

Mechanika kwantowa I

sem. zimowy 2012-2013

Krzysztof Byczuk

Instytut Fizyki Teoretycznej, Wydział Fizyki, UW

byczuk@fuw.edu.pl

www.fuw.edu.pl/byczuk

18-01-2013

1 Warunki zaliczenia

Część ćwiczeniowa:

1. Obecność i aktywność na ćwiczeniach - 10p.
2. Dwa kolokwia 12/11/2012 (Aula) i 17/12/2012 (Aula) - dwa razy po 30p.
3. Egzamin 29/01/2013 (Aula) - 30p.

Wypadkowa ocena z tej części:

5+ za 99-100p.,
5 za 90-98p.,
4+ za 85-89p.,
4 za 75-84p.,
3+ za 70-74p.,
3 za 50-69p.,
2 za 0-49p.

Część wykładowa:

W czasie każdego kolokwium i egzaminu odbędzie się 15 min. test z materiału wykładowego, 3 pytania losowane ze zbioru pytań, każdy test oceniany na 0p. (za jeden błąd lub więcej) lub 1 p. (z 3 poprawne odpowiedzi).

Wypadkowa ocena z tej części:

5+ za 3p.,
4+ za 2p.,
3+ za 1p.,
2 za 0p.

Ocenę z jednego testu, wybranego przez wykładowcę, można poprawić na egzaminie ustnym, 30-31/01/2013 (H342).

Na pisemnym egzaminie poprawkowym, 04/03/2013, można poprawić punktację z egzaminu pisemnego i testu. Na ustnym egzaminie poprawkowym, 05-07/03/2013, można poprawić punktację z testu.

Przewidujemy dodatkowe kolokwium tylko dla osób, które przyniosą dokument usprawiedliwiający ich nieobecność w terminie podstawowym.

Ocena końcowa będzie **mniej** z uzyskanych ocen w części ćwiczeniowej i wykładowej.

2 Tydzień I, 1-7/10/2012

2.1 Wykład

I. Historia mechaniki kwantowej: &1. *Trzy dekady powstawania nowej teorii, ważne daty.*

II. Podstawowe koncepcje mechaniki kwantowej: &1. *Równanie Schrodingera* - stan układu, funkcja falowa, równanie Schrodingera z czasem w $d=1$ i $d=3$ (dalej $d=1$), stała Plancka, interpretacja probabilistyczna funkcji falowej, zasada superpozycji rozwiązań; &2. *Rozwiązanie równania Schrodingera* - 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 na 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);

2.2 Zadania na ćwiczenia

1. **Promieniowanie ciała doskonale czarnego** Przypomnieć definicję ciała doskonale czarnego, doświadczalne fakty odnoszące się do widma promieniowania, oraz prawo Boltzmana-Stefana i Rayleigha-Jeansa. Przypomnieć numeryczne wartości stałych. Przypomnieć postulat Plancka i wyprowadzić wzór Plancka. Pokazać, że maksimum rozkładu wypada dla $\lambda_{max} = b/T$, znaleźć b . Oszacować temperaturę powierzchni gwiazdy jeśli z pomiaru wynika, że $\lambda_{max} = 446\text{nm}$. Oszacować λ_{max} dla promieniowania pochodzącego od drutu wolframowego rozgrzanego do temperatury 3300K. Wykonać obliczenia numeryczne i zwrócić uwagę na jednostki oraz typowe wykładniki.

2. **Efekt fotoelektryczny** Przypomnieć fakty doświadczalne związane z efektem fotoelektrycznym, postulaty Einsteina i wyjaśnienie teoretyczne tego zjawiska. Dwie wiązki światła o długościach $\lambda_1 = 80\text{nm}$ i $\lambda_2 = 110\text{nm}$ padając na powierzchnię ołowiu wybijają elektrony o maksymalnych energiach, odpowiednio 11,390eV i 7,154eV. 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.

3. **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 policzyć jej wartość dla elektronów. Wprowadzić $\hbar = h/2\pi$. Wysoko energetyczne 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.

4. **Hipoteza de Broglie'a** Przypomnieć hipotezę de Broglie'a i wynik doświadczenia Davisona-Germera. Wprowadzić długość fali de Broglie'a. Obliczyć długość de Broglie'a dla protonu o energii 70 MeV i dla kuli ka-
rabinowej o masie 100g poruszającej się z prędkością 900 m/s. Wykonać obliczenia numeryczne i zwrócić uwagę na jednostki oraz typowe wykładniki.

5. **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 pozytronium (stan związany elektronu i pozytronu) 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 pozytronium, który 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 protonów o energii 2 eV na kryształ, piąte maksimum w intensywności widocznej na ekranie obserwuje się pod kątem 30° . Oszacować odległość pomiędzy płaszczyznami w tym kryształ.

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 reliktowego wynosi 3 K. Dla jakiej częstości obserwuje się maksymalną energię?

3 Tydzień II, 08-14/10/2012

3.1 Wykład

&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 znamy 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.

3.2 Zadania na ćwiczenia

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

2. **Prawdopodobieństwo znalezienia cząstki** Cząstka w nieskończonej studni potencjału od 0 do a jest z 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 $\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-z^2) dz = \sqrt{\pi}$, $\int_{-\infty}^{\infty} z^{2n} \exp(-z^2) dz = \sqrt{\pi} (1 \cdot 3 \cdot 5 \dots (2n-1))/2^n$, $\int_{-\infty}^{\infty} z^{2n+1} \exp(-z^2) dz = 0$, oraz wprowadzić funkcję błędu $\text{erf}(z) = 2/\sqrt{\pi} \int_0^z \exp(-u^2) du$. 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 $\Psi(x, t) = (A_1 \exp(-x^2/a) + A_2 x \exp(-x^2/b)) \exp(-ict)$ dla $-\infty < x < \infty$. a) Wyznaczyć warunek na współczynniki normalizacji A_1 i A_2 . b) Unormować $\Psi(x, t)$ dla $A_1 = A_2$ oraz $a = 32$ i $b = 8$. c) Znaleźć prawdopodobieństwo że cząstka znajduje się w przedziale $0 < x < 32$. Zauważyć, że $\text{erf}(32) \approx 1$.

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) $\Psi(x, 0) = A \sin^5(\pi x/a)$. W a) znaleźć współczynniki rozwinięcia obciążając 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. $\int dx \psi^*(x) (H^2 \psi(x)) = \int dx (H \psi(x))^* (H \psi(x))$.

3.3 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 $n = 3$ stanie wzbudzonym w

chwili $t = 0$. Nagle szerokość studni została podwojona ($a \rightarrow 2a$) tak, że stan układu nie został zaburzony. Jeśli mierzymy energię chwilę później, jakie jest prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w stanie podstawowym, a jakie jest prawdopodobieństwo, że jest ona w pierwszym stanie wzbudzonym (mówimy o stanach dla nowej studni)? Obliczyć średnią energię cząstki przed i po podwojeniu szerokości studni. Zinterpretować wynik.

4 Tydzień III, 15-21/10/2012

4.1 Wykład

III. Równanie Schroedingera 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, nienormowalne w zwykłym sensie, z ciągłą energią z kontinuum), rozwiązywanie problemu z odcinkami płaskim potencjałem, reguły zszywania rozwiązań, definicja współczynnika przejścia i odbicia, przykład rozpraszania na schodku dla fali o energii $E < V$;

&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 Erenfesta* - 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 nieskończonej wymiarowej przestrzeni wektorowej i iloczynu skalarnego, baza w przestrzeni wektorowej, rozkład wektora w bazie, rozkład operatora jednostkowego, zupełność bazy;

4.2 Zadania na ćwiczenia

1. **Wyznaczamy średnie 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. **Obliczamy prąd gęstości prawdopodobieństwa** Cząstka w jednowymiarowej nieskończonej studni jest w stanie $\Psi(x, t) = \sqrt{\frac{1}{a}} \sin(\pi x/a) \exp(-iE_1 t/\hbar) + \sqrt{\frac{1}{a}} \sin(2\pi x/a) \exp(-iE_2 t/\hbar)$, gdzie E_i są 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. Rozmynieć 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), komar o masie 1g.

4.3 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 $\hbar\omega = \hbar^2 k^2/2m + V$. Schroedinger 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.

5 Tydzień IV, 22-28/10/2012

5.1 Wykład

&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 wydma dyskretnego i ciągłego.

V. Przestrzeń Hilberta stanów - postulaty mechaniki kwantowej: &1. *Przestrzeń stanów kwantowych układu* - wektor stanu, przestrzeń Hilberta, postulat I (o stanie układu), obserwabla 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;

5.2 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 ilością 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 od $(-a, a)$ znajduje się częściowo przepuszczalna przegroda $U(x) = (\hbar^2/m)V_0\delta(x)$. Przedys-

kutować 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. Jakież są stany zaraz po pomiarze. W tym problemie warunki zszycia wydedukować z całkowania równania Schrodingera 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.

5.3 Zadania domowe

1. Jaką wartość musi przyjmować parametr $V_0 a < 0$ w rozpraszaniu na skończonej studni potencjału aby elektron o energii 1eV zawrócił z prawdopodobieństwem 0.2. Oszacować to samo dla samolotu Boeing 474 gdy leci z prędkością 900km/h. Potrzebne dane znaleźć samodzielnie.

2. Rzucając 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 .

6 Tydzień V, 29/10-04/11/2012

6.1 Wykład

&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 Schrodingera dla wektora stanu, równanie Schrodingera 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 Schrodingera, obraz Heisenberga, równanie ruchu Heisenberga dla operatorów;

6.2 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 na szereg i obcinania

go dla uzyskania rozwiązań unormowanych (fizycznych). Omówić podstawowe własności wielomianów Hermite'a, funkcję tworzącą, formuły rekurencyjne i na pochodne, unormowanie, jakieś przykłady na obliczenie wartości średniej, np. $\langle x^2 \rangle$.

6.3 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. Stosując metodę Frobeniusa, rozwiązywania równania różniczkowego przez rozwinięcie w szereg, rozwiązać równanie $d^2y(t)/dt^2 = \pm k^2 y(t)$.

7 Tydzień VI, 05/11-11/11/2012

Od teraz stosujemy konsekwentnie notację Diraca i rozróżniamy wektor stanu od funkcji falowej w danej bazie

7.1 Wykład

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 obserwabi* - dowód twierdzenia i istnieniu wspólnych stanów własnych dla komutujących operatorów, omówienie zagadnienia jednoczesnego wyznaczania i mierzenia komutujących obserwabi w fizyce kwantowej.

7.2 Zadania na ćwiczenia

Uwaga, w następny poniedziałek 12/11/2011 w godzinach 09:00 - 13:00 Aula (N335) jest wolnym! Obowiązuje materiał z ćwiczeń i

wykładu do VI tygodnia włącznie. Przypominam też o tym, że będzie test z materiału teoretycznego.

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

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

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

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.

8 Tydzień VII, 012/11-18/11/2012

8.1 Wykład

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; &8. *Dodatek - Wielomiany ortogonalne* - problem Sturma-Liouville'a, iloczyn skalarny z wagą, wielomiany ortogonalne, wzór Rodriguesa, związki rekurencyjne, funkcje tworzące, przykład: wielomiany Hermite'a.

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

8.2 Zadania na ćwiczenia

1. Proszę o dokończenie zadań z poprzednich tygodni, a w tych grupach gdzie program jest realizowany na bieżąco można zrobić dowolne dodatkowe zadania z materiału określonego wcześniej. Np. Rozwiązanie oscylatora w przestrzeni pędów lub coś z zadań domowych poniżej ze ściśle rozwiązywalnymi potencjałami.

2. *Przykład: układ dwupoziomowy* - wprowadzenie układu dwupoziomowego jako modelu dla molekuli amoniaku, szczegółowa analiza problemu własnego, ewolucji w czasie w różnych obrazach, pomiaru, itd. dla tego modelu w celu zilustrowania postulatów i pokazania zastosowania notacji Diraca. W szczególności: Mamy układ dwupoziomowy ($|0\rangle, |1\rangle$), i hamiltonian $H = B|0\rangle\langle 0| - B|1\rangle\langle 1|$. Wyznaczyć możliwe energie w pomiarze energii, prawdopodobieństwa na stanach a) $|\psi\rangle = (|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$ i b) $|\phi\rangle = |0\rangle$, oraz średnią energię. Jeśli $X = \kappa|0\rangle\langle 1| + \kappa|1\rangle\langle 0|$ jest inną obserwabłą, znaleźć możliwe wyniki pomiaru i prawdopodobieństwa na stanie (b). Jakie będą możliwe stany zaraz po pomiarze. Jak one będą zmieniały się w czasie. Jak wtedy będą prawdopodobieństwa pomiaru możliwych wartości obserwabli X ? Jak wygląda ewolucja obserwabli X w czasie w obrazie Heisenberga? Porównajmy obliczenia w notacji Diraca z notacją macierzową i przećwiczmy postulaty mechaniki kwantowej.

8.3 Zadania domowe

1. Istnieje kilka (kilkanaście) przykładów potencjałów oddziaływania dla których równanie Schroedingera 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:

- $V(x) = V_0 \cot^2(\pi x/a)$ 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.

9 Tydzień VIII, 25/11/2012

9.1 Wykład

IX. Separowalne problemy w dwóch wymiarach:

&1. *Cząstka w dwuwymiarowej nieskończonej studni potencjału* - Hamiltonian separowalny względem zmienionych 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 , jednoczesne 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 ,

9.2 Zadania na ćwiczenia

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

2. **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 Liboff'a), unormować, policzyć $\langle z|\hat{x}|z\rangle$, $\langle z|\hat{p}|z\rangle$, rozłożyć stan $|z\rangle$ w bazie $|n\rangle$, pokazać, że stan koherentny można przedstawić $|z\rangle = \hat{D}(z)|0\rangle$, gdzie $\hat{D}(z) = \exp(z\hat{a}^\dagger - z^*a)$, pokazać unitarność $\hat{D}(z)$, policzyć całkę przekrycia $\langle z|z'\rangle$, sprawdzić zupełność $|z\rangle$. Wsk. użyć tw. Bakera-Cambella-Hausdorfa $\exp(\hat{X} + \hat{Y}) = \exp(\hat{X})\exp(\hat{Y})\exp(-[\hat{X}, \hat{Y}]/2)$ dla $[X, Y] = \text{const}$ (dowód w zadaniach domowych).

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

9.3 Zadania domowe

1. Udowodnić wzór Bakera-Cambella-Hausdorfa.

2. Pokazać, że stan koherentny wysycia zasadę nieoznaczoności Heisenberga.

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

4. 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.

5.* 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.

10 Tydzień IX, 26/11-02/12/2012

10.1 Wykład

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; &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 $\Theta_l^m(\theta)$.

10.2 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 $\omega_z = \omega_\parallel$.

3. **Zasada wariacyjna** - wyprowadzić twierdzenie Ritza i sformułować zasadę wariacyjną dla stanu podstawowego.

4. **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) $1/(x^2 + \gamma^2)$.

5. **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. $d\Theta(x)/dx = \delta(x)$.

10.3 Zadania domowe

1.* Pokazać, że operator $a^\dagger$ nie ma unormowanych stanów (wektorów) własnych. wsk. dowód a.a.

2. Znaleźć najlepsze szacowanie 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 zadanego

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).

11 Tydzień X, 03-09/12/2012

11.1 Wykład

XI. Zagadnienia ruchu w trzech wymiarach:

&1. *Cząstka swobodna we współrzędnych kartezjańskich* - separacja równania Schroedingera 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;

11.2 Zadania na ćwiczenia

1. Omówić przybliżenie WKB (w formie wykładu na podstawie książki Liboffa). Omówić zakres stosowalności metody.

2. Stosując przybliżenie WKB znaleźć energie a) dla potencjału oscylatora harmonicznego w jednym wymiarze i b) dla potencjału $V(x) = F|x|$. Porównać z wynikami ścisłymi (oscylator) i wariacyjnymi (poprzednie ćwiczenia).

3. *Zimna emisja elektronów* Zbadać tunelowanie przez potencjał $V(x) = 0$ dla $x < 0$ i $V(x) = V_0 - \lambda x$ dla $0 \leq x \leq V_0/\lambda$ metodą WKB.

11.3 Zadania domowe

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. Zastosować przybliżenie WKB do znalezienia energii wiązania dla potencjałów: a) $V(x) = kx^2 + ax^4$, dla $k > 0$ i $b > 0$, b) $V(x) = V_0 \tanh^2(\pi x/a)$ dla $0 < x < a$, c) nieskończonej studni potencjału. Przedyskutować otrzymane wyniki i zakres stosowalności przybliżenia.

12 Tydzień XI, 10-16/12/2012

12.1 Wykład

&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 radialne, zmienne bezwymiarowe i stałe, promień Bohra, stała Rydberga, asymptotyka równania radialnego, rozwinięcie Frobeniusa, urywanie szeregu, wialomiany Laguerre, 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.

12.2 Zadania na ćwiczenia

Przypomnienie o kolokwium 17/12/11 w Auli od 9:15-13:00, materiał do przybliżenia WKB (bez momentu 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 $\sigma_x \sigma_y$ 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. Cząstka 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. Cząstka 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 $|lm\rangle$. Dokonujemy 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 jest na dwa tygodnie (4 ćwiczenia).

12.3 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 oznaczamy stany 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 $V(\mathbf{r})$ 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 $V(r)$?

13 Tydzień XII, 17-23/12/2012

13.1 Wykład

XIII. Rachunek zaburzeń &1. *Rachunek zaburzeń dla stanów niezdegenerowanych, zaburzenie niezależne od czasu* - istota rachunku zaburzeń, rozwijane rozwiązania względem parametru kontrolnego, warunki 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.

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;

13.2 Zadania na ćwiczenia

(Potrzebne funkcje specjalne były na wykładzie!)

1. Znaleźć poziomy energetyczne i unormowane funkcje falowe cząstki o masie μ poruszającej się w nieskończenie głębokiej sferycznie symetrycznej studni potencjału $V(r) = 0$ dla $r \leq R$ i $V(r) = \infty$ dla $r > R$.

2. Znaleźć poziomy energetyczne i unormowane funkcje falowe cząstki o masie μ i o zerowym momen-

cie 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.

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

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

5. *Twierdzenie Hellmanna-Fenmanna* (np. w wikipedii) podać treść twierdzenia i je udowodnić.

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

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 .

14 Tydzień XII, 07-13/01/2013

14.1 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, degeneracji stanów cząstki swobodnej; &3. *Moment magnetyczny elektronu* - związek momentu magnetycznego ze spinem, magneton Bohra, Hamiltonian Zeemana, omówienie doświadczenia Sterna - Gerlach.

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;

14.2 Zadania na ćwiczenia

1. *Rachunek zaburzeń* Częstka o masie M porusza się w polu siły $M\omega^2 z^2/2$. Układ umieszczono w polu grawitacyjnym blisko powierzchni Ziemi. raktując 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. $T = \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4} - mc^2$ rozwijamy 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* Policzyc 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.

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-gim rzędzie. Pomiąć spin elektronów i zasadę Pauliego. Zadanie jest długie więc chodzi jedynie o podanie zasadniczych kroków i pokazaniu, że mamy obniżenie energii na skutek oddziaływań elektrostatycznych i tworzenie się stanu związanego dwóch atomów.

14.3 Zadania domowe

1. Znaleźć w 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 $\mathcal{E} = \mathcal{E}\hat{z}$. Wyznaczyć polaryzowalność atomu, t.j. $\alpha = -d^2\Delta E/d\mathcal{E}^2$.

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 ∞ 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 XIII, 14-20/01/2013

15.1 Wykład

&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.

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 rozproszeniowego, 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;

15.2 Zadania na ćwiczenia

Proszę o dokończenie zadań poprzedniego tygodnia i później przejście do nowych problemów.

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

15.3 Zadania domowe

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

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

3. Częstka o spinie $1/2$ jest w stanie $|\psi\rangle = (1/\sqrt{5}) \begin{pmatrix} i \\ 2 \end{pmatrix}$. Jakie jest prawdopodobieństwo zmierzania

rzenia, że cząstka jest ze spinem w górę lub w dół względem osi z ? Jakie jest prawdopodobieństwo zmierzania, 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 . Policzyc $\langle S_z(t) \rangle$ 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?

17 Literatura

- R.L. Liboff, Wstęp do mechaniki kwantowej
- R. Shankar, Mechanika kwantowa
- J.B. Brojan, J. Mostowski, K. Wódkiewicz, Zbiór zadań z mechaniki kwantowej

16 Tydzień XIV, 21-27/01/2012

16.1 Wykład

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 niejednostopnym zawierającym nieskończony solenoid, wpływ potencjału wektorowego na strukturę interferencyjną, wynik doświadczenia i wnioski.

16.2 Zadania na ćwiczenia

dokończenie poprzednich zadań.

1. *Rozpraszanie* Obliczyć w przybliżeniu Borna różniczkowy przekrój czynny na rozpraszanie cząstek o ładunku Q i masie m o energii E na ekranowanym potencjale kulombowskim (Yukawy) $V(r) = Zqe^{-r/a}/r$. Omówić granicę $a = \infty$.

mając czas:

2. Dla dwóch spinów $1/2$ znaleźć wektory bazowe w reprezentacji momentów sprzężonych i pokazać, że dzieli się przestrzeń stanów na singletową i trypletową. (Można wspomnieć o splątaniu i paradoksie EPR jeśli starczy czasu).

16.3 Zadania domowe

1. Obliczyć w przybliżeniu Borna różniczkowy przekrój czynny na rozpraszanie cząstek o ładunku e i masie m o energii E na potencjale $V(r) = V_0$ dla $r < a$ i $V(r) = 0$ dla $r > a$.