

# Notatki do ćwiczeń

Andrzej Więckowski

25 maja 2019

## Spis treści

<b>1</b>	<b>Brakety</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>Operatory</b>	<b>2</b>
<b>3</b>	<b>(Anty-)komutator</b>	<b>3</b>
<b>4</b>	<b>Kwantowanie kanoniczne</b>	<b>3</b>
<b>5</b>	<b>Zasada nieoznaczoności</b>	<b>3</b>
<b>6</b>	<b>Zmiana bazy—transformacje</b>	<b>3</b>
<b>7</b>	<b>Reprezentacja położeniowa</b>	<b>4</b>
<b>8</b>	<b>Równanie Schrödingera</b>	<b>5</b>
<b>9</b>	<b>Ewolucja obserwabli</b>	<b>5</b>
<b>10</b>	<b>Podstawowe zadania: studnia, tunelowanie, ...</b>	<b>5</b>
<b>11</b>	<b>Kwantowy oscylator harmoniczny</b>	<b>6</b>
<b>12</b>	<b>Moment pędu, spin</b>	<b>6</b>
	<b>Dodatki</b>	<b>7</b>
<b>A</b>	<b>Iloczyn skalarny, delta Kronecera, iloczyn wektorowy, symbol Leviego-Civity</b>	<b>7</b>
<b>B</b>	<b>Teoria dystrybucji, delta Diraca</b>	<b>7</b>

## 1 Brakety

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

$$\text{ket: } \langle\psi| = (\psi_1^* \quad \psi_2^* \quad \psi_3^* \quad \dots) = \sum_i \psi_i^* \langle i|; \quad (2)$$

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

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

## 2 Operatory

Element macierzowy operatora:

$$A_{nm} = \langle n|\hat{A}|m\rangle \quad (5)$$

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

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

Działanie operatora na ket:

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

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

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

Zagadnienie własne:

$$\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle \quad (9)$$

Operator w bazie stanów własnych:

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

### 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  $\alpha, \beta$  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:

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

### 4 Kwantowanie kanoniczne

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

$$\text{operator położenia: } \hat{x}_i = x_i; \quad (13)$$

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

### 5 Zasada nieoznaczoności

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

$$\Delta A \Delta B \geq |\langle \frac{1}{2i}[A, B] \rangle|, \quad \Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}; \quad (15)$$

### 6 Zmiana bazy—transformacje

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

$$U|i\rangle = |\tilde{i}\rangle, \quad U = \sum_j |\tilde{j}\rangle \langle j| \quad (16)$$

Elementy macierzowe  $U$ :

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

Postać  $U$  w bazie  $|i\rangle$

$$U = \sum_{ij} U_{ij} |i\rangle \langle j| = \sum_{ij} \langle i | \tilde{j} \rangle |i\rangle \langle j| = \begin{pmatrix} \langle 1 | \tilde{1} \rangle & \langle 1 | \tilde{2} \rangle & \langle 1 | \tilde{3} \rangle & \dots \\ \langle 2 | \tilde{1} \rangle & \langle 2 | \tilde{2} \rangle & \langle 2 | \tilde{3} \rangle & \dots \\ \langle 3 | \tilde{1} \rangle & \langle 3 | \tilde{2} \rangle & \langle 3 | \tilde{3} \rangle & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (18)$$

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

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

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

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

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

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

## 7 Reprezentacja położeniowa

Zagadnienie własne operatora położenia:

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle \quad (22)$$

Elementy macierzowe operatora  $\hat{x}$ :

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

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

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

Funkcja falowa (definicja):

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

Iloczyn skalarny:

$$\langle \psi | \phi \rangle = \langle \psi | \underbrace{\left( \int dx |x\rangle \langle x| \right)}_{\mathbb{1}} | \phi \rangle = \int dx \langle \psi | x \rangle \langle x | \phi \rangle = \int dx \psi^*(x) \phi(x) \quad (26)$$

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

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

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

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

Wartość oczekiwana operatora:

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle = \langle \psi | \underbrace{\left( \int dx |x\rangle \langle x| \right)}_{\mathbb{1}} A \underbrace{\left( \int dy |y\rangle \langle y| \right)}_{\mathbb{1}} | \psi \rangle = \int \int dx dy \psi^*(x) A_{xy} \psi(y) \quad (29)$$

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

$$\langle A(\hat{x}) \rangle = \int \int dx dy \psi^*(x) A(x) \underbrace{\langle x | y \rangle}_{\delta(x-y)} \psi(y) = \int dx \psi^*(x) A(x) \psi(x) \quad (30)$$

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

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

W ogólności dla dowolnej obserwabli:

$$\langle A \rangle = \int dx \psi^*(x) A \psi(x) \quad (32)$$

## 8 Równanie Schrödingera

Równanie fundamentalne:

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

Równanie falowe:

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

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

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

## 9 Ewolucja obserwabli

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H, A] \rangle + \langle \dot{A} \rangle \quad (36)$$

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

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{r} \rangle = \frac{1}{m} \langle \vec{p} \rangle \quad (37)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{p} \rangle = -\langle \nabla V \rangle \quad (38)$$

## 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:

$$\lim_{x \rightarrow x_0^-} \psi(x) = \lim_{x \rightarrow x_0^+} \psi(x) \quad (39)$$

$$\lim_{x \rightarrow x_0^-} \frac{d}{dx} \psi(x) = \lim_{x \rightarrow x_0^+} \frac{d}{dx} \psi(x) \quad (40)$$

## 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  $N = a^\dagger a$ :

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

Relacje komutacji:

$$! [a, a^\dagger] = 1 \quad (42)$$

$$[N, a] = -a, [N, a^\dagger] = a^\dagger, [H, a] = -\hbar\omega a, [H, a^\dagger] = \hbar\omega a^\dagger \quad (43)$$

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

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle \quad (44)$$

$$\langle n|p^2|n\rangle = \sum_\ell \langle n|p|\ell\rangle \langle \ell|p|n\rangle = \sum_\ell |\langle n|p|\ell\rangle|^2 \quad (45)$$

$$\langle n|x^2|n\rangle = \sum_\ell |\langle n|x|\ell\rangle|^2 \quad (46)$$

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

$$E_n = 0 \leftrightarrow \langle n|x|\ell\rangle = \langle n|p|\ell\rangle = 0 \quad (48)$$

$$\langle n|[x, p]|n\rangle = \langle n|(xp - px)|n\rangle = i\hbar = \underbrace{\sum_\ell (\langle n|x|\ell\rangle \langle \ell|p|n\rangle - \langle n|p|\ell\rangle \langle \ell|x|n\rangle)}_{\Sigma \neq 0 \rightarrow i\hbar} \rightarrow E_n > 0 \quad (49)$$

## 12 Moment pędu, spin

...

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

Stosujemy konwencję sumacyjną:

$$\sum_i a_i b_i \equiv a_i b_i \quad (50)$$

Własność delty Kronecera:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases} \quad (51)$$

$$\sum_n f(n) \delta_{nm} = f(m) \quad (52)$$

$$\sum_n \delta_{nn} \equiv \delta_{nn} = 3 \quad (53)$$

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = \left( \sum_i a_i \hat{e}_i \right) \cdot \left( \sum_j b_j \hat{e}_j \right) = \sum_{ij} a_i b_j \underbrace{\hat{e}_i \cdot \hat{e}_j}_{\delta_{ij}} = \sum_i a_i b_i \quad (54)$$

Iloczyn skalarny:

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = \sum_i a_i b_i \equiv a_i b_i \quad (55)$$

Iloczyn wektorowy:

$$(\vec{a} \times \vec{b})_i = \sum_{jk} \epsilon^{ijk} a_j b_k \equiv \epsilon^{ijk} a_j b_k, \quad (56)$$

gdzie  $\epsilon^{ijk}$  to symbol Levi-Civity:

$$\epsilon^{ijk} = \begin{cases} +1 & \text{permutacja parzysta, t.j.: } i, j, k = 1, 2, 3; \quad 2, 3, 1; \quad 3, 1, 2 \\ 0 & \sim \\ -1 & \text{permutacja nieparzysta, t.j.: } i, j, k = 1, 3, 2; \quad 2, 1, 3; \quad 3, 2, 1 \end{cases} \quad (57)$$

Własności  $\epsilon^{ijk}$ :

$$\epsilon^{ijk} \epsilon^{lmn} = \det \begin{bmatrix} \delta_{il} & \delta_{im} & \delta_{in} \\ \delta_{jl} & \delta_{jm} & \delta_{jn} \\ \delta_{kl} & \delta_{km} & \delta_{kn} \end{bmatrix} \quad (58)$$

$$\epsilon^{ijk} \epsilon^{imn} = \delta_{jm} \delta_{kn} - \delta_{jn} \delta_{km} \quad (59)$$

$$\epsilon^{ijk} \epsilon^{ijn} = 2\delta_{kn} \quad (60)$$

## B Teoria dystrybucji, delta Diraca

...