Mechanika Kwantowa R 2016/2017, Seria 5

Zadanie 1 Wprowadzamy nowe zmienne $\xi = \frac{x+y}{\sqrt{2}}$, $\chi = \frac{x-y}{\sqrt{2}}$. Laplasjan w tych zmiennych wygląda tak samy jak w x, y (obrót układu współrzędnych), a potencjał sie separuje: $V(\xi, \chi) = \frac{k_1}{2}\xi^2 + \frac{k_2}{2}\chi^2$. Stąd mamy ogólne rozwiązanie:

$$\psi_{n_1,n_2}(x,y) = \psi_{n_1}[(x+y)/\sqrt{2}]\psi_{n_2}[(x-y)/\sqrt{2}],$$

gdzie ψ_{n_i} rozwiązania dla jednwymiarowego oscylatora harmonicznego z częstością własną $\omega_i = \sqrt{\frac{k_i}{m}}$. Odpowiednia energia:

$$E_{n_1,n_2} = \hbar\omega_1(n_1 + \tfrac{1}{2}) + \hbar\omega_2(n_2 + \tfrac{1}{2}).$$

Degeneracja będzie się pojawiać gdy ω_1/ω_2 jest liczbą wymierną. Gdy $\omega_1 = \omega_2$ mamy dla poziomu o energii $E_n = \hbar\omega(n+1)$ mamy $n+1$ krotną degenerację.

Zadanie 2 Szukamy stanów związanych, czyli $E < 0$. Intuicja: jeśli ma być jakiś stan związany to należy go szukać dla $l = 0$ (dla $l > 0$ mamy dodatkowy człon "odśrodkowy" w potencjale który czyni potencjał efektywnie płytszym). W obszarze $r \leq a$:

$$R_I(r) = A\frac{\sin kr}{kr}, \quad k = \sqrt{\frac{2m(V_0+E)}{\hbar^2}}$$

gdyż odrzucamy podobnie jak w poprzednim zadaniu rozwiązanie wybuchające w $r = 0$. W obszarze $r > a$ mamy

$$R_{II}(r) = B\frac{e^{k'r}}{r} + C\frac{e^{-k'r}}{r}, \quad k' = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}$$

Kładziemy $B = 0$ aby nie mieć rozwiązania wybuchającego w $r \to \infty$. Zszywamy funkcję i pochodną i dostajemy warunek

$$-ka\cot ka = k'a, \quad k'a = \sqrt{\frac{2mV_0^2a^2}{\hbar^2} - k^2a^2}$$

Analizując powyższe równanie graficznie (przecięcie funkcji $-x\cot x$ z okręgiem o promieniu $\sqrt{2mV_0^2a^2/\hbar^2}$) widzimy, że będzie co najmniej jedno rozwiązanie gdy $\sqrt{\frac{2mV_0^2a^2}{\hbar^2}} > \frac{\pi}{2}$.

Zadanie 3 W obszarze $a < r < b$ mamy ogólne rozwiązanie postaci:

$$\psi(r) = A\frac{\sin kr}{r} + B\frac{\cos kr}{r}$$

Nakładamy warunek $\psi(a) = \psi(b) = 0$. Otrzymujemy:

$$\psi(r) = C\frac{\sin[k(r-a)]}{r}, \quad k(b-a) = n\pi.$$

Warunek unormowania:

$$4\pi C^2 \int_0^\infty \mathrm{d}r\, r^2 \left(\frac{\sin[k(r-a)]}{r}\right)^2 = 2\pi(b-a)C^2 = 1$$

Czyli $C = \frac{1}{\sqrt{2\pi(b-a)}}$ a dopuszczalne energie:

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2m(b-a)^2}.$$

Zadanie 4 Analizując równanie Schroedingera na radialną zależność funkncji falowej w potencjałach symetrycznych,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2 r\psi}{dr^2} + V(r)r\psi = Er\psi$$

widać, że obecnośc delty Diraca będzie prowadzić do takiego samego skoku pochodnej radialnej jak to były w przypadku jednowymiarowym jeśli rozważay funkcje $u(r) = r\psi(r)$. Szukamy stanów związanych, $E < 0$. Zapisujemy więc radialną funkcję falową w obu obszarach:

$$\psi(r) = \begin{cases} A\frac{\sinh kr}{r} + & r < R \\ C\frac{e^{-kr}}{r} & r > R \end{cases}$$

gdzie $k = \sqrt{2m|E|/\hbar^2}$ i odrzuciliśmy rozwiązanie wybuchające w $r = \infty$ oraz w $r = 0$. Warunek zszycia funkcji falowych oraz skoku pochodnej prowadzi do równań:

$$\begin{aligned} &A\sinh kR = Ce^{-kR} \\ &Ak\cosh kR + kCe^{-kR} = \frac{2m\lambda R}{\hbar^2}Ce^{-kR}. \end{aligned}$$

Rozwiazując równania dochodzimy:

$$k = \frac{m\lambda R}{\hbar^2}(1 - e^{-2kr}).$$

Aby istniało rozwiązanie funkcja po prawej stronie musi mieć w $k = 0$ pochodna wiekszą niż 1, stąd warunek: $\frac{2m\lambda R}{\hbar^2} > 1$.

Zadanie 5 Stała normalizacyjna $A = \sqrt{\frac{3\alpha^3}{8\pi}}$. Wygodnie jest zapisać osobno unormowaną część kątową funkcji falowej $\psi(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\sin\theta\cos\varphi$. Możemy teraz rozpisać tę funkcje jako:

$$\psi(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\sin\theta\frac{1}{2}(e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{1,1}(\theta,\varphi) - Y_{1,-1}(\theta,\varphi)).$$

Widać z ego rozkładu, że mierząc całkowity moment pędu jedyna możliwa to uzyskania wartość to $l = 1$, a mierząc rzut na oś z mamy równe prawdopodobieństwo zmierzenia $m = \pm 1$.

Zadanie 6 Dla $l = 1$, operator L_y zapisany w bazie własnej L_z, $|l,m\rangle$ ma postać:

$$L_y = \frac{i\hbar}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix},$$

Wartości własne są oczywiście postaci $\hbar, 0, -\hbar$. Odpowiadające im stany własne:

$$|+\rangle_y = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 \\ i\sqrt{2} \\ -1 \end{bmatrix}, \quad |0\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad |-\rangle_y = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 \\ -i\sqrt{2} \\ -1 \end{bmatrix},$$

Odpowiednie prawdopodobieństwa wynoszą:

$$p_+ = |_y\langle+|\psi\rangle|^2 = \frac{1}{2},\ p_0 = 0\ p_- = \frac{1}{2}.$$

Zadanie 7 Zapisując stany własne oscylatora harmonicznego w postaci $|n_x, n_y, n_z\rangle$, widzimy, że dla drugiego poziomu wzbudzonego $n_x + ny + n_z = 2$ mamy 6 stanów:

$$|0,0,2\rangle, |0,1,1\rangle, |0,2,0\rangle, |1,0,1\rangle, |1,1,0\rangle, |2,0,0\rangle.$$

Operator rzutu momentu pędu na oś z ma postać:

$$L_z = xp_y - yp_x = \frac{\hbar}{i}(a_x^\dagger a_y - a_y^\dagger a_x),$$

gdzie a_i sa operatorami anihilacji związanymi z kierunkiem i. Zapisując operator L_z w tej bazie otrzymujemy następującą macierz:

$$L_z = \frac{\hbar}{i}\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & -\sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 \end{bmatrix}$$

Macierz ta ma następujące wartości własne: $m = 2, 1, 0, 0, -1, -2$. Widać stąd, że przestrzeń musi się w takim razie składać z 5-cio wymiarowej przestrzeni odpowiadającej $l = 2$ oraz jednowymiarowej przestrzeni odpowiadającej $l = 0$. Wszystkie stany własne poza tymi odpowiadającymi $m = 0$ jednoznacznie można otrzymać z rozkładu własnego powyższej macierzy:

$$|l = 2, m = 2\rangle = \frac{1}{2}(|0,2,0\rangle - i\sqrt{2}|1,1,0\rangle - |2,0,0\rangle)$$
$$|l = 2, m = 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1,0,1\rangle + i|0,1,1\rangle)$$
$$|l = 2, m = -1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1,0,1\rangle - i|0,1,1\rangle)$$
$$|l = 2, m = 1\rangle = \frac{1}{2}(|0,2,0\rangle + i\sqrt{2}|1,1,0\rangle - |2,0,0\rangle)$$

Aby zidentyfikować stany $|l = 2, m = 0\rangle$ od $|l = 0, m = 0\rangle$ można albo zapisać operator kwadratu całkowitego momentu pędu L^2 albo co łatwiejsze podziałać operatorem $L_- = L_x + iL_y$ na stan $|l = 2, m = 1\rangle$ co da nam stan $|l = 2, m = 0\rangle$ a wtedy jednoznacznie zidentyfikujemy też $|l = 0, m = 0\rangle$ jako stan ortogonalny do wszystkich pozostałych. Mamy

$$L_- = L_x - iL_y = \frac{\hbar}{i}(a_y^\dagger a_z - a_z^\dagger a_y - ia_z^\dagger a_x + ia_x^\dagger a_z).$$

Działając na $|l=2,m=1\rangle$ dostajemy:

$$L_-|l=2,m=1\rangle = \frac{\hbar}{i\sqrt{2}}(|1,1,0\rangle + \sqrt{2}i|0,2,0\rangle - \sqrt{2}i|0,0,2\rangle - i\sqrt{2}|0,0,2\rangle - |1,1,0\rangle + i\sqrt{2}|2,0,0\rangle)$$

Czyli:

$$|l=2,m=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}(|2,0,0\rangle - 2|0,0,2\rangle + |0,2,0\rangle),$$

Z czego wynika, że:

$$|l=0,m=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|2,0,0\rangle + |0,0,2\rangle + |0,2,0\rangle).$$

Widać, że tak jak być powinno stan z $l=0$ nie wyróżnia żadnego z kierunków.

Zadanie 8 Niech $|m_1,m_2\rangle$ będzie bazą stanów własnych oepratorów spinu s_z poszczególnych cząstek: $s_{z,1}|m_1,m_2\rangle = \hbar m_1|m_1,m_2\rangle$, $s_{z,2}|m_1,m_2\rangle = \hbar m_2|m_1,m_2\rangle$. Szukamy bazy $|s,m\rangle$ takiej, że $S_z|s,m\rangle = \hbar m|s,m\rangle$, $S^2|s,m\rangle = \hbar^2 s(s+1)|s,m\rangle$, gdzie $\vec{S} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2$, ... Oczywiste jest że najwyższy spin $s=2$ (pozatym spodziewamy się spinów $s=1$ i $s=0$). Dla tego spinu jedyny stan który będzie miał $m=2$ to: $|s=2,m=2\rangle = |m_1=1,m_2=1\rangle$ gdy oba rzuty spinów skierowane w tę samą stronę. Stan $|s=2,m=1\rangle$ uzyskamy działając operatorem S_- na stan $|s=2,m=2\rangle$. Z jednej strony $S_-|s=2,m=2\rangle = 2\hbar|s=2,m=1\rangle$, z drugiej $S_-|s=2,m=2\rangle = (s_{-,1}+s_{-,2})|1,1\rangle = \hbar\sqrt{2}(|1,0\rangle + |0,1\rangle)$. Stąd dostajemy: $|s=2,m=1\rangle = (|1,0\rangle + |0,1\rangle)/\sqrt{2}$. Postępując dalej w ten sposób uzyskamy wszytskie stany $|s=2,m\rangle$:

$$\begin{aligned}
|s=2,m=2\rangle &= |1,1\rangle \\
|s=2,m=1\rangle &= (|1,0\rangle + |0,1\rangle)/\sqrt{2} \\
|s=2,m=0\rangle &= (|1,-1\rangle + 2|0,0\rangle + |-1,1\rangle)/\sqrt{6} \\
|s=2,m=-1\rangle &= (|-1,0\rangle + |0,-1\rangle)/\sqrt{2} \\
|s=2,m=-2\rangle &= |-1,-1\rangle
\end{aligned}$$

Chcąc teraz znaleźć stan $|s=1,m=1\rangle$. W ramach podprzestrzeni o $m=1$, czyli podprzestrzeni rozpiętej przez $|1,0\rangle$ i $|0,1\rangle$ szukamy stany ortogonalnego do $|s=2,m=1\rangle$. Jest to $|s=1,m=1\rangle = (|1,0\rangle - |0,1\rangle)/\sqrt{2}$. Pozostałe stany $|s=1,m\rangle$ dostajemy działając operatorem obniżającym S_- otrzymując:

$$\begin{aligned}
|s=1,m=1\rangle &= (|1,0\rangle - |0,1\rangle)/\sqrt{2} \\
|s=1,m=0\rangle &= (|1,-1\rangle - |-1,1\rangle)/\sqrt{2} \\
|s=1,m=-1\rangle &= (|-1,0\rangle - |0,-1\rangle)/\sqrt{2}
\end{aligned}$$

Pozostaje ostatni stan ortogonalny do $|s=2,m=0\rangle, |s=1,m=0\rangle$ i żyjący w podprzestrzeni o $m=0$:

$$|s=0,m=0\rangle = (|1,-1\rangle - |0,0\rangle + |-1,1\rangle)/\sqrt{3}.$$

Zadanie 9 Operator momentu pędu na kierunek $\vec{n}$ ma postać: $L_{\vec{n}} = \vec{L} \cdot \vec{n} = \sin\theta_0 \cos\varphi_0 L_x + \sin\theta_0 \sin\varphi_0 L_y + \cos\theta_0 L_z$. Korzystamy z faktu, że $L_x = (L_+ + L_-)/2$, $L_y = (L_+ - L_-)/2i$, a jednocześnie wiemy jak działają operatory $L_\pm$ na stany $|l,m\rangle$: $L_+|l,m\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m+1)}|l,m+1\rangle$, $L_-|l,m\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m-1)}|l,m - 1\rangle$. Stąd mamy:

$$\langle l,m|L_{\vec{n}}|l,m\rangle = \cos\theta_0 \hbar m$$

Liczymy teraz:

$$\langle l,m|L_{\vec{n}}^2|l,m\rangle = \langle l,m| \left[\frac{\sin\theta_0}{2}\left(e^{-i\varphi_0}L_+ + L_- e^{i\varphi_0}\right) + \cos\theta_0 L_z\right]^2 |l,m\rangle =$$

$$\hbar^2 \left[m^2\cos^2\theta_0 + \frac{\sin^2\theta_0}{2}(l(l+1) - m^2)\right] \quad (1)$$

Więc dyspersja

$$\Delta L_{\vec{n}} = \hbar\sqrt{\sin^2\theta_0[l(l+1) - m^2]/2}$$

Zadanie 10 Korzystając z pstaci stanów własnych atomu wodoru, które zapisujemy jako $|n,l,m\rangle$ mamy:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1,0,0\rangle + A\sqrt{3}(-i|2,1,1\rangle + |2,1,-1\rangle + \sqrt{7}|2,1,0\rangle)$$

Stąd mamy, że $A = 1/(3\sqrt{6})$ i stan ma postać:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1,0,0\rangle + \frac{1}{3\sqrt{2}}(-i|2,1,1\rangle + |2,1,-1\rangle + \sqrt{7}|2,1,0\rangle)$$

Prawdopodobieństwo pomiaru $l = 0$ i $l = 1$ wynosi $1/2$. Licząc gęstości prawdopodobienstwa w r możemy sumować gęstości od poszczególnych wkładów odpowiadającym różnym l z odpowiednimi wagami (pamiętamy o r^2 z Jacobianu).

$$\rho(r) = r^2\left(\frac{1}{2}\frac{4}{a^3}e^{-\frac{2r}{a}} + \frac{1}{2}\frac{1}{(2a)^3}\frac{r^2}{3a^2}e^{-\frac{r}{a}}\right) = \frac{r^2}{a^3}\left(2e^{-\frac{2r}{a}} + \frac{r^2}{48a^2}e^{-\frac{r}{a}}\right)$$

Maksimum tej funkcji możemy znaleźc jedynie numerycznie. Wiemy, że wszystko się będzie skalowało liniowo z a wiec wstawiamy $a = 1$ maksymalizujmy numerycznie i stwierdzamy, że najbardziej prawdopodobna odległość to $r_+ = 1.048a$. Funkcja falowa w chwili t ma postać:

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1,0,0\rangle e^{iR_0 t/\hbar} + \frac{1}{3\sqrt{2}}(-i|2,1,1\rangle + |2,1,-1\rangle + \sqrt{7}|2,1,0\rangle)e^{iR_0 t/4\hbar}$$

gdzie $R_0 = 13.6eV$ stała Rydberga. Jeśli w chwili t wykonano pomiar L_z dajacy wynik $\hbar$ oznacza to, że stan został zrzutowany na $|2,1,1\rangle$.

Zadanie 11 Podstawiamy $z = r\cos\theta$, $x = r\sin\theta\cos\varphi$, $y = r\sin\theta\sin\varphi$ i otrzymujemy:

$$\psi(r,\theta\varphi) = \mathcal{N}e^{-r/a}\left(\cos\theta + i\sqrt{3/2}\sin^2\theta\cos 2\varphi\right)$$

Rozpoznajemy obecność harmonik sferycznych $Y_{10} = \sqrt{3/4\pi}\cos\theta$, $Y_{2\pm2} = \sqrt{15/32\pi}\sin^2\theta e^{\pm 2i\varphi}$. Ignorując, częśc radialną funkcji falowej piszemy unormowaną funkcję falową w kątach θ, φ:

$$\psi(\theta,\varphi) = A[\sqrt{4\pi/3}Y_{10}(\theta,\varphi) + i\sqrt{3/2}\sqrt{32\pi/15}(Y_{22}+Y_{2-2})/2] = \frac{1}{\sqrt{11}}(Y_{10}\sqrt{5} + i(Y_{22}+Y_{2,-2})\sqrt{3})$$

Stąd widać jakie są prawdopodobieństwa:

$$P(1,0) = 5/11, P(2,2) = P(2,-2) = 3/11.$$

Zadanie 12 Wyznaczamy stałą normalizacyjną z warunku:

$$A^2 4\pi\int_0^\infty r^2 e^{-2r/a} = 1$$

co daje $A = 1/\sqrt{\pi a^3}$. Unormowany fragment kątowy funkcji falowej ma postać $\psi(\theta,\varphi) = e^{2i\varphi}/\sqrt{4\pi}$. Widzimy, że funkcja ma dobrze określony rzut momentu pędu na oś z, $m = 2$, a więc szukając rozkładu na harmoniki sferyczne możemy się ograniczyć do $Y_{l,2}$, $l \geq 2$. Aby obliczyć amplitudy rozkładu $\psi = \sum_{l\geq 2} c_l Y_{l,2}$ musimy umieć liczyć:

$$c_l = \int \mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi\sin\theta Y^*_{l,2}\psi(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-2)!}{(l+2)!}}\int \mathrm{d}\theta\sin\theta P^2_l(\cos\theta),$$

gdzie P_l^2 są stowarzyszonymi wielomianami Legendra, które wyrażają się przez wielomiany Legendre'a poprzez $P_l^2(\cos\theta) = \sin^2\theta\frac{d^2}{dw^2}P_l(w)\Big|_{w=\cos\theta}$. Znamy funkcje tworzącą $P_l(w)$: $\sqrt{1-2sw+s^2} = \sum_l P_l(w)s^l$, to nam by pozwoliło liczyć całki z $P_l(w)$, ale my chcemy liczyć

$$\int \mathrm{d}\theta\sin\theta P_l^2(cos\theta) = \int \mathrm{d}w_{-1}^1 = \int_{-1}^1 (1-w^2)\frac{d^2}{dw^2}P_l(w)$$

Różniczkując dwukrotnie funkcję tworząca $P_l(w)$ po w mamy:

$$\frac{3s}{(1-2sw+s^2)^{5/2}} = \sum_l \frac{d^2 P_l(w)}{dw^2}s^l$$

Teraz możemy znaleźć f. tworzącą dla stowarzyszonych wielomianó Legendra P_l^2:

$$\int_{-} 1^1 \mathrm{d}(1-w^2)frac3s(1-2sw+s^2)^{5/2} = \frac{3s^2(1-w^2)}{1-2sw+s^2} = \sum_{l=2}^\infty P_l^2(w)s^l$$

Interesuje nas $\int_{-1}^1 \mathrm{d}w, P_l^2(w)$ więc całkujemy powyższą f. tworzącą po w i patrzymy na wyraz stojący przy potędze s^l:

$$\int_{-1}^1 \mathrm{d}w\,\frac{3s^2(1-w^2)}{1-2sw+s^2} = \frac{4s^2}{1-s^2}$$

Rozwijając w szereg $1/(1-s^2)$ widzimy, że przy potędze s^l stoi współczynnik 4 (dla l parzystych) i 0 (dla l nieparzystych). Stąd ostatecznie

$$c_l = \begin{cases} 2\sqrt{\frac{(2l+1)(l-2)!}{(l+2)!}} & \text{dla } l \text{ parzystych} \\ 0 & \text{dla } l \text{ nieparzystych} \end{cases}$$

Odpowiednie prawdopodobieństwa:

$$P(l,2) = \begin{cases} 4\frac{(2l+1)(l-2)!}{(l+2)!} & \text{dla } l \text{ parzystych} \\ 0 & \text{dla } l \text{ nieparzystych} \end{cases}$$