

# Mechanika Kwantowa R (2015)

R. Demkowicz-Dobrzański

## Podręczniki

1. L. Schiff, Mechanika Kwantowa (obszerna)
2. R. Liboff, Wprowadzenie do Mechaniki Kwantowej (mniej obszerna)
3. I. Białynicki-Birula, M. Cieplak, J. Kamiński, Teoria Kwantów (patriotyczna, nacisk na falowość)
4. J. Sakurai, Modern Quantum Mechanics (nacisk na eleganckie rzeczy)
5. L. Susskind, Quantum Mechanics (dla młodszego brata/siostry)
6. J. A. Wheeler, W. Zurek, Quantum Theory and Measurement (dla filozoficznej kontemplacji)

## Zasady zaliczenia

2 kolokwia (2 x 30 punktów) [30 marca, 18 maja], egzamin (40 punktów) [19 czerwca]. W sumie 100 punktów: 45-55 = 3, 55-65 = 3.5, 65-75=4, 75-85=4.5, 85-95 = 5, 95-100=5!). Egzamin ustny (zmiana oceny co najwyżej o 0.5). Serie domowe dobrowolne.

## TYDZIEŃ 1 (25.02,27.02)

### Wstęp Historyczno-Filozoficzny

Powstanie mechaniki kwantowej—rewolucja porównywalna z przewrotem kopernikańskim. Przed rokiem 1900 praktycznie doskonaly opis wszystkich zjawisk (mechanika, grawitacja, termodynamika, elektrodynamika, optyka, ...). Cyfaty ku przestrodze:

Kiedy rozpoczynałem studia fizyczne (1880r) i u mego czcigodnego nauczyciela Philippa von Jolly'ego zasięgałem opinii na temat warunków i perspektyw moich studiów, przedstawił mi on fizykę jako naukę wysoko rozwiniętą, prawie całkowicie dojrzałą, która po ukoronowaniu jej osiągnąć przez odkrycie zasady zachowania energii miała już wkrótce przyjąć ostateczną postać. Wprawdzie w tym czy innym zakątku pozostaje jeszcze do zbadania i usunięcia jakiś pyłek czy pęcherzyk, ale jeśli chodzi o system jako całość, to jest on dość zabezpieczony, a fizyka teoretyczna wyraźnie zbliża się do osiągnięcia takiej doskonałości, jaka od stuleci jest właściwa geometrii (Max Planck)

Wszystkie najważniejsze fundamentalne prawa i fakty w fizyce zostały już odkryte i tak dobrze ustalone, iż jest nikome prawdopodobieństwo, że zostaną one uzupełnione w wyniku nowych odkryć. (Albert A. Michelson, 1899)

„Drobne problemy”: Promieniowanie rozgrzanych ciał, Zjawisko fotoelektryczne, Budowa atomu (klasyczny elektron poruszający się po orbicie powinien promieniować) → wprowadzenie pojęcia kwantu energii—energia może być przekazywana jedynie w porcjach,  $h\nu = \hbar\omega$ ,  $h = 6.62 \cdot 10^{-34} Js$ ,  $\hbar = h/2\pi = 1.05 \cdot 10^{-34} Js$ . Materia i światło wymieniają energię w porcjach.

*Szkic rozumowania Plancka* Obserwujemy, że gęstość energii od częstości ma kształt inny niż przewiduje teoria klasyczna. Sześcian o boku  $a$  mody znikające na brzegach:  $A \sin k_x x \sin k_y y \sin k_z z$ . Warunki brzegowe,  $k_x = n_x \pi/a$ , ... Związek dyspersyjny  $\omega^2 = (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)c^2$ ,  $\omega = 2\pi\nu$ .  $n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = \frac{4a^2}{c^2} \nu^2$ . Liczba modów o częstości mniejszej niż  $\nu$   $N(\nu) = \frac{1}{8} \frac{4\pi}{3} (2a\nu/c)^3 * 2$  (dwie polaryzacje). Czyli gęstość częstościowa modów:  $n(\nu) = 8\pi a^3 \nu^2 / c^3$ . Zasada ekwipartycji—na każdy mod przypada energia  $kT$ —problem, gęstość energii:  $u(\nu, T) = 8\pi kT \nu^2 / c^3$ —wybuch dla wysokich częstości (całkowita energia nieskończona) W danym modzie prawdopodobieństwo, że jest energia  $E$  (rozkład Boltzmanna),  $p(E) = \frac{1}{Z} e^{-E/kT}$ —średnio  $\langle E \rangle = kT$ . Ale jeśli energie tylko dyskretne  $E_n = nh\nu$ ,  $p(E_n) = \frac{1}{Z} e^{-nh\nu/kT}$ ,  $\langle E \rangle = \sum_n nh\nu p(n) = \frac{nh\nu}{e^{nh\nu/kT} - 1}$ .  $u(\nu, T) 8\pi h (\nu/c)^3 / (e^{h\nu/kT} - 1)$ . (Wystarczy jakościowe porcjonalności)

Kiedy myśli się o wszystkich eksperymentalnych potwierdzeniach elektrodynamiki Maxwella w badaniach nawet najbardziej złożonych zjawisk interferencji, kiedy myśli się o niezwykłych trudnościach w objaśnianiu zjawisk elektrycznych i magnetycznych przez teorie, które by odrzucały tę elektrodynamikę, to instynktownie przyjmujemy się wrogi stosunek do wszelkich prób poruszenia tego fundamentu. Dlatego też pozostawimy nadal na uboczu hipotezę kwantów światła, tym bardziej, że jest ona jeszcze w stadium zarodkowym. Będziemy przyjmowali, że wszystkie zjawiska zachodzące w próżni dokładnie odpowiadają równaniom Maxwella (Max Planck 1912)

Niepodzielny kwant światła + płytka światłodzieląca → indeterminizm!. Ale Mechanika kwantowa to coś więcej niż mechanika klasyczna + indeterminizm. Interferometr Macha-Zehndera [RYSUNEK], Natężenia na wyjściu dla klasycznej fali e-m:  $I_1 = I_0 \sin^2 \theta/2$ ,  $I_2 = I_0 \cos^2 \theta/2$  (Ćwiczenia). Czyli prawdopodobieństwa:  $p_1 = \sin^2 \theta/2$ ,  $p_2 = \cos^2 \theta/2$ . Nie możemy myśleć, że foton leci jednym lub drugim ramieniem! Jego położenie jest nieokreślone wewnątrz interferometru—nie ma takiej „własności sam w sobie”. Co będzie jeśli wykonamy pomiar wewnątrz interferometru—nadamy własność obiektowi „którą drogą”, ale... niszczyliśmy interferencje:  $p_1 = p_2 = 1/2$ . Inaczej niż w mechanice klasycznej obiekty „nie mają cech istniejących obiektywnie przed dokonaniem pomiaru” Foton nie ma określonego poło-

żenia w interferometrze dopóki nie dokonamy pomiaru wewnątrz. Z kolei jeśli dokonujemy pomiaru na wyjściu to możemy myśleć że foton interferometrze był w superpozycji dwóch dróg z określoną fazą względną  $\pi$ , 0—te cechy fotonu się „urealnijają” dzięki pomiarowi.

*Jak to było w Mechanice klasycznej?*

- Stan układu (np. podanie  $q_i$  i  $p_i$  w sformułowaniu Hamiltonowskim) pozwala obliczyć wszystkie potencjalnie mierzalne fizyczne własności - te własności istnieją niezależnie od pomiaru (**realizm**)—pojęcie pomiaru nie ma znaczenia w sformułowaniu teorii. Brak podziału obserwator vs układ mierzony. Obaj istnieją wewnątrz tego same obiektywnego świata (który „można zobaczyć” z zewnątrz)
- Stan układu w chwili  $t'$  wyznaczony jednoznacznie przez stan układu w dowolnej wcześniejszej chwili  $t < t'$  (**determinizm**). Ewolucja=trajektoria w przestrzeni fazowej.  $H(q_i, p_i)$ -Hamiltonian

$$\begin{cases} \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \end{cases} \quad \frac{dA(q_i, p_i)}{dt} = \{A, H\}$$

$$\{A, H\} = \sum_i \frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i}$$

- Opis statystyczny w mechanice klasycznej (rozkłady prawdopodobieństwa w przestrzeni fazowej) związany jest jedynie z **naszą niewiedzą** i nie ma w nim nic fundamentalnie nowego

*Jak to jest w Mechanice kwantowej?*

- Pomiar nie jest po prostu ujawnieniem wcześniej istniejących własności układu. Wybierając pomiar decydujemy którym z własności fizycznych nadamy określone wartości (**brak realizmu**). Obserwator i pomiar pełnią fundamentalną rolę w teorii—nie możliwy jest obiektywny opis od zewnątrz (Istota wyższa obserwuje wszechświat z zewnątrz!). Wszechświat trzeba opisywać od środka!
- Stan układu—informacja o prawdopodobieństwach wyników różnych potencjalnie wykluczających się pomiarów. W ogólności nie da się przewidzieć wyniku konkretnego pomiaru mimo posiadania pełnej (w rozumieniu teorii) wiedzy o układzie (**indeterminizm**). Stan układu zmienia się gwałtownie w momencie poznania wyniku pomiaru (kolaps funkcji falowej).
- Ewolucja stanu układu pomiędzy przygotowaniem a pomiarem jest deterministyczna (równanie Schroedingera), ale z uwagi na brak realizmu ta ewolucja powinna

być traktowana jako narzędzie do obliczania prawdopodobieństw wyników pomiarów a nie realny byt istniejący niezależnie od obserwatora.

Pojęcie obiektywnej rzeczywistości wyparowało, zastąpione przez przejrzysty matematyczny formalizm, który nie opisuje już zachowania samych cząstek a raczej naszą wiedzę o tym zachowaniu. Tym, co obserwujemy, nie jest przyroda sama w sobie, lecz przyroda, jaka nam się jawi, gdy zadajemy jej pytania we właściwy nam sposób (Werner Heisenberg)

Stan kwantowy nie jest obiektywną własnością pojedynczego układu, ale informacją uzyskaną ze sposobu przygotowania układu, które mogą być użyte to przewidywania wyników przyszłych pomiarów. Kolaps funkcji falowej zachodzi w umyśle obserwatora, nie dlatego, że zachodzi tm jakiś szczególnie proces fizyczny, ale dlatego, że stan jest pojęciowym konstruktem samego obserwatora. (Asher Peres)

Kiedy fizycy przeprowadzają eksperymenty w laboratorium, są realistami. Mówią o fotonach i elektronach poruszających się tu i tam. W momencie jednak, gdy rozpoczniesz dyskusję filozoficzną i zapytasz ich o podstawy mechaniki kwantowej, większość powie, że tak naprawdę nic nie istnieje w oderwaniu od kontekstu pomiarowego, który to coś definiuje. (Anton Zeilinger)

Rzeczy i zdarzenia są 'puste' w takim sensie, że nie posiadają żadnej nieziennej esencji ani absolutnego istnienia, które zasługiwało by na miano „niezależności” od reszty. Materia nie może być obiektywnie pojmowana i opisywana poza obserwatorem - materia i umysł są współzależne. (Dalailama, „The Universe in a single atom”)

Układ nasz, z którego żadną miarą wyjść nie możemy, rozbity jest na podmiot i przedmiot, których rzeczywistego stosunku nigdy nie wyjaśnimy, ponieważ nie jesteśmy obojętnymi spektatorami zjawisk, ale jedną ze stron działających. (Stanisław Ignacy Witkiewicz „O Dualizmie”, 1902)

*Ewolucja Fizyki—o dchodzenie od opisu „z zewnątrz” do opisu „od wewnątrz”*

- Fizyka Arystotelesa: Ruch jako pojęcie absolutne. Prawa fizyki zdefiniowane względem jedynie słusznego absolutnego układu odniesienia (Ziemia). Brak pojęcia układu odniesienia zależnego od obserwatora.
- Fizyka klasyczna: **Ruch jako pojęcie względne zależne od obserwatora**. Czas i przestrzeń - pojęcia absolutne. Obiekty fizyczne posiadające swoje cechy niezależne od obserwatora.
- Teoria względności: **Nie tylko ruch ale czas, przestrzeń i masa - pojęcia względne zależne od obserwatora**. Ale wciąż własności przynależą do obiektów i wymagają jedynie dokonania pewnych transformacji aby uzgodnić opisy różnych obserwatorów
- Teoria kwantowa: **Teoria sformułowana w języku uwzględniającym jawnie obserwatora - opis od wewnątrz**

### Obrońcy realizmu

- **David Bohm, Teoria parametrów ukrytych** – cząstki mają dobrze określone wszystkie własności fizyczne niezależnie od obserwatora tylko nie mamy do nich dostępu. Sprowadza mechanikę kwantową do klasycznej fizyki statystycznej. Łamanie nierówności Bella wyklucza istnienie lokalnej teorii parametrów ukrytych
- **Roger Penrose, Grawitacja jako źródło kolapsu** – „Nie można pogodzić się z teorią kwantów. Musimy ją zmienić, tak by dostarczała wiarygodnego obrazu świata [...] Jeśli zinterpretujemy dosłownie deklaracje niektórych najsłynniejszych zwolenników teorii kwantów, to nie otrzymamy w ogóle żadnego obrazu świata” (Cienie Umysłu)”. Funkcja falowa i jej kolaps są realne. Kolaps spowodowany jest grawitacją – niemożliwość istnienia superpozycji dwóch różnych geometrii czasoprzestrzeni. Fenomen świadomości związany z nową fizyką odpowiedzialną za kolaps
- **Hugh Everett, teoria wielu światów** – Nigdy nie następuje kolaps. Istnieją wszystkie składniki superpozycji – nasza świadomość jest też układem kwantowym i żyje w jednym z tych składników i dlatego obserwuje konkretne wyniki. Równolegle istnieją inne „nasze świadomości” obserwujące inne wyniki. Funkcję falową traktujemy jako podstawowy byt fizyczny

### Najprostszy układ kwantowy - qubit, spin 1/2

Eksperyment Sterna-Gerlacha (1922) [RYSUNEK]. Klasycznie energia momentu magnetycznego w polu magnetycznym  $H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$ . Pole  $B$  niejednorodne w kierunku  $z$ ,  $\vec{B} \approx (B_0 + \alpha z)\hat{e}_z$ . Siła  $\vec{F} \approx \alpha\mu_z\hat{e}_z$ . W zależności od orientacji  $\vec{\mu}$  klasycznie spodziewamy się różnego odchylenia-płamka. W eksperymencie tylko dwie płamki!. Skwantowanie momentu magnetycznego! Rzut na oś  $z$  przyjmuje tylko jedną z dwóch wartości  $\pm\mu_B$ .  $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$  magneton Bohra (dalej będziemy pisać po prostu  $\mu$ , bo moglibyśmy mieć do czytania nie koniecznie z elektronami). Związane ze skwantowaniem wewnętrznego momentu pędu elektronu (spinu 1/2,  $s_z = \pm\hbar/2$ ).

$|+\rangle_z, |-\rangle_z$  - stany odpowiadające odpowiednio pomiarowi rzutu  $\mu$  na oś  $z$   $\pm\mu$ . Trzy schematy zagadki: (i) SGz i na jednym ze składników znów SGz - Powtórzenie pomiaru  $\mu_z$  na  $|\pm\rangle$  da już wynik deterministyczny (tak jakby powtórnie sprawdzać którędy leci foton). (ii) SGz i na jednym ze składników SGx (iii) SGz SGx SGz. (drugi pomiar x, „zamazał” jakakolwiek informację o z).

Stany spinu chcemy opisać jako wektory w dwu wymiarowej przestrzeni wektorowej z iloczynem skalarnym (przestrzeni Hilberta).  $|+\rangle_z, |-\rangle_z$  - wektory ortogonalne ( baza).  
Ogólny stan:

$$|\psi\rangle = \psi_+|+\rangle_z + \psi_-|-\rangle_z = \begin{bmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{bmatrix}$$

- unormowany wektor  $|\psi_+|^2 + |\psi_-|^2 = 1$ .  $\psi_{\pm} = {}_z\langle\pm|\psi\rangle$ -amplitudy prawdopodobieństwa (analogia do amplitud fali e-m w interferometrze),  $|\psi_{\pm}|^2 = p_{\pm}$ . Używamy notacji bracket:  $\langle\psi| = [\psi_+^*, \psi_-^*] = \psi_+^*\langle+|_z + \psi_-^*\langle-|_z$ .  $\langle\psi|\phi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle = \psi_+^*\phi_+ + \psi_-^*\phi_-$ .

Jak wyglądać powinien stan  $|+\rangle_x$ ? Mamy  $|+\rangle_x$  i mierzymy  $\mu_z$ , dostajemy wyniki  $\pm\mu$  (nie ma innych wartości np.  $\mu_z = 0$ ) z  $p_{\pm} = 1/2$  (średnio  $\langle\mu_x\rangle = 0$  tak jak powinno być klasycznie). Jaka postać  $|\pm\rangle_x$ ? (Ortogonalność!)

$$|+\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle_z + |-\rangle_z), \quad |-\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle_z - |-\rangle_z)$$

(umowna konwencja  $\pm$ ). A co z  $|\pm\rangle_y$ ? Musi spełniać:  $|_y\langle+|-\rangle_y|^2 = 0$ ,  $|_y\langle\pm|\pm\rangle_z|^2 = 1/2$ ,  $|_y\langle\pm|\pm\rangle_x|^2 = 1/2$ . Stąd z dokładnością do globalnego czynnika fazowego (Ćwiczenia):

$$|+\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle_z + i|-\rangle_z), \quad |-\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle_z - i|-\rangle_z).$$

Globalny czynnik fazowy nigdy nie ma znaczenia—obserwowalne są prawdopodobieństwa.

Stan o rzucie momentu magnetycznego  $+\mu$  w kierunku  $\vec{n} = [\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta]$ ,  $|\vec{n}\rangle = n_+|z\rangle_+ + n_-|z\rangle_-$ . Średnia wartość momentu magnetycznego tak jak klasycznie:

$$\begin{aligned} |z\langle+|\vec{n}\rangle|^2 - |z\langle-|\vec{n}\rangle|^2 &= \cos\theta \\ |x\langle+|\vec{n}\rangle|^2 - |x\langle-|\vec{n}\rangle|^2 &= \sin\theta\cos\varphi \\ |y\langle+|\vec{n}\rangle|^2 - |y\langle-|\vec{n}\rangle|^2 &= \sin\theta\sin\varphi \end{aligned}$$

$$|n_+|^2 - |n_-|^2 = \cos\theta$$

$$\frac{1}{2}(|n_+ + n_-|^2 - |n_+ - n_-|^2) = \sin\theta\cos\varphi$$

$$\frac{1}{2}(|n_+ - in_-|^2 - |n_+ + in_-|^2) = \sin\theta\sin\varphi$$

Z dokładnością do globalnego czynnika fazowego:

$$|\vec{n}\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|+\rangle_z + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}|-\rangle_z = \begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi} \end{bmatrix}$$

Ogólny stan qubitu. Liczba parametrów rzeczywistych  $4 - 1 - 1 = 2$ . Ogólny stan—punkt na sferze Blocha (RYSUNEK-SFERA BLOCHA). Uwaga: ortogonalność na sferze Blocha (w przestrzeni) to nie ortogonalność w przestrzeni Hilberta.

Macierze  $\sigma_{x,y,z}$  (Pauliego) których wektorami własnymi będą  $|\pm\rangle_{x,y,z}$  a wartości własne  $\pm 1$ :

$$\sigma_x = |+\rangle_x\langle+| - |-\rangle_x\langle-| = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$$

$$\sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

Zwróćmy uwagę, że  $\langle \mu_z \rangle = \langle \psi | \mu \sigma_z | \psi \rangle$  i analogicznie  $x, y$ .  $\mu \sigma_z$  - obserwabla rzutu momentu magnetycznego na oś  $z$ . Ogólnie

$$\mu_{\vec{n}} = \mu(n_x \sigma_x + n_y \sigma_y + n_z \sigma_z) = \mu_B \vec{n} \cdot \vec{\sigma}$$

Obserwabla rzut momentu magnetycznego w kierunku  $\vec{n}$  (wartości własne  $\pm \mu$ , wektory własne  $|\pm\rangle_{\vec{n}}$ ). Sprawdzić (Ćwiczenia):

$$\langle \vec{n} | \mu_{\vec{n}} | \vec{n} \rangle = \mu \vec{n} \cdot \vec{n}'$$

czyli uzyskujemy wartość oczekiwaną, która zgadza się z klasycznym wyrażeniem (wartość oczekiwana: obkładamy obserwabłą stanem).

Model pokazuje, że przed pomiarem nie mamy nigdy dobrze określonej wartości wszystkich składowych momentu magnetycznego—co najwyżej jedną. Wybierając kierunek pomiaru „urealniamy” daną składową.

### Ćwiczenia

1. Wyprowadzenie wzoru Plancka, dyskusja dlaczego klasyczny opis nieadekwatny. Można też później przedyskutować problem ciepła właściwego ciał stałych - model Einsteina
2. Klasyczny model atomu wodoru - uproszczone rozumowanie prowadzące do jakościowego wyniku: po jakim czasie elektron spadnie na proton w związku z promieniowaniem wynikającym z wzoru Larmora ( $10^{-10}$  s).
3. Klasyczna dyskusja działania płytki światłodzielnącej i interferometru Macha-Zehndera - wyprowadzenie wzorów na natężenia na wyjściu, które muszą w wersji kwantowej odpowiadać prawdopodobieństwom—wprowadzenie notacji wektora dwuwymiarowego z amplitudami (klasycznie-amplitudy pola e-m, kwantowo to będą amplitudy prawdopodobieństwa)
4. Bomba Vaidmana w wersji podstawowej—prawdopodobieństwo sukcesu  $1/4$  (w kolejnych tygodniach można dać w wersji zaawansowanej z sukcesem dowolnie bliskim 1 w kontekście efektu Zenona)
5. Mając stałą  $\hbar, G, c$  możemy zbudować naturalny układ jednostek gdzie  $\hbar = 1, G = 1, c = 1$  (czas Plancka, długość Plancka - charakterystyczne skale gdzie spodziewamy się efektów kwantowej grawitacji, masa Plancka (czarna dziura o tej masie miałaby promień Schwarzschilda równy długości Plancka)
6. Pokazać, że z dokładnością do globalnego czynnika fazowego stany spinu  $1/2$   $|\pm\rangle_y$  wyznaczone jednoznacznie przy założeniu, że mamy  $|\pm\rangle_z$  i  $|\pm\rangle_x$  i że konieczne są liczby zespolone.
7. Sprawdzić że  $\langle \vec{n} | \mu_{\vec{n}} | \vec{n} \rangle = \mu \vec{n} \cdot \vec{n}'$

8. Sprawdzić, że wektory własne  $\mu_{\vec{n}}$ , to  $|\vec{n}\rangle$  i  $|\vec{n}'\rangle$ .
9. Przygotowano stan  $|\vec{n}\rangle$ , a następnie zmierzono urządzeniem Sterna Gerlacha ustawionym w kierunku zadanym przez wektor  $\vec{m}$ . Jakie jest prawdopodobieństwo zmierzenia wartości momentu magnetycznego  $+\mu$ ?

### TYDZIEŃ II (04.03, 06.03)

#### Matematyczne sformułowanie Mechaniki kwantowej

**Zasada superpozycji!** podstawa Mechaniki kwantowej. Jeśli układ można przygotować w stanach  $|1\rangle, |2\rangle$  to można go też przygotować w stanie superpozycji tych dwóch stanów  $\alpha|1\rangle + \beta|2\rangle$  (np. foton w superpozycji dwóch dróg, atom w superpozycji dwóch stanów energetycznych, spin w superpozycji do góry i do dołu, itp...) Stąd stany opisujemy używając przestrzeni wektorowej.

**Stan układu** reprezentujący pełną wiedzę o układzie—unormowany wektor:  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ ,  $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ . Wymiar przestrzeni Hilberta  $\mathcal{H}$  może być  $\infty$ .  $e^{i\alpha}|\psi\rangle \equiv |\psi\rangle$ .

**Pomiar** Rzutowanie stanu w pewnej bazie  $|i\rangle$ .  $p_i = |\langle i | \psi \rangle|^2$  (kwadrat amplitud prawdopodobieństwa) i układ po pomiarze w stanie  $|i\rangle$ . Oznacza to, że stany ortogonalne są potencjalnie rozróżnialne przez pewien pomiar. Jeśli wynik pomiaru  $i$  związany z pewną wielkością fizyczną o wartości  $a_i$ , to  $A = \sum_i a_i |i\rangle \langle i|$  - nazywamy obserwabłą danej wielkości fizycznej (operator Hermitowski).  $\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle = \sum_i a_i \langle \psi | |i\rangle \langle i| | \psi \rangle = \sum_i a_i |\langle \psi | i \rangle|^2$ .

**Ewolucja.** Podobnie jak w mechanice klasycznej. Ewolucja układu izolowanego odwracalna (informacja nie ginie), jeśli mieliśmy stany rozróżnialne to pozostaną rozróżnialne (zachowuje ortogonalność).

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle$$

Zakładamy:  $U(t)$ -operacja liniowa (reprezentowana przez macierz) i zachowująca rozróżnialność stanów. Rozważmy bazę  $|i\rangle, |j\rangle, \langle j | i \rangle = \delta_{ij}$ . Chcemy

$$\langle U(t)i | U(t)j \rangle = \langle i | U(t)^\dagger U(t) | j \rangle = \delta_{ij}$$

Czyli  $U(t)^\dagger U(t) = \mathbf{1}$ .  $U(t)$ -unitarna—zachowuje iloczynny skalarne.

Rozważmy nieskończenie małą ewolucję,  $U(dt)$ , wiemy, że  $U(dt) \xrightarrow{dt \rightarrow 0} \mathbf{1}$ . Zakładamy też że pierwszy rząd nietrywialny rząd jest liniowy w czasie (stałe na razie nazwane arbitralnie)

$$U(dt) \approx \mathbf{1} - \frac{i}{\hbar} H dt$$

Z warunku unitarności  $U(dt)^\dagger U(dt) = \mathbf{1} + \frac{i}{\hbar}(H^\dagger - H) + O(dt^2) \rightarrow H^\dagger = H$  - operator Hermitowski (po to było  $i$ ). Z tego wynika:

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = H|\psi(t)\rangle \quad (1)$$

(Równanie Schroedingera - ale ciągle nie wiemy co to jest  $H$ ?)

Jak ewoluują wartości oczekiwane obserwabli?

$$\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|A|\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar}(\langle\psi(t)|AH - HA|\psi(t)\rangle) = -\frac{i}{\hbar}\langle[A, H]\rangle$$

Weźmy  $A = H$ ,  $\frac{d\langle H \rangle}{dt} = -\frac{i}{\hbar}\langle[H, H]\rangle = 0$ . Wartość oczekiwana  $H$  nie zmienia się w czasie—dobry kandydat na energię! (z dokładnością do stałej, którą wprowadzamy za pomocą  $\hbar$  jednocześnie zapewniając dobre jednostki)  $H$ -Hamiltonian, obserwabla związana z pomiarem energii.

Analogia z Mechaniką klasyczną.

$$\frac{dA}{dt} = \{A, H\}, \quad \frac{d\langle\hat{A}\rangle}{dt} = -\frac{i}{\hbar}\langle[\hat{A}, \hat{H}]\rangle$$

Czyli formalnie zastępując nawias Poissona  $\{\cdot, \cdot\}$  przez  $-\frac{i}{\hbar}[\cdot, \cdot]$  mamy korespondencje między klasycznym i kwantowym opisem (pod warunkiem że wiemy jak napisać operatory odpowiadające danym obserwablom).

Jeśli  $H$  nie zależy od czasu (brak zewnętrznych zmiennych czynników), równanie (1) daje:

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle, \quad U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}.$$

Wystarczy umieć liczyć exp od macierzy.

Jeśli  $H = \sum_k E_k |E_k\rangle\langle E_k|$ . Jak ewoluują  $|E_k\rangle$ ?

$$|E_k(t)\rangle = e^{-\frac{iE_k t}{\hbar}} |E_k(0)\rangle$$

—stany stacjonarne (globalny czynnik fazowy nie zmienia fizycznie stanu). Mając rozkład  $|\psi(0)\rangle = \sum_k \psi_k |E_k\rangle$ :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_k \psi_k e^{-\frac{iE_k t}{\hbar}} |E_k\rangle = \sum_k \langle E_k | \psi(0) \rangle e^{-\frac{iE_k t}{\hbar}} |E_k\rangle.$$

Urok notacji bracket:  $|\psi\rangle = \sum_k \psi_k |E_k\rangle = \sum_k \langle E_k | \psi \rangle |E_k\rangle = \sum_k |E_i\rangle \langle E_i | \psi \rangle$ , Ale  $\sum_i |E_i\rangle \langle E_i| = \mathbb{1}$ , czyli  $|\psi\rangle = \mathbb{1} |\psi\rangle$ .

*Przykład: precesja momentu magnetycznego w polu magnetycznym* Pole  $B$  w kierunku  $z$ ,  $H = -\mu\sigma_z B$ . Weźmy  $|\psi(0)\rangle = \cos\theta/2|+\rangle_z + \sin\theta/2|-\rangle_z$

$$|\psi(t)\rangle = \cos\frac{\theta}{2} e^{-\frac{i\mu B t}{\hbar}} |+\rangle_z + \sin\frac{\theta}{2} e^{\frac{i\mu B t}{\hbar}} |-\rangle_z$$

$$|\psi(t)\rangle \equiv \cos\frac{\theta}{2} |+\rangle_z + \sin\frac{\theta}{2} e^{\frac{2i\mu B t}{\hbar}} |-\rangle_z$$

Czyli na sferze Blocha obrót wokół osi  $z$ ,  $\omega = 2\mu B/\hbar$ .

W ogólności jeśli  $H$  zależy od czasu wciąż możemy napisać:

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = H(t)|\psi(t)\rangle$$

ale odcałkowanie już nietrywialne. Można formalnie napisać:

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle, \quad U(t) = \mathcal{T} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t ds H(s)}$$

gdzie  $\mathcal{T}$  oznacza uporządkowanie czasowe operatorów (te z mniejszym  $s$  muszą uderzać na stan pierwsze). Jawnie

$$U(t) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H(t_1) H(t_2) \dots H(t_n)$$

My raczej będziemy mieć do czynienia z  $H$  niezależnymi od czasu. W Mechanice kwantowej mamy szizofreniczną ewolucję stanu: (i) ciągłą deterministyczną jak nie ma pomiarów, (ii) skokowa niedeterministyczna (kolaps funkcji falowej) w wyniku pomiaru.

### Cząstka w przestrzeni (1D)

Zmierzamy do równania Schrodingera na koszułkach. Chcemy opisać punktową nierelatywistyczną cząstkę kwantową o masie  $m$ , mogącą poruszać się w 1D. Nieskończenie wiele położeń cząstki—przestrzeń nieskończenie wymiarowa. Jeśli mamy jakąś skalę rozdzielczości to liczba stanów przeliczalna:

$$|\psi\rangle = \sum_x \psi(x)|x\rangle.$$

$\psi(x) = \langle x | \psi \rangle$  - funkcja falowa (amplituda prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w  $x$ ),  $|\psi(x)|^2$ -prawdopodobieństwo,  $|x\rangle$  - stan którego pomiar położenia da zawsze  $x$ . Warunek unormowania  $\sum_x |\psi(x)|^2 = 1$ . Mamy po prostu nieskończenie wymiarową przestrzeń wektorową. W praktyce często uciągamy [OPISAĆ PRZEJŚCIE DOKŁADNIEJ]:

$$|\psi\rangle = \int_x \psi(x)|x\rangle.$$

Wtedy  $|\psi(x)|^2$  gęstość prawdopodobieństwa,  $\int dx |\psi(x)|^2 = 1$ . Mówimy, że  $\psi(x)$  należą do przestrzeni Hilberta  $L^2$ -przestrzeń funkcji całkowalnych z kwadratem. Ale zaraz pojawiają się pewne problemy z interpretacją  $|x\rangle$ ... Musi być:

$$1 = \langle\psi|\psi\rangle = \int dx dx' \psi^*(x) \psi(x') \langle x|x'\rangle$$

Czyli musimy mieć  $\langle x|x'\rangle = \delta(x-x')$ . Stany  $|x\rangle$  nie są unormowane, nie należą do  $L^2$ , mimo to używamy ich dla wygody. Dają rozkład jedności:

$$\int dx |x\rangle\langle x| = \mathbb{1}$$

bo  $\langle x' | \int dx |x\rangle\langle x| |x''\rangle = \delta(x'-x'')$ . Iloczyn skalarny funkcji falowych:

$$\langle\psi|\phi\rangle = \int dx \psi^*(x) \phi(x).$$

Operator położenia  $\hat{x}$ .  $\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$ . Czyli  $\hat{x}|\psi\rangle = \int dx \psi(x) x|x\rangle$ , innymi słowy myśląc o funkcji falowej możemy równoważnie mówić:  $\hat{x}\psi(x) = x\psi(x)$ . Odrywając się od  $|\psi\rangle$  i mówiąc tylko o  $\psi(x)$  mówimy, że używamy reprezentacji położeniowej stanu kwantowego (amplitud w bazie własnej  $\hat{x}$ ).

Żeby napisać kwantowy Hamiltonian odpowiadający klasycznemu  $(p^2/2m + V(x))$  potrzebujemy operatora  $\hat{p}$ . Posłużmy się analogią do nawiasów Poissona. Wiemy, że  $\{x, p\} = 1$  czyli chcemy znaleźć  $\hat{p}$ , żeby:

$$\langle\psi|[\hat{x}, \hat{p}]|\psi\rangle = i\hbar.$$

Równoważnie  $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar\mathbb{1}$  Czyli w reprezentacji położeniowej

$$(x\hat{p} - \hat{p}x)\psi(x) = i\hbar\psi(x)$$

Weźmy

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$$

$$-i\hbar x \frac{d\psi(x)}{dx} + i\hbar \frac{d(x\psi(x))}{dx} = i\hbar\psi(x)$$

jest OK. Możemy napisać Hamiltonian w reprezentacji położeniowej:

$$H = \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right)^2 + V(x)$$

Czyli równanie Schroedingera zależne od czasu, na funkcję falową  $\psi(x, t)$  w reprezentacji położeniowej

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right] \psi(x, t) \quad (2)$$

Dla  $H$  niezależnego od czasu Wiemy, że stany własne  $H$  (stany o energii  $E$ ), ewoluują:

$$\psi_E(x, t) = \psi_E(x) e^{-\frac{iEt}{\hbar}},$$

i eliminujemy czas otrzymując równanie Schroedingera bez czasu:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right] \psi_E(x) = E\psi_E(x)$$

Rozwiązując to równanie znajdujemy stany własne  $H$ .

*Przykład. Cząstka swobodna* Bierzemy  $V(x) = 0$ ,  $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x)$ . Rozwiązanie (stała arbitralna):

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ipx}{\hbar}},$$

gdzie  $p = \pm\sqrt{2mE}$ . Czyli pełna funkcja:

$$\psi_p(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)},$$

fala płaska biegnąca w prawo lub lewo. Długość fali

$$\lambda = 2\pi\hbar/p = \frac{\hbar}{p}$$

tak jak w Hipotezie de Broglie. Moglibyśmy zacząć od tego na zasadzie analogii ze światłem i argumentować, że stąd  $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ .

## Reprezentacja pędowa

$\psi_p(x)$  to jest stan własny operatora  $\hat{p}$  z wartością własną  $p$ , możemy go nazwać  $|p\rangle$ :

$$|p\rangle = \int dx \psi_p(x) |x\rangle$$

niestety podobnie jak  $|x\rangle$  nie unormowany:

$$\langle p|p'\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dx e^{i(p-p')x/\hbar} = \delta(p-p')$$

Ale dają rozkład jedynki:

$$\int dp |p\rangle \langle p| = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp dx dx' e^{ip(x-x')/\hbar} |x\rangle \langle x'| = \int dx |x\rangle \langle x| = \mathbb{1}$$

Czyli możemy zapisać równoważnie stan:

$$|\psi\rangle = \int dx \psi(x) |x\rangle = \int dp \tilde{\psi}(p) |p\rangle$$

Gdzie  $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$ ,  $\tilde{\psi}(p) = \langle p|\psi\rangle$  - funkcja falowa w reprezentacji pędowej:

$$\tilde{\psi}(p) = \int dx \psi(x) \langle p|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx e^{-ipx/\hbar} \psi(x)$$

transformata Fouriera.

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp e^{ipx/\hbar} \tilde{\psi}(p)$$

$|\tilde{\psi}(p)|^2$  - gęstość prawdopodobieństwa zmierzenia pędu  $p$ .

## Paczka Gaussowska

Model zlokalizowanej cząstki swobodnej.

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} e^{\frac{ip_0x}{\hbar} - \frac{x^2}{4\sigma^2}}$$

Fala płaska modulowana gausem.

$$\langle x \rangle = \langle \psi | \hat{x} | \psi \rangle = \int dx \psi^*(x) x \psi(x) = 0 \quad \Delta^2 x = \sigma^2$$

W reprezentacji pędowej:

$$\tilde{\psi}(p) = \left(\frac{2\sigma^2}{\pi\hbar^2}\right)^{1/4} e^{-\frac{\sigma^2(p-p_0)^2}{\hbar^2}}$$

$$|\tilde{\psi}(p)|^2 = \sqrt{\frac{2\sigma^2}{\pi\hbar^2}} e^{-\frac{2\sigma^2(p-p_0)^2}{\hbar^2}}$$

Czyli  $\Delta^2 p = \hbar^2/(4\sigma^2)$

$$\Delta^2 p \Delta^2 x = \frac{\hbar^2}{4}$$

Im lepiej określamy położenie tym gorzej określamy pęd (przejaw ogólnej zasady nieoznaczoności Heisenberga, w tym przypadku własność transformaty Fouriera). Jak ewoluuje paczka? Rozkładamy na stany o określonej energii i ewoluujemy:

$$|\psi(t)\rangle = \int dp \langle p|\psi(0)\rangle e^{-\frac{ip^2t}{2m\hbar}} |p\rangle$$

$$\tilde{\psi}(p,t) = \tilde{\psi}(p,0) e^{-\frac{ip^2t}{2m\hbar}}$$

Wracamy do reprezentacji położeniowej:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp e^{\frac{ipx}{\hbar}} \tilde{\psi}(p,t)$$

Wychodzi z dokładnością do nieistotnego czynnika fazowego [Ćwiczenia]:

$$\psi(x,t) = \left(\frac{\sigma^2}{2\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{\sigma^2 + \frac{i\hbar t}{2m}}} e^{\frac{ip_0 x}{\hbar}} e^{-\frac{(x - \frac{p_0 t}{m})^2}{4(\sigma^2 + \frac{i\hbar t}{2m})}}$$

Ciekawiej jak weźmiemy moduł:

$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi[\sigma^2 + (\frac{\hbar t}{2m\sigma})^2]}} e^{-\frac{(x - \frac{p_0 t}{m})^2}{2(\sigma^2 + (\frac{\hbar t}{2m\sigma})^2)}}$$

Średnia paczki porusza się jak cząstka klasyczna  $\langle x \rangle = p_0 t/m$ , ale paczka się rozplywa:

$$\sigma(t) = \sqrt{\sigma^2 + \left(\frac{\hbar t}{2m\sigma}\right)^2} = \sigma \sqrt{1 + (t/\tau)^2}$$

gdzie  $\tau = \frac{2m\sigma^2}{\hbar}$  charakterystyczny czas rozplywania.

## Ćwiczenia

1. Krótka powtórka z algebry: operatory Hermitowskie, Unitarne (własności - wartości własne, ortogonalność wektorów własnych), liczenie funkcji od operatora [w szczególności  $\exp(A)$ , zwrócić uwagę, że  $\exp(A+B) \neq \exp(A)\exp(B)$  i dlatego problem jak Hamiltonian zależy od czasu], przykłady z notacją bra, ket
2. Zapisać równania na ewolucję wartości oczekiwanych składowych  $\vec{\mu}$  dla momentu magnetycznego umieszczonego w polu  $B$  skierowanym w kierunku  $z$  — precesja (wprowadzić przy okazji ogólne reguły komutacyjne dla macierzy Pauliego).
3. Rozważyć stan  $|+\rangle_z$ , w polu magnetycznym  $B$  w kierunku  $x$ . Napisać stan po czasie  $t$ . Zmierzono  $\mu_z$ , znaleźć prawdopodobieństwa wyniku  $\pm\mu$ . Gdyby podzielono  $t$  na  $n$  krótki odcinków czasu  $t = n\tau$ ,  $n \gg 1$ , i mierzono stan co czas  $\tau$ . Jakie jest prawdopodobieństwo w granicy  $n \rightarrow \infty$ , że stan w każdym pomiarze będzie

wychodził  $|+\rangle_z$  (efekt Zenona). Wrócić do przykładu Bomby—ale przetłumaczonego na spin. Jeśli bomba by wybuchła gdy moment magnetyczny w dół  $|-\rangle_z$ , to bierzemy czas ewolucji  $t = \pi/\omega$  ( $\omega = 2\mu B/\hbar$  częstość precesji), i co  $\tau = t/n$  zblizamy do miejsca gdzie potencjalnie jest bomba - efekt Zenona powoduje ze jak weźmiemy  $n$  bardzo duże to pozostajemy w stanie  $|+\rangle_z$  i bomba nie wybucha. Jeśli bomby nie ma to ewolucja idzie unitarnie do  $|-\rangle_z$ . Na końcu mierzymy i wiemy, że bomby nie było.

4. Pokazać, że  $\frac{d}{dx}$  nie jest op. hermitowskim a już  $-i\frac{d}{dx}$  jest

5. Pokazać, że (tw. Ehrenfesta)

$$m \frac{d}{dt} \langle \hat{x} \rangle = \langle \hat{p} \rangle, \quad \frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle = -\langle \frac{d}{dx} V(x) \rangle$$

. Do tego wykazać najpierw  $[\hat{p}, f(\hat{x})] = -f'(\hat{x})$

6. Zapisać równanie Schroedingera w reprezentacji pędowej

7. Paczka Gaussowska - średnie położenie, wariancja, Ogólnie przyda się na przyszłość wzór na całki typu  $\int_{-\infty}^{+\infty} x^n e^{-x^2}$  (przez różniczkowanie po parametrze) - ewolucja w czasie (rozmywanie, ruch ze średnim pędem, wyprowadzić przez całkę konturową  $\int_{-\infty}^{\infty} e^{bx-ax^2} = e^{b^2/(4a^2)}$  (działa zawsze jak  $Re(a) \geq 0$ , przy liczeniu propagatora będziemy mieli przypadek  $Re(a) = 0$  więc warto zrobić to porządnie), policzyć charakterystyczny czas rozmywania dla obiektu makroskopowego vs mikroskopowego.

## TYDZIEŃ III (11.03,13.03)

### Funkcja Green'a (propagator)

Wiemy, że jeśli  $H = \sum_k E_k |k\rangle \langle k|$ ,  $\phi_k(x) = \langle x|k\rangle$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_k \langle k|\psi(t_0)\rangle e^{-\frac{iE_k(t-t_0)}{\hbar}} |k\rangle$$

, Przechodząc do reprezentacji położeniowej:

$$\begin{aligned} \psi(x,t) &= \sum_k \phi_k(x) e^{-\frac{iE_k(t-t_0)}{\hbar}} \int dx_0 \langle k|x_0\rangle \langle x_0|\psi(t_0)\rangle = \\ &= \int dx_0 \sum_k \phi_k(x) \phi_k^*(x_0) e^{-\frac{iE_k(t-t_0)}{\hbar}} \psi(x_0, t_0) = \\ &= \int dx G(x,t, x_0, t_0) \psi(x_0, t_0) \quad (3) \end{aligned}$$

Gdzie

$$G(x,t, x_0, t_0) = \sum_k \phi_k(x) \phi_k^*(x_0) e^{-\frac{iE_k(t-t_0)}{\hbar}} \quad (4)$$

funkcja Greena (raczej koncepcyjnie ciekawe niż rachunkowo użyteczne).  $G(x, t_0, x_0, t_0) = \delta(x - x_0)$  - Ok, dzięki zupełności bazy.

### Interpretacja funkcji falowej jako płynu

Mamy gęstość prawdopodobieństwa:

$$\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2$$

Wprowadźmy prąd prawdopodobieństwa

$$j(x, t) = - \left( \frac{i\hbar}{2m} \right) [\psi^* \partial_x \psi - \partial_x \psi^* \psi] = \frac{\hbar}{m} \text{Im} (\psi^* \partial_x \psi)$$

i mamy równanie a'la równanie ciągłości:

$$\partial_t \rho + \partial_x j = 0$$

W 3D byłoby odpowiednio:

$$\partial_t \rho + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$$

prawdopodobieństwo nie ginie. Zauważmy, że:

$$\int dx j(x, t) = \langle p \rangle_t / m$$

, czyli „średnia prędkość”.

### Granica klasyczna/półklasyczna

Rozdzielmy na amplitudę i fazę:

$$\psi(x, t) = \sqrt{\rho(x, t)} e^{\frac{iS(x, t)}{\hbar}} \quad (5)$$

gdzie  $S(x, t)$  f. rzeczywista.

$$\psi^* \partial_x \psi = \frac{1}{2} \partial_x \rho + \frac{i}{\hbar} \rho \partial_x S$$

Czyli:

$$j = \frac{\rho}{m} \partial_x S$$

Zmienność przestrzenna fazy—strumień prawdopodobieństwa. Średnio daje średni pęd:

$$\int dx \rho \partial_x S = \langle p \rangle_t$$

. Czyli  $\partial_x S$  ma coś wspólnego z pędem.

Rozważmy cząstek o energii  $E$  w stałym potencjale  $V$ :

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{\pm i p x - i E t}{\hbar}}, \quad p = \sqrt{2m(E - V)}$$

Intuicja jak potencjał wolno zmienny [RYSUNEK] to rozwiązanie powinno być bliskie powyższemu tylko

$$p(x) = \sqrt{2m[E - V(x)]} = \partial_x S$$

, zależne od  $x$  i w ten sposób mielibyśmy bliski związek z ruchem klasycznym. Naturalny warunek wolno zmienności (Skala długości  $\lambda = \hbar/p(x)$ ):  $p(x)/(\frac{dp(x)}{dx}) \gg \lambda$ :

$$(\partial_x S)^2 \gg \hbar \partial_x^2 S. \quad (6)$$

Wstawmy (5) do równania Schroedingera:

$$\begin{aligned} & i\hbar \partial_t \sqrt{\rho} - \sqrt{\rho} \partial_t S = \\ & - \frac{1}{2m} [\hbar^2 \partial_x^2 \sqrt{\rho} + 2i\hbar \partial_x \sqrt{\rho} \partial_x S + i\hbar \sqrt{\rho} \partial_x^2 S - \sqrt{\rho} (\partial_x S)^2] + \sqrt{\rho} V \end{aligned} \quad (7)$$

I patrzmy na wyrazy w najniższym rzędzie w  $\hbar$  (że to legalnie uspokaja nas warunek (6)):

$$-\partial_t S = \frac{1}{2m} (\partial_x S)^2 + V \quad (8)$$

To jest klasyczne równanie Hamiltona-Jacobiego,  $S(x, t)$ -funkcja działania (funkcja tworząca)—możemy to traktować jako taki consistency check. Zwróćmy uwagę, że klasycznie mamy  $p = \partial_x S$  czyli zgodnie z intuicjami wcześniejszymi.  $S = \text{const}$  wyznacza jakby fronty falowe a cząstka porusza się prostopadle do nich. Tak jak optyka geometryczna ma się do falowej do mechanika klasyczna ma się do kwantowej! (Hamilton najpierw stosował swoje podejście w optyce a później przeniósł na mechanikę. Schroedinger i de Broglie się tym inspirowali, wcześniej brakowało skali wyznaczanej teraz przez  $\hbar$ ).

Rozważmy teraz stany stacjonarne o energii  $E$  w przybliżeniu półklasycznym. Mamy:  $\partial_t \rho = 0$ ,  $\partial_t S = -E$ . Możemy rozwiązać (8)

$$S(x, t) = \pm \int^x ds \sqrt{2m[E - V(s)]} - Et.$$

Chcemy aby spełnione było równanie ciągłości  $\partial_t \rho + \partial_x j = 0$ , czyli

$$\partial_x (\rho \partial_x S) = \text{const}$$

a więc

$$\rho(x) = \frac{\text{const}}{\sqrt{2m[E - V(x)]}}$$

czyli

$$\psi(x) = \frac{\text{const}}{\sqrt{p(x)}} e^{\pm \left(\frac{i}{\hbar}\right) [\int_{x_0}^x ds p(s) - Et]}, \quad p(x) = \sqrt{2m[E - V(x)]}$$

Intuicja: jak mniejszy pęd, cząstka dłużej przebywa, większe prawdopodobieństwo znalezienia. Przybliżenie WKB (Wentzel, Kramers, Brillouin)—„pierwsza poprawka kwantowa do teorii klasycznej”. Przybliżenie tym lepsze im wolniej zmienny potencjał. To się nam kiedyś przyda jako metoda przybliżona poszukiwania energii własnych, współczynników transmisji, itp. Zwróćmy uwagę, że możemy też stosować to przybliżenie w obszarze  $E < V(x)$ , wtedy:

$$\psi(x) = \frac{\text{const}}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\pm \left(\frac{1}{\hbar}\right) [\int_{x_0}^x ds |p(s)| - Et]}, \quad |p(x)| = \sqrt{2m[V(x) - E]}$$

Mamy f. wykładnicze. Niestety w okolicy  $E \approx V(x)$  nie możemy użyć tego przybliżenia i stąd w praktyce potrzeba jeszcze dokładnej analizy w okolicach punktu powrotu (później) [SZKIC RYSUNKU FUNKCJI W POTENCJALE]



### Całki po trajektoriach

Feynman (1948). Spójrzmy na propagator (4) - mówi jak propagują się amplitudy. Zauważmy, że dla  $t > t_1 > t_0$

$$\int dx_1 G(x, t, x_1, t_1) G(x_1, t_1, x_0, t_0) = \int dx_1 \sum_{k, k'} \phi_k(x) \phi_k^*(x_1) e^{-\frac{iE_k(t-t_1)}{\hbar}} \phi_{k'}(x_1) \phi_{k'}^*(x_0) e^{-\frac{iE_{k'}(t_1-t_0)}{\hbar}} = \sum_k \phi_k(x) \phi_k^*(x_0) e^{-\frac{iE_k(t-t_0)}{\hbar}} = G(x, t, x_0, t_0) \quad (9)$$

Ciekawe pytanie—na ile to jest ogólna własność dla innych równań niż Schrodingera. [RYSUNEK - suma amplitud po różnych drogach.] Jeśli teraz będziemy zagęszczać czasy pośrednie, to efektywnie będzie suma amplitud po wszystkich trajektoriach  $x(\tau)$ ,  $t_0 < \tau < t$  z  $x(t_0) = x_0$  do  $x(t) = x$ . Jakie powinniśmy przypisać amplitudy  $\phi[x(\tau)] = ?$  tym drogom żeby sumując je wszystkie uzyskać dobry kwantowy propagator?

$$G(x, t, x_0, t_0) = \sum_{x(\tau): x(t_0)=x_0, x(t)=x} \phi[x(\tau)]$$

Na pewno chcemy, żeby odtworzyć jakoś granicę kalsyczną. Zasada najmniejszego działania: klasyczna trajektoria—extremum funkcjonału działania:

$$S[x(\tau)] = \int_{t_0}^t L(x, \dot{x}), \quad \delta S[x(\tau)] = 0$$

$L(x, \dot{x})$ -Lagranżian. Jeśli przypisać każdej trajektorii:  $e^{\frac{i}{\hbar} S[x(\tau)]}$ , to generalnie zmieniając trajektorie działanie się zmienia i sumujemy przypadkowe fazy, ale gdy w okolicy  $\delta S[x(\tau)] = 0$ , działanie nie zmienia się w pierwszym rzędzie—amplitudy wielu trajektorii dodają się konstruktywnie! Sensownie jest więc spróbować:

$$G(x, t, x_0, t_0) = \text{const} \sum_{x(\tau)} e^{\frac{i}{\hbar} S[x(\tau)]}$$

Magia. Pokażemy że dostajemy równanie Schrodingera. Dzięki własności składania, wystarczy rozważyć infinitezimalny krok:  $t = t_0 + \epsilon$ . Wtedy

$$G(x, t_0 + \epsilon, x_0, t_0) = \text{const} \cdot e^{\frac{i}{\hbar} \epsilon L[(x+x_0)/2, (x-x_0)/\epsilon]}$$

Weźmy:

$$L(x, \dot{x}) = \frac{m\dot{x}^2}{2} - V(x)$$

$$\psi(x, t_0 + \epsilon) = \text{const} \int dx_0 \psi(x_0, t_0) e^{\frac{im(x-x_0)^2}{2\hbar\epsilon}} e^{-\frac{i\epsilon V[(x+x_0)/2]}{\hbar}}$$

Oznaczmy  $\eta = x_0 - x$ . Będziemy rozwijać w  $\eta$  i  $\epsilon$ . Widać, że wkład dają  $\eta \propto \sqrt{\epsilon}$ , czyli rozwijamy do pierwszego rzędu

w  $\epsilon$  i drugiego w  $\eta$ :

$$\psi(x, t_0) + \epsilon \partial_t \psi = \text{const} \int d\eta e^{\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon}} \left[ 1 - \frac{i}{\hbar} \epsilon V(x_0, t_0) \right] \left[ \psi(x, t_0) + \eta \partial_x \psi + \frac{\eta^2}{2} \partial_x^2 \psi \right] \quad (10)$$

W najniższym rzędzie mamy warunek:  $\text{const} \int d\eta e^{\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon}} = 1$ , stąd wyznaczamy stałą  $\text{const} = \sqrt{m/(2\pi i \hbar \epsilon)}$ . W rzędzie do  $\epsilon$  mamy:

$$\epsilon \partial_t \psi = -\frac{i}{\hbar} \epsilon V \psi + \frac{i\hbar\epsilon}{2m} \partial_x^2 \psi$$

I mamy równanie Schrodingera! Czyli efektywnie, propagator możemy liczyć jako:

$$G(x_2, t_2, x_1, t_1) = \int_{x(\tau)} \mathcal{D}[x(\tau)] e^{\frac{i}{\hbar} S[x(\tau)]} \quad (11)$$

$$S[x(\tau)] = \int_{t_1}^{t_2} L(x, \dot{x}, t) dt \quad (12)$$

### Ćwiczenia

1. Obliczyć  $j(x, t)$  dla paczki gaussowskiej, a potem  $\int dx j(x, t)$  i sprawdzić, że równa się  $\langle p \rangle_t / m$ —intuicja prąd prawdopodobieństwa ma coś wspólnego ze średnim pędem.
2. Obliczyć funkcję Greena dla cząstki swobodnej z definicji
3. Wyprowadzić funkcję Greena dla cząstki swobodnej metodą całek po trajektoriach
4. Pokazać, że dla potencjałów co najwyżej kwadratowych da się łatwo znajdować propagator metodą całek po trajektoriach (potencjał liniowy, oscylator harmoniczny). Można to zilustrować znajdując funkcję Greena metodą całek po trajektoriach dla potencjału harmonicznego (patrz Feynman, Hibbs). Aby wyznaczyć część propagatora zależną tylko od różnicy czasu, co jest trudne, można przeewoluować Gaussa i skorzystać z warunku zachowania unormowania. Stwierdzić jaki Gauss nie zmieni się z dokładnością do fazy—w ten sposób pokazujemy, że to stan własny. Można też z propagatora wyznaczyć stany własne i energie oscylatora harmonicznego—to się da zrobić zauważając związki z funkcją tworzącą wielomianów Hermita, to jest pokazane w Am. J. Phys. 56, 216–222 (1988), jest też w <http://arxiv.org/abs/quant-ph/0205085v2>.
5. Quantum speed limit [Opcjonalnie jak starczy czasu—chodzi o intuicje, że szybko ewoluują stany o dużej wariancji energii]: Wyprowadzić ograniczenie na minimalny czas jaki jest potrzebny aby stan  $|\psi\rangle$  przeewoluował do stanu ortogonalnego  $|\psi_\perp\rangle$ :  $T \geq h/(4\Delta E)$ , gdzie  $\Delta E$  jest nieoznaczonością energii w

stanie  $|\psi\rangle$ . Wskazówka: Pokazać najpierw że dla dowolnego op. hermitowskiego zachodzi:  $\hat{A}|\psi\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle|\psi\rangle + \Delta A|\psi_\perp\rangle$ , gdzie  $\langle\psi_\perp|\psi\rangle = 0$  (Am. J. Phys. 60, 182 (1992)). Można też zrobić w wersji uproszczonej myśląc o qubicie z pewnym hamiltonianem  $H$  i niech sami stwierdzą które stany ewoluują najszybciej i sprawdzić ograniczenie  $T \geq h/(4\Delta E)$ .

[Przygotować serie zadań domowych do kolokwium 30 marca, uwzględniając zadania z następnymi dwoma tygodniami]

## TYDZIEŃ IV (18.03,20.03)

### Stany stacjonarne

Typowe zadanie w mechanice kwantowej—znaleźć stany stacjonarne, tzn. Rozwiązać równanie Schroedingera bez czasu. Równanie drugiego rzędu: jeśli  $V(x)$  skończone  $\rightarrow \psi(x)$ ,  $\partial_x\psi(x)$  ciągłe. Dwa typy stanów stacjonarnych: stany związane, stany rozproszeniowe. [SZKIC DOŁKA POTENCJAŁU W GRANICY DAŻĄCEGO DO ZERA].

Jeśli rozważamy  $E < 0$  to w  $\pm\infty$  mamy rozwiązania typu  $A \exp(x\sqrt{2m|E|}/\hbar)$  ( $x \rightarrow -\infty$ ),  $B \exp(-x\sqrt{2m|E|}/\hbar)$  ( $x \rightarrow \infty$ ) (musimy odrzucić wybuchające) Przedłużamy je do  $x = 0$  i zawsze przez dobór stałych uzyskamy ciągłość  $\psi(x)$  ale już w ogólności nie  $\partial_x\psi(x)$ —sugeruje, że nie wszystkie  $E$  będą dopuszczalne. Funkcja będzie ograniczona w skończonym obszarze i normowalna—stany związane (dykretne widmo energii). Konieczne jest by był obszar wewnątrz gdzie  $E > V(x)$ .

Jeśli rozważamy  $E > 0$ , to asymptotycznie mamy  $Ae^{+ix\sqrt{2mE}} + Be^{-ix\sqrt{2mE}}$  (dla  $x \rightarrow -\infty$ ) i podobnie  $Ce^{+ix\sqrt{2mE}} + De^{-ix\sqrt{2mE}}$  ( $x \rightarrow +\infty$ ). Dobierając stałe możemy zapewnić ciągłość zarówno  $\psi$  jak i  $\partial_x\psi$  dla dowolnych  $E$ . Stany rozproszeniowe (ciągłe widmo energii), reprezentują stany cząstki nadbiegające/rozproszone. Rozważamy, falę nadbiegającą  $Ae^{ix\sqrt{2mE}}$ , odbitą  $Be^{-ix\sqrt{2mE}}$  i przechodzącą  $Ce^{ix\sqrt{2mE}}$  i zszywamy. Współczynnik transmisji, odbicia:  $T = \left|\frac{j_A}{j_B}\right| = \left|\frac{C}{A}\right|^2$ ,  $R = \left|\frac{j_C}{j_A}\right| = \left|\frac{B}{A}\right|^2$  Uwaga na  $T$  gdy asymptotycznie mamy różne potencjały (nie będzie już po prostu stosunku amplitud...).

Jeśli znamy rozwiązanie kawałkami w pewnych obszarach, zszywamy nakładając warunki ciągłości  $\psi(x)$ ,  $\partial_x\psi$ . Generalnie b. mało potencjałów dających analityczne rozwiązania. Przydatna uwaga: Jeśli potencjał symetryczny  $V(x) = V(-x)$ , zamieniając  $x$  na  $-x$  w rów. Schroedingera, widać, że  $\psi(x)$  i  $\psi(-x)$  spełniają to samo równanie. Jeśli dla danej energii tylko jedno rozwiązanie to  $\psi(x) = \alpha\psi(-x)$ , czyli  $\alpha^2 = 1$  czyli  $\alpha = \pm 1$ . Jeżeli nie to możemy zawsze skonstruować (nieunormowane)  $u_s = u(x) + u(-x)$ ,  $u_a = u(x) - u(-x)$ .

### Zasada nieoznaczoności

Zasada nieoznaczoności Heisenberga-Robertsona. Niech  $A$  i  $B$  dwie obserwabli. Wtedy dla dowolnego  $|\psi\rangle$

$$\Delta^2 A \Delta^2 B \geq \frac{1}{4} |\langle[A, B]\rangle|^2$$

W szczególności:

$$\Delta^2 x \Delta^2 p \geq \frac{\hbar^2}{4}.$$

*Dowód* : Wprowadźmy obserwabli dla których średnie są zero:  $\tilde{A} = A - \langle A \rangle$ ,  $\tilde{B} = B - \langle B \rangle$ . Rozważmy operator  $\tilde{F} = \tilde{A} + i\lambda\tilde{B}$ , gdzie  $\lambda \in \mathbb{R}$ . Wiemy, że  $\langle\psi|\tilde{F}^\dagger\tilde{F}|\psi\rangle \geq 0$  czyli:

$$\langle\psi|(\tilde{A} - i\lambda\tilde{B})(\tilde{A} + i\lambda\tilde{B})|\psi\rangle \geq 0$$

Czyli

$$\langle\tilde{A}^2\rangle + \lambda^2\langle\tilde{B}^2\rangle + i\lambda\langle[\tilde{A}, \tilde{B}]\rangle \geq 0$$

Zwróćmy uwagę, że jeśli  $\tilde{A}, \tilde{B}$  hermitowskie to  $[\tilde{A}, \tilde{B}]$  antyhermitowski,  $[\tilde{A}, \tilde{B}] = i\tilde{C}$ , gdzie  $\tilde{C}$  hermitowski.

$$\langle\tilde{A}^2\rangle + \lambda^2\langle\tilde{B}^2\rangle - \lambda\langle\tilde{C}\rangle \geq 0$$

Dla dowolnego  $\lambda \in \mathbb{R}$  czyli:

$$\langle\tilde{C}\rangle^2 - 4\langle\tilde{A}^2\rangle\langle\tilde{B}^2\rangle \leq 0$$

Ostatecznie:

$$\Delta^2 A \Delta^2 B \geq \frac{1}{4} |\langle[A, B]\rangle|^2. \square$$

Znaczenie zasady nieoznaczoności: nie mówimy tu nic o zaburzeniu (w odróżnieniu od oryginalnej pracy Heisenberga), tylko o możliwości stanu do posiadania jednocześnie określonych wielkości.

### Pomiary jednoczesne komutujących obserwabli

Jeśli  $[A, B] = 0$  istnieje wspólna baza własna  $\{|a, b\rangle\}$ , taka że  $A|a, b\rangle = a|a, b\rangle$ ,  $B|a, b\rangle = b|a, b\rangle$ .

*Dowód*. Na początek założymy, że widmo  $A$  niezdegenerowane:  $|a'\rangle$ ,  $|a''\rangle$ —wektory własne odpowiadające różnym wartościom własnym.

$$\langle a'|[A, B]|a''\rangle = (a'' - a')\langle a''|B|a'\rangle = 0$$

Czyli  $\langle a''|B|a'\rangle = \delta_{a'a''}\langle a'|B|a'\rangle$ —diagonalne. Czyli  $|a'\rangle$  jest też stanem własnym  $B$  z wartością własną  $\langle a'|B|a'\rangle$ . Jeśli jest degeneracja  $A|a^{(i)}\rangle = a'|a^{(i)}\rangle$ ,  $i = 1, 2, \dots$ , to wiemy, że wyrazy pozadiagonalne blokowo też muszą być zero, a w ramach bloku o tej samej wartości własnej można zawsze zdiagonalizować  $B$  [NASZKICOWAĆ]. Mamy więc pomiar rzutowy mierzący perfekcyjnie obie obserwabli. Kolejność pomiaru nie ma znaczenia, możemy napisać:  $P_{a,b} = P_a P_b = P_b P_a$ ,  $P_a = \sum_i |a^{(i)}\rangle\langle a^{(i)}|$ . Mówmy, że  $A, B, C, \dots$  tworzą zupełny zbiór komutujących obserwabli, jeśli ich wspólne stany własne tworzą bazę i odpowiadający zestaw wartości własnych jest niezdegenerowany.

### Pomiary jednoczesne niekomutujących obserwabli

Jeśli obserwabla komutowały, pomiar jednoczesny był możliwy bo mogliśmy napisać, że rzut  $P_{a,b} = P_a P_b$ . Jeśli niekomutują już tak nie jest, nie mamy wspólnej bazy własnej. *Przykład:* Wróćmy do Sterna-Gerlacha. Weźmy stan  $|+\rangle_z$ . Rozważmy dwa scenariusze: (i) najpierw mierzymy  $\sigma_z$  potem  $\sigma_x$  (ii) najpierw mierzymy  $\sigma_x$  potem  $\sigma_z$ . Jakie jest łączne prawdopodobieństwo zmierzenia odpowiednich wartości. Mamy  $p^{(i)}(z=+, x=+) = 1/2, p^{(i)}(z=+, x=-) = 1/2$  a w drugim przypadku:  $p^{(ii)}(x=\pm, z=\pm) = 1/4$ . Kolejność pomiaru ma znaczenie. W drugim pomiarze tracimy całą informację o  $\sigma_z$ . Wniosek pomiar jednoczesny niemożliwy.

Czy jednak w jakimś sensie możemy myśleć o jednoczesnym pomiarze np. położenia i pędu. Argument jakościowy (Ścisłej na MK3/2, Kwantowa teoria pomiaru i estymacji). Jeśli dopuścimy, że precyzją pomiarów nie jest doskonała—np. mierzymy efektywnie położenie/pęd z pewnym rozmyciem to coś da się zrobić. Nie mamy stanu o jednocześnie perfekcyjnie określonym położeniu i pędzie, ale mamy np stan gaussowski o w miarę dobrze określonym położeniu i pędzie

$$\psi_{\bar{x},\bar{p}}(x) = \frac{1}{(2\pi\sigma_x^2)^{1/4}} e^{-\frac{(x-\bar{x})^2}{4\delta^2 x} + \frac{i x \bar{p}}{\hbar}}.$$

Mamy  $\delta^2 x \delta^2 p \geq \hbar^2/4$ . Możemy myśleć o pomiarze „rzutującym na takie stany” - wynik pomiaru daje nam informację zarówno o  $x$  jak i  $p$  z pewną dokładnością określoną przez  $\delta^2 x, \delta^2 p$ . Problem—stany gaussowskie nie tworzą bazy ortonormalnej. Nie są ortogonalne czyli nie ma pomiaru rzutowego rzutującego na nie. Można to jednak zrobić poprzez pojęcie pomiarów uogólnionych—efektywnie rozszerzenia układu na dodatkowe stopnie swobody i zwykły pomiar rzutowy na większej przestrzeni. Wtedy  $\delta x^2, \delta p^2$  będą rzeczywiście pojęciami odpowiadającymi precyzji samego pomiaru. Gdyby teraz się zapytać o obserwowany rozrzut wyników pomiaru położenia i pędu przy takim pomiarze jednoczesnym to mamy:  $\Delta^2 x = \Delta^2 x + \delta^2 x, \Delta^2 p = \Delta^2 p + \delta^2 p$ . Z tego wynika:

$$\begin{aligned} \Delta^2 x \Delta^2 p &= \Delta^2 x \Delta^2 p + \delta^2 x \delta^2 p + \Delta^2 x \delta^2 p + \delta^2 x \Delta^2 p \geq \\ &\frac{\hbar^2}{2} + \frac{\hbar^2}{4} \left( \frac{\Delta^2 x}{\delta^2 x} + \frac{\delta^2 x}{\Delta^2 x} \right) \geq \hbar^2 \quad (13) \end{aligned}$$

To jest poprawna zasada nieoznaczoności dla łącznego pomiaru  $x$  i  $p$ . To też można rozumieć w sensie precyzja pomiaru  $x$  vs. zaburzenie  $p$  jak w oryginalnym rozumowaniu Heisenberga. Widać, że związek jest ale bardziej subtelny.

### Obraz Heisenberga

Rozważaliśmy ewolucję stanów, podczas gdy obserwabla były niezależne od czasu—obraz Schroedingera. Zależna od czasu wartość oczekiwana obserwabli:

$$\langle A \rangle_t = \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle = \langle \psi(0) | U^\dagger(t) A U(t) | \psi(0) \rangle$$

Możemy formalnie myśleć, że to obserwabla ewoluuje a stan nie. Obraz Heisenberga:

$$A^{(H)}(t) = U^\dagger(t) A U(t)$$

A stany nie  $|\psi_H(t)\rangle = U^\dagger(t) |\psi(t)\rangle = |\psi(0)\rangle$ . Równanie na ewolucję obserwabli:

$$\frac{dA^{(H)}(t)}{dt} = \frac{U^\dagger(t)}{dt} A U(t) + U^\dagger(t) A \frac{dU(t)}{dt}$$

Ale  $\frac{dU(t)}{dt} = -iH(t)U(t)/\hbar$ , czyli:

$$\frac{dA^{(H)}(t)}{dt} = +\frac{i}{\hbar} [U^\dagger(t) H(t) A U(t) - U^\dagger(t) A H(t) U(t)]$$

Jeśli  $H$  niezależny od czasu  $U(t) = e^{-iHt/\hbar}$  i komutują czyli:

$$\frac{dA^{(H)}(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [A^{(H)}(t), H].$$

Już to mieliśmy ale na wartościach oczekiwanych. Równanie ruchu Heisenberga. Zwróćmy uwagę, że  $H^{(H)}(t) = H$ .

### Zasada nieoznaczoności czas-energia

Czas nie jest operatorem, jest parametrem ewolucji więc nie można formalnie zastosować zasady nieoznaczoności dla  $t$  i  $H$ . Myślimy o czymś w stylu  $\Delta t \Delta H \geq ?$  ale czym ma być  $\Delta t$ . Pomyślmy, że patrzemy na ewolucje czasową pewnej obserwabli  $A(t)$ . Wiemy, że

$$\Delta^2 H \Delta^2 A(t) \geq \frac{1}{4} |\langle \psi | [A(t), H] | \psi \rangle|^2$$

Ale przecież:  $\frac{dA^{(H)}(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [A^{(H)}(t), H]$  Czyli:

$$\Delta^2 H \Delta^2 A(t) \geq \frac{\hbar^2}{4} |\langle \psi | \frac{dA(t)}{dt} | \psi \rangle|^2$$

Czym jest  $\Delta A / |\langle \frac{dA(t)}{dt} \rangle|$ ? Myślimy tak: mierząc  $A$  chcemy stwierdzić jak długo stan ewoluował:  $\Delta A$  rozrzut pomiaru,  $\langle A(t) \rangle$  wartość średnia. Liniowa propagacja błędu, dla precyzji estymowania  $t$ :  $\Delta t = \Delta A / |\langle \frac{dA(t)}{dt} \rangle|$  [SZKIC  $\langle A(t) \rangle$ ]. Czyli (wstawiliśmy daszek dla podkreślenia):

$$\Delta^2 \hat{H} \Delta^2 t \geq \frac{\hbar^2}{4}.$$

### Ćwiczenia

1. Znajdź potencjał dla którego stan gaussowski  $\psi(x) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}}$  jest stanem własnym
2. Nieskończona studnia ( $V = 0$  dla  $0 < x < a$  i  $V = \infty$  dla pozostałych) stany własne, ewolucja stanów np: a)  $\psi(x) = Ax(a-x)$ , b)  $\psi(x) = A \sin^5(\pi x/a)$ . Średnie energie i odchylenia w a), b).

3. Skończona studnia potencjału:  $V(x) = 0$  dla  $|x| < a/2$ , i  $V(x) = V_0$  w pozostałych. Znaleźć stany związane (skorzystać z faktu, że możemy poszukiwać rozwiązań o określonej symetrii: symetryczne, antysymetryczne) (metoda graficzna). Rozważyć granicę gdy studnia przechodzi do delty Diraca—ile stanów związanych? Przedyskutować rozwiązywanie problemów z Delta Diraca bez robienia przejścia granicznego—skok pochodnej w warunkach zszywania.

4. Problem transmisji przez prostokątną barierę:  $V(x) = V_0$ , dla  $0 < x < a$ . Wyznaczyć współczynnik przejścia i odbicia (Rozważyć  $E > V_0$ , oraz  $0 < E < V_0$ . Komentarz- rozpraszanie rezonansowe. Rozważyć granicę delty-Diraca. (komentarz jakby było gdyby był dodek  $V_0 < 0$ )

## TYDZIEŃ V (25.03,27.03)

Szukamy rozwiązań w różnych prostych potencjałach

### Potencjał liniowy

$V(x) = -Fx$ . [INTUICYJNY RYSUNEK, spodziewamy się widma ciągłego].

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - Fx\right]\psi(x) = E\psi(x)$$

Przechodzimy do reprezentacji pędowej  $\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx \psi(x) e^{-ixp/\hbar}$ .

$$\frac{p^2}{2m} \tilde{\psi} - iF\hbar \frac{d}{dp} \tilde{\psi} = E\tilde{\psi}$$

Równanie pierwszego rzędu!

$$\frac{d\tilde{\psi}}{dp} = \frac{i}{F\hbar} (E - p^2/2m) \tilde{\psi}$$

$$\tilde{\psi}_E(p) = C e^{\frac{i}{F\hbar} (Ep - p^3/6m)}$$

Dozwolone ciągłe spektrum energii (jak dla cząstki swobodnej). Chcemy mieć „ortonormalność”

$$\int dp \tilde{\psi}_E(p)^* \tilde{\psi}_{E'}(p) = C^2 \int dp e^{\frac{i}{F\hbar} p(E' - E)} = C^2 2\pi F\hbar \delta(E - E')$$

Czyli  $C = 1/\sqrt{2\pi F\hbar}$ . Mamy też zupełność:

$$\int dE \psi_E^*(p) \psi_E(p') = \delta(p - p').$$

Ostatecznie:

$$\psi_E(x) = \frac{1}{2\pi\hbar\sqrt{F}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{\frac{ip}{\hbar}(x+E/F) - \frac{ip^3}{6mF\hbar}}$$

$$\psi_E(x) = \frac{1}{\pi\hbar\sqrt{F}} \int_0^\infty dp \cos\left(\frac{p}{\hbar}(x+E/F) - \frac{p^3}{6mF\hbar}\right)$$

Energia tylko przesuwana stan. To co zrobiliśmy to rozwiązaliśmy równanie Airy'ego:

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} - y\psi = 0, \quad y = -(x+E/F) \left(\frac{2mF}{\hbar^2}\right)^{1/3}$$

Rozwiązanie, funkcja Airy'ego:

$$Ai(y) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty ds \cos(sy + s^3/3)$$

Znane są asymptotyczne własności funkcji  $Ai(y)$ :

$$Ai(y) = \begin{cases} \frac{1}{2\sqrt{\pi}y^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}y^{3/2}} & y \rightarrow +\infty \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}(-y)^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3}(-y)^{3/2} - \pi/4\right) & y \rightarrow -\infty \end{cases}$$

Z czym się kojarzą... podstawmy  $y$ :

$$\psi_E(x) = \begin{cases} \frac{A}{2(-(x+E/F))^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}[-(x+E/F)]^{3/2} \sqrt{\frac{2mF}{\hbar^2}}} & \\ \frac{A}{((x+E/F))^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3}[(x+E/F)]^{3/2} \sqrt{\frac{2mF}{\hbar^2}} - \pi/4\right) & \end{cases}$$

$A = \left(\frac{\hbar^2}{2mF\pi^6}\right)^{1/12}$ . Zauważmy, że klasyczny pęd  $p(x) = \sqrt{2m(E+Fx)}$ , a  $\int_{-E/F}^x dx' p(x') = \frac{2}{3}[2m(E+Fx)]^{3/2}/(2mF)$  czyli:

$$\psi_E(x) = \begin{cases} \frac{A'}{2|\sqrt{p(x)}|} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_x^{-E/F} |p(x')| dx'} & x \rightarrow -\infty \\ \frac{A'}{\sqrt{p(x)}} \cos\left[\frac{1}{\hbar} \int_{-E/F}^x dx' p(x') - \pi/4\right] & x \rightarrow \infty \end{cases}$$

$A' = \left(\frac{\hbar}{(2mF)^2\pi^3}\right)^{1/6}$ . Mamy rozwiązania typu WKB, ale tutaj są ładnie zszyte w punkcie powrotu—to nam się przyda. Ale... równanie Airy'ego jest drugiego rzędu co z drugim liniowo niezależnym równaniem Zgubiliśmy je robiąc transformate Fouriera. (Można robić bardziej ogólne transformaty całkowe  $\psi(x) = \int_C dz \tilde{\psi}(z) e^{zx}$ —po pewnym konturze na płaszczyźnie zespolonej. Dla Fouriera  $C = i\mathbb{R}$ ). Biorąc inny kontur możemy dostać, drugą funkcję Airy'ego

$$Bi(y) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty e^{-s^3/3+sy} + \sin(s^3/3 - sy)$$

jej zachowanie asymptotyczne:

$$Bi(y) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\pi}y^{1/4}} e^{\frac{2}{3}y^{3/2}} & y \rightarrow \infty \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}(-y)^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3}(-y)^{3/2} + \pi/4\right) & y \rightarrow -\infty \end{cases}$$

### Metoda WKB znajdowania stanów własnych

[NASZKICOWAĆ OGÓLNY POTENCJAŁ—obszar I, II, III, punkty powrotu  $x_1, x_2$  i rozwiązanie przybliżone] Przybliżenie WKB działa dobrze poza punktami powrotu. Ale

możemy spróbować zszyć te rozwiązania przybliżając potencjał w punkcie powrotu poprzez potencjał liniowy!

$$\psi_I(x) = \frac{A}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} |p(x')| dx'} \quad (14)$$

$$\psi_{II}(x) = \frac{B}{\sqrt{p(x)}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' + \delta\right) \quad (15)$$

$$\psi_{III}(x) = \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} |p(x')| dx'} \quad (16)$$

$p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}$ . Zszywając I i II mamy z własności asymptotycznych  $Ai(y)$ , że  $A = B/2$ ,  $\delta = -\pi/4$ . Teraz musimy zszyć II i III. Ale żeby to zrobić musimy zapisać  $\psi_{II}(x)$  używając punktu powrotu  $x_2$ .

$$\psi_{II}(x) = \frac{B'}{\sqrt{p(x)}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' + \delta'\right)$$

Zszywanie narzuca, że  $C = B'/2$  oraz że  $\delta' = -\pi/4$ . Ale to ta sama funkcja czyli:

$$B' \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' - \pi/4\right) = B \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' - \pi/4\right)$$

Oznaczmy  $z = \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' - \pi/4$ ,  $\eta = \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} p(x') dx'$ . Wtedy:

$$B' \cos(\eta - z - \pi/2) = B \cos z$$

$$\cos(\eta - \pi/2) \cos z + \sin(\eta - \pi/2) \sin z = \frac{B}{B'} \cos z$$

Czyli  $\eta - \pi/2 = n\pi$ ,  $B/B' = \pm 1$ .

$$\int_{x_1}^{x_2} p(x) dx = \hbar(n + 1/2)\pi, \quad n = 0, \dots$$

Warunek kwantyzacji. Równoważnie

$$\oint p(x) dx = h(n + 1/2)$$

Warunek kwantyzacji Sommerfelda—obszar przestrzeni fazowej określanej przez trajektorię cząstki skwantowany w wielokrotności  $h$ . W ten sposób możemy łatwo dostać przybliżone wartości energii dla w zasadzie dowolnych potencjałów.

Uwaga: jak mamy sztywne ściany to trochę inaczej—tam funkcja falowa musi zniknąć. Jeśli sztywna ściana w  $x_2$ , to

$$B' \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' - \pi/2\right) = B \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' - \pi/4\right)$$

I mamy warunek  $\eta - 3\pi/4 = n\pi$ ,  $\int_{x_1}^{x_2} p(x) dx = \hbar(n + 3/4)\pi$ . A jeśli dwie sztywne ściany:  $\int_{x_1}^{x_2} p(x) dx = \hbar(n + 1)\pi$ . Czy to się zgadza dla studni nieskończonej?  $\sqrt{2mE}a = \hbar n'\pi$ ,  $n' = 1, 2, \dots$  i OK:  $E_n = \hbar^2 n'^2 \pi^2 / (2ma^2)$ .

Można też zastosować metodę WKB dla znajdowania współczynników transmisji przez dowolną barierę. [SZKIC BARIERY POTENCJAŁU]. Cząstka pada z lewej:

$$\psi_I(x) = \frac{A}{\sqrt{p(x)}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_x^{x_1} p(x') dx'} + \frac{B}{\sqrt{p(x)}} e^{+\frac{i}{\hbar} \int_x^{x_1} p(x') dx'} \quad (17)$$

$$\psi_{II}(x) = \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} |p(x')| dx'} + \frac{D}{\sqrt{|p(x)|}} e^{+\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} |p(x')| dx'} \quad (18)$$

$$\psi_{III}(x) = \frac{F}{\sqrt{p(x)}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx'} \quad (19)$$

Warunki zszywania, tym razem musimy też użyć własności  $Bi(y)$ , prowadzą po pewnych rachunkach do wzoru na współczynnik transmisji:

$$T = \left| \frac{F}{A} \right|^2 = \frac{1}{\left(\frac{1}{4r} + r\right)^2} \approx \frac{1}{r^2}, \quad r = e^{\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} |p(x)| dx}$$

**Przykład** Czas życia jądra uranu. Rozważmy rozpad  $\alpha$ :  $^{238}\text{U} \rightarrow ^{234}\text{Th} + \alpha$ . Tu kluczowy jest efekt tunełowania. Cząstki alpha emitowane z energią ok  $E = 4.2\text{MeV}$ . [SZKIC POTENCJAŁU: mamy cząstkę  $\alpha$  w potencjale  $V(x) = -30\text{MeV}$  na odległości  $x < 10\text{fm}$ , a potem potencjał spada Coulombowsko:  $V(x) = 30\text{MeV} \cdot 10\text{fm}/x$ .] Jaki jest czas połowicznego rozpadu? Wyobraźmy sobie najpierw cząstkę padającą na barierę z energią  $E$  jakie jest prawdopodobieństwo transmisji.  $r = \exp\left(\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \int_{10\text{fm}}^{60\text{fm}} \sqrt{\frac{30\text{MeV} \cdot 10\text{fm}}{x} - 5\text{MeV}} dx\right) \approx \exp(44)$ . Czyli prawdopodobieństwo transmisji  $T = \exp(-88) = 10^{-38}$ . Jak oszacować czas życia? Ile razy na sekundę cząstka się „odbija”?  $v = \sqrt{2(E + 30\text{MeV})/m} = 4 \cdot 10^7 \text{m/s}$ ,  $f = v/20\text{fm} = 2 \cdot 10^{21}$ . Czas życia  $t = 1/(2 \cdot 10^{21} \cdot 10^{-38}) = 5 \cdot 10^{16} \text{s} \approx 1.5\text{mldlat}$  (prawdziwa wartość ok. 4 mld lat).

## Ćwiczenia

1. Udowodnić, że stany gausowskie są jedyne, które wysycają zasadę nieoznaczoności dla  $x$  i  $p$ .
2. Rozważyć paczkę gausowską o początkowej wariancji położenia  $\Delta_x^2(0)$  i średnim pędzie zero. Korzystając z obrazu Heisenberga wyprowadzić wyrażenie na średnie położenie  $\langle x(t) \rangle$  i wariancję położenia  $\Delta_x^2(t)$  dla (i) ewolucji swobodnej, (ii) ewolucji w potencjale liniowym (iii) ewolucji w potencjale kwadratowym—(dla potencjału kwadratowego zidentyfikować Gaussa który nie będzie się zmieniał—jakiej energii odpowiada). Skomentować, że w obrazie Schroedingera odpowiedzi na te pytania byłyby znacznie trudniejsze do uzyskania. (przyda się BCH)
3. Stosując przybliżenie WKB znaleźć poziomy energetyczne dla oscylatora harmonicznego

4. Stosując przybliżenie WKB znajdź zależność współczynnika transmisji od energii dla potencjału  $V(x) = V_0 - \alpha|x|$

[Kollokwium 1 (30 marca)]

## TYDZIEŃ VI (01.04, 08.04, 10.04)

### Oscylator harmoniczny

Rozważmy

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$$

Bardzo ważny przypadek—wiele dołków potencjałów można lokalnie przybliżyć kwadratowo. Znajdziemy stany własne metodą algebraiczną (alternatywnie metoda Frobeniusa—rozwijanie w szereg ĆWICZENIA, lub z całek po trajektoriach) Wprowadźmy operatory anihilacji/kreacji:

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( x + \frac{ip}{m\omega} \right), \quad a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( x - \frac{ip}{m\omega} \right)$$

Zauważmy:

$$[a, a^\dagger] = 1$$

Oraz, że:

$$H = \hbar\omega(a^\dagger a + 1/2) = \hbar\omega(N + 1/2).$$

gdzie  $\hat{N} = a^\dagger a$  - „operator liczby wzbudzeń” - już hermitowski. Niech  $|n\rangle$  wektor własny  $\hat{N}$ :

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle.$$

Czy coś możemy powiedzieć o  $n$ ? Zauważmy, że  $[N, a] = -a$ ,  $[N, a^\dagger] = a^\dagger$  ( $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$ ). Zastanówmy się jak działa  $\hat{N}$  na  $a|n\rangle$  i  $a^\dagger|n\rangle$ :

$$\hat{N}a|n\rangle = (n-1)a|n\rangle \quad \hat{N}a^\dagger|n\rangle = (n+1)a^\dagger|n\rangle$$

Czyli  $a|n\rangle$  i  $a^\dagger|n\rangle$  są proporcjonalne do wektorów własnych  $\hat{N}$ ,  $|n-1\rangle$ ,  $|n+1\rangle$  o wartościach  $n-1$  i  $n+1$ . Żeby zachować unormowanie:

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle.$$

Ale operator  $N = a^\dagger a$  nieujemny, czyli nie możemy dostać nigdy wartości własnej  $< 0$ . Działając wiele razy  $a^k|n\rangle$  w końcu musi się urwać, czyli  $n$  może być tylko całkowite, a najmniejsze  $n = 0$ , stan  $|0\rangle$ . Jaka energia odpowiada stanowi  $|n\rangle$ :

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle, \quad E_n = \hbar\omega(n + 1/2).$$

Stan podstawowy  $|0\rangle$  ma  $E_0 = \hbar\omega/2$ . Co to za stan? Spełnia warunek  $a|0\rangle = 0$ .

$$\left( x + \frac{i}{m\omega} \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right) \psi_0(x) = 0,$$

$$\psi_0(x) = \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$$

Stan Gaussowski z  $\Delta^2 x \hbar / (2m\omega)$ . Można zrozumieć, że niezerowa energia bierze się z fluktuacji położenia i pędu.  $\langle x^2 \rangle = \hbar / (2m\omega)$ ,  $\langle p^2 \rangle = m\hbar\omega/2$ , i stąd  $\langle H \rangle = \hbar\omega/2$ , z samej zasady nieoznaczoności wynika, że nie da się mniej. [Dygresja: kwantując pole e-m będziemy mieli kolekcje „kwantowych oscylatorów harmonicznycy”—niezerowa energia stanu podstawowego= fluktuacje próżni, efekt Casimira]. Jak znaleźć pozostałe stany własne?

$$a^\dagger n |0\rangle = a^\dagger n-1 \sqrt{1}|1\rangle = \sqrt{n}|n\rangle,$$

Czyli:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} a^\dagger n |0\rangle.$$

Mamy więc wyrażenie na funkcje falowe:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left[ \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} \right) \right]^n \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$$

Wprowadźmy bezwymiarową zmienną  $q = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$ ,

$$\psi_n(q) = \frac{1}{\sqrt{n! 2^n \sqrt{\pi}}} \left( q - \frac{d}{dq} \right)^n e^{-q^2/2}$$

$$\psi_n(q) = \frac{1}{\sqrt{n! 2^n \sqrt{\pi}}} H_n(q) e^{-q^2/2}$$

Gdzie wprowadziliśmy wielomiany Hermita:

$$H_n(q) = e^{q^2/2} \left( q - \frac{d}{dq} \right)^n e^{-q^2/2}$$

Mamy np.

$$H_0(q) = 1$$

$$H_1(q) = 2q$$

$$H_2(q) = 4q^2 - 2$$

[ZROBIĆ SZKIC STANÓW WŁASNYCH i modułów kwadrat]. Każdy kolejny stan o jedno więcej miejsce zerowe i na zmianę stany symetryczne i antysymetryczne. Ortonormalność stanów własnych implikuje następujący warunek „ortonormalności” wielomianów Hermita:

$$\int dq H_n(q) H_m(q) e^{-q^2} = \delta_{n,m} \sqrt{\pi} 2^n n!$$

Podsumowując:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left( \frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/4} H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$$

$$E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$$

a. *Stany koherentne* Jakie stany odpowiadają najbardziej klasycznemu obrazkowi oscylacji cząstki na sprężynce... Zdefiniujmy:

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$

To jest stan własny  $\hat{a}$ :

$$\begin{aligned} \hat{a}|\alpha\rangle &= e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \sqrt{n} |n-1\rangle = \\ &= \alpha e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_n \frac{\alpha^{n-1}}{\sqrt{(n-1)!}} |n-1\rangle = \alpha|\alpha\rangle \end{aligned}$$

I co z tego wynika?

$$\langle\alpha|x|\alpha\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{1}{\sqrt{2}} \langle\alpha|a + a^\dagger|\alpha\rangle = \sqrt{2\frac{\hbar}{m\omega}} \operatorname{Re}(\alpha)$$

$$\langle\alpha|p|\alpha\rangle = \sqrt{m\omega\hbar} \frac{1}{\sqrt{i2}} \langle\alpha|a - a^\dagger|\alpha\rangle = \sqrt{2m\omega\hbar} \operatorname{Im}(\alpha)$$

Czyli

$$\alpha = \frac{\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\langle x\rangle + i\frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}\langle p\rangle\right)}{\sqrt{2}}$$

określa średnie położenie w przestrzeni fazowej (x,p). Obliczmy teraz wariancję x i p dla tego stanu:

$$\langle\alpha|x^2|\alpha\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle\alpha|(a + a^\dagger)^2|\alpha\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} (\alpha^2 + \alpha^{*2} + 2\alpha\alpha^* + 1)$$

analogicznie dla p i dostajemy

$$\Delta^2 x = \frac{\hbar}{2m\omega}, \quad \Delta^2 p = \frac{\hbar m\omega}{2}$$

wysyca zasadę nieoznaczoności... czyli w końcu okazało się, że to znany stan Gaussowski. Spójrzmy w reprezentacji położeniowej na warunek na bycie stanem własnym  $\hat{a}$ :

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x + \frac{d}{dx} \frac{\hbar}{\sqrt{m\omega}} \right) \psi(x) = \alpha\psi(x)$$

$$\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{1}{\psi(x)} \frac{d\psi(x)}{dx} = \sqrt{2}\alpha - x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

$$\psi(x) = A e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 + \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\alpha x}$$

$$\psi(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x-\langle x\rangle)^2 + \frac{i\langle p\rangle x}{\hbar}}$$

Kiedyś już mówiliśmy o takich stanach... maksymalnie dobrze określone i położenie i pęd Jak ewoluuje stan koherentny:

$$\begin{aligned} U_t|\alpha\rangle &= e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-i\omega t(n+1/2)} |n\rangle = \\ &= e^{-i\omega t/2} e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_n \frac{(\alpha e^{i\omega t})^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \equiv |\alpha e^{-i\omega t}\rangle \end{aligned}$$

Czyli stan koherentny pozostaje koherentny a  $\alpha$  ewoluuje jak stan klasyczny w oscylatorze harmonicznym—stąd takie wyjątkowe. Stany koherentne—najbardziej klasyczne ze stanów oscylatora. Używając zmiennych bezwymiarowych:

$$\psi(q) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-(q-\sqrt{2}\operatorname{Re}\alpha)^2/2 + iq\sqrt{2}\operatorname{Im}\alpha}$$

Weźmy  $\alpha = \sqrt{2}s$ , gdzie  $s \in \mathbb{R}$ . Wiemy jak ten stan rozkłada się na stany własne:

$$\begin{aligned} \psi(q) &= \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-(q-2s)^2/2} = \\ &= e^{-s^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\sqrt{2}s)^n}{n!} \frac{H_n(q) e^{-q^2/2}}{\sqrt{\sqrt{\pi}2^n n!}} \quad (20) \end{aligned}$$

Czyli:

$$e^{-s^2+2sq} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} H_n(q)$$

Znaleźliśmy funkcję tworzącą dla wielomianów Hermita. Tzn. że możemy je liczyć inaczej:

$$\begin{aligned} H_n(q) &= \left. \frac{d^n}{ds^n} e^{-s^2+2sq} \right|_{s=0} = \left. \frac{d^n}{ds^n} e^{q^2-(s-q)^2} \right|_{s=0} = \\ &= e^{q^2} \left. \frac{d^n}{ds^n} e^{-(s-q)^2} \right|_{s=0} = e^{q^2} (-1)^n \left. \frac{d^n}{dq^n} e^{-(s-q)^2} \right|_{s=0} = \\ &= e^{q^2} (-1)^n \frac{d^n}{dq^n} e^{-q^2} \quad (21) \end{aligned}$$

Własności stanów koherentnych.

$$|\langle\alpha|\alpha'\rangle|^2 = e^{-|\alpha-\alpha'|^2}$$

są nieortogonalne (wektory własne operatora niehermitowskiego, więc mają prawo). Ale zauważmy, że:

$$\begin{aligned} \int d^2\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha| &= \int d^2\alpha e^{-|\alpha|^2} \sum_{n,m} \frac{\alpha^n \alpha^{*m}}{\sqrt{n!m!}} |n\rangle\langle m| = \\ &= \int dr d\varphi r e^{-r^2} \sum_{n,m} \frac{r^{n+m} e^{i\varphi(n-m)}}{\sqrt{n!m!}} |n\rangle\langle m| = \\ &= 2\pi \int dr e^{-r^2} \sum_n r^{2n+1} \frac{1}{n!} |n\rangle\langle n| = \pi \sum_n |n\rangle\langle n| = \pi \mathbb{1} \quad (22) \end{aligned}$$

To znaczy, że możemy napisać dla dowolnego stanu rozkład na stany koherentne:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\pi} \int d^2\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha|\psi\rangle = \int d^2\alpha \underbrace{\frac{1}{\pi} \langle\alpha|\psi\rangle}_{c(\alpha)} |\alpha\rangle$$

Mówimy, że stany koherentne tworzą układ nadzupełny.

### Potencjały periodyczne

Rozważmy potencjał periodyczny z okresem  $d$  t.że:

$$V(x) = V(x + d)$$

Tego typu potencjały pojawiają się w fizyce ciała stałego—elektrony walencyjne poruszają się w potencjale zadanym przez sieć krystaliczną utworzoną przez jony.

*Twierdzenie Blocha.* Stany własne w potencjale periodycznym są zawsze postaci:

$$\psi(x) = u(x)e^{ikx},$$

gdzie  $u(x + d) = u(x)$  jest funkcją periodyczną.

Dowód: Rozważmy unitarny operator przesunięcia  $\mathcal{D}_d\psi(x) = \psi(x - d)$ .  $\mathcal{D}_d = e^{-d\frac{d}{dx}} = e^{-i\hat{p}d/\hbar}$ . Ponieważ, potencjał jest periodyczny to  $\mathcal{D}_d H \mathcal{D}_d^\dagger = H$ , czyli:

$$[H, \mathcal{D}_d] = 0.$$

Skoro komutują to zawsze możemy szukać stanów własnych  $H$  w klasie stanów własnych  $\mathcal{D}$ . Szukamy:  $\mathcal{D}_d\psi(x) = \lambda\psi(x)$ , gdzie  $\lambda = e^{-ika}$ , zawsze można bo wartości własne operatora unitarnego mają  $|\lambda| = 1$ . Czyli:  $\psi(x - a) = e^{-ika}\psi(x)$ . Zdefiniujmy  $u(x) = \psi(x)e^{-ikx}$ ,  $k \in \mathbb{R}$ . Mamy  $u(x - a)e^{ik(x-a)} = e^{-ika}u(x)e^{ikx}$ , czyli  $u(x - a) = u(x)$ .  $\square$ .

*Model Kroniga-Pelleya* Rozważmy prosty model [SZKIC]:

$$V(x) = \sum_{n=0}^{N-1} \lambda \delta(x - nd)$$

gdzie  $N$  bardzo duże (liczba jonów sieci krystalicznej). Dla zagwarantowania periodyczności, zamykamy cząstkę na kółku i narzucamy periodyczne warunki brzegowe takie, że  $\psi(x + Nd) = \psi(x)$ . Szukamy rozwiązań postaci:  $\psi(x) = u(x)e^{ikx}$ . Periodyczne warunki brzegowe prowadzą do formalnej dyskretyzacji  $k = 2\pi n/(Nd)$ ,  $n = 0, \dots, N-1$ . Stany o różnych  $k$  ortogonalne. Dla dużych  $N$  możemy myśleć, że w praktyce  $k$  ciągłe.

Rozważamy warunki zszycia w  $x = d$ .

$$\psi'_>(d) - \psi'_<(d) = \frac{2m\lambda}{\hbar^2} \psi(d)$$

czyli

$$u'_>(d) - u'_<(d) = \frac{2m\lambda}{\hbar^2} u(d)$$

ale wiemy, że  $u'_>(d) = u'_>(0)$  czyli ostatecznie mamy układ równań:

$$u'_>(0) - u'_<(d) = \frac{2m\lambda}{\hbar^2} u(0) \quad (23)$$

$$u(d) = u(0) \quad (24)$$

Ale znamy rozwiązanie w obszarze pomiędzy deltami:

$$\psi(x) = Ae^{iqx} + Be^{-iqx}, \quad q = \sqrt{2mE/\hbar^2}$$

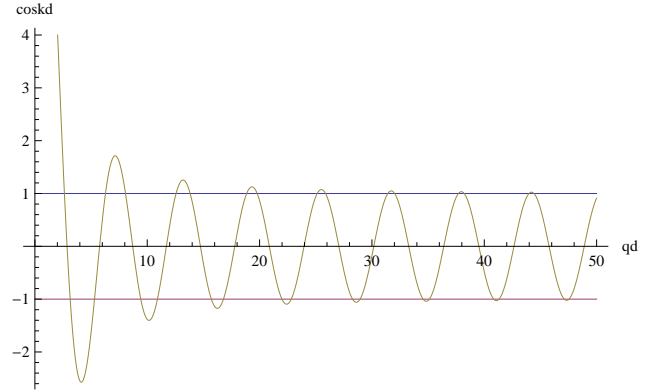
Czyli

$$u(x) = Ae^{i(q-k)x} + Be^{-i(q+k)x}$$

Wstawiając do (23) dostajemy warunki na istnienie rozwiązania po kilku liniijkach przekształceń...

$$\frac{\sin(qd)}{qd} \frac{m\lambda d}{\hbar^2} + \cos(qd) = \cos(kd)$$

Wykres dla  $\frac{m\lambda d}{\hbar^2} = 10$



Widzimy, że nie wszystkie  $q$  są dozwolone. Mamy przerwy energetyczne. Możemy o tym myśleć, że to są rozmyte poziomy studni pomiędzy deltami. Gdyby delty były nieskończenie silnie rozmycia by nie było. Częściej robimy wykres  $E(k) = \frac{\hbar^2 q(k)^2}{2m}$ . [SZKIC  $E(k)$  dla  $ka$  od  $-\pi$  do  $\pi$  pasma],  $\hbar k$  nazywamy quasi-pędem. W danym paśmie mamy  $k = 2n\pi/Na$  czyli  $N$  różnych stanów dostępnych (tak naprawdę jeśli myślimy o elektronach to mamy  $2N$  stanów po jeszcze dwa stany spinowe). Oznacza to w kryształach gdzie każdy atom daje dwa elektrony (lub parzystą liczbę) walencyjne będziemy mieli zapełnione pasma w pełni będziemy mieli izolatory/półprzewodniki a jak nieparzystą to przewodniki. To nie do końca prawda bo model jednowymiarowy nie oddaje w pełni fizyki i jest dużo kontrprzykładów. Ale faktem jest, że z jednym elektronem walencyjnym będzie zapełnione z grubsza pół pasma i zawsze bardzo dobry przewodnik (metale alkaliczne) a z kolei najbardziej popularne półprzewodniki Ge, As, mają 4 elektrony walencyjne. Ale już Ca, ma dwa i jest dość dobrym przewodnikiem.

### 3D

Wyczerpaliśmy ciekawe tematy w 1D. Przechodzimy do 3D:

$$|\psi\rangle = \int d^3r \psi(\vec{r}, t) |\vec{r}\rangle$$

,  $\vec{r} = (x, y, z)$ . Mamy nieunormowane stany":

$$\langle \vec{r}' | \vec{r} \rangle = \delta^3(\vec{r}' - \vec{r})$$



. W reprezentacji położeniowej:  $\hat{x} = x$ ,  $\hat{y} = y$ ,  $\hat{z} = z$ ,  $p_x = -i\hbar\partial_x$ ,  $p_y = -i\hbar\partial_y$ ,  $p_z = -i\hbar\partial_z$ . Zauważmy, że  $[x, p_x] = [y, p_y] = [z, p_z] = i\hbar$  a pozostałe zero. Równanie Schroedingera;

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V(\vec{r})\psi$$

Prąd prawdopodobieństwa:

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\psi^* \vec{\nabla} \psi)$$

i mamy równanie ciągłości:

$$\partial_t \rho + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0.$$

Analogicznie mamy odpowiednie równanie Schroedingera bez czasu:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V(\vec{r})\psi = E\psi$$

Stan o określonym pędzie  $|\vec{p}\rangle$  (stany własne cząstki swobodnej,  $E_p = \vec{p}^2/2m$ )

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\vec{p}\vec{r}/\hbar}$$

Reprezentacja pędowa zdefiniowana analogicznie:

$$\tilde{\psi}(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3\vec{r} e^{-i\vec{p}\vec{r}/\hbar} \psi(\vec{r})$$

Zwróćmy uwagę, że jeśli przez  $\mathcal{H}$  rozumiemy przestrzeń Hilberta cząstki w jednym wymiarze, to cząstka w 3D jest wektorem żyjącym w  $\mathcal{H}^{\otimes 3}$ . Możemy myśleć, że  $|\vec{r}\rangle = |x\rangle \otimes |y\rangle \otimes |z\rangle$  jest tensorem prostym i nasz stan rozpisujemy w takiej bazie [ZAPYTAĆ MĄDRYCH LUDZI JAK TO PORZĄDNIK UZASADNIC].

Możemy też naturalnie zdefiniować operatory momentu pędu:

$$L_x = yp_z - zp_y, L_y = zp_x - xp_z, L_z = xp_y - yp_x$$

Zauważmy, że nie ma dylematów z kolejnością położenia i pędów bo komutują. Reguły komutacyjne (tak jak nawiasy Poissona):

$$[L_i, L_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} L_k$$

Obserwacja, operator kwadratu całkowitego momentu pędu:

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$$

komutuje z  $L_i$ ,  $[L^2, L_i] = 0$ .

Ponieważ  $\Delta = \partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2$  to jeśli potencjał się separuje  $V(\vec{r}) = V_x(x) + V_y(y) + V_z(z)$  to możemy dokonać separacji zmiennych i poszukiwać rozwiązań postaci:  $\psi(\vec{r}) = X(x)Y(y)Z(z)$ .

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 X}{X} + V_x(x) + -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 Y}{Y} + V_y(y) + -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 Z}{Z} + V_z(z) = E$$

Każdy ze składników musi być stałą czyli mamy efektywnie trzy równania typu:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 X}{X} + V_x(x) = E_x$$

Każde z nich rozwiązujemy jak w 1D, znajdując dopuszczalne energie  $E_{n_x}$  i odpowiednie rozwiązania  $X_{n_x}(x)$ , numerowane  $n_x$ , podobnie dla  $y$  i  $z$ . Ostatecznie mamy rozwiązania postaci:

$$\psi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) = X_{n_x}(x)Y_{n_y}(y)Z_{n_z}(z) \quad (25)$$

o odpowiadające im energie:

$$E_{n_x, n_y, n_z} = E_{n_x} + E_{n_y} + E_{n_z}$$

Zwróćmy uwagę, że jeśli mamy bazę funkcji które są rozwiązaniami w każdym z trzech wymiarów to funkcje postaci (25) rozpinają całą przestrzeń funkcji w 3D. To oznacza, że nie zgubiliśmy żadnego z rozwiązań, bo każdą funkcję można by rozłożyć w tej bazie i wtedy widać, że tylko kombinacje stanów o tych samych energiach będą wektorami własnymi (tensory proste rozpinają przestrzeń iloczynu tensorowego).

Oscylator harmoniczny w 3D Z powyższych rozważań wynika, że możemy od razu napisać rozwiązanie dla oscylatora harmonicznego w 3D:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{m}{2}(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2)$$

Rozwiązaniami będą stany:

$$\psi_{n_x, n_y, n_z} = X_{n_x}(x)Y_{n_y}(y)Z_{n_z}(z),$$

gdzie  $n_x, n_y, n_z = 0, 1, \dots, a$

$$X_{n_x}(x) = \left(\frac{m\omega_x}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^{n_x} n_x!}}$$

i analogicznie  $Y_{n_y}(y), Z_{n_z}(z)$ . Odpowiednie energie:

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \hbar\omega_x n_x + 1/2 + \hbar\omega_y n_y + 1/2 + \hbar\omega_z n_z + 1/2$$

W przypadku oscylatora izotropowego będziemy mieli degeneracje stanów. np  $E_0 = 3/2\hbar\omega$  (jeden stan),  $E_1 = 5/2\hbar\omega$  (3 stany). W notacji algebraicznej nasze stany możnaby napisać:

$$H = \hbar\omega_x(a^\dagger a + 1/2) + \hbar\omega_y(b^\dagger b + 1/2) + \hbar\omega_z(c^\dagger c + 1/2)$$

$$|n_x, n_y, n_z\rangle = \frac{a^{\dagger n_x}}{\sqrt{n_x!}} \frac{b^{\dagger n_y}}{\sqrt{n_y!}} \frac{c^{\dagger n_z}}{\sqrt{n_z!}} |0\rangle$$

gdzie

$$a = \sqrt{\frac{m\omega_x}{2\hbar}} \left( x + \frac{ip_x}{\hbar\omega_x} \right)$$

$$b = \sqrt{\frac{m\omega_y}{2\hbar}} \left( y + \frac{ip_y}{\hbar\omega_y} \right)$$

$$c = \sqrt{\frac{m\omega_z}{2\hbar}} \left( z + \frac{ip_z}{\hbar\omega_z} \right)$$

### Potencjały sferycznie symetryczne

Załóżmy, że  $V(\vec{r}) = V(r)$ . Rozwiązując rów. Schroedingera wygodnie jest przejść do współrzędnych sferycznych. Potrzebujemy Laplasjan w sferycznych:

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 \partial_r) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \partial_\theta (\sin \theta \partial_\theta) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta}.$$

Spójrzmy teraz na operatory momentu pędu we współrzędnych sferycznych:

$$L_x = i\hbar (\sin \varphi \partial_\theta + \cot \theta \cos \varphi \partial_\varphi) \quad (26)$$

$$L_y = i\hbar (-\cos \varphi \partial_\theta + \cot \theta \sin \varphi \partial_\varphi) \quad (27)$$

$$L_z = -i\hbar \partial_\varphi \quad (28)$$

i na operator kwadratu momentu pędu:

$$L^2 = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin \theta} \partial_\theta (\sin \theta \partial_\theta) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial^2 \varphi \right]$$

Widać, że mamy coś takiego jak w Laplasjanie:

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 \partial_r) - \frac{\hat{L}^2}{r^2 \hbar^2}$$

Czyli hamiltonian:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 \partial_r) + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2}$$

Widzimy, że  $L^2$  zależy tylko od współrzędnych kątowych, czyli  $[H, L^2] = 0$ . Czyli funkcji własnych możemy zawsze szukać pośród funkcji własnych  $L^2$ . Dokonujemy rozdziału zmiennych:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi)$$

i mamy:

$$-\frac{\hbar^2}{R} \partial_r (r^2 \partial_r R) + 2mr^2 [V(r) - E] + \frac{1}{Y} (\hat{L}^2 Y) = 0$$

Musimy więc umieć rozwiązać problem własny dla  $L^2$

$$\hat{L}^2 Y = \lambda Y$$

Możnaby przez rozwijanie w szereg itp. ale chcemy znów ładniejszą metodą algebraiczną i też ogólniej, żeby już uchwycić spin i poczuć piękno teorii grup.

### Ćwiczenia

1. Rozwiązać oscylator harmoniczny przez szereg. Wielomiany Hermity. Funkcja Tworząca. Znaleźć wartości oczekiwane i wariancje położenia i pędów dla stanów własnych, porównać o ile łatwiej to zrobić metodą algebraiczną używając własności operatorów kreacji i anihilacji w porównaniu z użyciem funkcji falowych w reprezentacji położeniowej..

2. Zapisać problem znalezienia stanów własnych oscylatora harmonicznego w reprezentacji pędowej—co z tego wynika? Znaleźliśmy stany własne transformaty Fouriera.
3. Zastanowić, się czy istnieje stan własny operatora kreacji
4. Pokazać, że  $|\alpha\rangle = D(\alpha)|0\rangle$ , gdzie  $D(\alpha) = e^{\alpha a^\dagger - \alpha^* a}$
5. Udowodnić, że w stanach własnych oscylatora  $\langle E_{kin} \rangle = \langle E_{pot} \rangle$
6. Rozważ oscylator harmoniczny w stanie podstawowym. W pewnej chwili przez bardzo krótki czas  $\delta t$  przyłożono to cząstki bardzo dużą siłę  $F = \gamma/\delta t$ . Przyjmując granicę  $\delta t \rightarrow 0$  (przy czym  $\gamma = \text{const}$ ), zbadaj w jakim stanie znajdzie się cząstka tuż po takim kopnięciu i jak będzie dalej ewoluować.

### TYDZIEŃ VII (15.04, 17.04)

#### Teoria momentu pędu

Grupa obrotów Głęboka prawda o obrotach: obroty wokół ustalonej osi komutują, wokół różnych osi nie. Macierze obrotu wokół osi x,y,z:

$$R_x(\phi) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \phi & -\sin \phi \\ 0 & \sin \phi & \cos \phi \end{bmatrix}$$

$$R_y(\phi) = \begin{bmatrix} \cos \phi & 0 & \sin \phi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \phi & 0 & \cos \phi \end{bmatrix}$$

$$R_z(\phi) = \begin{bmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Ogólnie grupa obrotu:  $R^T R = \mathbb{1}$ ,  $\det R = 1$  grupa ortogonalna  $SO(3)$ . Rozważmy teraz wykonane po sobie kolejno nieskończenie małe obroty, rozwijając wszystko to max drugiego rzędu w  $\epsilon$ :

$$R_x(\epsilon)R_y(\epsilon) \approx$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 - \epsilon^2/2 & -\epsilon \\ 0 & \epsilon & 1 - \epsilon^2/2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 - \epsilon^2/2 & 0 & \epsilon \\ 0 & 1 & 0 \\ -\epsilon & 0 & 1 - \epsilon^2/2 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 1 - \epsilon^2/2 & 0 & \epsilon \\ \epsilon^2 & 1 - \epsilon^2/2 & -\epsilon \\ -\epsilon & \epsilon & 1 - \epsilon^2 \end{bmatrix} \quad (29)$$

Jesli odwrócimy kolejność:

$$R_x(\epsilon)R_y(\epsilon) \approx \begin{bmatrix} 1 - \epsilon^2/2 & \epsilon^2 & \epsilon \\ 0 & 1 - \epsilon^2/2 & -\epsilon \\ -\epsilon & \epsilon & 1 - \epsilon^2 \end{bmatrix}$$

Czyli komutator obrotów:

$$R_x(\epsilon)R_y(\epsilon) - R_y(\epsilon)R_x(\epsilon) \approx \begin{bmatrix} 0 & -\epsilon^2 & 0 \\ \epsilon^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \approx R_z(\epsilon^2) - 1$$

*b. Reprezentacje grupy obrotów* Grupa obrotów działa na wektory w przestrzeni trój wymiarowej. My będziemy mieli do czynienia ze stanami kwantowymi opisanymi jako wektory w różnie wymiarowych przestrzeniach. Będziemy więc potrzebowali reprezentacji grupy obrotów  $U_R$  t.że obrocony stan pod wpływem obrotu  $R$ :  $|\psi\rangle_R = U_R|\psi\rangle$ . Jako reprezentacja  $U_R$  musi spełniać:  $U_{R_1R_2} = U_{R_1}U_{R_2}$ ,  $U_{R^{-1}} = U_R^{-1}$ . Co więcej interesują nas tylko reprezentacje unitarne (nie chcemy, żeby rozróżnialność stanów zależała od orientacji układu odniesienia!)  $U_R^\dagger U_R = \mathbb{1}$  (w przypadku grupy obrotów nie ogranicza nas to, bo grupa zwarta).

Najpierw rozważmy obrót znanej nam funkcji falowej  $\psi(\vec{r})$ , pod wpływem obrotu  $R$ . Dostajemy nową funkcję falową:

$$\psi'(\vec{r}) = \psi(R^{-1}\vec{r})$$

Załóżmy, że obrót jest infitezymalny wokół osi  $\vec{n}$  o kąt  $\epsilon$ ,  $\vec{\epsilon} = \epsilon\vec{n}$ . Mamy  $R^{-1}\vec{r} = \vec{r} - \vec{\epsilon} \otimes \vec{r}$ . Czyli:

$$\begin{aligned} \psi'(\vec{r}) &= \psi(\vec{r}) - [(\vec{\epsilon} \otimes \vec{r}) \cdot \vec{\nabla}] \psi(\vec{r}) = [\mathbb{1} - (\vec{\epsilon} \otimes \vec{r}) \cdot \vec{\nabla}] \psi(\vec{r}) = \\ &= [\mathbb{1} - \vec{\epsilon} \cdot (\vec{r} \otimes \vec{\nabla})] \psi(\vec{r}) = [\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \epsilon \vec{n} \cdot \vec{L}] \psi(\vec{r}) \quad (30) \end{aligned}$$

$\vec{n} \cdot \vec{L}$  pełni rolę generatora obrotu wokół osi  $\vec{n}$  (analogicznie jak  $\vec{p}$  generator translacji,  $\vec{H}$  generator ewolucji czasowej). Czyli  $U_{\vec{n}}(\epsilon) \approx \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \epsilon \vec{n} \cdot \vec{L}$ . Rozważmy skończony obrót o kąt  $\phi$  wokół osi  $\vec{n}$  Możemy napisać:

$$U_{\vec{n}}(\phi) = \lim_{N \rightarrow \infty} (\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \frac{\phi}{N} \vec{n} \cdot \vec{L})^N = e^{-\frac{i}{\hbar} \phi \vec{n} \cdot \vec{L}}$$

Zwróćmy uwagę, zgadza się dla  $\vec{n} = \hat{e}_z$ ,  $L_z = -i\hbar\partial_\phi$ . Mamy reprezentację grupy obrotów w naszej przestrzeni Hilberta.

Ale teraz chcemy myśleć ogólniej, nie koniecznie o przestrzennym momencie pędu. Mamy, jakąś przestrzeń Hilberta, i rozważamy działanie reprezentacji grupy obrotów. Definiujemy jako  $J_i$  generator dla reprezentacji obrotu wokół osi  $i$ .

$$U_i(\varphi) = e^{-\frac{i}{\hbar} \varphi J_i}$$

Rozważamy inifitezymalne obroty, i z tego, że to jest reprezentacja musi wynikać, że mamy dla  $U$

$$U_x(\epsilon)U_y(\epsilon) - U_y(\epsilon)U_x(\epsilon) \approx U_z(\epsilon^2) - 1$$

Czyli:

$$[J_x, J_y] = i\hbar J_z$$

i ogólniej

$$[J_i, J_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} J_k$$

Czymkolwiek są  $J_i$ , fakt, że generują reprezentację grupy obrotu wymusza, żeby spełniały reguły komutacyjne takie jak zwykły moment pędu (choć tutaj jest ogólniej bo możemy mieć spin), obrót wokół osi  $\vec{n}$  o kąt  $\varphi$  prowadzi do transformacji stanu:

$$U_{\vec{n}}(\varphi) = U_i(\varphi) = e^{-\frac{i}{\hbar} \varphi \vec{n} \cdot \vec{J}}$$

Oczywiście znów mamy  $[J^2, J_i] = 0$ . Chcemy teraz, zrozumieć ogólne własności stanów własnych  $J^2$  i  $J_z$  korzystając jedynie z reguł komutacyjnych  $J_i$ . Oznaczmy wartości własne przez  $a, b$ :

$$J^2|a, b\rangle = a|a, b\rangle \quad (31)$$

$$J_z|a, b\rangle = b|a, b\rangle \quad (32)$$

Wprowadzamy  $J_\pm = J_x \pm iJ_y$  (operatory drabinkowe):

$$[J_+, J_-] = 2\hbar J_z \quad (33)$$

$$[J_z, J_\pm] = \pm\hbar J_\pm \quad (34)$$

Zróbmy podobną „sztuczkę” jak w oscylatorze harmonicznym:

$$J_z(J_\pm)|a, b\rangle = ([J_z, J_\pm] + J_\pm J_z)|a, b\rangle = (b \pm \hbar)(J_\pm|a, b\rangle),$$

czyli  $J_\pm$  podnosi lub obniża wartość własną  $J_z$  o  $\hbar$ . Zauważmy, że nie zmienia się  $b$  bo  $[J^2, J_\pm] = 0$ .

$$J_\pm|a, b\rangle = c_{pm}|a, b \pm \hbar\rangle$$

Nie możemy jednak podnosić  $b$  bez końca... zauważmy, że:

$$J^2 - J_z^2 = \frac{1}{2}(J_+J_- + J_-J_+) = \frac{1}{2}(J_+J_+^\dagger + J_+^\dagger J_+)$$

jest operatorem nieujemnie określonym. Czyli  $\langle a, b | (J^2 - J_z^2) | a, b \rangle \geq 0$ . To znaczy, że jest jakieś  $b_{\max}$  powyżej którego już nie możemy podnosić i dla którego musi zachodzić:

$$J_+|a, b_{\max}\rangle = 0$$

Możemy też napisać:

$$\begin{aligned} 0 &= J_-J_+|a, b_{\max}\rangle = J_x^2 + J_z^2 - i(J_yJ_x - J_xJ_y)|a, b_{\max}\rangle = \\ &= (J^2 - J_z^2 - \hbar J_z)|a, b_{\max}\rangle = (a - b_{\max}^2 - \hbar b_{\max})|a, b_{\max}\rangle \quad (35) \end{aligned}$$

Czyli  $a = b_{\max}(b_{\max} + \hbar)$ . Analogicznie, działając  $J_-$  mamy  $b_{\min}$  i dostajemy  $a = b_{\min}(b_{\min} - \hbar)$ . Czyli:  $b_{\min}(b_{\min} - \hbar) = b_{\max}(b_{\max} + \hbar)$ ,

$$(b_{\min} - b_{\max} - \hbar)(b_{\min} + b_{\max}) = 0$$

Z tego wynika, że skoro  $b_{\min} \leq b_{\max}$  to jedyna możliwość  $-b_{\min} = b_{\max}$ . Musimy móc przejść z  $|a, b_{\min}\rangle$  do  $|a, b_{\max}\rangle$  określoną liczbą kroków  $n$ . Czyli dopuszczalne

$$b_{\max} = \frac{\hbar n}{2} = \hbar j \quad j = 0, 1/2, 1, \dots$$

gdzie oznaczyliśmy  $j = n/2$ . Dopuszczalne wartości własne  $J_z$ ,  $b \in \{-\hbar j, \dots, \hbar j\}$ . A wartości własne  $J^2$

$$a = \hbar^2 j(j+1).$$

Wprowadzamy oznaczenie  $b = m\hbar$  i oznaczamy stany własne jako  $|j, m\rangle$ :

$$J^2|j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1)|j, m\rangle, \quad j = 0, 1/2, 1, \dots \quad (36)$$

$$J_z|j, m\rangle = m\hbar|j, m\rangle, \quad m = -j, -j+1, \dots, j-1, j \quad (37)$$

Mamy ogólną mądrości mówiące o skwantowaniu momentu pędu (wszystko z relacji komutacyjnych  $J_i$ ) Mamy bazę  $|j, m\rangle$ , chcemy teraz napisać jawnie operatory  $J_i$  w tej bazie. Wiemy:

$$\langle j', m' | J^2 | j, m \rangle = j(j+1)\hbar^2 \delta_{j'j} \delta_{m'm} \quad (38)$$

$$\langle j', m' | J_z | j, m \rangle = m\hbar \delta_{j'j} \delta_{m'm} \quad (39)$$

Wiemy, też

$$J_+|j, m\rangle = c_{jm}^+|j, m+1\rangle$$

Weźmy iloczyn skalarny:

$$|c_{jm}^+|^2 = \langle j, m | J_- J_+ | j, m \rangle = \langle j, m | J^2 - J_z^2 - \hbar J_z | j, m \rangle = \hbar^2 [j(j+1) - m(m+1)]$$

analogicznie dla  $J_-$ . Czyli:

$$J_+|j, m\rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)}\hbar|j, m+1\rangle \quad (40)$$

$$J_-|j, m\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\hbar|j, m-1\rangle \quad (41)$$

$$(42)$$

Dzięki temu mamy elementy macierzowe  $J_\pm$ :

$$\langle j', m' | J_\pm | j, m \rangle = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}\hbar \delta_{j'j} \delta_{m', m \pm 1}$$

A stąd możemy już napisać sobie macierze  $J_x$  i  $J_y$ . Widzimy, że  $J_i$  nie zmieniają  $j$  a jedynie  $m$ . Czyli możemy myśleć, że obroty które są generowane przez  $J_i$  nie wyprowadzają z podprzestrzeni o ustalonym  $j$ . Rozważmy więc najniższe  $j$ .

*Spin 1/2*  $j = 0$  jest nieciekawy, bo wszystkie  $J_i$  się na nim zerują. Najniższy nietrywialny dopuszczalny  $j = 1/2$ . Mamy bazę  $|+\rangle = |j = 1/2, m = 1/2\rangle$ ,  $|-\rangle := |j = 1/2, m = -1/2\rangle$ . W tej bazie:

$$J_z = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad J_+ = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad J_- = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$J_x = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad J_y = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$$

Czyli dla spinu 1/2

$$J_i = \frac{\hbar}{2} \sigma_i$$

Potrąfimy w związku z tym obracać stany spinu 1/2.

$$U_{\vec{n}}(\varphi) = e^{-\frac{i}{\hbar} \varphi \vec{\sigma} \vec{n}}$$

Macierz obrotu spinu o kąt  $\varphi$  wokół osi  $z$ :

$$U_z(\varphi) = e^{-\frac{i}{\hbar} \varphi J_z} = \begin{bmatrix} e^{\frac{i}{2} \varphi} & 0 \\ 0 & e^{-\frac{i}{2} \varphi} \end{bmatrix}$$

Zauważmy, że  $U_z(2\pi) = -\mathbf{1}$  Czyli stan powraca do swojego oryginalnego stanu ale przemonożony przez -1. Żeby nie było -1 potrzebujemy obrotu o  $4\pi$ . Tak będzie dla wszystkich spinów połówkowych, poprzez twierdzenie spin-statystyka to prowadzi do symetrycznych lub antysymetrycznych stanów wielu cząstek (fermiony, bozony). Ściśle rzecz biorąc to nie jest więc reprezentacja grupy obrotów, ale czegoś większego. Nasze postępowanie było takie: wzięliśmy SO(3) (grupa Liego), rozważyliśmy jej generatory (algebra Liego) i zbadaliśmy różne możliwe reprezentacje tych generatorów spełniające reguły komutacyjne a następnie z tych generatorów z powrotem zrobiliśmy reprezentacje grupy. Nasze macierze są ogólnymi macierzami unitarnym 2 x 2 z  $\det U = 1$  dzięki temu, że macierze Pauliego są bazą wszystkich macierzy hermitowskich bezśladowych 2 x 2. Patrząc na spin 1/2 wylądowaliśmy w reprezentacji grupy SU(2). SU(2), SO(3) mają ten sam generator spełniające te same reguły komutacyjne, grupy są różne (SU(2) jest dwa razy większa od SO(3), jest co więcej jednopółna—grupa nakrywająca SO(3)).

*Harmoniki sferyczne* Wróćmy teraz do operatora orbitalnego momentu pędu  $\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p}$ , działającego na skalarnie funkcje falowe  $\psi(\vec{r})$ . Pamiętamy, że dla potencjałów sferycznie symetrycznych rozdzieliliśmy  $\psi(\vec{r}) = R(r)Y(\theta, \varphi)$ , i zatrzymaliśmy się na problemie własnym  $L^2 Y = \lambda Y$ . Z rozważań ogólnych wiemy, że możemy ponumerować stany własne przez  $l, m$

$$L^2 Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad (43)$$

$$L_z Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \hbar m Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad (44)$$

Z drugiego równania mamy:

$$-i\hbar \partial_\varphi Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \hbar m Y_{l,m}(\theta, \varphi)$$

Z tego wynika, że  $Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \Theta_{l,m}(\theta) e^{im\varphi}$ . Wiemy, że  $-l \leq m \leq l$ . Jeśli  $l$  byłoby połówkowe, mielibyśmy niejednoznaczność funkcji falowej—obrot o  $2\pi$  pozostawiał by znak - a nie może, bo funkcja skalarna po obrocie o  $2\pi$  jest po prostu sobą samą. Czyli  $l$  całkowite.

Weźmy  $Y_{l,l}$ , wiemy że działając  $L_+ Y_{l,l} = 0$ :

$$-i\hbar e^{i\varphi} (i\partial_\theta - \cot \theta \partial_\varphi) \Theta(\theta) e^{il\varphi} = 0$$

$$\frac{1}{\Theta} \frac{d\Theta}{d\theta} = l \cot \theta$$

Czyli

$$Y_{l,l} = c_{l,l} \sin^l \theta e^{il\varphi}$$

Warunek unormowania prowadzi do  $|c_{l,l}|^2 = \frac{(2l+1)(2l)!}{4\pi} \frac{1}{(2^l l!)^2}$ .  
Wybieramy też konwencje w znaku tak, że:

$$Y_{l,l} = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(2l)!}{4\pi}} \sin^l \theta e^{il\varphi}$$

Kolejne stany własne uzyskamy działając  $L_- = \hbar e^{-i\varphi} (-\partial_\theta + i \cot \theta \partial_\varphi)$  i odpowiednio renormalizując:

$$Y_{l,l-1} = -\frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(2l)!}{4\pi}} \hbar e^{i(l-1)\varphi} \sin^{l-1} \theta \cos \theta 2l \frac{1}{\sqrt{2l}} \quad (45)$$

Ogólne jawne wyrażenie na harmoniki sferyczne:

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = (-1)^{(m+|m|)/2} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}$$

gdzie  $P_l^m(x)$  stowarzyszone wielomiany Legendre'a:

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{|m|/2} \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} P_l(x)$$

gdzie  $P_l(x)$  wielomiany Legendre'a:

$$P_l(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2-1)^l$$

Podsumowując Harmoniki sferyczne to takie unormowane funkcje  $\theta, \varphi$ , że:

$$L_z Y_{l,m} = \hbar m Y_{l,m} \quad (46)$$

$$L^2 Y_{l,m} = \hbar^2 l(l+1) Y_{l,m} \quad (47)$$

$$\int d\varphi d\theta \sin \theta Y_{l,m}(\theta, \varphi) Y_{l',m'}(\theta, \varphi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (48)$$

Są bazą w przestrzeni funkcji całkowalnych z kwadratem na sferze (wiemy, bo znaleźliśmy wszystkie stany własne operatora hermitowskiego). Warunek zupełności:

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\theta, \varphi) Y_{lm}(\theta', \varphi') = \frac{1}{\sin \theta} \delta(\theta - \theta') \delta^{\varphi - \varphi'}$$

Czyli każdą funkcję całkowalną z kwadratem na sferze możemy rozłożyć w bazie Harmonik sferycznych. Przykładowe harmoniki:

$$Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi} \quad (49)$$

$$Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1) \quad Y_{2,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi} \quad (50)$$

$$Y_{2,2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi} \quad (51)$$

## Ćwiczenia

1. Znaleźć stany własne w nieskończonej trójwymiarowej studni potencjału  $V(\vec{r}) = 0$ , dla  $0 < x < a$ ,  $0 < y < b$ ,  $0 < z < c$
2. Dla oscylatora izotropowego 3D, zapisać operatory momentu pędu za pomocą operatorów kreacji/anihilacji  $a, b, c$ . Pokazać, że  $L_x, L_y, L_z$  komutują z Hamiltonianem. Znaleźć stany o energii  $5/2\hbar\omega$  które będą jednocześnie stanami własnymi  $L^2$  i  $L_z$
3. Korzystając z własności operatorów  $J_{\pm}$ , Znaleźć jawne postacie macierzy  $J_x, J_y, J_z$  dla cząstki o spinie 1.
4. Pokazać, że  $e^{-\frac{i}{\hbar} J_z} J_x e^{\frac{i}{\hbar} J_z} = J_x \cos \varphi + J_y \sin \varphi$ , czyli, że składowe momentu pędu rzeczywiście transformują się pod wpływem obrotu jak składowe wektora w 3D
5. Napisać explicite transformację obrotu spinu 1/2 wokół osi x o kąt  $\varphi$ . Jaką postać, ma transformacja dla  $\varphi = 2\pi$ ?. Porównać, z przypadkiem cząstki o spinie 1—tu już „normalnie” obrót o  $2\pi$  to identyczność
6. Cząstka o spinie 1 została przygotowana w w stanie  $|j=1, m=1\rangle$ . Jakie wartości i z jakimi prawdopodobieństwami można uzyskać mierząc rzutu spinu cząstki na oś y.

## TYDZIEŃ VIII (22.04, 24.04)

### Potencjały sferycznie symetryczne c.d.

Wiemy, że dla potencjałów sferycznie symetrycznych mamy.

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

I wiemy, że  $L^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1)$ ,  $l = 0, \dots, \infty$  czyli równanie na część radialną ma postać:

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2 R} \partial_r (r^2 \partial_r R) + V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - E = 0$$

Część z  $l(l+1)$  pełni funkcję potencjału związanego z siłą odśrodkową.

*Cząstka swobodna we wsp. sferycznych* Weźmy  $V(r) = 0$ . Znamy rozwiązania we wsp. kartezjańskich, ale fale płaskie nie są stanami własnymi  $L_z, L^2$ . Teraz będziemy mieć rozwiązania tego samego problemu ale w innej bazie.

$$-\frac{\hbar^2}{R} \partial_r (r^2 \partial_r R) - 2mr^2 E + \hbar^2 l(l+1) = 0$$

Wprowadźmy oznaczenie  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ :

$$-\frac{1}{R} \partial_r (r^2 \partial_r R) - k^2 r^2 + l(l+1) = 0$$

Weźmy najpierw  $l = 0$ , i zapiszmy jako:

$$-\frac{1}{Rr} \partial_r^2 (rR) - k^2 = 0$$

Czyli

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

Rozwiązanie odpowiadające stanowi cząstki o zerowym momencie pędu. Dla ogólnego  $l$ :

$$\partial_r^2 R + \frac{2}{r} \partial_r R + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} = 0$$

Wprowadzając zmienną  $\rho = kr$ :

$$\partial_\rho^2 R + \frac{2}{\rho} \partial_\rho R + \left(1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right) R = 0$$

Równanie Bessla. Rozwiązania kuliste funkcje Bessla:

$$R_l(\rho) = A j_l(\rho) + B n_l(\rho)$$

$$j_l(\rho) = (-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho}\right)^l \frac{\sin \rho}{\rho}$$

$$n_l(\rho) = -(-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho}\right)^l \frac{\cos \rho}{\rho}$$

Dla małych  $\rho$ :

$$j_l(\rho) \approx \frac{2^l l!}{(2l+1)!} \rho^l, \quad n_l(\rho) \approx -\frac{(2l)!}{2^l l!} \rho^{-(l+1)}$$

Czyli podsumowując. Dla energii  $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ :

$$\psi_{l,m}(r, \theta, \varphi) = [A j_l(kr) + B n_l(kr)] Y_{l,m}(\theta, \varphi)$$

*Potencjał Coulombowski* Weźmy  $V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$  będzie nam opisywał oddziaływanie elektronu naładowanym jądrem o ładunku  $Ze$  Przeskalujemy  $\rho = \alpha r$ ,  $\alpha = \sqrt{\frac{8m|E|}{\hbar^2}}$ . Mamy:

$$-\frac{4|E|}{\rho^2} \partial_\rho (\rho^2 \partial_\rho R) - \frac{Ze^2}{\rho} \sqrt{8m|E|} \hbar^2 + \frac{4|E|l(l+1)}{\rho^2} - E = 0$$

Oznaczmy  $\lambda = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar} \sqrt{\frac{m}{2E}}$

$$\frac{1}{\rho^2} \partial_\rho (\rho^2 \partial_\rho R) + \left[ \frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] R = 0$$

Równoważnie:

$$\frac{1}{\rho} \partial_\rho^2 (\rho R) + \left[ \frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] R = 0$$

Postępujemy podobnie jak w przypadku oscylatora harmonicznego rozwiązywanego przez szereg. Patrzymy najpierw

na zachowanie asymptotyczne w  $\rho \rightarrow \infty$ . Rozważmy  $R(\rho) = \rho^n e^{\pm \frac{1}{4}\rho}$ . Sprawdzamy, że spełnia równanie w wiodącym rzędzie. To sugeruje szukać rozwiązań postaci:

$$R(\rho) = F(\rho) e^{-\frac{1}{2}\rho}$$

gdzie  $F(\rho)$  wielomian skończonego rzędu w  $\rho$ . Podstawiamy i uzyskujemy:

$$\partial_\rho^2 F + \left(\frac{2}{\rho} - 1\right) \partial_\rho F + \left[\frac{\lambda - 1}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right] F = 0$$

Weźmy  $F(\rho) = \rho^s L(\rho)$ ,  $s \geq 0$  (żeby było skończone w  $\rho = 0$ ),  $L(\rho) = \sum_{\nu=0} a_\nu \rho^\nu$ ,  $a_0 \neq 0$ . Dostajemy:

$$\rho^2 \partial_\rho^2 L + \rho[2(s+1) - \rho] \partial_\rho L + [\rho(\lambda - s - 1) + s(s+1) - l(l+1)] L = 0$$

Weźmy to równanie dla  $\rho = 0$

$$s(s+1) - l(l+1) = 0$$

Mamy dwie możliwości  $s = l$ ,  $s = -(l+1)$ . Wybieramy nie wybuchające  $s = l$ . Wtedy

$$\rho \partial_\rho^2 L + [2(l+1) - \rho] \partial_\rho L + (\lambda - l - 1) L = 0 \quad (52)$$

Wstawiamy wielomian  $L$  i dostajemy związki między kolejnymi współczynnikami  $a_\nu$ :

$$\frac{a_{\nu+1}}{a_\nu} = \frac{\nu + l + 1 - \lambda}{(\nu + 1)(\nu + 2l + 2)}$$

Jeśli szereg by się nie urwał, to  $\frac{a_{\nu+1}}{a_\nu} \rightarrow \frac{1}{\nu}$ , a to znaczy, że  $R(\rho) \rightarrow r^n e^{\frac{1}{2}r}$  i funkcja wybucha. Warunek urwania:

$$\lambda = \nu_{\max} + l + 1 =: n = 1, 2, \dots, \infty$$

gdzie  $n$  będziemy nazywać główną liczbą kwantową. W takim razie energia:

$$E_n = -\frac{Z^2 e^4 m^2}{32\pi^2 \epsilon_0^2 n^2 \hbar^2} = R_0 \frac{Z^2}{n^2}, \quad R_0 = -13,6 \text{ eV}$$

Czynnik skalujący  $\alpha$ :

$$\alpha = \frac{2Z}{na_0}, \quad a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} = 0,52 \text{ \AA} \quad (\text{promień Bohra})$$

Dla większych  $Z$  wszystko się kurczy.

Wielomiany spełniające równanie (52) można wyrazić przez stowarzyszone wielomiany Laguerre. Wielomiany Laguerre spełniają równanie:

$$\rho \partial_\rho^2 L_p + (1 - \rho) \partial_\rho L_p + p L_p = 0$$

A w związku z tym stowarzyszone wielomiany Laguerre  $L_p^q = \frac{d^q}{d\rho^q} L_p$  spełniają (różniczkujemy powyżej  $q$  razy:

$$\rho \partial_\rho^2 L_p^q + \partial_\rho L_p^q (1 - \rho + q) + L_p^q (p - q) = 0$$

Porównując z (52) widzimy, że  $p = n + l$ ,  $q = 2l + 1$ . Czyli rozwiązaniami będą  $L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$ . Jawnie:

$$L_{n+l}^{2l+1}(\rho) = \sum_{m=0}^{n-l-1} (-1)^{m+2l+1} \frac{[(n+l)!]^2}{(n-l-1-m)!(2l+1+m)!m!} x^m$$

Dokonując unormowania, mamy ostateczną postać rozwiązań:

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (53)$$

$$R_{nl}(r) = \mathcal{N}_{n,l} \left( \frac{2Zr}{na_0} \right)^l e^{-\frac{Zr}{na_0}} L_{n+l}^{2l+1} \left( \frac{2Zr}{na_0} \right) \quad (54)$$

$$\mathcal{N}_{n,l} = - \left( \frac{2Z}{na_0} \right)^{3/2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)]^3}} \quad (55)$$

Przykładowo:

$$R_{10}(r) = 2 \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{a_0}} \quad (56)$$

$$R_{20}(r) = \left( \frac{Z}{2a_0} \right)^{3/2} \left( 2 - \frac{Zr}{a_0} \right) e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \quad (57)$$

$$R_{21}(r) = \left( \frac{Z}{2a_0} \right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0 \sqrt{3}} e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \quad (58)$$

$$(59)$$

Energia zależy tylko od  $n$ . Jaka degeneracja? Dla każdego  $n$  mamy dopuszczalne  $l = 0, \dots, n-1$ , a dla każdego  $l$   $2l+1$  różnych  $m$ :

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2n(n-1)/2 + n = n^2$$

### Problem dwóch ciał

Mysząc o atomie wodoru nie mamy pojedynczej cząstki w potencjale, ale oddziaływujące dwie cząstki. Powinniśmy więc napisać równanie Schroedingera dla funkcji falowej dwóch cząstek:  $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ .

$$i\hbar \partial_t \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \Delta_2 + V(r_1, r_2) \right] \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

Jeśli  $V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ , to wprowadzając zmienne

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2, \quad \vec{R} = (m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2) / (m_1 + m_2)$$

Otrzymamy:

$$i\hbar \partial_t \psi = \left[ -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_R - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{R}, \vec{r})$$

gdzie  $M = m_1 + m_2$ ,  $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ , masa zredukowana. Czyli mamy separację zmiennych. Mamy całość jako cząstkę swobodną o masie  $M$  oraz cząstkę o masie  $\mu$  w potencjale  $V(\vec{r})$ . Czyli np. dla atomu wodoru we wszystkich wyprowadzonych wzorach powinniśmy zamienić  $m$  na  $\mu = m_p m_e / (m_p + m_e)$ .

### Ćwiczenia

1. Rozłożyć coś na harmoniki - jakie wartości momentu pędu
2. Obrócić harmonikę  $Y_{11}$  i zobaczyć, że rozkłada się tak jak powinna
3. Znaleźć energie i stany dla  $l=0, l=1$  w potencjale  $V(r) = 0$  dla  $r \leq a$  i  $V(r) = \infty$  dla  $r > a$
4. Potencjał  $V(r) = -V_0$  dla  $r < a$  o  $V(r) = 0$  dla  $r > a$ . Dla jakich  $V_0$  istnieją stany związane.
5. Znaleźć energie i stany własne pozytronium

### TYDZIEŃ IX (29.04, 06.05)

Mało potencjałów pozwala na analityczne rozwiązanie równania Schroedingera, więc metody przybliżone są b. ważne.

### Rachunek zaburzeń bez czasu

Rozważamy:

$$H = H_0 + V,$$

gdzie  $H_0$  potrafimy rozwiązać:

$$H_0 |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle$$

a  $V$  jest zaburzeniem. Będziemy pisać  $\lambda V$ , żeby śledzić rzędy wielkości zaburzenia. Chcemy rozwiązać:

$$(H_0 + \lambda V) |n\rangle = E_n |n\rangle$$

Zakładamy najpierw, że widmo niezaburzone  $E_n^{(0)}$  jest niezdegenerowane. Piszemy:

$$|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |n^{(2)}\rangle + \dots \quad (60)$$

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} \quad (61)$$

gdzie założyliśmy implícite, że zwiększając  $\lambda$  od 0 do 1 nasze energie i stany zachowują się w sposób ciągły. Podstawiamy i patrzymy na kolejne rzędy:

$$(0) (H_0 - E_n^{(0)}) |n^{(0)}\rangle = 0 \quad (62)$$

$$(1) (H_0 - E_n^{(0)}) |n^{(1)}\rangle = (E_n^{(1)} - V) |n^{(0)}\rangle \quad (63)$$

$$(2) (H_0 - E_n^{(0)}) |n^{(2)}\rangle = (E_n^{(1)} - V) |n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)} |n^{(0)}\rangle \quad (64)$$

$$(3) (H_0 - E_n^{(0)}) |n^{(3)}\rangle = (E_n^{(1)} - V) |n^{(2)}\rangle + E_n^{(2)} |n^{(1)}\rangle + E_n^{(3)} |n^{(0)}\rangle \quad (65)$$

$$\dots \quad (66)$$

Zauważmy, że zawsze mogą dodać do  $|n^{(i)}\rangle$  coś proporcjonalnego do  $|n^{(0)}\rangle$  i wciąż będzie równanie spełnione. Czyli

bez utraty ogólności możemy przyjąć, że  $\langle n^{(i)} | n^{(0)} \rangle = 0$ , dla  $i \geq 1$ . Obkładamy z lewej przez  $|n^{(0)}\rangle$  i dostajemy:

$$E_n^{(i)} = \langle n^{(0)} | V | n^{(i-1)} \rangle$$

Czyli, żeby znaleźć poprawkę do energii w  $i$ -tym rzędzie potrzebujemy stanu w  $i-1$  rzędzie. W szczególności łatwo znaleźć:

$$E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | V | n^{(0)} \rangle.$$

Teraz szukamy stanu  $|n^{(1)}\rangle$ . Wiemy, że ortogonalny do  $|n^{(0)}\rangle$ , więc zapiszemy

$$|n^{(1)}\rangle = \sum_{k \neq n} a_k^{(n,1)} |k^{(0)}\rangle$$

Obkładamy (1) z lewej przez  $\langle k^{(0)} |$  i dostajemy:

$$a_k^{(1)} = \frac{\langle k^{(0)} | V | n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

Czyli ostatecznie:

$$|n^{(1)}\rangle = \sum_{k \neq n} \frac{\langle k^{(0)} | V | n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} |k^{(0)}\rangle$$

Wszystko OK dzięki temu, że nie ma degeneracji!!! Dzięki temu, mamy też jawnie poprawkę do energii w drugim rzędzie:

$$E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{|\langle n^{(0)} | V | k^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

Zwróćmy na tendencję do odpychania się poziomów w powyższym wyrażeniu wraz ze zwiększaniem zaburzenia. Warunek na zbierność jest by  $|\langle n^{(0)} | V | k^{(0)} \rangle / (E_n^{(0)} - E_k^{(0)})|$  było odpowiednio małe. Formalnie stany zaburzone, które piszemy są nieunormowane. W praktyce trzeba by je na koniec unormować.

Co robić gdy mamy degenerację? Problem, ma związek z naszym założeniem ciągłej zmiany stanu wraz z odchodzeniem  $\lambda$  od zera. To że mamy osobliwość sugeruje że coś się dzieje ze stanem skokowo. Intuicja: do macierzy jednostkowej dodajemy epsilonowe zaburzenie które w sposób nieciągły wyróżnia bazę. Jeśli degeneracja to nie jest jasne od jakiej bazy zaczynać, trzeba wybrać dobrze. Intuicyjnie: bazę która diagonalizuje  $V$  w podprzestrzeni zdegenerowanej. Ściśle. Rozważmy  $g$ -krotnie zdegenerowany poziom energetyczny  $n$ :  $|n_1^{(0)}\rangle, \dots, |n_g^{(0)}\rangle$ ,  $E_{n_k}^{(0)} = E_n^{(0)}$ . Oznaczmy zbiór stanów z przestrzeni zdegenerowanej  $D = \{n_1, \dots, n_g\}$  Wiemy, że każdy stan  $|n^{(0)}\rangle = \sum_{k \in D} a_k^{(0)} |n_k^{(0)}\rangle$  ma energię  $E^{(0)}$  Wstawiamy do (63) i

$$(H_0 - E_n^{(0)}) |n^{(1)}\rangle = (E_n^{(1)} - V) |n^{(0)}\rangle$$

Obkładamy z lewej kolejno  $|n_j\rangle$  dostajemy układ równań  $j = 1, \dots, g$ :

$$\sum_k (E_n^{(1)} \delta_{jk} - \langle n_j^{(0)} | V | n_k^{(0)} \rangle) a_k^{(0)} = 0$$

Oznaczmy  $\langle n_j | V | n_k \rangle = V_{jk}$  Czyli w zapisie macierzowym:

$$\begin{bmatrix} V_{11} - E_n^{(1)} & V_{12} & \dots & V_{1g} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ V_{g1} & \dots & \dots & V_{gg} - E_n^{(1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_g \end{bmatrix} = 0$$

Czyli rozwiązujemy problem własny  $V$  w podprzestrzeni zdegenerowanej. Baza własna  $V$ :  $|m_k^{(0)}\rangle$  Wartości własne  $E_{m_k}^{(1)}$  to odpowiednie poprawki w pierwszym rzędzie, a wektory własne  $|m_k^{(0)}\rangle$  to właściwe wektory w zerowym rzędzie od których zaczynamy rachunek zaburzeń.

$$E_{m_k}^{(1)} = \langle m_k^{(0)} | V | m_k^{(0)} \rangle$$

Czyli robimy tak jak w przypadku niezdegenerowanym, tylko w bazie gdzie  $V$  nie ma elementów pozadiagonalnych w podprzestrzeniach zdegenerowanych. Czyli w sumach pomijamy inne stany z przestrzeni zdegenerowanej. Gorzej jeśli degeneracja się nie usuwa w pierwszym rzędzie, czyli kilka wartości  $E_{m_k}^{(1)}$  takich samych. Nie mamy wyróżnionej bazy. Wtedy trzeba rozważać problem usunięcia degeneracji w drugim rzędzie. Wiemy, że pierwsza poprawka do stanu  $|n^{(1)}\rangle = \sum_{k \notin D} a_k^{(1)} |k^{(0)}\rangle$ , musi spełniać:

$$a_k^{(1)} = \frac{\langle k^{(0)} | V (\sum_{i \in D} a_i^{(0)} |n_i^{(0)}\rangle)}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

Wkładamy do (64) i dostajemy szereg równań  $j = 1, \dots, g$ :

$$\langle n_j^{(0)} | V \sum_{k \notin D} |k^{(0)}\rangle \frac{\langle k^{(0)} | V \sum_{i \in D} a_i^{(0)} |n_i^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} - E_n^{(2)} \sum_{i \in D} \delta_{ji} a_i^{(0)} = 0$$

Czyli musimy rozwiązać problem własny dla macierzy:

$$M_{ij} = \sum_{k \notin D} \frac{V_{ik} V_{kj}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

i wartości własne to będą energie  $E_n^{(2)}$ , a wektory własne dobre startowe niezaburzone stany  $|m_k^{(0)}\rangle$ . Jeśli w drugim rzędzie nie usuniemy degeneracji ...

### Metoda wariacyjna

A co zrobić jeśli nie znamy rozwiązań  $H_0$ , a chcemy znaleźć stan podstawowy jakiegoś problemu.

*Twierdzenie:* Dla dowolnego stanu  $|\bar{0}\rangle$ ,

$$\langle \bar{0} | H | \bar{0} \rangle \geq E_0$$

gdzie  $E_0$  energia stanu podstawowego.

*Dowód*

$$|\bar{0}\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n | \bar{0} \rangle$$



gdzie  $H|n\rangle = E_n|n\rangle$ .

$$\langle \bar{0}|H|\bar{0}\rangle = \sum_n E_n |\langle n|\bar{0}\rangle|^2 \geq E_0 \sum_n |\langle n|\bar{0}\rangle|^2 = E_0$$

Idea: Postulujemy pewną klasę funkcji zależną od pewnej liczby parametrów, następnie minimalizujemy średnie  $H$  po tych parametrach i uzyskujemy górne przybliżenie energii stanu podstawowego i przybliżoną postać stanu:

$$E_0 \leq \min_{\lambda} \frac{\langle \bar{0}_\lambda|H|\bar{0}_\lambda\rangle}{\langle \bar{0}_\lambda|\bar{0}_\lambda\rangle}$$

*Przykład* Weźmy oscylator harmoniczny  $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ . Postulujemy gausowską funkcję próbną:

$$\psi_\lambda(x) = \frac{1}{(2\pi\lambda)^{1/4}} e^{-\frac{x^2}{4\lambda}}$$

Gdzie wariancja  $\lambda$  nie znana. Liczymy

$$\begin{aligned} \langle H \rangle_\lambda &= \frac{1}{(2\pi\lambda)^{1/2}} \int dx e^{-\frac{x^2}{2\lambda}} \left( x^2 \left( -\frac{\hbar^2}{8m\lambda^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 \right) + \frac{\hbar^2}{4m\lambda} \right) = \\ &= \frac{\hbar^2}{8m\lambda} + \frac{1}{2}m\omega^2\lambda \end{aligned}$$

Szukamy minimum

$$\frac{d\langle H \rangle_\lambda}{d\lambda} = 0 \rightarrow \lambda = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

Działa. Jeśli klasa funkcji będzie dostatecznie dobra uzyskamy dobre przybliżenie.

### Rachunek zaburzeń z czasem

Zajmowaliśmy się rachunkiem zaburzeń dla równania Schroedingera bez czasu. W szczególności hamiltonian zaburzenia niezależny od czasu. Są ciekawe sytuacje gdy

$$H(t) = H_0 + V(t)$$

Np. gdy włączamy pewne oddziaływanie, albo atmo oddziałuje z falą elektromagnetyczną i interesuje nas ewolucja stanu w czasie. Zakładamy, że potrafimy rozwiązać  $H_0$  a  $V(t)$  będzie znów małe:

$$H_0|n\rangle = E_0|n\rangle$$

*Obraz oddziaływania* Mając stan w obrazie Schroedingera  $|\psi(t)\rangle = \mathcal{T}e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t=0}^t H(t')dt'} |\psi(0)\rangle$  definiujemy stan w obrazie oddziaływania (Diraca)

$$|\psi(t)\rangle_D = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} |\psi(t)\rangle$$

Podobnie definiujemy observable w obrazie oddziaływania:

$$A_D = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} A e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t}$$

Zwróćmy uwagę, że

$${}_D\langle \psi(t)|A_D|\psi(t)\rangle = \langle \psi(t)|A|\psi(t)\rangle$$

Robimy coś jak obraz Heisenberga tylko nie bierzemy całego  $H$  a jedynie  $H_0$ , czyli usuwamy z ewolucji stanu część zadaną przez  $H_0$ . Równanie na ewolucję  $|\psi(t)\rangle_D$ :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle_D &= i\hbar \frac{d}{dt} \left( e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} |\psi(t)\rangle \right) = \\ &= -H_0 e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} |\psi(t)\rangle + e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} [H_0 + V(t)] |\psi(t)\rangle = \\ &= e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} V(t) e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} |\psi(t)\rangle_D = V_D(t) |\psi(t)\rangle_D \end{aligned}$$

„Pozbyliśmy się” ewolucji z  $H_0$ . Podsumowująca tabelka:

obraz	Schroedingera	Diraca	Heisenberga
ewolucja stanu	$H$	$V_D$	brak
ewolucja obserwabli	brak	$H_0$	$H$

Zastosujemy do rachunku zaburzeń. Piszemy

$$H = H_0 + \lambda V(t)$$

żeby śledzić rzędy. Zapiszmy ewolucję za pomocą operatora ewolucji:

$$|\psi(t)\rangle_D = U_D(t) |\psi(0)\rangle_D$$

który spełnia:

$$i\hbar \frac{d}{dt} U_D(t) = \lambda V_D(t) U_D(t)$$

Znamy warunek początkowy:

$$U_D(t) = \mathbb{1}$$

i możemy zapisać formalnie rozwiązanie powyższego równanie jako:

$$U_D(t) = \mathbb{1} - \lambda \frac{i}{\hbar} \int_0^t V_D(t') U_D(t') dt'$$

To pozwala rozwiązywać równanie na operator ewolucji perturbacyjnie:

$$U_D(t) = U_D^{(0)}(t) + \lambda U_D^{(1)}(t) + \lambda^2 U_D^{(2)}(t) + \dots$$

$$U_D^{(0)}(t) = \mathbb{1} \quad (67)$$

$$U_D^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t V_D(t') dt' \quad (68)$$

$$U_D^{(2)}(t) = \left( \frac{-i}{\hbar} \right)^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' V_D(t') V_D(t'') \quad (69)$$

Szereg Dysona.

Rozważmy sytuację, że w chwili początkowej stan  $|\psi(0)\rangle_D = |\psi(0)\rangle = |i\rangle$ , jest jednym ze stanów własnych

$H_0$ . Chcemy znaleźć stan w późniejszych chwilach czasu. Zapisujemy w bazie  $H_0$

$$|\psi(t)\rangle_D = \sum_n c_n(t)|n\rangle$$

Zauważmy, że mając  $|\psi(t)\rangle_D$  będziemy mieć też  $|\psi(t)\rangle$  bo  $|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)e^{-iE_n t/\hbar}|n\rangle$ . Rozpisując w kolejnych rzędach mamy:

$$c_n(t) = c_n^{(0)}(t) + \lambda c_n^{(1)}(t) + \lambda^2 c_n^{(2)}(t) + \dots$$

Porównując wyrazy przy tych samych potęgach  $\lambda$  mamy:

$$c_n^{(0)}(t) = \delta_{n,i}$$

$$c_n^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t \langle n|V_D(t')|i\rangle dt'$$

$$c_n^{(2)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_m \int_0^t \int_0^{t'} \langle n|V_D(t')|m\rangle \langle m|V_D(t'')|i\rangle dt' dt''$$

...

Zauważmy, że

$$\langle n|V_D(t)|i\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}E_n t} \langle n|V(t)|i\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_i t} = e^{i\omega_{ni}t} V_{ni}(t)$$

gdzie  $\omega_{ni} = (E_n - E_i)/\hbar$ . Czyli:

$$c_n^{(0)}(t) = \delta_{n,i}$$

$$c_n^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{ni}t'} V_{ni}(t') dt'$$

$$c_n^{(2)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_m \int_0^t \int_0^{t'} e^{i\omega_{nm}t'} V_{nm}(t') e^{i\omega_{mi}t''} V_{mi}(t'') dt' dt''$$

...

**Zaburzenie harmoniczne** Stan początkowo w  $|i\rangle$ . W chwili  $t = 0$  włączamy zaburzenie (np. układ zaczyna oddziaływać z falą e-m):

$$V(t) = 2V \sin \omega t$$

Liczmy amplitudę znalezienia stanu w  $|n\rangle$ :

$$c_n^{(1)}(t) = \frac{-2i}{\hbar} V_{ni} \int_0^t e^{i\omega_{ni}t'} \sin \omega t' dt'$$

gdzie  $V_{ni} = \langle n|V|i\rangle$ .

$$\begin{aligned} c_n^{(1)}(t) &= -\frac{V_{ni}}{\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{ni}t'} (e^{i\omega t'} - e^{-i\omega t'}) dt' = \\ &= -\frac{V_{ni}}{\hbar} \left( \frac{1}{i(\omega_{ni} + \omega)} \left[ e^{i(\omega_{ni} + \omega)t} - 1 \right] - \frac{1}{i(\omega_{ni} - \omega)} \left[ e^{i(\omega_{ni} - \omega)t} - 1 \right] \right) \\ &= -\frac{2V_{ni}}{\hbar} \left( e^{\frac{i(\omega_{ni} + \omega)t}{2}} \frac{\sin \frac{(\omega_{ni} + \omega)t}{2}}{\omega_{ni} + \omega} - e^{\frac{i(\omega_{ni} - \omega)t}{2}} \frac{\sin \frac{(\omega_{ni} - \omega)t}{2}}{\omega_{ni} - \omega} \right) \end{aligned}$$

Widzimy, że duże wkłady będziemy mieli wtedy  $\omega = \pm\omega_{ni}$ . Jeśli  $\omega_{ni} > 0$  „absorpcja” (drugi człon dominuje), jeśli  $\omega_{ni} <$

0 „emisja wymuszona” (pierwszy człon dominuje). Dla ustalenia uwagi przyjmijmy  $\omega_{ni} > 0$  i skupmy się na drugim wyrazie. Prawdopodobieństwo przejścia do stanu  $n$  wynosi:

$$|c_n^{(1)}(t)|^2 = \frac{4|V_{ni}|^2 \sin^2 \frac{(\omega_{ni} - \omega)t}{2}}{\hbar^2 (\omega_{ni} - \omega)^2}$$

Zbadajmy granicę  $t \rightarrow \infty$ . Fakt:

$$\frac{\sin^2(\omega t/2)}{t\omega^2} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \frac{\pi}{2} \delta(\omega)$$

Intuicja (szerokość  $1/t$ , wysokość  $t^2$ ). Czyli w granicy:

$$|c_n^{(1)}(t)|^2 = \frac{2\pi t}{\hbar^2} |V_{ni}|^2 \delta(\omega_{ni} - \omega)$$

Prawdopodobieństwo rośnie liniowo w czasie. Wprowadzamy więc prawdopodobieństwo na jednostkę czasu (szybkość przejścia)

$$w_{i \rightarrow n} = \frac{2\pi}{\hbar^2} |V_{ni}|^2 \delta(\omega_{ni} - \omega)$$

Często będziemy mieli kontinuum stanów wokół pewnej energii  $E_n$ . Wprowadzając gęstość stanów  $dN = \rho(E_n) dE$ , możemy napisać (jeśli prawdopodobieństwa przejść takie same) możemy napisać:

$$w_{i \rightarrow [n]} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{ni}|^2 \rho(E_n)$$

gdzie  $[n]$  oznacza grupę stanów o energii  $E_n = E_i + \omega$ . Złota reguła Fermiego.

Zwróćmy uwagę, że  $|V_{ni}|^2 = |V_{in}|^2$  czyli prawdopodobieństwa emisji wymuszonej i absorpcji na gęstość końcowych stanów są sobie równe.

**Przykład. Prosty model magnetycznego rezonansu jądrowego**  
Rozważmy spin w polu magnetycznym  $B = B_0 e_z + B_1 (e_x \cos \omega t + e_y \sin \omega t)$ . Typowo  $B_1 (10^{-3} T) \ll B_0 (1 T)$  Hamiltonian:

$$H = -\gamma B_0 \sigma_z - \gamma B_1 (\cos \omega t \sigma_x + \sin \omega t \sigma_y)$$

Dla niezaburzonego  $E_\uparrow = -\gamma B_0$ ,  $E_\downarrow = \gamma B_0$ . Czyli częstotliwość przejścia  $\omega_0 = 2\gamma B_0/\hbar$ . Macierz zaburzenia:

$$V(t) = -\gamma B_1 \begin{bmatrix} 0 & e^{-i\omega t} \\ e^{i\omega t} & 0 \end{bmatrix}$$

Zwróćmy uwagę, że to nieco inny model niż zaburzenie harmoniczne, bo nie mnożymy pewnego operatora przez jedną funkcję skalarną zależną od czasu. Robimy tak bo dzięki temu ten model ma też ścisłe rozwiązanie... Jeśli na początku były w stanie  $|\uparrow\rangle$  amplituda przejścia do stanu  $|\downarrow\rangle$ :

$$c_\downarrow^{(1)} = \frac{i}{\hbar} \int_0^t e^{i(\omega_0 - \omega)t'} \gamma B_1 dt'$$

Czyli

$$p_{\uparrow \rightarrow \downarrow} = \frac{4\gamma^2 B_1^2 \sin^2(\omega_0 - \omega)t/2}{\hbar^2 (\omega_0 - \omega)^2}$$

tu po prostu nie ma drugiego członu z  $(\omega_0 + \omega)$ . Ale ten problem można rozwiązać ściśle! W obrazie oddziaływania

$$|\psi(t)\rangle_D = c_{\uparrow}(t)|\uparrow\rangle + c_{\downarrow}(t)|\downarrow\rangle$$

Z kolei

$$V_D(t) = -\gamma B_1 \begin{bmatrix} 0 & e^{i(\omega_0 - \omega)t} \\ e^{-(\omega_0 - \omega)t} & 0 \end{bmatrix}$$

możemy rozwiązać ściśle...

$$p_{\uparrow \rightarrow \downarrow} = \frac{\gamma^2 B_1^2 / \hbar^2}{\gamma^2 B_1^2 / \hbar^2 + (\omega - \omega_0)^2 / 4} \sin^2[\sqrt{(\omega - \omega_0)^2 / 4 + \gamma^2 B_1^2 / \hbar^2}]$$

widać, że w najniższym rzędzie w  $B_1$  się zgadza.

## Ćwiczenia

Oscylator z zaburzeniem liniowym ,czwarta potęga. Efekt skończonych rozmiarów jądra w atomie wodoru. Poprawka do energii w atomie Helu ze względu na oddziaływanie elektronów. Oddziaływanie van-der-Wallsa (dwa atomy wodoru). Efekt Starka, kwadratowy (stan podstawowy), liniowy (stan podstawowy, pierwszy wzbudzony, degenracja!). Jonizacja atomu wodoru [Przygotować serie zadań domowych do kolokwium 18 maja uwzględniając zadania z następnego tygodnia]

## TYDZIEŃ X (13.05, 15.05)

### Tw. adiabatyczne

Rozważaliśmy zaburzenie zmienne w czasie które było małe w porównaniu z  $H_0$  ale nie mówiliśmy nic o szybkości zmienności. Teraz myślimy o sytuacji gdy Hamiltonian  $H(t)$  zmienia się bardzo wolno (wolne włączanie/obracanie pola itp.) W każdej chwili czasu możemy napisać:

$$H(t)|n(t)\rangle = E_n(t)|n(t)\rangle \quad (70)$$

$|n(t)\rangle$  tworzą bazę zależną od czasu. Formalnie możemy napisać dowolne rozwiązanie w postaci:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) e^{i\theta_n(t)} |n(t)\rangle, \quad \theta_n(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(t') dt'$$

Wstawiamy do równ. Schroedingera:

$$i\hbar \sum_n \left[ \dot{c}_n(t) |n(t)\rangle + c_n(t) |\dot{n}(t)\rangle + c_n(t) |n(t)\rangle \dot{\theta}_n(t) \right] e^{i\theta_n(t)} = \sum_n H(t) c_n(t) e^{i\theta_n(t)} |n(t)\rangle \quad (71)$$

trzeci wyraz po lewej się skraca się z prawym mamy:

$$\sum_n \dot{c}_n(t) |n(t)\rangle e^{i\theta_n(t)} = - \sum_n c_n(t) |\dot{n}(t)\rangle e^{i\theta_n(t)}$$

Czyli

$$\dot{c}_m(t) = - \sum_n c_n(t) \langle m(t) | \dot{n}(t) \rangle e^{i[\theta_n(t) - \theta_m(t)]}$$

Z kolei różniczkując (70) mamy, dla  $n \neq m$ :

$$\langle m(t) | \dot{n}(t) \rangle = \frac{\langle m(t) | \dot{H}(t) | n(t) \rangle}{E_n - E_m}$$

Czyli:

$$\dot{c}_m(t) = -c_m(t) \langle m(t) | \dot{m}(t) \rangle + \sum_{n \neq m} c_n(t) e^{i[\theta_n(t) - \theta_m(t)]} \frac{\langle m(t) | \dot{H}(t) | n(t) \rangle}{E_n(t) - E_m(t)} \quad (72)$$

O przybliżeniu adiabatycznym mówmy kiedy możemy pominąć drugi człon:

$$|\dot{H}_{mn}| \times \hbar / H_{mn} (\text{skala czasowa ewolucji}) \ll (E_n(t) - E_m(t))$$

Wtedy jeśli w  $t = 0$  zaczynamy ze stanu własnego  $H(0)$ ,  $|m(0)\rangle$  to pozostaje on ciągle stanem własnym zmieniającego się stanu własnego  $H(t)$ :

$$c_m(t) = c_m(0) e^{-i \int_0^t \langle m(t') | \dot{m}(t') \rangle dt'} = c_m(0) e^{i\gamma_m(t)}$$

gdzie  $\gamma_m(t) = i \int_0^t \langle m(t') | \dot{m}(t') \rangle dt'$ , czyli domnaża się tylko przez fazę. Ostatecznie:

$$|\psi(t)\rangle = e^{i\theta_m(t)} e^{i\gamma_m(t)} |m(t)\rangle$$

$\theta_m(t)$  - faza dynamiczna,  $\gamma_m(t)$  - faza geometryczna. Zwróćmy uwagę, że redefiniując stany w każdej chwili czasu  $|m(t)\rangle \rightarrow |m(t)\rangle e^{i\chi(t)}$ ,  $\gamma_m(t) \rightarrow \gamma_m(t) - \int_0^t \dot{\chi}(t) dt$  możemy tę fazę wchłonąć więc wydaje się нефизyczna.

### Faza Berry'ego

Rozważmy sytuację, że Hamiltonian zależy pośrednio od czasu, poprzez zależność od pewnych parametrów układu  $R(t)$  zależnych od czasu (pole Magnetyczne, siła potencjału, itp...). Będziemy pisać  $H[\vec{R}(t)]$  i  $|m[\vec{R}(t)]\rangle$ . Rozważmy teraz adiabatyczną zmianę gdzie  $\vec{R}(t)$  zakreśla pewną trajektorię. Zgodnie z wcześniejszymi wynikami możemy napisać:

$$\gamma_m = i \int_{\vec{R}(0)}^{\vec{R}(t)} \langle m(\vec{R}) | \vec{\nabla}_R | m(\vec{R}) \rangle \cdot d\vec{R}$$

Ciekawie się robi jak rozważamy kontur zamknięty, czyli Hamiltonian wraca do swojej pierwotnej formy. W tej sytuacji faza geometryczna nie zależy już od redefinicji faz w stanach własnych! bo: domnażając przez fazę  $|m[R(t)]\rangle e^{i\chi[\vec{R}(t)]}$  otrzymujemy:

$$\gamma_m = i \oint_{R(t)} \langle m(\vec{R}) | \vec{\nabla}_R | m(\vec{R}) \rangle \cdot d\vec{R} - \oint_{R(t)} \vec{\nabla} \chi(R) \cdot d\vec{R} = \gamma_m$$

bo rotacja gradientu zero.

**Przykład** Weźmy stan spinu  $1/2$   $|+\rangle_z$ , i rozważmy pole magnetyczne zmieniające się wzdłuż równoleżnika:  $\vec{B}(\theta) = B[\cos\theta\mathbf{e}_z, \sin\theta\cos\varphi\mathbf{e}_x, \sin\theta\sin\varphi\mathbf{e}_y]$  dla  $\varphi = [0, 2\pi]$  powraca do początkowej wartości Stan własny Hamiltonianu  $|\theta\rangle = \cos\theta/2|+\rangle + \sin(\theta/2)e^{i\varphi}|-\rangle$  Obliczmy

$$\gamma = i \int_0^{2\pi} d\varphi (\cos\theta/2\langle +| + e^{-i\varphi} \sin(\theta/2)\langle -|) i e^{i\varphi} \sin(\theta/2)|-\rangle = j = 1. \quad (73)$$

$$= -2\pi \sin^2 \theta/2 = -\frac{1}{2}\Omega$$

Czyli faza zmienia się o pół kąta bryłowego  $\Omega$  zakreślonego na sferze (tak będzie dla dowolnej trajektorii). Np. dla ruchu po równiku dostaniemy  $-1$ . (dla stanów o rzucie spinu  $m$  byłoby  $-m\Omega$ ) Stąd nazwa geometryczna. Można zaobserwować w eksperymentach interferencyjnych—na jednej ścieżce wolno zmienne pole magnetyczne i obserwując interferencję z dwóch dróg widać tę fazę. (Aharonov-Bohm effect to też to samo, później)

#### Dodawanie momentów pędu

Wiemy, że unitarna macierz obrotu cząstki wyraża się przez operatory momentu pędu  $U_{\vec{n}}(\varphi) = e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi\vec{n}\cdot\vec{J}}$ . Znamy różne reprezentacje grupy obrotu (albo ściślej  $SU(2)$ ) i wiemy, że nieprzywiedlne reprezentacje numerujemy  $j$  i mamy odpowiednie reprezentacje operatorów momentu pędu. Np dla cząstki o spinie  $s = 1/2$  mieliśmy (oznaczamy  $S$  zamiast  $J$ ):

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

w bazie  $|m = +1/2\rangle, |m = -1/2\rangle$ . Wiemy jak obracać stany:

$$|\psi'\rangle = U_{\vec{n}}(\varphi)|\psi\rangle, \quad U_{\vec{n}}(\varphi) = e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi\vec{n}\cdot\vec{S}}$$

Rozważmy teraz dwa spiny  $1/2$ . Baza w przestrzeni dwóch spinów  $|m_1\rangle \otimes |m_2\rangle$ ,  $m_i = \pm 1/2$ . Ogólny stan dwóch spinów:

$$|\psi\rangle_{12} = \sum_{m_1, m_2} c_{m_1, m_2} |m_1\rangle \otimes |m_2\rangle$$

Jak obraca się stan dwóch spinów:

$$|\psi'\rangle_{12} = U_{\vec{n}}(\varphi) \otimes U_{\vec{n}}(\varphi) |\psi\rangle_{12} = e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi\vec{n}\cdot\vec{S}} \otimes e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi\vec{n}\cdot\vec{S}} |\psi\rangle_{12} = e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi\vec{n}\cdot(\vec{S} \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \vec{S})} |\psi\rangle_{12} = e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi\vec{n}\cdot\vec{J}} |\psi\rangle_{12} \quad (74)$$

gdzie

$$\vec{J} = \vec{S} \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$$

jest operatorem całkowitego spinu. Chcemy wiedzieć jakie są możliwe wartości  $j$  i  $m_j$  związanych z  $\vec{J}$  i jakie stany w przestrzeni dwóch spinów  $1/2$  temu odpowiadają (stany własne  $\vec{J}$ ). To nam pozwoli lepiej zrozumieć jak obracają się stany dwóch spinów  $1/2$ . Dotąd używaliśmy bazy

$|m_1\rangle \otimes |m_2 = \pm 1/2\rangle$  stany własne  $S_{1,z}, S_{2,z}$  (i w sposób trywialny  $S_1^2, S_2^2$ ). Teraz chcemy stany własne  $J^2, J_z$ . Jaki możemy mieć maksymalny  $J_z = S_{1,z} + S_{2,z}$ .

$$J_z | +1/2\rangle \otimes | +1/2\rangle = \hbar | +1/2\rangle \otimes | +1/2\rangle$$

Czyli maksymalnie  $m_j = +1$ . To oznacza, że maksymalnie  $j = 1$ . Sprawdźmy czy jest to też stan własny  $J^2$ :

$$J^2 = S_1^2 + S_2^2 + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = \frac{3\hbar^2}{2} \mathbf{1} + 2(S_{1,x}S_{2,x} + S_{1,y}S_{2,y} + S_{1,z}S_{2,z})$$

$$J^2 | +1/2\rangle \otimes | +1/2\rangle = \left(\frac{3\hbar^2}{2} + 2\frac{\hbar^2}{4}\right) | +1/2\rangle \otimes | +1/2\rangle = 2\hbar^2 | +1/2\rangle \otimes | +1/2\rangle$$

czyli faktycznie  $j = 1$ . Możemy więc napisać:

$$|j = 1, m_j = 1\rangle = | +1/2\rangle \otimes | +1/2\rangle$$

Chcemy pozostałe stany o  $j = 1$ . Wiemy, że:

$$J_- |j, m\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m-1)} |j, m-1\rangle$$

Czyli:

$$|j = 1, m_j = 0\rangle = J_- |j = 1, m_j = 1\rangle \frac{1}{\hbar\sqrt{2}}$$

Ale  $J_- = S_{1,-} + S_{2,-}$ , więc:

$$\begin{aligned} |j = 1, m_j = 0\rangle &= \frac{1}{\hbar\sqrt{2}} (S_{1,-} + S_{2,-}) | +1/2\rangle \otimes | +1/2\rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (| -1/2\rangle \otimes | +1/2\rangle + | +1/2\rangle \otimes | -1/2\rangle) \end{aligned}$$

Podobnie dostaniemy:

$$|j = 1, m_j = -1\rangle = | -1/2\rangle \otimes | -1/2\rangle.$$

Mamy trzy wektory w czterowymiarowej przestrzeni. Został nam jeszcze jeden wektor ortogonalny i możemy sprawdzić, że on odpowiada  $j = 0, m_j = 0$ :

$$|j = 0, m_j = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (| -1/2\rangle \otimes | +1/2\rangle - | +1/2\rangle \otimes | -1/2\rangle)$$

Formalnie rozdzieliliśmy naszą przestrzeń 4-ro wymiarową na podprzestrzeń trypletową i singletową, które nie mieszają się pod wpływem obrotów, generatorem mają postać blokową w tej bazie:

$$J_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad J_y = \frac{\hbar}{i\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad J_z = \hbar \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Stany z przestrzeni trypletowej obracają się jak cząstka o spinie 1 a z przestrzeni singletowej jak cząstka o spinie 0 (czyli nie obracają się). Oznacza to, że gdyby napisać macierz obrotu dwóch cząstek w tej bazie mielibyśmy postać blokową:

$$U_{\vec{n}}^{(\frac{1}{2})}(\varphi) \otimes U_{\vec{n}}^{(\frac{1}{2})}(\varphi) = U_{\vec{n}}^{(1)}(\varphi) \oplus U_{\vec{n}}^{(0)}(\varphi)$$

Albo w skrócie:

$$\frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2} = 1 \oplus 0$$

Rozkład reprezentacji tensorowej  $SU(2)$  na sumę prostą nieprzywiedlnych reprezentacji. To jest przykład dodawania momentów pędu. Zwróćmy uwagę, że stan singletowy się nie zmienia pod wpływem obrotów—ważna i ciekawa własność. W szczególności moglibyśmy napisać:

$$|j=0, m_j=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|-1/2\rangle_x \otimes |+1/2\rangle_x - |+1/2\rangle_x \otimes |-1/2\rangle_x)$$

Zwróćmy też uwagę na ciekawostkę: singlet stan antisymetryczny, tryplet -stany symetryczne. Głęboki związek reprezentacji tensorowych  $SU(2)$  z symetriami ze względu na zamianę cząstek.

Ogólna procedura dodawania momentów pędu. Mamy dwie cząstki o  $j_1, j_2$  czyli przestrzeń  $(2j_1+1)(2j_2+1)$  wymiarową rozpiętą przez:

$$|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle \equiv |m_1\rangle \otimes |m_2\rangle$$

. Chcemy w tej przestrzeni znaleźć bazę wektorów własnych  $J^2, J_z$ , gdzie  $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$ .

$$J^2|j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1)|j, m\rangle, \quad J_z|j, m\rangle = \hbar m|j, m\rangle$$

. Skorzystajmy z własności:

$$\vec{J}_1 \cdot \vec{J}_2 = \frac{1}{2}(J_{1,+}J_{2,-} + J_{1,-}J_{2,+}) + J_{1,z}J_{2,z}$$

Dzięki temu:

$$J^2 = J_1^2 + J_2^2 + 2J_{1,z}J_{2,z} + J_{1,+}J_{2,-} + J_{1,-}J_{2,+}$$

Maksymalne  $j = j_1 + j_2$ . Zaczynamy:

$$|j, j\rangle = |j_1\rangle \otimes |j_2\rangle$$

Sprawdzamy. Teraz:

$$|j, j-1\rangle = \frac{1}{\hbar\sqrt{2j}} J_- |j, j\rangle = \frac{1}{\sqrt{2j}} \left( \sqrt{2j_1} |j_1-1\rangle |j_2\rangle + \sqrt{2j_2} |j_1\rangle \otimes |j_2-1\rangle \right)$$

itd aż do

$$|j, -j\rangle = |-j_1\rangle \otimes |-j_2\rangle$$

Zwróćmy uwagę, że mamy stan ortogonalny do  $|j, j-1\rangle$  który też ma wartość własną  $J_z$ , równą  $j-1$ . Napiszmy go:

$$|j, j-1\rangle^\perp = \frac{1}{\sqrt{2j}} \left( \sqrt{2j_2} |j_1-1\rangle |j_2\rangle - \sqrt{2j_1} |j_1\rangle \otimes |j_2-1\rangle \right)$$

Sprawdźmy czy jest wektorem własnym  $J^2$ :

$$\begin{aligned} J^2|j, j-1\rangle^\perp &= \hbar^2 \frac{j_2}{j} (j_1(j_1+1) + j_2(j_2+1)) + \\ &+ 2(j_1-1)j_2 |j_1-1\rangle |j_2\rangle + \hbar^2 \sqrt{\frac{j_2}{j}} \sqrt{2j_1 2j_2} |j_1\rangle |j_2-1\rangle + \\ &- \sqrt{\frac{j_1}{j}} [j_1(j_1+1) + j_2(j_2+1) - 2(j_2-1)j_1] |j_1\rangle |j_2-1\rangle \\ &- \hbar^2 \sqrt{\frac{j_1}{j}} \sqrt{2j_1 2j_2} |j_1-1\rangle |j_2\rangle = \hbar^2 (j_1+j_2-1)(j_1+j_2) |j, j-1\rangle^\perp \end{aligned}$$

Czyli

$$|j, j-1\rangle^\perp = |j-1, j-1\rangle$$

Możemy teraz dalej konstruować... będziemy uzyskiwać dodatkowe wektory aż do momentu aż zejdziemy do  $m = |j_1 - j_2|$  wtedy zacznie nam się zmniejszać liczba wyrazów (np weźmy  $j_1$  i  $j_2 = 0$ ). Uzyskamy wszystkie  $j$  z przedziału  $j_1 + j_2$  aż do  $|j_1 - j_2|$ . Każde  $j$  wystąpi dokładnie raz. Wymiar się zgadza

Czyli w skrócie:

$$j_1 \otimes j_2 = j_1 + j_2 \oplus \dots \oplus |j_1 - j_2|$$

Ogólnie piszemy:

$$|j, m\rangle = \sum_{m_1, m_2} \langle j_1, m_1, j_2, m_2 | j, m \rangle |m_1\rangle |m_2\rangle$$

gdzie  $\langle j_1, m_1, j_2, m_2 | j, m \rangle$  nazywamy współczynnikami Clebscha-Gordana. Niezerowe tylko jeśli  $m = m_1 + m_2$  i  $|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$ . Jawna ogólna postać dość koszmarna...

Więcej cząstek, analogicznie. Np.

$$\frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2} = (1 \oplus 0) \otimes \frac{1}{2} = \frac{3}{2} \oplus \frac{1}{2} \oplus \frac{1}{2}$$

Mamy dwie podprzestrzenie o spinie  $1/2$  i jedną o spinie  $3/2$ .

Diagramy Younga. W poziomie symetryzacja. W pionie antisymetryzacja.

To, że stany z określonej przestrzeni  $j$  mają dobrze określone własności symetrii związane z tym że  $[U^{\otimes N}, \Pi_g] = 0$ . [Kolokwium 2 (18 maja)]

## TYDZIEŃ XI (20.05, 22.05)

### stany splątane, Bell

#### Macierz gęstości

Wektor w przestrzeni Hilberta  $|\psi\rangle$  reprezentuje pełną wiedzę o układzie. Używamy go do liczenia prawdopodobieństw. Pomiar w bazie  $|i\rangle$ :

$$p(i|\psi) = |\langle i|\psi\rangle|^2 = \langle i|\psi\rangle\langle\psi|i\rangle$$

Co by było gdybyśmy wiedzieli jedynie tyle że otrzymujemy stany  $|\psi_k\rangle$  z prawdopodobieństwami  $q_k$ . Jakie jest prawdopodobieństwo że wynik pomiaru będzie  $i$ :

$$p(i) = \sum_k q_k p(i|\psi_k) = \sum_k q_k \langle i|\psi_k\rangle\langle\psi_k|i\rangle = \langle i|\rho|i\rangle,$$

gdzie

$$\rho = \sum_k q_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k|$$

jest op. hermitowskim nieujemnie określonym, o śladzie 1 - macierz gęstości. Opisuje to co możemy przewidzieć o zachowaniu układu bez pełnej wiedzy.

c. *Przykład* Porównajmy dwa stany spinu  $1/2$ :

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+1/2\rangle_z + |-1/2\rangle_z)$$

$$\rho_1 = |\psi_1\rangle\langle\psi_1| = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \quad (75)$$

Oraz

$$\rho_2 = \frac{1}{2}(|+1/2\rangle_z\langle+1/2|_z + |-1/2\rangle_z\langle-1/2|_z) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Pomiary w bazie  $z$  dadzą ten sam wynik. Ale już w bazie  $x$  w  $\rho_1$  wyjdzie zawsze wynik  $+1$  a w  $\rho_2$  wyniki  $+1$  i  $-1$  z równymi prawdopodobieństwami. Ciekawostka:

$$\rho_2 = \frac{1}{2}(|+1/2\rangle_x\langle+1/2|_x + |-1/2\rangle_x\langle-1/2|_x)$$

i podobnie w dowolnej bazie. Te sytuacje eksperymentalne są nierozróżnialne! Nie pozwalają przewidzieć nic na temat wartości rzutu spinu w żadnym kierunku.

Tego typu sytuacje gdy potrzebujemy macierzy gęstości do opisu pojawiają się naturalnie w przypadku układów oddziałujących z otoczeniem. Mamy stan:

$$|\Psi\rangle_{SE} \in \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E, \quad \rho_{SE} = |\Psi\rangle_{SE}\langle\Psi|$$

Ale fizycznie mamy dostęp jedynie do stopni swobody  $S$ . Jak efektywnie wygląda opisać nasz stan? Obserwowalne są jedynie prawdopodobieństwa pomiarów na  $S$ . Tzn. możemy rzutować w pewnej bazie na  $S$ :  $|i\rangle_S$ , potencjalnie coś może mierzyć jakąś bazę na  $E$   $|j\rangle_E$  ale po wynikach musimy uśrednić:

$$p(i) = \sum_j s\langle i|\otimes_E\langle j|\rho_{SE}|i\rangle_S\otimes|j\rangle_E = s\langle i|\left(\sum_j \langle j|_E\rho_{SE}|j\rangle_E\right)|i\rangle_S$$

Wygląda tak jakbysmy po prostu liczyli prawdopodobieństwo na pewnym obiekcie

$$\rho_S = \sum_j {}_E\langle j|\rho_{SE}|j\rangle_E, \quad p(i) = \langle i|\rho_S|i\rangle$$

Co oznacza ten napis?. Jeśli napiszemy  $\rho_{SE}$  w bazie:

$$\rho_{SE} = \sum_{ij,i'j'} (\rho_{SE})_{ij,i'j'}^ij|i\rangle \otimes |j\rangle\langle i'|\langle j'|$$

to

$$\rho_S = \sum_{i,i'} |i\rangle\langle i'| \sum_j (\rho_{SE})_{ij,i'j}^ij$$

Albo bardziej po ludzku:

$$(\rho_S)_{i'j}^ij = \sum_j (\rho_{SE})_{ij,i'j}^ij$$

Zwróćmy uwagę, że  $\rho_S$  nie zależy od wyboru bazy w  $E$ : Weźmy:  $|k\rangle = \sum_j U_{kj}|j\rangle, \dots$

$$\begin{aligned} \rho_S &= \sum_k \langle k|_E\rho_{SE}|k\rangle_E = \sum_{kj,j'} U_{kj}^* \langle j|\rho_{SE}U_{kj'}|j'\rangle = \\ &= \sum_{jj'} \delta_{jj'} \langle j|\rho_{SE}|j'\rangle = \rho_S \end{aligned} \quad (76)$$

$\rho_S$  jest obiektem który zawiera pełną informację dostępną w podukładzie. Często zapisujemy:

$$\rho_S = \text{Tr}_E\rho_{SE}$$

operacja częściowego śladowania.

d. *Przykład* Rozważmy eksperyment interferencyjny w którym foton przechodząc przez szczelinę zmienia stan obecnego tam atomu

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes |0\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \otimes |0\rangle + |1\rangle \otimes |1\rangle)$$

W wyniku oddziaływania foton splątał się z atomem. Czego możemy się spodziewać na ekranie.

$$\rho_S = \frac{1}{2}(|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|)$$

Stan równoważny eksperymentowi w którym z  $p = 1/2$  foton leci górną lub dolną drogą—brak interferencji. Fakt, że informacja o drodze fotonu wyciekła do innego układu fizycznego niszczy szanse na obserwację interferencji—dekoherencja.

## TYDZIEŃ XII (27.05, 29.05)

Wróćmy do atomu wodoru uwzględniając spin elektronu. Mamy przestrzenne i spinowe stopnie swobody. Formalnie  $\mathcal{H}_{3D} \otimes \mathcal{H}_{\text{spin}}$ , gdzie  $\dim(\mathcal{H}_{\text{spin}}) = 2$ . Nasza formalna baza  $|r\rangle \otimes |\pm \frac{1}{2}\rangle$

$$|\psi\rangle = \int d\vec{r} \sum_{m_s=\pm\frac{1}{2}} \psi_{m_s}(\vec{r})|r\rangle \otimes |m_s\rangle$$

Często zapisujemy jako w reprezentacji położeniowej jako

$$\tilde{\psi}(\vec{r}) = \begin{bmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{bmatrix}$$

Jeśli  $H$  nie zawiera żadnych członów zależnych od spinu to formalnie ma postać  $H \otimes \mathbb{1}$  i rozwiązania na  $\psi_{\pm}(\vec{r})$  są identyczne nie zależą od  $m$ .

Wróćmy do atomów wodoropodobnych. Pamiętamy, że uzyskaliśmy stany własne, które były jednocześnie stanami własnymi  $L^2, L_z$

$$|n, l, m\rangle, \quad E_n = -\frac{R_0 Z^2}{n^2}$$

energia zależała tylko od  $n$ . Jeśli nie dodamy w  $H$  żadnych członów zależnych od spinu, to stopnie spinowe nie zmieniają energii czyli, możemy formalnie napisać stany własne jako również stany własne  $S^2$  i  $S_z$

$$|n, l, m, s, m_s\rangle,$$

przy czym  $s = 1/2$ ,  $m_s = \pm 1/2$ . I po prostu mamy dwa razy więcej dopuszczalnych stanów o tych samych energiach. Możemy też przeciwiczyć dodawanie momentów pędu. Wprowadźmy  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$  Pierwszy działa na przestrzenne stopnie swobody, drugi na spinowe. Zamiast numerować  $l, m, s, m_s$  możemy równoważnie używać innej bazy i numerować  $|l, s, j, m_j\rangle$ , gdzie  $|l - s| \leq j \leq l + s$ , będącą bazą własną  $L^2, S^2, J^2, J_z$ , to nic nie zmienia energie te same.

*Przykład* Weźmy  $n = 2, l = 1, s = 1/2$  mamy 6 stanów  $m \in \{-1, 0, 1\}$ ,  $m_s = \pm \frac{1}{2}$ . Dopuszczalne  $j = 1/2, 3/2$ . Znajdźmy stany w tej bazie.

$$|j = 3/2, m_j = 3/2\rangle = |m = 1, m_s = 1/2\rangle$$

Działamy  $J_-$ :

$$\begin{aligned} J_- |j = 3/2, m_j = 3/2\rangle &= \hbar\sqrt{3}|j = 3/2, m_j = 1/2\rangle = \\ &= \hbar(\sqrt{2}|m = 0, m_s = 1/2\rangle + \sqrt{1}|m = 1, m_s = -1/2\rangle) \end{aligned} \quad (77)$$

Czyli:

$$\begin{aligned} |j = 3/2, m_j = 1/2\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}}|0, 1/2\rangle + \\ &+ \sqrt{\frac{1}{3}}|1, -1/2\rangle \end{aligned} \quad (78)$$

Dalej:

$$\begin{aligned} |j = 3/2, m_j = -1/2\rangle &= \\ \frac{1}{2} \left( \sqrt{\frac{2}{3}}(\sqrt{2}| -1, 1/2\rangle + |0, -1/2\rangle) + \sqrt{\frac{2}{3}}|0, -1/2\rangle \right) &= \\ \sqrt{\frac{2}{3}}|0, -1/2\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}| -1, 1/2\rangle \end{aligned} \quad (79)$$

$$|j = 3/2, m_j = -3/2\rangle = |m = -1, m_s = -1/2\rangle$$

Pozostałe:

$$|j = 1/2, m_j = 1/2\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}|0, 1/2\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}|1, -1/2\rangle$$

$$|j = 1/2, m_j = -1/2\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}|0, -1/2\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}| -1, +1/2\rangle$$

I mamy 6 stanów. Zapiszmy w takim razie jawnie w reprezentacji położeniowej np.  $|n = 2, l = 1, s = 1/2, j = 3/2, m_j = 1/2\rangle$ :

$$\tilde{\psi}(\vec{r}) = R_{2,1}(r) \begin{bmatrix} \sqrt{\frac{2}{3}}Y_{1,0}(\theta, \varphi) \\ \sqrt{\frac{1}{3}}Y_{1,1}(\theta, \varphi) \end{bmatrix}$$

Teraz się okaże poco nam to wszystko. Najważniejszy efekt który zaburza ten obrazek-sprzężenie spin-orbita. Intuicyjne (nieściśle wyprowadzenie, ściśle dopiero z równania Diraca): jądro wytwarza pole elektostatyczne w którym porusza się elektron. Dla elektronu wygląda to jak poruszające się pole elektryczne czyli pojawia się pole magnetyczne  $\vec{B} = -\frac{\vec{v}}{c^2} \times \vec{E}$  (przybliżenie nierelatywistyczne, możemy to wyprowadzić z pęteli z prądem protonu wokół elektronu  $\mu_0 I / 2r$ ). W naszym przypadku  $\vec{E} = \vec{r} \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0 r^3}$ . Nasz elektron ma moment magnetyczny:  $\vec{\mu} = -e\vec{S}/(m_e)$ , i mamy dodatkowy człon w Hamiltonianie postaci

$$\begin{aligned} H_{S-O} &= -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\frac{e\vec{S}}{m_e c} \left( \frac{\vec{p}}{m_e c} \times \frac{\vec{r}Ze}{4\pi\epsilon_0 r^3} \right) = \\ &= \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 c^2 m_e^2 r^3} \vec{L} \cdot \vec{S}. \end{aligned} \quad (80)$$

Ściśle powinien być jeszcze czynnik 1/2 (efekt przejścia do przyspieszającego układu, precesja Thomasa) czyli

$$H_{S-O} = \frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 c^2 m_e^2 r^3} \vec{L} \cdot \vec{S}$$

Mamy nowy człon w hamiltonianie. Już nie komutuje z  $L_z$  i  $S_z$ ! Ale zauważmy, że:

$$J^2 = L^2 + S^2 + 2\vec{L} \cdot \vec{S},$$

czyli

$$\vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2}(J^2 - L^2 - S^2)$$

komutuje z  $L^2, S^2, J^2, J_z$ . Widać, że lepiej używać bazy  $|n, l, s, j, m_j\rangle$  bo w tej bazie  $H_{S-O}$  jest diagonalny. Czyli możemy robić rachunek zaburzeń z degeneracją. Stany z  $j = l \pm \frac{1}{2}$ , poprawka do energii:

$$\begin{aligned} \Delta_{j=l+1/2} &= \frac{\hbar^2}{2} [(l+1/2)(l+3/2) - l(l+1) - 3/4] \\ &= \frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 c^2 m_e^2} \int dr r^2 R_{nl}(r)^2 \frac{1}{r^3} = \frac{Zh^2 e^2 l}{16\pi\epsilon_0 c^2 m_e^2} \int dr R_{nl}^2(r)/r \end{aligned} \quad (81)$$

$$\begin{aligned} \Delta_{j=l-1/2} &= \frac{\hbar^2}{2} [(l-1/2)(l+1/2) - l(l+1) - 3/4] \\ &= \frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 c^2 m_e^2} \int dr r^2 R_{nl}(r)^2 \frac{1}{r^3} = -\frac{Zh^2 e^2 (l+1)}{16\pi\epsilon_0 c^2 m_e^2} \int dr R_{nl}^2(r)/r \end{aligned} \quad (82)$$

Rząd wielkości poprawki:

$$\Delta \propto \frac{\hbar^2 e^2}{\epsilon_0 c^2 m_e^2} / a_0^3$$

Jak ona się ma do stałej Rydberga  $R_0 = \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2}$ ,  $a_0 = 4\pi\epsilon_0 \hbar^2 / m_e e^2$ :

$$\frac{\Delta}{R_0} \propto \frac{e^2}{\epsilon_0 c^2 m_e} \frac{m_e e^2}{\epsilon_0 \hbar^2} = \frac{e^4}{\epsilon_0^2 \hbar^2 c^2} = \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \right)^2 \approx (1/137)^2 \approx 5 \cdot 10^{-5} \quad (83)$$

Narysować schemat poziomów  $2s_{1/2}, 2p_{1/2}, 2p_{3/2}$  (mamy jeszcze efekty relatywistyczne w związku z prędkością, ściśle rozwiązanie równania Diraca pokazałoby, że poziomy  $2s_{1/2}$  i  $2p_{1/2}$  mają tę samą energię. Ale i to nie prowadzi bo Lamb Shift podnosi  $2s_{1/2}$ )

### Cząstka w polu elektro-magnetycznym

W analogii do klasycznego Hamiltonianu piszemy:

$$H = \frac{1}{2m}(\vec{p} - e\vec{A})^2 + e\varphi(\vec{r})$$

Pamiętajmy, że  $\vec{p}$  to pęd kanoniczny a  $\vec{\Pi} = \vec{p} - e\vec{A}$  to pęd kinematyczny. Zauważmy:

$$\frac{dx_i}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[x_i, H] = \frac{p_i - eA_i}{m}$$

Zauważmy też, że składowe  $\Pi_i$  nie komutują ze sobą.

Zastanówmy się co się stanie jak zmienimy cechowanie:

$$\vec{A} \rightarrow \vec{A} + \nabla\chi(\vec{r}, t), \quad \varphi \rightarrow \varphi - \partial_t\chi$$

Wtedy pola  $E$  i  $B$  się nie zmieniają:

$$\vec{E} = -\nabla\varphi - \partial_t\vec{A} \quad \vec{B} = \nabla \times \vec{A}$$

Wiemy, że w fizyce klasycznej to nie zmienia trajektorii. Nam zmienia się równanie Schrodingera i dostaniemy inną funkcję falową

$$i\hbar\partial_t\tilde{\psi} = \left(\frac{1}{2m}(\vec{p} - e\vec{A} - e\nabla\chi)^2 + e\varphi(\vec{r}) - e\partial_t\chi\right)\tilde{\psi}$$

Spróbujmy powiązać  $\tilde{\psi} = e^{ia\chi}\psi$ . Wystarczy wziąć  $a = e/\hbar$  i będzie dobrze. Zauważmy, że gęstość prawdopodobieństwa się nie zmienia, jak również kinematyczny pęd.

### Cząstka w stałym polu magnetycznym

Rozważmy cząstkę swobodną bez spinu w stałym polu magnetycznym  $\vec{B} = B\hat{e}_z$ . Szukamy stanów własnych. Potencjał wektorowy:  $A_x = -By, A_y = A_z = 0$ .

$$\frac{1}{2m}[(p_x + eBy)^2 + p_y^2 + p_z^2]\psi = E\psi$$

$$[H, p_x] = [H, p_z] = 0.$$

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_z z)}Y(y)$$

otrzymujemy:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_y^2 Y + \frac{m}{2}\Omega^2(y - y_0)^2 Y = (E - p_z^2/2m)Y$$

gdzie  $\Omega = \frac{eB}{m}$ ,  $y_0 = -p_x/eB$  Poziomy energetyczne:

$$E = \hbar\Omega(n + 1/2) + p_z^2/2m$$

Mamy degenracje ze względu na  $p_x$  (przesuwanie w przestrzeni—zauważmy, że  $p_x$  nie jest pędem kinematycznym), a  $p_z$  jest i odpowiada ruchowi w swobodnym kierunku z.

Teraz cechowanie symetryczne [Ćwiczenia]

### Efekt Zeemana

Umieszczamy atom wodoru w jednorodnym polu magnetycznym  $\vec{B} = B\hat{e}_z$ ,  $A = \frac{1}{2}[-By, Bx, 0]$ . Pamiętamy, że moment magnetyczny elektronu  $\vec{\mu} = -\frac{e}{m}\vec{S}$ :

$$H = \frac{(\vec{p} - (-e)\vec{A})^2}{2m} + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0}r + H_{S-O} - \frac{e}{m}\vec{S} \cdot \vec{B}$$

$$H = H_0 + \frac{eB}{2m}(xp_y - yp_x) + \frac{eB^2}{8m}(x^2 + y^2) + H_{S-O} - \frac{eB}{m}S_z$$

$$H = H_0 + H_{S-O} + \frac{eB}{2m}(L_z + 2S_z) + \frac{e^2B^2}{8m}(x^2 + y^2)$$

Ostatni wyraz to przedostatniego jest rzędu:  $eBa_0^2/\hbar = 10^{-19}10^{-20}/10^{-34} \approx 10^{-5}$ , pomijamy.

$$H \approx H_0 + H_{S-O} + \frac{eB}{2m}(J_z + S_z) = H_0 + H_{S-O} + H_Z$$

Pamiętamy, że do  $H_{S-O}$  lepiej było używać  $J$ , ale tutaj niestety zostaje jeszcze  $S_z$ . W zależności od tego czy poprawka Zeemana jest większa czy mniejsza od S-O używamy albo bazy  $|l, s, j, m_j\rangle$ , albo  $|l, m, s, m_s\rangle$ . Przyjmijmy, że poprawka Zeemana mała w porównaniu z S-O. Wtedy napiszemy, że

$$E_Z^{(1)} = \frac{eB}{2m}\langle j, l, s, m_j | J_z + S_z | j, l, s, m_j \rangle = \frac{eB}{2m}(\hbar m_j + \langle j, l, s, m_j | S_z | j, l, s, m_j \rangle) \quad (84)$$

Wyrażenie  $\langle j, l, s, m_j | S_z | j, l, s, m_j \rangle$  można otrzymać używając współczynników Clebscha-Gordana (rozkładając w bazie  $|l, m, s, m_s\rangle$ ), możemy jednak użyć pewnego uproszczonego nieco nieformalnego rozumowania. W stanach  $|j, l, s, m_j\rangle$  to co łamie symetrię sferyczną to  $\vec{J}$ . Czyli w tej przestrzeni elementy macierzowe  $\langle m_j | \vec{S} | m'_j \rangle = \text{const} \langle m_j | \vec{J} | m'_j \rangle$  w szczególności  $\langle S_z \rangle = \text{const} \langle J_z \rangle$ . Czyli operator spinu „równoległy” do całkowitego momentu pędu. Czyli:

$$\sum_{m'_j} \langle m_j | \vec{S} | m'_j \rangle \langle m'_j | \vec{J} | m_j \rangle = \text{const} \sum_{m'_j} \langle m_j | \vec{J} | m'_j \rangle \langle m'_j | \vec{J} | m_j \rangle$$

$$\langle \vec{S} \vec{J} \rangle = \text{const} j(j+1)$$

Z drugiej strony wiemy, że

$$\vec{S} \cdot \vec{J} = \hbar^2 \frac{1}{2}(j(j+1) - l(l+1) + s(s+1))$$

$$\text{const} = \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)}$$

I mamy:

$$E_Z^{(1)} = \frac{eB}{2m}\hbar m_j \left(1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)}\right) = B\mu_B \hbar m_j g$$

gdzie  $g$  - współczynnik Landego (współczynnik żyromagnetyczny).



### Monopol magnetyczny

Załóżmy, że istniałby monopol magnetyczny

$$B = \frac{e_M}{r^2} \hat{r}$$

Jaki odpowiada temu potencjał wektorowy? Rotacja we współrzędnych sferycznych:

$$\begin{aligned} \nabla \times \vec{A} = \hat{r} \left[ \frac{1}{r \sin \theta} \partial_\theta (A_\varphi \sin \theta) - \partial_\varphi A_\theta \right] + \\ + \hat{\theta} \frac{1}{r} \left[ \frac{1}{\sin \theta} \partial_\varphi A_r - \partial_r (r A_\varphi) \right] + \hat{\varphi} \frac{1}{r} [\partial_r (r A_\theta) - \partial_\theta A_r] \end{aligned}$$

Czyli wydaje się, że dobry byłby:

$$\vec{A} = \frac{e_M(1 - \cos \theta)}{r \sin \theta} \hat{\varphi}$$

Ale on ma osobliwość w  $\theta = \pi$  (ujemna część osi  $z$ ). Tylko tak się da bo  $\nabla(\nabla \times \vec{A}) = 0$ . Możemy zdefiniować dwa obszary w których zadamy potencjał:

$$A^I = \frac{e_M(1 - \cos \theta)}{r \sin \theta} \hat{\varphi} \quad 0 \leq \theta < \pi - \epsilon \quad (85)$$

$$A^{II} = -\frac{e_M(1 + \cos \theta)}{r \sin \theta} \hat{\varphi} \quad \epsilon \leq \theta \leq \pi \quad (86)$$

W obszarze gdzie  $A^I$  i  $A^{II}$  się przekrywają musi je łączyć transformacja cechowania.

$$A^{II} - A^I = -\frac{2e_M}{r \sin \theta} \hat{\varphi} = \nabla \chi$$

Czyli  $\chi = -2e_M \varphi$ . Teraz dwie funkcje falowe łączą się przez:

$$\psi^{II} = \psi^I e^{-\frac{2ie_M \varphi}{\hbar}}$$

Każda musi być jednoznacznie określona, czyli  $2ee_M/\hbar = n$  a w związku z tym:

$$e_M = \frac{\hbar}{2e}$$

### Efekt Aharonova-Bohma

Rozważmy pole magnetyczne w bardzo długim solenoidzie, także wewnątrz solenoidu  $r < a$  pole  $\vec{B} = B\hat{e}_z$  a na zewnątrz pole znika. Ale zauważmy, że potencjał wektorowy nie. Zapiszmy we współrzędnych biegunowych:

$$\vec{A} = \hat{e}_\varphi \begin{cases} Br/2 & r \leq R \\ Ba^2/2r & r \geq R \end{cases}$$

Dla przypomnienia rotacja:

$$\nabla \times \vec{A} = \frac{1}{r} [\partial_r (r A_\varphi) - \partial_\varphi A_r] \hat{e}_z + \dots$$

Teraz rozważmy eksperyment interferencyjny z elektronami. Za dwoma szczelinami umieszczamy solenoid (równoległe do

szczelin), tak, że jedna droga przechodzi górą a druga dołem. Cząstka nigdy nie może znaleźć się wewnątrz solenoidu a mimo to obserwujemy efekt interferencyjny w zależności od strumienia pola magnetycznego wewnątrz solenoidu. To jest coś czego nie ma w fizyce klasycznej, tam ważne jest tylko jakie jest  $E$  i  $B$  w obszarze gdzie jest cząstka. Jeśli mam funkcję falową  $\psi_0(r, t)$ , która jest rozwiązaniem równ. Schroedingera pod nieobecność potencjału wektorowego, to zakładając że potencjał wektorowy nie zmienia się w czasie widać, że rozwiązaniem w obecności potencjału będzie

$$\psi(r, t) = \psi_0(r, t) e^{\frac{ie}{\hbar} \int_{r_0}^r \vec{A} \cdot d\vec{s}}$$

To oznacza, że interferując dwie drogi pojawi nam się dodatkowa faza

$$\delta = \frac{e}{\hbar} \oint \vec{A} \cdot d\vec{s} = \frac{eB\pi a^2}{\hbar} = \frac{e\Phi_B}{\hbar}$$

gdzie  $\Phi_B = \pi a^2 B$ , czyli zależy od strumienia pola magnetycznego zamkniętego wewnątrz solenoidu. Wniosek: same pola  $E$  i  $B$  są niewystarczające to pełnego opisu w mechanice kwantowej choć wystarczają w kalsycznej.

### Ćwiczenia

1. Tw. Wirialne
2. Ćwiczenia trans. Galileusza a równanie Schroedingera

### TYDZIEŃ XIII (03.06, 05.06)

[Schemat teorii rozpraszania - fala płaska, centrum rozpraszania  $V(r)$ , detektor pod kątem  $\theta$ —wektor falow  $\vec{k}$ ] Rozważamy rozpraszanie elastyczne, gdzie  $V$  odpowiednio szybko spada z  $r$ , tak, że asymptotycznie mamy rozwiązania swobodne (w praktyce szybciej niż  $1/r$ ). Pada fala płaska  $\psi_{in} = Ae^{ik_0 r}$  - rozwiązanie swobodne. Fala rozproszona daleko od potencjału będzie rozwiązaniem dla cząstki swobodnej we współrzędnych sferycznych (kierunek  $\vec{k}_0 = k_0 \hat{e}_z$ ). Pamiętajmy, że ogólne rozwiązanie cząstki swobodnej we współrzędnych było:

$$\sum_{l,m} [A_{l,m} j_l(r) + B_{l,m} n_l(r)] Y_{l,m}(\theta, \varphi),$$

gdzie  $j_l(r)$ ,  $n_l(r)$  kuliste funkcje Bessla. Asymptotyczne własności kulistych funkcji Bessla:

$$j_l(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{r} \cos(r - [l+1]\pi/2)$$

$$n_l(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{r} \sin(r - [l+1]\pi/2)$$

czyli asymptotycznie ogólne rozwiązanie możemy zapisać:

$$f(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} + g(\theta, \varphi) \frac{e^{-ikr}}{r}$$

Pierwsze to fala rozbiegająca się do nieskończoności druga nadbiegająca. Nas interesują rozwiązania typu pierwszego. Czyli piszemy:  $\psi_{\text{out}} = Af(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r}$  Formalnie mamy Hamiltonian

$$H = H_0 + V(\vec{r})$$

i interesuje nas rozwiązanie o ustalonej energii  $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ , które asymptotycznie ma postać

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi_{\text{in}}\rangle + |\psi_{\text{out}}\rangle = Ae^{ik_0\vec{r}} + Af(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r}$$

, chcemy wyznaczyć  $f(\theta, \varphi)$  (amplituda rozpraszania). Zauważmy, że w związku z tym  $k = k_0$ . Co to nam da? Różniczkowy przekrój czynny (liczba cząstek rozproszonych w danym czasie w jednostkowy kąt bryłowy leżący pod kątem  $\theta, \varphi$  w stosunku do strumienia cząstek padających na jednostkę powierzchni). Strumień prawdopodobieństwa

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\psi^* \nabla \psi)$$

Dla fali padającej:

$$|\vec{j}_{\text{in}}| = |A|^2 \frac{\hbar k}{m}$$

Z kolei radialna składowa strumienia dla fali rozproszonej ( $\nabla f = \partial_r f \hat{e}_r + \frac{1}{r} \partial_\theta f \hat{e}_\theta + \frac{1}{r \sin \theta} \partial_\varphi f \hat{e}_\varphi$ ):

$$j_{\text{out},r} = |A|^2 \frac{\hbar k}{mr^2} |f(\theta, \varphi)|^2$$

Czyli liczba cząstek na jednostkę czasu lecących w kąt bryłowy  $d\Omega$ :  $j_{\text{out},r} r^2 d\Omega$ , a w związku z tym, różniczkowy przekrój czynny na jednostkowy kąt bryłowy:

$$\frac{d\sigma(\theta, \varphi)}{d\Omega} = \frac{j_{\text{out},r} r^2}{j_{\text{in}}} = |f(\theta, \varphi)|^2$$

Musimy więc znaleźć amplitudę rozpraszania. Całkowity przekrój czynny:

$$\sigma = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega}$$

Możemy napisać formalne rozwiązanie w reprezentacji położeniowej:

$$\psi(\vec{r}) = \psi_{\text{in}}(\vec{r}) - \frac{2m}{\hbar^2} \int d\vec{r}' \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}'|} V(\vec{r}') \psi(\vec{r}')$$

Sprawdźmy. Pokażmy najpierw, że

$$-(\Delta^2 + k^2) \frac{e^{ikr}}{4\pi r} = \delta^{(3)}(\vec{r})$$

Dla  $\vec{r} \neq 0$  wiadomo. Całkujemy po kuli o malejącym promieniu:

$$\begin{aligned} & - \int_K \Delta^2 \left( \frac{e^{ikr}}{4\pi r} \right) + \lim_{r \rightarrow 0} \frac{4\pi r^3}{3} k^2 \frac{e^{ikr}}{4\pi r} = \\ & = - \int_S \partial_r \frac{e^{ikr}}{4\pi r} = -ik4\pi r^2 \frac{e^{ikr}}{4\pi r} + 4\pi r^2 \frac{e^{ikr}}{4\pi r^2} = 1 \quad (87) \end{aligned}$$

Czyli spełnia. Mogłoby też być  $e^{-ik|\vec{r}-\vec{r}'|}$ , ale nas interesuje rozwiązanie z falami rozbiegającymi się. Równanie Lippmana-Schwingera. Możemy teraz rozwiązywać iteracyjnie. Podstawiając po prawej stronie za  $\psi$ , najpierw  $\psi_{\text{in}}$ , itd.

## A. Przybliżenie Borna

Rozważmy pierwszy rząd:

$$\psi(\vec{r}) = \psi_{\text{in}}(\vec{r}) - \frac{2m}{\hbar^2} \int d\vec{r}' \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}'|} V(\vec{r}') \psi_{\text{in}}(\vec{r}')$$

Ponadto przyjmujemy, że detektor daleko od obszaru gdzie potencjał rozpraszania znaczący:  $r \gg r'$ . Przybliżmy więc:

$$|\vec{r} - \vec{r}'| \approx r - \frac{\vec{r} \cdot \vec{r}'}{r} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \approx \frac{1}{r}$$

Otrzymujemy:

$$\psi(\vec{r}) = A \left( e^{ik_0\vec{r}} - \frac{e^{ikr}}{r} \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d\vec{r}' V(\vec{r}') e^{i(k_0 - \vec{k})\vec{r}} \right)$$

Dla potencjału sferycznie symetrycznego mamy:  $\vec{k} - \vec{k}_0 = K = 2k_0 \sin \theta/2$ . Wybieramy oś  $z$  w kierunku  $\vec{k} - \vec{k}_0$

$$\begin{aligned} f(\theta) &= \frac{m}{2\pi\hbar^2} 2\pi \int dr' r'^2 V(r') e^{iKr' \cos \theta'} \sin \theta' = \\ &= \frac{2m}{K\hbar^2} \int_0^\infty dr r V(r) \sin Kr \quad (88) \end{aligned}$$

## B. Fale parcjalne

Wiemy, że daleko od centrum potencjału rozwiązanie ma postać:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) &= \sum_{lm} (A_{lm} j_l(r) + B_{lm} n_l(r)) Y_{lm}(\theta, \varphi) \approx \\ & \sum_l \frac{c_l}{kr} \sin(kr - \pi l/2 + \delta_l) P_l(\cos \theta) \end{aligned}$$

gdzie pominieliśmy zależność od  $\varphi$  bo dla potencjałów sferycznie symetrycznych nie istotna. Porównujemy:

$$(e^{ik_0\vec{r}} + \frac{f(\theta)}{r} e^{ikr}) = \sum_l \frac{c_l}{kr} \sin(kr - \pi l/2 + \delta_l) P_l(\cos \theta)$$

Korzystamy z faktu:

$$\begin{aligned} e^{ikr \cos \theta} &= \sum_l (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta) \approx \\ & \sum_l (2l+1) i^l \frac{\sin(kr - l\pi/2)}{kr} P_l(\cos \theta) \quad (89) \end{aligned}$$

Rozwijamy  $f(\theta)$  w wielomiany Legendra

$$f(\theta) = \sum_l a_l e^{-i\pi l/2} P_l(\cos \theta)$$

Przyrównujemy i dostajemy:

$$f(\theta) = \sum_l \frac{1}{k} c_l \sin \delta_l \frac{1}{l} P_l(\cos \theta), c_l = (2l+1) i^l e^{i\delta_l}$$

Czyli

$$f(\theta) = \sum_l \frac{1}{k} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta)$$

Całkowity przekrój czynny:

$$\sigma = 2\pi \int_0^\pi d\theta \sin \theta |f(\theta)|^2 = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \sin^2 \delta_l = \frac{4\pi}{k} |Im[f(0)]|$$

gdzie skorzystaliśmy z  $\int d\theta \sin \theta P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) = 2/(2l+1)\delta_{ll'}$ . (Ostatnie przekształcenie Tw. optyczne). Ogólny wniosek potrzebujemy faz  $\delta_l$  aby mieć wszystko.

### Dekoherencja przez rozpraszanie

Dlaczego nie obserwujemy superpozycji obiektów kwantowych na dużych odległościach?—bo informacja o ich położeniu „wycieka” do otoczenia przez rozpraszanie się cząstek otoczenia na naszym obiekcie (powietrze, promieniowanie tła, neutrino,...). Prosty model dekoherencji. Rozważmy cząstek o dwóch stanach  $|0\rangle$ ,  $|1\rangle$ . W wyniku oddziaływania z otoczeniem zmienia stan otoczenia w zależności od swojego stanu:

$$|0\rangle_S \otimes |0\rangle_E \rightarrow |0\rangle_S \otimes |E_0\rangle \quad (90)$$

$$|1\rangle_S \otimes |1\rangle_E \rightarrow |1\rangle_S \otimes |E_1\rangle \quad (91)$$

Jeśli cząstka jest w stanach  $|0\rangle$ ,  $|1\rangle$  pozostanie w nich. Weźmy jednak ogólną superpozycję  $|\psi\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle$ :

$$|\psi\rangle_S |0\rangle_E \rightarrow c_0|0\rangle|E_0\rangle + c_1|1\rangle|E_1\rangle$$

Jak wygląda zredukowana macierz gęstości:

$$\rho_S = \begin{bmatrix} |c_0|^2 & c_0 c_1^* \langle E_1|E_0\rangle \\ c_0^* c_1 \langle E_0|E_1\rangle & |c_1|^2 \end{bmatrix}$$

Im bardziej ortogonalne stany otoczenia (więcej informacji wypłynęło o tym czy cząstka jest w stanie  $|0\rangle$  czy  $|1\rangle$ ) tym silniej tłumione wyrazy pozadiagonalne odpowiedzialne za koherencje. Widzimy, że oddziaływanie z otoczeniem wyróżnia nam bazę stanów które się nie zmieniają (pointer states) i superpozycje tych stanów w których koherencja pomiędzy pointer-states jest osłabiana poprzez oddziaływanie z otoczeniem.

Niech  $H_{\text{int}}$  będzie hamiltonianem oddziaływania układu z otoczeniem. Jeśli  $|i\rangle$  mają być pointer-states to:

$$e^{-iH_{\text{int}}t} |i\rangle_S \otimes |0\rangle_E = |i\rangle \otimes |E_i\rangle$$

Potencjały związane z oddziaływaniem cząstek zależą od położenia  $V(r_1, r_2)$ , czyli Hamiltonian oddziaływania będzie diagonalny w bazie położeniowej i dlatego stany odporne na dekoherencje to stany zlokalizowane!

Rozważmy model rozpraszania, cząstek padających opisaną funkcją falową  $|\psi_{\text{in}}\rangle_E$  na centrum rozpraszania będącym naszym układem kwantowym  $S$ . Niech  $|\vec{x}\rangle_S$  stan układu o dobrze określonym położeniu. Zakładamy dla uproszczenia, że położenie centrum rozpraszającego nie zmienia się pod wpływem rozproszenia. Ponieważ rozpraszanie zależy do potencjałów zależnych od położenia mamy ogólnie:

$$|\vec{x}\rangle_S \otimes |\psi_{\text{in}}\rangle \rightarrow |\vec{x}\rangle_S |\psi_{\vec{x}}\rangle_E$$

Niech w chwili początkowej stan naszego układu będzie

$$\rho_S(0) \otimes |\psi_{\text{in}}\rangle\langle\psi_{\text{in}}| = \int d^3x d^3x' \rho_S(x, x', 0) |\vec{x}\rangle\langle\vec{x}'| \otimes |\psi_{\text{in}}\rangle\langle\psi_{\text{in}}|$$

W wyniku ewolucji i wykonania częściowego śladu otrzymujemy końcowy stan:

$$\rho_S(T) = \int d^3x d^3x' \rho(\vec{x}, \vec{x}', 0) |\vec{x}\rangle\langle\vec{x}'| \langle\psi_{\vec{x}'}|\psi_{\vec{x}}\rangle$$

Musimy więc obliczyć jak różnie się rozpraszają cząstki jeśli przesuamy centrum rozpraszania—musimy znać  $\langle\psi_{\vec{x}'}|\psi_{\vec{x}}\rangle$ . Musimy scharakteryzować jak dużo cząstek o jakich pędach rozprasza się w danej jednostce czasu itp... to nieco żmudne wyprowadzenie, ale da się powiązać  $\langle\psi_{\vec{x}'}|\psi_{\vec{x}}\rangle$  z amplitudą rozpraszania. Ostateczny wynik, przy założeniu że pojedyncza cząstka unosi mało informacji  $2\pi/k = \lambda \gg |\vec{x} - \vec{x}'|$ :

$$\rho_S(\vec{x}, \vec{x}', T) = \rho_S(\vec{x}, \vec{x}', 0) e^{-\Lambda(\vec{x}-\vec{x}')^2 T}$$

gdzie

$$\Lambda = \int dk \rho(k) v(k) k^2 \sigma_{\text{eff}}(k),$$

gdzie  $k$  długość wektora falowego padających cząstek,  $\int dk \rho(k) = N/V$  - gęstość padających cząstek,  $v(k)$  prędkość cząstek padających,  $\sigma_{\text{eff}}(k) \propto a^2$  - wielkość rzędu całkowitego przekroju czynnego. Przykładowo dla obiektu o średnicy  $a = 10^{-5}m$  mamy

	$\Lambda [m^{-2}s^{-1}]$
kosmiczne promieniowanie tła	$10^{10}$
światło słoneczne na Ziemi	$10^{25}$
powietrze	$10^{40}$
próżnia laboratoryjna	$10^{27}$

Czyli dla superpozycji cząstki na odległości  $10^{-5}$  charakterystyczny czas trwania superpozycji w warunkach pokojowych to  $10^{-30}s$ . Rekord dla eksperymentów interferencyjnych cząstka 810 atomowa (2013).

[Przygotować serię zadań domowych przed egzaminem]

### Cwiczenia

1. Potencjał Yukawy
2. Rozpraszanie na sztywnej sferze o promieniu  $a$ .

## TYDZIEŃ XIV (10.06, 12.06)

### Cząstki identyczne—bozony i fermiony

W mechanice klasycznej możemy śledzić trajektorię konkretnej cząstki i w tym sensie nawet identyczne cząstki są rozróżnialne przez swoją historię. W mechanice kwantowej cząstki identyczne są fundamentalnie nierozróżnialne. W wyniku zderzenia, oddziaływania nie sposób powiedzieć że ten elektron na wyjściu to był ten na wejściu itp.. Stan  $N$  cząstek opujemy funkcją falową:

$$\psi(\vec{r}_1, s_1, \vec{r}_2, s_2, \dots, \vec{r}_N, s_N)$$

gdzie  $s_i$  oznaczają wewnętrzne spinowe stany cząstki. Jeśli cząstki są identyczne zamiana nie może mieć konsekwencji fizycznych. W szczególności:

$$|\psi(\vec{r}_{\pi_1}, s_{\pi_1}, \dots, \vec{r}_{\pi_N}, s_{\pi_N})|^2 = |\psi(\vec{r}_1, s_1, \vec{r}_2, s_2, \dots, \vec{r}_N, s_N)|^2$$

czyli:

$$\psi(\vec{r}_{\pi_1}, s_{\pi_1}, \dots, \vec{r}_{\pi_N}, s_{\pi_N}) = e^{i\alpha} \psi(\vec{r}_1, s_1, \vec{r}_2, s_2, \dots, \vec{r}_N, s_N)$$

No ale wymienienie dwóch cząstek ze sobą miejscami dwa razy musi dać czynnik 1 czyli:

$$e^{i\alpha} = \pm 1$$

Funkcja falowa, albo symetryczna (bozony, spin całkowity) albo antysymetryczna (fermiony, spin połówkowy).

Heurystyczny argument za związkem spin-statystyka. Weźmy dwie cząstki zlokalizowane wokół  $+i$  i  $-x_0$ , z których pierwszej spin skierowany w kierunku  $y$  obrócimy wokół osi  $z$  o  $\pi$ :  $|\Psi\rangle = [U_z(\pi)|\psi_{+x_0}\rangle] \otimes |\psi_{-x_0}\rangle$ . Teraz dokonujemy obrotu całej przestrzeni o  $\pi$  i mamy:  $|\Psi'\rangle = [U_z(2\pi)|\psi_{-x_0}\rangle][U_z(\pi)|\psi_{+x_0}\rangle] = \pm |\psi_{-x_0}\rangle \otimes [U_z(\pi)|\psi_{+x_0}\rangle]$ . Operacja obrotu jest równoważna zamianie cząstek, czyli zamiana cząstek powinna nam dawać znak  $\pm 1$  w zależności czy spin połówkowy czy całkowity.

Ważne obiekty złożone w sytuacjach gdy nie wchodzimy w ich wewnętrzną strukturę zachowują się tak jak mówi ich całkowity spin, np.  ${}^3\text{He}$  jest fermionem a  ${}^4\text{He}$  bozonem.

### Fermiony

Rozważmy dwie cząstki, z których każda może być w dwóch różnych stanach  $|1\rangle, |2\rangle$ . Potencjalnie przestrzeń 4-ro wymiarowa, ale antysymetryczny tylko jeden stan:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle \otimes |2\rangle - |2\rangle \otimes |1\rangle)$$

W szczególności dwa fermiony nie mogą być w tym samym stanie—zasada Pauliego. Ogólnie:  $N$ -fermionów z których każdy w  $d$  wymiarowej przestrzeni, mamy:  $\binom{d}{N}$  stanów antysymetrycznych, i musi być  $d \geq N$ . Funkcja falowa  $N$  fermionów obsadzających  $N$  stanów  $|1\rangle, \dots, |N\rangle$  ma postać:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\pi} (-1)^{\text{sgn}(\pi)} |\pi(1)\rangle \otimes \dots \otimes |\pi(N)\rangle$$

w reprezentacji położeniowej piszemy:

$$\psi(x_1, \dots, x_N) = \begin{vmatrix} \phi_1(x_1) & \dots & \phi_N(x_1) \\ \vdots & & \vdots \\ \phi_1(x_N) & \dots & \phi_N(x_N) \end{vmatrix}$$

wyznacznik Słatera.

Rozważmy atom dwuelektronowy Hel i potraktujmy oddziaływanie pomiędzy elektronami jako zaburzenie (pomijamy też spinorbita i oddziaływanie spinów między sobą):

$$H = \frac{\vec{p}_1^2}{2m} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m} - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

Hamiltonian komutuje z operatorem całkowitego spinu  $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$ , czyli możemy zawsze poszukiwać stanów w postaci:

$$|\Psi\rangle = |\psi\rangle_{12} \otimes |s, m_s\rangle$$

gdzie  $|\psi\rangle_{12}$  stan przestrzenny dwóch elektronów,  $|s, m_s\rangle$  stan spinowy własny  $S^2$  i  $S_z$ ,  $s = 0, 1$ ,  $m_s = -s, \dots, s$  (dodawanie dwóch spinów  $1/2$ ). Ale wiemy, że całkowity stan musi być antysymetryczny. Jeśli rozważamy stan podstawowy, dwa elektrony w stanie  $1s(n=1, l=0, m=0)$  to stan spinowy musi być antysymetryczny:

$$|\Psi\rangle_{(1s)^2=^1S_0} = |100\rangle \otimes |100\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} \otimes |s=0, m=0\rangle$$

Rozważmy teraz stan kiedy jeden z elektronów jest w stanie  $2s(n=2, l=0, m=0)$ , wtedy jeśli stan spinowy trypletowy  $s=1$  to przestrzenna funkcja antysymetryczna a jeśli singletowy  $s=0$  to funkcja przestrzenna symetryczna:

$$|\Psi\rangle_{(1s)(2s), ^3S_1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|100\rangle|200\rangle - |200\rangle|100\rangle) \otimes |s=1, m=0, \pm 1\rangle \quad (92)$$

$$|\Psi\rangle_{(1s)(2s), ^1S_0} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|100\rangle|200\rangle + |200\rangle|100\rangle) \otimes |s=0, m=0\rangle \quad (93)$$

Jakie są tego konsekwencje. Liczymy poprawkę do energii związaną z wzajemnym odpychaniem się elektronów

$$\Delta E =$$

$$\int d^3r_1 d^3r_2 \frac{1}{2} |\psi_{100}(\vec{r}_1)\psi_{200}(\vec{r}_2) \pm \psi_{200}(\vec{r}_1)\psi_{100}(\vec{r}_2)|^2 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = \int d^3r_1 d^3r_2 |\psi_{100}(\vec{r}_1)|^2 |\psi_{200}(\vec{r}_2)|^2 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \pm \int d^3r_1 d^3r_2 \psi_{100}(\vec{r}_1)\psi_{200}(\vec{r}_2) \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \psi_{100}^*(\vec{r}_2)\psi_{200}^*(\vec{r}_1) \quad (94)$$

Ostatni człon nosi nazwę energii wymiany. Jest dodatni. Elektrony w przestrzennym stanie symetrycznym są bliżej siebie i energia odpychania większa mamy rozsuniecie energii między tzw. ortohelem ( $s=1$ , niższa energia) i parahelem ( $s=0$ , wyższa energia) - rozsuniecie rzędu eV czyli istotne.

## Bozony

Stanów symetrycznych  $N$  cząstek w  $d$  poziomach jest  $\binom{N+d-1}{d-1}$ . W szczególności wiele bozonów może zajmować ten sam stan (BEC)—kondensat Bosego-Einsteina wtedy gdy duża liczba (rzędu całkowitej liczby atomów  $N$ ) obsadza jeden stan kwantowy (w praktyce w eksperymentach liczba atomów w BEC rzędu  $N = 10^5 - 10^{10}$ , temperatury rzędu  $100nK - 10\mu K$ ) Dzięki temu, że gazy są rzadkie nie dochodzi do przemiany do fazy stałej. Intuicja rozważmy dwa bozony  $N = 2$  mogące obsadzać dwa stany. Jeśli myślelibyśmy, że są cząstkami rozróżnialnymi mieliśmy 4 stany, a prawdopodobieństwo, że oba bozony w tym samym stanie byłoby  $1/2$ . Jeśli mamy bozony to mamy 3 stany a prawdopodobieństwo, że oba bozony w tym samym stanie jest  $2/3$ . Ten efekt będzie się stawał się jeszcze wyraźniejszy dla większych  $N$ . Wygodna notacja obsadzeniowa:

$$|n_1, \dots, n_d\rangle = \sqrt{\frac{n_1! \dots n_d!}{N!}} \sum_{\pi} \pi[|1\rangle^{\otimes n_1} \otimes \dots \otimes |d\rangle^{\otimes n_d}]$$

gdzie  $N = \sum_i n_i$  i sumujemy tylko po nietrywialnych permutacjach (czyli takich co zmieniają cząstki o innych stanach).

*Przykład* Interferencja dwu-fotonowa. Rozważmy płytkę światłodzielną 50%, na którą z dwóch portów wejściowych padają dwa fotony. Stan początkowy fotonów:

$$|\psi_{in}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle \otimes |2\rangle + |2\rangle \otimes |1\rangle)$$

Każdy foton poddawany jest transformacji zadanej przez płytkę

$$|1\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle) \quad (95)$$

$$|2\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |2\rangle) \quad (96)$$

Stan końcowy będzie:

$$|\psi_{out}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle \otimes |1\rangle + |2\rangle \otimes |2\rangle)$$

Fotony zawsze idą razem (bozonowe wzmocnienie!). Efekt Hong-Ou-Mandla.

## Relatywistyka (Klein-Gordon, Dirac -> Równanie Pauliego)

[Egzamin 19 czerwca]

## Ćwiczenia

1. Rozważmy  $N$  spinów  $1/2$  w jednowymiarowej pułapce harmoniczej. Jaka jest energia stanu podstawowego. Rozważmy teraz  $N = 2$  i dodatkowo potraktujmy jako zaburzenie kontaktowe oddziaływanie między elektronami  $V = \lambda\delta(x - x')$ . Jaki będzie stan podstawowy i jaka będzie jego energia?  $\psi_0(x) = (m\omega/\pi\hbar)^{1/4} e^{-m\omega x^2/2\hbar}$ ,  $\psi_1(x) = (m\omega/4\pi\hbar)^{1/4} 2\sqrt{m\omega/\hbar} x e^{-m\omega x^2/2\hbar}$
2. Napisać bazę stanów stanów 3 bozonów mogących obsadzać 3 poziomy. Przyjmując, że wszystkie stany są równoprawdopodobne, jakie jest prawdopodobieństwo, że wszystkie 3 bozony będą w tym samym stanie (3/8). A jakie by było dla cząstek rozróżnialnych? (3/27)