

Mechanika kwantowa I

semestr letni 2016–2017

Krzysztof Byczuk

Instytut Fizyki Teoretycznej, Wydział Fizyki UW

byczuk@fuw.edu.pl

www.fuw.edu.pl/byczuk

03.06.2017

Redakcja i korekta: Michał Tarnowski

mt374569@fuw.edu.pl

16.08.2017

1 Warunki zaliczenia ćwiczeń i ocena końcowa

Ćwiczenia:

Zaliczenie ćwiczeń odbywa się na podstawie następujących składowych:

1. Obecność na ćwiczeniach,
2. Aktywność na ćwiczeniach,
3. Dwie kartkówki w czasie ćwiczeń.

O szczegółowej formie zaliczenia decyduje prowadzący ćwiczenia. Osoby, które nie zaliczą ćwiczeń, mogą to zrobić w pierwszym terminie egzaminu. Drugi termin egzaminu będzie wtedy dla nich jedynym terminem.

Egzamin:

Egzamin składa się z egzaminu pisemnego w terminie I lub II i odpowiednio egzaminów ustnych. Wynik egzaminu pisemnego unormowany do 100 punktów będzie stanowił podstawę oceny końcowej z przedmiotu. Ocena jest pozytywna (lub ćwiczenia zostają zaliczone egzaminem), jeśli student otrzyma więcej niż 49 punktów.

Wypadkowa ocena:

- 5+ za 99 – 100 p.,
- 5 za 90 – 98 p.,
- 4+ za 81 – 89 p.,
- 4 za 72 – 80 p.,
- 3+ za 62 – 71 p.,
- 3 za 50 – 61 p.,
- 2 za 0 – 49 p.

2 Tydzień I, 27.02–05.03.2017

2.1 Wykład

I. Historia mechaniki kwantowej

§1. *Trzy dekady powstawania nowej teorii, ważne daty* – wzmianka o: promieniowaniu ciała doskonale czarnego, zjawisku fotoelektrycznym, cieple właściwym ciał stałych, zjawisku Comptona, twierdzeniu Earnshawa i stabilności atomów i molekuł, widmie atomów. (Doświadczenie Sterna–Gerlacha, rozpad alfa, interferencja światła – będą później).

II. Podstawowe koncepcje mechaniki kwantowej

§1. *Równanie Schrödingera* – stan układu, funkcja falowa, równanie Schrödingera z czasem w $d = 1$ i $d = 3$ (dalej $d = 1$), stała Plancka, interpretacja probabilistyczna funkcji falowej, zasada superpozycji rozwiązań;

§2. *Rozwiązywanie równania Schrödingera* – separacja zmiennych,

2.2 Zadania na ćwiczenia

1. **Efekt fotoelektryczny:** Przypomnieć fakty doświadczalne związane z efektem fotoelektrycznym, postulaty Einsteina i wyjaśnienie teoretyczne tego zjawiska. Dwie wiązki światła o długościach $\lambda_1 = 80$ nm i $\lambda_2 = 110$ nm, padając na powierzchnię ołowiu, wybijają elektrony o maksymalnych energiach – odpowiednio 11,390 eV i 7,154 eV. Oszacować na podstawie tych danych stałą Plancka h . Oszacować pracę wyjścia i częstość odcięcia. Wykonać obliczenia numeryczne i zwrócić uwagę na jednostki oraz typowe wykładniki.

2. **Efekt Comptona:** Przypomnieć doświadczenie i wynik otrzymany przez Comptona. Korzystając z hipotezy Einsteina, znaleźć przesunięcie długości fali w funkcji kąta rozproszenia. Zdefiniować długość fali Comptona i obliczyć jej wartość dla elektronów. Wprowadzić $\hbar = h/2\pi$. Wysokoenergetyczne fotony (twarde promieniowanie gamma) są rozpraszane na spoczywających elektronach. Zakładając, że energia fotonów $E \gg m_e c^2$, znaleźć przesunięcie długości fali dla fotonów rozproszonych do tyłu ($\theta = \pi$). Pokazać, że w granicy dużych energii E (padających fotonów) energia rozproszonych fotonów jest zawsze równa połowie energii spoczynkowej elektronów. Obliczyć energię elektronu po rozproszeniu (*recoil energy*), jeśli padające fotony miały energię 15 MeV. Wykonać obliczenia numeryczne i zwrócić uwagę na jednostki oraz typowe wykładniki.

3. **Hipoteza de Broglie’a:** Przypomnieć hipotezę de Broglie’a i wynik doświadczenia Davissona–Germera. Wprowadzić długość fali de Broglie’a. Obliczyć długość de Broglie’a dla protonu o energii 70 MeV i dla kuli karabinowej o masie 100 g, poruszającej się z prędkością 900 m/s. Wykonać obliczenia numeryczne i zwrócić uwagę na jednostki oraz typowe wykładniki.

4. **Atom wodoru według Bohra:** Przypomnieć założenia i rezultaty teorii Bohra dla atomu wodoru. Wprowadzić stałą Rydberga i stałą struktury subtelnej. Obliczyć ich numeryczne wartości. Dla pozytonium (stan związany elektronu i pozytonu) znaleźć

E_n i r_n . Ile wynosi stała Rydberga i promień Bohra? Porównać z wynikiem dla atomu wodoru (uwzględnić masę zredukowaną). Oszacować częstość i długość fali potrzebnej do zjonizowania pozytonium, które jest w pierwszym stanie wzbudzonym. Wykonać obliczenia numeryczne i zwrócić uwagę na jednostki oraz typowe wykładniki.

2.3 Zadania domowe

1. Oszacować energię elektronów w mikroskopie elektronowym potrzebną do obserwacji struktur na skali 0,27 nm. W rozpraszaniu na kryształach protonów o energii 2 eV piąte maksimum w intensywności (widocznej na ekranie) obserwuje się pod kątem 30° . Oszacować odległość pomiędzy płaszczyznami w tym kryształach.

2. Rozważyć foton rozpraszający się na elektronie w spoczynku. Jeśli długość fali przesunięcia Comptona jest równa trzem długościom fali i te fotony są rozproszone pod kątem 60° , obliczyć długość fali padającego fotonu, energię odbicia elektronu i kąt, pod którym elektron jest rozproszony.

3. Jaki jest strumień fotonów (fotony/m²s) lasera o mocy 60 W emitującego światło o długości fali 6000 Å? Przyjąć średnicę wiązki równą 3 mm.

4. Z pomiarów widma energii fotonów kosmicznych wynika, że temperatura promieniowania relikтового wynosi 3 K. Dla jakiej częstości obserwuje się maksymalną energię?

3 Tydzień II, 06–12.03.2017

3.1 Wykład

stany stacjonarne, wymiar funkcji falowej;

§3. *Interpretacja probabilistyczna i normalizacja* – normalizacja funkcji falowej, znajdowanie prawdopodobieństwa lokalizacji cząstki;

§4. *Rozwijanie funkcji falowej i znajdowanie współczynników rozwinięcia* – baza ze względu na energię, baza zupełna, rozwinięcie w szereg, kolaps (redukcja) funkcji falowej przy pomiarze energii, iloczyn skalarny (ozn. (ϕ, ψ)), baza ortonormalna, interpretacja współczynników rozwinięcia;

§5. *Faza funkcji falowej* – faza globalna, równoważność rozwiązań, faza względna, (przykład: cząstka w nieskończonej studni potencjału, interpretacja rozwiązań, rozkład stanu $\sin^3(2\pi x/a)$, możliwe wyniki i prawdopodobieństwa otrzymania wartości energii przy jej pomiarze, analiza wyników w Mathematicie);

§6. *Operatory w mechanice kwantowej* – nieformalna definicja $\hat{A}$, operatory liniowe, równanie własne, funkcje własne, wartości własne, operator położenia i operator pędu, wartość oczekiwana (średnia) operatora $\langle \hat{A} \rangle$ na stanie i interpretacja, gdy znane są wartości własne, dyspersja, wariancja, operator hermitowski i jego wartości własne, operator energii, hamiltonian, pojęcie komutatora i nieprzemienność operatorów;

3.2 Zadania na ćwiczenia

1. **Promieniowanie ciała doskonale czarnego:** Pokazać, że maksimum rozkładu Plancka wypada dla $\lambda_{max} = b/T$, znaleźć b . Oszacować temperaturę powierzchni gwiazdy, jeśli z pomiaru wynika, że $\lambda_{max} = 446$ nm. Oszacować λ_{max} dla promieniowania pochodzącego od drutu wolframowego rozgrzanego do temperatury 3300 K. Wykonać obliczenia numeryczne i zwrócić uwagę na jednostki oraz typowe wykładniki.

2. **Rachunek prawdopodobieństwa:** Przypomnieć definicję częstościową i aksjomatyczną prawdopodobieństwa, definicje zmiennej losowej (dyskretnej i ciągłej), rozkładu prawdopodobieństwa, średniej, momentów, wariancji, etc.

3. Zmienna losowa X ma rozkład $p(x) = \alpha \exp(x)$ dla $x \in [0, \ln 3]$ i zero w pozostałych przypadkach. Znaleźć parametr α , średnią, drugi moment, wariancję i rozkład prawdopodobieństwa zmiennej losowej $Y = \exp(X)$ oraz prawdopodobieństwo, że: a) $X < 0$, b) $X < 1$, c) $0.5 < X < 0.7$, d) $Y < 1.5$.

4. **Metoda Frobeniusa:** Metodą Frobeniusa rozwiązać równanie oscylatora w mechanice klasycznej: $d^2 f(x)/dx^2 + \omega^2 f(x) = 0$.

5. **Transformata Fouriera:** Znaleźć transformaty Fouriera funkcji: a) $F(x) = e^{-x^2/a^2}$, b) $F(x) = e^{-x/a}$ (do domu), c) $F(x) = 1$ dla $x \in [-a/2, a/2]$ (do domu).

6. (Można przenieść do domowych). Pokazać, że zasada nieoznaczoności pomiędzy położeniem i pędem jest własnością wynikającą z transformaty Fouriera.

3.3 Zadania domowe

1. Określić wszystkie momenty dla rozkładów: a) normalnego, b) Lorentza.

2. Prawdopodobieństwo zdania egzaminu z pewnego przedmiotu przez studenta z pewnej uczelni wynosi 0,98. Zakładając, że studenci zdają egzaminy niezależnie od siebie, obliczyć prawdopodobieństwo, że z 80 studentów zapisanych w USOS egzamin zda co najmniej 75 z nich.

3. Niech X oznacza „czas oczekiwania” na wyrzucenie szóstką przy rzucie kostką. Znaleźć rozkład prawdopodobieństwa zmiennej X . Obliczyć prawdopodobieństwo, że szóstka wypadnie po raz pierwszy: a) dołącznie w 10 rzucie, b) najpóźniej w 10 rzucie, c) nie wcześniej niż w 11 rzucie.

4. Zmienna losowa X ma rozkład prawdopodobieństwa $p(x) = Ax$ dla $x \in [0, \pi]$ i zero w pozostałych przypadkach. Znaleźć A . Dla zmiennej losowej $Y = \cos X$ obliczyć średnią z Y bez wyznaczania rozkładu prawdopodobieństwa tej zmiennej.

5. Rozwiązać: a) $zz^* + (z - z^*) = 3 + 2i$, b) $z^2 - 6z + 10 = 0$, c) $\operatorname{Re}(iz) \geq 1$, $|(z - 3)/(2 - 3i)| > 1$, d) $|(z + i)/(z^2 + 1)| \leq 1$.

6. (Wzór de Moivre'a) Wyrazić $\cos 3\phi$, $\sin 4\phi$, i $\cos 6\phi$ przez $\cos \phi$ i $\sin \phi$.

7. (Postać biegunowa) Rozwiązać i narysować: a) $z^2 = z^*$, b) $|z^4| = z$, c) $z^3 = (z^*)^3$, d) $z^3(z^*)^2 = -1$.

8. Rozwiązać: a) $z^4 - 4i\sqrt{3}z^2 - 16 = 0$, b) $z^2 + (2i - 1)z + 1 + 5i = 0$.

4 Tydzień III, 13–19.03.2017

4.1 Wykład

§7. *Pęd a transformata Fouriera, zasada nieoznaczoności* – transformaty Fouriera ($1/\sqrt{2\pi}$ w obu transformatach), tw. Parsewala i interpretacja probabilistyczna funkcji falowej $\phi(p)$, dowód zasady nieoznaczoności $\Delta x \Delta p$ (bez komutatora);

§8. *Prawo zachowania prawdopodobieństwa* – gęstość prądu prawdopodobieństwa, równanie ciągłości, interpretacja.

III. Równanie Schrödingera bez czasu

§1. *Cząstka swobodna* – fale płaskie, energia kinetyczna i pęd, degeneracja, problem z unormowaniem, idea konstrukcji paczki falowej, prędkości grupowa i fazowa;

4.2 Zadania na ćwiczenia

1. **Znajdowanie potencjału:** Niech funkcje falowe dla pewnych stanów mają postać $\psi(x) = A_1 \exp(-(m\omega/2\hbar)x^2)$ oraz $\psi(x) = A_2 \exp(-i(m\omega/2\hbar)x^2)$, a odpowiadające im energie są równe odpowiednio $\hbar\omega/2$ oraz $3\hbar\omega/2$. Dla jakich potencjałów $V(x)$ są to rozwiązania równania Schrödingera?

2. **Prawdopodobieństwo znalezienia cząstki:** Cząstka w nieskończonej studni potencjału od 0 do a jest w stanie podstawowym opisanym funkcją falową $\psi(x) = A \sin(\pi x/a)$. Znaleźć unormowanie A . Obliczyć prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w przedziale $[a/2, 3a/4]$.

3. **Przydatne całki:** Podać wyrażenia na całki:

- a) $\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-z^2) dz = \sqrt{\pi}$,
 - b) $\int_{-\infty}^{\infty} z^{2n} \exp(-z^2) dz = \sqrt{\pi} \cdot (1 \cdot 3 \cdot 5 \dots (2n-1))/2^n$,
 - c) $\int_{-\infty}^{\infty} z^{2n+1} \exp(-z^2) dz = 0$
- oraz wprowadzić funkcję błędu:
- d) $\text{erf}(z) = 2/\sqrt{\pi} \int_0^z \exp(-u^2) du$.

Pierwszą i drugą dla $n = 2$ obliczyć jawnie dla z rzeczywistego i biorąc kwadrat wyrażenia w pierwszej oraz różniczkując po parametrze w drugiej całce (sposoby Feynmana).

4. **Normalizacja stanu superponowanego:** Stan cząstki opisany jest funkcją falową $\Psi(x, t) = (A_1 \exp(-x^2/a^2) + A_2 x \exp(-x^2/b^2)) \exp(-ict)$ dla $-\infty < x < \infty$. a) Wyznaczyć warunek na współczynniki normalizacji A_1 i A_2 . b) (do domu) Unormować $\Psi(x, t)$ dla $A_1 = A_2$ oraz $a^2 = 32 \text{ nm}^2$ i $b^2 = 8 \text{ nm}^2$. c) (do domu) Znaleźć prawdopodobieństwo, że cząstka znajduje się w przedziale $0 < x < 32 \text{ nm}$. Zauważyć, że $\text{erf}(32) \approx 1$ dla rozwiązania z b).

5. **Nieskończona studnia potencjału:** Cząstka znajduje się w nieskończonej studni potencjału od 0 do a . Znaleźć stany własne i funkcje własne w reprezentacji energii (hamiltonianu). Wyznaczyć unormowanie. Znaleźć ewolucję w czasie stanów a) $\Psi(x, 0) = Ax(a-x)$, b) (do domu) $\Psi(x, 0) = A \sin^5(\pi x/a)$. W a) znaleźć współczynniki rozwinięcia, obliczając iloczyn skalarny, a w b) – bezpośrednio korzystając z rozwinięcia Newtona. Jakie wartości energii można otrzymać przy pomiarach i z jakimi prawdopodobieństwami

dla a) i b)? Jaka jest średnia energia i jej odchylenie standardowe dla a) i b)? Dla przypadku b) obliczyć na dwa sposoby – raz ze średniej z hamiltonianu i raz sumując energie ze znalezionymi prawdopodobieństwami. Omówić, co będzie zaraz po pomiarze energii. Wsk.: $\int dx \psi^*(x)(H^2\psi(x)) = \int dx (H\psi(x))^*(H\psi(x))$.

4.3 Zadania domowe

1. Znaleźć unormowanie stanu opisanego funkcją falową $\psi(x) = A \exp(-|x|/2a) \exp(ik_0(x-x_0))$.

2. Cząstka o masie m znajduje się w jednowymiarowej, nieskończonej studni potencjału od 0 do a . Wiadomo, że jest ona w stanie wzbudzonym $n = 3$ w chwili $t = 0$. Nagle szerokość studni została podwojona ($a \rightarrow 2a$) tak, że stan układu nie został zaburzony. Jeśli mierzy się energię chwilę później, jakie jest prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w stanie podstawowym, a jakie jest prawdopodobieństwo, że jest ona w pierwszym stanie wzbudzonym? (Są to stany dla nowej studni). Obliczyć średnią energię cząstki przed i po podwojeniu szerokości studni. Zinterpretować wynik.

3. Rozwiązać problem ruchu cząstki kwantowej o masie m w nieskończonej studni potencjału: $V(x) = 0$ dla $|x| \leq a/2$ oraz $V(x) = \infty$ dla $|x| > a/2$. Poklasyfikować rozwiązania na parzyste i nieparzyste ze względu na transformacje funkcji falowych. Porównać otrzymane energie własne i stany własne z problemem studni od 0 do a .

5 Tydzień IV, 20–26.03.2017

5.1 Wykład

§2. *Stany związane i rozproszeniowe w $d = 1$* – stany związane (zlokalizowane, unormowane z dyskretną energią), stany rozproszeniowe (rozciągłe, nieunormowalne w zwykłym sensie, z ciągłą energią z continuum), rozwiązywanie problemu z potencjałem odciwkami płaskim, reguły zszywania rozwiązań, definicja współczynnika przejścia i odbicia, przykład rozpraszania na schodku dla fali o energii $E < V$; przykład: rozpraszanie na schodku potencjału.

§3. *Parzystość rozwiązań* – operator parzystości, stany i energie własne operatora parzystości, klasyfikacja stanów własnych ze względu na parzystość dla hamiltonianu komutującego z operatorem parzystości;

§4. *Twierdzenie Ehrenfesta* – wyprowadzenie równań ruchu na średnie położenia i średni pęd, związek mechaniki kwantowej z mechaniką klasyczną.

IV. Notacja Diraca

§1. *Przestrzeń wektorowa (liniowa)* – notacja Diraca w definicjach nieskończonego wymiarowego przestrzeni wektorowych i iloczynu skalarnego, baza w przestrzeni wektorowej, rozkład wektora w bazie, rozkład operatora jednostkowego, zupełność bazy;

5.2 Zadania na ćwiczenia

Prosiłbym sprawdzić, czy studenci wiedzą, jak rozwiązać zadanie domowe 2 z poprzedniego tygodnia. Jeśli nie, to omówić, ale bez obliczeń – tylko o co tam chodzi.

1. **Wyznaczanie średnich z operatorów:** Dla stanu podstawowego w nieskończonej studni potencjału znaleźć $\langle \hat{x} \rangle$, $\langle \hat{p} \rangle$, Δx , Δp i omówić zasadę nieoznaczoności oraz pojęcie drgań zerowych.

2. **Obliczanie prądu gęstości prawdopodobieństwa:** Cząstka w jednowymiarowej, nieskończonej studni jest w stanie $\Psi(x, t) = \sqrt{1/a} \sin(\pi x/a) \exp(-iE_1 t/\hbar) + \sqrt{1/a} \sin(2\pi x/a) \exp(-iE_2 t/\hbar)$, gdzie E_i to energie własne. Znaleźć gęstość prądu prawdopodobieństwa dla tej funkcji falowej. Sprawdzić, że jest spełnione równanie ciągłości.

3. **Ewolucja paczki gaussowskiej:** Omówić ewolucję w czasie gaussowskiej paczki falowej. Rozmycie w czasie. Zmiana współczynnika normalizacyjnego w czasie. Zasada nieoznaczoności. Podać przykłady liczbowe dla elektronu, atomów srebra (to wyjaśnia, dlaczego eksperyment Sterna–Gerlacha nie wychodzi na elektronach) i komara o masie 1 g. Podkreślić, że rozmywa się gęstość prawdopodobieństwa, a elektron nadal jest punktowy i mierzony w jednym miejscu. Interpretacja Borna.

4. **Rozpływanie się paczki falowej – ogólnie:** Wyprowadzić wynik, że rozmycie paczki falowej (dowolnej) zmienia się w czasie jak $\Delta x^2(t) = \Delta_v^2(t - t_0)^2 + \Delta x^2(t = t_0)$. Obliczenia i komentarze są dostępne w książce Białynickiego-Biruli, Cieplaka i Kamińskiego. Szkic rachunku był na wykładzie, ale prosiłbym o obliczenie w szczegółach jako trening.

5.3 Zadania domowe

1. Obliczyć $\langle \hat{x}^n \rangle$ na stanie $\psi(x) = (2a/\pi)^{1/4} \exp(-ax^2)$ dla dowolnego n naturalnego.

2. Pokazać, że relacja nieoznaczoności jest wysycana (nierówność zastąpiona równością), gdy funkcja falowa spełnia równanie $-i\hbar d\psi(x)/dx = (\langle p \rangle + i\xi(x - \langle x \rangle))\psi(x)$. Znaleźć rozwiązanie.

3. Biorąc harmoniczną falę de Broglie’a $\Psi(x, t) = \exp(-i\omega t)(A \exp(ikx) + B \exp(-ikx))$, $E = \hbar\omega$, $p = \hbar k$, i obliczając pierwsze i drugie pochodne po t i x , odgadnąć, jakie równanie różniczkowe odtwarza poprawną relację dyspersji $\hbar\omega = \hbar^2 k^2/2m + V$. Schrödinger założył, że takie samo równanie musi być dla ogólnego przypadku $V(x)$. Sprawdzić też, jakie równanie odpowiada relatywistycznej relacji dyspersji $\hbar^2 \omega^2 = \hbar^2 c^2 k^2 + (mc^2)^2$, gdzie c jest prędkością światła w próżni.

6 Tydzień V, 27.03–02.04.2017

6.1 Wykład

§2. *Operatory w przestrzeni wektorowej* – reprezentacja macierzowa operatora, zmiana bazy, sprzężenie hermitowskie, operator unitarny, operator hermitowski, operatory rzutowe na podprzestrzenie własne, rozkład spektralny operatora, notacja dla widma dyskretnego i ciągłego.

V. Przestrzeń Hilberta stanów – postulaty mechaniki kwantowej

§1. *Przestrzeń stanów kwantowych układu* – wektor stanu, przestrzeń Hilberta, postulat I (o stanie układu),

obserwable fizyczne i odpowiadające im operatory hermitowskie, postulat II (o wynikach pomiaru obserwacji), ilustracja z cząstką swobodną, operator położenia i jego widmo, wektor stanu a funkcja falowa;

§2. *Funkcja falowa, postulaty pomiaru* – rozkład wektora stanu w danej reprezentacji stanów własnych operatora, współczynniki rozkładu jako składowe wektora stanu i jako funkcje falowe, postulat III (o prawdopodobieństwie otrzymania danego wyniku pomiaru), zespół statystyczny w mechanice kwantowej i interpretacja probabilistyczna, postulat IV (o stanie układu zaraz po pomiarze);

§3. *Ewolucja w czasie stanu kwantowego* – postulat V (o unitarnej ewolucji wektora stanu układu), operator unitarnej ewolucji, równanie Schrödingera dla wektora stanu, równanie Schrödingera dla operatora ewolucji i jego rozwiązanie dla hamiltonianu niezależnego od czasu, rozkład spektralny funkcji od operatora ($f(\hat{A}) = \sum f(a)|a\rangle\langle a|$);

6.2 Zadania na ćwiczenia

1. **Studnia potencjału:** Cząstka o masie m porusza się w jednowymiarowym potencjale: $V(x) = 0$ dla $|x| < a/2$ i $V(x) = V_0$ dla pozostałych x . Jest to tak zwana skończona studnia potencjału. Znaleźć wszystkie stany własne (dyskretnie i ciągłe, rozproszeniowe) dla tego problemu. Skorzystać z symetrii problemu, aby poklasyfikować rozwiązania. Dla stanów związanych omówić metodę graficznego znajdowania rozwiązań oraz wyznaczyć unormowanie. Zwrócić uwagę na związek pomiędzy liczbą węzłów funkcji falowej a liczbą kwantową. Dla stanów rozproszonych omówić problem degeneracji rozwiązań. Zwrócić uwagę na problem z unormowaniem w tym przypadku. Dla obu przypadków znaleźć rozwiązanie, gdy studnia redukuje się do potencjału typu delta Diraca. Przypomnieć operacyjne znaczenie symbolu delta Diraca.

2. **Nieskończona studnia z przegrodą:** W nieskończonej, jednowymiarowej studni potencjału, rozciągającej się na $(-a, a)$, znajduje się częściowo przepuszczalna przegroda: $U(x) = (\hbar^2/m)V_0\delta(x)$. Przedyskutować wymiar parametru V_0 . Zbadać wpływ przegrody na energie i funkcje własne cząstki w funkcji parametru V_0 . Dla cząstki w stanie $\psi(x) = (Ax$ dla $|x| < a$ i $\psi(x) = 0$ dla pozostałych x) wyznaczyć rozkład prawdopodobieństwa pomiaru energii. Jakie są stany zaraz po pomiarze? W tym problemie warunki zszycia wydedukować z całkowania równania Schrödingera wokół osobliwości delta.

3. **Transmisja przez prostokątną barierę:** Dla ruchu cząstki o masie m w potencjale $V(x) = V_0$ dla $0 < x < a$ wyznaczyć współczynniki przejścia i odbicia dla $E > 0$. Przeanalizować dwa przypadki. Omówić rozpraszanie rezonansowe. Z tych rozwiązań znaleźć granicę dla potencjału typu delta Diraca.

6.3 Zadania domowe

1. Jaką wartość musi przyjmować parametr $V_0 a < 0$ w rozpraszaniu na skończonej studni potencjału, aby

elektron o energii 1 eV zawrócił z prawdopodobieństwem 0,2? Oszacować to samo dla samolotu Boeing 474, gdy leci z prędkością 900 km/h. Potrzebne dane znaleźć samodzielnie.

2. Rozwiązać problem kwantowy ruchu cząstki w jednym wymiarze w potencjale $V(x) = 0$ dla $x < 0$, $V(x) = -V_0 < 0$ dla $0 < x < a$, oraz $V(x) = V_1 > 0$ dla $x > a$.

3. Cząstka o masie m , poruszająca się w jednym wymiarze, znajduje się w potencjale $V(x) = V_1\delta(x) + V_2\delta(x-a)$. Znaleźć wszystkie stany własne i przedyskutować rozwiązania w zależności od zmiany V_i .

7 Tydzień VI, 03–09.04.2017

7.1 Wykład

§4. *Obrazy w mechanice kwantowej* – transformacja obrazów, obraz Schrödingera, obraz Heisenberga, równanie ruchu Heisenberga dla operatorów; przykład: układ dwustanowy.

VI. Reprezentacje położenia i pędu

§1. *Reprezentacja położenia i reprezentacja pędu* – definicja reprezentacji położeniowej i pędowej przez odpowiednie równania własne dla operatorów położenia i pędu, elementy macierzowe przejścia do reprezentacji pędowej, dygresja o dystrybucji delta Diraca, unormowanie stanów własnych operatora położenia i pędu do delty Diraca;

§2. *Operator pędu w reprezentacji położeniowej* – reprezentacja operatora pędu w reprezentacji położeniowej, elementy macierzowe, działanie operatora pędu na stan i na funkcję falową;

§3. *Operator położenia i potencjału w reprezentacji położeniowej* – reprezentacja operatora położenia i operatora energii potencjalnej i kinetycznej, reprezentacja hamiltonianu w reprezentacji położeniowej;

§4. *Operatory w reprezentacji pędów* – operator pędu i położenia w reprezentacji pędowej, operator energii kinetycznej i potencjalnej oraz hamiltonian w reprezentacji pędowej.

Jeśli jest możliwość, to stosować notację Diraca na dalszych ćwiczeniach.

7.2 Zadania na ćwiczenia

1. **Własności operatorów**¹: Pokazać, że $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]$, $[x^n, p] = i\hbar nx^{n-1}$, $[x, p^n] = i\hbar np^{n-1}$, $[f(x), p] = i\hbar df(x)/dx$.

2. **Własności operatorów**: Pokazać, że $x^\dagger = x$, $(d/dx)^\dagger = -d/dx$, $(i d/dx)^\dagger = i d/dx$. Zbadać, czy operatory położenia, pędu oraz e^x , $e^{d/dx}$, e^p są hermitowskie.

3. **Własności operatorów**: Pokazać, że $(x d/dx)^\dagger = -x(d/dx) - 1$, $L_x^\dagger = L_x$, gdzie L_x jest x -ową składową operatora momentu pędu.

4. **Układ dwupoziomowy**: Na przykładzie układu z dwuwymiarową przestrzenią Hilberta (model spinu

1/2 lub fotonu z polaryzacją) pokazać działanie postulatów mechaniki kwantowej. Stany układu, wybór i zmiana bazy, operatory, diagonalizacja, nieprzemienność, ewolucja w czasie operatorów i stanów. (Notatki są w skrzynce. Chodzi mi o to, aby studenci samodzielnie poćwiczyli macierzową mechanikę kwantową na tym najprostszym a jednocześnie nietrywialnym przykładzie).

7.3 Zadania domowe

1. Pokazać, że $[A, B^n] = \sum_{j=0}^{n-1} B^j [A, B] B^{n-j-1}$, $[A^n, B] = \sum_{j=0}^{n-1} A^{n-j-1} [A, B] A^j$.

2. Pokazać, że jeśli $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, to $[F(\hat{A}), G(\hat{B})] = 0$, gdzie F i G są dowolnymi funkcjami operatorów.

3. Udowodnić wzór Bakera–Campbella–Hausdorffa.

4. Sprawdzić następujące reguły komutacyjne z operatorem energii $H = p^2/2m + V(x)$: a) $[H, p] = i\hbar dV/dx$, b) $[H, p^2] = 2i\hbar(dV/dx)p + \hbar^2 d^2V/dx^2$.

5. Układ w dwuwymiarowej przestrzeni Hilberta ma hamiltonian $H = iE_0(|0\rangle\langle 1| - |1\rangle\langle 0|)$. Znaleźć wartości i stany własne. W chwili początkowej układ jest w stanie $|0\rangle$. Znaleźć ewolucję stanu. Jakie są prawdopodobieństwa otrzymania poszczególnych energii? Obliczyć średnią energię i dyspersję w czasie.

8 Tydzień VII, 10–23.04.2017

obejmuje przerwę świąteczną. W środę 19.04 nie ma wykładu, bo jest piątkowy plan zajęć.

8.1 Wykład

VII. Operatory komutujące i niekomutujące:

§1. *Zasada nieoznaczoności* – dowód zasady nieoznaczoności na dowolnym stanie dla dowolnych dwóch niekomutujących operatorów, ilustracja dla operatorów położenia i pędu;

§2. *Operatory komutujące, zupełny zbiór komutujących obserwabli* – dowód twierdzenia o istnieniu wspólnych stanów własnych dla komutujących operatorów, omówienie zagadnienia jednoczesnego wyznaczania i mierzenia komutujących obserwabli w fizyce kwantowej.

VIII. Oscylator harmoniczny

§1. *Model klasycznego oscylatora harmonicznego* – prawo Hooke’a, częstość oscylatora, energia oscylatora;

§2. *Model kwantowego oscylatora harmonicznego* – hamiltonian układu, zmienne bezwymiarowe, asymptotyczne zachowanie funkcji falowej;

§3. *Operatory kreacji i anihilacji* – algebraiczne rozwiązanie, operatory kreacji i anihilacji, reguły komutacyjne, hamiltonian w nowych operatorach, operator liczby cząstek;

§4. *Algebraiczne wyznaczenie wartości własnych* – stany własne operatora liczby cząstek, działanie operatorów kreacji i anihilacji, zmiana n , operatory drabinkowe, konstrukcja stanu podstawowego, widmo operatora liczby cząstek i hamiltonianu;

§5. *Funkcje falowe oscylatora* – reprezentacja położeniowa operatorów kreacji i anihilacji, wyznaczenie

¹Symbol na oznaczanie operatora jest dalej pomijany, poza szczególnymi sytuacjami.

funkcji falowej stanu podstawowego w reprezentacji położeniowej, wyznaczenie funkcji falowych stanów wzbudzonych, wielomiany Hermite'a;

8.2 Zadania na ćwiczenia

1. **Obraz Heisenberga:** W obrazie Heisenberga znaleźć operatory $x(t)$ i $p(t)$ dla ruchu: a) swobodnego, b) pod wpływem stałej siły: $V(x) = -Fx$, c) w polu oscylatora harmonicznego: $V(x) = \frac{1}{2}m\omega_0^2x^2$, d) w polu oscylatora harmonicznego z polem elektrycznym: $V(x) = \frac{1}{2}m\omega_0^2x^2 + qE_0x \cos(\Omega t)$. (Można coś z tego do domu).

2. Korzystając z wyników poprzedniego zadania, znaleźć zależność dyspersji $\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$ od czasu dla ruchu a) swobodnego, b) w polu oscylatora harmonicznego. (Można coś z tego do domu).

3. Udowodnić, że jeśli w obrazie Heisenberga równość $[A(t), B(t)] = C(t)$ zachodzi dla pewnego $t = t_0$, to zachodzi dla dowolnego t .

4. **Unormowanie w pudle:** Jednym ze sposobów obejścia problemu normalizacji stanów swobodnych jest zamknięcie układu w skończonym obszarze przestrzeni. Rozważmy cząstkę o masie m , poruszającą się po okręgu o długości L . Znaleźć poziomy energetyczne i funkcje falowe tej cząstki. Znaleźć widmo operatora pędu dla tej cząstki. Obliczyć wartości średnie położenia i pędu oraz dyspersje położenia i pędu na n -tym stanie własnym. (Uwaga: zasada nieoznaczoności nie jest spełniona, gdyż operator położenia nie ma tej samej dziedziny co operator pędu. Nie jest to więc operator samosprzężony i nie są spełnione założenia twierdzenia Heisenberga).

5. **Zasada nieoznaczoności:** Znaleźć zasadę nieoznaczoności dla x i $f(p)$, w szczególności dla x i p^2 .

8.3 Zadania domowe

1. Obliczyć wartość średnią pędu na stanie własnym $|E\rangle$ operatora energii $H = p^2/2m + V(x)$. Obliczyć wartość średnią wielkości $xp + px$ na tym stanie.

2. Udowodnić, że na stanie własnym $|E\rangle$ operatora energii $H = p^2/2m + V(x)$ dyspersja pędu dana jest wzorem $\Delta_p^2 = 2m\langle T \rangle$, gdzie T jest operatorem energii kinetycznej.

3. Czy istnieją skończone wymiarowe macierze A i B spełniające kanoniczną relację komutacyjną $[A, B] = i\hbar$?

4. Wykazać, że $[A, B^{-1}] = B^{-1}[A, B]B^{-1}$. Sformułować zasadę nieoznaczoności dla A i B^{-1} , w szczególności dla p i $1/x$.

5. Znaleźć równanie ruchu $d\langle A(t)B(t) \rangle / dt$.

wektorów stanu w reprezentacji liczb obsadzeń, związek równania Schrödingera z algebrą liniową;

IX. Separowalne problemy w dwóch wymiarach

§1. *Cząstka w dwuwymiarowej, nieskończonej studni potencjału* – hamiltonian separowalny względem zmiennych przestrzennych, ogólna metoda rozwiązywania, redukcja problemu do problemów jednowymiarowych, rozwiązywanie dla nieskończonej studni, degeneracja rozwiązań, degeneracja wynikająca z symetrii i przypadku;

§2. *Oscylator harmoniczny w dwóch wymiarach* – separacja problemu, analiza degeneracji rozwiązań.

X. Moment pędu w mechanice kwantowej

§1. *Podstawowe wiadomości* – definicja operatora momentu pędu, reprezentacja położeniowa poszczególnych składowych, badanie relacji komutacyjnych dla składowych, operator L^2 i jego komutator z L_i , jednocześnie stany własne operatora L_z i L^2 i ich skwantowane wartości własne (bez wyprowadzenia), kwantyzacja i zasada nieoznaczoności, uogólniony moment pędu $J_i = L_i + S_i$;

9.2 Zadania na ćwiczenia

1. **Oscylator harmoniczny:** Znaleźć rozwiązanie dla wszystkich stanów własnych kwantowego oscylatora harmonicznego w reprezentacji położenia, badając asymptotyczne własności rozwiązań i stosując metodę Frobeniusa, rozwijania w szereg i obcinania go dla uzyskania rozwiązań unormowanych (fizycznych). Omówić podstawowe własności wielomianów Hermite'a, funkcję tworzącą, formuły rekurencyjne i na pochodne, unormowanie i jakieś przykłady na obliczenie wartości średniej, np. $\langle x^2 \rangle$.

2. **Energie średnie w oscylatorze:** Pokazać, że w stanie $|n\rangle$ zachodzi $\langle E_{\text{kin}} \rangle = \langle E_{\text{pot}} \rangle$. Sprawdzić zasadę nieoznaczoności na stanie $|n\rangle$.

3. **Stany koherentne:** Stan koherentny jest zdefiniowany jako stan własny operatora anihilacji $\hat{a}|z\rangle = z|z\rangle$. Znaleźć funkcje falowe tego stanu w reprezentacji położeniowej (notacja z Liboffa), unormować, obliczyć $\langle z|\hat{x}|z\rangle$, $\langle z|\hat{p}|z\rangle$, rozłożyć stan $|z\rangle$ w bazie $|n\rangle$. Pokazać, że stan koherentny można przedstawić jako $|z\rangle = \hat{D}(z)|0\rangle$, gdzie $\hat{D}(z) = \exp(z\hat{a}^\dagger - z^*a)$. Pokazać unitarność $\hat{D}(z)$, obliczyć całkę przekrycia $\langle z|z'\rangle$, sprawdzić zupełność $|z\rangle$. Wsk.: użyć tw. Bakera–Campbella–Hausdorffa – $\exp(\hat{X} + \hat{Y}) = \exp(\hat{X})\exp(\hat{Y})\exp(-[\hat{X}, \hat{Y}]/2)$ dla $[X, Y] = \text{const.}$ (Dowód jest w zadaniach domowych).

9 Tydzień VIII, 24–30.04.2017

9.1 Wykład

§6. *Elementy macierzowe operatorów* – wyznaczenie, jak działa operator kreacji i anihilacji wraz ze stałą, wyznaczenie elementów macierzowych operatora liczby cząstek, hamiltonianu, operatorów kreacji i anihilacji,

9.3 Zadania domowe

1. Niech cząstka, która porusza się w potencjale harmonicznym, znajduje się w stanie $\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_1(x, 0) + \Psi_2(x, 0))$, gdzie $\Psi_i(x, t)$ są stanami własnymi oscylatora harmonicznego. Znaleźć stan w dowolnej późniejszej chwili t oraz pokazać, że $\langle x \rangle$ oscyluje w czasie. Podać interpretację tego wyniku.

2. Istnieje kilka (kilkanaście) przykładów potencjałów oddziaływania, dla których równanie Schrödingera ma ściśle rozwiązanie w jednym wymiarze. Można te zagadnienia rozwiązać, badając asymptotyki i stosując metodę Frobeniusa tak jak dla oscylatora harmonicznego. Dla każdego problemu znajduje się jednak inne wielomiany ortogonalne. Proponuję wybrać i rozwiązać jeden z przykładów:

- $V(x) = V_0 \operatorname{ctg}^2(\pi x/a)$ dla $0 < x < a$,
- $V(x) = V_0 / \cos^2(x/a)$ dla $-\pi/2 < x < \pi/2$,
- $V(x) = V_0(\exp(-2x/a) - 2\exp(-x/a))$,
- $V(x) = V_0 / \cosh^2(x/a)$.

Podane problemy są trudne i warto sięgnąć do zaawansowanych podręczników i zbiorów zadań z mechaniki kwantowej, np. S. Flügge, *Practical Quantum Mechanics – Volume 1 and Volume 2* (Springer 1971) lub w polskim tłumaczeniu.

10 Tydzień IX, 01–07.05.2016

10.1 Wykład

nie odbył się z powodu przerw.

3. **Ewolucja w czasie stanu koherentnego:** Stanem początkowym oscylatora jest $|\Psi(0)\rangle = \exp(-g^2/2) \sum_{n=0}^{\infty} g^n / \sqrt{n!} |n\rangle$, $g \in \mathbb{R}$. Znaleźć $|\Psi(t)\rangle$, $\langle \hat{x}(t) \rangle$, $\langle \hat{p}(t) \rangle$. Warto pokazać ten sam wynik w różnych obrazach.

10.2 Zadania domowe

1. Pokazać, że stan koherentny wysyca zasadę nieoznaczoności Heisenberga.

2. Rozwiązać algebraicznie problem oscylatora w polu elektrycznym (przesunięty oscylator) z hamiltonianem $H = p^2/2m + Kx^2/2 + eFx$. Znaleźć energie, stany własne, średnie z x , x^2 , p i p^2 . Wskazać związek ze stanami koherentnymi. Wsk.: zastosować transformację $\hat{b} = \hat{a} + c$.

3. Oscylator jest w stanie $|\Psi(0)\rangle = (|n\rangle + |n+1\rangle)/\sqrt{2}$. Po jakim czasie będzie on w stanie ortogonalnym do $|\Psi(0)\rangle$? Obliczyć $\langle \hat{x}(t) \rangle$, $\langle \hat{p}(t) \rangle$, $\langle \hat{x}^2(t) \rangle$, $\langle \hat{p}^2(t) \rangle$. Sprawdzić zasadę nieoznaczoności Heisenberga.

4.* Pokazać na dowolnym stanie unormowanym, że $\hat{A}|\psi\rangle = \langle \psi|\hat{A}|\psi\rangle|\psi\rangle + \Delta A|\psi_{\perp}\rangle$, gdzie $\hat{A} = \hat{A}^{\dagger}$, $\langle \psi|\psi_{\perp}\rangle = 0$, ΔA jest dyspersją.

5.* Pokazać, że operator $a^{\dagger}$ nie ma unormowanych stanów (wektorów) własnych. Wsk.: dowód nie wprost, łac. *ad absurdum* (a.a.).

11 Tydzień X, 08–14.05.2017

11.1 Wykład

§2. Wartości własne operatora J – wyprowadzenie – operatory drabinkowe, relacje komutacyjne, algebraiczne wyznaczenie m i j , elementy macierzowe operatorów $J_{\pm}$;

§3. *Sztynny rotator kwantowy* – model izotropowego rotatora w mechanice klasycznej i kwantowej, omó-

wienie energii własnych i stanów własnych rotatora, widmo energetyczne i notacja spektroskopowa;

§4. *Funkcje własne operatorów L^2 i L_z* – wspólne sferyczne, zmiana bazy, postać operatora momentu pędu we współrzędnych sferycznych, harmoniki sferyczne (funkcje kuliste), normalizacja, rozwiązanie równania na L_z , rozwiązanie równania na L^2 , stowarzyszone wielomiany Legendre’a;

§5. *Wykresy biegunowe dla Y_l^m* – jawna postać harmonik sferycznych dla $l = 0, 1, 2$ i ich wykresy biegunowe, przykłady stanów dla rotatora;

§6. *Algebraiczny sposób otrzymywania harmonik sferycznych* – zastosowanie operatorów $\hat{L}_{\pm}$ do otrzymywania funkcji $\Theta_l^m(\theta)$.

XI. Zagadnienia ruchu w trzech wymiarach

§1. *Cząstka swobodna we współrzędnych kartezjańskich* – separacja równania Schrödingera w $d = 3$, rozwiązanie w postaci fali płaskiej, dyspersja, prędkość fazowa, paczka falowa, prędkość grupowa;

§2. *Cząstka swobodna we współrzędnych sferycznych* – pęd radialny, związek pomiędzy operatorem kwadratu momentu pędu, pędem radialnym i iloczynem skalarnym $\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}}$, związek $\hat{L}^2 = r^2 \hat{\mathbf{p}}^2 - r^2 \hat{p}_r^2$, hamiltonian swobodny we współrzędnych sferycznych;

§3. *Radialna funkcja falowa* – separacja zmiennych we współrzędnych sferycznych, równanie sferyczne Bessela, funkcje sferyczne Bessela i Neumanna;

§4 *Algebraiczne rozwiązanie równania Bessela* – podstawienie $R(x) = u(x)/x$, operatory drabinkowe $A = d/dx + (l+1)/x$, rozwiązanie rekurencyjne dla funkcji $u_l(x)$, rozwiązanie dla funkcji $R_l(x)$, funkcje sferyczne Bessela i Neumanna przez wielokrotne różniczkowanie;

§5. *Pomiar L^2 i L_z na fali płaskiej* – prawdopodobieństwo wyznaczenia m oraz l , rozkład fali płaskiej na harmoniki sferyczne, zastosowanie twierdzenia sumacyjnego dla harmonik sferycznych (bez dowodu), dyskusja otrzymanego rozwinięcia i możliwych wyników pomiaru momentu pędu.

11.2 Zadania na ćwiczenia

1. **Degeneracja rozwiązań dla oscylatora i jej znoszenie w $d = 2$:** Rozwiązać problem i zbadać, jak zmienia się degeneracja rozwiązań dla dwuwymiarowego, anizotropowego oscylatora harmonicznego. Potencjał ma postać $V(x, y) = K_x x^2/2 + K_y y^2/2$. Wyprowadzić ogólny wynik na stopień degeneracji w przypadku izotropowym.

2. **Degeneracja rozwiązań dla oscylatora i jej znoszenie w $d = 3$:** Rozwiązać problem i zbadać, jak zmienia się degeneracja rozwiązań dla trójwymiarowego, anizotropowego oscylatora harmonicznego. Wyprowadzić ogólny wynik na stopień degeneracji w przypadku izotropowym: $\omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega_0$. Przedyskutować zmianę stopnia degeneracji, gdy $\omega_x = \omega_y = \omega_{\perp}$ oraz $\omega_z = \omega_{||}$.

Moment pędu

1. Zasada nieoznaczoności dla momentu pędu: Dla stanu $|lm\rangle$ wyznaczyć $\langle L_z \rangle$, $\langle L_x \rangle$, $\langle L_y \rangle$, $\langle L^2 \rangle$, $\langle L_z^2 \rangle$, $\langle L_x^2 \rangle$, $\langle L_y^2 \rangle$. Sprawdzić zasadę nieoznaczoności dla $\sigma_{L_x} \sigma_{L_y}$ oraz zobaczyć, jakie musi być m , aby była ona minimalizowana.

2. Pokazać bezpośrednim rachunkiem, że $Y_1^{-1}(\theta, \phi) = \sqrt{3/8\pi} \sin \theta e^{-i\phi}$ jest unormowaną funkcją własną L^2 i L_z .

3. Rozkład prawdopodobieństwa $P(l, m)$: Dla funkcji falowej $\psi(r, \theta, \phi) = f(r)G(\theta, \phi)$, gdzie osobno część radialna i kątowa są unormowane, wyprowadzić wzór na obliczanie prawdopodobieństwa znalezienia l i m .

4. Częstka jest w stanie opisanym funkcją falową $\psi = f(r) \sin \theta$. Obliczyć $\langle L_z \rangle$, $\langle L_x \rangle$, $\langle L_y \rangle$, oraz $P(l = 2, m = 0)$, $P(l = 2, m = -1)$. Wsk.: pamiętać o unormowaniu.

5. Częstka jest w stanie opisanym funkcją falową: a) $\psi = A(ix + 2y - z)e^{-r^2/2a^2}$, b) $\psi = f(r)e^{2i\phi}$. Wyznaczyć $P(l, m)$.

6. Układ jest w stanie $|lm\rangle$. Dokonano pomiaru składowej $L_{z'}$, wektora $\mathbf{L}$ wzdłuż osi z' tworzącej kąt α z osią z . Jaka jest wartość średnia $L_{z'}$ i L_z^2 ?

7. Asymetryczny rotator o momentach bezwładności $I_x = I_y$ i I_z ma hamiltonian $H = (L_x^2 + L_y^2)/2I_x + L_z^2/2I_z$. Znaleźć funkcje własne i energie własne. Jaka jest średnia $\mathbf{L}$ przy pomiarze na dowolnym stanie własnym tego układu? W chwili $t = 0$ układ jest w stanie $|l = 3, m = 0\rangle$.

Uwaga: ten materiał z momentu pędu jest na dwa tygodnie (4 ćwiczenia).

11.3 Zadania domowe

1. Obliczyć średnie L_y na stanie $|\psi\rangle = |1, 1\rangle/\sqrt{2} - |1, 0\rangle/2 + |1, -1\rangle/2$, gdzie stany oznaczają się przez $|l, m\rangle$.

2. Dana jest funkcja falowa: a) $\psi = N \sin \theta \cos \phi$, b) $\psi = N(xy + yz)/r^2$. Zapisać to za pomocą harmonik. Znaleźć normalizację. Obliczyć średnie L^2 i L_z . Jakie wartości i z jakimi prawdopodobieństwami można znaleźć przy pomiarze L_z ?

3. Pokazać, że jeśli układ jest w stanie własnym operatora L_z , to: $\langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0$, $\langle L_x L_y + L_y L_x \rangle = 0$, $\langle L_x^2 \rangle = \langle L_y^2 \rangle$.

4.* Pokazać, że dla dowolnego potencjału $V(r)$ spełnione jest równanie ruchu dla momentu pędu $d\langle \mathbf{L} \rangle / dt = -\langle \mathbf{r} \times \nabla V \rangle$. Co będzie dla potencjału sferycznie symetrycznego $V(r)$?

radialne, efektywny potencjał, bariera centryfugalna, normalizacja funkcji radialnej, warunki brzegowe dla funkcji radialnej;

12.2 Zadania na ćwiczenia

1. (Dodatkowe z momentu pędu, jeśli dysponuje się czasem). Znaleźć reprezentacje funkcji kulistych we współrzędnych kartezjańskich i znaleźć reprezentację rzeczywistą tych funkcji. Przedyskutować wyniki dla $l = 0, 1, 2$, pokazując na ekranie wygląd odpowiednich orbitali.

Proszę dokończyć zadania z momentu pędu. Można wykorzystać też zadania domowe poniżej.

1. Znaleźć poziomy energetyczne i unormowane funkcje falowe cząstki o masie μ , poruszającej się w nieskończonej głębokiej, sferycznie symetrycznej studni potencjału: $V(r) = 0$ dla $r \leq R$ i $V(r) = \infty$ dla $r > R$. Dla cząstki w stanie s ($l = 0$) znaleźć $\langle r \rangle$, $\langle r^2 \rangle$, dyspersję, najbardziej prawdopodobne r oraz prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w odległości od centrum mniejszej od wartości najbardziej prawdopodobnej.

2. Znaleźć poziomy energetyczne i unormowane funkcje falowe cząstki o masie μ i o zerowym momencie pędu oraz poruszającej się w sferycznie symetrycznej jamce potencjału: $V(r) = -V_0 < 0$ dla $r \leq R$ i $V(r) = 0$ dla $r > R$. Znaleźć warunki, kiedy może nie istnieć stan związany.

12.3 Zadania domowe

1. Sztynny rotator kwantowy znajduje się w stanie opisanym funkcją falową $\psi(\theta, \phi) = A \sin^2 \theta \cos 2\phi$. Jakie wartości otrzyma się przy pomiarze L^2 i L_z ?

2. Sztynny rotator kwantowy znajduje się w stanie opisanym funkcją falową $\psi(\theta, \phi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l a_{lm} Y_l^m(\theta, \phi)$. Jakie jest prawdopodobieństwo, że przy pomiarze L^2 otrzyma się $\hbar^2 l(l+1)$? Jakie jest prawdopodobieństwo, że przy pomiarze L_z otrzyma się $\hbar m$?

3. Sztynny rotator kwantowy znajduje się w stanie z $l = 1$ i $m = 1$. Jakie jest prawdopodobieństwo, że w wyniku pomiaru L_x dostanie się $m = 0, \pm 1$? Wsk.: stan własny Y_1^1 rozłożyć na stany własne L_x – zauważając, że L^2 komutuje z L_x , więc l się nie zmienia. $X = aY_1^1 + bY_1^0 + cY_1^{-1}$.

12 Tydzień XI, 15–21.05.2017

12.1 Wykład

XII. Atom wodoru

§1. Zagadnienie dwóch cząstek – współrzędne względne i środka masy, masa całkowita i masa zredukowana, separacja problemu dla oddziaływań centralnych;

§2. Równanie radialne dla $V(r)$ – przejście dla zmiennej względnej do współrzędnych sferycznych, separacja równania na część kątową i radialną, równanie

13 Tydzień XII, 22–28.05.2017

13.1 Wykład

§3. Rozwiązanie dla atomu wodoropodobnego – atomy wodoropodobne, bezwymiarowe równanie radialne, zmienne bezwymiarowe i stałe, promień Bohra, stała Rydberga, asymptotyka równania radialnego, rozwinięcie Frobeniusa, urywanie szeregu, wielomiany Laguerre'a, liczby kwantowe (n, l, m) i ich zakresy zmienności, energia stanów własnych atomu wodoropodobnego, degeneracja, unormowanie, $n = 1, 2, 3$ funk-

cje falowe, gęstości prawdopodobieństwa znalezienia elektronu.

XIII. Rachunek zaburzeń

§1. *Rachunek zaburzeń dla stanów niezdegenerowanych, zaburzenie niezależne od czasu* – istota rachunku zaburzeń, rozwijanie rozwiązania względem parametru kontrolnego, warunek jednoznaczności rozwiązań, ortogonalność wszystkich poprawek do danego stanu niezaburzonego, szczegółowe wyprowadzenie wzorów na 1. i 2. rząd rachunku zaburzeń dla energii własnych i stanów własnych;

13.2 Zadania na ćwiczenia

(Potrzebne funkcje specjalne będą na wykładzie 23.05!)

1. *Atom wodoru*: Dla stanu $1s$ atomu wodoru obliczyć średnie $\langle r \rangle$, $\langle r^2 \rangle$, dyspersję rozkładu oraz najbardziej prawdopodobną wartość dla radialnego rozkładu prawdopodobieństwa $P(r) = |\psi|^2 r^2$.

2. Funkcją falową elektronu jest $\psi(r, \theta, \phi) = 1/81 \sqrt{2/\pi a_0^3} Z^{3/2} (6 - Zr/a_0)(Zr/a) \exp(-Zr/3a_0) \cos \theta$. Znaleźć n, l, m dla tego stanu. Zbudować inne funkcje falowe z $m \pm 1$. Znaleźć najbardziej prawdopodobną wartość r znalezienia elektronu.

3. *Twierdzenie Hellmanna–Feynmana* (np. w Wikipedii) – podać treść twierdzenia i je udowodnić.

4. Dla atomu wodoru obliczyć średnie $\langle 1/r^2 \rangle$, $\langle 1/r \rangle$, średnią z energii kinetycznej i średnią z energii potencjalnej na dowolnym stanie $|nlm\rangle$. Pokazać spełnianie twierdzenia o wirale.

Zasada wariacyjna

1. **Zasada wariacyjna**: Wyprowadzić (nie będzie na wykładzie) twierdzenie Ritz’a i sformułować zasadę wariacyjną dla stanu podstawowego.

2. **Ścisła energia stanu podstawowego**: Dla problemu oscylatora użyć następujących funkcji próbnych dla oszacowania energii stanu podstawowego: a) $\exp(-\alpha x^2)$, b) $x \exp(-\beta x^2)$, c) $1/(x^2 + \gamma^2)$.

3. **Przybliżona energia stanu podstawowego**: Cząstka o masie m porusza się w polu siły o potencjale $V(x) = F|x|$. Wyznaczyć górną granicę na energię stanu podstawowego przy użyciu funkcji próbnej $\exp(-\alpha|x|)$. Wsk.: $d\theta(x)/dx = \delta(x)$.

13.3 Zadania domowe

1. Rozwiązać zagadnienie sferycznie symetrycznego oscylatora harmonicznego z potencjałem $V(r) = \mu\omega^2 r^2/2$. Wyznaczyć energie własne i degenerację. Porównać rozwiązania z rozwiązaniami z przypadku oscylatora we współrzędnych kartezjańskich.

2. Z twierdzenia HF pokazać twierdzenie o wirale: $2\langle T \rangle = -\langle \mathbf{r} \cdot \mathbf{F} \rangle$, gdzie T i F są operatorami energii kinetycznej i siły, $\mathbf{F} = -\nabla V$. Zastosować wynik, gdy $V(\lambda \mathbf{r}) = \lambda^\nu V(\mathbf{r})$.

3. Znaleźć związek rekurencyjny Kramersa dla średniej $\langle r^s \rangle$ na stanie $|nlm\rangle$ atomu wodoru. Obliczyć różne średnie dla $s = 0, \pm 1, \pm 2$ i stąd dyspersję r .

(na zasadę wariacyjną)

1.* Rozważyć potencjał $V(x)$ o ciągłej pochodnej taki, że $V(x) < 0$ dla każdego x . Pokazać, że w takim

potencjale istnieje przynajmniej jeden stan związany. (Wsk.: użyć zasady wariacyjnej i gaussowskiej funkcji próbnej).

2. Znaleźć najlepsze oszacowanie dla oscylatora harmonicznego z dodatkowym potencjałem $U(x) = \kappa x^4$. Funkcję próbną z jednym parametrem wariacyjnym należy znaleźć samodzielnie.

3.* Na podstawie wyniku z zadania 5* z poprzedniego tygodnia pokazać, że minimalny czas, jaki jest potrzebny, aby układ kwantowy ewoluował z danego stanu $|\Psi\rangle$ do stanu $|\Psi_\perp\rangle$ (który jest ortogonalny do $|\Psi\rangle$) wynosi $T = h/4\Delta E$ – gdzie ΔE jest nieoznaczonością energii. Wsk.: AJP 60, 182 (1992).

14 Tydzień XIII, 29.05–04.06.2017

14.1 Wykład

§2. *Rachunek zaburzeń dla stanów zdegenerowanych, zaburzenie niezależne od czasu* – omówienie problemu i ilustracja dla stanu dwukrotnie zdegenerowanego, zagadnienie sekularne, wektory własne i znoszenie degeneracji (temat omówiony jakościowo i będzie analizowany na przykładach na ćwiczeniach);

§3. *Rachunek zaburzeń dla zaburzenia zależnego od czasu* – rozwinięcie rozwiązania w bazie stanów stacjonarnych ze współczynnikami zależnymi od czasu, układ równań różniczkowych na współczynniki, rozwinięcie rozwiązań na współczynniki w szereg perturbacyjny, rozwiązanie w pierwszym rzędzie, prawdopodobieństwo przejścia ze stanu l do stanu k w jednostce czasu;

§4. *Zaburzenie harmoniczne* – analiza zaburzenia harmonicznego, absorpcja i emisja rezonansowa, granice długich i krótkich czasów, złota reguła Fermiego.

14.2 Zadania na ćwiczenia

1. *Rachunek zaburzeń*: Cząstka o masie M porusza się w polu siły $M\omega^2 z^2/2$. Układ umieszczono w polu grawitacyjnym blisko powierzchni Ziemi. Traktując pole grawitacyjne jako małe zaburzenie, znaleźć poprawki do energii w pierwszym i drugim rzędzie rachunku zaburzeń. Porównać to rozwiązanie z rozwiązaniem ścisłym, otrzymanym przez liniową transformację kanoniczną.

2. W atomach wieloelektronowych wewnętrzne elektrony ekranują potencjał jądra atomowego. Opisuując ten efekt za pomocą potencjału Yukawy $U(r) = -(Ze^2/r) \exp(-r/d)$, obliczyć w pierwszym rzędzie rachunku zaburzeń względem $\hbar^2/mZd \ll 1$ poprawki do n -tego stanu energetycznego atomu wodoropodobnego. Wsk.: rozwinąć potencjał w szereg, biorąc 3 pierwsze wyrazy rozwinięcia. Kiedy to przybliżenie ma sens?

3. Znaleźć poprawki relatywistyczne (od energii kinetycznej) w atomie wodoru w 1. rzędzie rachunku zaburzeń. Wsk.: $T = \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4} - mc^2$ rozwinąć dla dużych c . $\langle \psi_{nlm} | p^4 | \psi_{nlm} \rangle = \langle p^2 \psi_{nlm} | p^2 \psi_{nlm} \rangle$, $p^2 |\psi\rangle = 2m(E_n - V(r))|\psi\rangle$ oraz tw. HF.

4. *Rachunek zaburzeń z degeneracją*: Wyznaczyć w pierwszym rzędzie rachunku zaburzeń poprawki do 2-wymiarowego oscylatora harmonicznego, zaburzonego potencjałem $V(x, y) = \kappa xy$. Rozwiązać równania dla $N = 1, 2, 3$. Porównać z rozwiązaniem ścisłym otrzymanym przez obrót układu współrzędnych o $\pi/4$.

5. *Efekt Starka*: Obliczyć w pierwszym rzędzie rachunku zaburzeń z degeneracją poprawki do energii atomu wodoru w stanie $n = 2$, umieszczonego w słabym polu elektrycznym skierowanym wzdłuż osi z . Wypisać odpowiadające tym energiom funkcje falowe. (Było na wykładzie).

6. *Oddziaływanie van der Waalsa*: Na przykładzie molekuly H_2 omówić powstawanie oddziaływań dalekiego zasięgu typu van der Waalsa. Skorzystać z rachunku zaburzeń w 2. rzędzie. Pominąć spin elektronów i zasadę Pauliego. Zadanie jest długie, więc chodzi jedynie o podanie zasadniczych kroków i pokazanie, że obniża się energia na skutek oddziaływań elektrostatycznych i tworzy się stan związany dwóch atomów.

14.3 Zadania domowe

1. Znaleźć do 2. rzędu rachunku zaburzeń poprawki do oscylatora harmonicznego zaburzanego potencjałem $k''x^4$.

2. Znaleźć poprawki do energii w pierwszym i drugim rzędzie rachunku zaburzeń do stanu podstawowego atomu wodoru, umieszczonego w słabym jednorodnym polu elektrycznym $\hat{\mathcal{E}} = \mathcal{E}\hat{z}$. Wyznaczyć polaryzowalność atomu, tj. $\alpha = -d^2\Delta E/d\mathcal{E}^2$.

3. Częstka o masie m znajduje się w trójwymiarowej, nieskończonej studni potencjału: $V(x, y, z) = 0$ dla $0 < x < L$, $0 < y < L$, $0 < z < L$ oraz $V = \infty$ w pozostałych przypadkach. Na cząstkę działa zaburzenie $U(x, y, z) = U_0 L^3 \delta(x - x_0) \delta(y - y_0) \delta(z - z_0)$. Znaleźć poprawki do energii w pierwszym rzędzie rachunku zaburzeń. Omówić sposób znoszenia degeneracji w zależności od zmian (x_0, y_0, z_0) .

15 Tydzień XIV, 05–11.06.2017

15.1 Wykład

XIV. Spin

§1. *Spin w mechanice kwantowej, operator spinu* – przypomnienie rozwiązań z $j = n/2$ dla zagadnienia momentu pędu, spinowe stopnie swobody, fermiony i bozony, operator spinu, algebra operatora spinu, reprezentacja macierzowa operatora spinu dla cząstek ze spinem $1/2$, macierze Pauliego;

§2. *Funkcja falowa cząstki swobodnej ze spinem* – przestrzeń stanów dla cząstek ze spinem, iloczyn tensorowy przestrzeni konfiguracyjnej i spinowej, spinory Pauliego, degeneracja stanów cząstki swobodnej;

§3. *Moment magnetyczny elektronu* – związek momentu magnetycznego ze spinem, magneton Bohra, hamiltonian Zeemana, omówienie doświadczenia Stern–Gerlacha.

XV. Struktura subtelna atomu wodoru

§1. *Całkowity moment pędu* – reprezentacja momentów niesprzężonych i reprezentacja momentów sprzężonych, wartości własne j i m_j w reprezentacji L-S (momentów sprzężonych), współczynniki Clebscha–Gordona (wzmianka), terminy widmowe i notacja spektroskopowa;

§2. *Oddziaływanie spin–orbita* – wprowadzenie oddziaływania spin–orbita i jego hamiltonianu;

§3. *Struktura subtelna atomu wodoru* – perturbacyjne uwzględnienie oddziaływania spin–orbita i poprawek relatywistycznych, poziomy energetyczne i ich degeneracja.

15.2 Zadania na ćwiczenia

Rachunek zaburzeń z czasem

(Wystarczy wybrać jedno lub dwa zadania na ćwiczenia, a ostatnie proszę przenieść do zadań domowych).

1. Atom wodoru w stanie podstawowym jest umieszczony w polu elektrycznym $\mathbf{E}(t) = E_0 \tau \mathbf{k} / (\tau^2 + t^2)$, skierowanym wzdłuż osi z . τ jest stałą o wymiarze czasu. Znaleźć prawdopodobieństwo, że po nieskończonym czasie atom znajdzie się w stanie wzbudzonym $2p$.

2. Atom wodoru w stanie podstawowym jest umieszczony w oscylującym polu elektrycznym $\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}_0 \sin(\omega t)$, gdzie częstość $\omega > m_e e^4 / 2\hbar^2$. Znaleźć prawdopodobieństwo na jednostkę czasu, że atom ulegnie jonizacji. Dla jakiej wartości ω prawdopodobieństwo to będzie maksymalne?

Spin

1. Częstka o spinie $1/2$ jest w stanie $|\psi\rangle = (1/\sqrt{5}) \begin{pmatrix} 2 \\ i \end{pmatrix}$. Jakie jest prawdopodobieństwo zmierzenia, że cząstka jest ze spinem w górę lub w dół względem osi z ? Jakie jest prawdopodobieństwo zmierzenia, że cząstka jest ze spinem w górę lub w dół względem osi y ?

2. Częstka o spinie $1/2$ znajduje się w polu magnetycznym $(0, 0, B_z)$ i jej energia opisywana jest hamiltonianem $H = -\mu_B B_z S_z$. W chwili $t = 0$ cząstka jest w stanie własnym $|+\rangle_x$ względem osi x . Znajdź stan układu w dowolnej chwili t . Jakie wyniki i z jakimi prawdopodobieństwami można dostać, mierząc S_x lub S_z w chwili t ?

3. Częstka o spinie $1/2$ znajduje się w polu magnetycznym $\mathbf{B} = B_0 \sin(\omega t) \hat{z}$. Wypisać hamiltonian układu. Jeśli w $t = 0$ układ jest w stanie $|+\rangle_y$, znaleźć prawdopodobieństwo, że mierząc S_y w chwili t , dostanie się $\hbar/2$.

4. Rozwiązać problem cząstki o spinie $1/2$ w stałym polu magnetycznym B_z wzdłuż osi z oraz oscylującym w czasie polu magnetycznym $B_x \sin(\omega t)$ wzdłuż osi x . Omówić w jakościowy sposób (czyli krótko) ideę NMR-u oraz zastosowania w fizyce i medycynie.

15.3 Zadania domowe

1. (Trudne) Udowodnić, że swobodny elektron nie może ani wyemitować, ani pochłoniąć fotonu.

2. Zadania 1–2 z rachunku zaburzeń z czasem rozwinąć na przypadek 3-wymiarowego oscylatora harmo-

nicznego o ładunku q . Rozważyć przejścia pomiędzy różnymi stanami i zastanowić się, kiedy elementy macierzowe nie są zerowe. (Wsk.: symetrie funkcji falowych).

Spin

1. Stanem cząstki o spinie $1/2$ jest $|\psi\rangle = (|+\rangle + |-\rangle)/\sqrt{2}$. Pokazać, że $\langle S_x S_y \rangle = 0$.

2. Stanem cząstki o spinie $1/2$ jest $|\psi\rangle = (|+\rangle + 2|-\rangle)/\sqrt{5}$. Obliczyć ΔS_x .

3. Cząstka o spinie $1/2$ jest w stanie $|\psi\rangle = (1/\sqrt{5}) \begin{pmatrix} i \\ 2 \end{pmatrix}$. Jakie jest prawdopodobieństwo zmierzenia, że cząstka jest ze spinem w górę lub w dół względem osi z ? Jakie jest prawdopodobieństwo zmierzenia, że cząstka jest ze spinem w górę lub w dół względem osi x ?

4. Cząstka o spinie $1/2$ znajduje się w polu magnetycznym $(0, 0, B_z)$ i jej energia opisywana jest hamiltonianem $H = -\mu_B B_z S_z$. W chwili $t = 0$ cząstka jest w stanie własnym $|+\rangle_x$ względem osi x . Obliczyć $\langle S_z(t) \rangle$ i $\langle S_x(t) \rangle$ w chwili t .

5. Cząstka o spinie $1/2$ znajduje się w polu magnetycznym $\mathbf{B} = B_0 \cos(\omega t)\hat{x} + B_0 \sin(\omega t)\hat{y}$. W chwili $t = 0$ jest w stanie $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$. Wypisać hamiltonian układu. Znaleźć transformację pozwalającą zapisać hamiltonian w postaci niezależnej od czasu. Jakie jest prawdopodobieństwo, że w chwili t układ znajduje się w stanie $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$? Kiedy to prawdopodobieństwo jest dokładnie równe jeden?

16 Tydzień XV, 11–14.06.2017

16.1 Wykład

XVI. Analiza stanów rozproszonych

§1. *Stany niezwiązane* – przypomnienie definicji stanów związanych i niezwiązanych, unormowanie do gęstości cząstek, równanie ciągłości w trzech wymiarach i jego całkowita interpretacja, przypomnienie współczynników przejścia i odbicia;

§2. *Rozpraszanie w trzech wymiarach, przekroje czynne* – geometria typowego eksperymentu rozpraszającego, gęstość prądu cząstek padających i przechodzących, definicja różniczkowego przekroju czynnego, całkowity przekrój czynny, amplituda rozpraszania, związek amplitudy rozpraszania z przekrojami czynnymi;

§3. *Przekrój czynny na rozpraszanie w przybliżeniu Borna* – zastosowanie złotej reguły Fermiego w problemie rozpraszania, gęstość stanów cząstek w pudle z okresowymi warunkami brzegowymi, wyprowadzenie wzoru na przekrój czynny, specyfikacja wzoru dla rozpraszania elastycznego na potencjałach centralnych, omówienie zakresu zastosowań;

XVII. Cząstka naładowana w polu magnetycznym

§1. *Hamiltonian* – pole magnetyczne w hamiltonianie klasycznym i kwantowym, wybór cechowania;

§2. Cząstka swobodna w stałym, jednorodnym polu – cechowanie Landaua i symetryczne rozwiązanie w cechowaniu Landaua, poziomy Landaua i degeneracja;

§3. *Zmiana funkcji falowej pod wpływem transformacji cechowania* – niezmienniczość cechowania w mechanice kwantowej;

§4. *Efekt Aharonova–Bohma* – postawienie problemu ruchu cząstki w obszarze niejednostajnym zawierającym nieskończony solenoid, wpływ potencjału wektorowego na strukturę interferencyjną, wynik doświadczenia i wnioski.

XVIII. Stany mieszane, operator statystyczny

§1. *Stany czyste i mieszane w mechanice kwantowej* – definicja i przykłady;

§2. *Operator statystyczny* – operator statystyczny, macierz gęstości, definicja, własności, związek ze średnimi, przykład dla wiązki cząstek o spinie $1/2$;

§3. *Mieszanie koherentne i niekoherentne* – rola diagonalnych i pozadiagonalnych elementów macierzy gęstości;

§4. *Ewolucja w czasie operatora statystycznego* – równanie von Neumanna;

§5. *Pomiar idealny w stanie mieszanym* – prawdopodobieństwo otrzymania wyniku, stan układu zaraz po pomiarze, wzór Krausa, przykład: pomiary położenia zespołu cząstek w nieskończonej studni $d = 1$.

16.2 Zadania na ćwiczenia

Proszę o dokończenie zaległych zadań lub zrobienie dodatkowych zadań z serii domowych, według uznania i zapotrzebowania w grupach. Można poświęcić czas na konsultacje i przygotowanie do egzaminu pisemnego.

17 Literatura

- R.L. Liboff, *Wstęp do mechaniki kwantowej*, PWN, Warszawa 1987, ISBN 83-0106516-8.
- R. Shankar, *Mechanika kwantowa*, PWN, Warszawa 2006, ISBN 83-0114701-6.
- J.B. Brojan, J. Mostowski, K. Wódkiewicz, *Zbiór zadań z mechaniki kwantowej*, PWN, Warszawa 1978.

18 Skrócona lista tematów

- I. Historia mechaniki kwantowej
- II. Podstawowe koncepcje mechaniki kwantowej
- III. Równanie Schrödingera bez czasu
- IV. Notacja Diraca
- V. Przestrzeń Hilberta stanów – postulaty mechaniki kwantowej
- VI. Reprezentacje położeń i pędów
- VII. Operatory komutujące i niekomutujące
- VIII. Oscylator harmoniczny
- IX. Separowalne problemy w dwóch wymiarach
- X. Moment pędu w mechanice kwantowej
- XI. Zagadnienia ruchu w trzech wymiarach
- XII. Atom wodoru
- XIII. Rachunek zaburzeń
- XIV. Spin
- XV. Struktura subtelna atomu wodoru
- XVI. Analiza stanów rozproszonych
- XVII. Cząstka naładowana w polu magnetycznym
- XVIII. Stany mieszane, operator statystyczny

19 Dłuższa lista tematów

- I. Historia mechaniki kwantowej
 - §1. Trzy dekady powstawania nowej teorii, ważne daty
- II. Podstawowe koncepcje mechaniki kwantowej
 - §1. Równanie Schrödingera
 - §2. Rozwiązanie równania Schrödingera
 - §3. Interpretacja probabilistyczna i normalizacja
 - §4. Rozwijanie funkcji falowej i znajdowanie współczynników rozwinięcia
 - §5. Faza funkcji falowej
 - §6. Operatory w mechanice kwantowej
 - §7. Pęd a transformata Fouriera, zasada nieoznaczoności
 - §8. Prawo zachowania prawdopodobieństwa
- III. Równanie Schrödingera bez czasu
 - §1. Częstka swobodna
 - §2. Stany związane i rozproszeniowe w $d = 1$
 - §3. Parzystość rozwiązań
 - §4. Twierdzenie Ehrenfesta
- IV. Notacja Diraca
 - §1. Przestrzeń wektorowa (liniowa)
 - §2. Operatory w przestrzeni wektorowej
- V. Przestrzeń Hilberta stanów – postulaty mechaniki kwantowej
 - §1. Przestrzeń stanów kwantowych układu
 - §2. Funkcja falowa, postulaty pomiaru
 - §3. Ewolucja w czasie stanu kwantowego
 - §4. Obrazy w mechanice kwantowej
- VI. Reprezentacje położeń i pędów
 - §1. Reprezentacja położenia i reprezentacja pędu
 - §2. Operator pędu w reprezentacji położeniowej
 - §3. Operator położenia i potencjału w reprezentacji położeniowej
 - §4. Operatory w reprezentacji pędów
- VII. Operatory komutujące i niekomutujące
 - §1. Zasada nieoznaczoności
 - §2. Operatory komutujące, zupełny zbiór komutujących obserwabli
- VIII. Oscylator harmoniczny
 - §1. Model klasycznego oscylatora harmonicznego
 - §2. Model kwantowego oscylatora harmonicznego
 - §3. Operatory kreacji i anihilacji
 - §4. Algebraiczne wyznaczenie wartości własnych
 - §5. Funkcje falowe oscylatora
 - §6. Elementy macierzowe operatorów
- IX. Separowalne problemy w dwóch wymiarach
 - §1. Częstka w dwuwymiarowej, nieskończonej studni potencjału
 - §2. Oscylator harmoniczny w dwóch wymiarach
- X. Moment pędu w mechanice kwantowej
 - §1. Podstawowe wiadomości
 - §2. Wartości własne operatora J – wprowadzenie
- §3. Szytywny rotator kwantowy
- §4. Funkcje własne operatorów L^2 i L_z
- §5. Wykresy biegunowe dla Y_l^m
- §6. Algebraiczny sposób otrzymywania harmonik sferycznych
- XI. Zagadnienia ruchu w trzech wymiarach
 - §1. Częstka swobodna we współrzędnych kartezjańskich
 - §2. Częstka swobodna we współrzędnych sferycznych
 - §3. Radialna funkcja falowa
 - §4. Algebraiczne rozwiązanie równania Bessela
 - §5. Pomiar L^2 i L_z na fali płaskiej
- XII. Atom wodoru
 - §1. Zagadnienie dwóch cząstek
 - §2. Równanie radialne dla $V(r)$
 - §3. Rozwiązanie dla atomu wodoropodobnego
- XIII. Rachunek zaburzeń
 - §1. Rachunek zaburzeń dla stanów niezdegenerowanych, zaburzenie niezależne od czasu
 - §2. Rachunek zaburzeń dla stanów zdegenerowanych, zaburzenie niezależne od czasu
 - §3. Rachunek zaburzeń dla zaburzenia zależnego od czasu
 - §4. Zaburzenie harmoniczne
- XIV. Spin
 - §1. Spin w mechanice kwantowej, operator spinu
 - §2. Funkcja falowa cząstki swobodnej ze spinem
 - §3. Moment magnetyczny elektronu
- XV. Struktura subtelna atomu wodoru
 - §1. Całkowity moment pędu
 - §2. Oddziaływanie spin-orbita
 - §3. Struktura subtelna atomu wodoru
- XVI. Analiza stanów rozproszeniowych
 - §1. Stany niezwiązane
 - §2. Rozpraszanie w trzech wymiarach, przekroje czynne
 - §3. Przekrój czynny na rozpraszanie w przybliżeniu Borna
- XVII. Częstka naładowana w polu magnetycznym
 - §1. Hamiltonian
 - §2. Częstka swobodna w stałym, jednorodnym polu
 - §3. Zmiana funkcji falowej pod wpływem transformacji cechowania
 - §4. Efekt Aharonova-Bohma
- XVIII. Stany mieszane, operator statystyczny
 - §1. Stany czyste i mieszane w mechanice kwantowej
 - §2. Operator statystyczny
 - §3. Mieszaniny koherentne i niekoherentne
 - §4. Ewolucja w czasie operatora statystycznego
 - §5. Pomiar idealny w stanie mieszanym

(Łącznie 69 zagadnień).

20 Pełna lista tematów

I. Historia mechaniki kwantowej

§1. *Trzy dekady powstawania nowej teorii, ważne daty* – wzmianka o: promieniowaniu ciała doskonale czarnego, zjawisku fotoelektrycznym, cieple właściwym ciał stałych, zjawisku Comptona, twierdzeniu Earnshawa i stabilności atomów i molekuł, widmie atomów. (Doświadczenie Sterna–Gerlacha, rozpad alfa, interferencja światła – będą później).

II. Podstawowe koncepcje mechaniki kwantowej

§1. *Równanie Schrödingera* – stan układu, funkcja falowa, równanie Schrödingera z czasem w $d = 1$ i $d = 3$ (dalej $d = 1$), stała Plancka, interpretacja probabilistyczna funkcji falowej, zasada superpozycji rozwiązań;

§2. *Rozwiązywanie równania Schrödingera* – separacja zmiennych, stany stacjonarne, wymiar funkcji falowej;

§3. *Interpretacja probabilistyczna i normalizacja* – normalizacja funkcji falowej, znajdowanie prawdopodobieństwa lokalizacji cząstki;

§4. *Rozwijanie funkcji falowej i znajdowanie współczynników rozwinięcia* – baza ze względu na energię, baza zupełna, rozwinięcie w szereg, kolaps (redukcja) funkcji falowej przy pomiarze energii, iloczyn skalarny (ozn. (ϕ, ψ)), baza ortonormalna, interpretacja współczynników rozwinięcia;

§5. *Faza funkcji falowej* – faza globalna, równoważność rozwiązań, faza względna, (przykład: cząstka w nieskończonej studni potencjału, interpretacja rozwiązań, rozkład stanu $\sin^3(2\pi x/a)$, możliwe wyniki i prawdopodobieństwa otrzymania wartości energii przy jej pomiarze, analiza wyników w Mathematicie);

§6. *Operatory w mechanice kwantowej* – nieformalna definicja $\hat{A}$, operatory liniowe, równanie własne, funkcje własne, wartości własne, operator położenia i operator pędu, wartość oczekiwana (średnia) operatora $\langle \hat{A} \rangle$ na stanie i interpretacja, gdy znane są wartości własne, dyspersja, wariancja, operator hermitowski i jego wartości własne, operator energii, hamiltonian, pojęcie komutatora i nieprzemienność operatorów;

§7. *Pęd a transformata Fouriera, zasada nieoznaczoności* – transformaty Fouriera ($1/\sqrt{2\pi}$ w obu transformatach), tw. Parsewala i interpretacja probabilistyczna funkcji falowej $\phi(p)$, dowód zasady nieoznaczoności $\Delta x \Delta p$ (bez komutatora);

§8. *Prawo zachowania prawdopodobieństwa* – gęstość prądu prawdopodobieństwa, równanie ciągłości, interpretacja.

III. Równanie Schrödingera bez czasu

§1. *Cząstka swobodna* – fale płaskie, energia kinetyczna i pęd, degeneracja, problem z unormowaniem, idea konstrukcji paczki falowej, prędkości grupowa i fazowa;

§2. *Stany związane i rozproszeniowe w $d = 1$* – stany związane (zlokalizowane, unormowane z dyskretną energią), stany rozproszeniowe (rozciągłe, nieunormowalne w zwykłym sensie, z ciągłą energią z continuum), rozwiązywanie problemu z odcinkami płaskim potencjałem, reguły zszywania rozwiązań, defini-

cja współczynnika przejścia i odbicia, przykład rozpraszania na schodku dla fali o energii $E < V$; przykład: rozpraszanie na schodku potencjału.

§3. *Parzystość rozwiązań* – operator parzystości, stany i energie własne operatora parzystości, klasyfikacja stanów własnych ze względu na parzystość dla hamiltonianu komutującego z operatorem parzystości;

§4. *Twierdzenie Ehrenfesta* – wyprowadzenie równań ruchu na średnie położenia i średni pęd, związek mechaniki kwantowej z mechaniką klasyczną.

IV. Notacja Diraca

§1. *Przestrzeń wektorowa (liniowa)* – notacja Diraca w definicjach nieskończone wymiarowych przestrzeni wektorowych i iloczynu skalarnego, baza w przestrzeni wektorowej, rozkład wektora w bazie, rozkład operatora jednostkowego, zupełność bazy;

§2. *Operatory w przestrzeni wektorowej* – reprezentacja macierzowa operatora, zmiana bazy, sprzężenie hermitowskie, operator unitarny, operator hermitowski, operatory rzutowe na podprzestrzeń własne, rozkład spektralny operatora, notacja dla widma dyskretnego i ciągłego.

V. Przestrzeń Hilberta stanów – postulaty mechaniki kwantowej

§1. *Przestrzeń stanów kwantowych układu* – wektor stanu, przestrzeń Hilberta, postulat I (o stanie układu), obserwable fizyczne i odpowiadające im operatory hermitowskie, postulat II (o wynikach pomiaru obserwabli), ilustracja z cząstką swobodną, operator położenia i jego widmo, wektor stanu a funkcja falowa;

§2. *Funkcja falowa, postulaty pomiaru* – rozkład wektora stanu w danej reprezentacji stanów własnych operatora, współczynniki rozkładu jako składowe wektora stanu i jako funkcje falowe, postulat III (o prawdopodobieństwie otrzymania danego wyniku pomiaru), zespół statystyczny w mechanice kwantowej i interpretacja probabilistyczna, postulat IV (o stanie układu zaraz po pomiarze);

§3. *Ewolucja w czasie stanu kwantowego* – postulat V (o unitarnej ewolucji wektora stanu układu), operator unitarnej ewolucji, równanie Schrödingera dla wektora stanu, równanie Schrödingera dla operatora ewolucji i jego rozwiązanie dla hamiltonianu niezależnego od czasu, rozkład spektralny funkcji od operatora ($f(\hat{A}) = \sum f(a)|a\rangle\langle a|$);

§4. *Obrazy w mechanice kwantowej* – transformacja obrazów, obraz Schrödingera, obraz Heisenberga, równanie ruchu Heisenberga dla operatorów; przykład: układ dwustanowy.

VI. Reprezentacje położenia i pędów

§1. *Reprezentacja położenia i reprezentacja pędu* – definicja reprezentacji położeniowej i pędowej przez odpowiednie równania własne dla operatorów położenia i pędu, elementy macierzowe przejścia do reprezentacji pędowej, dygresja o dystrybucji delta Diraca, unormowanie stanów własnych operatora położenia i pędu do delty Diraca;

§2. *Operator pędu w reprezentacji położeniowej* – reprezentacja operatora pędu w reprezentacji położeniowej, elementy macierzowe, działanie operatora pędu na stan i na funkcję falową;

§3. *Operator położenia i potencjału w reprezentacji położeniowej* – reprezentacja operatora położenia i operatora energii potencjalnej i kinetycznej, reprezentacja hamiltonianu w reprezentacji położeniowej;

§4. *Operatory w reprezentacji pędów* – operator pędu i położenia w reprezentacji pędowej, operator energii kinetycznej i potencjalnej oraz hamiltonian w reprezentacji pędowej.

VII. Operatory komutujące i niekomutujące

§1. *Zasada nieoznaczoności* – dowód zasady nieoznaczoności na dowolnym stanie dla dowolnych dwóch niekomutujących operatorów, ilustracja dla operatorów położenia i pędu;

§2. *Operatory komutujące, zupełny zbiór komutujących obserwabli* – dowód twierdzenia o istnieniu wspólnych stanów własnych dla komutujących operatorów, omówienie zagadnienia jednoczesnego wyznaczania i mierzenia komutujących obserwabli w fizyce kwantowej.

VIII. Oscylator harmoniczny

§1. *Model klasycznego oscylatora harmonicznego* – prawo Hooke’a, częstość oscylatora, energia oscylatora;

§2. *Model kwantowego oscylatora harmonicznego* – hamiltonian układu, zmienne bezwymiarowe, asymptotyczne zachowanie funkcji falowej;

§3. *Operatory kreacji i anihilacji* – algebraiczne rozwiązanie, operatory kreacji i anihilacji, reguły komutacyjne, hamiltonian w nowych operatorach, operator liczby cząstek;

§4. *Algebraiczne wyznaczenie wartości własnych* – stany własne operatora liczby cząstek, działanie operatorów kreacji i anihilacji, zmiana n , operatory drabinkowe, konstrukcja stanu podstawowego, widmo operatora liczby cząstek i hamiltonianu;

§5. *Funkcje falowe oscylatora* – reprezentacja położeniowa operatorów kreacji i anihilacji, wyznaczenie funkcji falowej stanu podstawowego w reprezentacji położeniowej, wyznaczenie funkcji falowych stanów wzbudzonych, wielomiany Hermite’a;

§6. *Elementy macierzowe operatorów* – wyznaczenie, jak działa operator kreacji i anihilacji wraz ze stałą, wyznaczenie elementów macierzowych operatora liczby cząstek, hamiltonianu, operatorów kreacji i anihilacji, wektorów stanu w reprezentacji liczb obsadzeń, związek równania Schrödingera z algebrą liniową;

IX. Separowalne problemy w dwóch wymiarach

§1. *Cząstka w dwuwymiarowej, nieskończonej studni potencjału* – hamiltonian separowalny względem zmiennych przestrzennych, ogólna metoda rozwiązywania, redukcja problemu do problemów jednowymiarowych, rozwiązania dla nieskończonej studni, degeneracja rozwiązań, degeneracja wynikająca z symetrii i przypadku;

§2. *Oscylator harmoniczny w dwóch wymiarach* – separacja problemu, analiza degeneracji rozwiązań.

X. Moment pędu w mechanice kwantowej

§1. *Podstawowe wiadomości* – definicja operatora momentu pędu, reprezentacja położeniowa poszczególnych składowych, badanie relacji komutacyjnych dla składowych, operator L^2 i jego komutator z L_i , jedno-

czesne stany własne operatora L_z i L^2 i ich skwantowane wartości własne (bez wyprowadzenia), kwantyzacja i zasada nieoznaczoności, uogólniony moment pędu $J_i = L_i + S_i$;

§2. *Wartości własne operatora J* – wyprowadzenie – operatory drabinkowe, relacje komutacyjne, algebraiczne wyznaczenie m i j , elementy macierzowe operatorów $J_{\pm}$;

§3. *Sztywny rotator kwantowy* – model izotropowego rotatora w mechanice klasycznej i kwantowej, omówienie energii własnych i stanów własnych rotatora, widmo energetyczne i notacja spektroskopowa;

§4. *Funkcje własne operatorów L^2 i L_z* – współrzędne sferyczne, zmiana bazy, postać operatora momentu pędu we współrzędnych sferycznych, harmoniki sferyczne (funkcje kuliste), normalizacja, rozwiązanie równania na L_z , rozwiązanie równania na L^2 , stowarzyszone wielomiany Legendre’a;

§5. *Wykresy biegunowe dla Y_l^m* – jawna postać harmonik sferycznych dla $l = 0, 1, 2$ i ich wykresy biegunowe, przykłady stanów dla rotatora;

§6. *Algebraiczny sposób otrzymywania harmonik sferycznych* – zastosowanie operatorów $\hat{L}_{\pm}$ do otrzymywania funkcji $\Theta_l^m(\theta)$.

XI. Zagadnienia ruchu w trzech wymiarach

§1. *Cząstka swobodna we współrzędnych kartezjańskich* – separacja równania Schrödingera w $d = 3$, rozwiązanie w postaci fali płaskiej, dyspersja, prędkość fazowa, paczka falowa, prędkość grupowa;

§2. *Cząstka swobodna we współrzędnych sferycznych* – pęd radialny, związek pomiędzy operatorem kwadratu momentu pędu, pędem radialnym i iloczynem skalarnym $\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}}$, związek $\hat{L}^2 = r^2 \hat{\mathbf{p}}^2 - r^2 \hat{p}_r^2$, hamiltonian swobodny we współrzędnych sferycznych;

§3. *Radialna funkcja falowa* – separacja zmiennych we współrzędnych sferycznych, równanie sferyczne Bessela, funkcje sferyczne Bessela i Neumanna;

§4. *Algebraiczne rozwiązanie równania Bessela* – podstawienie $R(x) = u(x)/x$, operatory drabinkowe $A = d/dx + (l+1)/x$, rozwiązanie rekurencyjne dla funkcji $u_l(x)$, rozwiązanie dla funkcji $R_l(x)$, funkcje sferyczne Bessela i Neumanna przez wielokrotne różniczkowanie;

§5. *Pomiar L^2 i L_z na fali płaskiej* – prawdopodobieństwo wyznaczenia m oraz l , rozkład fali płaskiej na harmoniki sferyczne, zastosowanie twierdzenia sumacyjnego dla harmonik sferycznych (bez dowodu), dyskusja otrzymanego rozwinięcia i możliwych wyników pomiaru momentu pędu.

XII. Atom wodoru

§1. *Zagadnienie dwóch cząstek* – współrzędne względne i środka masy, masa całkowita i masa zredukowana, separacja problemu dla oddziaływań centralnych;

§2. *Równanie radialne dla $V(r)$* – przejście dla zmiennej względnej do współrzędnych sferycznych, separacja równania na część kątową i radialną, równanie radialne, efektywny potencjał, bariera centryfugalna, normalizacja funkcji radialnej, warunki brzegowe dla funkcji radialnej;

§3. *Rozwiązanie dla atomu wodoropodobnego* – atomy wodoropodobne, bezwymiarowe równanie ra-

dialne, zmienne bezwymiarowe i stałe, promień Bohra, stała Rydberga, asymptotyka równania radialnego, rozwinięcie Frobeniusa, urywanie szeregu, wielomiany Laguerre'a, liczby kwantowe (n, l, m) i ich zakresy zmienności, energia stanów własnych atomu wodoropodobnego, degeneracja, unormowanie, $n = 1, 2, 3$ funkcje falowe, gęstości prawdopodobieństwa znalezienia elektronu.

XIII. Rachunek zaburzeń

§1. *Rachunek zaburzeń dla stanów niezdegenerowanych, zaburzenie niezależne od czasu* – istota rachunku zaburzeń, rozwijanie rozwiązania względem parametru kontrolnego, warunek jednoznaczności rozwiązań, ortogonalność wszystkich poprawek do danego stanu niezaburzonego, szczegółowe wyprowadzenie wzorów na 1. i 2. rząd rachunku zaburzeń dla energii własnych i stanów własnych;

§2. *Rachunek zaburzeń dla stanów zdegenerowanych, zaburzenie niezależne od czasu* – omówienie problemu i ilustracja dla stanu dwukrotnie zdegenerowanego, zagadnienie sekularne, wektory własne i znoszenie degeneracji (temat omówiony jakościowo i będzie analizowany na przykładach na ćwiczeniach);

§3. *Rachunek zaburzeń dla zaburzenia zależnego od czasu* – rozwinięcie rozwiązania w bazie stanów stacjonarnych ze współczynnikami zależnymi od czasu, układ równań różniczkowych na współczynniki, rozwinięcie rozwiązań na współczynniki w szereg perturbacyjny, rozwiązanie w pierwszym rzędzie, prawdopodobieństwo przejścia ze stanu l do stanu k w jednostce czasu;

§4. *Zaburzenie harmoniczne* – analiza zaburzenia harmonicznego, absorpcja i emisja rezonansowa, granice długich i krótkich czasów, złota reguła Fermiego.

XIV. Spin

§1. *Spin w mechanice kwantowej, operator spinu* – przypomnienie rozwiązań z $j = n/2$ dla zagadnienia momentu pędu, spinowe stopnie swobody, fermiony i bozony, operator spinu, algebra operatora spinu, reprezentacja macierzowa operatora spinu dla cząstek ze spinem $1/2$, macierze Pauliego;

§2. *Funkcja falowa cząstki swobodnej ze spinem* – przestrzeń stanów dla cząstek ze spinem, iloczyn tensorowy przestrzeni konfiguracyjnej i spinowej, spinory Pauliego, degeneracja stanów cząstki swobodnej;

§3. *Moment magnetyczny elektronu* – związek momentu magnetycznego ze spinem, magneton Bohra, hamiltonian Zeemana, omówienie doświadczenia Stern-Gerlacha.

XV. Struktura subtelna atomu wodoru

§1. *Całkowity moment pędu* – reprezentacja momentów niesprzężonych i reprezentacja momentów sprzężonych, wartości własne j i m_j w reprezentacji L-S (momentów sprzężonych), współczynniki Clebscha-Gordona (wzmianka), termy widmowe i notacja spektroskopowa;

§2. *Oddziaływanie spin-orbita* – wprowadzenie oddziaływania spin-orbita i jego hamiltonianu;

§3. *Struktura subtelna atomu wodoru* – perturbacyjne uwzględnienie oddziaływania spin-orbita i po-

prawek relatywistycznych, poziomy energetyczne i ich degeneracja.

XVI. Analiza stanów rozproszonych

§1. *Stany niezwiązane* – przypomnienie definicji stanów związanych i niezwiązanych, unormowanie do gęstości cząstek, równanie ciągłości w trzech wymiarach i jego całkowita interpretacja, przypomnienie współczynników przejścia i odbicia;

§2. *Rozpraszanie w trzech wymiarach, przekroje czynne* – geometria typowego eksperymentu rozpraszeniowego, gęstość prądu cząstek padających i przechodzących, definicja różniczkowego przekroju czynnego, całkowity przekrój czynny, amplituda rozpraszania, związek amplitudy rozpraszania z przekrojami czynnymi;

§3. *Przekrój czynny na rozpraszanie w przybliżeniu Borna* – zastosowanie złotej reguły Fermiego w problemie rozpraszania, gęstość stanów cząstek w pudle z periodycznymi warunkami brzegowymi, wyprowadzenie wzoru na przekrój czynny, specyfikacja wzoru dla rozpraszania elastycznych na potencjałach centralnych, omówienie zakresu zastosowań;

XVII. Cząstka naładowana w polu magnetycznym

§1. *Hamiltonian* – pole magnetyczne w hamiltonianie klasycznym i kwantowym, wybór cechowania;

§2. *Cząstka swobodna w statym, jednorodnym polu* – cechowanie Landaua i symetryczne rozwiązanie w cechowaniu Landaua, poziomy Landaua i degeneracja;

§3. *Zmiana funkcji falowej pod wpływem transformacji cechowania* – niezmienniczość cechowania w mechanice kwantowej;

§4. *Efekt Aharonova-Bohma* – postawienie problemu ruchu cząstki w obszarze niejednostajnym zawierającym nieskończony solenoid, wpływ potencjału wektorowego na strukturę interferencyjną, wynik doświadczenia i wnioski.

XVIII. Stany mieszane, operator statystyczny

§1. *Stany czyste i mieszane w mechanice kwantowej* – definicja i przykłady;

§2. *Operator statystyczny* – operator statystyczny, macierz gęstości, definicja, własności, związek ze średnimi, przykład dla wiązki cząstek o spinie $1/2$;

§3. *Mieszanie koherentne i niekoherentne* – rola diagonalnych i pozadiagonalnych elementów macierzy gęstości;

§4. *Ewolucja w czasie operatora statystycznego* – równanie von Neumanna;

§5. *Pomiar idealny w stanie mieszanym* – prawdopodobieństwo otrzymania wyniku, stan układu zaraz po pomiarze, wzór Krausa, przykład: pomiary położenia zespołu cząstek w nieskończonej studni $d = 1$.