta_n(t)} |\dot{n}(t)\rangle &= 0 \\ \dot{c}_m(t) &= - \sum_n c_n(t) \langle m(t) | \dot{n}(t) \rangle e^{i(\theta_n(t) - \theta_m(t))} \\ H(t) |n(t)\rangle &= E_n(t) |n(t)\rangle / \frac{d}{dt} \\ \langle m(t) | [\dot{H}(t)n(t) + H(t) |\dot{n}(t)\rangle] &= \cancel{\dot{E}_n(t)} |n(t)\rangle + E_n(t) |\dot{n}(t)\rangle \\ \langle m(t) | \dot{H}(t) |n(t)\rangle + \underbrace{\langle m(t) | H(t) |\dot{n}(t)\rangle}_{E_n(t) \langle m(t) | n(t)\rangle} &= E_n(t) \langle m(t) | \dot{n}(t)\rangle \end{aligned}$$

Gdzie  $m \neq n$  oraz

$$\langle m(t) | \dot{n}(t) \rangle = \frac{\langle m(t) | \dot{H} | n(t) \rangle}{E_n(t) - E_m(t)}$$

Pamiętając, że

$$\dot{c}_m(t) = -c_m(t) \langle m(t) | \dot{m}(t) \rangle - \sum_{m \neq n} c_n(t) e^{i[\theta_n(t) - \theta_m(t)]} \cdot \frac{\langle m(t) | \dot{H} | n(t) \rangle}{E_n(t) - E_m(t)}$$

Gdzie ten drugi człon odpowiada za 'przeskoki' pomiędzy poziomami energetycznymi. Jeśli jest to bardzo małe,, to jeśli stan początkowy był stanem własnym  $|\Psi(0)\rangle = |m=0\rangle$ , to pozostanie cały czas stanem własnym  $H(t) : |\Psi(t)\rangle = |m(t)\rangle$

# Spis treści

<b>1 Krótka historia fizyki i wstęp do kwantów</b>	<b>2</b>
1.1 Krótka historia fizyki . . . . .	2
1.2 Hipoteza Kwantu . . . . .	2
1.2.1 Ciało Doskonale Czarne . . . . .	2
1.2.2 Efekt Fotolektryczny . . . . .	2
1.2.3 Analiza pól EM . . . . .	2
1.3 Skutki skwantowania energii . . . . .	3
1.4 Superpozycja . . . . .	5
1.5 Hipoteza De Broigla'a . . . . .	7
<b>2 Stany i pomiary kwantowe</b>	<b>8</b>
2.1 Stany i pomiary kwantowe . . . . .	8
<b>3 Ewolucja stanów kwantowych i Hamiltonian</b>	<b>11</b>
3.1 Ewolucja stanów kwantowych . . . . .	11
3.2 Argument za naturą fizyczną H . . . . .	12
3.3 Wyznaczenie ewolucji stanu w praktyce . . . . .	13
<b>4 Równanie Schrodingera (na koszulkach)</b>	<b>14</b>
4.1 Schizofreniczna Ewolucja . . . . .	14
4.2 Kwantowy Efekt Zenona (z Elei) . . . . .	14
4.3 Równanie Schrodingera (na koszulkach) . . . . .	15
<b>5 Równanie Schrödingera, propagator i całki po trajektoriach et al.</b>	<b>17</b>
5.1 Powtórka z poprzedniego wykładu . . . . .	17
5.1.1 Reprezentacja położeniowa a pędowa . . . . .	17
5.2 Równanie Schrödingera . . . . .	17
5.2.1 Cząstka swobodna . . . . .	18
5.3 Historia rozwoju Mechaniki Kwantowej . . . . .	19
5.4 Obraz Schrödingera i obraz Heisenberga . . . . .	19
5.5 Propagator i całki po trajektoriach . . . . .	19
<b>6 Propagator et al.</b>	<b>21</b>
6.1 Ad Propagator . . . . .	21
6.2 Całka po trajektoriach . . . . .	22
<b>7 Zasady nieoznaczoności</b>	<b>23</b>
7.1 Off to propagator once more . . . . .	23
7.2 Zasada nieoznaczoności Heisenberga-Robertsona . . . . .	24
7.2.1 Twierdzenie . . . . .	25
7.2.2 Dowód . . . . .	25

<b>8 Zasady nieoznaczoności C.D.</b>	<b>26</b>
8.1 Jednoczesny pomiar komutujących obserwabli . . . . .	26
8.2 Jednoczesny pomiar niekomutujących obserwabli (?) . . . . .	27
8.3 Zasada nieoznaczoności czas-energia <b>Dodaj indeks</b> . . . . .	27
<b>9 Potencjał Kwadratowy</b>	<b>28</b>
9.1 Off to zasady nieoznaczoności once more . . . . .	28
9.2 Kwantowy Oscylator Harmoniczny . . . . .	28
9.2.1 Szukanie stanów własnych i wartości własnych $\hat{n}$ . . . . .	29
<b>10 Prima Aprilis</b>	<b>32</b>
10.1 W poprzednim odcinku... . . . . .	32
10.2 Wyznaczanie kolejnych stanów $\Psi_n$ . . . . .	32
10.2.1 Własności wielomianów Hermite'a . . . . .	33
10.3 Stany Koherentne . . . . .	33
<b>11 Potencjał liniowy i przybliżenie WKB</b>	<b>35</b>
<b>12 Przybliżenie WKB</b>	<b>37</b>
<b>13 Off to przybliżenie WKB once more</b>	<b>40</b>
13.1 Zszywanie rozwiązań WKB . . . . .	40
13.2 Wchodzimy w trzeci wymiar . . . . .	41
<b>14 Cząstka w 3D, moment pędu</b>	<b>43</b>
14.1 Moment pędu . . . . .	43
14.2 Potencjały sferyczne . . . . .	44
<b>15 Cząstka w 3D, moment pędu C.D.</b>	<b>47</b>
15.1 Wracamy do Schrödingera we współrzędnych sferycznych . . . . .	48
<b>16 Wchodzę Harmoniki Sferyczne</b>	<b>50</b>
<b>17 Wykład n+1</b>	<b>52</b>
17.1 W poprzednim odcinku... . . . . .	52
17.2 Metoda Frobeniusa . . . . .	52
17.3 Podsumowując . . . . .	54
<b>18 Moment pędu jako generator grupy obrotów w 3D</b>	<b>55</b>
<b>19 Rachunek Zaburzeń</b>	<b>58</b>
19.1 Dygresja o spinie $\frac{1}{2}$ . . . . .	58
19.2 Rachunek Zaburzeń . . . . .	58
<b>20 Zaburzeń ciąg dalszy</b>	<b>60</b>
20.1 Metoda Wariacyjna . . . . .	61
20.2 Dynamiczny rachunek zaburzeń . . . . .	61
20.2.1 Obraz Diraca (oddziaływania) . . . . .	61
<b>21 Zaburzenia w czasie</b>	<b>62</b>
21.1 W poprzednim odcinku . . . . .	62
21.2 Wracamy to obrazu Schrödingera . . . . .	62
21.3 Twierdzenie Adiabatyczne . . . . .	63

<b>A Długaśne wyprowadzenia wzorów</b>	<b>72</b>
A.1 Lecture 6 . . . . .	72
A.2 Lecture 9 . . . . .	72

# Spis rysункów

1.1	Wykres promieniowania ciała doskonale czarnego . . . . .	3
1.2	Porównanie hipotezy Plancka z prawem Rayleigha-Jeansa i rozkładem Wiena. Further reading o 'Katastrofie w nadfiolecie' na <a href="#">Wikipedii o ciele doskonale czarnym</a> . . . . .	4
1.3	Demonstracja działania płytki półprzepuszczalnej. . . . .	4
1.4	Demonstracja działania płytki światłodzielającej ( <i>Beam Splitter</i> ). . . . .	5
1.5	Schemat konstrukcji Interferometru Macha-Zehndera wraz z podpisem macierzami Jonesa . . . . .	6
1.6	Schemat konstrukcji Interferometru Macha-Zehndera wraz z podpisem macierzami Jonesa w przypadku zerowej zmiany fazy, tj. w szczególności dla jednego fotonu . . . . .	6
2.1	Porównanie podejść myślenia o kwantu - deterministyczny i niedeterministyczny . . . . .	9
4.1	Schizofreniczna Ewolucja . . . . .	14
6.1	Sumowanie po drogach dla cząstki kwantowej, liczona na propagatorach. Wyraża to też Feynmannowska <a href="#">Całka po trajektoriach</a> . . . . .	21
9.1	Rysunek studni potencjału dla kwantowego oscylatora harmonicznego <a href="#">Przerysuj i wstaw</a>	30
12.1	Notatki strona 1 . . . . .	38
12.2	Notatki strona 2 . . . . .	39
A.1	Uzasadnienie dla unitarnego operatora . . . . .	72
A.2	Uzasadnienie dla wartości komutatora $\hat{a}\hat{a}^\dagger$ . . . . .	72
A.3	Wyprowadzenie stanu własnego $\hat{n}$ . . . . .	73

# Indeks

- Całka po trajektoriach, 21, 22
- Funkcja
  - Bessela
    - Kulista, 51
  - falowa, 15
  - Greena, 20
- Harmonika Sferyczna, 50
- Hipoteza De Broigla, 7
- indeterminizm, 3
- Interferometr Macha-Zehndera, 5
- Kwant Energii, 2
- kwantowy oscylator harmoniczny, 23
- Macierz Pauliego, 57
- Moment Pędu
  - Orbitalny, 48
- Obserwabla, 9
  - Położenia, 16
- Operator
  - Anihillacji, 29
  - Kreacji, 29
- Ortogonalność, 33
- Pomiary kwantowe, 8
- Postulat pomiarowy, 9
- Potencjał
  - Kwadratowy, 28
  - Liniowy, 35
- Promień Bohra, 54
- Propagator, 20
- Rozkład Boltzmanna, 3
- Równanie
  - Airy, 36
  - Bessela
    - Kuliste, 51
  - Heisenberga, 19
  - Schrödingera, 12, 17
    - bez czasu, 18
    - Sferyczne, 48
    - W 3D, 42
- Stan
  - fotonu, 5
  - kwantowy, 8
- Stany
  - Koherentne, 33
- Stała
  - Plancka, 2
  - Rydberga, 53
- Superpozycja, 6
- Teoria parametrów ukrytych, 3
- Twierdzenie
  - Adiabatyczne, 63
- Układ izolowany, 11
- Wielomiany
  - Hermite'a, 33
  - Laguerre, Stowarzyszone, 54
- Zasada
  - superpozycji, 8
- Zasada Nieoznaczoności
  - czas-energia, 28
  - Heisenberga, 24
  - Heisenberga-Robertsona, 27
  - łącznego pomiaru, 27
- Związek
  - Komutacyjny, 43, 45
- Złota Reguła Fermiego, 63



# Załączniki

# Dodatek A

## Długańskie wyprowadzenia wzorów

### A.1 Lecture 6

$$\begin{aligned}
 & \left\langle x | U(t - t_0) | x_0 \right\rangle = \int dx_n \langle x_n | U_n(t_n - t_0) | x_0 \rangle \\
 & = \int dx_n \langle x | U(+ - t_n) U(t_n - t_0) | x_0 \rangle \\
 & = \int dx_n \langle x | U(+ - t_n) | x_n \rangle \langle x_n | U(t_n - t_0) | x_0 \rangle
 \end{aligned}$$

Wyprowadzenie A.1: Uzasadnienie dla unitarnego operatora

### A.2 Lecture 9

$$\begin{aligned}
 & \frac{i\hbar}{m\omega} (\underbrace{\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}}_{i\hbar}) = \frac{im}{2\hbar} \hat{x} + \frac{i}{2\hbar m\omega} (-\frac{1}{2}) \\
 & [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \frac{im\omega}{2\hbar} \left[ \hat{x} + \frac{i\hat{p}}{m\omega}, \hat{x} - \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right] = \frac{im\omega}{2\hbar} \left( -\frac{i}{m\omega} [\hat{x}, \hat{p}] + \frac{i}{m\omega} [\hat{p}, \hat{x}] \right) = 1
 \end{aligned}$$

Wyprowadzenie A.2: Uzasadnienie dla wartości komutatora  $\hat{a}\hat{a}^\dagger$

$$\hat{n}(\hat{a}|n\rangle) = \underbrace{\hat{a}^\dagger \hat{a}}_{\hat{a}^\dagger \hat{a} = 1} \hat{a}|n\rangle = \left\{ \begin{array}{l} \{\hat{a}, \hat{a}^\dagger\} = 1 \\ \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger \hat{a} = 1 \\ \hat{a}^\dagger \hat{a} = \hat{a}\hat{a}^\dagger - 1 \end{array} \right. \\ = (\hat{a}\hat{a}^\dagger - 1) \hat{a}|n\rangle = \\ = \hat{a} \underbrace{\hat{a}^\dagger \hat{a}|n\rangle}_{n|n\rangle} - \hat{a}|n\rangle = n \hat{a}|n\rangle - \hat{a}|n\rangle \neq \\ = (n-1) \hat{a}|n\rangle = (n-1)|n\rangle$$

$$(czyli \hat{n}|n\rangle = (n-1)|n\rangle)$$

(czyli  $\hat{a}|n\rangle$  jest też stanem własnym  $\hat{n}$  o wartości  
wyszczególnionej  $n-1$ )

Wyprowadzenie A.3: Wyprowadzenie stanu własnego  $\hat{n}$