[M]echanika kwantowa pojedynczej cząstki (nierelatywistycznej)

① Stany:

$|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ – przestrzeń Hilberta

wektor stanu (ket)

Iloczyn skalarny: $\langle\phi|\psi\rangle \in \mathbb{C}$

Interpretacja: amplituda prawdopodobieństwa przejścia ze stanu $|\psi\rangle$ do stanu $|\phi\rangle$

Warunek normalizacji:

$$\sum_n |\langle\phi_n|\psi\rangle|^2 = 1 \qquad |\langle\phi_n|\psi\rangle|^2 = p_n$$

prawdopodobieństwo uzyskania w wyniku pomiaru stanu $|\phi_n\rangle$

ket: $|\psi\rangle \rightarrow$ „wektor kolumnowy"

bra: $\langle\phi| \rightarrow$ „wektor wierszowy"

② Obserwable $\longrightarrow$ operator hermitowski w $\mathcal{H}$

Sprzężenie hermitowskie: $\langle\hat{A}^+\phi|\psi\rangle = \langle\phi|\hat{A}\psi\rangle$

Własności:

1° $(\lambda\hat{A} + \eta\hat{B})^+ = \lambda^*\hat{A}^+ + \eta^*\hat{B}^+$, $\hat{A}, \hat{B}$ – operatory , $\lambda, \eta \in \mathbb{C}$

2° $(\hat{A}^+)^+ = \hat{A}$

3° $(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+\hat{A}^+$

Operator hermitowski to taki dla którego $\hat{A}^+ = \hat{A}$,

$\hat{A}$ – ma stany własne i wektory własne.

…wnanie własne dla operatora hermitowskiego:

$$\hat{A}|\psi_\alpha\rangle = w_\alpha|\psi_\alpha\rangle$$

stany własne

↳ dozwolone wyniki pomiaru dla obserwabli odpowiadającej $\hat{A}$.

np. $\hat{H}|\psi_\alpha\rangle = E_\alpha|\psi_\alpha\rangle$

Dowolny stan możemy przedstawić jako kombinację stanów własnych $\hat{A}$:

$$|\phi\rangle = \sum_\alpha c_\alpha|\psi_\alpha\rangle \;,$$

gdzie $\quad c_\alpha = \langle\psi_\alpha|\phi\rangle$

stąd mamy w szczególności:

$$\hat{A}|\phi\rangle = \hat{A}\sum_\alpha c_\alpha|\psi_\alpha\rangle = \sum_\alpha c_\alpha \hat{A}|\psi_\alpha\rangle =$$

$$= \sum_\alpha c_\alpha w_\alpha|\psi_\alpha\rangle = \sum_\alpha w_\alpha|\psi_\alpha\rangle\langle\psi_\alpha|\phi\rangle$$

czyli

$$\hat{A} = \sum_\alpha w_\alpha \underbrace{|\psi_\alpha\rangle\langle\psi_\alpha|}_{\text{operator rzutowy na stan } |\psi_\alpha\rangle}$$

<u>Komutator</u> $\quad [\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$

dla $[\hat{A},\hat{B}] \neq 0$ nie można jednocześnie „zmierzyć obserwabli" reprezentowanych przez operatory $\hat{A}$ i $\hat{B}$ → zasada nieoznaczoności Heisenberga

Szczególną rolę w mechanice kwantowej pełni operator energii – hamiltonian

$\to$ generuje ewolucję czasową: $\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle}$

równanie Schrödingera.

W standardowym sformułowaniu MK szczególną rolę grają stany własne operatora położenia i pędu:

$|\vec{r}\rangle \to \hat{\vec{r}}|\vec{r}\rangle$ (stan w którym cząstka ma określone położenie)

$|\vec{p}\rangle \to \hat{\vec{p}}|\vec{p}\rangle$ (stan w którym cząstka ma określony pęd)

Funkcja falowa odpowiadająca stanowi $|\phi\rangle$:

$$\phi(\vec{r}) := \langle \vec{r}|\phi\rangle$$

Niech $\phi(\vec{r})$ – f. falowa (unormowana), wtedy

$|\phi(\vec{r})|^2$ – gęstość prawdopodobieństwa ... $P(\vec{r})$

$$1 = \int d\vec{r}\, P(\vec{r}) = \int d\vec{r}\, |\phi(\vec{r})|^2 = \int d\vec{r}\, \underbrace{\langle\phi|\vec{r}\rangle}_{\phi^*(\vec{r}) = \langle r|\psi\rangle^*}\langle\vec{r}|\phi\rangle =$$

$$= \langle\phi|\underbrace{\int d\vec{r}\, |\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|}_{id}\phi\rangle = \langle\phi|\phi\rangle \Rightarrow \boxed{\int d\vec{r}\, |\vec{r}\rangle\langle\vec{r}| = id}$$

zupełność bazy.

Ogólniej: $\langle\psi|\psi\rangle = 1$

$$1 = \sum_\nu \langle\nu|\psi\rangle^* \langle\nu|\psi\rangle = \sum_\nu |\nu\rangle\langle\nu| = id$$

Ile wynosi $\langle \vec{r} | \vec{r}' \rangle$?

$$\psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \psi \rangle = \langle \vec{r} | \underbrace{\int d\vec{r}' | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' |}_{id} \psi \rangle = \int d\vec{r}' \langle \vec{r} | \vec{r}' \rangle \underbrace{\langle \vec{r}' | \psi \rangle}_{\psi(\vec{r}')}$$

$$\Rightarrow \quad \psi(\vec{r}) = \int d\vec{r}' \langle \vec{r} | \vec{r}' \rangle \psi(\vec{r}') \Rightarrow \boxed{\langle \vec{r} | \vec{r}' \rangle = \delta(\vec{r} - \vec{r}')}$$

ortogonalność stanów

$\{|\nu\rangle\}$ - zbiór zupełny, ortogonalny, unormowany.

$$\sum_\nu |\nu\rangle\langle\nu| = 1$$

$$\psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \psi \rangle = \langle \vec{r} | 1 | \psi \rangle = \langle \vec{r} | \sum_\nu |\nu\rangle\langle\nu | \psi \rangle =$$

$$= \sum_\nu \underbrace{\langle \vec{r} | \nu \rangle}_{\psi_\nu(\vec{r})} \langle \nu | \psi \rangle = \sum_\nu \psi_\nu(\vec{r}) \int d\vec{r}' \langle \nu | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | \psi \rangle =$$

$$= \sum_\nu \psi_\nu(\vec{r}) \int d\vec{r}' \cancel{\langle \nu | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | \psi \rangle} \psi_\nu^*(\vec{r}') \psi(\vec{r}')$$

$$\Rightarrow \quad \psi(\vec{r}) = \int d\vec{r}' \underbrace{\sum_\nu \psi_\nu^*(\vec{r}') \psi_\nu(\vec{r})}_{\delta(\vec{r} - \vec{r}')} \psi(\vec{r}')$$

Wiedząc, że $\langle \vec{r} | \vec{r}' \rangle = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$, $\langle \vec{p} | \vec{p}' \rangle = \delta(\vec{p} - \vec{p}')$ oraz $\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}$. Jak działają operatory położenia i pędu w reprezentacji położeniowej?

- $$\langle \vec{r} | \hat{\vec{r}} | \phi \rangle = \langle \vec{r} | \hat{\vec{r}} \underbrace{\int d\vec{r}' | \vec{r}' \rangle}_{1} \underbrace{\langle \vec{r}' | \phi \rangle}_{\phi(\vec{r}')} =$$

$$= \int d\vec{r}' \, \vec{r} \underbrace{\langle \vec{r} | \vec{r}' \rangle}_{\delta(\vec{r} - \vec{r}')} \phi(\vec{r}') = \vec{r} \phi(\vec{r})$$

$$\langle \vec{r}|\hat{\vec{p}}|\phi\rangle = \int d\vec{p}\ \langle \vec{r}|\hat{\vec{p}}|\vec{p}\rangle\langle\vec{p}|\phi\rangle = \int d\vec{p}\ \vec{p}\ \underbrace{\langle\vec{r}|\vec{p}\rangle}_{\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}}\langle\vec{p}|\phi\rangle =$$

$$= \frac{\hbar}{i}\partial_{\vec{r}} \int d\vec{p}\ \langle\vec{r}|\vec{p}\rangle\langle\vec{p}|\psi\rangle = \frac{\hbar}{i}\partial_{\vec{r}}\underbrace{\langle\vec{r}|\phi\rangle}_{\phi(\vec{r})} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\phi(\vec{r})$$

$$\partial_{\vec{r}} \to \nabla$$

Biorąc pod uwagę $\psi(\vec{r}) = \psi_\mu(\vec{r})$ mamy:

$$\psi_\mu(\vec{r}) = \sum_\nu \psi_\nu(\vec{r}) \underbrace{\int d\vec{r}\,'\ \psi_\nu^*(\vec{r}\,')\,\psi_\mu(\vec{r}\,')}_{\delta_{\mu\nu}}\ ,\ \text{stąd}$$

$$\boxed{\delta_{\mu\nu} = \int d\vec{r}\,'\ \psi_\nu^*(\vec{r}\,')\,\psi_\mu(\vec{r}\,')}$$

KWANTOWY OSCYLATOR HARMONICZNY (d=1)

$$\hat{H} = \hat{H}_{kin} + \hat{H}_{pot} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$$

W reprezentacji położeniowej:

$$\langle x|\hat{x}|\psi\rangle = x\,\psi(x)$$

$$\langle x|\hat{p}|\psi\rangle = \frac{\hbar}{i}\partial_x\psi(x) \qquad [\hat{x},\hat{p}] = i\hbar$$

zagadnienie własne: $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right]\psi(x) = E\psi(x)$$

Wprowadzamy zmienne bezwymiarowe:

$$\left.\begin{aligned}\hat{x} &\equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\,\hat{X}\\ \hat{p} &\equiv \sqrt{m\hbar\omega}\,\hat{P}\end{aligned}\right\} \longrightarrow [\hat{X},\hat{P}] = i \qquad (*)$$

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\left(\hbar\omega\hat{P}^2 + \hbar\omega\hat{X}^2\right)$$

$$\hat{\mathbb{H}} = \frac{\hat{H}}{\hbar\omega} \to \hat{\mathbb{H}} = \frac{1}{2}\left(\hat{\mathbb{P}}^2 + \hat{\mathbb{X}}^2\right)$$

w reprezentacji położeniowej:

$$\hat{\mathbb{H}} = \frac{1}{2}\left(-\partial_{\mathbb{X}}^2 + \mathbb{X}^2\right)$$

Tu nie odwołujemy się do żadnej wybranej reprezentacji, a jedynie do definicji przestrzeni Hilberta i relacji (*)

Wprowadzamy operatory:

$$\begin{cases} a \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{\mathbb{X}} + i\hat{\mathbb{P}}\right) \\ a^+ \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{\mathbb{X}} - i\hat{\mathbb{P}}\right) \end{cases} \longrightarrow \begin{cases} \hat{\mathbb{X}} = \frac{\sqrt{2}}{2}\left(a + a^+\right) \\ \hat{\mathbb{P}} = \frac{\sqrt{2}}{2i}\left(a - a^+\right) \end{cases}$$

para operatorów hermitowsko sprzężonych

$$[a, a^+] = \frac{1}{2}\Big(-i\underbrace{[\hat{\mathbb{X}}, \hat{\mathbb{P}}]}_{i} + i\underbrace{[\hat{\mathbb{P}}, \hat{\mathbb{X}}]}_{-i}\Big) = \mathbb{1} \quad (**)$$

mamy tu na myśli operator identyczności! ($\mathbb{1} \equiv id$)

$$\hat{\mathbb{H}} = \frac{1}{2}\cdot\left[-\frac{1}{2}\left(a - a^+\right)^2 + \frac{1}{2}\left(a + a^+\right)^2\right] =$$

$$= \frac{1}{4}\left[aa^+ + a^+a + aa^+ + a^+a\right] = \frac{1}{2}\left[aa^+ + a^+a\right] =$$

$$\overset{(**)}{=} a^+a + \frac{1}{2} \equiv \hat{N} + \frac{1}{2}, \quad \hat{N} \underset{\text{ozn.}}{\equiv} a^+a$$

Rozwiązywane przez Was zagadnienie własne sprowadza się do konstrukcji stanów własnych operatora $\hat{N}$:

$$[\hat{N}, a] = \hat{N}a - a\hat{N} = a^+aa - \underbrace{aa^+}_{a^+a+1}a = a^+aa - a^+aa - a =$$

$$= -a$$

$$[\hat{N}, a^+] = \hat{N}a^+ - a^+\hat{N} = a^+\underbrace{aa^+}_{a^+a+1} - a^+a^+a = a^+a^+a + a^+ - a^+a^+a =$$

$$= a^+$$

Pokażemy, że jeśli $|\nu\rangle$ jest stanem własnym $\hat{N}$ z wartością własną ν to:

(•) $\nu \geq 0$

(••) jeśli $\nu = 0$ to $a|\nu\rangle = 0$, jeśli nie, to $a|\nu\rangle$ jest niezerowym wektorem o normie $\nu\langle\nu|\nu\rangle$, spełniającym

$$\hat{N}a|\nu\rangle = (\nu-1)|\nu\rangle$$

(•••) $a^+|\nu\rangle$ jest niezerowym wektorem o normie $(\nu+1)\langle\nu|\nu\rangle$ spełniającym $\hat{N}a^+|\nu\rangle = (\nu+1)a^+|\nu\rangle$

{ czyli $a|\nu\rangle$, $a^+|\nu\rangle$ są stanami własnymi $\hat{N}$ o wartości własnej $\nu-1$ i $\nu+1$.

D: ~~z zagadnienia $\hat{N}$~~

z założenia $\hat{N}|\nu\rangle = \nu|\nu\rangle$, $\langle\nu|\nu\rangle > 0$

Normy $a|\nu\rangle$, $a^+|\nu\rangle$:

$$\langle\nu|a^+a|\nu\rangle = \langle\nu|\hat{N}|\nu\rangle = \nu\langle\nu|\nu\rangle$$

$$\langle\nu|aa^+|\nu\rangle = \langle\nu|\hat{N}+1|\nu\rangle = (\nu+1)\langle\nu|\nu\rangle$$

Norma wektora z przestrzeni Hilberta jest nieujemna. Warunkiem koniecznym i wystarczającym, aby ektor był zerowym. Skoro norma wektora $a|\nu\rangle$ jest równa $\nu\langle\nu|\nu\rangle$, to $\nu\langle\nu|\nu\rangle \geq 0$, a to dowodzi $(\cdot)$ oraz pierwszą część $(\cdot\cdot)$, czyli $\nu=0 \Rightarrow a|\nu\rangle=0$.

Dalej mamy:

$$\underbrace{\hat{N}a}_{a\hat{N}-a}|\nu\rangle = a(\hat{N}-1)|\nu\rangle = (\nu-1)a|\nu\rangle$$

$$\underbrace{\hat{N}a^+}_{a^+\hat{N}+a^+}|\nu\rangle = a^+(\hat{N}+1)|\nu\rangle = (\nu+1)a^+|\nu\rangle,$$

co dowodzi $(\cdot\cdot)$ i $(\cdot\cdot\cdot)$. $\square$

Jeżeli $\nu>0$ to powyższe stwierdzenie można zastosować do wektora $a|\nu\rangle$ o wartości własnej $[\nu-1]$. Zatem jeżeli $\nu\neq 0$ to $\nu\geq 1$. Można w ten sposób stworzyć ciąg wektorów własnych $\hat{N}$: $|\nu\rangle, a|\nu\rangle, a^2|\nu\rangle, \ldots, a^\rho|\nu\rangle, \ldots$ z w. własnymi: $\nu, \nu-1, \nu-2, \ldots, \nu-\rho, \ldots$

Ten zbiór musi być ograniczony, bo wartości własne $\hat{N}$ są ograniczone przez 0 z dołu. Ponadto $\nu\in\mathbb{N}$, gdyż inaczej dla jakiegoś ρ dostalibyśmy wektor $a^\rho|\nu\rangle$ o ujemnej normie.

Działając a^+ możemy wygenerować ciąg (nieograniczony) wektorów własnych $\hat{N}$.

Ważny wniosek:

- spektrum $\hat{N}$ jest tworzone przez zbiór $\mathbb{N} = \{0, 1, 2, \dots\}$
- działając a^+, bądź a na wektor własny $\hat{N}$ generuje inny wektor własny $\hat{N}$.

(Można pokazać, że tak wygenerowany zbiór jest zupełny).

Wektory własne $\hat{N}$, które konstruujemy nie są unormowane do 1.

Normalizacja: $|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, \dots, |n\rangle, \dots$ ← unormowane w. własne $\hat{N}$

wartości własne: $0, 1, 2, \dots, n, \dots$

Mamy:
$$\langle n| a a^+ |n\rangle = (n+1) \langle n|n\rangle$$
$$\langle n| a^+ a |n\rangle = n \langle n|n\rangle$$

zatem:
$$a^+ |n\rangle = \sqrt{n+1}\, |n+1\rangle$$
$$a |n\rangle = \sqrt{n}\, |n-1\rangle \qquad (n \neq 0)$$
$$a|0\rangle = 0$$

stąd: $$\frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^n |0\rangle = |n\rangle$$

oraz $$\hat{N}|n\rangle = a^+ a |n\rangle = \sqrt{n}\, a^+ |n-1\rangle = (\sqrt{n})^2 |n\rangle = n|n\rangle$$

$$\langle n|n'\rangle = \delta_{nn'}$$

eprezentacja ~~b~~ liczby obsadzeń:

w bazie stanów własnych $\hat{N}$ mamy:

$$\hat{N} = \begin{pmatrix} 0 & & & & \\ & 1 & & 0 & \\ & & 2 & & \\ & 0 & & 3 & \\ & & & & \ddots \end{pmatrix}$$

← diag.

$$a = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & & & \\ & 0 & \sqrt{2} & & 0 \\ & & 0 & \sqrt{3} & \\ & 0 & & 0 & \ddots \\ & & & & \ddots \end{pmatrix} \qquad a^{+} = \begin{pmatrix} 0 & & & & \\ \sqrt{1} & 0 & & & 0 \\ & \sqrt{2} & 0 & & \\ 0 & & \sqrt{3} & 0 & \\ & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

↑ diag. ← diag.

Wracając do ~~H~~ $\hat{H}$ mamy:

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right)$$

$\hat{H}$ jest diagonalne w reprezentacji N i ma spektrum $\left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$, gdzie $n \in \mathbb{N}$.

Operatory kreacji i anihilacji

Powyższe rozwiązanie zagadnienia własnego $\hat{H}$ poprzez $a, a^{+}, \hat{N}$ można ~~teraz~~ traktować jako techniczny trik.

<u>Ale!</u> Poziomy energetyczne są oddalone o $\hbar\omega$ (każde sąsiednie 2).

Stąd możliwa interpretacja:

$|n\rangle$ = stan zawierający n identycznych „cząstek"

$|0\rangle$ – stan „próżni"

a^+ ze stanu $|n\rangle$ „tworzy" $|n+1\rangle$, a więc „kreuje cząstkę".

a ze stanu $|n\rangle$ „tworzy" $|n-1\rangle$, a więc „anihiluje cząstkę".

Ta interpretacja to podstawa kwantowej teorii wielu ciał.

Np. pole elektromagnetyczne $\rightarrow$ superpozycja fal płaskich
o danej polaryzacji $(\vec{\varepsilon})$
i wektorem falowym $(\vec{k})$

$$\omega = \frac{k}{c}$$

kwantowanie $\rightarrow$ fotony o energii $\hbar\omega$

Hamiltonian: $$H_{EM} \sim \sum_{\vec{k}\vec{\varepsilon}} \hbar\omega_{\vec{k}\vec{\varepsilon}} \underbrace{a^+_{\vec{k}\vec{\varepsilon}} a_{\vec{k}\vec{\varepsilon}}}_{\hat{N}_{\vec{k}\vec{\varepsilon}}}$$

$\hat{N}_{\vec{k}\vec{\varepsilon}}$ - operator liczby fotonów o zadanym $\vec{k}, \vec{\varepsilon}$

<u>czyli suma oscylatorów</u>

$a^+_{\vec{k},\vec{\varepsilon}}$, $a_{\vec{k},\vec{\varepsilon}}$ $\rightarrow$ operatory kreacji/anihilacji fotonu „typu" $\vec{k}, \vec{\varepsilon}$.