

Mechanika Kwantowa I (2006/2007) Szczegółowy program wykładu (wersja nr 13 z dnia 7.12.2006)

1. Wykład 3 października 2006

- Zrozumienie mechaniki kwantowej. Zrozumienie=wiedza+doświadczenie.
- Przykłady:
 - Człowiek neolitu a lustro, doświadczenie z odbiciem obrazu na powierzchni wody wymaga oderwania tego co widać od tego co istnieje.
 - Człowiek starożytności a ruch jednostajny, doświadczenie codzienne obarczone powszechnym zjawiskiem tarcia, ruch jednostajny sprzeczny z doświadczeniem codziennym.
 - Człowiek Oświecenia a oddziaływanie na odległość, zjawiska elektromagnetyczne wymagają oderwania wpływu na ciało od kontaktu materialnego z innym ciałem.
 - Człowiek XIX wieku a determinizm, zjawiska kwantowe wymagają rezygnacji z opisu silnie deterministycznego (przewidywanie zjawisk) na rzecz słabo deterministycznego (przewidywanie prawdopodobieństw zjawisk).
 - Człowiek obecny a teoria wszystkiego, dotychczasowy rozwój nauki wskazuje (być może) na nieskończoną hierarchie teorii wynikających jedna z drugiej, choć próby znalezienia teorii wszystkiego nadal trwają.
- Przyczynowość świata: z teraźniejszości wynika przyszłość, a raczej przyszłość nie ma wpływu na przeszłość.
- Stan układu = informacja posiadana o układzie. Informacja o układzie nigdy nie jest zupełna – oprócz układów które są prostymi abstrakcjami rzeczywistości. Przykłady: punkt materialny i pole elektromagnetyczne w próżni są abstrakcyjnymi uproszczeniami rzeczywistości definiowanymi przez swój stan (informację o nich posiadaną).
- Determinizm świata:
 - Silny: teorie klasyczne (mechanika, elektrodynamika) pozwalają ze znajomości stanu układu w chwili $t = 0$ przewidywać stan tego układu w czasie $t > 0$. Przykład: Odbicie błysku światła od powierzchni półprzezroczystej. Warunki brzegowe na granicy ośrodków 1 i 2 (przy braku ładunków prądów powierzchniowych):

$$\mathbf{n} \cdot (\mathbf{D}_2 - \mathbf{D}_1) = 0, \quad (1.1)$$

$$\mathbf{n} \cdot (\mathbf{B}_2 - \mathbf{B}_1) = 0, \quad (1.2)$$

$$\mathbf{n} \times (\mathbf{E}_2 - \mathbf{E}_1) = 0, \quad (1.3)$$

$$\mathbf{n} \times (\mathbf{H}_2 - \mathbf{H}_1) = 0, \quad (1.4)$$

wyznaczają prawa odbicia i załamania oraz polaryzacje i stosunki natężeń wiązki odbitej i załamanej:

$$P(\text{odbicie}) = \frac{\text{Natężenie wiązki odbitej}}{\text{Natężenie wiązki padającej}}, \quad (1.5)$$

$$P(\text{załamanie}) = \frac{\text{Natężenie wiązki załamanej}}{\text{Natężenie wiązki padającej}}. \quad (1.6)$$

- Słaby: teorie kwantowe pozwalają ze znajomości stanu układu w chwili $t = 0$ przewidywać **prawdopodobieństwo** znalezienia danego stanu tego układu w czasie $t > 0$. Obniżając natężenie światła w pojedynczym błysku dochodzimy do granicy gdy błysk zawiera pojedynczy foton. Foton ten odbije się z prawdopodobieństwem „P(odbicie)” lub załamie z prawdopodobieństwem „P(załamanie)”. Losu pojedynczego fotonu **nie można** przewidzieć.
- Słaby determinizm świata próbowano zastąpić niepełną znajomością świata (teorie zmiennych ukrytych) tak jak pojęcie pola elektromagnetycznego w próżni próbowano zastąpić pojęciem eteru. Zmienna ukryta fotonu = parametr fotonu mówiący czy odbije się czy załamie na granicy ośrodków.
- Nierówność Bella,

$$|C(a, b) - C(a, b')| + |C(a', b) + C(a', b')| \leq 2, \quad (1.7)$$

według Englert I.1.2.

- Obiekt klasyczny (najczęściej duży, makroskopowy) możemy obserwować bez zmiany jego stanu. Obiekt kwantowy (najczęściej mały, mikroskopowy) nie może być obserwowany bez zmiany jego stanu.

2. Wykład 6 października 2006

- Polarymetr Sterna-Gerlacha (SG), według Englerta I.2.1.

- Atom srebra przechodzący przez polarymetr SG doznaje zmiany pędu

$$\Delta \mathbf{p} = \mathbf{F} \Delta t = \beta(\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{a}) \mathbf{a} \Delta t, \quad (2.1)$$

gdzie Δt jest czasem przebywania w polarymetrze (zakładamy, że czas ten jest dużo mniejszy od okresu precesji Larmora), niejednorodne pole magnetyczne w polarymetrze $\mathbf{B} = \beta(\mathbf{r} \cdot \mathbf{a}) \mathbf{a}$ jest skierowane w kierunku wersora \mathbf{a} i gradient jego zmian skierowany jest w tym samym kierunku, a $\boldsymbol{\mu}$ jest momentem magnetycznym atomu.

- Po czasie T od wyjścia z polarymetru wszystkie atomy ułożone są wzdłuż odcinka o kierunku wersora \mathbf{a} i środka na osi wiązki w odległości vT od polarymetru, gdzie v jest prędkością atomów wiązki.
 - Klasycznie, położenie atomu na w/w odcinku zadane jest rzutem $\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{a}$ jego momentu magnetycznego $\boldsymbol{\mu}$ na kierunek polarymetru \mathbf{a} i wszystkie położenia na odcinku są dopuszczalne.
 - Kwantowo, atomy odchylają się tak jakby rzuty te były równe $\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{a} = \pm |\boldsymbol{\mu}|$, tworząc dwie wiązki. Jest tak dla każdego kierunku \mathbf{a} ustawienia polarymetru.
 - Doświadczenie Sterna-Gerlacha daje się wyjaśnić na gruncie mechaniki klasycznej zakładając, że każdy atom jest produkowany w jednej z dwu odmian; atomy „górne” odchylą się w dowolnie nachylonym polarymetrze do góry, czyli w kierunku wersora \mathbf{a} , zaś atomy „dolne” odchylą się do dołu, czyli przeciwnie do kierunku wersora \mathbf{a} . Jest to teoria zmiennych ukrytych, mówiąca, że każdy atom ma cechę, której nie znamy (parametr ukryty), która określa jego zachowanie w polarymetrze SG.
 - Założenie o zmiennych ukrytych prowadzi jednak do nierówności Bella, która jest naruszana w doświadczeniach z parami obiektów kwantowych.
 - Wiązka wychodząca do góry (do dołu) z danego polarymetru SG i wpuszczona do drugiego identycznie ustawionego polarymetru SG będzie z niego w całości wychodziła do góry (do dołu). Ale jeśli drugi polarymetr będzie ustawiony w innym kierunku niż pierwszy, to każda z wiązek rozszczepi się znów na dwie o natężeniach zależnych od kąta między polarymetrami.
- I Postulat mechaniki kwantowej.

- Przestrzeń Hilberta:

1. Przestrzeń liniowa wektorów $|a\rangle$ nad ciałem liczb zespolonych.
2. Iloczyn skalarny: forma biliniowa $\langle a|b\rangle$ (liniowa w drugim argumencie, antyliniowa w pierwszym argumencie), która dla równych argumentów jest długością wektora, a przy zamianie argumentów ulega sprzężeniu zespolonemu.

- Wektory prostopadłe, $\langle a|b\rangle = 0$, i równoległe $|\langle a|b\rangle|^2 = \langle a|a\rangle \langle b|b\rangle$.
- Wiązka wektorowa = klasa wektorów wzajemnie równoległych. Reprezentant wiązki = dowolny wektor z klasy.
- Stany określone są wiązkami wektorowymi w przestrzeni Hilberta, czyli dowolny współczynnik multiplikatywny nie ma znaczenia, ale wygodnie posługiwać się stanami unormowanymi, $\langle a|a\rangle = 1$, których dowolność ogranicza się tylko do dowolnego czynnika fazowego.

- Baza przestrzeni Hilberta $|a_i\rangle =$ zbiór wektorów liniowo niezależnych, takich że każdy wektor $|a\rangle$ z przestrzeni Hilberta może być przedstawiony jako ich kombinacja liniowa

$$|a\rangle = \sum_{i=1}^N \alpha_i |a_i\rangle. \quad (2.2)$$

Liczba N wektorów bazy = wymiar przestrzeni Hilberta (zajmujemy się na razie tylko przestrzeniami Hilberta o skończonej liczbie wymiarów). Najwygodniejsze są bazy ortonormalne,

$$\langle a_j | a_i \rangle = \delta_{ji}, \quad (2.3)$$

dla których współczynniki rozwinięcia α_i można obliczać jako następujące iloczyny skalarne:

$$\alpha_i = \langle a_i | a \rangle. \quad (2.4)$$

- Przestrzeń Hilberta atomów w dwu wiązkach za polarymetrem SG.

- Wektor $|\uparrow_z\rangle$ określa stan atomu odchylonego do góry w polarymetrze zorientowanym w kierunku osi z , $\mathbf{a} = \mathbf{e}_z$.

Wektor $|\downarrow_z\rangle$ określa stan atomu odchylonego do dołu w tym samym polarymetrze.

- Zakładamy, że te dwa wektory są unormowane,

$$\langle \uparrow_z | \uparrow_z \rangle = \langle \downarrow_z | \downarrow_z \rangle = 1, \quad (2.5)$$

i wzajemnie ortogonalne,

$$\langle \downarrow_z | \uparrow_z \rangle = 0. \quad (2.6)$$

- Zakładamy, że dowolny stan $|a\rangle$ lub $|a'\rangle$ atomu wychodzącego z dowolnego polarymetru SG w górę lub w dół określony jest kombinacją liniową wektorów $|\uparrow_z\rangle$ i $|\downarrow_z\rangle$,

$$|a\rangle = \alpha |\uparrow_z\rangle + \beta |\downarrow_z\rangle, \quad (2.7)$$

$$|a'\rangle = \alpha' |\uparrow_z\rangle + \beta' |\downarrow_z\rangle, \quad (2.8)$$

czyli stany $|\uparrow_z\rangle$ i $|\downarrow_z\rangle$ tworzą ortonormalną bazę dwuwymiarowej przestrzeni Hilberta stanów atomów srebra.

- Iloczyn skalarny dwu stanów z tej przestrzeni Hilberta wynosi

$$\langle a | a' \rangle = \alpha^* \alpha' + \beta^* \beta'. \quad (2.9)$$

- Przestrzeń Hilberta stanów atomów srebra jest izomorficzna przestrzeni Hilberta \mathcal{C}_2 zawierającej pary liczb zespolonych:

$$|\uparrow_z\rangle \iff \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.10)$$

$$|\downarrow_z\rangle \iff \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (2.11)$$

$$|a\rangle \iff \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}. \quad (2.12)$$

- Przestrzeń Hilberta qubitów.

- Wszystkie dwuwymiarowe przestrzenie Hilberta są do siebie wzajemnie izomorficzne. Dlatego najrozmaitsze fizyczne układy o dwu stanach mogą być opisane w identyczny sposób. Generyczny stan z dwuwymiarowej przestrzeni Hilberta nazywamy qubitem.
- Przykłady:
 - 1° Stan neutronu = $|n\rangle$, stan protonu = $|p\rangle$, stan nukleonu = $\alpha|n\rangle + \beta|p\rangle$ (formalizm izospinu).
 - 2° Stan kwarku górnego = $|u\rangle$, stan kwarku dolnego = $|d\rangle$, stan kwarku lekkiego = $\alpha|u\rangle + \beta|d\rangle$ (formalizm izospinu).
 - 3° Stan fotonu o polaryzacji prawoskrętnej = $|\text{right}\rangle$, stan fotonu o polaryzacji lewoskrętnej = $|\text{left}\rangle$, stan fotonu o polaryzacji dowolnej = $\alpha|\text{right}\rangle + \beta|\text{left}\rangle$.

3. Wykład 27 października 2006

- Własności obserwabli
 - Obserwabłą nazywamy hermitowski operator w przestrzeni Hilberta, którego zbiór stanów własnych tworzy bazę tej przestrzeni Hilberta.
 - Równanie własne dla obserwabli.
 - Wielomian charakterystyczny i równanie charakterystyczne.
 - Rzeczywistość wartości własnych.
 - Ortogonalność wektorów własnych odpowiadających różnym wartościom własnym.
 - Wybór bazy ortogonalnych wektorów własnych w przestrzeni własnej odpowiadającej zdegenerowanym wartościom własnym.
 - Operatory rzutowe na przestrzenie własne (niezdegenerowane i zdegenerowane).
 - Postulaty mechaniki kwantowej dotyczące pomiarów dla zdegenerowanych obserwabli.
- Zasada superpozycji.
- Ruch układu kwantowego.
 - Operator ewolucji układu kwantowego \hat{U} transformuje stan układu w chwili t_0 w stan układu w chwili późniejszej t .
 - Kombinacje liniowe stanów w chwili t_0 powinny być transformowane w takie same kombinacje liniowe stanów w chwili t , a więc operator ewolucji powinien być operatorem liniowym.
 - Operator ewolucji powinien zachowywać całkowite prawdopodobieństwo, a więc zachowywać normę każdego stanu, a więc powinien być operatorem unitarnym.
 - Wynika stąd, że pochodna czasowa stanu kwantowego musi być dana wzorem (zależne od czasu równanie Schrödingera):

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

dla

$$\hat{H} = i\hbar \hat{U}^+ \frac{d}{dt} \hat{U}. \quad (3.2)$$

- Postulujemy, że generatorem przesunięcia w czasie \hat{H} jest obserwabla odpowiadająca energii układu – Hamiltonian. Wymaga to wprowadzenia stałej proporcjonalności o wymiarze działania, stałej Plancka \hbar , która jest uniwersalną stałą przyrody.
- Zależność od czasu wartości oczekiwanych obserwabli,

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | \hat{O} | \Psi(t) \rangle = \langle \Psi(t) | -i\hbar \frac{d\hat{O}}{dt} + [\hat{O}, \hat{H}] | \Psi(t) \rangle. \quad (3.3)$$

- Zasada zachowania energii.
- Równanie własne dla operatora energii (niezależne od czasu równanie Schrödingera):

$$\hat{H} |\Psi_i\rangle = E_i |\Psi_i\rangle. \quad (3.4)$$

- Widmo energii własnych.
- Ewolucja czasowa stanów własnych Hamiltonianu.

- Ewolucja czasowa dowolnych stanów czystych – rozkład stanu początkowego na stany własne Hamiltonianu.
- Ewolucja czasowa dowolnych stanów mieszanych – równanie ewolucji dla operatora statystycznego.

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho}(t) = [\hat{H}, \hat{\rho}(t)] \quad (3.5)$$

• Postulaty mechaniki kwantowej – podsumowanie.

- I. Stan układu kwantowego określony jest hermitowskim ($\hat{\rho}^+ = \hat{\rho}$), nieujemnieokreślonym (dla wszystkich $|a\rangle$, $\langle a|\hat{\rho}|a\rangle \geq 0$) i mającym jednostkowy ślad ($\text{Tr} \hat{\rho} = 1$) operatorem statystycznym w przestrzeni Hilberta. Stan nazywamy stanem czystym $|b\rangle$ jeśli dodatkowo operator statystyczny jest operatorem rzutowym ($\hat{\rho}^2 = \hat{\rho} = \frac{|b\rangle\langle b|}{\langle b|b\rangle}$); w przeciwnym wypadku stan nazywamy stanem mieszanym. Stan czysty określony jest więc wektorem $|b\rangle$ w przestrzeni Hilberta, a dokładnie wiązką wektorową wektorów wzajemnie równoległych.
- II. Kwantowa wielkość mierzalna określona jest hermitowskim ($\hat{O}^+ = \hat{O}$) operatorem w przestrzeni Hilberta (zwanym obserwabłą), którego zbiór stanów własnych jest bazą w tejże przestrzeni Hilberta.
- III. Jedynym możliwym wynikiem pomiaru układu kwantowego jest wartość własna λ_a obserwabli ($\hat{O}|a\rangle = \lambda_a|a\rangle$).
- IV. Prawdopodobieństwo otrzymania w wyniku pomiaru wartości własnej λ_a jest równe $\text{Tr} \hat{\rho} \hat{P}_a$, gdzie $\hat{\rho}$ jest operatorem statystycznym układu, a \hat{P}_a jest operatorem rzutowym ($\hat{P}_a^2 = \hat{P}_a$) na podprzestrzeń własną obserwabli odpowiadającą wartości własnej λ_a . Jeśli układ mierzony jest w stanie czystym $|b\rangle$ to prawdopodobieństwo to wynosi $\frac{\langle b|\hat{P}_a|b\rangle}{\langle b|b\rangle}$.
- V. Przeprowadzenie pomiaru na układzie kwantowym w stanie czystym $|b\rangle$, i otrzymanie wyniku pomiaru λ_a , skutkuje zmianą stanu tego układu na stan czysty $\frac{\hat{P}_a|b\rangle}{\langle b|\hat{P}_a|b\rangle^{1/2}}$ („redukcja pakietu falowego”).
- VI. Ewolucja czasowa czystego stanu układu kwantowego $|a(t)\rangle$ zadana jest zależnym od czasu równaniem Schrödingera, $i\hbar \frac{d}{dt} |a(t)\rangle = \hat{H}|a(t)\rangle$, gdzie \hat{H} jest operatorem energii układu (w ogólności zależnym od czasu), a stała Plancka \hbar ma wartość doświadczalną (kwiecień 2005): $1.054571596(82) \times 10^{-34} \text{ Js} \simeq 197 \text{ MeV fm}/c$. Wynika stąd, że ewolucja czasowa operatora statystycznego zadana jest równaniem $i\hbar \frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} = [\hat{H}, \hat{\rho}(t)]$.

4. Wykład 31 października 2006

- Mechanika kwantowa (kinematyka) punktu materialnego w jednym wymiarze.

- Definicja stanu $|x\rangle$ cząstki znajdującej się w punkcie x .
- Definicja przestrzeni liniowej zbudowanej z kombinacji liniowych stanów $|x\rangle$,

$$|\Psi\rangle = \int dx \Psi(x)|x\rangle. \quad (4.1)$$

- Definicja operatora położenia \hat{x}

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle, \quad (4.2)$$

$$\hat{x}|x'\rangle = x'|x'\rangle. \quad (4.3)$$

- Definicja iloczynów skalarnych dla **różnych** stanów:

$$\langle x'|x\rangle = 0 \quad \text{dla} \quad x' \neq x, \quad (4.4)$$

czyli amplituda prawdopodobieństwa uzyskania wartości x' w wyniku pomiaru położenia cząstki będącej w stanie $|x\rangle$ musi być zero.

- Amplituda prawdopodobieństwa uzyskania wartości x' w wyniku pomiaru położenia cząstki będącej w stanie $|\Psi\rangle$, dla profilu $\Psi(x)$, który jest różny od zera tylko na odcinku (x_1, x_2) , musi być równa:

$$\langle x'|\Psi\rangle = \int dx \Psi(x)\langle x'|x\rangle \begin{cases} = 0 & \text{dla} \quad x' \notin (x_1, x_2) \\ \neq 0 & \text{dla} \quad x' \in (x_1, x_2) \end{cases}. \quad (4.5)$$

Ponieważ musi tak być dla dowolnie małego $|x_1 - x_2|$, więc musimy iloczyny skalarne zdefiniować jako

$$\langle x'|x\rangle = \delta(x' - x), \quad (4.6)$$

a więc stany $|x\rangle$ **nie należą** do przestrzeni Hilberta (stany niewłaściwe rozszerzonej przestrzeni Hilberta).

- Natomiast stany $|\Psi\rangle$ należą do przestrzeni Hilberta o ile profile $\Psi(x)$ są całkowne z kwadratem (należą do \mathcal{L}^2),

$$\langle \Psi|\Psi\rangle = \int dx' \int dx \Psi^*(x')\Psi(x)\langle x'|x\rangle = \int dx \Psi^*(x)\Psi(x) = \int dx |\Psi(x)|^2, \quad (4.7)$$

(stany właściwe przestrzeni Hilberta).

- $\Psi(x) = \langle x|\Psi\rangle =$ funkcja falowa = stan $|\Psi\rangle$ w reprezentacji położeniowej.
- Operator położenia w reprezentacji położeniowej.
- $\Psi_{x'}(x) = \langle x|x'\rangle = \delta(x - x')$ – funkcja falowa stanu $|x'\rangle$.
- Operator pomiaru położenia na odcinku (x_1, x_2) (operator rzutowy),

$$\hat{P}_{(x_1, x_2)} = \int_{x_1}^{x_2} dx |x\rangle\langle x|. \quad (4.8)$$

Prawdopodobieństwo otrzymania położenia w odcinku (x_1, x_2) w wyniku pomiaru wykonanego na stanie $|\Psi\rangle$ wynosi

$$P_{(x_1, x_2)} = \langle \Psi|\hat{P}_{(x_1, x_2)}|\Psi\rangle = \int_{x_1}^{x_2} dx \langle \Psi|x\rangle\langle x|\Psi\rangle = \int_{x_1}^{x_2} dx |\Psi(x)|^2. \quad (4.9)$$

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

- Wymiar funkcji falowej w jednym wymiarze $[\Psi(x)] = (\text{długość})^{-1/2}$.

5. Wykład 3 listopada 2006

- Operator pędu.

- Operator przesunięcia w reprezentacji położeniowej (unitarny):

$$(\hat{U}_{x_0}\psi)(x) = \int dx' U_{x_0}(x, x')\Psi(x') = \Psi(x - x_0) \quad (5.1)$$

- Grupa przesunięć: $\hat{U}_{x_0}\hat{U}_{x'_0} = \hat{U}_{x_0+x'_0}$.
- Generator przesunięcia \hat{k} (hermitowski): $\hat{U}_{x_0} = \exp(-ix_0\hat{k})$.
- Dowód, że $\hat{k} = -i\frac{d}{dx}$, czyli że

$$\Psi(x - x_0) = \exp\left(-x_0\frac{d}{dx}\right)\Psi(x). \quad (5.2)$$

- Postulat, że operatorem pędu w reprezentacji położeniowej jest $\hat{p} = \hbar\hat{k} = -i\hbar\frac{d}{dx}$, gdzie musieliśmy wprowadzić stałą wymiarową \hbar o wymiarze działania. A priori, nie wiemy czy jest to ta sama stała (stała Plancka) co w postulacie VI dotyczącym zależnego od czasu równania Schrödingera.
- Operator pędu jest operatorem hermitowskim.
- Postulat, że operatorem energii kinetycznej w reprezentacji położeniowej jest $\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$; taka sama funkcja pędu jak w mechanice klasycznej.
- Dla cząstki swobodnej $\hat{H} = \hat{T}$, i wtedy zmiana w czasie średniej wartości położenia $\bar{x} = \langle\Psi|\hat{x}|\Psi\rangle$ wynosi

$$i\hbar\frac{d}{dt}\bar{x} = \langle\Psi|[\hat{x}, \hat{H}]|\Psi\rangle = \langle\Psi|\frac{\hbar'^2}{2m}2\frac{d}{dx}|\Psi\rangle = \frac{i\hbar'}{m}\langle\Psi|\hat{p}|\Psi\rangle = i\hbar'\frac{\bar{p}}{m}, \quad (5.3)$$

gdzie w operatorze pędu użyliśmy a priori innej stałej \hbar' . Widać jednak, że klasyczne równanie ruchu $\frac{d}{dt}x = \frac{p}{m}$ będzie dla wartości średnich spełnione tylko dla $\hbar' = \hbar$.

- Własności operatora pędu

- Funkcje własne operatora pędu w reprezentacji położeniowej:

$$\hat{p}\Psi_p(x) = p\Psi_p(x) \implies \Psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{ip}{\hbar}x\right). \quad (5.4)$$

- Stany własne operatora pędu w przestrzeni Hilberta:

$$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle \implies |p\rangle = \int dx \Psi_p(x)|x\rangle. \quad (5.5)$$

- Iloczyn skalarny stanów własnych pędu obliczamy jako całkę z fal płaskich:

$$\langle p'|p\rangle = \int dx \Psi_{p'}^*(x)\Psi_p(x) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dx \exp\left(\frac{-ip'x}{\hbar}\right) \exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right) = \delta(p' - p), \quad (5.6)$$

a więc stany własne pędu **nie należą** do przestrzeni Hilberta (wektory niewłaściwe).

- Reprezentacja pędowa.

- Funkcja falowa w reprezentacji pędowej: $\Psi(p) = \langle p | \Psi \rangle$.
- Operator położenia w reprezentacji pędowej: $\hat{x} = i\hbar \frac{d}{dp}$.
- $|\Psi(p)|^2 =$ gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki o pędzie p .
- Wymiar funkcji falowej w reprezentacji pędowej w jednym wymiarze $[\Psi(p)] = (\text{długość}/\hbar)^{1/2}$.
- Operator energii potencjalnej.
 - Operator energii potencjalnej w reprezentacji położeniowej:

$$(\hat{V}\Psi)(x) = \langle x | \hat{V} | \Psi \rangle = \int dx' \langle x | \hat{V} | x' \rangle \Psi(x') = \int dx' V(x, x') \Psi(x'), \quad (5.7)$$

gdzie $V(x, x')$ jest jądrem całkowym operatora całkowego.

- Operator energii potencjalnej jest hermitowski o ile $V(x, x') = V^*(x', x)$.
- Potencjał lokalny $V(x, x') = V(x)\delta(x - x')$, a nielokalny w przeciwnym wypadku.
- Dla potencjału lokalnego, $(\hat{V}\Psi)(x) = V(x)\Psi(x)$, działanie operatora energii potencjalnej w reprezentacji położeniowej polega na mnożeniu funkcji falowej przez potencjał.
- Lokalny operator energii potencjalnej jest hermitowski o ile potencjał jest rzeczywisty $V(x) = V^*(x)$.
- Rzeczywistość funkcji falowych dla potencjałów lokalnych.
 - Operator sprzężenia zespolonego w reprezentacji położeniowej = operator odwrócenia czasu.
 - Z rzeczywistości potencjału lokalnego wynika, że funkcja własna Hamiltonianu i funkcja do niej zespolenie sprzężona spełniają równanie Schrödingera dla tej samej energii własnej.
 - 1° Jeżeli ta energia własna jest niezdegenerowana to można zmienić fazę funkcji falowej tak aby była funkcją rzeczywistą.
 - 2° Jeżeli ta energia własna jest zdegenerowana to albo część rzeczywista jest proporcjonalna do urojonej i wtedy można zmienić fazę funkcji falowej tak aby była funkcją rzeczywistą (jak w 1°), albo część rzeczywista i urojona stanowią dwie liniowo niezależne rzeczywiste funkcje własne, które można zortogonalizować.
 - Wniosek: Dla potencjału lokalnego można szukać rzeczywistych funkcji falowych.
 - Przykład: ruch swobodny dla $V(x) \equiv V = \text{const}$. Dla $E > V$, fale płaskie = zdegenerowane rozwiązania wzajemnie zespolenie sprzężone, o przeciwnych pędach = połączone operatorem odwrócenia czasu. Równoważnie: dwa rozwiązania rzeczywiste, \sin i \cos , oba T -parzyste.
- Topologiczne cechy funkcji falowych w jednym wymiarze.
 - Rozpatrujemy znaki dwu stron niezależnego od czasu równania Schrödingera:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi_E(x) = (E - V(x)) \Psi_E(x). \quad (5.8)$$

- Obszar klasycznie dozwolony $E > V(x)$:
 - 1° Jeżeli $\Psi_E(x) > 0$ (dodatnia) $\implies \Psi_E''(x) < 0$ (wkłęsła),
 - 2° Jeżeli $\Psi_E(x) < 0$ (ujemna) $\implies \Psi_E''(x) > 0$ (wypukła),

3° Jeżeli $\Psi_E(x) = 0$ (węzeł) $\implies \Psi_E''(x) = 0$ (punkt przegięcia).

Wynika stąd, że funkcja falowa oscyluje wokół zera z częstością tym większą im większa jest energia wzbudzenia $E - V(x)$ czyli energia kinetyczna.

– Obszar klasycznie zabroniony $E < V(x)$:

1° Jeżeli $\Psi_E(x) > 0$ (dodatnia) $\implies \Psi_E''(x) < 0$ (wypukła),

2° Jeżeli $\Psi_E(x) < 0$ (ujemna) $\implies \Psi_E''(x) > 0$ (wkłęsła),

3° Jeżeli $\Psi_E(x) = 0$ (węzeł) $\implies \Psi_E''(x) = 0$ (punkt przegięcia).

Wynika stąd, że

1° Jeżeli obszar klasycznie zabroniony rozciąga się do $+\infty$ to funkcja falowa nie może tam mieć węzła i musi zbiegać do zera przy $x \rightarrow +\infty$

2° Jeżeli obszar klasycznie zabroniony rozciąga się do $-\infty$ to funkcja falowa nie może tam mieć węzła i musi zbiegać do zera przy $x \rightarrow -\infty$

3° Funkcja falowa może mieć węzeł w obszarze klasycznie zabronionym tylko jeśli jest to obszar skończony.

6. Wykład 7 listopada 2006

- Ruch cząstki w nieskończonej studni potencjału.

- Stały lokalny potencjał $V(x) = V = \text{const}$, którego wartość wybieramy za $V = 0$, na odcinku $0 \leq x \leq L$ ograniczony nieskończenie twardymi ścianami, które interpretujemy jako obszary, gdzie prawdopodobieństwo znalezienia cząstki jest zero, czyli funkcja falowa znika.
- Niezależne od czasu równanie Schrödingera odpowiada diagonalizacji Hamiltonianu cząstki swobodnej z warunkami brzegowymi $\Psi(0) = \Psi(L) = 0$.
- Ogólne rozwiązanie musi być kombinacją liniową dwu rozwiązań rzeczywistych $\sin \frac{p}{\hbar}x$ oraz $\cos \frac{p}{\hbar}x$. Ale tylko pierwsze z nich spełnia warunek $\Psi(0) = 0$, więc

$$\Psi(x) = A \sin \frac{p}{\hbar}x. \quad (6.1)$$

- Drugi warunek brzegowy $\Psi(L) = 0$ wymaga aby wartości pędów p były skwantowane

$$p_n = \frac{n\hbar\pi}{L}, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (6.2)$$

a więc energie własne są dyskretne:

$$E_n = \frac{n^2\hbar^2\pi^2}{2mL^2}, \quad (6.3)$$

a funkcje falowe stanów własnych są

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{p_n}{\hbar}x. \quad (6.4)$$

gdzie współczynnik wybraliśmy tak aby funkcje falowe były unormowane.

- Stany własne nie są oczywiście stanami własnymi pędu, ale **wewnątrz** jamy potencjału są kombinacjami liniowymi dwu fal płaskich biegnących w przeciwnych kierunkach, ze skwantowanymi pędami p_n i $-p_n$.
- Liczba węzłów funkcji falowej $N_w = n - 1$ rośnie wraz z energią.
- Kombinacja liniowa dwu najniższych stanów własnych,

$$\Psi(x) = \alpha\Psi_1(x) + \beta\Psi_2(x), \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1, \quad (6.5)$$

ma średnią energię

$$\bar{E} = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = |\alpha|^2 E_1 + |\beta|^2 E_2, \quad (6.6)$$

która może przyjmować dowolne wartości między E_1 i E_2 , oraz dyspersję energii

$$\delta E^2 = |\alpha|^2 |\beta|^2 (E_2 - E_1)^2, \quad (6.7)$$

która jest równa zero tylko dla $\alpha = 0$ lub $\beta = 0$, czyli dla stanów własnych.

- Kombinacja liniowa dwu najniższych stanów własnych ewoluuje w czasie w następujący sposób:

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \alpha \exp\left(-i\frac{E_1}{\hbar}t\right) \Psi_1(x) + \beta \exp\left(-i\frac{E_2}{\hbar}t\right) \Psi_2(x) \\ &\simeq \alpha \Psi_1(x) + \beta \exp(-i\omega_{21}t) \Psi_2(x), \end{aligned} \quad (6.8)$$

gdzie symbol \simeq oznacza odrzucenie wspólnego czynnika fazowego, zaś częstość kwantowej oscylacji $\omega_{21} = (E_2 - E_1)/\hbar$ zależy od różnicy energii dwu stanów własnych.

- Częstość (kołową!) ruchu klasycznego możemy policzyć jako stosunek klasycznej prędkości p/m i długości toru $2L$ pomnożone przez 2π , czyli $\omega = \frac{p\pi}{mL}$. Dla pędu klasycznego $p = \frac{3}{2}p_1$ jest ona równa częstości ruchu kwantowego $\omega_{21} = \frac{3}{2}\frac{p_1\pi}{mL}$.
- Symulacje komputerowe ruchu cząstki w nieskończonej studni potencjału.
 - Ewolucja czasowa stanów własnych $n = 1$ i $n = 5$; zmiana fazy bez zmiany modułu.
 - Ewolucja czasowa kombinacji liniowych stanów własnych $n = 1 + n = 2$ i $n = 3 + n = 4$; częstość oscylacji kwantowych, korelacje pomiędzy przepływem gęstości prawdopodobieństwa a maksimami funkcji falowej w reprezentacji pędowej.
 - Ewolucja czasowa pakietu gaussowskiego nieruchomego w chwili $t=0$; rozptywanie się przed dotarciem do ścian studni, odbicia prądu prawdopodobieństwa od ścian studni, zmartwychwstanie funkcji falowej.
 - Ewolucja czasowa pakietu gaussowskiego pchniętego w chwili $t=0$; rozptywanie się przed dotarciem do ścian studni, odbicia od ścian studni, podobieństwo do ruchu klasycznego.
- Równanie ciągłości.
 - Ma postać:

$$\frac{d}{dt}\rho(x, t) + \frac{d}{dx}j(x, t) = 0 \quad (6.9)$$

dla

$$\rho(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 \quad (6.10)$$

$$j(x, t) = \frac{1}{m} \Re \left\{ \Psi^*(x, t) \left[-i\hbar \frac{d}{dx} \Psi(x, t) \right] \right\}, \quad (6.11)$$

i określa ewolucję czasową „cieczy prawdopodobieństwa” o gęstości $\rho(x, t)$ i prądzie przepływu $j(x, t)$.

- Zmiana prawdopodobieństwa znalezienia cząstki na danym odcinku (w danej objętości) równa jest różnicy prądu prawdopodobieństwa wpływającego w odcinek z lewej strony i wypływającego z prawej strony (całkowitemu prądowi wpływającemu przez powierzchnię ograniczającą objętość).

7. Wykład 10 listopada 2006

- Relacje nieoznaczoności. Jednowymiarowy oscylator harmoniczny.
 - Relacje nieoznaczoności, wg Englerta I.4.7.
 - Funkcje falowe minimalizujące nieoznaczoność pędu i położenia, wg Englerta I.4.8.
 - Jednowymiarowy oscylator harmoniczny metodą operatorów drabinowych, wg Englerta I.5.3.2.

8. Wykłady 14 i 17 listopada 2006

- Reprezentacja liczb obsadzeń.

- Stany własne oscylatora harmonicznego,

$$|n\rangle = \frac{(a^+)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle, \quad (8.1)$$

stanowią ortonormalną bazę w przestrzeni Hilbta stanów jednej cząstki w jednym wymiarze, czyli

$$\langle n'|n\rangle = \delta_{n'n}, \quad (8.2)$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n| = \hat{1}. \quad (8.3)$$

- Każdy stan $|\Psi\rangle$ jednej cząstki w jednym wymiarze może być reprezentowany przy pomocy nieskończonego ciągu liczb zespolonych $\Psi(n)$,

$$|\Psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n|\Psi\rangle, = \sum_{n=0}^{\infty} \Psi(n)|n\rangle, \quad (8.4)$$

co nazywamy reprezentacją „liczb obsadzeń”. Jest to analog funkcji falowej $\Psi(x)$ z reprezentacji położeniowej.

- Stany koherentne.

- Definicja

$$|z\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle = \exp(za^+)|0\rangle. \quad (8.5)$$

- Własności

$$a|z\rangle = z|z\rangle, \quad (8.6)$$

$$a^+|z\rangle = \frac{d}{dz}|z\rangle. \quad (8.7)$$

- Średnie wartości pędu i położenia w stanie koherentnym mają postać

$$\bar{x} = \frac{\langle z|\hat{x}|z\rangle}{\langle z|z\rangle} = \sqrt{2\lambda}\Re(z), \quad (8.8)$$

$$\bar{p} = \frac{\langle z|\hat{p}|z\rangle}{\langle z|z\rangle} = \sqrt{2\hbar\lambda}^{-1}\Im(z). \quad (8.9)$$

- Iloczyn skalarny i norma stanów koherentnych ma postać

$$\langle z|z'\rangle = \exp(z^*z'). \quad (8.10)$$

- Jeśli w chwili $t = 0$ oscylator jest w stanie koherentnym $|z_0\rangle$, to ewolucja czasowa tego stanu ma postać

$$|z, t\rangle = \exp(-i\omega t/2)|z(t)\rangle \quad \text{dla} \quad z(t) = z_0 \exp(-i\omega t). \quad (8.11)$$

– Funkcja falowa stanu koherentnego (jego reprezentacja położeniowa) ma postać

$$\Psi_z(x) = \langle x|z \rangle = \exp\left(\frac{z}{\sqrt{2}} \left[\xi - \frac{d}{d\xi}\right]\right) \langle x|0 \rangle, \quad (8.12)$$

gdzie $\xi = x/\lambda$ dla $\lambda = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$, a $\Psi_0(x) = \langle x|0 \rangle$ jest funkcją falową stanu podstawowego.

– Z własności (8.6) wynika, że funkcja falowa stanu koherentnego spełnia równanie różniczkowe

$$\lambda \frac{d}{dx} \Psi_z(x) = \left(\sqrt{2}z - \frac{x}{\lambda}\right) \Psi_z(x), \quad (8.13)$$

którego rozwiązaniem jest

$$\Psi_z(x) = (\pi\lambda^2)^{-1/4} \exp\left(-\frac{x^2}{2\lambda^2} + \sqrt{2}z\frac{x}{\lambda} - \frac{z^2}{2}\right), \quad (8.14)$$

$$= (\pi\lambda^2)^{-1/4} \mathcal{N}(z) \exp\left(\frac{i\bar{p}x}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{(x-\bar{x})^2}{2\lambda^2}\right), \quad (8.15)$$

dla $\mathcal{N}(z) = (\Re(z))^2 - z^2/2$. Stan koherentny jest więc przesuniętym i pchniętym stanem podstawowym oscylatora harmonicznego.

– Stany koherentne tworzą tzw. bazę nadzupelną przestrzeni Hilberta, to znaczy mimo tego, że nie są wzajemnie ortogonalne [por. równanie (8.10)], to pozwalają przedstawić operator tożsamościowy jako całkę po płaszczyźnie zespolonej z operatorów rzutowych [por. równanie (8.3)]

$$\pi^{-1} \int dz dz^* \exp(-|z|^2) |z\rangle \langle z| = \hat{1}. \quad (8.16)$$

- Reprezentacja Bargmana

Rozkład jedności (8.16) pozwala podać jeszcze jedną reprezentację przestrzeni Hilberta (reprezentację Bargmana), w której stany $|\Psi\rangle$ reprezentowane są funkcjami $\Psi(z^*)$ zmiennej zespolonej z^* :

$$\Psi(z^*) = \langle z|\Psi\rangle, \quad (8.17)$$

z iloczynem skalarnym określonym przez

$$\langle \Psi|\Psi'\rangle = \pi^{-1} \int dz dz^* \exp(-|z|^2) \Psi^*(z) \Psi'(z^*). \quad (8.18)$$

10. Wykład 21 listopada 2006

- Obrazy w mechanice kwantowej
 - Obraz Schrödingera odpowiada standardowym postulatom mechaniki kwantowej, dla których operatory wielkości fizycznych nie ewoluują w czasie (Postulat II), a ewolucja czasowa zapostulowana jest dla stanów układu (Postulat VI). Nie jest to jedyna możliwa forma postulatów, a mianowicie można sformułować postulaty w ten sposób, że kwantowe wielkości fizyczne (operatory) ewoluują w czasie tak jak wielkości fizyczne w mechanice klasycznej (np. położenie i pęd cząstki są funkcjami czasu). Możliwe są też jeszcze inne formy postulatów, ale wszystkie one muszą dawać takie same przewidywania dotyczące wyników pomiarów. Zamiast więc formułować od początku nowe zestawy postulatów dokonujemy pewnych unitarnych przekształceń na operatorach i stanach odpowiadających standardowym postulatom. Standardowe operatory i stany nazywamy „obrazem Schrödingera”.
 - Obraz Heisenberga.
Dla zadanego operatora ewolucji czasowej układu $\hat{U}(t, t_0)$,

$$\hat{U}(t, t_0)|\Psi(t_0)\rangle = |\Psi(t)\rangle, \quad (10.1)$$

definiujemy operator w \hat{O}_H obrazie Heisenberga jako

$$\hat{O}_H(t, t_0; t) \equiv \hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{O}(t)\hat{U}(t, t_0), \quad (10.2)$$

gdzie operator w obrazie Schrödingera $\hat{O}(t) \equiv \hat{O}_S(t)$ może w ogólności zależeć od czasu. Stan w obrazie Heisenberga definiujemy jako

$$|\Psi(t)\rangle_H \equiv \hat{U}^\dagger(t, t_0)|\Psi(t)\rangle = |\Psi(t_0)\rangle. \quad (10.3)$$

Obrazy Schrödingera i Heisenberga są równoważne, gdyż elementy macierzowe w tych dwu obrazach są identyczne:

$${}_H\langle\Psi(t)|\hat{O}_H|\Psi(t)\rangle_H = \langle\Psi(t)|\hat{O}|\Psi(t)\rangle. \quad (10.4)$$

Operatory w obrazie Heisenberga spełniają równanie ewolucji (równanie Heisenberga)

$$i\hbar\frac{d}{dt}\hat{O}_H = [\hat{O}_H, \hat{H}] + i\hbar\frac{\partial\hat{O}_H}{\partial t}, \quad (10.5)$$

gdzie

$$\frac{\partial\hat{O}_H}{\partial t} \equiv \left(\frac{d\hat{O}}{dt}\right)_H. \quad (10.6)$$

Równanie Heisenberga jest kwantowym analogiem równania na ewolucję czasową dowolnej funkcji położenia i pędów kanonicznych $O(q_i, p_i, t)$,

$$\frac{d}{dt}O = \{O, H\} + \frac{\partial O}{\partial t}, \quad (10.7)$$

gdzie $\{O, H\}$ jest tzw. nawiasem Poissona,

$$\{O, O'\} = \sum_i \frac{\partial O}{\partial q_i} \frac{\partial O'}{\partial p_i} - \frac{\partial O}{\partial p_i} \frac{\partial O'}{\partial q_i}, \quad (10.8)$$

a $H(q_i, p_i, t)$ jest klasyczną funkcją Hamiltona. Kwantowanie układu klasycznego (kwantowanie kanoniczne) polega na postulowaniu operatorów mechaniki kwantowej w ten sposób, aby nawiasy Poissona wielkości fizycznych przechodziły w komutatory operatorów kwantowych:

$$\{O, O'\} \longrightarrow \frac{1}{i\hbar} [\hat{O}_H, \hat{O}'_H]. \quad (10.9)$$

– Stałe ruchu w mechanice klasycznej

$$\frac{d}{dt} O = 0 \quad (10.10)$$

odpowiadają więc niezależnym od czasu operatorom w obrazie Heisenberga,

$$\frac{d}{dt} \hat{O}_H = 0 \quad (10.11)$$

czyli operatorom komutującym z Hamiltonianem,

$$[\hat{O}_H, \hat{H}] = 0 \quad \text{lub} \quad [\hat{O}, \hat{H}] = 0. \quad (10.12)$$

– Obraz Schwingera (używany w książce Englerta). Definiujemy operator w \hat{O}_{SW} obrazie Schwingera identycznie jak w obrazie Heisenberga

$$\hat{O}_{SW}(t, t_0; t) \equiv \hat{U}^+(t, t_0) \hat{O}(t) \hat{U}(t, t_0), \quad (10.13)$$

a stan w obrazie Schwingera definiujemy jako

$$|\Psi(t)\rangle_{SW} \equiv \hat{U}^+(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle. \quad (10.14)$$

W obrazie Schwingera elementy macierzowe nie zależą od czasu:

$${}_{SW} \langle \Psi(t) | \hat{O}_{SW} | \Psi(t) \rangle_{SW} = \langle \Psi(t_0) | \hat{O} | \Psi(t_0) \rangle, \quad (10.15)$$

czyli ewolucja czasowa operatorów w obrazie Heisenberga kompensowana jest przez ewolucję czasową stanów w odwrotnym kierunku czasowym. Odpowiada to takiej ewolucji czasowej, że stany własne obserwabli zawsze pozostają stanami własnymi tej obserwabli.