Notatki do ćwiczeń

Andrzej Więckowski

7 czerwca 2019

Spis treści

1 Brakety

$$\text{bra: } |\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \end{pmatrix} = \sum_i \psi_i |i\rangle, \quad \text{baza } \{|i\rangle\}\text{: } \textbf{ortonormalna: } \langle i|j\rangle = \delta_{ij}, \textbf{zupełna: } \sum_i |i\rangle\langle i| = \mathbb{1}; \tag{1}$$

$$\text{ket: } \langle\psi| = \begin{pmatrix} \psi_1^* & \psi_2^* & \psi_3^* & \dots \end{pmatrix} = \sum_i \psi_i^* \langle i|; \tag{2}$$

$$\langle\psi|\phi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1^* & \psi_2^* & \psi_3^* & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \vdots \end{pmatrix} = \left(\sum_i \psi_i^* \langle i|\right) \left(\sum_j \phi_j |j\rangle\right) = \sum_{ij} \psi_i^* \phi_i \delta_{ij} = \sum_i \psi_i^* \phi_i \tag{3}$$

$$|\psi\rangle\langle\phi| = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1^* & \phi_2^* & \phi_3^* & \dots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1\phi_1^* & \psi_1\phi_2^* & \psi_1\phi_3^* & \dots \\ \psi_2\phi_1^* & \psi_2\phi_2^* & \psi_2\phi_3^* & \dots \\ \psi_3\phi_1^* & \psi_3\phi_2^* & \psi_3\phi_3^* & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} = \sum_{nm} \psi_n \phi_m^* |n\rangle\langle m| \tag{4}$$

2 Operatory

Element macierzowy operatora:

$$A_{nm} = \langle n|\hat{A}|m\rangle \tag{5}$$

Operator w bazie $\{|n\rangle\}$:

$$\hat{A} = \sum_{nm} \langle n|A|m\rangle |n\rangle\langle m| = \sum_{nm} A_{nm} |n\rangle\langle m| = \begin{pmatrix} \langle 1|A|1\rangle & \langle 1|A|2\rangle & \langle 1|A|3\rangle & \dots \\ \langle 2|A|1\rangle & \langle 2|A|2\rangle & \langle 2|A|3\rangle & \dots \\ \langle 3|A|1\rangle & \langle 3|A|2\rangle & \langle 3|A|3\rangle & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \tag{6}$$

Działanie operatora na ket:

$$\hat{A}|\psi\rangle = \left(\sum_{nm} A_{nm}|n\rangle\langle m|\right) \left(\sum_k \psi_k |k\rangle\right) = \sum_n \underbrace{\sum_m A_{nm}\psi_m}_{(\hat{A}|\psi\rangle)_n} |m\rangle = |\psi'\rangle \tag{7}$$

Wartość oczekiwana w stanie $|\psi\rangle$:

$$! \quad \langle A\rangle_\psi = \langle A\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle = \sum_{nm} A_{nm} \langle\psi|n\rangle\langle m|\psi\rangle = \sum_{nm}\sum_{ij} A_{nm} \psi_i^* \delta_{in} \psi_j \delta_{mj} = \sum_{nm} \psi_n^* A_{nm} \psi_m \tag{8}$$

Zagadnienie własne:

$$\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle \tag{9}$$

Operator w bazie stanów własnych:

$$\hat{A} = \sum_{aa'} \langle a|\hat{A}|a'\rangle |a\rangle\langle a'| = \sum_{aa'} a\delta_{aa'} |a\rangle\langle a'| = \sum_a a|a\rangle\langle a| \tag{10}$$

3 (Anty-)komutator

Własności komutatora $[A,B] = AB - BA$ and anty-komutatora $\{A,B\} = AB + BA$:

1. $[\alpha A + \beta B, C] = \alpha[A,C] + \beta[B,C]$, gdzie α, β to stałe;
2. $[A,B] = -[B,A]$, $\{A,B\} = \{B,A\}$;
3. $[AB,C] = A[B,C] + [A,C]B$;
4. $[AB,C] = A\{B,C\} - \{A,C\}B$.

! Uwaga do zadań z komutatorami: w pierwszej kolejności korzystamy z własności komutatorów! W drugim kroku (jeśli istnieje taka potrzeba) korzystamy z definicji operatorów czy definicji komutatora. W szczególnych przypadkach działamy komutatorem na funkcję próbną:

$$[A,B]\varphi(x,t) = (AB - BA)\varphi(x,t) \tag{11}$$

4 Kwantowanie kanoniczne

$$! \quad [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}, \quad [\hat{x}_i, \hat{x}_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0; \tag{12}$$

$$\text{operator położenia: } \hat{x}_i = x_i; \tag{13}$$

$$\text{operator pędu: } \hat{p}_i = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_i}; \tag{14}$$

5 Zasada nieoznaczoności

Dla hermitowskich operatorów: $A = A^\dagger, B = B^\dagger$ ($\Delta A = \sqrt{(A - \langle A\rangle)^2}$):

$$! \quad \Delta A\, \Delta B \geq |\langle \tfrac{1}{2i}[A,B]\rangle|, \qquad \Delta x\, \Delta p \geq \tfrac{\hbar}{2}; \tag{15}$$

6 Zmiana bazy—transformacje

Dane są dwie zupełne, ortonormalne bazy $\{|i\rangle\}|_{i=1,2,3,\ldots}$ oraz $\{|\widetilde{i}\rangle\}$ oraz transformacja unitarna U:

$$U|i\rangle = |\widetilde{i}\rangle, \quad U = \sum_j |\widetilde{j}\rangle\langle j| \tag{16}$$

Elementy macierzowe U:

$$U_{ij} = \langle i| \left(\sum_{j'} |\widetilde{j'}\rangle\langle j'|\right) |j\rangle = \langle i|\widetilde{j}\rangle \tag{17}$$

Postać U w bazie $|i\rangle$

$$U = \sum_{ij} U_{ij}|i\rangle\langle j| = \sum_{ij}\langle i|\widetilde{j}\rangle|i\rangle\langle j| = \begin{pmatrix} \langle 1|\widetilde{1}\rangle & \langle 1|\widetilde{2}\rangle & \langle 1|\widetilde{3}\rangle & \ldots \\ \langle 2|\widetilde{1}\rangle & \langle 2|\widetilde{2}\rangle & \langle 2|\widetilde{3}\rangle & \ldots \\ \langle 3|\widetilde{1}\rangle & \langle 3|\widetilde{2}\rangle & \langle 3|\widetilde{3}\rangle & \ldots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \tag{18}$$

Transformacja stanu $|\psi\rangle = \sum_i \psi_i |i\rangle$:

$$|\psi\rangle = \sum_i \underbrace{\left(\sum_j |\widetilde{j}\rangle\langle\widetilde{j}|\right)}_{\mathbb{1}} \psi_i |i\rangle = \sum_j \sum_i \underbrace{\langle\widetilde{j}|i\rangle}_{U^\dagger_{ji}} \psi_i |\widetilde{j}\rangle = \sum_j \left(U^\dagger|\psi\rangle\right)_j |\widetilde{j}\rangle \tag{19}$$

Transformacja U jest unitarna i zachowuję normę $|\psi\rangle$:

$$UU^\dagger = \left(\sum_i |\widetilde{i}\rangle\langle i|\right)\left(\sum_j |j\rangle\langle\widetilde{j}|\right) = \sum_{ij} |\widetilde{i}\rangle \delta_{ij} \langle\widetilde{j}| = \mathbb{1}; \quad \langle\widetilde{\psi}|\widetilde{\psi}\rangle = \langle\psi|U^\dagger U|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle \tag{20}$$

Transformacja operatora $A = \sum_{nm} A_{nm} |n\rangle\langle m|$:

$$A = \sum_{nm} A_{nm} \underbrace{\left(\sum_i |\widetilde{i}\rangle\langle\widetilde{i}|\right)}_{\mathbb{1}} |n\rangle\langle m| \underbrace{\left(\sum_j |\widetilde{j}\rangle\langle\widetilde{j}|\right)}_{\mathbb{1}} = \sum_{nmij} A_{nm} |\widetilde{i}\rangle\langle\widetilde{j}| \underbrace{\langle\widetilde{i}|n\rangle}_{U^\dagger_{in}} \underbrace{\langle m|\widetilde{j}\rangle}_{U_{mj}} = \sum_{ij} \underbrace{\left(\sum_{nm} U^\dagger_{in} A_{nm} U_{mj}\right)}_{(U^\dagger A U)_{ij}} |\widetilde{i}\rangle\langle\widetilde{j}| \tag{21}$$

7 Reprezentacja położeniowa

Zagadnienie własne operatora położenia:

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle \tag{22}$$

Elementy macierzowe operatora $\hat{x}$:

$$\hat{x}_{xy} = \langle x|\hat{x}|y\rangle = x\delta(x-y), \quad \hat{x}^n_{xy} = x^n \delta(x-y) \tag{23}$$

Stany $|x\rangle$ stanowią ortogonalną zupełną ciągłą bazę:

$$\int \mathrm{d}x\, |x\rangle\langle x| = \mathbb{1}, \quad \langle x|y\rangle = \delta(x-y) \tag{24}$$

Funkcja falowa (definicja):

$$! \quad \psi(x) = \langle x|\psi\rangle \tag{25}$$

Iloczyn skalarny:

$$\langle\psi|\phi\rangle = \langle\psi| \underbrace{\left(\int \mathrm{d}x\, |x\rangle\langle x|\right)}_{\mathbb{1}} |\phi\rangle = \int \mathrm{d}x\, \langle\psi|x\rangle\langle x|\phi\rangle = \int \mathrm{d}x\, \psi^*(x)\phi(x) \tag{26}$$

Działanie operatora $\hat{\mathscr{O}}$ na funkcję falową $\psi(x)$—definicja:

$$\hat{\mathscr{O}}\psi(x) = \langle x|\hat{\mathscr{O}}|\psi\rangle = \langle x|\psi'\rangle = \psi'(x) \tag{27}$$

Elementy macierzowe operatora pędu $\hat{p}$ w reprezentacji położeniowej:

$$\hat{p}_{xy} = \langle x|\hat{p}|y\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\delta(x-y), \quad \hat{p}^n_{xy} = \langle x|\hat{p}^n|y\rangle = (-i\hbar)^n \frac{\partial^n}{\partial x^n}\delta(x-y) \tag{28}$$

Wartość oczekiwana operatora:

$$\langle A\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle = \langle\psi|\underbrace{\left(\int \mathrm{d}x\,|x\rangle\langle x|\right)}_{\mathbb{1}} A \underbrace{\left(\int \mathrm{d}y\,|y\rangle\langle y|\right)}_{\mathbb{1}} |\psi\rangle = \int\int \mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\psi^*(x)A_{xy}\psi(y) \tag{29}$$

Wzór (29), kiedy A jest funkcją $\hat{x}$ upraszcza się:

$$\langle A(\hat{x})\rangle = \int\int \mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\psi^*(x)A(x)\underbrace{\langle x|y\rangle}_{\delta(x-y)}\psi(x) = \int \mathrm{d}x\,\psi^*(x)A(x)\psi(x) \tag{30}$$

Wzór (29), analogicznie kiedy A jest funkcją $\hat{p}$ upraszcza się:

$$\langle A(\hat{p})\rangle = \int\int \mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\psi^*(x)\left(\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\frac{\partial^n A(p)}{\partial p^n}\bigg|_{p=0}\hat{p}^n_{xy}\right)\psi(y) = \int \mathrm{d}x\,\psi^*(x)A(p)\psi(x) \tag{31}$$

W ogólności dla dowolnej obserwabli:

$$\langle A\rangle = \int \mathrm{d}x\,\psi^*(x)A\psi(x) \tag{32}$$

8 Równanie Schrödingera

Równanie fundamentalne:

$$! \quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}(t)|\psi(t)\rangle \tag{33}$$

Równanie falowe:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \hat{H}\psi(x,t) \tag{34}$$

Hamiltonian cząstki o masie m w potencjale $V(x,t)$:

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + V(x,t) = -\frac{\hbar}{2m}\nabla^2 + V(x,t) \tag{35}$$

9 Ewolucja obserwabli

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle A\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle[H,A]\rangle + \langle\dot{A}\rangle \tag{36}$$

Twierdzenie Ehrenfesta dla cząstki o masie m (w polu $\vec{F} = -\nabla V(x)$) opisanej $\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + V(x)$:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\vec{r}\rangle = \frac{1}{m}\langle\vec{p}\rangle \tag{37}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\vec{p}\rangle = -\langle\nabla V\rangle \tag{38}$$

10 Podstawowe zadania: studnia, tunelowanie, ...

Przy rozwiązywaniu przyjmujemy, że funkcja falowa $\psi(x)$ oraz jej gradient są:

- jednowartościowe;

- ciągłe;
- skończone.

W konsekwencji prowadzi to do nakładania warunków na funkcję $\psi(x)$, gdzie znajduje się nieciągłość potencjału V. Jeżeli nieciągłość V jest w x_0 to naturalnie nakładamy na zadanie warunki:

$$\lim_{x\to x_0^-} \psi(x) = \lim_{x\to x_0^+} \psi(x) \tag{39}$$

$$\lim_{x\to x_0^-} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi(x) = \lim_{x\to x_0^+} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi(x) \tag{40}$$

11 Kwantowy oscylator harmoniczny

Hamiltonian ($k = m\omega^2$), operatory kreacji/anihilacji $a^\dagger = -\frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(p + im\omega x)$, $a = \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(p - im\omega x)$, operator liczby obsadzeń $N = a^\dagger a$:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{kx^2}{2} = \left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega = \left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{41}$$

Relacje komutacji:

!

$$[a, a^\dagger] = 1 \tag{42}$$

$$[N,a] = -a,\ [N,a^\dagger] = a^\dagger,\ [H,a] = -\hbar\omega a,\ [H,a^\dagger] = \hbar\omega a^\dagger \tag{43}$$

Dowód, że widmo energetyczne $E_n > 0$ dla takiego układu $\hat{H}$. Zagadnienie własne (baza energetyczna jest zupełna $\sum_n |n\rangle\langle n| = \mathbb{1}$):

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle \tag{44}$$

$$\langle n|p^2|n\rangle = \langle n|p \underbrace{\left(\sum_\ell |\ell\rangle\langle\ell|\right)}_{\mathbb{1}} p|n\rangle = \sum_\ell \langle n|p|\ell\rangle\langle\ell|p|n\rangle = \sum_\ell |\langle n|p|\ell\rangle|^2 \tag{45}$$

$$\langle n|x^2|n\rangle = \sum_\ell |\langle n|x|\ell\rangle|^2 \tag{46}$$

$$E_n = \langle n|H|n\rangle = \langle n|\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{kx^2}{2}\right)|n\rangle = \frac{1}{2m}\sum_\ell |\langle n|p|\ell\rangle|^2 + \frac{k}{2}\sum_\ell |\langle n|x|\ell\rangle|^2 \geq 0 \tag{47}$$

$$E_n = 0 \leftrightarrow \langle n|x|\ell\rangle = \langle n|p|\ell\rangle = 0 \tag{48}$$

$$\langle n|[x,p]|n\rangle = \langle n|(xp - px)|n\rangle = i\hbar = \underbrace{\sum_\ell \left(\langle n|x|\ell\rangle\langle\ell|p|n\rangle - \langle n|p|\ell\rangle\langle\ell|x|n\rangle\right)}_{\sum\neq 0\to i\hbar} \to E_n > 0 \tag{49}$$

Operator liczby obsadzeń $\hat{N}$ spełnia następujące zagadnienie własne:

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle, \qquad \text{gdzie } |n\rangle \text{ to stany własne hamiltonianu (41)} \tag{50}$$

Działanie operatorów $a, a^\dagger$ na $|n\rangle$:

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \tag{51}$$

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \tag{52}$$

Równanie (51) [analogicznie (52)] możemy otrzymać w następujący sposób:

$$a^\dagger|n\rangle = C_n|n\rangle \quad \Big| (\dots)^\dagger \tag{53}$$
$$\langle n|a = \langle n|C_n^* \tag{54}$$
$$\langle n|aa^\dagger|n\rangle = C_n C_n^* \langle n|n\rangle \tag{55}$$
$$\langle n|\left(aa^\dagger - a^\dagger a + a^\dagger a\right)|n\rangle = |C_n|^2 \tag{56}$$
$$\langle n|\left([a,a^\dagger] + N\right)|n\rangle = |C_n|^2 \tag{57}$$
$$1 + n = |C_n|^2 \to C_n = \sqrt{n+1} \quad \text{(co do fazy zespolonej)} \tag{58}$$

Stan podstawowy $|0\rangle$ (o najniższej energii) definicja:

$$! \; a|0\rangle = 0 \tag{59}$$

Energia E_0 stanu podstawowego:

$$H|0\rangle = \left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega|0\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega = E_0|0\rangle \tag{60}$$

Widmo energetyczne E_n:

$$! \; E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{61}$$

Funkcja falowa stanu podstawowego $\psi_0(x)$:

$$0 = \langle x|a \int \mathrm{d}y\, |y\rangle \underbrace{\langle y|0\rangle}_{\psi_0(y)} = \int \mathrm{d}y\, \langle x|a|y\rangle \psi_0(y) = \int \mathrm{d}y\, \langle x| \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(p - im\omega x)|y\rangle \psi_0(y) = \tag{62}$$

$$= \int \mathrm{d}y\, \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\left(\langle x|p|y\rangle - im\omega\langle x|x|y\rangle\right)\psi_0(y) = \tag{63}$$

$$= \int \mathrm{d}y\, \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\delta(x-y) - im\omega x\delta(x-y)\right)\psi_0(y) = \tag{64}$$

$$= \int \mathrm{d}y\, \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\left[-i\hbar\delta(x-y)\frac{\partial}{\partial y}\psi_0(y) - im\omega x\delta(x-y)\psi_0(y)\right] = \tag{65}$$

$$= \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi_0(x) - im\omega x\psi_0(x)\right] = 0 \tag{66}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi_0(x) = -\frac{m\omega}{\hbar}x\psi_0(x) \tag{67}$$

Ostatecznie:

$$\textcolor{red}{!}\ \psi_0(x) = A\exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}\frac{x^2}{2}\right), \qquad \text{gdzie } A \text{ to stała normalizacyjna} \tag{68}$$

Stany wzbudzone możemy generować rekurencyjnie:

$$\psi_1(x) = \langle x|1\rangle = \langle x|a^\dagger|0\rangle = \langle x|a^\dagger \underbrace{\mathbb{1}}_{\int \mathrm{d}y\,|y\rangle\langle y|} |0\rangle \to \dots \tag{69}$$

Reprezentacja macierzowa (baza energetyczna $|n\rangle$) operatorów kreacji i anihilacji:

$$a = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \ddots \end{bmatrix} \qquad a^\dagger = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & \ddots & \cdots \end{bmatrix} \tag{70}$$

12 Moment pędu, spin

$$\text{Orbitalny moment pędu: } \vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \tag{71}$$

$$L_i = \varepsilon^{ijk} x_j p_k \tag{72}$$

Relacje komutacji: $[L_i, x_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}x_k$; $[L_i, p_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}p_k$; $[L_i, L_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}L_k$;

$$\textcolor{red}{!}\ [L_i, \vec{L}^2] = 0 \tag{73}$$

Macierze Pauliego:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\text{Spinowy moment pędu: } \vec{S} = \tfrac{1}{2}\hbar\vec{\sigma}, \quad S^i = \tfrac{1}{2}\hbar\sigma_i \tag{74}$$

$$\text{Całkowity moment pędu: } \vec{J} = \vec{L} + \vec{S}, \qquad [\vec{L}, \vec{S}] = 0 \tag{75}$$

$$\textcolor{red}{!}\ \vec{J}\cdot\vec{J} = (\vec{L})^2 + (\vec{S})^2 + \underbrace{2\vec{L}\cdot\vec{S}}_{\text{oddziaływanie spin-orbita}} \tag{76}$$

Operatory drabinkowe:

$$S^\pm = S^x \pm iS^y, \tag{77}$$

Własności:

$$[S^+, S^-] = 2S^z; \quad [S^z, S^\pm] = \pm S^\pm; \tag{78}$$

$$S^2 = \vec{S}\cdot\vec{S} = (S^x)^2 + (S^y)^2 + (S^z)^2 = \tfrac{1}{2}(S^+S^- + S^-S^+) + (S^z)^2. \tag{79}$$

Stany $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$ są stanami własnymi operatora S^z:

$$S^+|\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle; \qquad S^-|\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle \tag{80}$$

$$S^+|\uparrow\rangle = 0; \qquad S^-|\downarrow\rangle = 0; \tag{81}$$

Ciekawy przykład

Dany jest układ opisany hamiltonianem:

$$\hat{H} = \Delta S^x + J(S^+S^- + S^-S^+) = \begin{bmatrix} J & \frac{1}{2}\Delta \\ \frac{1}{2}\Delta & J \end{bmatrix} \tag{82}$$

z warunkiem początkowym $|\psi(t=0)\rangle = |\uparrow\rangle$, Δ, J to parametry niezależne od czasu. Zadanie polega na rozwiązaniu równania Schrödingera (33), gdzie $|\psi\rangle = a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle$:

$$\begin{bmatrix} J & \Delta/2 \\ \Delta/2 & J \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = i\hbar\begin{bmatrix} \dot{a} \\ \dot{b} \end{bmatrix} \tag{83}$$

co prowadzi do układu równań różniczkowych:

$$\begin{cases} Ja + \frac{1}{2}\Delta b = i\hbar\dot{a} \\ \frac{1}{2}\Delta a + Jb = i\hbar\dot{b} \end{cases} \tag{84}$$

Policzmy pochodną $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}$ pierwszego równania:

$$J\dot{a} + \tfrac{1}{2}\Delta\dot{b} = i\hbar\ddot{a} \tag{85}$$

Wyraz zawierający $\dot{b}$ wyznaczamy z drugiego równania (84):

$$\dot{b} = \tfrac{1}{i\hbar}(\tfrac{1}{2}\Delta a + Jb) \tag{86}$$

Następnie wstawiamy go do (85):

$$J\dot{a} + \tfrac{1}{2}\Delta\tfrac{1}{i\hbar}(\tfrac{1}{2}\Delta a + Jb) = i\hbar\ddot{a} \tag{87}$$

Wyraz b wyznaczamy z pierwszego równania (84):

$$b = \tfrac{2}{\Delta}(i\hbar\dot{a} - Ja) \tag{88}$$

Następnie wstawiamy to do równania (89):

$$J\dot{a} + \tfrac{1}{2}\Delta\tfrac{1}{i\hbar}(\tfrac{1}{2}\Delta a + J\tfrac{2}{\Delta}(i\hbar\dot{a} - Ja)) = i\hbar\ddot{a} \tag{89}$$

Po uproszczeniach otrzymujemy równanie różniczkowe jednorodne drugiego rzędu:

$$-i\hbar\ddot{a} + 2J\dot{a} + \tfrac{1}{i\hbar}[(\tfrac{\Delta}{2})^2 - J^2]a = 0, \tag{90}$$

które łatwo możemy rozwiązać dokonując podstawienia:

$$a(t) = \mathrm{e}^{\lambda t} \tag{91}$$

Otrzymujemy równanie kwadratowe ze względu na parametr λ

$$-i\hbar\lambda^2 + 2J\lambda + \frac{1}{i\hbar}[(\tfrac{\Delta}{2})^2 - J^2]a = 0 \tag{92}$$

Rozwiązania równania kwadratowego:

$$\lambda = \frac{-2J \pm \Delta}{-2i\hbar} = \tfrac{i}{\hbar}(-J \pm \tfrac{\Delta}{2}) \tag{93}$$

Ostatecznie ogólna postać rozwiązania równania (90):

$$a(t) = A\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(-J+\frac{\Delta}{2})t} + B\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(-J-\frac{\Delta}{2})t}, \tag{94}$$

gdzie A, B to pewne stałe, które możemy wyznaczyć z warunku początkowego i warunku normalizacyjnego. Z warunku początkowego mamy:

$$a(t=0) = A + B = 1 \rightarrow B = 1 - A \tag{95}$$

$$a(t) = A\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(-J+\frac{\Delta}{2})t} + (1-A)\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(-J-\frac{\Delta}{2})t} = A\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Jt}\underbrace{\left[\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\frac{\Delta}{2}t} - \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\Delta}{2}t}\right]}_{2i\sin(\frac{\Delta}{2\hbar}t)} + \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(-J-\frac{\Delta}{2})t} \tag{96}$$

$$a(t) = 2iA\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Jt}\sin(\tfrac{\Delta}{\hbar}t) + \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(-J-\frac{\Delta}{2})t} = \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Jt}\underbrace{\left[2iA\sin(\tfrac{\Delta}{\hbar}t) + \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\Delta}{2}t}\right]}_{\cos(\frac{\Delta}{2\hbar}t)} = \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Jt}\cos(\tfrac{\Delta}{2\hbar}t), \tag{97}$$

gdzie tutaj w ostatnim kroku skorzystano z warunku $a(0) = 1$ oraz niezmienniczości cechowania stanu kwantowego. Ostatni krok to wyznaczenie $b(t)$ z warunku normalizacyjnego:

$$|a|^2 + |b|^2 = 1 \rightarrow |b|^2 = 1 - |a|^2 \tag{98}$$

$$b(t) = -i\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Jt}\sin(\tfrac{\Delta}{2\hbar}t) \tag{99}$$

Ostatecznie rozwiązaniem zadania jest:

$$|\psi(t)\rangle = \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Jt}\begin{bmatrix} \cos(\frac{\Delta}{2\hbar}t) \\ -i\sin(\frac{\Delta}{2\hbar}t) \end{bmatrix} \tag{100}$$

A Iloczyn skalarny, delta Kronecera, iloczyn wektorowy, symbol Leviego-Civity

Stosujemy konwencję sumacyjną:

$$\sum_i a_i b_i \equiv a_i b_i \tag{101}$$

Własność delty Kronecera:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases} \tag{102}$$

$$\sum_n f(n)\delta_{nm} = f(m) \tag{103}$$

$$\sum_n \delta_{nn} \equiv \delta_{nn} = 3 \tag{104}$$

$$\vec{a}\cdot\vec{b} = \left(\sum_i a_i\hat{e}_i\right)\cdot\left(\sum_j b_j\hat{e}_j\right) = \sum_{ij} a_i b_j \underbrace{\hat{e}_i\cdot\hat{e}_j}_{\delta_{ij}} = \sum_i a_i b_i \tag{105}$$

Iloczyn skalarny:

$$\vec{a}\cdot\vec{b} = \sum_i a_i b_i \equiv a_i b_i \tag{106}$$

Iloczyn wektorowy:

$$(\vec{a}\times\vec{b})_i = \sum_{jk} \varepsilon^{ijk} a_j b_k \equiv \varepsilon^{ijk} a_j b_k, \tag{107}$$

gdzie ε^{ijk} to symbol Levi-Civity:

$$\varepsilon^{ijk} = \begin{cases} +1 & \text{permutacja parzysta, t.j.: } i,j,k = 1,2,3; \quad 2,3,1; \quad 3,1,2 \\ \ \ 0 & \sim \\ -1 & \text{permutacja nieparzysta, t.j.: } i,j,k = 1,3,2; \quad 2,1,3; \quad 3,2,1 \end{cases} \tag{108}$$

Własności ε^{ijk}:

$$\varepsilon^{ijk}\varepsilon^{lmn} = \det\begin{bmatrix} \delta_{il} & \delta_{im} & \delta_{in} \\ \delta_{jl} & \delta_{jm} & \delta_{jn} \\ \delta_{kl} & \delta_{km} & \delta_{kn} \end{bmatrix} \tag{109}$$

$$\varepsilon^{ijk}\varepsilon^{imn} = \delta_{jm}\delta_{kn} - \delta_{jn}\delta_{km} \tag{110}$$

$$\varepsilon^{ijk}\varepsilon^{ijn} = 2\delta_{kn} \tag{111}$$

B Teoria dystrybucji, delta Diraca

Podstawy teorii dystrybucji:

$$\lim_{x\to\pm\infty} \varphi(x) = 0 \tag{112}$$

$$\Big\langle \varphi(x), \psi(x) \Big\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \varphi(x)\psi(x) \tag{113}$$

$$\left\langle \varphi, \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi \right\rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \varphi(x) \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi(x) = \underbrace{\varphi(x)\psi(x)\Big|_{-\infty}^{+\infty}}_{0} - \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\varphi(x)\psi(x) = -\left\langle \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\varphi(x), \psi(x) \right\rangle \quad (114)$$

Funkcja schodkowa Heaviside'a:

$$\theta(x) = \begin{cases} 1 & x > 0 \\ 0 & x \leq 0 \end{cases} \quad (115)$$

Delta Diraca:

$$\delta(x) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\theta(x) \quad (116)$$

Władności delty Diraca:

$$\operatorname{supp} f \in [a,b] \to \int\limits_{a}^{b} f(x)\delta(x) = f(0) \quad (117)$$

gdzie $\operatorname{supp} f$ to nośnik funkcji f, czyli doknięcie zbiory argumentów dla których $f(x) \neq 0$. W szczególności:

$$! \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, f(x)\delta(x) = f(0) \quad (118)$$

Ciekawa własność:

$$\delta\big(f(x)\big) = \sum_j \frac{\delta(x - x_j)}{|f'(x_j)|} \quad (119)$$

gdzie x_j to miejsca zerowe f(x).