

Uniwersytet Warszawski
Wydział Fizyki

ZBIÓR ZADAŃ Z MECHANIKI KWANTOWEJ

Autorzy:

JAKUB MIK
KAROL ŁUKANOWSKI
ŁUKASZ ŁYSAKOWSKI
PRZEMYSŁAW WŁADEK
AGATA WOJCIECHOWSKA

Opiekun Projektu:
dr hab. Katarzyna Krajewska

O projekcie

Niniejszy *Zbiór zadań z mechaniki kwantowej* powstał w ramach projektu studenckiego na Wydziale Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego. Jego podstawą stały się zadania domowe do wykładu z mechaniki kwantowej, prowadzonego w roku akademickim 2018/2019 przez dr hab. Katarzynę Krajewską.

Celem projektu było rozwiązanie zadań oraz szczegółowe zaprezentowanie tych rozwiązań w zakresie przewidzianym dla standardowego kursu mechaniki kwantowej. Znaleźć tu można między innymi zadania w poszczególnych blokach tematycznych:

- Seria 1: elementy rachunku prawdopodobieństwa, delta Diraca, transformata Fouriera, algebra liniowa;
- Seria 2: unormowanie funkcji falowej, wartości oczekiwane pomiaru położenia i pędu oraz ich dyspersje, zasada nieoznaczoności Heisenberga dla położenia i pędu;
- Seria 3: wartości oczekiwane pomiaru położenia i pędu, prąd prawdopodobieństwa, przechodzenie cząstki przez stopnie potencjału, współczynniki transmisji i odbicia;
- Seria 4: stany związane, cząstka w nieskończonej studni potencjału oraz w potencjale typu δ , ewolucja czasowa funkcji falowej, rozkład prawdopodobieństwa pomiaru energii;
- Seria 5: postulaty mechaniki kwantowej, twierdzenie Ehrenfesta, zasada nieoznaczoności Heisenberga, stany polaryzacyjne światła;
- Seria 6: związki komutacyjne operatorów, oscylator harmoniczny, stany koherentne;
- Seria 7: eksperyment Sterna-Gerlacha, macierze Pauliego;
- Seria 8: niezależny od czasu rachunek zaburzeń (z degeneracją i bez degeneracji), metoda wariacyjna;
- Seria 9: orbitalny moment pędu i rozkład prawdopodobieństwa jego pomiaru, sztywny rotator;
- Seria 10: atom wodoru, twierdzenie Hellmanna-Feynmana, rachunek zaburzeń i metoda wariacyjna w zastosowaniu do atomu wodoru, cząstka w studni sferycznie symetrycznej;
- Seria 11: spin $1/2$, cząstka o spinie $1/2$ w polu magnetycznym, dodawanie momentów pędu, współczynniki Clebscha-Gordana;
- Seria 12: cząstka naładowana w polu elektromagnetycznym, rachunek zaburzeń zależny od czasu, przybliżenie Borna.

1 Seria

Zadanie 1

Wskazówka w zepsutym prędkościomierzu porusza się swobodnie tak, że wprawiona w ruch równie prawdopodobnie zatrzymuje się dla dowolnego kąta θ pomiędzy 0 a π .

- (a) Wyznaczyć rozkład gęstości prawdopodobieństwa pomiaru położenia wskazówki $\rho(\theta)$.
(b) Obliczyć wartość oczekiwaną oraz średnie odchylenie kwadratowe pomiaru położenia wskazówki.
(c) Obliczyć średnie: $\langle \sin \theta \rangle$, $\langle \cos \theta \rangle$ oraz $\langle \cos^2 \theta \rangle$.

Rozwiązanie:

(a) Ponieważ wskazówka prędkościomierza zatrzymuje się z jednakowym prawdopodobieństwem na dowolnym kącie θ z przedziału $[0, \pi]$, to funkcja rozkładu gęstości prawdopodobieństwa $\rho(\theta)$ musi być stała, tzn. $\rho(\theta) = A = \text{const}$. Wiemy ponadto, że prawdopodobieństwo zatrzymania się wskazówki gdziekolwiek musi wynosić 1. Oznacza to, że całka z gęstości prawdopodobieństwa $\rho(\theta)$ obliczona w granicach $[0, \pi]$ równa się 1,

$$1 = \int_0^\pi \rho(\theta) d\theta = A \int_0^\pi d\theta = A\pi. \quad (1.1)$$

Stąd wyznaczamy stałą $A = 1/\pi$ i ostatecznie

$$\rho(\theta) = \frac{1}{\pi} \quad \text{dla } \theta \in [0, \pi]. \quad (1.2)$$

(b) Wartość oczekiwaną $\langle \theta \rangle$ obliczamy z definicji

$$\langle \theta \rangle = \int_0^\pi \rho(\theta) \theta d\theta = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \theta d\theta = \left[\frac{\theta^2}{2\pi} \right]_0^\pi = \frac{\pi}{2}. \quad (1.3)$$

Podobnie ma się sytuacja ze średnią kwadratu θ

$$\langle \theta^2 \rangle = \int_0^\pi \rho(\theta) \theta^2 d\theta = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \theta^2 d\theta = \left[\frac{\theta^3}{3\pi} \right]_0^\pi = \frac{\pi^2}{3}. \quad (1.4)$$

Mając $\langle \theta \rangle$ i $\langle \theta^2 \rangle$, łatwo możemy obliczyć wariancję

$$\sigma_\theta^2 = \langle \theta^2 \rangle - \langle \theta \rangle^2 = \frac{1}{3}\pi^2 - \frac{1}{4}\pi^2 = \frac{1}{12}\pi^2. \quad (1.5)$$

Biorąc pierwiastek kwadratowy z wariancji, otrzymujemy szukane przez nas odchylenie standardowe pomiaru położenia wskazówki prędkościomierza,

$$\sigma_\theta = \frac{\pi}{2\sqrt{3}}. \quad (1.6)$$

(c) Z definicji, przy zadanej gęstości prawdopodobieństwa $\rho(\theta)$, wielkość $\langle f(\theta) \rangle$ zdefiniowana jest wzorem

$$\langle f(\theta) \rangle = \int_0^\pi \rho(\theta) f(\theta) d\theta. \quad (1.7)$$

Stąd, wyliczamy po kolei wszystkie średnie w punkcie (c),

$$\langle \sin \theta \rangle = \int_0^\pi \rho(\theta) \sin \theta d\theta = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \sin \theta d\theta = \frac{1}{\pi} [-\cos \theta]_0^\pi = \frac{1}{\pi} (-\cos \pi - (-\cos 0)) = \frac{2}{\pi}, \quad (1.8)$$

$$\langle \cos \theta \rangle = \int_0^\pi \rho(\theta) \cos \theta d\theta = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \cos \theta d\theta = \frac{1}{\pi} [\sin \theta]_0^\pi = \frac{1}{\pi} (\sin \pi - \sin 0) = 0, \quad (1.9)$$

$$\langle \cos^2 \theta \rangle = \int_0^\pi \rho(\theta) \cos^2 \theta d\theta = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \cos^2 \theta d\theta = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \frac{1 + \cos(2\theta)}{2} d\theta = \frac{1}{\pi} \left[\frac{\theta}{2} + \frac{\sin(2\theta)}{4} \right]_0^\pi = \frac{1}{2}. \quad (1.10)$$

Zadanie 2

Dany jest rozkład gęstości prawdopodobieństwa pomiaru dwóch zmiennych losowych X oraz Y ,

$$\rho(x, y) = \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{x^2+y^2}{2}}. \quad (1.11)$$

- (a) Wyznaczyć rozkłady brzegowe. Czy zmienne X, Y są niezależne?
(b) Obliczyć $P((X, Y) \in A)$, gdzie $A = \{(x, y) : x^2 + y^2 < 1\}$.

Rozwiązanie:

(a) Dla zadanej gęstości prawdopodobieństwa dwóch zmiennych losowych (1.11), rozkład brzegowy zmiennej losowej X wyznaczamy następująco

$$\rho_X(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x, y) dy = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2+y^2}{2}} dy = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}}, \quad (1.12)$$

gdzie skorzystaliśmy z wyniku na całkę Gaussowską,

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ay^2} dy = \sqrt{\frac{\pi}{a}}. \quad (1.13)$$

Przeprowadzając analogiczne rachunki dla $\rho_Y(y)$, dostajemy

$$\rho_Y(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{y^2}{2}}. \quad (1.14)$$

Z definicji dwie zmienne losowe X i Y są niezależne, o ile zachodzi równość

$$\rho_X(x)\rho_Y(y) = \rho(x, y). \quad (1.15)$$

Po podstawieniu tutaj obliczonych rozkładów brzegowych (1.12) i (1.14), okazuje się, że ta równość jest spełniona. Zatem zmienne losowe X i Y są niezależne.

(b) Rozważmy dysk A zdefiniowany tak jak poniżej

$$A = \{(x, y) : x^2 + y^2 < 1\}. \quad (1.16)$$

Znając gęstość prawdopodobieństwa pomiaru dwóch zmiennych losowych $\rho(x, y)$, prawdopodobieństwo tego, że ich pomiar da wynik w obszarze A wynosi

$$P((X, Y) \in A) = \int_{(x,y) \in A} \rho(x, y) = \frac{1}{2\pi} \int_{(x,y) \in A} e^{-\frac{x^2+y^2}{2}} dx dy. \quad (1.17)$$

Całkę tę najłatwiej obliczyć we współrzędnych biegunowych, więc

$$P((X, Y) \in A) = \frac{1}{2\pi} \int_0^1 r e^{-\frac{r^2}{2}} dr \int_0^{2\pi} d\varphi = \int_0^1 r e^{-\frac{r^2}{2}} dr, \quad (1.18)$$

gdzie po podstawieniu nowej zmiennej $u = r^2/2$, otrzymujemy

$$P((X, Y) \in A) = \int_0^{\frac{1}{2}} e^{-u} du = [-e^{-u}]_0^{\frac{1}{2}} = \frac{e - \sqrt{e}}{e}. \quad (1.19)$$

Zadanie 3

Sprawdzić bezpośrednim rachunkiem, czy rodzina funkcji

$$\delta_\epsilon(x) = \begin{cases} \frac{2}{\pi\epsilon^2} \sqrt{\epsilon^2 - x^2} & \text{gdy } -\epsilon \leq x \leq \epsilon \\ 0 & \text{gdy } x < -\epsilon \text{ oraz } x > \epsilon, \end{cases} \quad (1.20)$$

jest dobrym modelem delty Diraca dla $\epsilon \rightarrow 0$.

Rozwiązanie:

Aby rodzinę funkcji (1.20) można było uznać za dobry model delty Diraca w granicy, gdy $\epsilon \rightarrow 0$ muszą być spełnione warunki:

1. $\int_{-\infty}^{\infty} \delta_{\epsilon}(x) dx = 1$,
2. $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta_{\epsilon}(x) dx = f(0)$ dla dowolnej funkcji próbnej $f(x)$.

Ad. 1. Wykonujemy całkę

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta_{\epsilon}(x) dx = \frac{2}{\pi \epsilon^2} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \sqrt{\epsilon^2 - x^2} dx = \frac{4}{\pi \epsilon} \int_0^{\epsilon} \sqrt{\epsilon^2 - x^2} dx, \quad (1.21)$$

gdzie w ostatnim kroku skorzystaliśmy z faktu, że funkcja podcałkowa jest funkcją parzystą, a więc całka od $-\epsilon$ do ϵ równa jest podwojonej całce od 0 do ϵ . Następnie, dokonujemy zamiany zmiennych $x = \epsilon \cos t$, przy której t zmienia się od $\pi/2$ do 0. Ponadto, w tych granicach zmienności t mamy $\sqrt{\epsilon^2 - x^2} = \epsilon |\sin t| = \epsilon \sin t$ oraz $dx = -\epsilon \sin t dt$. Podstawiając to wszystko do całki (1.21), otrzymujemy

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \delta_{\epsilon}(x) dx &= -\frac{4}{\pi} \int_{\pi/2}^0 \sin^2 t dt = \frac{4}{\pi} \int_0^{\pi/2} \sin^2 t dt = \frac{4}{\pi} \int_0^{\pi/2} \frac{1 - \cos(2t)}{2} dt = \\ &= \frac{4}{\pi} \left[\frac{t}{2} - \frac{\sin(2t)}{4} \right]_0^{\pi/2} = \frac{4}{\pi} \cdot \frac{\pi}{4} = 1. \end{aligned} \quad (1.22)$$

Oznacza to, że zadany model funkcji delta spełnia warunek 1.

Ad. 2. Dla dowolnej funkcji próbnej $f(x)$ obliczamy

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta_{\epsilon}(x) dx = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{2}{\pi \epsilon^2} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} f(x) \sqrt{\epsilon^2 - x^2} dx. \quad (1.23)$$

Podstawiając tu $x = \epsilon t$, skąd wynika, że t zmienia się w granicach od -1 do 1 oraz $dx = \epsilon dt$, dostajemy

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta_{\epsilon}(x) dx = \frac{2}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-1}^1 f(\epsilon t) \sqrt{1 - t^2} dt = \frac{2}{\pi} f(0) \int_{-1}^1 \sqrt{1 - t^2} dt. \quad (1.24)$$

Tutaj, przeszliśmy z granicą do $\epsilon \rightarrow 0$. W dalszym ciągu pozostaje wykonanie całki, którą zamieniamy na podwojoną całkę od 0 do 1,

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta_{\epsilon}(x) dx = \frac{4}{\pi} f(0) \int_0^1 \sqrt{1 - t^2} dt. \quad (1.25)$$

Dokonując zamiany zmiennych $t = \cos u$, gdzie u zmienia się od $\pi/2$ do 0 oraz $dt = -\sin u du$, dostajemy

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta_{\epsilon}(x) dx = -\frac{4}{\pi} f(0) \int_{\pi/2}^0 \sin^2 u du = \frac{4}{\pi} f(0) \int_0^{\pi/2} \sin^2 u du = \frac{4}{\pi} \cdot \frac{\pi}{4} f(0) = f(0), \quad (1.26)$$

gdzie skorzystaliśmy z wyniku całkowania w Ad. 1. Tym samym pokazaliśmy, że rodzina funkcji (1.20) spełnia również warunek 2. Na podstawie przeprowadzonych rachunków stwierdzamy zatem, że rodzina funkcji (1.20) jest dobrym modelem funkcji delta Diraca.

Zadanie 4

Niech $\tilde{f}(k)$ oraz $\tilde{g}(k)$ będą transformatami Fouriera funkcji $f(x)$ oraz $g(x)$. Udowodnić następujące własności:

- (a) Jeśli $g(x) = f(ax)$, to $\tilde{g}(k) = \frac{1}{|a|} \tilde{f}\left(\frac{k}{a}\right)$,
- (b) $\int f(x) g(x) e^{-ikx} dx = \int \tilde{f}(k') \tilde{g}(k - k') dk'$, gdzie całka po prawej stronie definiuje tak zwany splot funkcji, w tym przypadku splot transformat Fouriera $(\tilde{f} \star \tilde{g})(k)$.

Rozwiązanie:

Transformatą Furiera nazywamy odwzorowanie liniowe i ciągłe $\mathcal{F} : f(x) \mapsto \tilde{f}(k)$ takie, że

$$\tilde{f}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} f(x) dx. \quad (1.27)$$

(a) Weźmy pod uwagę funkcję $g(x) = f(ax)$ i obliczmy jej transformatę Fouriera,

$$\tilde{g}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} g(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} f(ax) dx. \quad (1.28)$$

Niech nowa zmienna $t = ax$, skąd wynika, że $dt = a dx$. Dla $a > 0$ całkujemy w granicach od $-\infty$ do ∞ , a zatem całka (1.28) przybiera postać

$$\tilde{g}(k) = \frac{1}{a} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{ikt}{a}} f(t) dt = \frac{1}{a} \tilde{f}\left(\frac{k}{a}\right). \quad (1.29)$$

Z kolei dla $a < 0$, przy tym samym podstawieniu, musimy całkować od ∞ do $-\infty$, co daje w wyniku

$$\tilde{g}(k) = \frac{1}{a} \int_{\infty}^{-\infty} e^{-\frac{ikt}{a}} f(t) dt = -\frac{1}{a} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{ikt}{a}} f(t) dt = -\frac{1}{a} \tilde{f}\left(\frac{k}{a}\right). \quad (1.30)$$

Ostatecznie, dla dowolnego parametru $a \in \mathbb{R}$, dostajemy

$$\tilde{g}(k) = \frac{1}{|a|} \tilde{f}\left(\frac{k}{a}\right), \quad (1.31)$$

co kończy dowód.

(b) Weźmy pod uwagę wyrażenie

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) g(x) e^{-ikx} dx, \quad (1.32)$$

gdzie funkcje $f(x)$ oraz $g(x)$ zapiszemy za pomocą odwrotnej transformaty Fouriera,

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{\sqrt{2\pi}} \tilde{f}(k') e^{ik'x}, \quad (1.33)$$

$$g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk''}{\sqrt{2\pi}} \tilde{g}(k'') e^{ik''x}. \quad (1.34)$$

Wstawiając powyższe wyrażenia do (1.32), dostajemy

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) g(x) e^{-ikx} dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{\sqrt{2\pi}} \tilde{f}(k') \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk''}{\sqrt{2\pi}} \tilde{g}(k'') \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{i(k'+k''-k)x}. \quad (1.35)$$

W całce po zmiennej x rozpoznajemy przedstawienie całkowe funkcji delta Diraca,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{i(k'+k''-k)x} = 2\pi \delta(k' + k'' - k), \quad (1.36)$$

skąd wynika, że

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) g(x) e^{-ikx} dx = \int_{-\infty}^{\infty} dk' \tilde{f}(k') \int_{-\infty}^{\infty} dk'' \tilde{g}(k'') \delta(k'' + k' - k) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(k') \tilde{g}(k - k') dk'. \quad (1.37)$$

To dowodzi równości w punkcie (b).

Zadanie 5

W trójwymiarowej przestrzeni wektorowej z bazą ortonormalną $\{|v_1\rangle, |v_2\rangle, |v_3\rangle\}$, działa operator:

$$\begin{aligned} \hat{A} = & 2|v_1\rangle\langle v_1| - i|v_2\rangle\langle v_1| + |v_3\rangle\langle v_1| + i|v_1\rangle\langle v_2| + 2|v_2\rangle\langle v_2| \\ & - i|v_3\rangle\langle v_2| + |v_1\rangle\langle v_3| + i|v_2\rangle\langle v_3| + 2|v_3\rangle\langle v_3|. \end{aligned} \quad (1.38)$$

(a) Znaleźć macierz operatora $\hat{A}$ w zadanej bazie. Czy jest to operator samosprzężony?

(b) Obliczyć wartości własne $\hat{A}$.

(c) Wyznaczyć trzy ortonormalne wektory własne $\hat{A}$ oraz odpowiadające im operatory rzutowe.

(d) Sprawdzić bezpośrednim rachunkiem rozkład jedyńki oraz rozkład spektralny operatora $\hat{A}$.

Rozwiązanie:

(a) Aby wyznaczyć macierz operatora $\hat{A}$ w bazie $|v_i\rangle$, obliczamy odpowiednie wyrazy macierzowe A_{ij} korzystając ze wzoru

$$A_{ij} = \langle v_i | \hat{A} | v_j \rangle. \quad (1.39)$$

W przypadku operatora (1.38) otrzymujemy

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 2 & i & 1 \\ -i & 2 & i \\ 1 & -i & 2 \end{pmatrix}. \quad (1.40)$$

Sprzężenie hermitowskie obliczamy za pomocą wzoru $\hat{A}^\dagger = (\hat{A}^T)^*$, co oznacza, że macierz (1.40) należy transponować i sprzężać w sposób zespolony. Łatwo się przekonać, że w przypadku macierzy (1.40) dostajemy $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$. To z kolei oznacza, że operator $\hat{A}$ jest samosprzężony.

(b) Równanie własne dla macierzy (1.40) ma postać

$$(\hat{A} - \lambda \hat{1}) |v\rangle = 0, \quad (1.41)$$

gdzie λ jest wartością własną, $\hat{1}$ jest macierzą jednostkową, zaś $|v\rangle$ to odpowiadający λ wektor własny. Aby to równanie było spełnione, musi zachodzić warunek,

$$\det(\hat{A} - \lambda \hat{1}) = 0, \quad (1.42)$$

tzn. że zerować musi się wielomian charakterystyczny macierzy $\hat{A}$. W naszym przypadku,

$$\det \begin{pmatrix} 2 - \lambda & i & 1 \\ -i & 2 - \lambda & i \\ 1 & -i & 2 - \lambda \end{pmatrix} = \lambda(\lambda - 3)^2 = 0. \quad (1.43)$$

Stąd otrzymujemy następujące wartości własne: $\lambda_1 = 0$, która jest wartością niezdegenerowaną i podwójnie zdegenerowaną wartość własną $\lambda_{2,3} = 3$.

(c) Wektory własne wyznaczamy z równania (1.41), wstawiając doń kolejne wartości własne. Niech wektor $|v\rangle$ ma współrzędne a, b, c , których poszukujemy. Dla $\lambda_1 = 0$, równanie (1.41) przyjmuje postać

$$\begin{pmatrix} 2 & i & 1 \\ -i & 2 & i \\ 1 & -i & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (1.44)$$

Dokonując redukcji wierszowej występującej tu macierzy, sprowadzamy to równanie do postaci

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ -i & 2 & i \\ 0 & -i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (1.45)$$

Jest to układ trzech równań na trzy niewiadome a, b, c ,

$$\begin{cases} a + c = 0 \\ -ia + 2b + ic = 0 \\ -ib + c = 0. \end{cases} \quad (1.46)$$

Tylko dwa z tych równań są liniowo niezależne i pozwalają wyznaczyć, że $a = -c$ oraz $b = -ic$. Zatem, z dokładnością do stałej multiplikatywnej c , wektor własny należący do wartości własnej $\lambda_1 = 0$ ma postać

$$|v_1\rangle = \begin{pmatrix} -1 \\ -i \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (1.47)$$

Dla $\lambda_{2,3} = 3$ równanie (1.41) przyjmuje postać

$$\begin{pmatrix} -1 & i & 1 \\ -i & -1 & i \\ 1 & -i & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (1.48)$$

gdzie, podobnie, szukamy nieznanymi parametrów a, b, c . W przypadku tej macierzy łatwo zauważyć, że pierwszy i trzeci jej rząd są liniowo zależne, co oznacza, że w rzeczywistości dysponujemy układem dwóch równań na trzy niewiadome,

$$\begin{cases} -ia - b + ic = 0, \\ a - ib - c = 0. \end{cases} \quad (1.49)$$

Rozwiązaniem tego układu jest zależność $b = -ia + ic$, co oznacza, że

$$\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ -ia + ic \\ c \end{pmatrix} = a \begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix} + c \begin{pmatrix} 0 \\ i \\ 1 \end{pmatrix} = a |v_2\rangle + b |v_3\rangle. \quad (1.50)$$

Równanie to definiuje dwa nieunormowane wektory własne $|v_2\rangle$ oraz $|v_3\rangle$ należące do dwukrotnie zdegenerowanej wartości własnej $\lambda_{2,3} = 3$. Łatwo sprawdzić, że wektory te nie są ortogonalne, bo $\langle v_2 | v_3 \rangle = -1$. Z kolei oba wektory $|v_2\rangle$ i $|v_3\rangle$ są ortogonalne do $|v_1\rangle$, który należy do innej wartości własnej. Dla naszych dalszych celów, chcielibyśmy skonstruować zbiór ortogonalnych wektorów własnych macierzy $\hat{A}$. Użyjemy do tego procedury Grama-Schmidta.

Niech pierwszym wektorem nowej bazy ortogonalnej, którą będziemy oznaczać jako $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$, będzie wektor $|v_1\rangle$ a drugim $|v_2\rangle$. Możemy to zapisać jako

$$|u_1\rangle = |v_1\rangle \quad \text{oraz} \quad |u_2\rangle = |v_2\rangle. \quad (1.51)$$

Jak wspomnieliśmy powyżej, wektory te są ortogonalne. Ostatni wektor bazy wyznaczamy ze wzoru

$$\begin{aligned} |u_3\rangle &= |v_3\rangle - \frac{\langle u_2 | v_3 \rangle}{\langle u_2 | u_2 \rangle} |u_2\rangle = |v_3\rangle - \frac{(1, i, 0) \begin{pmatrix} 0 \\ i \\ 1 \end{pmatrix}}{(1, i, 0) \begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix}} |u_2\rangle = |v_3\rangle + \frac{1}{2} |u_2\rangle \\ &= \begin{pmatrix} 0 \\ i \\ 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 \\ i/2 \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (1.52)$$

Ostatecznie otrzymujemy trzy ortogonalne wektory własne, które po unormowaniu przyjmują postać

$$|u_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} -1 \\ -i \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |u_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |u_3\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} \begin{pmatrix} 1/2 \\ i/2 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (1.53)$$

Teraz zajmijmy się wyznaczeniem operatorów rzutowych. Dla unormowanego wektora $|u\rangle$, operator rzutujący na jego kierunek wyraża się wzorem $\hat{P}_u = |u\rangle \langle u|$. W naszym przypadku,

$$\hat{P}_{u_1} = |u_1\rangle \langle u_1| = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} -1 \\ -i \\ 1 \end{pmatrix} (-1, i, 1) = \begin{pmatrix} 1 & -i & -1 \\ i & 1 & -i \\ -1 & i & 1 \end{pmatrix}, \quad (1.54)$$

$$\hat{P}_{u_2} = |u_2\rangle \langle u_2| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix} (1, i, 0) = \begin{pmatrix} 1 & i & 0 \\ -i & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.55)$$

$$\hat{P}_{u_3} = |u_3\rangle \langle u_3| = \frac{2}{3} \begin{pmatrix} 1/2 \\ i/2 \\ 1 \end{pmatrix} (1/2, -i/2, 1) = \begin{pmatrix} 1/4 & -i/4 & 1/4 \\ i/4 & 1/4 & i/2 \\ 1/2 & -i/2 & 1 \end{pmatrix}. \quad (1.56)$$

(d) Przez rozkład jedyńki rozumiemy, że spełniona jest tożsamość,

$$\hat{P}_{u_1} + \hat{P}_{u_2} + \hat{P}_{u_3} = \hat{1}. \quad (1.57)$$

Podstawiając do lewej strony tego wyrażenia wyznaczone w punkcie (c) macierze, dostajemy

$$\begin{aligned}\hat{P}_{u_1} + \hat{P}_{u_2} + \hat{P}_{u_3} &= \begin{pmatrix} 1/3 & -i/3 & -1/3 \\ i/3 & 1/3 & -i/3 \\ -1/3 & i/3 & 1/3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/2 & i/2 & 0 \\ -i/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 2/12 & -2i/12 & 2/6 \\ 2i/12 & 2/12 & 2i/6 \\ 2/6 & -2i/2 & 2/3 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1/3 + 1/2 + 2/12 & -i/3 + i/2 - 2i/12 & -1/3 + 1/3 \\ i/3 - i/2 + 2i/12 & 1/3 + 1/2 + 2/12 & -i/3 + i/3 \\ -1/3 + 1/3 & i/3 - i/3 & 1/3 + 2/3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \hat{1},\end{aligned}\quad (1.58)$$

co dowodzi prawdziwości (1.57).

Rozkład spektralny operatora $\hat{A}$ to w naszym przypadku następująca równość

$$\lambda_1 \hat{P}_{u_1} + \lambda_{2,3}(\hat{P}_{u_2} + \hat{P}_{u_3}) = \hat{A}. \quad (1.59)$$

Podstawiając do lewej strony tej równości wartości własne macierzy $\hat{A}$ i wyznaczone wcześniej operatory rzutowe, dostajemy

$$\begin{aligned}\lambda_1 \hat{P}_{u_1} + \lambda_{2,3}(\hat{P}_{u_2} + \hat{P}_{u_3}) &= 0 \begin{pmatrix} 1/3 & -i/3 & -1/3 \\ i/3 & 1/3 & -i/3 \\ -1/3 & i/3 & 1/3 \end{pmatrix} + 3 \begin{pmatrix} 1/2 + 1/6 & i/2 - i/6 & 1/3 \\ -i/2 + i/6 & 1/2 + 1/6 & i/3 \\ 1/3 & -i/3 & 2/3 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 2 & i & 1 \\ -i & 2 & i \\ 1 & -i & 2 \end{pmatrix} = \hat{A},\end{aligned}\quad (1.60)$$

co dowodzi wzoru (1.59).

2 Seria

Zadanie 1

W stanie kwantowym opisanym funkcją falową $\psi(x)$, wartości oczekiwane pomiaru położenia i pędu wynoszą odpowiednio $\langle x \rangle$ i $\langle p \rangle$. Pokazać, że funkcja falowa

$$\phi(x) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\langle p \rangle x\right) \psi(x + \langle x \rangle), \quad (2.1)$$

opisuje stan, w którym wartości oczekiwane pomiaru położenia i pędu wynoszą zero.

Rozwiązanie:

Wartość oczekiwana pomiaru położenia w stanie $\phi(x)$ wyraża się wzorem,

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x |\phi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} x \left| \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\langle p \rangle x\right) \psi(x + \langle x \rangle) \right|^2 dx, \quad (2.2)$$

gdzie podstawiliśmy postać funkcji falowej (2.1). Ponieważ moduł funkcji eksponent wynosi w tym przypadku 1, wyrażenie to upraszcza się do postaci,

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x |\psi(x + \langle x \rangle)|^2 dx. \quad (2.3)$$

Dokonujemy teraz zamiany zmiennych, podstawiając $x + \langle x \rangle = y$. Jako że $\langle x \rangle$ jest stałą, to $dx = dy$. Podstawiając nowe zmienne do równania (2.3), otrzymujemy

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} (y - \langle x \rangle) |\psi(y)|^2 dy. \quad (2.4)$$

Rozdzielając powyższą całkę na dwie oraz porządkując wyrazy, dostajemy

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} y |\psi(y)|^2 dy - \langle x \rangle \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(y)|^2 dy. \quad (2.5)$$

Pierwsza całka jest wartością oczekiwaną pomiaru położenia cząstki w stanie kwantowym opisanym funkcją falową ψ . Druga całka z kolei jest równa 1, przy czym mnożona jest przez $\langle x \rangle$. Wyrazy te odejmują się, dając w wyniku $\langle x \rangle = 0$.

Zadanie 2

Cząstka jest w stanie kwantowym opisanym funkcją falową,

$$\psi(x) = f(x) e^{ip_0 x / \hbar}, \quad (2.6)$$

gdzie $f(x)$ jest normowalną i rzeczywistą funkcją położenia. Pokazać, że p_0 jest wartością oczekiwaną pomiaru pędu cząstki w tym stanie.

Rozwiązanie:

Aby obliczyć wartość oczekiwaną pędu w stanie $\psi(x)$ korzystamy ze wzoru ogólnego,

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x). \quad (2.7)$$

Podstawiając tutaj funkcję falową (2.6), dostajemy

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) e^{-ip_0 x / \hbar} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) f(x) e^{ip_0 x / \hbar} = \\ &= -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) e^{-ip_0 x / \hbar} \left[\frac{\partial f(x)}{\partial x} e^{ip_0 x / \hbar} + \frac{ip_0}{\hbar} f(x) e^{ip_0 x / \hbar} \right] = \\ &= -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \frac{\partial f(x)}{\partial x} + p_0 \int_{-\infty}^{\infty} dx f^2(x), \end{aligned} \quad (2.8)$$

gdzie skorzystaliśmy z faktu, że funkcja $f(x)$ jest rzeczywista. Następnie, pierwszy człon w tym wyrażeniu przekształcamy całkując przez części,

$$-i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \frac{\partial f(x)}{\partial x} = f^2(x) \Big|_{-\infty}^{+\infty} + i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\partial f(x)}{\partial x} f(x). \quad (2.9)$$

Stąd wynika, że

$$-2i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \frac{\partial f(x)}{\partial x} = f^2(x) \Big|_{-\infty}^{+\infty}. \quad (2.10)$$

Ponieważ funkcja $f(x)$ jest normowalna,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx f^2(x) = 1, \quad (2.11)$$

to musi odpowiednio szybko zanikać do zera na granicach przedziału całkowania. Zatem wyraz brzegowy, $f^2(x) \Big|_{-\infty}^{+\infty} = 0$. Oznacza to, że

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \frac{\partial f(x)}{\partial x} = 0. \quad (2.12)$$

Podstawiając ten wynik do równania (2.8) i korzystając tam z warunku unormowania funkcji $f(x)$ (2.11) dostajemy, że wartość oczekiwana pomiaru pędu w stanie opisanym funkcją falową (2.6) wynosi p_0 .

Zadanie 3

W chwili $t = 0$, cząstka znajduje się w stanie kwantowym opisanym funkcją falową,

$$\psi(x) = \begin{cases} A(x/a), & 0 \leq x \leq a \\ A(b-x)/(b-a), & a \leq x \leq b \\ 0, & \text{dla pozostałych } x, \end{cases} \quad (2.13)$$

gdzie a, b, A są dodatnimi stałymi rzeczywistymi. **(a)** Unormować funkcję falową. **(b)** Narysować wykres $\psi(x)$. Jakie jest najbardziej prawdopodobne położenie cząstki w chwili $t = 0$? **(c)** Ile wynosi prawdopodobieństwo znalezienia cząstki na prawo od $x = a$ w chwili $t = 0$? Sprawdź swój wynik dla przypadków szczególnych, gdy $b = a$ oraz $b = 2a$.

Rozwiązanie:

(a) Na początku wyznaczmy gęstość prawdopodobieństwa pomiaru położenia cząstki $\rho(x)$. Podstawiając (2.13) do definicji, $\rho(x) = |\psi(x)|^2$, dostajemy

$$\rho(x) = \begin{cases} \frac{A^2}{a^2} x^2, & 0 \leq x \leq a \\ \frac{A^2}{(b-a)^2} (b-x)^2, & a \leq x \leq b \\ 0, & \text{dla pozostałych } x. \end{cases} \quad (2.14)$$

Pamiętamy przy tym, że stała A jest rzeczywista. Dobieramy ją tak, aby funkcja falowa była unormowana, tzn. aby spełniony był warunek

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) dx = 1. \quad (2.15)$$

Podstawiając tutaj (2.14), dostajemy

$$\frac{A^2}{a^2} \int_0^a x^2 dx + \frac{A^2}{(b-a)^2} \int_a^b (b-x)^2 dx = 1. \quad (2.16)$$

Pierwsza z całek po lewej stronie wynosi

$$\int_0^a x^2 dx = \frac{x^3}{3} \Big|_0^a = \frac{a^3}{3}, \quad (2.17)$$

natomiast druga całka,

$$\int_a^b (b-x)^2 dx = \left| b-x = y, -dx = dy \right| = \int_0^{b-a} y^2 dy = \frac{y^3}{3} \Big|_0^{b-a} = \frac{(b-a)^3}{3}. \quad (2.18)$$

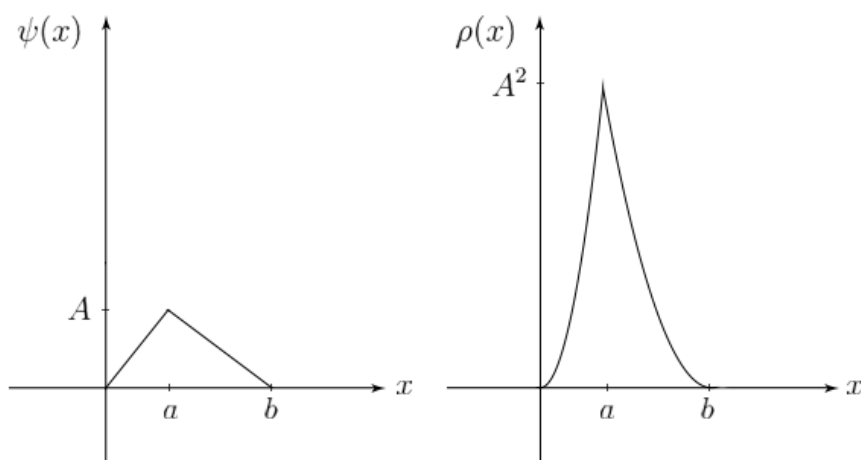
Podstawiając oba wyniki do równania (2.16),

$$\frac{A^2 a}{3} + \frac{A^2(b-a)}{3} = \frac{A^2 b}{3} = 1, \quad (2.19)$$

dostajemy, że stała normalizacyjna równa się $A = \sqrt{\frac{3}{b}}$. To oznacza, że rozkład gęstości prawdopodobieństwa (2.14) zadany jest wzorem,

$$\rho(x) = \begin{cases} \frac{3}{a^2 b^2} x^2, & 0 \leq x \leq a \\ \frac{3}{b^2(b-a)^2} (b-x)^2, & a \leq x \leq b \\ 0, & \text{dla pozostałych } x. \end{cases} \quad (2.20)$$

(b) Na rysunku 1 są przedstawione dwa wykresy funkcji. Po lewej stronie wykres funkcji $\psi(x)$, a po prawej wykres funkcji $\rho(x)$. Najbardziej prawdopodobne położenie cząstki odpowiada maksimum rozkładu gęstości prawdopodobieństwa. Analizując wykres $\rho(x)$ od razu zauważamy, że maksimum to wypada w punkcie $x = a$. I jest to właśnie położenie, w którym cząstka znajdzie się z największym prawdopodobieństwem.



Rysunek 1: Wykresy funkcji $\psi(x)$ oraz $\rho(x)$.

(c) Prawdopodobieństwo znalezienia cząstki na prawo od a wyraża się wzorem ogólnym:

$$P(x > a) = \int_a^\infty \rho(x) dx. \quad (2.21)$$

Dla rozkładu gęstości prawdopodobieństwa $\rho(x)$ danego wzorem (2.20), prawdopodobieństwo to wynosi

$$P(x > a) = \frac{3}{b^2(b-a)^2} \int_a^b (b-x)^2 dx = \frac{b-a}{b^2}, \quad (2.22)$$

gdzie skorzystaliśmy z wyniku całki (2.18). Jak wynika ze wzoru (2.22), dla $b = a$ prawdopodobieństwo znalezienia cząstki na prawo od a wynosi 0, natomiast dla $b = 2a$ wynosi ono $\frac{1}{2}$, co można wydedukować z rysunku 1.

Zadanie 4

Cząstka o masie m jest w stanie kwantowym opisanym w chwili t przez funkcję falową,

$$\psi(x, t) = N e^{-\alpha|x|} e^{-i\omega t}, \quad (2.23)$$

gdzie α, ω, N są dodatnimi stałymi rzeczywistymi. (a) Oblicz stałą normalizacyjną N . (b) Oblicz wartości oczekiwane pomiaru x oraz p , a także odpowiednie średnie odchylenia kwadratowe σ_x i σ_p . (c) Sprawdź,

czy spełniona jest zasada nieoznaczoności Heisenberga.

Wskazówka: Funkcja gamma Eulera zdefiniowana jest jako

$$\Gamma(n) = \int_0^{\infty} x^{n-1} e^{-x} dx, \quad (2.24)$$

i spełnia warunki $\Gamma(1) = 1$ oraz $\Gamma(n+1) = n\Gamma(n)$.

Rozwiązanie:

(a) Podstawiając do warunku normalizacyjnego,

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1, \quad (2.25)$$

funkcję falową (2.23), dostajemy

$$N^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha|x|} dx = 1. \quad (2.26)$$

Ze względu na wyrażenie $|x|$ w wykładniku funkcji podcałkowej, rozbijemy występującą tu całkę na dwie całki w granicach od $-\infty$ do 0 i od 0 do ∞ . Wykonując każdą z nich z osobna, otrzymujemy

$$\begin{aligned} N^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha|x|} dx &= N^2 \left[\int_{-\infty}^0 e^{2\alpha x} dx + \int_0^{\infty} e^{-2\alpha x} dx \right] \\ &= N^2 \left[\frac{1}{2\alpha} e^{2\alpha x} \Big|_{-\infty}^0 - \frac{1}{2\alpha} e^{-2\alpha x} \Big|_0^{\infty} \right] = N^2 \left[\frac{1}{2\alpha} + \frac{1}{2\alpha} \right] = \frac{N^2}{\alpha}. \end{aligned} \quad (2.27)$$

Podstawiając ten wynik do warunku (2.26) dostajemy (z dokładnością do czynnika fazowego), że $N = \sqrt{\alpha}$, a zatem unormowana funkcja falowa wynosi

$$\psi(x, t) = \sqrt{\alpha} e^{-\alpha|x|} e^{-i\omega t}. \quad (2.28)$$

(b) Aby wyznaczyć wartość oczekiwaną pomiaru położenia cząstki w stanie kwantowym opisanym funkcją falową $\psi(x, t)$, korzystamy ze wzoru

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x |\psi(x, t)|^2 dx. \quad (2.29)$$

Podstawiając tu funkcję falową (2.28), wyrażenie to przybiera postać

$$\langle x \rangle = \alpha \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-2\alpha|x|} dx. \quad (2.30)$$

Podobnie, rozdzielamy całkę na dwie całki od $-\infty$ do 0 i od 0 do ∞ :

$$\langle x \rangle = \alpha \int_{-\infty}^0 x e^{2\alpha x} dx + \alpha \int_0^{\infty} x e^{-2\alpha x} dx. \quad (2.31)$$

Na początku zajmijmy się pierwszą z tych całek. Dokonujemy zamiany zmiennych, wprowadzając zmienną $t = -2\alpha x$. Wówczas,

$$I_1 = \int_{-\infty}^0 x e^{2\alpha x} dx = \frac{1}{4\alpha^2} \int_{\infty}^0 t e^{-t} dt = -\frac{1}{4\alpha^2} \int_0^{\infty} t e^{-t} dt = -\frac{\Gamma(2)}{4\alpha^2}, \quad (2.32)$$

gdzie zamieniliśmy granice całkowania i wyraziliśmy ostatnią całkę przez funkcję gamma Eulera, $\Gamma(2)$. Wykorzystując własności funkcji gamma: $\Gamma(1) = 1$ oraz $\Gamma(n+1) = n\Gamma(n)$, możemy napisać że:

$$I_1 = -\frac{1}{4\alpha^2} \Gamma(2) = -\frac{1}{4\alpha^2} \Gamma(1+1) = -\frac{1}{4\alpha^2} \Gamma(1) = -\frac{1}{4\alpha^2}. \quad (2.33)$$

Drugą całkę w (2.31) obliczamy podobnie, tym razem wprowadzając zmienną $t = 2\alpha x$:

$$I_2 = \int_0^{\infty} x e^{-2\alpha x} dx = \frac{1}{4\alpha^2} \int_0^{\infty} t e^{-t} dt = \frac{1}{4\alpha^2} \Gamma(2) = \frac{1}{4\alpha^2}. \quad (2.34)$$

Ostatecznie, podstawiając (2.33) i (2.34) do wzoru (2.31) otrzymujemy, że wartość oczekiwana pomiaru położenia cząstki w stanie opisanym funkcją falową (2.28) wynosi

$$\langle x \rangle = 0. \quad (2.35)$$

Średnie odchylenie standardowe pomiaru położenia cząstki zadane jest wzorem,

$$\sigma_x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}. \quad (2.36)$$

Aby je obliczyć, musimy wyznaczyć jeszcze wartość oczekiwaną pomiaru kwadratu położenia cząstki $\langle x^2 \rangle$. Korzystając ze wzoru ogólnego,

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\psi(x, t)|^2 dx, \quad (2.37)$$

gdzie podstawiamy (2.28), po redukcji i rozdzieleniu na dwie całki otrzymujemy

$$\langle x^2 \rangle = \alpha \int_{-\infty}^0 x^2 e^{2\alpha x} dx + \alpha \int_0^{\infty} x^2 e^{-2\alpha x} dx. \quad (2.38)$$

Najpierw obliczymy pierwszą całkę wprowadzając zmienną $t = -2\alpha x$,

$$I_1 = \int_{-\infty}^0 x^2 e^{2\alpha x} dx = -\frac{1}{8\alpha^3} \int_{\infty}^0 t^2 e^{-t} dt = \frac{1}{8\alpha^3} \int_0^{\infty} t^2 e^{-t} dt = \frac{1}{8\alpha^3} \Gamma(3) = \frac{1}{8\alpha^3} \Gamma(2+1) = \frac{1}{4\alpha^3}. \quad (2.39)$$

W przypadku drugiej całki wprowadzamy zmienną $t = 2\alpha x$,

$$I_2 = \int_0^{\infty} x^2 e^{-2\alpha x} dx = \frac{1}{8\alpha^3} \int_0^{\infty} t^2 e^{-t} dt = \frac{1}{4\alpha^3}. \quad (2.40)$$

Wyznaczone tu wartości obu całek wstawiamy do wyrażenia na $\langle x^2 \rangle$, dzięki czemu dostajemy

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{2\alpha^2}. \quad (2.41)$$

Ostatecznie, mając na uwadze (2.35) i (2.41), średnie odchylenie standardowe pomiaru położenia cząstki (2.36) przyjmuje postać

$$\sigma_x = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha}. \quad (2.42)$$

Wartość oczekiwaną pomiaru pędu cząstki możemy obliczyć w reprezentacji położeniowej jako

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x, t) dx, \quad (2.43)$$

gdzie $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ jest operatorem pędu. W naszym przypadku,

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\alpha} e^{-\alpha|x|} e^{i\omega t} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) [\sqrt{\alpha} e^{-\alpha|x|} e^{-i\omega t}] dx = -i\hbar \alpha \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha|x|} (-\alpha \operatorname{sgn}(x)) e^{-\alpha|x|} dx \\ &= i\hbar \alpha^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha|x|} \operatorname{sgn}(x) dx = -i\hbar \alpha^2 \int_{-\infty}^0 e^{2\alpha x} dx + i\hbar \alpha^2 \int_0^{\infty} e^{-2\alpha x} dx, \end{aligned} \quad (2.44)$$

gdzie funkcja $\operatorname{sgn}(x)$ wynosi -1 dla $x < 0$ oraz 1 dla $x > 0$, i pojawia się ona z pochodnej: $\frac{d}{dx}|x| = \operatorname{sgn}(x)$. Wyrażenie (2.44) podzielimy na dwie proste do obliczenia całki:

$$I_1 = \int_{-\infty}^0 e^{2\alpha x} dx = \frac{1}{2\alpha} [e^{2\alpha x}]_{-\infty}^0 = \frac{1}{2\alpha} [1 - 0] = \frac{1}{2\alpha} \quad (2.45)$$

oraz

$$I_2 = \int_0^{\infty} e^{-2\alpha x} dx = \frac{-1}{2\alpha} [e^{-2\alpha x}]_0^{\infty} = \frac{-1}{2\alpha} [0 - 1] = \frac{1}{2\alpha}. \quad (2.46)$$

Ich wyniki wstawiamy do wzoru na wartość oczekiwaną pędu (2.44), skąd dostajemy

$$\langle p \rangle = 0. \quad (2.47)$$

Wartość oczekiwana kwadratu pędu cząstki $\langle p^2 \rangle$ w stanie $\psi(x, t)$ dana jest w reprezentacji położeniowej wyrażeniem,

$$\langle p^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \psi(x, t). \quad (2.48)$$

Podstawiając tu postać funkcji falowej (2.28), otrzymujemy

$$\begin{aligned} \langle p^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\alpha} e^{-\alpha|x|} e^{i\omega t} \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \left[\sqrt{\alpha} e^{-\alpha|x|} e^{-i\omega t} \right] dx = \alpha^2 \hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha|x|} \frac{\partial}{\partial x} \left[\operatorname{sgn}(x) e^{-\alpha|x|} \right] dx \\ &= \alpha^2 \hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha|x|} \left[2\delta(x) e^{-\alpha|x|} - \alpha \operatorname{sgn}^2(x) e^{-\alpha|x|} \right] dx. \end{aligned} \quad (2.49)$$

Występująca tu funkcja delta Diraca $\delta(x)$ to wynik różniczkowania, $\frac{d}{dx} \operatorname{sgn}(x) = 2\delta(x)$. Z kolei $\operatorname{sgn}^2(x) = 1$. Zatem

$$\langle p^2 \rangle = 2\alpha^2 \hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha|x|} \delta(x) dx - \alpha^3 \hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha|x|} dx, \quad (2.50)$$

gdzie pierwszą z całek wykonujemy natychmiast, korzystając z tego, że dla dowolnej funkcji próbnej $f(x)$ mamy

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x) dx = f(0). \quad (2.51)$$

Z kolei drugą całkę w (2.50) obliczyliśmy przy okazji normowania funkcji falowej (2.27). Całka ta wynosi $1/\alpha$. Ostatecznie, wartość oczekiwana pomiaru kwadratu pędu cząstki to

$$\langle p^2 \rangle = \alpha^2 \hbar^2. \quad (2.52)$$

Średnie odchylenie kwadratowe z kolei, dane w ogólności wzorem

$$\sigma_p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}, \quad (2.53)$$

wynosi w naszym przypadku

$$\sigma_p = \alpha \hbar, \quad (2.54)$$

gdzie podstawiliśmy (2.47) i (2.52) do definicji (2.53).

(c) Obliczmy wartość $\sigma_x \sigma_p$. W naszym przypadku,

$$\sigma_x \sigma_p = \frac{\hbar \sqrt{2}}{2} \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (2.55)$$

co oznacza, iż spełniona jest zasada nieoznaczoności Heisenberga.

Uzupełnienie: Na koniec udowodnimy, że $\frac{d}{dx} \operatorname{sgn}(x) = 2\delta(x)$, gdzie tożsamość tę należy rozumieć w sensie dystrybucyjnym. To znaczy w sensie całki z dowolną funkcją próbną $f(x)$, która zanika wystarczająco szybko do zera dla $x \rightarrow \pm\infty$. Wychodząc od interesującej nas całki, którą całkujemy przez części, dostajemy

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{d}{dx} \operatorname{sgn}(x) \right) f(x) dx = \operatorname{sgn}(x) f(x) \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{sgn}(x) f'(x) dx. \quad (2.56)$$

Ze względu na znikanie funkcji próbnej dla $x \rightarrow \pm\infty$, wyraz brzegowy wynosi zero. Z kolei drugą całkę rozpisujemy na przedziały zmienności x w następujący sposób,

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{d}{dx} \operatorname{sgn}(x) \right) f(x) dx &= \int_{-\infty}^0 f'(x) dx - \int_0^{\infty} f'(x) dx = \\ &= f(x) \Big|_{-\infty}^0 - f(x) \Big|_0^{\infty} = 2f(0) = 2 \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x) dx, \end{aligned} \quad (2.57)$$

gdzie w ostatnim kroku skorzystaliśmy z (2.51). To kończy dowód naszej równości.

Zadanie 5

W oparciu o zasadę nieoznaczoności Heisenberga oszacować najmniejszą możliwą energię cząstki o masie m umieszczonej w jednowymiarowym potencjale harmonicznym o częstości ω , $V(x) = m\omega^2 x^2/2$. Porównać z wynikiem ścisłym, który wynosi $\hbar\omega/2$.

Rozwiązanie:

Posługując się zasadą nieoznaczoności Heisenberga, można przeprowadzić bardzo proste oszacowanie pokazujące, że energia kwantowego oscylatora harmonicznego jest ograniczona z dołu. Zapiszmy zasadę nieoznaczoności Heisenberga,

$$\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle \langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}. \quad (2.58)$$

Lewą stronę tej nierówności można przepisać do postaci

$$\langle x^2 \rangle \langle p^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \langle p^2 \rangle - \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle \langle p \rangle^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}, \quad (2.59)$$

skąd wynika, że

$$\langle x^2 \rangle \langle p^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} + \langle x \rangle^2 \langle p^2 \rangle + \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle \langle p \rangle^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}. \quad (2.60)$$

W ostatnim kroku skorzystaliśmy z faktu, że każdy z członów $\langle x \rangle^2 \langle p^2 \rangle$ i $\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle \langle p \rangle^2$ jest nieujemny. Stąd wynika, że $\langle p^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4\langle x^2 \rangle}$ a, co za tym idzie, wartość oczekiwana pomiaru energii kinetycznej może być oszacowana przez

$$\frac{\langle p^2 \rangle}{2m} \geq \frac{\hbar^2}{8m\langle x^2 \rangle}. \quad (2.61)$$

Ostatecznie, wartość oczekiwana energii całkowitej układu,

$$\langle E \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} + \frac{m\omega^2 \langle x^2 \rangle}{2} \quad (2.62)$$

może zostać ograniczona od dołu,

$$\langle E \rangle \geq \frac{\hbar^2}{8m\langle x \rangle^2} + \frac{m\omega^2 \langle x \rangle^2}{2}. \quad (2.63)$$

Naszym celem jest znalezienie minimalnej wartości wyrażenia stojącego po prawej stronie tej nierówności.

Zdefiniujmy funkcję

$$f(y) = \frac{\hbar^2}{8my^2} + \frac{m\omega^2 y^2}{2}, \quad (2.64)$$

gdzie $y = \langle x^2 \rangle \geq 0$. W punkcie, w którym ta funkcja osiąga minimum spełniony jest warunek znikania pierwszej pochodnej,

$$\frac{df}{dy} = 0, \quad \text{czyli} \quad -\frac{\hbar^2}{4my^3} + m\omega^2 y = 0. \quad (2.65)$$

Rzeczywistymi rozwiązaniami tego równania są $y = \pm \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$, przy czym w naszym przypadku wybieramy rozwiązanie dodatnie. Jak łatwo sprawdzić, $y = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$ jest minimum funkcji $f(y)$, w którym osiąga ona wartość $f_{\min} = \hbar\omega/2$. W związku z nierównością (2.63), wartość ta definiuje również ograniczenie dolne na średnią energię całkowitą oscylatora harmonicznego,

$$\langle E \rangle \geq \frac{\hbar\omega}{2}. \quad (2.66)$$

Ograniczenie to równe jest ścisłej wartości energii oscylatora w stanie podstawowym.

3 Seria 3

Zadanie 1

Układ znajduje się w stanie kwantowym opisanym unormowaną funkcją falową:

$$\psi(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) & \text{dla } x \in [0, a] \\ 0 & \text{poza tym.} \end{cases} \quad (3.1)$$

Obliczyć w reprezentacji położeniowej: $\langle x \rangle$, σ_x , $\langle p \rangle$ oraz σ_p . Ile wynosi $\sigma_x \sigma_p$?

Rozwiązanie:

(a) Obliczając wartość oczekiwaną pomiaru położenia cząstki $\langle x \rangle$, korzystamy ze wzoru ogólnego,

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x |\psi(x)|^2 dx = \frac{2}{a} \int_0^a x \sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right) dx, \quad (3.2)$$

gdzie podstawiliśmy (3.1). Wprowadzając nową zmienną $t = \frac{\pi}{a}x$, pamiętamy, że jednocześnie $dx = \frac{a}{\pi}dt$. Równanie (3.2) przyjmuje wtedy postać

$$\langle x \rangle = \frac{2a}{\pi^2} \int_0^\pi t \sin^2 t dt. \quad (3.3)$$

Całkę tę obliczamy przez części, korzystając z tego, że $\sin^2 t = \frac{1}{2}(t - \sin t \cos t)'$. Kolejne przekształcenia dają w wyniku

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \frac{2a}{\pi^2} \left[\frac{t^2 - t \sin t \cos t}{2} \Big|_0^\pi - \frac{1}{2} \int_0^\pi (t - \sin t \cos t) dt \right] = \frac{2a}{\pi^2} \left[\frac{\pi^2}{2} - \frac{1}{2} \int_0^\pi t dt + \frac{1}{4} \int_0^\pi \sin(2t) dt \right] \\ &= \frac{2a}{\pi^2} \left[\frac{\pi^2}{2} - \frac{\pi^2}{4} - \frac{1}{8} \cos(2t) \Big|_0^\pi \right] = \frac{2a}{\pi^2} \left[\frac{\pi^2}{2} - \frac{\pi^2}{4} \right] = \frac{a}{2}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

(b) Średnie odchylenie standardowe pomiaru położenia cząstki dane jest wzorem (2.36). Wynika stąd, że musimy jeszcze obliczyć $\langle x^2 \rangle$. W naszym przypadku,

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\psi(x)|^2 dx = \frac{2}{a} \int_0^a x^2 \sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right) dx, \quad (3.5)$$

gdzie podstawiliśmy postać funkcji falowej (3.1). Podobnie jak w punkcie (a), wprowadzamy zmienną $t = \frac{\pi}{a}x$ oraz całkujemy przez części. W wyniku dostajemy

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &= \frac{2a^2}{\pi^3} \int_0^\pi t^2 \sin^2 t dt = \frac{2a^2}{\pi^3} \left[\frac{t^3 - t^2 \sin t \cos t}{2} \Big|_0^\pi - \int_0^\pi t^2 dt + \int_0^\pi t \sin t \cos t dt \right] \\ &= \frac{2a^2}{\pi^3} \left[\frac{\pi^3}{2} - \frac{\pi^3}{3} + \int_0^\pi t \cos t \sin t dt \right] = \frac{2a^2}{\pi^3} \left[\frac{\pi^3}{6} + \frac{1}{2} t \sin^2 t \Big|_0^\pi - \frac{1}{2} \int_0^\pi \sin^2 t dt \right] \\ &= \frac{2a^2}{\pi^3} \left[\frac{\pi^3}{6} - \frac{1}{4} \int_0^\pi (1 - \cos(2t)) dt \right] = \frac{2a^2}{\pi^3} \left[\frac{\pi^3}{6} - \frac{1}{4} \left(t - \frac{1}{2} \sin(2t) \right) \Big|_0^\pi \right] = \frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{2\pi^2}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Zatem σ_x wynosi

$$\sigma_x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = a \sqrt{\frac{1}{12} - \frac{1}{2\pi^2}}, \quad (3.7)$$

gdzie podstawiliśmy wyniki (3.4) oraz (3.6).

(c) Chcąc obliczyć wartość oczekiwaną pomiaru pędu cząstki $\langle p \rangle$ posłużymy się wzorem ogólnym (2.7). Podstawiając tam postać funkcji falowej (3.1), dostajemy

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) dx = -i\hbar \frac{2\pi}{a^2} \int_0^a \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) \cos\left(\frac{\pi}{a}x\right) dx \\ &= -i\hbar \frac{\pi}{a^2} \int_0^a \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right) dx = \frac{i\hbar}{2a} \cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right) \Big|_0^a = 0. \end{aligned} \quad (3.8)$$

(d) Podobnie jak w punkcie (b), chcąc obliczyć $\sigma_p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}$ należy najpierw wyznaczyć $\langle p^2 \rangle$ oraz wykorzystać wynik uzyskany w powyższym podpunkcie.

$$\begin{aligned}\langle p^2 \rangle &= \frac{2}{a} \int_0^a dx \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) = -\frac{2\hbar^2 \pi}{a^2} \int_0^a dx \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \frac{\partial}{\partial x} \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) \\ &= \frac{2\hbar^2 \pi^2}{a^3} \int_0^a \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx = \frac{\hbar^2 \pi^2}{a^3} \int_0^a dx \left[1 - \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\right] = \frac{\hbar^2 \pi^2}{a^3} \left[x - \frac{a}{2\pi} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\right]_0^a = \frac{\hbar^2 \pi^2}{a^2}.\end{aligned}\quad (3.9)$$

Stąd wynika, że

$$\sigma_p = \frac{\hbar \pi}{a}. \quad (3.10)$$

(e) Zasada nieoznaczoności Heisenberga jest spełniona, albowiem

$$\sigma_x \sigma_p = \hbar \pi \sqrt{\frac{1}{12} - \frac{1}{2\pi^2}} \approx 0,568\hbar \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (3.11)$$

gdzie podstawiliśmy (3.7) and (3.10).

Zadanie 2

Pokazać, że dla funkcji falowej $\psi(x, t)$ opisującej stan cząstki o masie m zachodzi

$$\int_{\mathbb{R}} j(x, t) dx = \frac{\langle p \rangle_t}{m}, \quad (3.12)$$

gdzie $j(x, t)$ jest prądem prawdopodobieństwa, zaś $\langle p \rangle_t$ jest wartością oczekiwaną pomiaru pędu w chwili t .

Rozwiązanie:

Z definicji, gęstość prądu prawdopodobieństwa w jednym wymiarze wynosi

$$j(x, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^*(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t) - \psi(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \psi^*(x, t) \right). \quad (3.13)$$

Całkując tę wielkość po zmiennej x i korzystając z liniowości całki, możemy zapisać, że

$$\int_{\mathbb{R}} j(x, t) dx = \frac{\hbar}{2mi} \int_{\mathbb{R}} dx \psi^*(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t) - \frac{\hbar}{2mi} \int_{\mathbb{R}} dx \psi(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \psi^*(x, t). \quad (3.14)$$

W przypadku pierwszej z powyższych całek mamy

$$\frac{\hbar}{2mi} \int_{\mathbb{R}} dx \psi^*(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t) = \frac{1}{2m} \int_{\mathbb{R}} dx \psi^*(x, t) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x, t) = \frac{\langle p_x \rangle_t}{2m}, \quad (3.15)$$

gdzie wyodrębniliśmy operator pędu, $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$. W związku z tym całka ta równa jest wartości oczekiwanej pomiaru pędu. W przypadku drugiej całki,

$$\begin{aligned}\frac{\hbar}{2mi} \int_{\mathbb{R}} dx \psi(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \psi^*(x, t) &= \frac{\hbar}{2mi} [\psi^*(x, t) \psi(x, t)]_{-\infty}^{\infty} - \frac{\hbar}{2mi} \int_{\mathbb{R}} dx \psi^*(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t) \\ &= -\frac{1}{2m} \int_{\mathbb{R}} dx \psi^*(x, t) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x, t) = -\frac{\langle p_x \rangle_t}{2m}.\end{aligned}\quad (3.16)$$

Tutaj, ze względu na normowalność funkcji falowej ψ , czynnik brzegowy $[\psi^*(x, t) \psi(x, t)]_{-\infty}^{\infty}$ wynosi zero. Ostatecznie, podstawiając (3.15) oraz (3.16) do równania (3.14), dostajemy

$$\int_{\mathbb{R}} j(x, t) dx = \frac{\langle p_x \rangle_t}{m}, \quad (3.17)$$

co kończy dowód.

Zadanie 3

Rozważyć cząstkę o masie m i energii E ($V_0 > E > 0$), padającą z lewej strony na stopień potencjału,

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{dla } x < 0 \\ V_0 & \text{dla } x > 0. \end{cases} \quad (3.18)$$

Wykazać, że współczynnik transmisji wynosi $T = 0$, pomimo że istnieje niezerowe prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w obszarze zabronionym klasycznie (tzn. dla $x > 0$).

Rozwiązanie:

Dla $x > 0$, równanie Schrödingera przyjmuje postać

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0\psi = E\psi \Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}\psi = 0. \quad (3.19)$$

Z warunków zadania wynika, że występujący tu współczynnik $\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}$ jest ujemny. Podstawiając $\kappa^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} > 0$, dostajemy równanie

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \kappa^2\psi = 0. \quad (3.20)$$

Jego rozwiązaniem jest w ogólności,

$$\psi_2 = Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x}. \quad (3.21)$$

Nakładając tu warunek brzegowy na znikanie funkcji falowej w nieskończoności, tzn. $\psi \rightarrow 0$ dla $x \rightarrow \infty$, dostajemy, że $C = 0$. Funkcja falowa opisująca cząstkę w obszarze $x > 0$ wynosi zatem

$$\psi = De^{-\kappa x}. \quad (3.22)$$

Oznacza to, że istnieje niezerowe prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w tym obszarze. Z kolei gęstość prądu prawdopodobieństwa dla $x > 0$, zgodnie ze wzorem (3.13), wynosi

$$j_{prze} = \frac{\hbar}{2mi} [D^* e^{-\kappa x} D(-\kappa) e^{-\kappa x} - D e^{-\kappa x} D^*(-\kappa) e^{-\kappa x}] = 0. \quad (3.23)$$

Oznacza to, że współczynnik przejścia (transmisji) cząstki przez stopień potencjału wynosi zero, $T = 0$.

Zadanie 4

W doświadczeniach nad rozpraszaniem nisko-energetycznych elektronów na atomach gazów szlachetnych takich jak neon, hel, argon, Ramsauer zauważył, że atomy stają się przezroczyste dla pewnych szczególnych wartości energii padających elektronów (tzn. elektrony o pewnych energiach praktycznie się nie odbijają). Zjawisko to można wytłumaczyć rozważając stacjonarne rozwiązania równania Schrödingera o dodatniej energii ($E > 0$) opisujące elektron o masie m w potencjale:

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{dla } |x| \leq a \\ 0 & \text{dla pozostałych } x, \end{cases} \quad (3.24)$$

gdzie $V_0 > 0$. Przyjmijmy, że elektron pada z lewej strony na studnię potencjału.

(a) Obliczyć współczynnik transmisji T .

(b) Pokazać, że $T = 1$ dla pewnych wartości energii E . Na tej podstawie zinterpretować zjawisko Ramsauera.

(c) Dla rozpraszania elektronów na atomach helu najmniejsza energia elektronów, dla której obserwuje się zjawisko Ramsauera wynosi $E = 0.7$ eV. Przyjmując, że promień atomu to $a = 0.1$ nm, obliczyć w ramach przyjętego modelu głębokość studni potencjalnej w atomie V_0 .

Rozwiązanie:

W przypadku, gdy $x < -a$, tj. z lewej strony studni potencjału (3), równanie Schrödingera przyjmuje postać,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_1}{dx^2} = E\psi_1 \Rightarrow \frac{d^2\psi_1}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi_1, \quad (3.25)$$

gdzie zgodnie z warunkami zadania $E > 0$. Podstawiając tutaj

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0, \quad (3.26)$$

możemy sprowadzić równanie (3.25) do postaci równania różniczkowego dla oscylatora harmonicznego,

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + k^2\psi_1 = 0, \quad (3.27)$$

którego ogólne rozwiązanie stanowi

$$\psi_1 = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}. \quad (3.28)$$

Tutaj fala Ae^{ikx} jest falą padającą i reprezentuje elektron poruszający się w prawo, natomiast fala Be^{-ikx} jest falą odbitą i reprezentuje elektron poruszający się w lewo.

Analogiczne rozwiązanie równania Schrödingera można napisać w obszarze, gdzie $x > a$, tzn. z prawej strony studni potencjału (3). Mianowicie,

$$\psi_3 = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}. \quad (3.29)$$

W odróżnieniu jednak od poprzedniej sytuacji, w obszarze tym nie ma fali odbitej. Narzucając na rozwiązanie (3.29) warunek, że $G = 0$, dostajemy ostatecznie,

$$\psi_3 = Fe^{ikx}, \quad (3.30)$$

co reprezentuje falę przechodzącą przez studnię potencjału.

W przypadku, gdy $|x| \leq a$, równanie Schrödingera przyjmuje z kolei postać,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_2}{dx^2} - V_0\psi_2 = E\psi_2 \Rightarrow \frac{d^2\psi_2}{dx^2} = -\frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}\psi_2. \quad (3.31)$$

Wprowadzając oznaczenie,

$$s^2 = \frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2} > 0, \quad (3.32)$$

stwierdzamy, że równania Schrödingera (3.31) sprowadza się do równania dla oscylatora harmonicznego, a zatem jego ogólnym rozwiązaniem jest

$$\psi_2 = Ce^{isx} + De^{-isx}. \quad (3.33)$$

W tym przypadku występują obie fale, zarówno propagująca się w lewo jak i w prawo.

(a) Z definicji, współczynnik transmisji T zdefiniowany jako

$$T = \frac{|j_{prze}|}{|j_{pad}|}, \quad (3.34)$$

gdzie j_{pad} to gęstość prądu prawdopodobieństwa fali padającej (czyli Ae^{ikx}), natomiast j_{prze} to gęstość prądu prawdopodobieństwa fali przechodzącej (czyli Fe^{ikx}). Zgodnie z definicją gęstości prądu prawdopodobieństwa (3.13),

$$j_{prze} = \frac{\hbar}{2mi} [F^*e^{-ikx} F i k e^{ikx} - F e^{ikx} F^* (-ik) e^{-ikx}] = \frac{k\hbar}{m} |F|^2, \quad (3.35)$$

oraz

$$j_{pad} = \frac{\hbar}{2mi} [A^*e^{-ikx} A i k e^{ikx} - A e^{ikx} A^* (-ik) e^{-ikx}] = \frac{k\hbar}{m} |A|^2, \quad (3.36)$$

skąd wynika, że

$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \left| \frac{F}{A} \right|^2. \quad (3.37)$$

W dalszym ciągu musimy zatem wyznaczyć iloraz współczynników F i A .

W tym celu nakładamy na nasze ogólne rozwiązanie równania Schrödingera warunki zszycia funkcji falowej. Ponieważ na granicy obszarów, tj. w punktach $x = \pm a$, potencjał ma skończony skok, to żądamy,

aby funkcja falowa oraz jej pierwsza pochodna były w tych punktach ciągłe. Oznacza to, że spełniony musi być poniższy układ równań:

$$\psi_1(-a) = \psi_2(-a) \implies Ae^{-ika} + Be^{ika} = Ce^{-isa} + De^{isa}, \quad (3.38)$$

$$\psi_1'(-a) = \psi_2'(-a) \implies kAe^{-ika} - kB e^{ika} = sCe^{-isa} - sDe^{isa}, \quad (3.39)$$

$$\psi_2(a) = \psi_3(a) \implies Ce^{isa} + De^{-isa} = Fe^{ika}, \quad (3.40)$$

$$\psi_2'(a) = \psi_3'(a) \implies sCe^{isa} - sDe^{-isa} = kFe^{ika}. \quad (3.41)$$

Iloraz współczynników F i A wyznaczymy z równania (3.40),

$$\frac{C}{A}e^{isa} + \frac{D}{A}e^{-isa} = \frac{F}{A}e^{ika}. \quad (3.42)$$

gdzie podzieliśmy stronami przez A .

Mnożąc równanie (3.40) przez s i dodając stronami do (3.41), dostajemy

$$2s\frac{C}{A}e^{isa} = (k+s)\frac{F}{A}e^{ika}. \quad (3.43)$$

Stąd wynika, że

$$\frac{C}{A} = \frac{F}{A} \frac{k+s}{2s} e^{i(k-s)a}. \quad (3.44)$$

W następnym kroku mnożymy równanie (3.38) przez k i dodajemy stronami do (3.39). Otrzymujemy wówczas,

$$2kAe^{-ika} = (k+s)Ce^{-isa} + (k-s)De^{isa}. \quad (3.45)$$

Dzieląc stronami to równanie przez A i rozwiązując względem D/A ,

$$(k-s)\frac{D}{A}e^{isa} = 2ke^{-ika} - (k+s)\frac{C}{A}e^{-isa}, \quad (3.46)$$

dostajemy

$$\frac{D}{A} = \frac{2k}{k-s}e^{-i(k+s)a} - \frac{C}{A} \left(\frac{k+s}{k-s} \right) e^{-2isa}. \quad (3.47)$$

Za C/A podstawiamy tutaj wyrażenie (3.44),

$$\frac{D}{A} = \frac{2k}{k-s}e^{-i(k+s)a} - \frac{F}{A} \frac{(k+s)^2}{2s(k-s)}e^{-3isa+ika}. \quad (3.48)$$

Dysponując ilorazami C/A oraz D/A , wracamy do równania (3.42).

Podstawiając do równania (3.42) wyrażenia (3.44) i (3.48), dostajemy

$$\begin{aligned} \frac{F}{A}e^{ika} &= \left[\frac{F}{A} \frac{k+s}{2s} e^{i(k-s)a} \right] e^{isa} + \left[\frac{2k}{k-s} e^{-i(k+s)a} - \frac{F}{A} \frac{(k+s)^2}{2s(k-s)} e^{-3isa+ika} \right] e^{-isa}, \\ \frac{F}{A} \left[e^{ika} - \frac{k+s}{2s} e^{ika} + \frac{(k+s)^2}{2s(k-s)} e^{-i(4s-k)a} \right] &= \frac{2k}{k-s} e^{-i(2s+k)a}, \\ \frac{F}{A} \left[1 - \frac{k+s}{2s} + \frac{(k+s)^2}{2s(k-s)} e^{-4isa} \right] &= \frac{2k}{k-s} e^{-2i(s+k)a}. \end{aligned} \quad (3.49)$$

Kolejne przekształcenia prowadzą do

$$\frac{F}{A} = \frac{\frac{2k}{k-s} e^{-2i(s+k)a}}{1 - \frac{k+s}{2s} + \frac{(k+s)^2}{2s(k-s)} e^{-4isa}} = \frac{4kse^{-2i(s+k)a}}{(k+s)^2 e^{-4isa} - (s-k)^2} = \frac{4kse^{-2ika}}{(k+s)^2 e^{-2isa} - (s-k)^2 e^{2isa}}. \quad (3.50)$$

Teraz korzystamy ze wzoru Eulera: $e^{ix} = \cos x + i \sin x$.

$$\begin{aligned} \frac{F}{A} &= \frac{4kse^{-2ika}}{(k+s)^2 [\cos(2sa) - i \sin(2sa)] - (s-k)^2 [\cos(2sa) + i \sin(2sa)]} \\ &= \frac{4kse^{-2ika}}{[(k+s)^2 - (s-k)^2] \cos(2sa) - i[(k+s)^2 + (s-k)^2] \sin(2sa)} \\ &= \frac{2kse^{-2ika}}{2ks \cos(2sa) - i(k^2 + s^2) \sin(2sa)}. \end{aligned} \quad (3.51)$$

Biorąc kwadrat modułu otrzymanego wyżej wyrażenia, wyznaczamy współczynnik transmisji (3.34),

$$T = \left| \frac{F}{A} \right|^2 = \frac{4k^2 s^2}{4k^2 s^2 \cos^2(2sa) + (k^2 + s^2)^2 \sin^2(2sa)} = \frac{4k^2 s^2}{4k^2 s^2 + (k^2 - s^2)^2 \sin^2(2sa)}, \quad (3.52)$$

gdzie w ostatnim kroku skorzystaliśmy z jedynki trygonometrycznej.

(b) Aby wyznaczyć wartości energii, dla których $T = 1$, musimy rozwiązać równanie

$$\frac{4k^2 s^2}{4k^2 s^2 + (k^2 - s^2)^2 \sin^2(2sa)} = 1, \quad (3.53)$$

gdzie za T podstawiliśmy wyrażenie (3.52). Mnożąc to równanie stronami przez mianownik, otrzymujemy

$$(k^2 - s^2)^2 \sin^2(2sa) = 0. \quad (3.54)$$

Rozwiązaniami równania są

$$(k = s \vee \sin^2(2sa) = 0) \implies (s = \frac{n\pi}{2a} \wedge n \in \mathbb{N}). \quad (3.55)$$

Rozwiązanie $k = s$ jest trywialne i oznacza, że $V_0 = 0$. Dlatego nie bierzemy go pod uwagę. Drugi warunek, $s = n\pi/2a$ dla $n \in \mathbb{N}$, wyznacza wartości szukanych energii E_n . Po podniesieniu tego warunku stronami do kwadratu i podstawieniu za s wyrażenia (3.32), dostajemy

$$s^2 = \frac{2m(E_n + V_0)}{\hbar^2} = \frac{n^2 \pi^2}{4a^2} \quad (3.56)$$

Po drobnych przekształceniach otrzymujemy

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{8ma^2} - V_0. \quad (3.57)$$

Ponieważ E_n reprezentuje energię kinetyczną rozpraszanego elektronu, spośród wszystkich możliwych rozwiązań (3.57) musimy wybrać tylko takie $n \in \mathbb{N}$, dla których $E_n > 0$. Biorąc to pod uwagę, zauważmy, że dla zadanych parametrów studni V_0 i a , elektrony o energiach (3.57) nie będą się odbijać od studni potencjału. Przyjmując, że potencjał z zadania modeluje atom gazu szlachetnego, fakt ten wyjaśnia obserwowane zjawisko Ramsauera.

(c) Z równania (3.57) wynika, że

$$V_0 = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{8ma^2} - E_n. \quad (3.58)$$

Przy zadanym promieniu studni $a = 10^{-10}$ m, najmniejsza energia elektronów, dla której obserwuje się zjawisko Ramsauera wynosi $E = 0,7$ eV $= 1,12 \cdot 10^{-19}$ J. Pozostałe dane liczbowe to masa elektronu $m = 9,109 \cdot 10^{-31}$ kg oraz zredukowana stała Plancka $\hbar = 1,055 \cdot 10^{-34}$ J·s. Stwierdzamy, że dla $n = 1$ mamy $V_0 > 0$, co odpowiada warunkowi zadania. Ostatecznie, podstawiając wszystkie dane liczbowe oraz $n = 1$, dostajemy odpowiednio głębokość studni potencjału $V_0 = 1,3939 \cdot 10^{-18}$ J $= 8,71$ eV.

4 Seria 4

Zadanie 1

Rozważyć nieskończoną studnię potencjału o szerokości $2a$:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{dla } |x| < a \\ \infty & \text{dla pozostałych } x. \end{cases} \quad (4.1)$$

W chwili $t = 0$ cząstka opisana jest funkcją falową:

$$\psi(x, 0) = N \left[\cos^3\left(\frac{\pi x}{2a}\right) + \sin^3\left(\frac{\pi x}{a}\right) \right] \quad (4.2)$$

dla $|x| < a$ oraz 0 poza studnią.

(a) Znaleźć rozkład funkcji falowej $\psi(x, 0)$ w szereg funkcji własnych Hamiltonianu a następnie unormować funkcję falową.

(b) Wyznaczyć rozkład prawdopodobieństwa pomiaru energii układu znajdującego się w stanie $\psi(x, 0)$.

(c) Jakie jest prawdopodobieństwo, że pomiar energii cząstki w stanie $\psi(x, 0)$ da wartość mniejszą od $\frac{\pi^2 \hbar^2}{ma^2}$?

(d) Korzystając z wyników podpunktu (b), obliczyć średnią $\langle E \rangle$ i dyspersję σ_E^2 pomiaru energii dla stanu $\psi(x, 0)$.

(e) Obliczyć funkcję falową w chwili t . Czy wyniki z podpunktu (d) zachodzą również dla $\psi(x, t)$?

Wskazówka: Funkcję falową można przekształcić, korzystając ze wzorów trygonometrycznych:

$$\cos^3 x = \frac{1}{4}(3 \cos x + \cos(3x)), \quad \sin^3 x = \frac{1}{4}(3 \sin x - \sin(3x)). \quad (4.3)$$

Rozwiązanie:

Na początku wyznaczamy funkcje własne Hamiltonianu. W obszarze $|x| > a$ funkcja falowa jest równa zero. Z kolei w obszarze $|x| < a$ równanie Schrödingera przybiera postać

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E \psi(x), \quad (4.4)$$

gdzie z warunków zadania wynika, że $E > 0$. Równanie to zyskuje postać równania oscylatora harmonicznego,

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) = 0, \quad (4.5)$$

którego ogólnym rozwiązaniem jest funkcja

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx), \quad (4.6)$$

gdzie k wynosi

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}. \quad (4.7)$$

Warunkiem zszycia funkcji falowej dla tego typu potencjałów jest zerowanie się funkcji falowej na granicy nieskończonej ściany. Wynika stąd, że

$$\begin{cases} \psi(-a) = A \sin(-ka) + B \cos(-ka) = 0, \\ \psi(a) = A \sin(ka) + B \cos(ka) = 0. \end{cases} \quad (4.8)$$

Ponieważ funkcja sinus jest nieparzysta, zaś cosinus jest funkcją parzystą, prowadzi nas to do

$$\begin{cases} -A \sin(ka) + B \cos(ka) = 0, \\ A \sin(ka) + B \cos(ka) = 0. \end{cases} \quad (4.9)$$

Dodanie i odjęcie stronami tych dwóch równań daje

$$A \sin(ka) = 0 \wedge B \cos(ka) = 0. \quad (4.10)$$

Zauważmy, że stałe A i B nie mogą być jednocześnie równe zero, gdyż oznaczałoby to, że funkcja falowa a , co za tym idzie, prawdopodobieństwo znalezienia cząstki gdziekolwiek w przestrzeni wynoszą zero.

Podobnie, funkcje trygonometryczne sinus i cosinus od tego samego argumentu nie posiadają wspólnych miejsc zerowych. Oznacza to, że rozwiązanie (4.10) stanowi

$$(A = 0 \wedge \cos(ka) = 0) \vee (B = 0 \wedge \sin(ka) = 0). \quad (4.11)$$

Najpierw zajmijmy się pierwszym zestawem warunków. W przypadku, gdy $A = 0$ funkcja falowa (4.6) wynosi $\psi(x) = B \cos(kx)$. Z kolei cosinus zeruje się, gdy

$$ka = \frac{\pi}{2} + n\pi \Rightarrow k = \frac{\pi}{2a}(2n+1), \quad \text{gdzie } n \in \mathbb{Z}. \quad (4.12)$$

Podnosząc teraz parametr k do kwadratu i wyrażając go przez energię cząstki (4.7), otrzymujemy

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{\pi^2}{4a^2} (2n+1)^2 \Rightarrow E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2} (2n+1)^2. \quad (4.13)$$

Widzimy, że energia cząstki w zadanym potencjale może przyjmować tylko wartości dyskretne. Co więcej, występująca tu liczba $(2n+1)$ może przyjmować tylko wartości nieparzyste i oznaczając ją będziemy przez $\ell = 2n+1 = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$. Oznacza to, że możliwe energie cząstki i odpowiadające im stany własne numerować będziemy liczbą ℓ , a mianowicie $E_\ell = \frac{\pi^2 \hbar^2 \ell^2}{8ma^2}$ oraz $\psi_\ell(x) = B \cos\left(\frac{\pi \ell x}{2a}\right)$. Na pierwszy rzut oka, energie te są dwukrotnie zdegenerowane, albowiem są dwa stany $\psi_\ell(x)$ oraz $\psi_{-\ell}(x)$ o tej samej energii. Zwróćmy jednak uwagę, że $\psi_{-\ell}(x) = B \cos\left(-\frac{\pi \ell x}{2a}\right) = B \cos\left(\frac{\pi \ell x}{2a}\right) = \psi_\ell(x)$. Wynika stąd, że opisane powyżej rozwiązania równania Schrödingera są numerowane w sposób jednoznaczny przez wartości $\ell = 1, 2, 3, \dots$

Dla drugiego zestawu warunków przeprowadzamy podobne rozumowanie. W przypadku, gdy $B = 0$ funkcja falowa (4.6) wynosi $\psi(x) = A \sin(kx)$. Rozwiązaniem równania $\sin(ka) = 0$ są z kolei takie wartości k , dla których

$$ka = n\pi \Rightarrow k = \frac{\pi}{2a}(2n), \quad \text{gdzie } n \in \mathbb{Z}. \quad (4.14)$$

Powyżej wydzieliliśmy liczbę $2n$, aby podkreślić, że tym razem rozwiązania zależą od liczby parzystej. Wykonując te same przekształcenia co poprzednio, dostajemy z równania (4.14), że

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2} (2n)^2. \quad (4.15)$$

Tym razem zastępujemy liczbę $2n$ przez liczbę parzystą $\ell = 0, \pm 2, \pm 4, \dots$. W takiej sytuacji dozwolone energie cząstki oraz odpowiadające im funkcje falowe wynoszą: $E_\ell = \frac{\pi^2 \hbar^2 \ell^2}{8ma^2}$ oraz $\psi_\ell(x) = A \sin\left(\frac{\pi \ell x}{2a}\right)$. Spośród dozwolonych wartości ℓ eliminujemy $\ell = 0$, gdyż odpowiada to sytuacji, gdy funkcja falowa wynosi tożsamościowo zero w całej przestrzeni. Ponadto $\psi_{-\ell}(x) = A \sin\left(-\frac{\pi \ell x}{2a}\right) = -A \sin\left(\frac{\pi \ell x}{2a}\right) = -\psi_\ell(x)$. Skoro funkcje falowe $\psi_\ell(x)$ i $\psi_{-\ell}(x)$ różnią się jedynie o czynnik fazowy ($e^{-i\pi} = -1$), to opisują one ten sam stan cząstki. Dlatego dyskutowane tu rozwiązania numerować będziemy liczbą $\ell = 2, 4, 6, \dots$

Podsumowując, energie własne cząstki w zadanym potencjale wynoszą

$$E_\ell = \frac{\pi^2 \hbar^2 \ell^2}{8ma^2}, \quad \text{gdzie } \ell = 1, 2, 3, \dots \quad (4.16)$$

Z kolei odpowiadające im funkcje własne wynoszą zero w obszarze $|x| > a$, natomiast

$$\psi_\ell(x) = \begin{cases} A \sin\left(\frac{\pi \ell x}{2a}\right) & \text{dla } \ell = 2, 4, 6, \dots \\ B \cos\left(\frac{\pi \ell x}{2a}\right) & \text{dla } \ell = 1, 3, 5, \dots \end{cases} \quad (4.17)$$

w obszarze $|x| \leq a$. Jak widać, są to rozwiązania o ustalonej parzystości, co wiąże się z symetrią rozważanego potencjału. Aby unormować funkcje własne, musimy nałożyć warunek, że

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_\ell(x)|^2 dx = 1. \quad (4.18)$$

Dla przykładu, dla funkcji nieparzystych warunek ten sprowadza się do obliczenia następującej całki,

$$\begin{aligned} 1 &= |A|^2 \int_{-a}^a \sin^2\left(\frac{\pi \ell x}{2a}\right) dx = \frac{|A|^2}{2} \int_{-a}^a \left[1 - \cos\left(\frac{\pi \ell x}{a}\right)\right] dx \\ &= \frac{|A|^2}{2} \left[x - \frac{a}{\pi \ell} \sin\left(\frac{\pi \ell x}{a}\right) \right] \Big|_{-a}^a = |A|^2 a. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Stąd wynika, że (z dokładnością do czynnika fazowego) stała normalizacyjna wynosi $A = 1/\sqrt{a}$. Ten sam wynik dostajemy normując funkcje parzyste. Ostatecznie, unormowane funkcje własne Hamiltonianu wynoszą

$$\psi_\ell(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{\pi\ell x}{2a}\right) & \text{dla } \ell = 2, 4, 6, \dots \\ \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left(\frac{\pi\ell x}{2a}\right) & \text{dla } \ell = 1, 3, 5, \dots \end{cases} \quad (4.20)$$

dla $|x| \leq a$ oraz zero poza tym obszarem. Zauważmy, że różne funkcje odpowiadają różnym wartościom energii. W związku z tym są one też ortogonalne. Możemy zatem zapisać, że

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_\ell^*(x) \psi_j(x) dx = \delta_{\ell j}, \quad (4.21)$$

gdzie $\delta_{\ell j}$ jest deltą Kroneckera.

(a) Rozważmy funkcję falową (4.2). Posługując się wskazówką do zadania, jesteśmy w stanie przedstawić zadaną funkcję falową za pomocą stanów własnych (4.20). Mianowicie,

$$\begin{aligned} \psi(x, 0) &= \frac{N}{4} \left[3 \cos\left(\frac{\pi x}{2a}\right) + \cos\left(\frac{3\pi x}{2a}\right) + 3 \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) - \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right) \right] \\ &= \frac{N\sqrt{a}}{4} [3\psi_1(x) + 3\psi_2(x) + \psi_3(x) - \psi_6(x)]. \end{aligned} \quad (4.22)$$

Ze względu na fakt, że funkcje własne $\psi_\ell(x)$ stanowią układ ortonormalny, czego wyrazem jest wzór (4.21), powyższą funkcję falową łatwo jest unormować. Otóż,

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, 0)|^2 dx = \frac{|N|^2 a}{16} \left(9 \int_{-a}^a |\psi_1(x)|^2 dx + 9 \int_{-a}^a |\psi_2(x)|^2 dx + \int_{-a}^a |\psi_3(x)|^2 dx + \int_{-a}^a |\psi_6(x)|^2 dx \right) \\ &= \frac{|N|^2 a}{16} (9 + 9 + 1 + 1) = \frac{5|N|^2 a}{4}, \end{aligned} \quad (4.23)$$

gdzie nie wypisaliśmy pozostałych całek, gdyż wynosiły zero. Stąd wynika, że z dokładnością do czynnika fazowego stała normalizacyjna N wynosi

$$N = \frac{2}{\sqrt{5a}}. \quad (4.24)$$

Podstawiając to wyrażenie do (4.22), otrzymujemy unormowaną funkcję falową $\psi(x, 0)$,

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{2\sqrt{5}} [3\psi_1(x) + 3\psi_2(x) + \psi_3(x) - \psi_6(x)]. \quad (4.25)$$

(b) Na podstawie rozkładu funkcji falowej $\psi(x, 0)$ na stany własne Hamiltonianu (4.25) stwierdzamy, że jedynymi możliwymi wynikami pomiaru energii cząstki w stanie (4.25) są wartości E_1, E_2, E_3, E_6 . Ponadto, wartości te zostaną zmierzone z prawdopodobieństwami,

$$\begin{aligned} P(E = E_1) &= \left| \frac{3}{2\sqrt{5}} \right|^2 = \frac{9}{20}, \\ P(E = E_2) &= \left| \frac{3}{2\sqrt{5}} \right|^2 = \frac{9}{20}, \\ P(E = E_3) &= \left| \frac{1}{2\sqrt{5}} \right|^2 = \frac{1}{20}, \\ P(E = E_6) &= \left| -\frac{1}{2\sqrt{5}} \right|^2 = \frac{1}{20}. \end{aligned} \quad (4.26)$$

Prawdopodobieństwa pomiaru pozostałych wartości energii wynoszą zero. Jako test poprawności naszego wyniku, stwierdzamy, że zachodzi związek: $\sum_{\ell=1}^{\infty} P(E = E_\ell) = 1$.

(c) Biorąc pod uwagę wzór (4.16), stwierdzamy, że spośród możliwych wartości pomiaru energii na stanie $\psi(x, 0)$ jedynie E_1 i E_2 są mniejsze niż $\frac{\hbar^2 \pi^2}{ma^2}$. Stąd wynika, że szukane prawdopodobieństwo wynosi

$$P(E < \frac{\pi \hbar^2}{ma^2}) = P(E = E_1) + P(E = E_2) = \frac{9}{20} + \frac{9}{20} = \frac{9}{10}. \quad (4.27)$$

(d) Wartość oczekiwaną pomiaru energii na stanie $\psi(x, 0)$ obliczamy za pomocą wzoru

$$\begin{aligned}\langle E \rangle &= \sum_{\ell=1}^{\infty} P(E = E_{\ell}) E_{\ell} = \frac{9}{20} \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} + \frac{9}{20} \frac{4\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} + \frac{1}{20} \frac{9\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} + \frac{1}{20} \frac{36\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} \\ &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} \left[\frac{9}{20} + \frac{36}{20} + \frac{9}{20} + \frac{36}{20} \right] = \frac{9}{2} E_1.\end{aligned}\quad (4.28)$$

Z kolei nieoznaczoność pomiaru energii na stanie $\psi(x, 0)$ wynosi

$$\sigma_E = \sqrt{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}.\quad (4.29)$$

Mając to na uwadze, obliczamy

$$\begin{aligned}\langle E^2 \rangle &= \sum_{\ell} P(E = E_{\ell}) E_{\ell}^2 = \frac{9}{20} E_1^2 + \frac{9}{20} 16E_1^2 + \frac{1}{20} 81E_1^2 + \frac{1}{20} 1296E_1^2 \\ &= E_1^2 \left[\frac{9}{20} + \frac{144}{20} + \frac{81}{20} + \frac{1296}{20} \right] = \frac{153}{2} E_1^2.\end{aligned}\quad (4.30)$$

Podstawiając do wzoru (4.29) wyrażenia (4.28) oraz (4.30), dostajemy

$$\sigma_E = \frac{15}{2} E_1.\quad (4.31)$$

(e) Ponieważ Hamiltonian cząstki nie zależy od czasu, operator ewolucji czasowej, który ewoluuje rozwiązania równania Schrödingera od chwili t_0 do t wyraża się prostym wzorem, $\hat{U}(t, t_0) = e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar}$. Stąd, wartość funkcji falowej w chwili $t > 0$ daje się obliczyć jako

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= e^{-i\hat{H}t/\hbar} \psi(x, 0) = e^{-i\hat{H}t/\hbar} \left[\frac{3}{2\sqrt{5}} \psi_1(x) + \frac{3}{2\sqrt{5}} \psi_2(x) + \frac{1}{2\sqrt{5}} \psi_3(x) - \frac{1}{2\sqrt{5}} \psi_6(x) \right] \\ &= \frac{3}{2\sqrt{5}} \psi_1(x) e^{-iE_1 t/\hbar} + \frac{3}{2\sqrt{5}} \psi_2(x) e^{-iE_2 t/\hbar} + \frac{1}{2\sqrt{5}} \psi_3(x) e^{-iE_3 t/\hbar} - \frac{1}{2\sqrt{5}} \psi_6(x) e^{-iE_6 t/\hbar},\end{aligned}\quad (4.32)$$

gdzie skorzystaliśmy z faktu, że $\hat{H}\psi_{\ell}(x) = E_{\ell}\psi_{\ell}(x)$.

Aby sprawdzić, czy wyniki z podpunktu (d) zachodzą również dla $\psi(x, t)$ należy wyznaczyć rozkład prawdopodobieństwa pomiaru energii na stanie $\psi(x, t)$. W pierwszej kolejności zauważamy, że jedynymi wartościami energii, jakie można zmierzyć w chwili $t > 0$ są E_1, E_2, E_4, E_6 . Wartości te zmierzone zostaną z prawdopodobieństwami,

$$\begin{aligned}P(E = E_1) &= \left| \frac{3}{2\sqrt{5}} e^{-iE_1 t/\hbar} \right|^2 = \frac{9}{20}, \\ P(E = E_2) &= \left| \frac{3}{2\sqrt{5}} e^{-iE_2 t/\hbar} \right|^2 = \frac{9}{20}, \\ P(E = E_3) &= \left| \frac{1}{2\sqrt{5}} e^{-iE_3 t/\hbar} \right|^2 = \frac{1}{20}, \\ P(E = E_6) &= \left| -\frac{1}{2\sqrt{5}} e^{-iE_6 t/\hbar} \right|^2 = \frac{1}{20}.\end{aligned}\quad (4.33)$$

Ponieważ rozkład prawdopodobieństwa pomiaru energii jest dokładnie taki sam jak w chwili początkowej $t = 0$, wyniki z punktu (d) pozostaną bez zmian w chwili późniejszej $t > 0$.

Zadanie 2

Cząstka o masie m znajduje się w nieskończonej studni potencjału:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{dla } 0 < x < a, \\ \infty & \text{dla pozostałych } x. \end{cases}\quad (4.34)$$

W chwili $t = 0$ jej stan opisuje unormowana funkcja falowa

$$\psi(x, 0) = \sqrt{\frac{30}{a^5}} x(a - x)\quad (4.35)$$

dla $0 < x < a$ oraz 0 poza studnią. Wyznaczyć funkcję falową w chwili $t > 0$. Obliczyć rozkład prawdopodobieństwa pomiaru energii układu znajdującego się w stanie $\psi(x, t)$.

Rozwiązanie:

Aby wyznaczyć funkcję falową w chwili $t > 0$, warto najpierw znaleźć rozkład funkcji (4.35) na stany własne Hamiltonianu. Wyznaczenie tych stanów jest analogiczne do przeprowadzonego w zadaniu 1.

Ponieważ cząstka nie może wnikać w obszary $x < 0$ oraz $x > a$, przyjmujemy, że jej funkcja falowa jest tam równa zero. W obszarze $x \in [0, a]$ funkcja falowa cząstki spełnia równanie Schrödingera (4.4). Rozwiązaniem ogólnym tego równania jest (4.6), gdzie wprowadziliśmy oznaczenie (4.7). Dla nieskończonej ściany potencjału, zszywamy jedynie funkcję falową na granicy obszarów. Oznacza to, że musimy zażądać, aby funkcja (4.6) spełniała warunki: $\psi(0) = 0 = \psi(a)$. Prowadzi to do układu dwóch równań,

$$\begin{aligned}\psi(0) = B = 0 &\Rightarrow \psi(x) = A \sin(kx), \\ \psi(a) = A \sin(ka) = 0 &\Rightarrow (A = 0 \vee \sin(ka) = 0).\end{aligned}\quad (4.36)$$

Z pierwszego równania natychmiast wynika, że funkcje własne są nieparzyste, $\psi(x) = A \sin(kx)$. Drugi warunek prowadzi do dwóch możliwości. Jeżeli $A = 0$, to wtedy funkcja falowa wewnątrz nieskończonej studni, a co za tym idzie, funkcja falowa cząstki w całej przestrzeni wynosi zero. Przypadek ten odrzucamy, gdyż oznacza on, że cząstka nie istnieje nigdzie w przestrzeni. Druga możliwość prowadzi do wniosku $ka = n\pi$, gdzie w ogólności $n \in \mathbb{Z}$. Podstawiając tu oznaczenie (4.7), otrzymujemy warunek na dozwolone wartości energii cząstki,

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}. \quad (4.37)$$

Okazuje się, że możemy zawęzić obszar zmienności liczby n . Dla $n = 0$ mamy $k = 0$, co z kolei prowadzi do wniosku, że funkcja falowa jest zero w całej przestrzeni. Przypadek ten odrzucamy z naszych rozważań. Zauważamy również, że $\psi_{-n}(x) = -\psi_n(x)$ oraz, że obie funkcje $\psi_{\pm n}(x)$ należą do tej samej energii. W takiej sytuacji wystarczy przyjąć, że $n = 1, 2, 3, \dots$. Pozostaje jeszcze kwestia unormowania rozwiązań. Służy temu warunek

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(x)|^2 dx \Rightarrow 1 = |A|^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = \frac{|A|^2 a}{2}. \quad (4.38)$$

Stąd, dostajemy, że z dokładnością do czynnika fazowego $A = \sqrt{\frac{a}{2}}$. Podsumowując, energie i odpowiadające im unormowane stany własne dla cząstki w potencjale (4.34) przybierają postać

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}, \quad \psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) & \text{dla } |x| < a \\ 0 & \text{dla } |x| \geq a, \end{cases} \quad (4.39)$$

gdzie $n = 1, 2, 3, \dots$

Rozkładamy funkcję $\psi(x, 0)$ w szereg funkcji własnych Hamiltonianu,

$$\psi(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x), \quad (4.40)$$

gdzie współczynniki c_n wynoszą

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \psi(x, 0) dx. \quad (4.41)$$

Podstawiając tu funkcje własne $\psi_n(x)$ oraz funkcję $\psi(x, 0)$, dostajemy

$$c_n = \frac{2\sqrt{15}}{a^3} \int_0^a x(a-x) \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = \frac{2\sqrt{15}}{a^2} \int_0^a x \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx - \frac{2\sqrt{15}}{a^3} \int_0^a x^2 \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx. \quad (4.42)$$

Dokonujemy tutaj zamiany zmiennych $t = \frac{n\pi x}{a}$, skąd wynika, że $x = \frac{at}{n\pi}$ oraz $dx = \frac{a}{n\pi} dt$. Wtedy

$$c_n = \frac{2\sqrt{15}}{n^2 \pi^2} \int_0^{n\pi} t \sin t dt - \frac{2\sqrt{15}}{n^3 \pi^3} \int_0^{n\pi} t^2 \sin t dt. \quad (4.43)$$

Wykonując całkowanie przez części, dostajemy dla pierwszej całki

$$I_1 = \int_0^{n\pi} t \sin t dt = -t \cos t \Big|_0^{n\pi} + \int_0^{n\pi} \cos t dt = -n\pi \cos(n\pi) + \sin t \Big|_0^{n\pi} = -n\pi(-1)^n. \quad (4.44)$$

W przypadku drugiej całki,

$$\begin{aligned} I_2 &= \int_0^{n\pi} t^2 \sin t dt = -t^2 \cos t \Big|_0^{n\pi} + 2 \int_0^{n\pi} t \cos t dt = -n^2 \pi^2 (-1)^n + 2 \left[t \sin t \Big|_0^{n\pi} - \int_0^{n\pi} \sin t dt \right] \\ &= -n^2 \pi^2 (-1)^n + 2 \cos t \Big|_0^{n\pi} = -n^2 \pi^2 (-1)^n + 2((-1)^n - 1). \end{aligned} \quad (4.45)$$

Obliczone wartości całek wstawiamy do wzoru (4.43), co daje

$$c_n = \frac{4\sqrt{15}}{n^3 \pi^3} (1 - (-1)^n), \quad (4.46)$$

bądź w równoważnej postaci

$$c_n = \begin{cases} \frac{8\sqrt{15}}{n^3 \pi^3} & \text{dla } n = 1, 3, 5, \dots \\ 0 & \text{dla } n = 2, 4, 6, \dots \end{cases} \quad (4.47)$$

Ostatecznie, funkcja falowa w chwili początkowej rozpisana w bazie stanów własnych Hamiltonianu ma postać,

$$\psi(x, 0) = \frac{4\sqrt{15}}{\pi^3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^3} (1 - (-1)^n) \psi_n(x). \quad (4.48)$$

Stan cząstki w chwili czasu $t > 0$ wyznaczamy za pomocą operatora ewolucji czasowej,

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= e^{-i\hat{H}t/\hbar} \psi(0) = \frac{4\sqrt{15}}{\pi^3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^3} (1 - (-1)^n) e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(x) \\ &= \frac{4\sqrt{15}}{\pi^3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^3} (1 - (-1)^n) e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(x). \end{aligned} \quad (4.49)$$

Stąd wynika, że dokonując pomiaru energii cząstki w stanie $\psi(x, t)$ zmierzmy wartości E_n [wzór (4.39)] z prawdopodobieństwami

$$P(E = E_n) = \begin{cases} 0 & \text{dla } n = 2, 4, 6, \dots \\ \left| \frac{8\sqrt{15}}{n^3 \pi^3} e^{-iE_n t/\hbar} \right|^2 & \text{dla } n = 1, 3, 5, \dots \end{cases} = \begin{cases} 0 & \text{dla } n = 2, 4, 6, \dots \\ \frac{960}{n^6 \pi^6} & \text{dla } n = 1, 3, 5, \dots \end{cases} \quad (4.50)$$

Zadanie 3

Cząstka o masie m znajduje się w nieskończonej jednowymiarowej studni potencjału rozciągającej się od 0 do a . Wiadomo, że w chwili $t = 0$ cząstka znajduje się w stanie stacjonarnym o energii $\frac{9\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$. Nagle szerokość studni została podwojona ($a \rightarrow 2a$), przy czym stan układu nie został zaburzony. Jeśli mierzymy energię chwilę później, to jakie jest prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w stanie podstawowym, a jakie jest prawdopodobieństwo, że jest ona w pierwszym stanie wzbudzonym (przy czym chodzi o stany w studni o szerokości $2a$)?

Rozwiązanie:

W chwili początkowej $t = 0$ cząstka znajduje się w studni nieskończonej rozciągającej się od 0 do a . Zgodnie z zadaniem 2, dozwolone stany własne i energie własne cząstki dane są wzorem (4.39). Z treści zadania wynika, że cząstka w chwili $t = 0$ znajduje się w jednym ze stanów własnych (4.39), a mianowicie w stanie o energii $\frac{9\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$. Porównując tę wartość ze wzorem ogólnym na dozwolone wartości energii (4.39), stwierdzamy, że cząstka jest w drugim stanie wzbudzonym (czyli o $n = 3$). Oznacza, to że funkcja falowa cząstki zadana jest wzorem,

$$\psi(x, 0) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right) & \text{dla } x \in [0, a] \\ 0 & \text{dla } x \notin [0, a]. \end{cases} \quad (4.51)$$

W przypadku studni rozciągającej się od 0 do $2a$, rozwiązaniem zagadnienia własnego są stany własne postaci

$$\phi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{2a}\right) & \text{dla } x \in [0, 2a] \\ 0 & \text{dla } x \notin [0, 2a]. \end{cases} \quad (4.52)$$

Stany te odpowiadają energiom własnym

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{8ma^2}, \quad (4.53)$$

gdzie w równaniu (4.39) dokonaliśmy zamiany $a \rightarrow 2a$. Stan podstawowy to stan o najniższej możliwej energii, czyli o $n = 1$. Prawdopodobieństwo tego, że cząstka opisana funkcją falową (4.51) znajdzie się w stanie podstawowym $\phi_1(x)$ wynosi

$$P_1 = |\langle \phi_1 | \psi \rangle|^2 \quad (4.54)$$

i sprowadza się do obliczenia elementu macierzowego $\langle \phi_1 | \psi \rangle$,

$$\begin{aligned} \langle \phi_1 | \psi \rangle &= \frac{\sqrt{2}}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{\pi x}{2a}\right) \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right) dx = \frac{1}{\sqrt{2}a} \int_0^a \left[\cos\left(\frac{5\pi x}{2a}\right) - \cos\left(\frac{7\pi x}{2a}\right) \right] dx \\ &= \frac{\sqrt{2}}{\pi} \left[\frac{1}{5} \sin\left(\frac{5\pi x}{2a}\right) - \frac{1}{7} \sin\left(\frac{7\pi x}{2a}\right) \right] \Big|_0^a = \frac{12\sqrt{2}}{35\pi}. \end{aligned} \quad (4.55)$$

Stąd, szukane prawdopodobieństwo wynosi

$$P_1 = 2 \left(\frac{12}{35\pi} \right)^2. \quad (4.56)$$

Z kolei aby wyznaczyć prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w pierwszym stanie wzbudzonym (czyli w stanie o $n = 2$), obliczamy najpierw

$$\begin{aligned} \langle \phi_2 | \psi \rangle &= \frac{\sqrt{2}}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right) dx = \frac{1}{\sqrt{2}a} \int_0^a \left[\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) - \cos\left(\frac{4\pi x}{a}\right) \right] dx \\ &= \frac{\sqrt{2}}{\pi} \left[\frac{1}{2} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) - \frac{1}{4} \sin\left(\frac{4\pi x}{a}\right) \right] \Big|_0^a = 0. \end{aligned} \quad (4.57)$$

Zatem

$$P_2 = |\langle \phi_2 | \psi \rangle|^2 = 0. \quad (4.58)$$

Zadanie 4

Znaleźć stany i energie własne cząstki o masie m umieszczonej w potencjale:

$$V(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 & \text{dla } x > 0, \\ \infty & \text{dla pozostałych } x. \end{cases} \quad (4.59)$$

Rozwiązanie:

Zauważmy, że dla dodatnich wartości x zadanie sprowadza się do rozwiązania równania Schrödingera dla potencjału oscylatora harmonicznego. W wyniku otrzymamy więc dobrze znane funkcje własne oscylatora harmonicznego o częstości ω ,

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) e^{-m\omega x^2 / 2\hbar}, \quad (4.60)$$

gdzie H_n oznacza n -ty wielomian Hermite'a, zaś $n = 0, 1, 2, 3, \dots$. Rozwiązania te obowiązują dla $x > 0$. Z kolei dla pozostałych wartości x , funkcja falowa wynosi zero. Ze względu na warunek zszycia funkcji falowej na granicy obszarów (tj. dla $x = 0$), wnioskujemy, że spośród wszystkich funkcji (4.60) dobrymi rozwiązaniami są tylko te, dla których $\psi_n(0) = 0$. Warunek ten spełniony jest jedynie dla n nieparzystych, dla których $H_n(0) = 0$.

Ostatecznie, rozwiązaniem problemu są stany własne

$$\phi_n(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_n(x) & \text{dla } x > 0, \\ 0 & \text{dla pozostałych } x, \end{cases} \quad (4.61)$$

gdzie $\psi_n(x)$ dane jest wzorem (4.60) zaś dodatkowy czynnik $1/\sqrt{2}$ pojawia się z unormowania funkcji falowej. Z kolei odpowiadające im energie własne wynoszą

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (4.62)$$

gdzie należy pamiętać, że $n = 1, 3, 5, \dots$

Zadanie 5

Obliczyć współczynnik transmisji T dla cząstki o energii $E > 0$ padającej na studnię potencjału:

$$V(x) = -V_0\delta(x), \quad V_0 > 0. \quad (4.63)$$

Rozwiązanie:

Funkcję falową dla $x < 0$ oznaczajmy będziemy jako $\psi_<(x)$. Dla zadanego potencjału (4.63) spełnia ona równanie Schrödingera

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_< = E\psi_<, \quad (4.64)$$

gdzie zgodnie z warunkami zadania $E > 0$. Powstałe równanie różniczkowe możemy przepisać jako

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi_< + k^2 \psi_< = 0, \quad (4.65)$$

gdzie liczba falowa k wynosi

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}.$$

Przy okazji zauważmy, że dla $x > 0$ odpowiednia funkcja falowa cząstki $\psi_>(x)$ spełnia dokładnie to samo równanie (4.65). Stąd, wyznaczamy rozwiązanie

$$\begin{cases} \psi_<(x) = Ae^{-ikx} + Be^{ikx} \\ \psi_>(x) = Ce^{-ikx} + De^{ikx}, \end{cases} \quad (4.66)$$

gdzie A, B, C, D są nieznanymi współczynnikami.

Założmy, że cząstka pada na potencjał z lewej strony. W takiej sytuacji przyjmujemy, że $C = 0$, gdyż dla $x > 0$ brak jest fali odbitej. To oznacza, że funkcja falowa jest postaci

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{-ikx} + Be^{ikx} & \text{dla } x < 0 \\ De^{ikx} & \text{dla } x > 0. \end{cases} \quad (4.67)$$

W dalszym ciągu nakładamy na powyższe rozwiązanie warunki zszycia:

$$\psi_>(0) = \psi_<(0) \quad (4.68)$$

oraz

$$\left. \frac{d\psi_>}{dx} \right|_{0+} - \left. \frac{d\psi_<}{dx} \right|_{0-} = \frac{-2mV_0}{\hbar^2} \psi(0). \quad (4.69)$$

Po podstawieniu tu funkcji falowej (4.67), dostajemy układ równań,

$$A + B = D, \quad (4.70)$$

$$ikD + ikA - ikB = \frac{2mV_0}{\hbar^2} D, \quad (4.71)$$

który rozwiązujemy ze względu na iloraz D/B . W tym celu z pierwszego równania wyznaczamy $A = D - B$ i podstawiamy do drugiego z nich. Daje to nam równanie,

$$ikD - ikB = \frac{mV_0}{\hbar^2}D, \quad (4.72)$$

gdzie po podzieleniu przez B dostajemy

$$\frac{D}{B} = \left[1 + \frac{mV_0}{ik\hbar^2} \right]^{-1}. \quad (4.73)$$

Podobnie jak w zadaniu 4 z serii 3, wyznaczamy współczynnik transmisji cząstki T przez studnię potencjału delta. Okazuje się, że wynosi on

$$T = \left| \frac{D}{B} \right|^2. \quad (4.74)$$

Podstawiając tu wynik (4.73), dostajemy

$$T = \frac{1}{\left| 1 + \frac{mV_0}{ik\hbar^2} \right|^2} = \frac{1}{1 + \frac{m^2V_0^2}{k^2\hbar^4}} = \frac{1}{1 + \frac{mV_0^2}{2\hbar^2E}}, \quad (4.75)$$

gdzie w ostatnim kroku podstawiliśmy definicję liczby falowej k .

5 Seria 5

Zadanie 1

Dany jest układ fizyczny w trójwymiarowej przestrzeni wektorowej z bazą ortonormalną $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$ oraz dwa operatory hermitowskie – Hamiltonian $\hat{H}$ oraz $\hat{A}$. Obserwable te zdefiniowane są następującymi wzorami:

$$\begin{aligned}\hat{H}|u_1\rangle &= 2E_0|u_1\rangle - E_0|u_3\rangle, \\ \hat{H}|u_2\rangle &= E_0|u_2\rangle, \\ \hat{H}|u_3\rangle &= -E_0|u_1\rangle - 2E_0|u_3\rangle, \\ \hat{A} &= a(4|u_1\rangle\langle u_1| + 2|u_2\rangle\langle u_2| - 2|u_3\rangle\langle u_3|),\end{aligned}\tag{5.1}$$

gdzie $E_0 > 0$ i $a < 0$. W chwili t_0 dokonano pomiaru energii i otrzymano największą z możliwych wartości, zaś w chwili $t_1 > t_0$ zmierzono wielkość reprezentowaną operatorem $\hat{A}$ i otrzymano najmniejszą z możliwych wartości.

1. Podać macierze reprezentujące operatory $\hat{H}$ i $\hat{A}$.
2. Podać ewolucję stanu na odcinku czasu (t_0, t_1) .
3. Podać postać stanu tuż po dokonaniu pomiaru wielkości $\hat{A}$, oraz ewolucję czasową tego stanu dla $t > t_1$.

Każdy ze stanów w punktach 2 i 3 wyrazić w bazie stanów własnych Hamiltonianu.

Rozwiązanie:

1. Macierz Hamiltonianu w bazie $\{u_i\}_{i=1,2,3}$ ma następującą postać

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} 2E_0 & 0 & -E_0 \\ 0 & E_0 & 0 \\ -E_0 & 0 & -2E_0 \end{bmatrix},\tag{5.2}$$

natomiast macierz operatora $\hat{A}$ w tej bazie wynosi

$$\hat{A} = \begin{bmatrix} 4a & 0 & 0 \\ 0 & 2a & 0 \\ 0 & 0 & -2a \end{bmatrix}.\tag{5.3}$$

2. W chwili t_0 układ jest w stanie własnym Hamiltonianu o największej wartości własnej. Aby wyznaczyć ten stan, musimy obliczyć wartości i wektory własne macierzy (5.2).

Z równań (5.1) widać, że jedną z wartości własnych oraz odpowiadającym jej wektorem własnym są

$$\lambda_2 = E_0, \quad |v_2\rangle = |u_2\rangle,\tag{5.4}$$

gdzie $|v_i\rangle$ oznaczać będą wektory własne Hamiltonianu. W przypadku pozostałych wartości własnych dostajemy

$$\det \begin{bmatrix} 2E_0 - \lambda & -E_0 \\ -E_0 & -2E_0 - \lambda \end{bmatrix} = \lambda^2 - 5E_0^2 = 0 \implies \lambda_1 = -\sqrt{5}E_0, \quad \lambda_3 = \sqrt{5}E_0.\tag{5.5}$$

Związane z tymi wartościami wektory własne rozpinają jądra

$$\ker \begin{bmatrix} 2 + \sqrt{5} & -1 \\ -1 & -2 + \sqrt{5} \end{bmatrix} \implies |v_1\rangle = (-2 + \sqrt{5})|u_1\rangle + |u_3\rangle,\tag{5.6}$$

$$\ker \begin{bmatrix} 2 - \sqrt{5} & -1 \\ -1 & -2 - \sqrt{5} \end{bmatrix} \implies |v_3\rangle = (-2 - \sqrt{5})|u_1\rangle + |u_3\rangle.\tag{5.7}$$

Wektory bazy $|v_i\rangle$ są ortogonalne, bo $\langle v_1|v_3\rangle = -(\sqrt{5}-2)(\sqrt{5}+2)+1=0$ i oczywiście $\langle v_2|v_1\rangle = \langle v_2|v_3\rangle = 0$. Najlepiej korzystać z wektorów ortonormalnych, więc obliczamy $\|v_1\| = \sqrt{(\sqrt{5}-2)^2+1} = \sqrt{10-2\sqrt{5}}$, $\|v_2\| = 1$, $\|v_3\| = \sqrt{10+2\sqrt{5}}$. Niech unormowane wektory $\{v_i\}$ tworzą bazę $\{e_i\}$, tzn. że $|e_i\rangle = |v_i\rangle/\|v_i\|$ dla $i = 1, 2, 3$.

Z powyższego wynika, że w chwili t_0 układ jest w stanie $|\psi(t_0)\rangle = |e_3\rangle$ o energii $\sqrt{5}E_0$. Ewolucja czasowa tego stanu od chwili t_0 do chwili t_1 zachodzi zgodnie ze wzorem

$$|\psi(t_1)\rangle = e^{-i\hat{H}(t_1-t_0)/\hbar} |\psi(t_0)\rangle = e^{-i\hat{H}(t_1-t_0)/\hbar} |e_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2(5+\sqrt{5})}} \exp\left(-\frac{i\sqrt{5}E_0}{\hbar}(t-t_0)\right) |v_3\rangle. \quad (5.8)$$

3. Jak widać z (5.3), macierz operatora $\hat{A}$ jest diagonalna w bazie wektorów $\{u_i\}$. Oznacza to, że wektory te są wektorami własnymi tej macierzy, zaś wyrazy diagonalne to odpowiadające im wartości własne. Rozumując analogicznie jak w podpunkcie 2 wiadomo, że w chwili t_1 zmierzono najmniejszą wartość własną operatora $\hat{A}$, czyli $4a$ (bo $a < 0$), natomiast stan bezpośrednio po pomiarze to $|\psi(t_1)\rangle = |u_1\rangle$. Zapiszmy w ogólności

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}(t-t_1)/\hbar} |\psi(t_1)\rangle = e^{-i\hat{H}(t-t_1)/\hbar} |u_1\rangle. \quad (5.9)$$

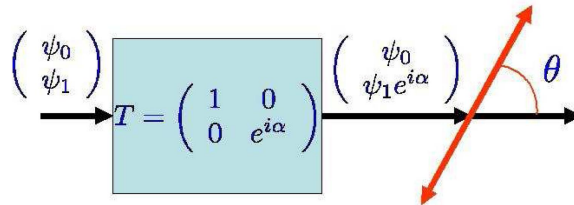
Wiadomo jak $\hat{H}$ działa na wektory swojej bazy własnej, więc zapisujemy w niej $|u_1\rangle$ i normujemy. Zatem ostatecznie ewolucja stanu w czasie $t > t_1$ przyjmuje postać:

$$|\psi(t)\rangle = 2 \left(\frac{1}{\sqrt{2(5-\sqrt{5})}} \exp\left(\frac{i\sqrt{5}E_0}{\hbar}(t-t_1)\right) |v_1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2(5+\sqrt{5})}} \exp\left(-\frac{i\sqrt{5}E_0}{\hbar}(t-t_1)\right) |v_3\rangle \right). \quad (5.10)$$

Zadanie 2

Na rysunku 2 przedstawiono element optyczny, który przesuwa fazę składowej ψ_1 polaryzacji o kąt α oraz polaryzator nachylony do osi optycznej pod kątem θ .

(a) Zakładając wyjściowe stany polaryzacji odpowiednio: $|45^\circ\rangle$, $|135^\circ\rangle$, $|L\rangle$ oraz $|R\rangle$, znaleźć postać stanu



Rysunek 2: Element optyczny.

polaryzacji, tuż za elementem optycznym, dla następujących faz α :

- $\alpha = \frac{2\pi}{4} = \frac{\pi}{2}$. Taki element optyczny nazywa się w optyce ćwierć-falówką (ćwierć okresu).
- $\alpha = \frac{2\pi}{2} = \pi$. Taki element optyczny nazywa się w optyce pół-falówką (pół okresu).

(b) Dla wszystkich przykładów stanów wyjściowych i fazy, przedstawionych w poprzednim pytaniu, obliczyć odpowiednie prawdopodobieństwa, że polaryzator zmierzy polaryzację w kierunku $|\theta\rangle = \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix}$.

Rozwiązanie:

1. Rozważmy stan polaryzacji światła $|45^\circ\rangle = \begin{pmatrix} \cos 45^\circ \\ \sin 45^\circ \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$.

Za elementem optycznym $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_0 \\ \psi_1 e^{i\alpha} \end{pmatrix}$, skąd wynika, że

- $\alpha = \frac{\pi}{2}$, $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\frac{\pi}{2}} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$

Prawdopodobieństwo pomiaru polaryzacji $|\theta\rangle$ przez polaryzator wynosi w tym przypadku,

$$P_\theta = |\langle\theta|\psi\rangle|^2 = \frac{1}{2} |\cos\theta + i\sin\theta|^2 = \frac{1}{2} (\cos^2\theta + \sin^2\theta) = \frac{1}{2}. \quad (5.11)$$

- $\alpha = \pi$, $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\pi} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$

$$P_\theta = |\langle\theta|\psi\rangle|^2 = \frac{1}{2} |\cos\theta - \sin\theta|^2 = \sin^2(45^\circ - \theta). \quad (5.12)$$

2. Rozważmy stan polaryzacji światła $|135^\circ\rangle = \begin{pmatrix} \cos 135^\circ \\ \sin 135^\circ \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}$.

- $\alpha = \frac{\pi}{2}$, $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ e^{i\frac{\pi}{2}} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ i \end{pmatrix}$

$$P_\theta = |\langle\theta|\psi\rangle|^2 = \frac{1}{2} |-\cos\theta + i\sin\theta|^2 = \frac{1}{2} (\cos^2\theta + \sin^2\theta) = \frac{1}{2}. \quad (5.13)$$

- $\alpha = \pi$, $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ e^{i\pi} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix}$

$$P_\theta = |\langle\theta|\psi\rangle|^2 = \frac{1}{2} |-\cos\theta - \sin\theta|^2 = \sin^2(135^\circ - \theta). \quad (5.14)$$

3. Stan polaryzacyjny światła opisujący polaryzującą kołową lewoskrętną ma postać $|L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$.

- $\alpha = \frac{\pi}{2}$, $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -ie^{i\frac{\pi}{2}} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$

$$P_\theta = |\langle\theta|\psi\rangle|^2 = \frac{1}{2} |\cos\theta + \sin\theta|^2 = \sin^2(135^\circ - \theta). \quad (5.15)$$

- $\alpha = \pi$, $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -ie^{i\pi} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$

$$P_\theta = |\langle\theta|\psi\rangle|^2 = \frac{1}{2} |\cos\theta + i\sin\theta|^2 = \frac{1}{2} (\cos^2\theta + \sin^2\theta) = \frac{1}{2}. \quad (5.16)$$

4. Stan polaryzacyjny światła opisujący polaryzującą kołową prawoskrętną ma postać $|R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$.

- $\alpha = \frac{\pi}{2}$, $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ ie^{i\frac{\pi}{2}} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$

$$P_\theta = |\langle\theta|\psi\rangle|^2 = \frac{1}{2} |\cos\theta - \sin\theta|^2 = \sin^2(45^\circ - \theta). \quad (5.17)$$

- $\alpha = \pi$, $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ ie^{i\pi} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$

$$P_\theta = |\langle\theta|\psi\rangle|^2 = \frac{1}{2} |\cos\theta - i\sin\theta|^2 = \frac{1}{2} (\cos^2\theta + \sin^2\theta) = \frac{1}{2}. \quad (5.18)$$

Zadanie 3

Wykazać, że

$$e^{t\hat{A}}\hat{B}e^{-t\hat{A}} = \hat{B} + t[\hat{A}, \hat{B}] + \frac{t^2}{2!}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \frac{t^3}{3!}[\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]] + \dots \quad (5.19)$$

Korzystając z tej równości pokazać, że dla operatorów momentu pędu zachodzi:

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{L}_x\theta\right)\hat{L}_z\exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{L}_x\theta\right) = \hat{L}_z\cos\theta - \hat{L}_y\sin\theta. \quad (5.20)$$

Rozwiązanie:

Rozważmy funkcję postaci

$$f(t) = e^{t\hat{A}}\hat{B}e^{-t\hat{A}}. \quad (5.21)$$

Znajdźmy postać pochodnych tej funkcji po parametrze t i ich wartość dla $t = 0$:

$$\begin{aligned} f(0) &= \hat{B} \\ f'(t) &= \hat{A}e^{t\hat{A}}\hat{B}e^{-t\hat{A}} - e^{t\hat{A}}\hat{B}e^{-t\hat{A}}\hat{A} = e^{t\hat{A}}\hat{A}\hat{B}e^{-t\hat{A}} - e^{t\hat{A}}\hat{B}\hat{A}e^{-t\hat{A}} = e^{t\hat{A}}[\hat{A}, \hat{B}]e^{-t\hat{A}} \\ f'(0) &= [\hat{A}, \hat{B}] \\ f''(t) &= \hat{A}e^{t\hat{A}}[\hat{A}, \hat{B}]e^{-t\hat{A}} - e^{t\hat{A}}[\hat{A}, \hat{B}]e^{-t\hat{A}}\hat{A} = e^{t\hat{A}}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]e^{-t\hat{A}} \\ f''(0) &= [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] \\ f'''(t) &= \hat{A}e^{t\hat{A}}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]e^{-t\hat{A}} - e^{t\hat{A}}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]e^{-t\hat{A}}\hat{A} = e^{t\hat{A}}[\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]]e^{-t\hat{A}} \\ f'''(0) &= [\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]] \end{aligned} \quad (5.22)$$

Możemy teraz rozwinąć $f(t)$ w szereg Taylora wokół $t = 0$,

$$f(t) = f(0) + tf'(0) + \frac{t^2}{2!}f''(0) + \frac{t^3}{3!}f'''(0) + \dots \quad (5.23)$$

i podstawić tu wyznaczone w (5.22) wartości pochodnych,

$$e^{t\hat{A}}\hat{B}e^{-t\hat{A}} = \hat{B} + t[\hat{A}, \hat{B}] + \frac{t^2}{2!}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \frac{t^3}{3!}[\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]] + \dots \quad (5.24)$$

W ten sposób otrzymujemy poszukiwaną zależność.

Aby udowodnić wzór dla momentów pędu (5.20), przyjmijmy, że $t = -\frac{i}{\hbar}\theta$, $\hat{A} = \hat{L}_x$ i $\hat{B} = \hat{L}_z$. Policzmy kilka pierwszych potęg i komutatorów:

$$t = -\frac{i\theta}{\hbar}, t^2 = -\frac{\theta^2}{\hbar^2}, t^3 = \frac{i\theta^3}{\hbar^3}, t^4 = \frac{\theta^4}{\hbar^4}, t^5 = -\frac{i\theta^5}{\hbar^5}, t^6 = -\frac{\theta^6}{\hbar^6} \dots \quad (5.25)$$

oraz

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{B}] &= [\hat{L}_x, \hat{L}_z] = -i\hbar\hat{L}_y, & [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] &= [\hat{L}_x, -i\hbar\hat{L}_y] = \hbar^2\hat{L}_z, \\ [\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]] &= -i\hbar^3\hat{L}_y, & [\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]]] &= \hbar^4\hat{L}_z, \\ [\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]]]] &= -i\hbar^5\hat{L}_y, \\ [\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]]]]] &= \hbar^6\hat{L}_z \dots \end{aligned} \quad (5.26)$$

Wstawiamy je teraz do tożsamości (5.24) i zauważamy, że odtwarzają nam się rozwinięcia w szereg funkcji

$\cos \theta$ i $\sin \theta$:

$$\begin{aligned}
& \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{L}_x\theta\right)\hat{L}_z\exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{L}_x\theta\right) \\
&= \hat{L}_z - i\hbar\hat{L}_y\left(-\frac{i\theta}{\hbar}\right) - \frac{1}{2!}\hbar^2\hat{L}_z\left(\frac{\theta^2}{\hbar^2}\right) - \frac{1}{3!}i\hbar^3\hat{L}_y\left(\frac{i\theta^3}{\hbar^3}\right) \\
&+ \frac{1}{4!}\hbar^4\hat{L}_z\left(\frac{\theta^4}{\hbar^4}\right) - \frac{1}{5!}i\hbar^5\hat{L}_y\left(-\frac{i\theta^5}{\hbar^5}\right) - \frac{1}{6!}\hbar^6\hat{L}_z\frac{\theta^6}{\hbar^6}\dots \\
&= \hat{L}_z\left(1 - \frac{\theta^2}{2!} + \frac{\theta^4}{4!} - \frac{\theta^6}{6!} + \dots\right) - \hat{L}_y\left(\theta - \frac{\theta^3}{3!} + \frac{\theta^5}{5!} - \dots\right) \\
&= \hat{L}_z \cos \theta - \hat{L}_y \sin \theta.
\end{aligned} \tag{5.27}$$

Tym samym dowiedliśmy równania (5.20).

Zadanie 4

(a) Korzystając z równania Ehrenfesta wykazać, że dla cząstki swobodnej o masie m operator pchnięcia Galileuszowskiego, $\hat{G} = t\hat{p} - m\hat{x}$, jest stałą ruchu.

(b) Wykazać, że

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar}v\hat{G}\right)\frac{\hat{p}^2}{2m}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}v\hat{G}\right) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + v\hat{p} + \frac{mv^2}{2}. \tag{5.28}$$

Rozwiązanie:

(a) Korzystając z równania Ehrenfesta możemy obliczyć zmianę w czasie wartości oczekiwanej operatora $\hat{G}$. Mianowicie,

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{G}\rangle = \left\langle\frac{\partial}{\partial t}\hat{G}\right\rangle - \frac{i}{\hbar}\langle[\hat{G}, \hat{H}]\rangle, \tag{5.29}$$

gdzie Hamiltonian w przypadku cząstki swobodnej wynosi $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$. Podstawiając tu postać operatora $\hat{G}$, dostajemy

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{G}\rangle = \langle\hat{p}\rangle + \frac{i}{2\hbar}\langle[\hat{x}, \hat{p}^2]\rangle = 0, \tag{5.30}$$

gdzie skorzystaliśmy z komutatora $[\hat{x}, \hat{p}^2] = \hat{p}[\hat{x}, \hat{p}] + \hat{p}[\hat{x}, \hat{p}] = 2i\hbar\hat{p}$. Okazało się więc, że wartość oczekiwana operatora pchnięcia Galileuszowskiego jest stała. Jako że nic nie zakładamy o postaci stanu, na którym liczymy wartość oczekiwaną, mamy

$$\forall_\psi : \langle\psi|\hat{G}|\psi\rangle = \text{const} \tag{5.31}$$

i w takim sensie $\langle\hat{G}\rangle$ jest stałą ruchu.

(b) Rozpisujemy lewą stronę dowodzonej równości korzystając ze wzoru (5.19),

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar}v\hat{G}\right)\frac{\hat{p}^2}{2m}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}v\hat{G}\right) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{iv}{\hbar}\left[\hat{G}, \frac{\hat{p}^2}{2m}\right] + \frac{1}{2}\left(\frac{iv}{\hbar}\right)^2\left[\hat{G}, \left[\hat{G}, \frac{\hat{p}^2}{2m}\right]\right]. \tag{5.32}$$

W szeregu tym pozostają jedynie 3 wyrazy, ponieważ drugi komutator jest stałą. Dokładniej,

$$\left[\hat{G}, \frac{\hat{p}^2}{2m}\right] = \left[t\hat{p} - m\hat{x}, \frac{\hat{p}^2}{2m}\right] = \left[t\hat{p} - m\hat{x}, \frac{\hat{p}^2}{2m}\right] = -\frac{1}{2}[\hat{x}, \hat{p}^2] = -i\hbar\hat{p} \tag{5.33}$$

oraz

$$\left[\hat{G}, \left[\hat{G}, \frac{\hat{p}^2}{2m}\right]\right] = [t\hat{p} - m\hat{x}, -i\hbar\hat{p}] = im\hbar[\hat{x}, \hat{p}] = -m\hbar^2. \tag{5.34}$$

Podstawiając wyliczone wartości komutatorów i upraszczając stałe otrzymujemy rzeczywiście,

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar}v\hat{G}\right)\frac{\hat{p}^2}{2m}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}v\hat{G}\right) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + v\hat{p} + \frac{mv^2}{2}. \tag{5.35}$$

Zadanie 5

Obliczyć komutator $[\hat{L}^2, \hat{r}^2]$ i sformułować odpowiednią zasadę nieoznaczoności.

Rozwiązanie:

Zauważmy, że

$$[\hat{L}_i, \hat{r}^2] = 0. \quad (5.36)$$

Sprytny dowód tego faktu korzysta z faktu, że orbitalny moment pędu jest generatorem obrotu. Operator obrotu o kąt θ wokół osi i definiuje się jako

$$\hat{U} = \exp(-i\theta\hat{L}_i/\hbar). \quad (5.37)$$

W działaniu na $\hat{r}^2$ daje on oczywiście skalar,

$$\hat{U}\hat{r}^2\hat{U}^\dagger = \hat{r}^2. \quad (5.38)$$

Różniczkując to równanie po kącie θ , dostajemy

$$\hat{U}(-i\hat{L}_i\hat{r}^2 + i\hat{r}^2\hat{L}_i)\hat{U}^\dagger = 0, \quad (5.39)$$

co oznacza, że

$$\hat{U}[\hat{L}_i, \hat{r}^2]\hat{U}^\dagger = 0. \quad (5.40)$$

Skoro zachodzi to dla dowolnego θ , to rzeczywiście $[\hat{L}_i, \hat{r}^2] = 0$. Zatem

$$[\hat{L}^2, \hat{r}^2] = \hat{L}_i[\hat{L}_i, \hat{r}^2] + [\hat{L}_i, \hat{r}^2]\hat{L}_i = 0. \quad (5.41)$$

W takiej sytuacji, zasada nieoznaczoności dla danych operatorów wyglądają następująco

$$\Delta^2 \hat{L}^2 \Delta^2 \hat{r}^2 = 0 \quad (5.42)$$

i oznacza, że obserwable $\hat{L}^2$ oraz $\hat{r}^2$ można zmierzyć jednocześnie z dowolnie małą dokładnością.

6 Seria 6

Zadanie 1

Oblicz bądź udowodnij:

1. $[\hat{a}, (\hat{a}^\dagger)^2], [\hat{a}^2, (\hat{a}^\dagger)^2],$
2. $[\hat{a}, (\hat{a}^\dagger)^n] = n(\hat{a}^\dagger)^{n-1}, [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^n] = -n\hat{a}^{n-1},$
3. $[\hat{a}^\dagger \hat{a}, (\hat{a}^\dagger)^m],$
4. $e^{x\hat{a}} \hat{a}^\dagger e^{-x\hat{a}} = \hat{a}^\dagger + x, e^{x\hat{a}^\dagger} \hat{a} e^{-x\hat{a}^\dagger} = \hat{a} - x.$

Rozwiązanie:

1. W rozwiązaniu przydatna jest równość:

$$[\hat{A}, \hat{B} \cdot \hat{C}] = \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C}. \quad (6.1)$$

Korzystając z niej oraz z faktu, że $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$, dostajemy

$$[\hat{a}, \hat{a}^{\dagger 2}] = [\hat{a}, \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] + [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] \hat{a}^\dagger = 2\hat{a}^\dagger. \quad (6.2)$$

Z kolei

$$[\hat{a}^2, \hat{a}^{\dagger 2}] = \hat{a} [\hat{a}, \hat{a}^{\dagger 2}] + [\hat{a}, \hat{a}^{\dagger 2}] \hat{a} = 2\hat{a}\hat{a}^\dagger + 2\hat{a}^\dagger \hat{a}, \quad (6.3)$$

gdzie skorzystaliśmy z wyniku (6.2).

2a. Równość $[\hat{a}, \hat{a}^{\dagger n}] = n(\hat{a}^\dagger)^{n-1}$ udowodnimy indukcyjnie.

Dla $n = 1$,

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \cdot (\hat{a}^\dagger)^0 = 1, \quad (6.4)$$

a zatem badany wzór jest spełniony.

W kroku indukcyjnym, zakładamy że wzór jest prawdziwy dla n , tzn. że zachodzi

$$[\hat{a}, \hat{a}^{\dagger n}] = n(\hat{a}^\dagger)^{n-1}, \quad (6.5)$$

natomiast musimy udowodnić, że wynika stąd, iż wzór ten jest prawdziwy dla $n + 1$. Innymi słowy, nasza teza indukcyjna jest następująca

$$[\hat{a}, \hat{a}^{\dagger(n+1)}] = (n+1)(\hat{a}^\dagger)^n. \quad (6.6)$$

Sprawdźmy, czy wzór jest prawdziwy dla $n + 1$,

$$[\hat{a}, \hat{a}^{\dagger(n+1)}] = [\hat{a}, \hat{a}^{\dagger n} \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^{\dagger n} [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] + [\hat{a}, \hat{a}^{\dagger n}] \hat{a}^\dagger = \hat{a}^{\dagger n} + n(\hat{a}^\dagger)^{n-1} \hat{a}^\dagger = (n+1)\hat{a}^{\dagger n}. \quad (6.7)$$

Ponieważ wzór jest prawdziwy dla $n = 1$ oraz zachodzi krok indukcyjny, to dowodzi prawdziwości naszego wzoru dla dowolnych n .

2b. Podobnie wygląda dowód równości $[\hat{a}^\dagger, \hat{a}^n] = -n\hat{a}^{n-1}$.

Dla $n = 1$,

$$[\hat{a}^\dagger, \hat{a}] = -1, \quad (6.8)$$

a zatem równość jest spełniona. Zakładamy następnie, że wzór jest spełniony dla n ,

$$[\hat{a}^\dagger, \hat{a}^n] = -n\hat{a}^{n-1}, \quad (6.9)$$

natomiast dla $n + 1$ stawiamy tezę, że

$$[\hat{a}^\dagger, \hat{a}^{n+1}] = -(n+1)\hat{a}^n. \quad (6.10)$$

Wychodząc od lewej strony tej równości, dostajemy

$$[\hat{a}^\dagger, \hat{a}^{n+1}] = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^n \hat{a}] = \hat{a}^n [\hat{a}^\dagger, \hat{a}] + [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^n] \hat{a} = -\hat{a}^n - n\hat{a}^{n-1} \hat{a} = -(n+1)\hat{a}^n, \quad (6.11)$$

co kończy dowód indukcyjny.

3.

$$[\hat{a}^\dagger \hat{a}, (\hat{a}^\dagger)^m] = \hat{a}^\dagger [\hat{a}, (\hat{a}^\dagger)^m] + [\hat{a}^\dagger, (\hat{a}^\dagger)^m] \hat{a} = \hat{a}^\dagger m (\hat{a}^\dagger)^{m-1} = m (\hat{a}^\dagger)^m, \quad (6.12)$$

gdzie skorzystaliśmy ze wzoru (6.6).

4. Aby dowieść równość $\exp(x\hat{a})\hat{a}^\dagger \exp(-x\hat{a}) = \hat{a}^\dagger + x$ rozwińmy eksponensy po lewej stronie równania w szereg Taylora. Dostajemy wówczas,

$$\begin{aligned} & \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(x\hat{a})^n}{n!} \right) \hat{a}^\dagger \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-x\hat{a})^n}{n!} \right) \\ &= \left(1 + \frac{x\hat{a}}{1} + \frac{x^2\hat{a}^2}{2} + \frac{x^3\hat{a}^3}{6} + \dots \right) \hat{a}^\dagger \left(1 - \frac{x\hat{a}}{1} + \frac{x^2\hat{a}^2}{2} - \frac{x^3\hat{a}^3}{6} + \dots \right) \\ &= \hat{a}^\dagger + x(\hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a}) + \frac{1}{2}x^2(\hat{a}^\dagger\hat{a}^2 - 2\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^2\hat{a}^\dagger) + \dots \\ &= \hat{a}^\dagger + x[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] + \frac{1}{2}x^2[\hat{a}, [\hat{a}, \hat{a}^\dagger]] + \frac{1}{6}x^3[\hat{a}, [\hat{a}, [\hat{a}, \hat{a}^\dagger]]] + \dots = \hat{a}^\dagger + x, \end{aligned} \quad (6.13)$$

gdzie skorzystaliśmy z faktu, że $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$. Tym samym udowodniliśmy równość.

Podobnie w celu udowodnienia że $\exp(x\hat{a}^\dagger)\hat{a}\exp(-x\hat{a}^\dagger) = \hat{a} - x$, rozwińmy eksponensy w szeregi i pogrupujmy wyrazy

$$\begin{aligned} & \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(x\hat{a}^\dagger)^n}{n!} \right) \hat{a} \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-x\hat{a}^\dagger)^n}{n!} \right) \\ &= \left(1 + \frac{x\hat{a}^\dagger}{1} + \frac{x^2(\hat{a}^\dagger)^2}{2} + \frac{x^3(\hat{a}^\dagger)^3}{6} + \dots \right) \hat{a} \left(1 - \frac{x\hat{a}^\dagger}{1} + \frac{x^2(\hat{a}^\dagger)^2}{2} - \frac{x^3(\hat{a}^\dagger)^3}{6} + \dots \right) \\ &= \hat{a} + x(\hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^\dagger) + \frac{1}{2}x^2(\hat{a}(\hat{a}^\dagger)^2 - 2\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger + (\hat{a}^\dagger)^2\hat{a}) + \dots \\ &= \hat{a} + x[\hat{a}^\dagger, \hat{a}] + \frac{1}{2}x^2[\hat{a}^\dagger, [\hat{a}^\dagger, \hat{a}]] + \frac{1}{6}x^3[\hat{a}^\dagger, [\hat{a}^\dagger, [\hat{a}^\dagger, \hat{a}]]] + \dots = \hat{a} - x, \end{aligned} \quad (6.14)$$

co kończy dowód.

Zadanie 2

Zdefiniujmy operatory:

$$\hat{A}_1 = \frac{1}{4}(\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger + \hat{a}\hat{a}), \quad \hat{A}_2 = \frac{1}{4}(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger), \quad \hat{A}_3 = \frac{i}{4}(\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger - \hat{a}\hat{a}). \quad (6.15)$$

(a) Czy są to operatory samosprężone?

(b) Dla każdej pary operatorów, obliczyć komutatory: $[\hat{A}_i, \hat{A}_j]$.

(c) Obliczyć niezerowe elementy macierzowe operatorów $\hat{A}_i$ pomiędzy stanami własnymi oscylatora harmonicznego: $\langle n | \hat{A}_i | m \rangle$.

Rozwiązanie:

(a) Należy sprawdzić, czy $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$, gdzie $\hat{A}^\dagger$ jest operatorem sprzężonym hermitowsko do $\hat{A}$. Po kolei,

$$\hat{A}_1^\dagger = \left[\frac{1}{4}(\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger + \hat{a}\hat{a}) \right]^\dagger = \frac{1}{4}[(\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger)^\dagger + (\hat{a}\hat{a})^\dagger] = \frac{1}{4}[\hat{a}\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger] = \hat{A}_1, \quad (6.16)$$

$$\hat{A}_2^\dagger = \left[\frac{1}{4}(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger) \right]^\dagger = \frac{1}{4}[(\hat{a}^\dagger\hat{a})^\dagger + (\hat{a}\hat{a}^\dagger)^\dagger] = \frac{1}{4}[\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}] = \hat{A}_2, \quad (6.17)$$

$$\hat{A}_3^\dagger = \left[\frac{i}{4}(\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger - \hat{a}\hat{a}) \right]^\dagger = \left(\frac{i}{4}\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger \right)^\dagger - \left(\frac{i}{4}\hat{a}\hat{a} \right)^\dagger = -\frac{i}{4}\hat{a}\hat{a} + \frac{i}{4}\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger = \frac{i}{4}(-\hat{a}\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger) = \hat{A}_3. \quad (6.18)$$

Stąd wniosek, że wszystkie operatory są samosprężone.

(b) Dla przykładu obliczymy jeden z komutatorów,

$$[\hat{A}_1, \hat{A}_2] = \left[\frac{1}{4}(\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger + \hat{a} \hat{a}), \frac{1}{4}(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger) \right] = \underbrace{\left[\frac{1}{4} \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger, \frac{1}{4} \hat{a}^\dagger \hat{a} \right]}_I + \underbrace{\left[\frac{1}{4} \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger, \frac{1}{4} \hat{a} \hat{a}^\dagger \right]}_{II} + \underbrace{\left[\frac{1}{4} \hat{a} \hat{a}, \frac{1}{4} \hat{a}^\dagger \hat{a} \right]}_{III} + \underbrace{\left[\frac{1}{4} \hat{a} \hat{a}, \frac{1}{4} \hat{a} \hat{a}^\dagger \right]}_{IV}, \quad (6.19)$$

gdzie

$$\begin{aligned} I &= \frac{1}{16} [\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger \hat{a}] = \frac{1}{16} \hat{a}^\dagger [\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger, \hat{a}] + \frac{1}{16} \underbrace{[\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger] \hat{a}}_0 = \frac{1}{16} \hat{a}^\dagger [\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger, \hat{a}] = \frac{1}{16} (\hat{a}^\dagger)^2 [\hat{a}^\dagger, \hat{a}] + \frac{1}{16} \hat{a}^\dagger [\hat{a}^\dagger, \hat{a}] \hat{a}^\dagger \\ &= -\frac{1}{8} (\hat{a}^\dagger)^2, \end{aligned} \quad (6.20)$$

$$II = \frac{1}{16} [\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger, \hat{a} \hat{a}^\dagger] = \frac{1}{16} [\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger \hat{a} + 1] = \frac{1}{16} \underbrace{[\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger \hat{a}]}_I + \frac{1}{16} \underbrace{[\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger, 1]}_0 = -\frac{1}{8} (\hat{a}^\dagger)^2, \quad (6.21)$$

$$III = \frac{1}{16} [\hat{a} \hat{a}, \hat{a}^\dagger \hat{a}] = \frac{1}{16} \hat{a}^\dagger \underbrace{[\hat{a} \hat{a}, \hat{a}]}_0 + \frac{1}{16} [\hat{a} \hat{a}, \hat{a}^\dagger] \hat{a} = \frac{1}{16} [\hat{a} \hat{a}, \hat{a}^\dagger] \hat{a} = \frac{1}{16} \hat{a} [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] \hat{a} + \frac{1}{16} [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] \hat{a}^2 = \frac{1}{8} \hat{a}^2, \quad (6.22)$$

$$IV = \frac{1}{16} [\hat{a} \hat{a}, \hat{a} \hat{a}^\dagger] = \frac{1}{16} [\hat{a} \hat{a}, \hat{a}^\dagger \hat{a} + 1] = \frac{1}{16} \underbrace{[\hat{a} \hat{a}, \hat{a}^\dagger \hat{a}]}_{III} + \frac{1}{16} \underbrace{[\hat{a} \hat{a}, 1]}_0 = \frac{1}{8} \hat{a}^2. \quad (6.23)$$

Podstawiając otrzymane tu wartości komutatorów do równania (6.19), dostajemy

$$[\hat{A}_1, \hat{A}_2] = -\frac{1}{8} \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger - \frac{1}{8} \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger + \frac{1}{8} \hat{a} \hat{a} + \frac{1}{8} \hat{a} \hat{a} = \frac{1}{4} (\hat{a} \hat{a} - \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger) = i \hat{A}_3. \quad (6.24)$$

Wykonując podobne rachunki dla pozostałych komutatorów pokazujemy, że

$$[\hat{A}_i, \hat{A}_j] = i \epsilon_{ijk} \hat{A}_k. \quad (6.25)$$

(c) Obliczamy elementy macierzowe $\langle n | \hat{A}_i | m \rangle$ operatorów $\hat{A}_i$ pomiędzy stanami własnymi oscylatora harmonicznego. Po kolei,

$$\begin{aligned} \langle n | \hat{A}_1 | m \rangle &= \langle n | \frac{1}{4} (\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger + \hat{a} \hat{a}) | m \rangle = \frac{1}{4} \left(\langle n | \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger | m \rangle + \langle n | \hat{a} \hat{a} | m \rangle \right) \\ &= \frac{1}{4} \left(\sqrt{m+1} \langle n | \hat{a}^\dagger | m+1 \rangle + \sqrt{m} \langle n | \hat{a} | m-1 \rangle \right) \\ &= \frac{1}{4} \left[\sqrt{m+1} \sqrt{m+2} \delta_{n,m+2} + \sqrt{m} \sqrt{m-1} \delta_{n,m-2} \right], \end{aligned} \quad (6.26)$$

$$\begin{aligned} \langle n | \hat{A}_2 | m \rangle &= \langle n | \frac{1}{4} (\hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger) | m \rangle = \frac{1}{4} \left(\langle n | \hat{a}^\dagger \hat{a} | m \rangle + \langle n | \hat{a} \hat{a}^\dagger | m \rangle \right) \\ &= \frac{1}{4} \left(\sqrt{m} \langle n | \hat{a}^\dagger | m-1 \rangle + \sqrt{m+1} \langle n | \hat{a} | m+1 \rangle \right) \\ &= \frac{1}{4} \left(m \delta_{n,m} + (m+1) \delta_{n,m} \right) = \frac{1}{4} \delta_{n,m} (2m+1), \end{aligned} \quad (6.27)$$

$$\begin{aligned} \langle n | \hat{A}_3 | m \rangle &= \langle n | \frac{i}{4} (\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger - \hat{a} \hat{a}) | m \rangle = \frac{i}{4} \left(\langle n | \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger | m \rangle - \langle n | \hat{a} \hat{a} | m \rangle \right) \\ &= \frac{i}{4} \left(\sqrt{m+1} \langle n | \hat{a}^\dagger | m+1 \rangle - \sqrt{m} \langle n | \hat{a} | m-1 \rangle \right) \\ &= \frac{i}{4} \left(\sqrt{m+1} \sqrt{m+2} \delta_{n,m+2} - \sqrt{m} \sqrt{m-1} \delta_{n,m-2} \right). \end{aligned} \quad (6.28)$$

Zadanie 3

Wykazać, że średnia energia kinetyczna w n -tym stanie oscylatora harmonicznego, $|n\rangle$, jest równa średniej energii potencjalnej na tym stanie

Rozwiązanie:

Rozważmy operatory anihilacji i kreacji:

$$\begin{cases} \hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} + \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right) \\ \hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} - \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right). \end{cases} \quad (6.29)$$

Odejmując oraz dodając stronami równania (6.29) jesteśmy w stanie wyrazić operatory położenia i pędu poprzez operatory kreacji i anihilacji:

$$\begin{cases} \hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \\ \hat{p} = \frac{1}{i} \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger). \end{cases} \quad (6.30)$$

Operatory energii kinetycznej oraz energii potencjalnej to

$$\hat{E}_{kin} = \frac{\hat{p}^2}{2m}, \quad \hat{E}_{pot} = \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2. \quad (6.31)$$

Zatem wartość oczekiwana pomiaru energii kinetycznej w stanie $|n\rangle$ wynosi

$$\begin{aligned} \langle n | \hat{E}_{kin} | n \rangle &= \langle n | \frac{\hat{p}^2}{2m} | n \rangle = -\frac{\hbar\omega}{4} \langle n | (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)^2 | n \rangle = -\frac{\hbar\omega}{4} \langle n | \hat{a}^2 - \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} + (\hat{a}^\dagger)^2 | n \rangle \\ &= -\frac{\hbar\omega}{4} [\langle n | \hat{a}^2 | n \rangle - \langle n | \hat{a}\hat{a}^\dagger | n \rangle - \langle n | \hat{a}^\dagger\hat{a} | n \rangle + \langle n | (\hat{a}^\dagger)^2 | n \rangle], \end{aligned} \quad (6.32)$$

gdzie skorzystaliśmy z (6.30). Wyrazy $\langle n | \hat{a}^2 | n \rangle$ oraz $\langle n | (\hat{a}^\dagger)^2 | n \rangle$ wynoszą zero. Stąd,

$$\begin{aligned} \langle n | \hat{E}_{kin} | n \rangle &= \frac{\hbar\omega}{4} [\langle n | \hat{a}\hat{a}^\dagger | n \rangle + \langle n | \hat{a}^\dagger\hat{a} | n \rangle] = \frac{\hbar\omega}{4} [\sqrt{n+1} \langle n | \hat{a} | n+1 \rangle + \sqrt{n} \langle n | \hat{a}^\dagger | n-1 \rangle] \\ &= \frac{\hbar\omega}{4} [(n+1)\langle n | n \rangle + n\langle n | n \rangle] = \frac{\hbar\omega}{2} \left(n + \frac{1}{2} \right). \end{aligned} \quad (6.33)$$

Teraz obliczmy średnią energię potencjalną,

$$\begin{aligned} \langle n | \hat{E}_{pot} | n \rangle &= \langle n | \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 | n \rangle = \frac{\hbar\omega}{4} \langle n | (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2 | n \rangle = \frac{\hbar\omega}{4} \langle n | \hat{a}^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} + (\hat{a}^\dagger)^2 | n \rangle \\ &= \frac{\hbar\omega}{4} [\langle n | \hat{a}\hat{a}^\dagger | n \rangle + \langle n | \hat{a}^\dagger\hat{a} | n \rangle], \end{aligned} \quad (6.34)$$

gdzie pominęliśmy wyrazy $\langle n | \hat{a}^2 | n \rangle$ oraz $\langle n | (\hat{a}^\dagger)^2 | n \rangle$, ponieważ wynoszą one zero. Kontynuując,

$$\begin{aligned} \langle n | \hat{E}_{pot} | n \rangle &= \frac{\hbar\omega}{4} [\sqrt{n+1} \langle n | \hat{a} | n+1 \rangle + \sqrt{n} \langle n | \hat{a}^\dagger | n \rangle] \\ &= \frac{\hbar\omega}{4} [(n+1)\langle n | n \rangle + n\langle n | n \rangle] = \frac{\hbar\omega}{2} \left(n + \frac{1}{2} \right). \end{aligned} \quad (6.35)$$

Porównując obliczone wartości średnich (6.33) oraz (6.35), dochodzimy do wniosku, że

$$\langle n | \hat{E}_{kin} | n \rangle = \langle n | \hat{E}_{pot} | n \rangle, \quad (6.36)$$

co było do wykazania. Ponadto możemy zauważyć, że suma tych energii wynosi $\hbar\omega(n + \frac{1}{2})$, co jest energią całkowitą oscylatora harmonicznego w n -tym stanie własnym.

Zadanie 4

Udowodnić wzór Bakera-Campbella-Hausdorffa:

$$\exp(\hat{A} + \hat{B}) = \exp(\hat{A}) \exp(\hat{B}) \exp(-[\hat{A}, \hat{B}]/2), \quad (6.37)$$

który zachodzi dla dwóch dowolnych operatorów $\hat{A}$ i $\hat{B}$ takich, że $[\hat{A}, \hat{B}] = \text{const}$.

Rozwiązanie

Niech $[\hat{A}, \hat{B}] = \text{const} \equiv c$. Rozważmy funkcję zmiennej $t \in \mathbb{R}$ t.ż. $f(t) = \exp(t\hat{A}) \exp(t\hat{B}) \exp(-\frac{ct^2}{2})$. Różniczkując tę funkcję po parametrze t , mamy

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}f(t) &= \hat{A} \exp(t\hat{A}) \exp(t\hat{B}) \exp\left(-\frac{ct^2}{2}\right) + \exp(t\hat{A}) \hat{B} \exp(t\hat{B}) \exp\left(-\frac{ct^2}{2}\right) \\ &\quad - tc \exp(t\hat{A}) \exp(t\hat{B}) \exp\left(-\frac{ct^2}{2}\right). \end{aligned} \quad (6.38)$$

Zgodnie ze wzorem (5.19) można napisać,

$$\exp(t\hat{A}) \hat{B} \exp(-t\hat{A}) = \hat{B} + tc, \quad (6.39)$$

skąd wynika, że

$$\exp(t\hat{A}) \hat{B} = (\hat{B} + tc) \exp(t\hat{A}). \quad (6.40)$$

Podstawiając to wyrażenie do drugiego wyrazu sumy po prawej stronie równości (6.38), dostajemy

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}f(t) &= \hat{A} \exp(t\hat{A}) \exp(t\hat{B}) \exp\left(-\frac{ct^2}{2}\right) + (\hat{B} + tc) \exp(t\hat{A}) \exp(t\hat{B}) \exp\left(-\frac{ct^2}{2}\right) \\ &\quad - tc \exp(t\hat{A}) \exp(t\hat{B}) \exp\left(-\frac{ct^2}{2}\right), \end{aligned} \quad (6.41)$$

co upraszcza się do postaci

$$\frac{d}{dt}f(t) = (\hat{A} + \hat{B})f(t). \quad (6.42)$$

Rozwiązaniem tego równania różniczkowego jest $f(t) = D \exp((\hat{A} + \hat{B})t)$, gdzie D jest stałe. Z równości dla $t = 0$, mamy $D = 1$. Ostatecznie, dostajemy

$$\exp(\hat{A} + \hat{B}) = \exp(\hat{A}) \exp(\hat{B}) \exp(-[\hat{A}, \hat{B}]/2), \quad (6.43)$$

co było do udowodnienia.

Zadanie 5

(a) Wykazać, że stan koherentny można przedstawić w postaci:

$$|\alpha\rangle = \hat{D}(\alpha)|0\rangle, \quad (6.44)$$

gdzie $|0\rangle$ jest stanem podstawowym oscylatora harmonicznego, natomiast operator przesunięcia $\hat{D}(\alpha)$ zdefiniowany jest jako $\hat{D}(\alpha) = \exp(\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a})$.

(b) Pokazać, że operator przesunięcia jest unitarny oraz że zachodzi

$$\hat{D}^\dagger(\alpha)\hat{a}\hat{D}(\alpha) = \hat{a} + \alpha, \quad \hat{D}^\dagger(\alpha)\hat{a}^\dagger\hat{D}(\alpha) = \hat{a}^\dagger + \alpha^*. \quad (6.45)$$

Wskazówka: W zadaniu należy skorzystać z równości Bakera-Campbella-Hausdorffa.

Rozwiązanie:

W rozwiązaniu będziemy używać postaci operatorów kreacji i anihilacji oraz postaci stanu koherentnego wyrażonego w bazie stanów własnych oscylatora harmonicznego $|n\rangle$, czyli

$$\begin{aligned}\hat{a} &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} + \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right), \\ \hat{a}^\dagger &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} - \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right), \\ |\alpha\rangle &= \exp\left(\frac{-|\alpha|^2}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle,\end{aligned}\tag{6.46}$$

gdzie $\alpha \in \mathbb{C}$.

(a) Korzystając ze wzoru Bakera-Campbella-Hausdorffa (6.37), przekształćmy prawą stronę dowodzonej równości,

$$\hat{D}(\alpha)|0\rangle = \exp(\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a})|0\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}[\alpha\hat{a}^\dagger, -\alpha^*\hat{a}]\right) \exp(\alpha\hat{a}^\dagger) \exp(-\alpha^*\hat{a})|0\rangle.\tag{6.47}$$

Występujący tu komutator wynosi

$$[\alpha\hat{a}^\dagger, -\alpha^*\hat{a}] = -|\alpha|^2[\hat{a}^\dagger, \hat{a}] = |\alpha|^2[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = |\alpha|^2,\tag{6.48}$$

gdzie skorzystaliśmy z faktu, że $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$. Równanie (6.47) przyjmuje więc postać

$$\begin{aligned}\hat{D}(\alpha)|0\rangle &= \exp\left(\frac{-|\alpha|^2}{2}\right) \exp(\alpha\hat{a}^\dagger) \exp(-\alpha^*\hat{a})|0\rangle \\ &= \exp\left(\frac{-|\alpha|^2}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha\hat{a}^\dagger)^n}{n!} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-\alpha^*\hat{a})^k}{k!} |0\rangle,\end{aligned}\tag{6.49}$$

gdzie każdą funkcję eksponent rozwinęliśmy z osobna w szereg.

Wiadomo, że operator $\hat{a}$ w działaniu na stan podstawowy oscylatora harmonicznego da 0, tzn. $\hat{a}|0\rangle = 0$. Zatem jedynym niezerowym wyrazem w sumie po k będzie ten dla $k = 0$. W dalszej kolejności należy podzielić operatorem kreacji n razy na stan podstawowy, tzn. należy skorzystać z faktu, że $|n\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle$. Ostatecznie, dostajemy

$$\hat{D}(\alpha)|0\rangle = \exp\left(\frac{-|\alpha|^2}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle = \exp\left(\frac{-|\alpha|^2}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = |\alpha\rangle,\tag{6.50}$$

gdzie skorzystaliśmy z reprezentacji stanu koherentnego $|\alpha\rangle$ w bazie stanów własnych oscylatora harmonicznego (6.46). Tym samym udowodniliśmy wzór (6.44).

(b) Zauważmy, że

$$\hat{D}^\dagger(\alpha) = \exp(\alpha^*\hat{a} - \alpha\hat{a}^\dagger) = \hat{D}(-\alpha),\tag{6.51}$$

a, co za tym idzie,

$$\begin{aligned}\hat{D}^\dagger(\alpha)\hat{D}(\alpha) &= \hat{D}(-\alpha)\hat{D}(\alpha) = \exp(\alpha^*\hat{a} - \alpha\hat{a}^\dagger) \exp(\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a}) \\ &= \exp(\alpha^*\hat{a} - \alpha\hat{a}^\dagger + \alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a}) = \hat{1}.\end{aligned}\tag{6.52}$$

W dowodzie tej równości skorzystaliśmy ze wzoru Bakera-Campbella-Hausdorffa (6.37), gdzie występujący tam komutator wynosi w naszym przypadku 0. Podobnie dowodzimy, że $\hat{D}(\alpha)\hat{D}^\dagger(\alpha) = \hat{1}$. Oznacza to, że operator przesunięcia $\hat{D}(\alpha)$ jest unitarny.

Tożsamości dowodzimy korzystając ze wzoru Bakera-Campbella-Hausdorffa (6.37). Rozpisujemy zatem

$$\begin{aligned}\hat{D}^\dagger(\alpha)\hat{a}\hat{D}(\alpha) &= \exp(\alpha^*\hat{a} - \alpha\hat{a}^\dagger)\hat{a}\exp(-(\alpha^*\hat{a} - \alpha\hat{a}^\dagger)) = \hat{a} + [\alpha^*\hat{a} - \alpha\hat{a}^\dagger, \hat{a}] + \dots \\ &= \hat{a} - \alpha[\hat{a}^\dagger, \hat{a}] = \hat{a} + \alpha\end{aligned}\tag{6.53}$$

co kończy dowód. Tutaj skorzystaliśmy z faktu, że komutator $[\hat{a}^\dagger, \hat{a}]$ jest stałą, a zatem kolejne wyrazy sumy (oznaczone wielokropkiem) są równe 0. Analogicznie dowodzimy drugą równość. Mianowicie,

$$\begin{aligned}\hat{D}^\dagger(\alpha)\hat{a}^\dagger\hat{D}(\alpha) &= \exp(\alpha^*\hat{a} - \alpha\hat{a}^\dagger)\hat{a}^\dagger\exp(-(\alpha^*\hat{a} - \alpha\hat{a}^\dagger)) = \hat{a}^\dagger + [\alpha^*\hat{a} - \alpha\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger] + \dots \\ &= \hat{a}^\dagger + \alpha^*[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger + \alpha^*,\end{aligned}\tag{6.54}$$

co kończy dowód.

7 Seria 7

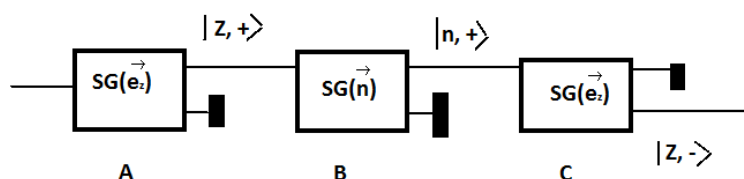
Zadanie 1

Wiązka atomów srebra przechodzi po kolei przez następujące filtry Sterna-Gerlacha:

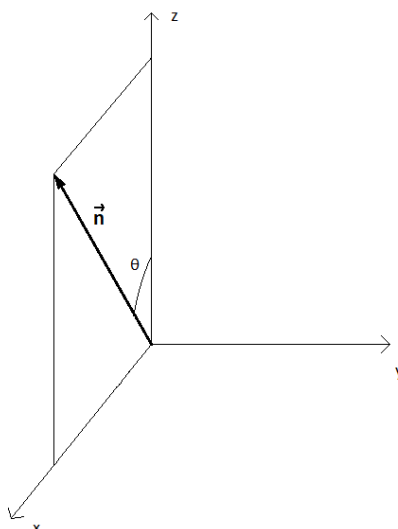
1. $SG(\vec{e}_z)$ bez dolnego wylotu;
2. $SG(\vec{n})$ bez dolnego wylotu, przy czym kierunek gradientu pola magnetycznego $\vec{n}$ jest w płaszczyźnie xz pod kątem θ do osi z ;
3. $SG(\vec{e}_z)$ bez górnego wylotu.

Jaka jest intensywność wiązki atomów srebra po przejściu przez wszystkie filtry zakładając, że intensywność wiązki po przejściu przez pierwszy filtr jest unormowana do jedynki? Jak powinniśmy zorientować drugi filtr, aby intensywność wiązki końcowej była maksymalna?

Rozwiązanie:



Rysunek 3: Układ opisany w zadaniu 1 z serii 7.



Rysunek 4: Kierunek gradientu pola magnetycznego $\vec{n}$.

Na rysunku 3 przedstawiono opisany w zadaniu układ filtrów Sterna-Gerlacha. Widoczne tam wektory $|z, +\rangle$ oraz $|z, -\rangle$ można reprezentować w bazie standardowej jako

$$|z, +\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |z, -\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (7.1)$$

Z treści zadania wynika, iż musimy wyznaczyć stan $|\vec{n}, +\rangle$. Odpowiada on sytuacji, gdy przez urządzenie Sterna-Gerlacha o gradientie pola magnetycznego skierowanym wzdłuż osi $\vec{n}$ przepuszczone atomy srebra

odchyłać się będą do góry. Tzn. ich rzut na oś $\vec{n}$ wynosił będzie $+\mu_0$, gdzie μ_0 jest wartością momentu magnetycznego atomów srebra. Wektor kierunkowy $\vec{n}$ zorientowany jest jak na rysunku 4, tzn. pod kątem θ do osi z w płaszczyźnie xz . Innymi słowy,

$$\vec{n} = (\sin \theta, 0, \cos \theta). \quad (7.2)$$

Zatem operator składowej momentu magnetycznego wzdłuż osi $\vec{n}$ wynosi

$$\hat{\mu}_{\vec{n}} = \mu_0 \hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{n} = \mu_0 [\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z] \begin{bmatrix} \sin \theta \\ 0 \\ \cos \theta \end{bmatrix} = \mu_0 \left(\sin \theta \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} + \cos \theta \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \right) = \mu_0 \begin{bmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{bmatrix}, \quad (7.3)$$

gdzie $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$ są macierzami Pauliego. Możliwymi wynikami pomiaru wartości momentu magnetycznego wzdłuż osi $\vec{n}$ są wartości własne operatora $\hat{\mu}_{\vec{n}}$. Poszukajmy zatem wartości własnych macierzy (7.3).

Musimy rozwiązać równanie na λ , $\det(\hat{\mu}_{\vec{n}} - \lambda \hat{1}) = 0$. Zapisane w postaci jawnej ma ono postać,

$$\det \begin{bmatrix} \mu_0 \cos \theta - \lambda & \mu_0 \sin \theta \\ \mu_0 \sin \theta & -\mu_0 \cos \theta - \lambda \end{bmatrix} = 0. \quad (7.4)$$

Obliczając wyznacznik tej macierzy, dostajemy

$$-(\mu_0 \cos \theta - \lambda)(\mu_0 \cos \theta + \lambda) - \mu_0^2 \sin^2 \theta = \lambda^2 - \mu_0^2(\sin^2 \theta + \cos^2 \theta) = \lambda^2 - \mu_0^2 = 0, \quad (7.5)$$

skąd wynika, że

$$\lambda^2 = \mu_0^2 \implies \lambda = \pm \mu_0. \quad (7.6)$$

Interesuje nas tylko przypadek $\lambda = +\mu_0$. Szukamy wektora własnego należącego do tej wartości własnej,

$$|\vec{n}, +\rangle = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}, \quad (7.7)$$

gdzie żądamy, aby wektor stanu $|\vec{n}, +\rangle$ był unormowany, tzn. $|a|^2 + |b|^2 = 1$. Wychodząc od równania,

$$\mu_0 \begin{bmatrix} \cos \theta - 1 & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta - 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = 0, \quad (7.8)$$

dostajemy, że

$$a = b \frac{1 + \cos \theta}{\sin \theta} = b \operatorname{ctg} \frac{\theta}{2}. \quad (7.9)$$

To z kolei razem z warunkiem normalizacyjnym prowadzi nas do wniosku, że $b = \sin \frac{\theta}{2}$, a co za tym idzie $a = \cos \frac{\theta}{2}$. Ostatecznie, interesujący nas wektor stanu wynosi

$$|\vec{n}, +\rangle = \begin{bmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} \end{bmatrix}. \quad (7.10)$$

Po przejściu przez pierwszy filtr wszystkie atomy są w stanie $|z, +\rangle$. Prawdopodobieństwo przejścia atomów w stanie $|z, +\rangle$ przez drugi filtr wynosi,

$$P_1 = |\langle \vec{n}, + | z, + \rangle|^2 = \left| \begin{bmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & \sin \frac{\theta}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \right|^2 = \cos^2 \frac{\theta}{2}. \quad (7.11)$$

Z kolei atomy po przejściu przez drugi filtr są w stanie $|\vec{n}, +\rangle$. W związku z tym prawdopodobieństwo ich przejścia przez trzeci filtr wynosi

$$P_2 = |\langle z, - | \vec{n}, + \rangle|^2 = \left| \begin{bmatrix} 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} \end{bmatrix} \right|^2 = \sin^2 \frac{\theta}{2}. \quad (7.12)$$

Ponieważ intensywności atomów srebra po przejściu przez pierwszy filtr jest unormowana do jedynki, intensywność wiązki po przejściu przez cały układ będzie równa

$$I = P_1 \cdot P_2 = \cos^2 \frac{\theta}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2} = \frac{1}{4} \sin^2 \theta. \quad (7.13)$$

Jest ona największa dla $\theta = 90^\circ$ i wynosi 25%.

Zadanie 2

Atomy srebra zostały przygotowane w stanie $|y, -\rangle$. Z jakim prawdopodobieństwem atomy zostaną odchylone **(a)** do góry, **(b)** do dołu przez aparat Sterna-Gerlacha $SG(\vec{n})$, gdzie

$$\vec{n} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta) ? \quad (7.14)$$

Kąty θ i φ parametryzują dowolny wektor jednostkowy w przestrzeni, przy czym $0 \leq \theta \leq \pi$ oraz $0 \leq \varphi < 2\pi$.

Rozwiązanie:

Operator momentu magnetycznego atomu srebra wzdłuż osi wyznaczonej przez wektor jednostkowy $\vec{n}$ wynosi

$$\hat{\mu}_{\vec{n}} = \mu_0 \hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{n}, \quad (7.15)$$

gdzie μ_0 jest wartością momentu magnetycznego. Z kolei $\hat{\vec{\sigma}}$ ma trzy składowe, $\hat{\vec{\sigma}} = (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$, z których każda jest jedną z macierzy Pauliego,

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (7.16)$$

Podstawiając równania (7.14) oraz (7.16) do definicji (7.15), dostajemy

$$\hat{\mu}_{\vec{n}} = \mu_0 \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix}, \quad (7.17)$$

gdzie skorzystaliśmy ze wzoru Eulera, $\exp(i\varphi) = \cos \varphi + i \sin \varphi$. Wyznaczając wartości własne macierzy (7.17), dostajemy $-\mu_0$ i $+\mu_0$. Zgodnie z postulatami mechaniki kwantowej, w wyniku pomiaru momentu magnetycznego jedynymi możliwymi wynikami pomiaru są wartości własne operatora momentu magnetycznego, a zatem w naszym przypadku wartości $\pm\mu_0$. Z kolei stan układu zaraz po pomiarze danej wartości własnej jest opisany przez odpowiadający jej wektor własny. Musimy więc obliczyć stany własne operatora (7.17).

Wektor własny należący do wartości własnej $\lambda = +\mu_0$ znajdujemy rozwiązując układ równań,

$$\mu_0 \begin{pmatrix} \cos \theta - 1 & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta - 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} a(\cos \theta - 1) + b \sin \theta e^{-i\varphi} = 0, \\ a \sin \theta e^{i\varphi} - b(\cos \theta + 1) = 0. \end{cases} \quad (7.18)$$

Z drugiego równania wyznaczamy $a = b \frac{\cos \theta + 1}{\sin \theta} e^{-i\varphi}$. W celu uporządkowania tego wyrażenia korzystamy ze wzorów trygonometrycznych,

$$\sin \theta = 2 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2}, \quad \cos \theta = 2 \cos^2 \frac{\theta}{2} - 1, \quad (7.19)$$

skąd dostajemy

$$a = b \frac{\cos \theta + 1}{\sin \theta} e^{-i\varphi} = b e^{-i\varphi} \operatorname{ctg} \frac{\theta}{2} \Rightarrow b = a e^{i\varphi} \operatorname{tg} \frac{\theta}{2}. \quad (7.20)$$

Wektor własny przybiera postać,

$$|\vec{n}, +\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = a \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\varphi} \operatorname{tg} \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad (7.21)$$

gdzie stałą a wyznaczamy z warunku normalizacyjnego,

$$1 = |a|^2 \begin{pmatrix} 1 & e^{-i\varphi} \operatorname{tg} \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\varphi} \operatorname{tg} \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} = |a|^2 \left(1 + \operatorname{tg}^2 \frac{\theta}{2} \right) = \frac{|a|^2}{\cos^2 \frac{\theta}{2}}. \quad (7.22)$$

Ponieważ $\theta \in [0, \pi]$, to z powyższego wynika, że $|a| = \cos \frac{\theta}{2}$. Zatem, z dokładnością do czynnika fazowego, wektor $|\vec{n}, +\rangle$ przybiera postać

$$|\vec{n}, +\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}. \quad (7.23)$$

Analogicznie, można wyznaczyć stan własny $|\vec{n}, -\rangle$ należący do wartości własnej $-\mu_0$. Mianowicie,

$$|\vec{n}, -\rangle = \begin{pmatrix} -e^{-i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \\ \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}. \quad (7.24)$$

Łatwo sprawdzić, że zachodzi również $\langle \vec{n}, + | \vec{n}, - \rangle = \langle \vec{n}, - | \vec{n}, + \rangle = 0$, a zatem wyznaczone wektory własne są względem siebie ortogonalne.

Stan początkowy atomu srebra zadany jest wektorem $|y, -\rangle$, który można przedstawić jako

$$|y, -\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}. \quad (7.25)$$

Prawdopodobieństwo pomiaru odchylenia do góry atomów znajdujących się w stanie początkowym $|y, -\rangle$ zadane jest wzorem

$$P_+ = |\langle \vec{n}, + | y, - \rangle|^2. \quad (7.26)$$

Najpierw obliczymy wyrażenie wewnątrz modułu,

$$\langle \vec{n}, + | y, - \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \cos \frac{\theta}{2}, & e^{-i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ -i \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\cos \frac{\theta}{2} - ie^{-i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \right). \quad (7.27)$$

Stąd, prawdopodobieństwo (7.26) wynosi

$$P_+ = \frac{1}{2} (1 - \sin \theta \sin \varphi). \quad (7.28)$$

Prawdopodobieństwo odchylenia atomów do dołu P_- można obliczyć na dwa sposoby. Po pierwsze, można jawnie obliczyć $P_- = |\langle \vec{n}, - | y, - \rangle|^2$, korzystając w postaci odpowiednich wektorów. Po drugie, można zauważyć, że $P_+ + P_- = 1$. Zatem prawdopodobieństwo odchylenia wiązki do dołu wynosi

$$P_- = 1 - |\langle \vec{n}, + | y, - \rangle|^2 = \frac{1}{2} (1 + \sin \theta \sin \varphi). \quad (7.29)$$

Zadanie 3

Wiązka atomów srebra przechodzi przez filtr Sterna-Gerlacha bez dolnego wylotu, gdzie kierunek gradientu pola magnetycznego w filtrze wynosi $\vec{n} = \frac{1}{3}(1, 2, 2)$. Następnie, atomy przechodzą przez taki sam filtr, przy czym pomiędzy filtrami działa stałe i jednorodne pole magnetyczne o wektorze indukcji magnetycznej $\vec{B} = (0, 0, \frac{B}{2})$, gdzie $B > 0$. Zakładając, że odległość pomiędzy filtrami i prędkość atomów są tak dobrane, że atomy przechodzą przez drugi filtr w chwili $\tau = \frac{\pi \hbar}{\mu_0 B}$, gdzie μ_0 jest wartością ich momentu magnetycznego, oblicz prawdopodobieństwo przejścia atomów przez drugi filtr.

Wskazówka: Hamiltonian oddziaływania momentu magnetycznego $\hat{\mu}$ z polem magnetycznym o indukcji $\vec{B}$ wynosi $\hat{H} = -\hat{\mu} \cdot \vec{B}$.

Rozwiązanie:

Operator momentu magnetycznego wyznaczamy ze wzoru (7.15), czyli

$$\hat{\mu}_{\vec{n}} = \frac{\mu_0}{3} \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + 2 \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + 2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right] = \frac{\mu_0}{3} \begin{pmatrix} 2 & 1-2i \\ 1+2i & -2 \end{pmatrix}. \quad (7.30)$$

Po przejściu przez filtr Sterna Gerlacha atomy srebra znajdują się w stanie własnym wyżej obliczonego operatora należącym do dodatniej wartości własnej $+\mu_0$. Stan ten spełnia równanie,

$$\frac{\mu_0}{3} \begin{pmatrix} 2 & 1-2i \\ 1+2i & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \mu_0 \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}. \quad (7.31)$$

Powyższe równanie własne daje warunek na a ,

$$a = b(1 - 2i), \quad (7.32)$$

skąd wynika, że wektor własny przybiera postać

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = b \begin{pmatrix} 1 - 2i \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (7.33)$$

Stałą b wyznaczamy z warunku normalizacji,

$$1 = |b|^2(|1 - 2i|^2 + 1) = 6|b|^2 \Rightarrow |b| = \frac{1}{\sqrt{6}}. \quad (7.34)$$

Ostatecznie, atomy srebra po przejściu przez zadany filtr znajdują się w stanie $|\vec{n}, +\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 - 2i \\ 1 \end{pmatrix}$.

Po opuszczeniu filtru atomy poruszają się w jednorodnym, stałym polu magnetycznym. Hamiltonian oddziaływania ich momentów magnetycznych z polem magnetycznym wynosi $\hat{H} = -\mu_0 \hat{\vec{\sigma}} \vec{B} = -\frac{1}{2}\mu_0 B \hat{\sigma}_z$, a ewolucja czasowa momentów magnetycznych zadana jest operatorem ewolucji czasowej $\hat{U}(t) = \exp\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) = \exp\left(i\frac{\mu_0 B t}{2\hbar} \hat{\sigma}_z\right)$. Stan $|\vec{n}, +\rangle$ po czasie t przeewoluuje zatem zgodnie z

$$\hat{U}(t) |\vec{n}, +\rangle = \exp\left(i\frac{\mu_0 B t}{2\hbar} \hat{\sigma}_z\right) \cdot \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 - 2i \\ 1 \end{pmatrix} \quad (7.35)$$

Przedstawiając stan $|\vec{n}, +\rangle$ jako kombinację liniową wektorów własnych operatora $\hat{\sigma}_z$, dostajemy

$$\begin{aligned} \hat{U}(t) |\vec{n}, +\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} \exp\left(i\frac{\mu_0 B t}{2\hbar} \hat{\sigma}_z\right) \left[(1 - 2i) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{6}} \left[(1 - 2i) \exp\left(i\frac{\mu_0 B t}{2\hbar}\right) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \exp\left(-i\frac{\mu_0 B t}{2\hbar}\right) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right]. \end{aligned} \quad (7.36)$$

W chwili przejścia przez drugi filtr, czyli dla $\tau = \frac{\pi\hbar}{\mu_0 B}$, stan układu wynosi

$$\hat{U}(\tau) |\vec{n}, +\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \left[(1 - 2i)i \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} - i \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 2 + i \\ -i \end{pmatrix}. \quad (7.37)$$

Stąd, prawdopodobieństwo przejścia atomów srebra przez drugi filtr wynosi

$$\begin{aligned} P &= \left| \langle \vec{n}, + | \hat{U}(\tau) |\vec{n}, +\rangle \right|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{6}} (1 + 2i, 1) \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 2 + i \\ -i \end{pmatrix} \right|^2 \\ &= \left| \frac{1}{6} ((1 + 2i)(2 + i) - i) \right|^2 = \left| \frac{4i}{6} \right|^2 = \frac{4}{9}. \end{aligned} \quad (7.38)$$

Zadanie 4

Udowodnić następujące związki:

- (a) $(\vec{a} \cdot \hat{\vec{\sigma}})^2 = \vec{a}^2$,
- (b) $\{\vec{a} \cdot \hat{\vec{\sigma}}, \vec{b} \cdot \hat{\vec{\sigma}}\} = 2\vec{a} \cdot \vec{b}$,
- (c) $(\vec{a} \cdot \hat{\vec{\sigma}})(\vec{b} \cdot \hat{\vec{\sigma}}) = \vec{a} \cdot \vec{b} + i\hat{\vec{\sigma}} \cdot (\vec{a} \times \vec{b})$,

gdzie $\hat{\vec{\sigma}}$ składa się z macierzy Pauliego, $\hat{\vec{\sigma}} = (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$, natomiast $\vec{a} = (a_x, a_y, a_z)$ i $\vec{b} = (b_x, b_y, b_z)$ są dowolnymi trójwymiarowymi wektorami.

Rozwiązanie:

- (a) Dowodzimy korzystając z faktu, że $\{\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j\} = 2\delta_{ij}$,

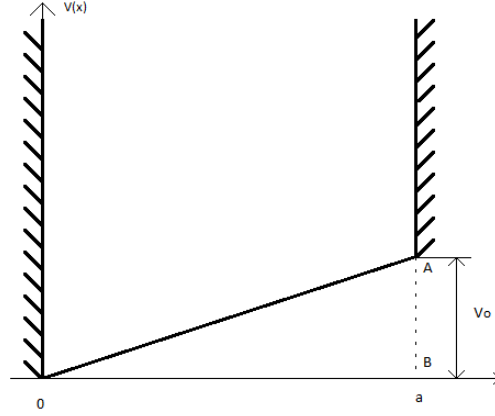
$$\begin{aligned} (\vec{a} \cdot \hat{\vec{\sigma}})^2 &= (a_x \hat{\sigma}_x + a_y \hat{\sigma}_y + a_z \hat{\sigma}_z)^2 = a_x^2 \hat{\sigma}_x^2 + a_y^2 \hat{\sigma}_y^2 + a_z^2 \hat{\sigma}_z^2 \\ &\quad + a_x a_y (\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x) + a_x a_z (\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_z + \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x) + a_y a_z (\hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z + \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_y) \\ &= a_x^2 + a_y^2 + a_z^2 + a_x a_y \{\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y\} + a_x a_z \{\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_z\} + a_y a_z \{\hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z\} = \vec{a}^2. \end{aligned} \quad (7.39)$$

- (b) Korzystając z tej samej własności macierzy Pauliego, co powyżej mamy,

$$\begin{aligned} \{\vec{a} \cdot \hat{\vec{\sigma}}, \vec{b} \cdot \hat{\vec{\sigma}}\} &= (a_x \hat{\sigma}_x + a_y \hat{\sigma}_y + a_z \hat{\sigma}_z)(b_x \hat{\sigma}_x + b_y \hat{\sigma}_y + b_z \hat{\sigma}_z) \\ &\quad + (b_x \hat{\sigma}_x + b_y \hat{\sigma}_y + b_z \hat{\sigma}_z)(a_x \hat{\sigma}_x + a_y \hat{\sigma}_y + a_z \hat{\sigma}_z) = [a_x b_x + a_x b_y \{\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y\} \\ &\quad + a_x b_z \{\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_z\} + a_y b_y + a_y b_z \{\hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z\} + a_z b_z] + [b_x a_x + b_x a_y \{\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y\} \\ &\quad + b_x a_z \{\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_z\} + b_y a_y + b_y a_z \{\hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z\} + b_z a_z] = 2\vec{a} \cdot \vec{b}. \end{aligned} \quad (7.40)$$

(c) Korzystamy dla wygody z konwencji sumacyjnej Einsteina oraz z własności $\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j = \delta_{ij} \hat{1} + i \epsilon_{ijk} \hat{\sigma}_k$,

$$\begin{aligned}
 (\vec{a} \cdot \hat{\vec{\sigma}})(\vec{b} \cdot \hat{\vec{\sigma}}) &= a_i b_j \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j = a_i b_j (\delta_{ij} + i \epsilon_{ijk} \hat{\sigma}_k) = a_i b_i + i a_i b_j \epsilon_{ijk} \hat{\sigma}_k \\
 &= \vec{a} \cdot \vec{b} + i \hat{\vec{\sigma}} \cdot (\vec{a} \times \vec{b}).
 \end{aligned} \tag{7.41}$$



Rysunek 5: Studnia nieskończona ze ściętym dnem.

8 Seria 8

Zadanie 1

W pierwszym rzędzie rachunku zaburzeń obliczyć poprawkę do energii stanów własnych cząstki o masie m w nieskończonej jednowymiarowej studni kwantowej o szerokości a , której część AB została ucięta, jak pokazuje rysunek 5. Modyfikację Hamiltonianu:

$$H' = \frac{V_0}{a}x \quad \text{dla} \quad 0 \leq x \leq a \quad (8.1)$$

potraktować jako zaburzenie.

Rozwiązanie:

Dla potencjału niezaburzonego (czyli dla nieskończonej studni) funkcje własne i wartości własne są dane wzorem (4.39). Poprawkę do energii w pierwszym rzędzie rachunku zaburzeń obliczamy za pomocą wzoru

$$E_n^{(1)} = \langle n | \hat{H}' | n \rangle = \int \psi_n^*(x) H' \psi_n(x) dx, \quad (8.2)$$

gdzie zaburzenie Hamiltonianu dane jest wzorem (8.1). Stąd,

$$E_n^{(1)} = \frac{2V_0}{a^2} \int_0^a x \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx. \quad (8.3)$$

Z analogiczną całką mieliśmy do czynienia w zadaniu 1 z serii 3. Wykonując podobne rachunki, dostajemy, że pierwsza poprawka do energii n -tego stanu cząstki wynosi w naszym przypadku,

$$E_n^{(1)} = \frac{V_0}{2}. \quad (8.4)$$

Zadanie 2

Cząstka o masie m porusza się w nieskończonej dwuwymiarowej studni kwantowej, której potencjał wynosi

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{dla } 0 < x, y < a \\ \infty & \text{dla pozostałych } x, y. \end{cases} \quad (8.5)$$

(a) Wyznaczyć ściśle rozwiązania stacjonarnego problemu niezaburzonego.

(b) Znaleźć w pierwszym rzędzie rachunku zaburzeń poprawki do energii stanu podstawowego i pierwszego stanu wzbudzonego spowodowane zaburzeniem postaci

$$H'(x, y) = \begin{cases} V_0 \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi y}{a}\right) & \text{dla } 0 < x, y < a \\ 0 & \text{dla pozostałych } x, y. \end{cases} \quad (8.6)$$

Rozwiązanie:

(a) Stacjonarne równanie Schrödingera dla cząstki znajdującej się w obszarze $0 < x, y < a$ ma postać

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \psi(x, y) = E\psi(x, y). \quad (8.7)$$

Równanie to można rozseparować przyjmując, że funkcja własna jest iloczynem funkcji zależnych tylko od x i tylko od y : $\psi(x, y) = f(x)g(y)$. Dzielimy równanie (8.7) przez funkcję $\psi(x, y)$, dostajemy

$$E = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} f(x)}_{E_1} - \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} g(y)}_{E_2}. \quad (8.8)$$

Aby zapewnić, że wyrażenie po prawej stronie jest stałe, musimy przyjąć, że każdy człon (zależny od innej zmiennej) jest stałą, przy czym $E = E_1 + E_2$. Ostatecznie, rozwiązanie naszego problemu sprowadza się do rozwiązania układu dwóch niezależnych równań różniczkowych,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} f(x) = E_1 f(x) \quad \text{dla } 0 < x < a, \quad (8.9)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} g(y) = E_2 g(y) \quad \text{dla } 0 < y < a, \quad (8.10)$$

przy czym poza wskazanymi obszarami funkcje f i g wynoszą zero. Zatem problem sprowadził się do rozwiązania jednowymiarowych nieskończonych studni od 0 do a , co zostało zrobione w zadaniu 2 z serii 4. Możemy zatem wypisać, że

$$f_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi n}{a} x\right) & \text{dla } 0 < x < a, \\ 0 & \text{dla innych } x, \end{cases} \quad E_{1,n} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma} n^2, \quad (8.11)$$

oraz

$$g_k(y) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi k}{a} y\right) & \text{dla } 0 < y < a, \\ 0 & \text{dla innych } y, \end{cases} \quad E_{2,k} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma} k^2, \quad (8.12)$$

gdzie n i k numerujące nasze rozwiązania są liczbami naturalnymi. Ostatecznie dostajemy, że stany własne i energie własne cząstki w nieskończonej studni dwuwymiarowej wynoszą

$$\psi_{n,k}(x, y) = \begin{cases} \frac{2}{a} \sin\left(\frac{\pi n}{a} x\right) \sin\left(\frac{\pi k}{a} y\right) & \text{dla } 0 < x, y < a, \\ 0 & \text{dla innych } x, y, \end{cases} \quad (8.13)$$

oraz

$$E_{n,k} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma} (n^2 + k^2), \quad (8.14)$$

przy czym są numerowane dwiema liczbami kwantowymi $n, k = 1, 2, 3, \dots$

(b) Stan podstawowy odpowiada liczbom kwantowym $n = k = 1$. Stąd, poprawka do energii stanu podstawowego w pierwszym rzędzie rachunku zaburzeń wynosi

$$E_{1,1}^{(1)} = \int_0^a dx \int_0^a dy \psi_{1,1}^*(x, y) H'(x, y) \psi_{1,1}(x, y) = \frac{4V_0}{a^2} \int_0^a \sin^3\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx \int_0^a \sin^3\left(\frac{\pi y}{a}\right) dy, \quad (8.15)$$

gdzie podstawiliśmy (8.6) oraz (8.13). Aby obliczyć te całki korzystamy ze wzoru (4.3),

$$\begin{aligned} E_{1,1}^{(1)} &= \frac{V_0}{4a^2} \int_0^a \left(3 \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) - \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right) \right) dx \int_0^a \left(3 \sin\left(\frac{\pi y}{a}\right) - \sin\left(\frac{3\pi y}{a}\right) \right) dy \\ &= \frac{V_0}{4\pi^2} \left(-3 \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \frac{1}{3} \cos\left(\frac{3\pi x}{a}\right) \right) \Big|_0^a \left(-3 \cos\left(\frac{\pi y}{a}\right) + \frac{1}{3} \cos\left(\frac{3\pi y}{a}\right) \right) \Big|_0^a = \frac{64V_0}{9\pi^2}. \end{aligned} \quad (8.16)$$

Ponieważ stan podstawowy nie jest zdegenerowany użyliśmy tutaj rachunku zaburzeń bez degeneracji.

Pierwszy stan wzbudzony jest dwukrotnie zdegenerowany, albowiem stany $\psi_{1,2}$ oraz $\psi_{2,1}$ mają tę samą energię. W tym przypadku musimy użyć rachunku zaburzeń z degeneracją. Tzn. musimy najpierw wyznaczyć macierz zaburzenia w bazie stanów $\psi_{1,2}$ oraz $\psi_{2,1}$,

$$\hat{H}' = \begin{pmatrix} \langle 1, 2 | \hat{H}' | 1, 2 \rangle & \langle 1, 2 | \hat{H}' | 2, 1 \rangle \\ \langle 2, 1 | \hat{H}' | 1, 2 \rangle & \langle 2, 1 | \hat{H}' | 2, 1 \rangle \end{pmatrix}. \quad (8.17)$$

Obliczamy po kolei wszystkie elementy macierzowe. Bez wdawania się w szczegóły obliczeń, dostajemy

$$\begin{aligned} \langle 1, 2 | \hat{H}' | 1, 2 \rangle &= \int_0^a dx \int_0^a dy \psi_{1,2}^*(x, y) H'(x, y) \psi_{1,2}(x, y) \\ &= \frac{4V_0}{a^2} \int_0^a \sin^3\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx \int_0^a \sin\left(\frac{\pi y}{a}\right) \sin^2\left(\frac{2\pi y}{a}\right) dy = \frac{256V_0}{45\pi^2}, \\ \langle 2, 1 | \hat{H}' | 1, 2 \rangle &= \int_0^a dx \int_0^a dy \psi_{2,1}^*(x, y) H'(x, y) \psi_{1,2}(x, y) \\ &= \frac{4V_0}{a^2} \int_0^a \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) dx \int_0^a \sin^2\left(\frac{\pi y}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi y}{a}\right) dy = 0, \\ \langle 1, 2 | \hat{H}' | 2, 1 \rangle &= \langle 2, 1 | \hat{H}' | 1, 2 \rangle^* = 0, \\ \langle 2, 1 | \hat{H}' | 2, 1 \rangle &= \int_0^a dx \int_0^a dy \psi_{2,1}^*(x, y) H'(x, y) \psi_{2,1}(x, y) \\ &= \frac{4V_0}{a^2} \int_0^a \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right) dx \int_0^a \sin^3\left(\frac{\pi y}{a}\right) dy = \frac{256V_0}{45\pi^2}. \end{aligned} \quad (8.18)$$

Ostatecznie, macierz zaburzenia przybiera postać

$$\hat{H}' = \begin{pmatrix} \frac{256V_0}{45\pi^2} & 0 \\ 0 & \frac{256V_0}{45\pi^2} \end{pmatrix}. \quad (8.19)$$

Powyższa macierz posiada podwójną wartość własną równą $\frac{256V_0}{45\pi^2}$, stanowiącą poprawkę do energii pierwszego stanu wzbudzonego. W pierwszym rzędzie rachunku zaburzeń zaburzenie z zadania nie znosi degeneracji.

Zadanie 3

Jednowymiarowy oscylator harmoniczny o masie m i częstości ω został zaburzony Hamiltonianem

$$\hat{H}' = \varepsilon \frac{m\omega^2}{2} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x}^3, \quad (8.20)$$

gdzie ε jest bezwymiarowym małym parametrem. Można pokazać, że energia stanu podstawowego takiego oscylatora zachowuje się jak

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \left(1 - \frac{11}{16}\varepsilon^2 - \frac{465}{256}\varepsilon^4 - \frac{39709}{4096}\varepsilon^6 \right) + O(\varepsilon^8). \quad (8.21)$$

Używając rachunku zaburzeń wykazać słuszność tego wzoru do wyrazu kwadratowego w ε włącznie.

Rozwiązanie:

W rozwiązaniu skorzystamy z operatorów kreacji i anihilacji:

$$\begin{aligned} \hat{a} &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} + \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right) \\ \hat{a}^\dagger &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} - \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right), \end{aligned} \quad (8.22)$$

skąd wyznaczamy, że

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger). \quad (8.23)$$

Podnosimy otrzymane wyrażenie na $\hat{x}$ do sześciannu i podstawiamy do (8.20), co daje

$$\hat{H}' = \epsilon \frac{\hbar\omega}{4\sqrt{2}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^3 = \epsilon \frac{\hbar\omega}{4\sqrt{2}} \left(\underbrace{\hat{a}\hat{a}\hat{a}}_{(1)} + \underbrace{\hat{a}\hat{a}\hat{a}^\dagger}_{(2)} + \underbrace{\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}}_{(3)} + \underbrace{\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger}_{(4)} + \underbrace{\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}}_{(5)} + \underbrace{\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger}_{(6)} + \underbrace{\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a}}_{(7)} + \underbrace{\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger}_{(8)} \right). \quad (8.24)$$

W pierwszym rzędzie rachunku zaburzeń, poprawka do energii stanu podstawowego wyraża się wzorem

$$E_0^{(1)} = \langle 0 | \hat{H}' | 0 \rangle = 0, \quad (8.25)$$

gdzie $|0\rangle$ to stan podstawowy niezaburzonego oscylatora harmonicznego. Ze względu na postać zaburzenia, poprawka ta wynosi zero.

Poprawka do energii stanu podstawowego w drugim rzędzie rachunku zaburzeń wynosi

$$E_0^{(2)} = \sum_{m \neq 0} \frac{|\langle m | \hat{H}' | 0 \rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_m^{(0)}}. \quad (8.26)$$

Ponieważ $\hat{a}|0\rangle = 0$, to wyrazy oznaczone jako (1), (3), (5), (7) w (8.24) nie dają wkładu do $\langle m | \hat{H}' | 0 \rangle$. Wkładu nie daje również wyraz (2). Jedynie wyrazy (4) oraz (6) dla $m = 1$ oraz wyraz (8) dla $m = 3$ nie wyzerują wyrażenia. Stąd,

$$\begin{aligned} E_0^{(2)} &= \sum_{m \neq 0} \frac{|\langle m | \hat{H}' | 0 \rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_m^{(0)}} = \frac{|\langle 1 | \hat{H}' | 0 \rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_1^{(0)}} + \frac{|\langle 3 | \hat{H}' | 0 \rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_3^{(0)}} \\ &= \frac{|\langle 1 | \epsilon \frac{\hbar\omega}{4\sqrt{2}} (\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger) | 0 \rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_1^{(0)}} + \frac{|\langle 3 | \epsilon \frac{\hbar\omega}{4\sqrt{2}} (\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger) | 0 \rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_3^{(0)}} \\ &= \epsilon^2 \frac{\hbar^2\omega^2}{32} \left(\frac{|\langle 1 | \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger | 0 \rangle + \langle 1 | \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger | 0 \rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_1^{(0)}} + \frac{|\langle 3 | \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger | 0 \rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_3^{(0)}} \right). \end{aligned} \quad (8.27)$$

Występujące tu energie niezaburzonego oscylatora wynoszą $E_0^{(0)} = \frac{\hbar\omega}{2}$, $E_1^{(0)} = \frac{3\hbar\omega}{2}$, $E_3^{(0)} = \frac{7\hbar\omega}{2}$. Zatem $E_0^{(0)} - E_1^{(0)} = -\hbar\omega$ oraz $E_0^{(0)} - E_3^{(0)} = -3\hbar\omega$. Z kolei elementy macierzowe to $\langle 1 | \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger | 0 \rangle = \langle 1 | \hat{a}\hat{a}^\dagger | 1 \rangle = \sqrt{2} \langle 1 | \hat{a} | 2 \rangle = 2 \langle 1 | 1 \rangle = 2$, $\langle 1 | \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger | 0 \rangle = \langle 1 | \hat{a}^\dagger\hat{a} | 1 \rangle = \langle 1 | \hat{a}^\dagger | 0 \rangle = \langle 1 | 1 \rangle = 1$, $\langle 3 | \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger | 0 \rangle = \langle 3 | \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger | 1 \rangle = \sqrt{2} \langle 3 | \hat{a}^\dagger | 2 \rangle = \sqrt{6} \langle 3 | 3 \rangle = \sqrt{6}$. Podstawiając te wielkości do równania (8.27), dostajemy

$$E_0^{(2)} = -\frac{11}{32} \hbar\omega \epsilon^2. \quad (8.28)$$

Ostatecznie, energia stanu podstawowego zaburzonego oscylatora harmonicznego wynosi

$$E_0 = E_0^{(0)} + E_0^{(1)} + E_0^{(2)} + \dots = \frac{\hbar\omega}{2} \left(1 - \frac{11}{16} \epsilon^2 \right) + O(\epsilon^4), \quad (8.29)$$

w zgodzie z równaniem (8.21).

Zadanie 4

Cząstka o masie m znajduje się w trójwymiarowym izotropowym potencjale harmonicznym o częstotliwości ω . Do potencjału dodano małe zaburzenie postaci

$$\hat{H}' = \varepsilon \hat{x} \hat{y} \hat{z}^2. \quad (8.30)$$

Wyznaczyć w pierwszym rzędzie rachunku zaburzeń poprawki do energii pierwszego stanu wzbudzonego spowodowane tym zaburzeniem.

Rozwiązanie:

Energia cząstki znajdującej się w izotropowym trójwymiarowym potencjale harmonicznym o częstotliwości ω wyraża się wzorem

$$E_{n,k,m}^{(0)} = \hbar\omega \left(n + k + m + \frac{3}{2} \right), \quad (8.31)$$

gdzie $n, k, m = 0, 1, 2, \dots$. Pierwszy poziom wzbudzony jest trzykrotnie zdegenerowany, albowiem trzy stany własne $|1, 0, 0\rangle$, $|0, 1, 0\rangle$ oraz $|1, 0, 0\rangle$ posiadają tę samą energię równą $E_{1,0,0}^{(0)} = E_{0,1,0}^{(0)} = E_{0,0,1}^{(0)} = \frac{5\hbar\omega}{2}$. Musimy zatem zastosować rachunek zaburzeń z degeneracją, przy czym najwygodniej jest przeprowadzić rachunki posługując się operatorami kreacji i anihilacji.

Podobnie jak w poprzednim zadaniu, wprowadzamy operatory kreacji i anihilacji,

$$\hat{x} = A(\hat{a}_x + \hat{a}_x^\dagger), \quad (8.32)$$

$$\hat{y} = A(\hat{a}_y + \hat{a}_y^\dagger), \quad (8.33)$$

$$\hat{z} = A(\hat{a}_z + \hat{a}_z^\dagger), \quad (8.34)$$

gdzie stała $A = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$. Wynika stąd, że Hamiltonian zaburzenia (8.30) wyniesie

$$\begin{aligned} \hat{H}' &= \varepsilon A^4 (\hat{a}_x + \hat{a}_x^\dagger)(\hat{a}_y + \hat{a}_y^\dagger)(\hat{a}_z + \hat{a}_z^\dagger)(\hat{a}_x + \hat{a}_x^\dagger) \\ &= \varepsilon A^4 (\hat{a}_x + \hat{a}_x^\dagger)(\hat{a}_y + \hat{a}_y^\dagger)((\hat{a}_z^\dagger)^2 + \hat{a}_z^2 + \hat{a}_z \hat{a}_z^\dagger + \hat{a}_z^\dagger \hat{a}_z). \end{aligned} \quad (8.35)$$

Jego macierz w bazie stanów $|1, 0, 0\rangle$, $|0, 1, 0\rangle$ oraz $|1, 0, 0\rangle$ to

$$\hat{H}' = \begin{bmatrix} \langle 1, 0, 0 | \hat{H}' | 1, 0, 0 \rangle & \langle 1, 0, 0 | \hat{H}' | 0, 1, 0 \rangle & \langle 1, 0, 0 | \hat{H}' | 0, 0, 1 \rangle \\ \langle 0, 1, 0 | \hat{H}' | 1, 0, 0 \rangle & \langle 0, 1, 0 | \hat{H}' | 0, 1, 0 \rangle & \langle 0, 1, 0 | \hat{H}' | 0, 0, 1 \rangle \\ \langle 0, 0, 1 | \hat{H}' | 1, 0, 0 \rangle & \langle 0, 0, 1 | \hat{H}' | 0, 1, 0 \rangle & \langle 0, 0, 1 | \hat{H}' | 0, 0, 1 \rangle \end{bmatrix}. \quad (8.36)$$

Wyznaczamy $\hat{H}' |1, 0, 0\rangle$, $\hat{H}' |0, 1, 0\rangle$ oraz $\hat{H}' |0, 0, 1\rangle$:

$$\begin{aligned} \hat{H}' |1, 0, 0\rangle &= \varepsilon A^4 (\hat{a}_x + \hat{a}_x^\dagger)(\hat{a}_y + \hat{a}_y^\dagger) \left(\sqrt{2} |1, 0, 2\rangle + |1, 0, 0\rangle \right) = \varepsilon A^4 (\hat{a}_x + \hat{a}_x^\dagger) \left(\sqrt{2} |1, 1, 2\rangle + |1, 1, 0\rangle \right) \\ &= \varepsilon A^4 \left(\sqrt{2} |0, 1, 2\rangle + 2 |2, 1, 2\rangle + |0, 1, 0\rangle + \sqrt{2} |2, 1, 0\rangle \right), \end{aligned} \quad (8.37)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}' |0, 1, 0\rangle &= \varepsilon A^4 (\hat{a}_x + \hat{a}_x^\dagger)(\hat{a}_y + \hat{a}_y^\dagger) \left(\sqrt{2} |0, 1, 2\rangle + |0, 1, 0\rangle \right) \\ &= \varepsilon A^4 (\hat{a}_x + \hat{a}_x^\dagger) \left(\sqrt{2} |0, 0, 2\rangle + 2 |0, 2, 2\rangle + |0, 0, 0\rangle + \sqrt{2} |0, 2, 0\rangle \right) \\ &= \varepsilon A^4 \left(\sqrt{2} |1, 0, 2\rangle + 2 |1, 2, 2\rangle + |1, 0, 0\rangle + \sqrt{2} |1, 2, 0\rangle \right), \end{aligned} \quad (8.38)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}' |0, 0, 1\rangle &= \varepsilon A^4 (\hat{a}_x + \hat{a}_x^\dagger)(\hat{a}_y + \hat{a}_y^\dagger) \left(\sqrt{6} |0, 0, 3\rangle + 3 |0, 0, 1\rangle \right) \\ &= \varepsilon A^4 (\hat{a}_x + \hat{a}_x^\dagger) \left(\sqrt{6} |0, 1, 3\rangle + 3 |0, 1, 1\rangle \right) = \varepsilon A^4 \left(\sqrt{6} |1, 1, 3\rangle + 3 |1, 1, 1\rangle \right). \end{aligned} \quad (8.39)$$

W tej sytuacji macierz (8.36) przyjmuje postać

$$\hat{H}' = \begin{bmatrix} 0 & \varepsilon A^4 & 0 \\ \varepsilon A^4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (8.40)$$

Jej wartości własne wyznaczamy z warunku, że

$$\det \begin{bmatrix} -\lambda & \varepsilon A^4 & 0 \\ \varepsilon A^4 & -\lambda & 0 \\ 0 & 0 & -\lambda \end{bmatrix} = 0, \quad (8.41)$$

co daje

$$-\lambda^3 + \lambda \varepsilon^2 A^8 = 0 \Rightarrow \lambda(\lambda^2 - \varepsilon^2 A^8) = 0 \Rightarrow (\lambda = 0 \vee \lambda = \varepsilon A^4 \vee \lambda = -\varepsilon A^4). \quad (8.42)$$

Oznacza to, że pierwszy wzbudzony poziom energetyczny pod wpływem zadanego zaburzenia rozszczepia się na trzy podpoziomy o energiach,

$$\begin{aligned} E_{(1)} &= \frac{5}{2} \hbar \omega - \varepsilon \frac{\hbar^2}{4m^2 \omega^2}, \\ E_{(2)} &= \frac{5}{2} \hbar \omega, \\ E_{(3)} &= \frac{5}{2} \hbar \omega + \varepsilon \frac{\hbar^2}{4m^2 \omega^2}, \end{aligned} \quad (8.43)$$

a zatem zaburzenie to znosi całkowicie degenerację poziomą.

Zadanie 5

W klasie funkcji próbnych **(a)** $\psi_\alpha(x) = e^{-\alpha x^2}$, **(b)** $\psi_\beta(x) = x e^{-\beta x^2}$, **(c)** $\psi_\gamma(x) = \frac{1}{x^2 + \gamma^2}$ oszacować energię stanu podstawowego jednowymiarowego oscylatora harmonicznego o masie m i częstotliwości ω .

Rozwiązanie:

(a) Dla zadanej klasy funkcji próbnych, obliczamy $\langle \psi_\alpha | \psi_\alpha \rangle$:

$$\langle \psi_\alpha | \psi_\alpha \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_\alpha^*(x) \psi_\alpha(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}}. \quad (8.44)$$

Następnie, obliczamy wartość oczekiwaną

$$\begin{aligned} \langle \psi_\alpha | \hat{H} | \psi_\alpha \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_\alpha^*(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right) \psi_\alpha(x) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha x^2} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right) e^{-\alpha x^2} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-2\alpha x^2} \left[\frac{\alpha \hbar^2}{m} + \left(\frac{m\omega^2}{2} - \frac{2\alpha^2 \hbar^2}{m} \right) x^2 \right] = \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} \left[\frac{\hbar^2 \alpha}{2m} + \frac{m\omega^2}{8\alpha} \right]. \end{aligned} \quad (8.45)$$

Stąd wynika, że w klasie zadanych funkcji próbnych oszacowanie na energię stanu podstawowego dostaniemy minimalizując wielkość,

$$E(\alpha) = \frac{\langle \psi_\alpha | \hat{H} | \psi_\alpha \rangle}{\langle \psi_\alpha | \psi_\alpha \rangle} = \frac{\hbar^2 \alpha}{2m} + \frac{m\omega^2}{8\alpha}. \quad (8.46)$$

Obliczając pochodną

$$\frac{dE(\alpha)}{d\alpha} = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{m\omega^2}{8\alpha^2}, \quad (8.47)$$

i przyrównując ją do zera, dostajemy wartości α , w których funkcja (8.46) ma ekstrema. Są to

$$\alpha_{\pm} = \pm \frac{m\omega}{2\hbar}. \quad (8.48)$$

Ponieważ druga pochodna funkcji $E(\alpha)$ dla α_+ jest dodatnia, natomiast dla α_- jest ujemna, to stwierdzamy, że $E(\alpha)$ osiąga minimum dla α_+ . Ostatecznie, oszacowaniem energii stanu podstawowego jest

$$E(\alpha_+) = \frac{\hbar\omega}{2}. \quad (8.49)$$

Jak widać, w klasie zadanych funkcji próbnych dostaliśmy oszacowanie energii stanu podstawowego równe dokładnie tejże energii. Wynika to stąd, że jako klasę funkcji próbnych wybraliśmy funkcje Gaussowskie, a to funkcja Gaussowska opisuje stan podstawowy oscylatora. Im lepiej dobierzemy funkcje próbne, tym oszacowanie energii bliższe będzie rzeczywistej energii stanu podstawowego.

(b) Postępując w analogiczny sposób jak w punkcie (a) dochodzimy do wniosku, że w zadanej klasie funkcji próbnych nie daje się znaleźć oszacowania energii stanu podstawowego. Wynika to z faktu, że funkcje te są ortogonalne do funkcji stanu podstawowego oscylatora.

(c) Metoda postępowania jak w punkcie (a).

Zadanie 6

Rozważyć jednowymiarowy potencjał $V(x)$, który jest funkcją ciągłą t.j. $V(x) < 0$ dla każdego x oraz $V(x) \rightarrow 0$ dla $x \rightarrow \pm\infty$. Posługując się metodą wariacyjną pokazać, że w potencjale o tych własnościach zawsze istnieje stan związany (o energii mniejszej niż 0). W tym celu posłużyć się Gaussowskimi funkcjami próbnymi $\psi_\alpha(x) = e^{-\alpha x^2}$.

Rozwiązanie:

Dla zadanych funkcji, obowiązuje równanie (8.44). Ponadto,

$$\begin{aligned}\langle \psi_\alpha | \hat{H} | \psi_\alpha \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) e^{-\alpha x^2} dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha x^2} \left(\frac{\hbar^2 \alpha}{m} (1 - 2\alpha x^2) + V(x) \right) dx \\ &= \frac{\hbar^2 \alpha}{m} \int_{-\infty}^{\infty} (1 - 2\alpha x^2) e^{-2\alpha x^2} dx + \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha x^2} V(x) dx = \frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{\frac{\pi \alpha}{2}} + \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha x^2} V(x) dx.\end{aligned}\quad (8.50)$$

Stąd, oszacowanie energii stanu podstawowego zadane jest przez minimum funkcji,

$$E(\alpha) = \frac{\langle \psi_\alpha | \hat{H} | \psi_\alpha \rangle}{\langle \psi_\alpha | \psi_\alpha \rangle} = \frac{\hbar^2 \alpha}{2m} + \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha x^2} V(x) dx. \quad (8.51)$$

Z warunku na zerowanie się pochodnej funkcji $E(\alpha)$,

$$\frac{dE(\alpha)}{d\alpha} = 0 = \frac{\hbar^2}{2m} + \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha}} \int_{-\infty}^{\infty} V(x) (1 - 4\alpha x^2) e^{-2\alpha x^2} dx, \quad (8.52)$$

dostajemy

$$\frac{\hbar^2}{2m} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha}} \int_{-\infty}^{\infty} V(x) (4\alpha x^2 - 1) e^{-2\alpha x^2} dx. \quad (8.53)$$

Wstawiając to wyrażenie do (8.51), otrzymujemy

$$E(\alpha) = \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} V(x) (4\alpha x^2 + 1) e^{-2\alpha x^2} dx. \quad (8.54)$$

Wyrażenie podcałkowe jest zawsze ujemne z uwagi na warunek $V(x) < 0$. Oznacza to, że w klasie naszych funkcji próbnych $E(\alpha)$ jest zawsze ujemne. Jako że $E(\alpha)$ stanowi oszacowanie energii stanu podstawowego z góry, dowiedliśmy tym samym, że musi istnieć stan o $E < 0$, czyli stan związany.

9 Seria 9

Zadanie 1

Cząstka znajduje się w stanie kwantowym $|\ell m\rangle$. Na układzie dokonano pomiaru rzutu, $\hat{L}_{z'}$, wektora orbitalnego momentu pędu na oś z' tworzącą z osią z kąt α . Obliczyć wartość oczekiwaną $\langle \hat{L}_{z'} \rangle$.

Rozwiązanie:

Aby obliczyć szukaną wartość oczekiwaną musimy przedstawić operator $\hat{L}_{z'}$ za pomocą współrzędnych operatora $\hat{L}$ w układzie nieprimowanym. Operator $\hat{L}$ transformuje się pod wpływem obrotów jak wektor, a macierz transformacji składa się z kosinusów kierunkowych. Tzn.,

$$\begin{pmatrix} \hat{L}_{x'} \\ \hat{L}_{y'} \\ \hat{L}_{z'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos x'x & \cos x'y & \cos x'z \\ \cos y'x & \cos y'y & \cos y'z \\ \cos z'x & \cos z'y & \cos z'z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{L}_x \\ \hat{L}_y \\ \hat{L}_z \end{pmatrix}, \quad (9.1)$$

gdzie np. $\cos x'x$ oznacza kosinus kąta pomiędzy osią x' układu obróconego a osią x . Stąd wynika, że

$$\begin{aligned} \hat{L}_{z'} &= \hat{L}_x \cos z'x + \hat{L}_y \cos z'y + \hat{L}_z \cos z'z \\ \Rightarrow \langle \hat{L}_{z'} \rangle &= \langle \hat{L}_x \rangle \cos z'x + \langle \hat{L}_y \rangle \cos z'y + \langle \hat{L}_z \rangle \cos z'z, \end{aligned} \quad (9.2)$$

gdzie wartość oczekiwaną liczoną jest na stanie $|\ell m\rangle$.

Układ znajduje się w stanie własnym operatora $\hat{L}_z$. Oznacza to, że wartość oczekiwaną operatorów $\hat{L}_x$ oraz $\hat{L}_y$ na tym stanie wynosi 0. Można to pokazać korzystając z faktu, że $[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x$. Mianowicie,

$$i\hbar \langle \hat{L}_x \rangle = \langle \hat{L}_y \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y \rangle = \langle \hat{L}_y \hat{L}_z \rangle - \langle \hat{L}_z \hat{L}_y \rangle = \hbar m \langle \hat{L}_y \rangle - \hbar m \langle \hat{L}_y \rangle = 0, \quad (9.3)$$

gdzie wykorzystaliśmy $\hat{L}_z |\ell m\rangle = \hbar m |\ell m\rangle$. Podobnie przebiega dowód dla $\langle \hat{L}_y \rangle = 0$. Podstawiając wyliczone tak średnie do równania (9.2), dostajemy

$$\langle \hat{L}_{z'} \rangle = \langle \hat{L}_z \rangle \cos z'z = \hbar m \cos \alpha, \quad (9.4)$$

gdzie w naszym przypadku kąt pomiędzy osiami z' oraz z wynosi α .

Zadanie 2

Cząstka znajduje się w stanie, w którym pomiar wielkości $\hat{L}^2$ i $\hat{L}_z$ daje zawsze w wyniku wartości $2\hbar^2$ i $\hbar$. Jakie jest prawdopodobieństwo, że mierząc w tym stanie $\hat{L}_x$ dostaniemy również $\hbar$?

Rozwiązanie:

Z treści zadania wynika, że cząstka znajduje się w stanie własnym operatorów $\hat{L}^2$ oraz $\hat{L}_z$ o orbitalnej liczbie kwantowej $\ell = 1$ oraz o magnetycznej liczbie kwantowej $m = 1$. Stan ten oznaczamy jako $|1, 1\rangle$.

Wyznamy teraz macierz operatora $\hat{L}_x$ w bazie wektorów własnych operatora $\hat{L}_z$. Ponieważ cząstka jest w stanie o $\ell = 1$, interesujące nas tu stany własne $\hat{L}_z$ to $|1, -1\rangle$, $|1, 0\rangle$ oraz $|1, 1\rangle$. W rozwiązaniu korzystamy z operatorów drabinkowych,

$$\begin{cases} \hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y, \\ \hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y. \end{cases} \quad (9.5)$$

Dodając stronami oba równania, dostajemy

$$\hat{L}_x = \frac{1}{2} (\hat{L}_+ + \hat{L}_-). \quad (9.6)$$

Działając tym operatorem na każdy z interesujących nas stanów własnych $\hat{L}_z$, mamy

$$\hat{L}_x |1, -1\rangle = \frac{1}{2} (\hat{L}_+ + \hat{L}_-) |1, -1\rangle = \frac{1}{2} \hat{L}_+ |1, -1\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2} \hbar |1, 0\rangle, \quad (9.7)$$

$$\hat{L}_x |1, 0\rangle = \frac{1}{2} (\hat{L}_+ + \hat{L}_-) |1, 0\rangle = \frac{1}{2} \hat{L}_+ |1, 0\rangle + \frac{1}{2} \hat{L}_- |1, 0\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2} \hbar |1, 1\rangle + \frac{\sqrt{2}}{2} \hbar |1, -1\rangle, \quad (9.8)$$

$$\hat{L}_x |1, 1\rangle = \frac{1}{2} (\hat{L}_+ + \hat{L}_-) |1, 1\rangle = \frac{1}{2} \hat{L}_- |1, 1\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2} \hbar |1, 0\rangle. \quad (9.9)$$

Stąd, dostajemy macierz operatora $\hat{L}_x$ w zadanej bazie,

$$\hat{L}_x = \begin{bmatrix} 0 & \frac{\sqrt{2}}{2}\hbar & 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2}\hbar & 0 & \frac{\sqrt{2}}{2}\hbar \\ 0 & \frac{\sqrt{2}}{2}\hbar & 0 \end{bmatrix}. \quad (9.10)$$

W następnym kroku, szukamy wektora własnego tej macierzy dla wartości własnej $\hbar$,

$$\begin{bmatrix} -\hbar & \frac{\sqrt{2}}{2}\hbar & 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2}\hbar & -\hbar & \frac{\sqrt{2}}{2}\hbar \\ 0 & \frac{\sqrt{2}}{2}\hbar & -\hbar \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (9.11)$$

Z powyższego układu równań otrzymujemy następujące zależności,

$$a = \frac{\sqrt{2}}{2}b \wedge c = \frac{\sqrt{2}}{2}b. \quad (9.12)$$

Wektor własny przyjmuje więc postać,

$$\begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2}b \\ b \\ \frac{\sqrt{2}}{2}b \end{bmatrix} = \frac{\sqrt{2}}{2}b \begin{bmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{bmatrix}, \quad (9.13)$$

przy czym po unormowaniu wynosi on,

$$|\Phi\rangle = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} |1, -1\rangle + \frac{\sqrt{2}}{2} |1, 0\rangle + \frac{1}{2} |1, 1\rangle. \quad (9.14)$$

Tutaj, dokonaliśmy już rozkładu wektora $|\Phi\rangle$ na stany własne $|1, -1\rangle$, $|1, 0\rangle$ i $|1, 1\rangle$. Podsumowując, wektor $|\Phi\rangle$ jest stanem własnym operatorów $\hat{L}^2$ i $\hat{L}_x$ takim, że pomiar na tym stanie $\hat{L}^2$ i $\hat{L}_x$ da odpowiednio wartości $2\hbar^2$ oraz $\hbar$.

W końcu, prawdopodobieństwo tego, że pomiar na stanie $|1, 1\rangle$ operatora $\hat{L}_x$ da w wyniku $\hbar$ wynosi

$$P = |\langle \Phi | 1, 1 \rangle|^2 = \left| \left(\frac{1}{2} \langle 1, -1 | + \frac{\sqrt{2}}{2} \langle 1, 0 | + \frac{1}{2} \langle 1, 1 | \right) | 1, 1 \rangle \right|^2 = \frac{1}{4}. \quad (9.15)$$

Zadanie 3

Cząstka znajduje się w stanach kwantowych: **(a)** $\psi(\mathbf{r}) = f(r) \sin \theta \cos \phi$, **(b)** $\psi(\mathbf{r}) = g(r) \sin^2 \theta \cos(2\phi)$, **(c)** $\psi(\mathbf{r}) = h(r) \sin \theta \cos \theta \sin \phi$, gdzie $f(r)$, $g(r)$ oraz $h(r)$ są zadanymi funkcjami radialnymi. W każdym przypadku wyznaczyć rozkład prawdopodobieństwa pomiaru $\hat{L}^2$ i $\hat{L}_z$.

Rozwiązanie:

W rozwiązaniu będziemy korzystać z następujących harmonik sferycznych,

$$Y_1^1 = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\phi}, \quad (9.16)$$

$$Y_1^{-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\phi}, \quad (9.17)$$

$$Y_2^{-2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{-2i\phi}, \quad (9.18)$$

$$Y_2^{-1} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{-i\phi}, \quad (9.19)$$

$$Y_2^1 = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{i\phi}, \quad (9.20)$$

$$Y_2^2 = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{2i\phi}. \quad (9.21)$$

(a) Funkcja $\psi(\mathbf{r}) = f(r) \sin \theta \cos \varphi$ faktoryzuje się na część radialną $f(r)$ oraz część kątową $G(\theta, \phi) = \sin \theta \cos \phi$, przy czym funkcje te nie są unormowane. Aby mówić o rozkładzie prawdopodobieństwa zadanym w treści, musimy unormować funkcję kątową. W tym celu obliczamy całkę,

$$\int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi |G(\theta, \phi)|^2 = \int_0^\pi \sin^3 \theta d\theta \int_0^{2\pi} \cos^2 \phi d\phi. \quad (9.22)$$

Całkę po kącie θ wyznaczamy przez wprowadzenie zmiennej $\cos \theta = u$,

$$\int_0^\pi \sin^3 \theta d\theta = - \int_1^{-1} (1 - u^2) du = \left(\frac{1}{3} u^3 - u \right) \Big|_1^{-1} = \frac{4}{3}. \quad (9.23)$$

Całkę po kącie ϕ obliczamy następująco,

$$\int_0^{2\pi} \cos^2 \phi d\phi = \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} (1 + \cos(2\phi)) d\phi = \frac{1}{2} \left(\phi + \frac{1}{2} \sin(2\phi) \right) \Big|_0^{2\pi} = \pi. \quad (9.24)$$

Ostatecznie,

$$\int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi |G(\theta, \phi)|^2 = \frac{4\pi}{3}. \quad (9.25)$$

Oznacza to, że musimy przeddefiniować funkcję kątową tak, że

$$\tilde{G}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \theta \cos \phi. \quad (9.26)$$

Następnie, wyrażamy ją jako kombinację liniową harmonik sferycznych. W tym celu korzystamy ze wzoru,

$$\cos \phi = \frac{e^{i\phi} + e^{-i\phi}}{2}, \quad (9.27)$$

co prowadzi do

$$\tilde{G}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{16\pi}} \sin \theta e^{i\phi} + \sqrt{\frac{3}{16\pi}} \sin \theta e^{-i\phi} = -\frac{1}{\sqrt{2}} Y_1^1 + \frac{1}{\sqrt{2}} Y_1^{-1}, \quad (9.28)$$

gdzie skorzystaliśmy ze wzorów (9.16) i (9.17). Moduły współczynników stojących przy harmonikach sferycznych podniesione do kwadratu dadzą prawdopodobieństwo zmierzenia na stanie $\psi(\mathbf{r})$ odpowiednich wartości $\vec{L}^2$ oraz L_z ,

$$P(1, 1) = \left(-\frac{1}{\sqrt{2}} \right)^2 = \frac{1}{2}, \quad (9.29)$$

$$P(1, -1) = \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right)^2 = \frac{1}{2}. \quad (9.30)$$

Oznacza to, że w wyniku pomiaru $\vec{L}^2$ oraz L_z na stanie $\psi(\mathbf{r})$ z prawdopodobieństwem $\frac{1}{2}$ zmierzone zostaną wartości $2\hbar^2$ i $\hbar$, oraz z prawdopodobieństwem $\frac{1}{2}$ wartości $2\hbar^2$ i $-\hbar$.

(b) Dla funkcji falowej $\psi(\mathbf{r}) = g(r)H(\theta, \phi)$, gdzie $H(\theta, \phi) = \sin^2 \theta \cos(2\phi)$ tak, jak poprzednio rozpoznamy od znormalizowania funkcji $H(\theta, \phi)$,

$$\int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi |H(\theta, \phi)|^2 = \int_0^\pi \sin^5 \theta d\theta \int_0^{2\pi} \cos^2(2\phi) d\phi. \quad (9.31)$$

Całkę po θ wykonujemy dzięki podstawieniu $\cos \theta = u$, co prowadzi do

$$\int_0^\pi \sin^5 \theta d\theta = - \int_1^{-1} (1 - u^2)^2 du = \int_1^{-1} (2u^2 - u^4 - 1) du = \frac{2}{3} u^3 - \frac{1}{5} u^5 - u \Big|_1^{-1} = \frac{16}{15}. \quad (9.32)$$

Z kolei całka po ϕ , podobnie jak w punkcie (a), wynosi π . Stąd wynika, że

$$\int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi |H(\theta, \phi)|^2 = \frac{16\pi}{15}, \quad (9.33)$$

a zatem unormowana funkcja kątowna wynosi

$$\tilde{H}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{15}{16\pi}} \sin^2 \theta \cos(2\phi). \quad (9.34)$$

Rozpisując $\cos(2\phi)$ z pomocą wzoru (9.27), dostajemy

$$\tilde{H}(\theta, \psi) = \sqrt{\frac{15}{64\pi}} \sin^2 \theta e^{2i\phi} + \sqrt{\frac{15}{64\pi}} \sin^2 \theta e^{-2i\phi} = \frac{1}{\sqrt{2}} Y_2^2 + \frac{1}{\sqrt{2}} Y_2^{-2}, \quad (9.35)$$

gdzie skorzystaliśmy ze wzorów (9.18) i (9.21). Z powyższego wynika, że na skutek pomiaru na stanie $\psi(\mathbf{r})$ wielkości $\tilde{L}^2$ i L_z zmierzmy z prawdopodobieństwem $\frac{1}{2}$ wartości $6\hbar^2$ i $2\hbar$ a także z prawdopodobieństwem $\frac{1}{2}$ wartości $6\hbar^2$ i $-2\hbar$.

(c) W przypadku funkcji $\psi(\mathbf{r}) = h(r)K(\theta, \phi)$, gdzie $K(\theta, \phi) = \sin \theta \cos \theta \sin \phi$, warunek unormowania części kątowej sprowadza się do obliczenia całki,

$$\int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi |K(\theta, \phi)|^2 = \int_0^\pi \sin^3 \theta \cos^2 \theta d\theta \int_0^{2\pi} \sin^2 \phi d\phi. \quad (9.36)$$

W przypadku całki po θ , mamy

$$\int_0^\pi \sin^3 \theta \cos^2 \theta d\theta = \int_0^\pi \sin^3 \theta d\theta - \int_0^\pi \sin^5 \theta d\theta = \frac{4}{3} - \frac{16}{15} = \frac{4}{15}, \quad (9.37)$$

gdzie skorzystaliśmy z wyników (9.23) i (9.32). Z kolei całka po ϕ wynosi ponownie π . Ostatecznie,

$$\int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi |K(\theta, \phi)|^2 = \frac{4\pi}{15}. \quad (9.38)$$

Unormowana funkcja kątowna wynosi zatem

$$\tilde{K}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{15}{4\pi}} \sin \theta \cos \theta \sin \phi. \quad (9.39)$$

Podstawiając tu,

$$\sin \phi = \frac{e^{i\phi} - e^{-i\phi}}{2i}, \quad (9.40)$$

dostajemy

$$\tilde{K}(\theta, \phi) = i\sqrt{\frac{15}{16\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{-i\phi} - i\sqrt{\frac{15}{16\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{i\phi} = \frac{i}{\sqrt{2}} Y_2^{-1} + \frac{i}{\sqrt{2}} Y_2^1, \quad (9.41)$$

przy czym skorzystaliśmy z (9.19) i (9.20). Na tej podstawie stwierdzamy, że na zadanym stanie $\psi(\mathbf{r})$ z prawdopodobieństwem $\frac{1}{2}$ zmierzmy wartości $\tilde{L}^2$ and L_z równe $6\hbar^2$ i $-\hbar$, oraz z takim samym prawdopodobieństwem wartości $6\hbar^2$ i $\hbar$.

Zadanie 4

Znaleźć stany i energie własne płaskiego rotatora (tzn. takiego, którego ruch ograniczony jest do płaszczyzny). W sytuacji, gdy rotator opisany jest funkcją falową,

$$\psi(\varphi) = N \cos^2 \varphi, \quad (9.42)$$

wyznaczyć rozkład prawdopodobieństwa pomiaru $\hat{L}_z$ na tym stanie.

Rozwiązanie:

Hamiltonian płaskiego rotatora o momencie bezwładności I wynosi $\hat{H} = \frac{\hat{L}_z^2}{2I}$, gdzie $\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$. Stąd równanie Schrödingera przyjmuje postać,

$$-\frac{\hbar^2}{2I} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} = E f, \quad (9.43)$$

gdzie f to poszukiwane funkcje własne, a $E \geq 0$ energie własne. Oznaczając $m^2 = 2IE/\hbar^2$, otrzymujemy równanie różniczkowe

$$\frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} = -m^2 f, \quad (9.44)$$

którego rozwiązaniami są funkcje

$$f(\varphi) = Ae^{\pm im\varphi}. \quad (9.45)$$

Ponieważ funkcje falowe muszą być określone w sposób jednoznaczny, musi zachodzić $f(\varphi) = f(\varphi + 2\pi)$. To z kolei wymusza warunek $m \in \mathbb{Z}$. Pozwalając m przyjmować dodatnie i ujemne wartości, możemy nie uwzględniać znaku $\pm$ w eksponentach. Normalizacja funkcji falowej daje

$$\int_0^{2\pi} |f(\varphi)|^2 d\varphi = |A|^2 \int_0^{2\pi} d\varphi = 2\pi |A|^2 = 1 \Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}, \quad (9.46)$$

co jest określone z dokładnością do czynnika fazowego. Stany i energie własne płaskiego rotatora dane są więc przez

$$f_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, \quad E_m = \frac{\hbar^2 m^2}{2I}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (9.47)$$

Rozważmy teraz funkcję falową $\psi(\varphi) = N \cos^2 \varphi$. Stałą normalizacyjną znajdujemy z warunku,

$$\int_0^{2\pi} |\psi(\varphi)|^2 d\varphi = |N|^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \cos^4 \varphi = \frac{3\pi}{4} |N|^2 = 1 \Rightarrow N = \frac{2}{\sqrt{3\pi}}, \quad (9.48)$$

przy czym jest ona wyznaczona z dokładnością do czynnika fazowego. Unormowana funkcja falowa rotatora wynosi zatem,

$$\psi(\varphi) = \frac{2}{\sqrt{3\pi}} \cos^2 \varphi = \frac{2}{\sqrt{3\pi}} \frac{e^{2i\varphi} + e^{-2i\varphi} + 2e^{0i\varphi}}{4} = \frac{1}{\sqrt{6}} (f_2(\varphi) + f_{-2}(\varphi) + 2f_0(\varphi)), \quad (9.49)$$

gdzie rozpisaliśmy ją w bazie stanów własnych (9.47). Stąd wynika, że z prawdopodobieństwem $1/6$ pomiar $\hat{L}_z$ na stanie $\psi(\varphi)$ zwróci wartość $2\hbar$, z prawdopodobieństwem $1/6$ zwróci $-2\hbar$ i z prawdopodobieństwem $2/3$ zwróci wartość 0 .

Zadanie 5

Asymetryczny rotator opisany jest Hamiltonianem,

$$\hat{H} = \frac{\hat{L}_x^2}{2I_1} + \frac{\hat{L}_y^2}{2I_2} + \frac{\hat{L}_z^2}{2I_3}. \quad (9.50)$$

(a) Znaleźć stany i energie własne rotatora, dla którego dwa spośród momentów bezwładności są sobie równe, $I_1 = I_2 = I \neq I_3$. Przedyskutować degenerację poziomów energetycznych rotatora.

(b) W sytuacji, gdy oba momenty bezwładności się trochę różnią, tzn. $I_1 - I_2 = \Delta \ll I_1 + I_2 = 2I$, Hamiltonian układu można rozwinąć w małym parametrze $\frac{\Delta}{2I} \ll 1$. Pokazać, że poprawka do Hamiltonianu w najniższym rzędzie rozwinięcia wynosi

$$\hat{H}' = \frac{\Delta}{4I^2} (\hat{L}_y^2 - \hat{L}_x^2).$$

(c) Wyznaczyć w pierwszym rzędzie rachunku zaburzeń poprawki do energii stanów o $\ell = 0$ i $\ell = 1$, spowodowane zaburzeniem $\hat{H}'$.

Rozwiązanie:

(a) Dokonajmy użytecznego przekształcenia Hamiltonianu asymetrycznego rotatora,

$$\hat{H} = \frac{\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2}{2I} + \frac{\hat{L}_z^2}{2I_3} = \frac{\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2}{2I} + \frac{\hat{L}_z^2}{2I_3} = \frac{\hat{L}^2}{2I} + \frac{\hat{L}_z^2}{2I_e}, \quad (9.51)$$

gdzie wprowadziliśmy oznaczenie,

$$\frac{1}{2I_e} = \frac{1}{2I_3} - \frac{1}{2I}, \quad (9.52)$$

$$I_e = \frac{I_3 I}{I - I_3}. \quad (9.53)$$

Jak wiadomo, operatory $\hat{L}^2$ i $\hat{L}_z^2$ komutują ze sobą, a skoro zapisaliśmy za ich pomocą Hamiltonian, istnieje wspólna dla tych operatorów i Hamiltonianu baza funkcji własnych. Z teorii momentu pędu wiemy, że bazę taką stanowią harmoniki sferyczne Y_ℓ^m , oznaczane w abstrakcyjnej przestrzeni Hilberta jako $|\ell, m\rangle$, są więc one poszukiwanymi stanami własnymi rotatora.

Energie własne znajdujemy działając Hamiltonianem na stany własne $|\ell, m\rangle$,

$$\hat{H} |\ell, m\rangle = \frac{\hat{L}^2}{2I} |\ell, m\rangle + \frac{\hat{L}_z^2}{2I_e} |\ell, m\rangle = \left(\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2I} + \frac{\hbar^2 m^2}{2I_e} \right) |\ell, m\rangle. \quad (9.54)$$

Stąd wynika, że

$$E_{\ell m} = \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2I} + \frac{\hbar^2 m^2}{2I_e}, \quad (9.55)$$

$$\ell = 0, 1, 2, \dots, \quad m = -\ell, -\ell+1, \dots, 0, \dots, \ell-1, \ell.$$

Zauważmy, że dla ustalonego ℓ mamy $2\ell+1$ różnych wartości m , przy czym przeciwne m dają tę samą wartość energii $E_{\ell m}$. Stąd wnioskujemy, że każdy poziom energetyczny z $m \neq 0$ jest podwójnie zdegenerowany, a te z $m = 0$ pojedynczo. To wszystko przy założeniu, że stosunek I do I_e nie jest liczbą wymierną. Gdyby tak nie było i $I_e = \frac{q}{p}I$, energia byłaby proporcjonalna do $\ell(\ell+1) + pm^2/q$ i wartość degeneracji mogłaby ulec zmianie, tj. dla konkretnych liczb całkowitych p i q mogłyby się znaleźć nietrywialne ℓ i m dające tę samą energię w różnych stanach.

(b) Z treści zadania wynika, że

$$\begin{cases} I_1 - I_2 = \Delta \\ I_1 + I_2 = 2I \end{cases} \implies \begin{cases} I_1 = I + \Delta/2 \\ I_2 = I - \Delta/2. \end{cases} \quad (9.56)$$

Podstawiając te wielkości do Hamiltonianu, dostajemy

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\hat{L}_x^2}{2I_1} + \frac{\hat{L}_y^2}{2I_2} + \frac{\hat{L}_z^2}{2I_3} = \frac{\hat{L}_x^2}{2I + \Delta} + \frac{\hat{L}_y^2}{2I - \Delta} + \frac{\hat{L}_z^2}{2I_3} = \frac{\hat{L}_x^2}{2I(1 + \Delta/2I)} + \frac{\hat{L}_y^2}{2I(1 - \Delta/2I)} + \frac{\hat{L}_z^2}{2I_3} \\ &= \frac{\hat{L}_x^2}{2I} \left(1 - \frac{\Delta}{2I}\right) + \frac{\hat{L}_y^2}{2I} \left(1 + \frac{\Delta}{2I}\right) + \frac{\hat{L}_z^2}{2I_3} = \frac{\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2}{2I} + \frac{\hat{L}_z^2}{2I_3} + \frac{\Delta}{4I^2} (\hat{L}_y^2 - \hat{L}_x^2), \end{aligned} \quad (9.57)$$

gdzie dokonaliśmy rozwinięcia Taylora funkcji $(1+x)^{-1} \approx 1-x$ dla małych x . Tym samym wyprowadziliśmy, że poprawkę do Hamiltonianu, o którym mowa w punkcie (a) stanowi $\hat{H}' = \frac{\Delta}{4I^2} (\hat{L}_y^2 - \hat{L}_x^2)$.

(c) Przepiszmy Hamiltonian zaburzenia w języku operatorów drabinkowych,

$$\hat{L}_x = \frac{\hat{L}_+ + \hat{L}_-}{2}, \hat{L}_y = \frac{\hat{L}_+ - \hat{L}_-}{2i} \implies \hat{L}_y^2 - \hat{L}_x^2 = -\frac{\hat{L}_+^2 + \hat{L}_-^2}{2}, \quad (9.58)$$

skąd wynika, że

$$\hat{H}' = -\frac{\Delta}{8I^2} (\hat{L}_+^2 + \hat{L}_-^2). \quad (9.59)$$

Ułatwi to nam wyznaczenie elementów macierzowych operatora $\hat{H}'$ na stanach o $\ell = 0$ oraz $\ell = 1$.

Stan o $\ell = 0$ jest niezdegenerowany i jest to $|0, 0\rangle$. W związku z tym w pierwszym rzędzie rachunku zaburzeń poprawkę do energii tego stanu stanowi $E_{00}^{(1)} = \langle 0, 0 | \hat{H}' | 0, 0 \rangle$. Ponieważ $\langle 0, 0 | \hat{L}_+^2 + \hat{L}_-^2 | 0, 0 \rangle = 0$, więc $E_{00}^{(1)} = 0$. Jesteśmy w stanie szybko to stwierdzić poprzez fakt, że operatory drabinkowe podwyższają lub obniżają m stanu. Jakikolwiek więc ich działanie na $|0, 0\rangle$ da zero, gdyż nie da się już tego stanu obniżyć lub podwyższyć.

Podobnie nie jest zdegenerowany poziom energetyczny E_{10} . Stosując ten sam argument, co powyżej dostajemy, że $E_{10}^{(1)} = \langle 1, 0 | \hat{H}' | 1, 0 \rangle = 0$.

Z kolei stany $|1, 1\rangle$ oraz $|1, -1\rangle$ odpowiadają tej samej energii, a zatem w tym przypadku należy zastosować rachunek zaburzeń z degeneracją. Znalezienie macierzy zaburzenia w bazie tych stanów sprowadza się do obliczenia elementów macierzowych,

$$\langle 1, 1 | \hat{L}_+^2 + \hat{L}_-^2 | 1, 1 \rangle = 0, \quad \langle 1, -1 | \hat{L}_+^2 + \hat{L}_-^2 | 1, -1 \rangle = 0, \quad \langle 1, \pm 1 | \hat{L}_+^2 + \hat{L}_-^2 | 1, \mp 1 \rangle = 2\hbar^2, \quad (9.60)$$

gdzie skorzystaliśmy z własności operatorów drabinkowych $\hat{L}_\pm |\ell, m\rangle = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1) - m(m\pm 1)} |\ell, m\pm 1\rangle$. W bazie $\{|1, 1\rangle, |1, -1\rangle\}$ macierz zaburzenia ma więc postać,

$$-\frac{\Delta\hbar^2}{4I^2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad (9.61)$$

a jej wartości własne to $\pm\Delta\hbar^2/4I^2$. Wartości te stanowią poprawki pierwszego rzędu do energii poziomu niezaburzonego $E_{11} = E_{1-1} = \frac{\hbar^2}{I} + \frac{\hbar^2}{2I_e}$. Tak więc, pod wpływem zaburzenia $\hat{H}'$ poziom ten rozszczepia się na dwa poziomy o energiach $\frac{\hbar^2}{I} + \frac{\hbar^2}{2I_e} \pm \frac{\Delta\hbar^2}{4I^2}$.

10 Seria 10

Zadanie 1

W chwili $t = 0$, atom wodoru znajduje się w stanie opisanym funkcją falową,

$$\psi(\vec{r}, 0) = N \left[e^{-r/a_0} + \frac{x+y+z}{2a_0} e^{-r/2a_0} \right]. \quad (10.1)$$

(a) Obliczyć stałą normalizacyjną N .

(b) Wyznaczyć ewolucję czasową funkcji falowej, $\psi(\vec{r}, t)$. Na tej podstawie, wyznaczyć rozkład prawdopodobieństwa pomiaru energii w chwili t oraz obliczyć wartość oczekiwaną tego pomiaru.

(c) Wyznaczyć rozkład prawdopodobieństwa pomiaru $\hat{L}^2$ w stanie opisanym funkcją falową $\psi(\vec{r}, t)$. Obliczyć wartość oczekiwaną tego pomiaru w chwili t .

Rozwiązanie:

(a) Można pokazać, że zadany stan początkowy (10.1) daje się przedstawić jako superpozycja następujących stanów własnych atomu wodoru $\psi_{n\ell m}(\vec{r})$,

$$\psi(\vec{r}, 0) = N \sqrt{\pi a_0^3} [\psi_{100}(\vec{r}) + 2(i-1)\psi_{211}(\vec{r}) + 2(1+i)\psi_{21-1}(\vec{r}) + 2\sqrt{2}\psi_{210}(\vec{r})]. \quad (10.2)$$

Aby wyznaczyć N , przyrównujemy normę (10.2) do jedynki. Ponieważ różne stany własne atomu wodoru są ortogonalne, licząc normę wystarczy podnieść do kwadratu moduły współczynników przy $\psi_{n\ell m}(\vec{r})$ i je zsumować,

$$1 = N^2 \pi a_0^3 (1 + 4|i-1|^2 + 4|1+i|^2 + 8) \implies N^2 = \frac{1}{25\pi a_0^3}. \quad (10.3)$$

Stąd wynika, że unormowana funkcja falowa stanu początkowego, z dokładnością do czynnika fazowego, wynosi

$$\psi(\vec{r}, 0) = \frac{1}{5} [\psi_{100}(\vec{r}) + 2(i-1)\psi_{211}(\vec{r}) + 2(1+i)\psi_{21-1}(\vec{r}) + 2\sqrt{2}\psi_{210}(\vec{r})]. \quad (10.4)$$

(b) Funkcja falowa w chwili $t > 0$ wynosi

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{5} \left[e^{-iE_1 t/\hbar} \psi_{100}(\vec{r}) + e^{-iE_2 t/\hbar} \left(2(i-1)\psi_{211}(\vec{r}) + 2(1+i)\psi_{21-1}(\vec{r}) + 2\sqrt{2}\psi_{210}(\vec{r}) \right) \right], \quad (10.5)$$

gdzie $E_1 = -13.6$ eV oraz $E_2 = -3.4$ eV. W wyniku pomiaru energii na zadanym stanie możemy zmierzyć jedynie wartości E_1 i E_2 , przy czym prawdopodobieństwa tych pomiarów wynoszą odpowiednio,

$$p(E_1) = \frac{1}{25}, \quad p(E_2) = \frac{24}{25}. \quad (10.6)$$

Z kolei wartość oczekiwana pomiaru energii na stanie $\psi(\vec{r}, t)$ wynosi

$$\langle E \rangle = p(E_1)E_1 + p(E_2)E_2 = \frac{1}{25}(E_1 + 24E_2) = -3.8 \text{ eV}. \quad (10.7)$$

(c) Na stanie $\psi(\vec{r}, t)$ możemy obliczyć kwadrat orbitalnego momentu pędu równy 0 bądź $2\hbar^2$, z prawdopodobieństwami

$$p(\ell = 0) = \frac{1}{25}, \quad p(\ell = 1) = \frac{24}{25}, \quad (10.8)$$

gdzie

$$p(\ell = 1) = \sum_{m=-1}^1 p(1, m), \quad p(\ell = 1, m = 1) = p(\ell = 1, m = 0) = p(\ell = 1, m = -1) = \frac{8}{25}. \quad (10.9)$$

Stąd wynika, że wartość oczekiwana pomiaru kwadratu orbitalnego momentu pędu wynosi

$$\langle \hat{L}^2 \rangle = 0 \cdot p(\ell = 0) + 2\hbar^2 \cdot p(\ell = 1) = \frac{48}{25}\hbar^2. \quad (10.10)$$

Zadanie 2

Przy pomocy metody wariacyjnej oszacować energię stanu podstawowego w atomie wodoru. Jako funkcje próbne wybrać funkcje sferycznie symetryczne, których zależność od r wyraża się wzorem,

$$\psi_\alpha(\vec{r}) = \begin{cases} A\left(1 - \frac{r}{\alpha}\right) & \text{dla } r \leq \alpha, \\ 0 & \text{dla } r > \alpha. \end{cases} \quad (10.11)$$

Tutaj, A jest stałą normalizacyjną, natomiast α jest parametrem wariacyjnym. Wynik porównać z wynikiem ścisłym.

Rozwiązanie:

W pierwszym kroku wyznaczmy stałą normalizacyjną A z warunku, że

$$\int |\psi(\vec{r})|^2 d^3\vec{r} = 1. \quad (10.12)$$

Aby wykonać tę całkę wygodnie jest skorzystać ze współrzędnych sferycznych. Wówczas, powyższy warunek zyskuje postać

$$A^2 \int_0^\alpha r^2 \left(1 - \frac{r}{\alpha}\right)^2 dr \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin\theta d\theta = 1. \quad (10.13)$$

Chwilowo skupmy się na wykonaniu obecnej tu całki potrójnej,

$$\begin{aligned} I &= \int_0^\alpha r^2 \left(1 - \frac{r}{\alpha}\right)^2 dr \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin\theta d\theta = 4\pi \int_0^\alpha r^2 \left(1 - \frac{2r}{\alpha} + \frac{r^2}{\alpha^2}\right) dr \\ &= 4\pi \int_0^\alpha \left(r^2 - \frac{2r^3}{\alpha} + \frac{r^4}{\alpha^2}\right) dr = 4\pi \left[\frac{r^3}{3} - \frac{r^4}{2\alpha} + \frac{r^5}{5\alpha^2}\right]_0^\alpha \\ &= 4\pi \left[\frac{\alpha^3}{3} - \frac{\alpha^3}{2} + \frac{\alpha^3}{5}\right] = 4\pi \cdot \frac{\alpha^3}{30} = \frac{2\pi\alpha^3}{15}. \end{aligned} \quad (10.14)$$

Stąd wynika, że

$$\frac{2\pi\alpha^3}{15} A^2 = 1 \quad \Rightarrow \quad A = \sqrt{\frac{15}{2\pi\alpha^3}}. \quad (10.15)$$

To oznacza, że unormowane funkcje próbne mają postać

$$\psi_\alpha(\vec{r}) = \begin{cases} \sqrt{\frac{15}{2\pi\alpha^3}} \left(1 - \frac{r}{\alpha}\right) & \text{dla } r \leq \alpha, \\ 0 & \text{dla } r > \alpha. \end{cases} \quad (10.16)$$

Ponieważ oszacowania energii stanu podstawowego szukamy w klasie unormowanych funkcji próbnych, zatem wielkość, jaką będziemy minimalizować to

$$E(\alpha) = \langle \psi_\alpha | \hat{H} | \psi_\alpha \rangle, \quad (10.17)$$

gdzie Hamiltonian ma postać

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (10.18)$$

Ze względu na symetrię problemu, występujący tu laplasjan zapiszemy we współrzędnych sferycznych,

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]. \quad (10.19)$$

Ponieważ funkcja próbna (10.16) nie zależy od θ i ϕ , a ponadto jest liniową funkcją współrzędnej radialnej r , wartość oczekiwana energii (10.17) sprowadza się do obliczenia następujących całek,

$$E(\alpha) = \frac{15}{2\pi\alpha^3} \int_0^\alpha r^2 \left(1 - \frac{r}{\alpha}\right) \left(-\frac{\hbar^2}{mr} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \left(1 - \frac{r}{\alpha}\right) dr \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin\theta d\theta. \quad (10.20)$$

Możemy szybko obliczyć wartości całek po zmiennych kątowych,

$$E(\alpha) = 4\pi \frac{15}{2\pi\alpha^3} \int_0^\alpha r^2 \left(1 - \frac{r}{\alpha}\right) \left(\frac{\hbar^2}{\alpha m r} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{e^2}{4\alpha\pi\epsilon_0}\right) dr, \quad (10.21)$$

co daje

$$E(\alpha) = \frac{30}{\alpha^3} \int_0^\alpha \left(\frac{\hbar^2 r}{\alpha m} - \frac{e^2 r}{4\pi\epsilon_0} + \frac{e^2 r^2}{2\alpha\pi\epsilon_0} - \frac{\hbar^2 r^2}{\alpha^2 m} - \frac{e^2 r^3}{4\alpha^2\pi\epsilon_0}\right) dr. \quad (10.22)$$

Następnie, po wykonaniu operacji całkowania, otrzymujemy

$$\begin{aligned} E(\alpha) &= \frac{30}{\alpha^3} \left[\frac{\hbar^2 r^2}{2\alpha m} - \frac{e^2 r^2}{8\pi\epsilon_0} + \frac{e^2 r^3}{6\alpha\pi\epsilon_0} - \frac{\hbar^2 r^3}{3\alpha^2 m} - \frac{e^2 r^4}{16\alpha^2\pi\epsilon_0} \right]_0^\alpha \\ &= \frac{30}{\alpha^3} \left[\frac{\hbar^2 \alpha}{2m} - \frac{e^2 \alpha^2}{8\pi\epsilon_0} + \frac{e^2 \alpha^2}{6\pi\epsilon_0} - \frac{\hbar^2 \alpha}{3m} - \frac{e^2 \alpha^2}{16\pi\epsilon_0} \right]. \end{aligned} \quad (10.23)$$

Porządkując i upraszczając to wyrażenie, dostajemy statecznie

$$E(\alpha) = \frac{5\hbar^2 \alpha^{-2}}{m} - \frac{5e^2 \alpha^{-1}}{8\pi\epsilon_0}. \quad (10.24)$$

Musimy znaleźć minimum powyższej funkcji różniczkując po parametrze α , a następnie wynik różniczkowania należy przyrównać do zera,

$$\frac{dE(\alpha)}{d\alpha} = -\frac{10\hbar^2}{m} \alpha^{-3} + \frac{5e^2}{8\pi\epsilon_0} \alpha^{-2} = 0. \quad (10.25)$$

Tak uczyniwszy, a następnie używając prostej algebry, rozwiązujemy równanie względem α ,

$$\frac{5e^2}{8\pi\epsilon_0} \alpha = \frac{10\hbar^2}{m}. \quad (10.26)$$

Ostatecznie,

$$\alpha_0 = \frac{16\pi\hbar^2\epsilon_0}{me^2}. \quad (10.27)$$

Obliczając drugą pochodną funkcji $E(\alpha)$, pokazujemy, że $\frac{d^2E(\alpha)}{d\alpha^2}|_{\alpha=\alpha_0} > 0$, a co za tym idzie w klasie rozważanych funkcji próbnych wartość $E(\alpha_0)$ stanowi wartość minimalną. Tak więc

$$E(\alpha_0) = -\frac{5me^4}{256\pi^2\hbar^2\epsilon_0^2} \quad (10.28)$$

stanowi oszacowanie energii stanu podstawowego w atomie wodoru. Podstawiając wartości numeryczne stałych fizycznych: $e = 1,60 \text{ C}$, $\hbar = 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$, $m = 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$, $\epsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12} \text{ F/m}$ oraz $\pi = 3,14$, dostajemy

$$E(\alpha_0) = -1,36 \cdot 10^{-18} \text{ J} = -8,49 \text{ eV} > -13,6 \text{ eV}. \quad (10.29)$$

Zadanie 3

Używając rachunku zaburzeń, oszacować wpływ skończonej masy protonu na energię stanu podstawowego w atomie wodoru. Przyjąć, że ładunek protonu jest rozmyty równomiernie na sferze o promieniu R a, co za tym idzie, zaburzenie Hamiltonianu ma postać

$$H'(\vec{r}) = \begin{cases} 0 & \text{dla } r > R \\ \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{R}\right) & \text{dla pozostałych } r \end{cases}. \quad (10.30)$$

Rozwiązanie:

Funkcja falowa stanu podstawowego w atomie wodoru wynosi

$$\psi_{100}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}. \quad (10.31)$$

Ponieważ poziom podstawowy jest niezdegenerowany, aby obliczyć poprawkę do jego energii stosujemy rachunek zaburzeń bez degeneracji. Poprawka ta równa się

$$\begin{aligned}
E_0^{(1)} &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{r} \psi_{100}^*(\vec{r}) H'(\vec{r}) \psi_{100}(\vec{r}) \\
&= \frac{e^2}{4\pi^2 a_0^3 \epsilon_0} \int_0^R dr r^2 \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{R} \right) e^{-\frac{2r}{a_0}} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \\
&= \underbrace{\frac{e^2}{\pi a_0^3 \epsilon_0} \int_0^R r^2 \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{R} \right) e^{-\frac{2r}{a_0}} dr}_{\Omega} = \underbrace{\Omega \int_0^R r e^{-\frac{2r}{a_0}} dr}_{I_1} - \underbrace{\frac{\Omega}{R} \int_0^R r^2 e^{-\frac{2r}{a_0}} dr}_{I_2}.
\end{aligned} \tag{10.32}$$

Pierwszą z całek obliczamy przez części,

$$I_1 = \int_0^R r e^{-\frac{2r}{a_0}} dr = -\frac{a_0}{2} r e^{-\frac{2r}{a_0}} \Big|_0^R + \frac{a_0}{2} \int_0^R e^{-\frac{2r}{a_0}} dr = -\frac{a_0 R}{2} e^{-\frac{2R}{a_0}} - \frac{a_0^2}{4} e^{-\frac{2R}{a_0}} + \frac{a_0^2}{4}. \tag{10.33}$$

Taką samą metodą obliczymy drugą z całek,

$$\begin{aligned}
I_2 &= \int_0^R r^2 e^{-\frac{2r}{a_0}} dr = -\frac{a_0}{2} r^2 e^{-\frac{2r}{a_0}} \Big|_0^R + a_0 \underbrace{\int_0^R r e^{-\frac{2r}{a_0}} dr}_{I_1} \\
&= -\frac{a_0 R^2}{2} e^{-\frac{2R}{a_0}} + a_0 \left[-\frac{a_0 R}{2} e^{-\frac{2R}{a_0}} - \frac{a_0^2}{4} e^{-\frac{2R}{a_0}} + \frac{a_0^2}{4} \right] \\
&= -\frac{a_0 R^2}{2} e^{-\frac{2R}{a_0}} - \frac{a_0^2 R}{2} e^{-\frac{2R}{a_0}} - \frac{a_0^3}{4} e^{-\frac{2R}{a_0}} + \frac{a_0^3}{4}.
\end{aligned} \tag{10.34}$$

Obliczone całki wstawiamy do wzoru (10.32). Po uporządkowaniu wyrazów podobnych otrzymujemy poprawkę do energii stanu podstawowego atomu wodoru spowodowaną skończonym rozmiarem protonu,

$$E_0^{(1)} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{e^{-\frac{2R}{a_0}} + 1}{a_0} + \frac{e^{-\frac{2R}{a_0}} - 1}{R} \right]. \tag{10.35}$$

Zadanie 4

Korzystając z twierdzenia Hellmanna-Feynmana, obliczyć wartość oczekiwaną $\langle \frac{1}{r^3} \rangle$ na dowolnym stanie własnym atomu wodoru o $\ell \neq 0$.

Rozwiązanie:

W przypadku radialnego równania Schrödingera dla atomu wodoru, Hamiltonian ma postać

$$\hat{H}_\ell = \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m\hat{r}^2} - \frac{\alpha \hbar c}{\hat{r}}, \tag{10.36}$$

gdzie $\alpha = e^2/4\pi\epsilon_0\hbar c$ jest stałą struktury subtelnej. Można dla niego sformułować zagadnienie własne,

$$\hat{H}_\ell |u_{\ell, n_r}\rangle = E_{\ell, n_r} |u_{\ell, n_r}\rangle, \tag{10.37}$$

przy czym okazuje się, że

$$E_{\ell, n_r} = -\frac{mc^2 \alpha^2}{2(\ell + n_r + 1)^2}. \tag{10.38}$$

Obliczając komutator $[\hat{p}_r, \hat{H}_\ell]$, dostajemy

$$[\hat{p}_r, \hat{H}_\ell] = -i\hbar \left(-\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{m\hat{r}^3} + \frac{\alpha \hbar c}{\hat{r}^2} \right). \tag{10.39}$$

Wartość oczekiwana powyższego wyrażenia na dowolnym stanie $|u_{\ell, n_r}\rangle$ znika, albowiem

$$\langle u_{\ell, n_r} | [\hat{p}_r, \hat{H}_\ell] | u_{\ell, n_r} \rangle = \langle u_{\ell, n_r} | \hat{p}_r \hat{H}_\ell - \hat{H}_\ell \hat{p}_r | u_{\ell, n_r} \rangle = E_{\ell, n_r} \langle u_{\ell, n_r} | \hat{p}_r - \hat{p}_r | u_{\ell, n_r} \rangle = 0. \tag{10.40}$$

Stąd wynika, że

$$\langle u_{\ell, n_r} | \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{m \hat{r}^3} | u_{\ell, n_r} \rangle = \langle u_{\ell, n_r} | \frac{\alpha \hbar c}{\hat{r}^2} | u_{\ell, n_r} \rangle. \quad (10.41)$$

O ile $\ell \neq 0$, dostajemy

$$\langle u_{\ell, n_r} | \frac{1}{\hat{r}^3} | u_{\ell, n_r} \rangle = \langle u_{\ell, n_r} | \frac{\alpha m c}{\hbar \ell(\ell+1) \hat{r}^2} | u_{\ell, n_r} \rangle = \frac{\alpha^3 m^3 c^3}{\hbar^3 n^3 \ell(\ell+1/2)(\ell+1)}, \quad (10.42)$$

gdzie skorzystaliśmy z wyprowadzonego z twierdzenia Hellmanna-Feynmana wzoru (patrz, ćwiczenia),

$$\langle u_{\ell, n_r} | \frac{1}{\hat{r}^2} | u_{\ell, n_r} \rangle = \frac{\alpha^2 m^2 c^2}{\hbar^2 n^3 (\ell+1/2)}. \quad (10.43)$$

Ponieważ operator $\hat{r}$ nie działa na współrzędne kątowe, możemy obie strony równania (10.42) domnożyć przez harmoniki sferyczne. Korzystając z ich ortonormalności, możemy ostatecznie napisać, że

$$\langle n, \ell, m | \frac{1}{\hat{r}^3} | n, \ell, m \rangle = \frac{\alpha^3 m^3 c^3}{\hbar^3 n^3 \ell(\ell+1/2)(\ell+1)}, \quad (10.44)$$

gdzie $\ell \neq 0$.

Zadanie 5

Znaleźć poziomy energetyczne i unormowane funkcje falowe cząstki o masie μ i zerowym orbitalnym momencie pędu ($\ell = 0$) poruszającej się w sferycznie symetrycznej, skończonej studni potencjału:

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{dla } r \leq a \\ 0 & \text{dla } r > a \end{cases}, \quad \text{gdzie } V_0 > 0. \quad (10.45)$$

Kiedy w tym potencjale nie tworzą się stany związane?

Rozwiązanie:

Dla cząstki o zerowym orbitalnym momencie pędu ($\ell = 0$) równanie Schrödingera na funkcję radialną $u(r)$ wynosi

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 u}{dr^2} + V(r)u(r) = Eu(r). \quad (10.46)$$

Dla $r \leq a$, równanie to przyjmuje postać

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{2\mu(E + V_0)}{\hbar^2} u = 0, \quad (10.47)$$

przy czym energia stanu związanego $E < 0$. Niech

$$\frac{2\mu(E + V_0)}{\hbar^2} = \kappa^2. \quad (10.48)$$

Ogólnym rozwiązaniem równania (10.47) jest funkcja

$$u(r) = A \sin(\kappa r) + B \cos(\kappa r), \quad (10.49)$$

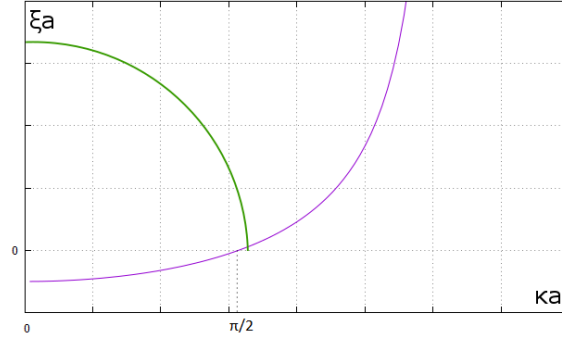
przy czym musimy narzucić na to rozwiązanie warunek brzegowy $u(0) = 0$. Stąd wynika, że $B = 0$, a zatem fizycznym rozwiązaniem równania radialnego (10.47) jest

$$u(r) = A \sin(\kappa r), \quad (10.50)$$

gdzie A jest dowolną stałą.

Dla $r > a$, równanie (10.46) przyjmuje postać

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{2\mu E}{\hbar^2} u = 0. \quad (10.51)$$



Rysunek 6: Rozwiązanie graficzne równań (10.60) i (10.61).

Wprowadzając oznaczenie,

$$\xi^2 = \frac{2\mu|E|}{\hbar^2}, \quad (10.52)$$

równanie (10.51) przepisujemy jako

$$\frac{d^2 u}{dr^2} - \xi^2 u = 0. \quad (10.53)$$

Ogólnym rozwiązaniem tego równania różniczkowego jest funkcja

$$u(r) = Ce^{-\xi r} + De^{\xi r}. \quad (10.54)$$

Na funkcję tę narzucamy warunek brzegowy znikania w nieskończoności, $\lim_{r \rightarrow \infty} u(r) = 0$. Stąd wynika, że musimy przyjąć, że $D = 0$. Ostatecznie, dla $r > a$ rozwiązaniem naszego problemu jest

$$u(r) = Ce^{-\xi r}, \quad (10.55)$$

gdzie C jest dowolną stałą.

Oba rozwiązania a także ich pochodne zszywamy w punkcie $r = a$. Daje to układ równań,

$$A \sin(\kappa a) = Ce^{-\xi a}, \quad (10.56)$$

$$A\kappa \cos(\kappa a) = -C\xi e^{-\xi a}, \quad (10.57)$$

z którego wynika, że

$$\kappa \cot(\kappa a) = -\xi. \quad (10.58)$$

Zauważmy również, że zachodzi

$$\kappa^2 + \xi^2 = \frac{2\mu V_0}{\hbar^2}. \quad (10.59)$$

Energii stanów związanych szukamy zatem jako punktów przecięcia następujących krzywych:

$$(a\kappa)^2 + (a\xi)^2 = \frac{2\mu V_0 a^2}{\hbar^2}, \quad (10.60)$$

$$-\kappa a \cot(\kappa a) = \xi a. \quad (10.61)$$

Krzywe te pokazano na rysunku 6. Zauważmy, że krzywa $-\kappa a \cot(\kappa a)$ przyjmuje wartości ujemne dla $\kappa a < \pi/2$. Zatem o ile promień okręgu będzie mniejszy niż $\frac{\pi}{2}$, czyli dla

$$V_0 < \frac{\pi^2 \hbar^2}{8\mu a^2}, \quad (10.62)$$

to nie będzie istniało rozwiązanie układu równań (10.60) i (10.61).

11 Seria 11

Zadanie 1

Cząstka o spinie $1/2$ znajduje się w polu magnetycznym $\vec{B} = B \sin(\omega t) \vec{e}_z$. W chwili $t = 0$ cząstka jest w stanie $|y, +\rangle$. Obliczyć prawdopodobieństwo, że cząstka będzie w tym stanie w chwili $t > 0$.

Rozwiązanie:

W chwili $t = 0$ cząstka znajduje się w stanie

$$|y, +\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ i \end{bmatrix}. \quad (11.1)$$

Hamiltonian oddziaływania cząstki z polem magnetycznym wynosi

$$\hat{H} = -\mu_0 \hat{\sigma} \vec{B} = -\mu_0 B \sin(\omega t) \hat{\sigma}_z = -\mu_0 B \sin(\omega t) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (11.2)$$

gdzie wstawiliśmy jawną postać wektora indukcji magnetycznej $\vec{B}$ dany w treści zadania a także postać macierzy Pauliego $\hat{\sigma}_z$. Równanie Schrödingera przyjmuje więc postać

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} \chi_+(t) \\ \chi_-(t) \end{bmatrix} = -\mu_0 B \sin(\omega t) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{bmatrix} \chi_+(t) \\ \chi_-(t) \end{bmatrix}. \quad (11.3)$$

W rzeczywistości równanie to separuje się na dwa niezależne od siebie równania różniczkowe,

$$\begin{cases} i\hbar \frac{d}{dt} \chi_+(t) = -\mu_0 B \sin(\omega t) \chi_+(t), \\ i\hbar \frac{d}{dt} \chi_-(t) = \mu_0 B \sin(\omega t) \chi_-(t). \end{cases} \quad (11.4)$$

Każde z nich z osobna rozwiązujemy separując zmienne. Mianowicie,

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \chi_+(t) = i \frac{\mu_0 B}{\hbar} \sin(\omega t) \chi_+(t), \\ \frac{d}{dt} \chi_-(t) = -i \frac{\mu_0 B}{\hbar} \sin(\omega t) \chi_-(t), \end{cases} \quad (11.5)$$

co daje

$$\begin{cases} \frac{d\chi_+}{\chi_+} = i \frac{\mu_0 B}{\hbar} \sin(\omega t) dt, \\ \frac{d\chi_-}{\chi_-} = -i \frac{\mu_0 B}{\hbar} \sin(\omega t) dt, \end{cases} \quad (11.6)$$

zaś po odcałkowaniu prowadzi do

$$|\chi(t)\rangle = \begin{bmatrix} \chi_+(t) \\ \chi_-(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_1 \exp\left(-i \frac{\mu_0 B}{\hbar \omega} \cos(\omega t)\right) \\ A_2 \exp\left(i \frac{\mu_0 B}{\hbar \omega} \cos(\omega t)\right) \end{bmatrix}. \quad (11.7)$$

Widoczne tu stałe całkowania A_1 i A_2 znajdujemy z warunku początkowego, $|\chi(t=0)\rangle = |y, +\rangle$. Tzn.

$$\chi_+(t=0) = A_1 \exp\left(-i \frac{\mu_0 B}{\hbar \omega}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \Rightarrow A_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(\frac{i \mu_0 B}{\hbar \omega}\right), \quad (11.8)$$

$$\chi_-(t=0) = A_2 \exp\left(i \frac{\mu_0 B}{\hbar \omega}\right) = \frac{i}{\sqrt{2}} \Rightarrow A_2 = \frac{i}{\sqrt{2}} \exp\left(-\frac{i \mu_0 B}{\hbar \omega}\right). \quad (11.9)$$

Ostatecznie spinor przyjmuje postać,

$$|\chi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \exp\left(\frac{i \mu_0 B}{\hbar \omega} [1 - \cos(\omega t)]\right) \\ i \exp\left(-\frac{i \mu_0 B}{\hbar \omega} [1 - \cos(\omega t)]\right) \end{bmatrix}. \quad (11.10)$$

Prawdopodobieństwo znalezienia cząstki znowu w stanie $|y, +\rangle$ po czasie t wynosi

$$\begin{aligned} P = |\langle y, + | \chi(t) \rangle|^2 &= \left| \frac{1}{2} [1, -i] \begin{bmatrix} \exp\left(\frac{i \mu_0 B}{\hbar \omega} [1 - \cos(\omega t)]\right) \\ i \exp\left(-\frac{i \mu_0 B}{\hbar \omega} [1 - \cos(\omega t)]\right) \end{bmatrix} \right|^2 \\ &= \cos^2\left(\frac{\mu_0 B}{\hbar \omega} [1 - \cos(\omega t)]\right). \end{aligned} \quad (11.11)$$

Zadanie 2

Rozważyć cząstkę o spinie $S = 1$ opisaną przez Hamiltonian,

$$\hat{H} = A\hat{S}_x^2 + B\hat{S}_y^2 + C\hat{S}_z^2, \quad (11.12)$$

gdzie $A > B > C > 0$ są stałe. Wyznaczyć energie własne oraz stany własne układu. Dla każdego ze stanów własnych oblicz $\langle \hat{S}_z \rangle$.

Rozwiązanie:

Szukamy energii własnych Hamiltonianu (11.12). W tym celu posłużymy się reprezentacjami macierzowymi operatora spinu $S = 1$ w bazie standardowej,

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{S}_y = \frac{i\hbar}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{S}_z = \hbar \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (11.13)$$

Stąd,

$$\begin{aligned} \hat{S}_x^2 &= \frac{\hbar^2}{2} \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} = \frac{\hbar^2}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \\ \hat{S}_y^2 &= \frac{-\hbar^2}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} = \frac{\hbar^2}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \\ \hat{S}_z^2 &= \hbar^2 \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} = \hbar^2 \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (11.14)$$

a, co za tym idzie, Hamiltonian (11.12) w reprezentacji macierzowej ma postać

$$\hat{H} = \hbar^2 \begin{bmatrix} \frac{A+B}{2} + C & 0 & \frac{B-A}{2} \\ 0 & A+B & 0 \\ \frac{B-A}{2} & 0 & \frac{A+B}{2} + C \end{bmatrix}. \quad (11.15)$$

Zgodnie z postulatami mechaniki kwantowej, energie własne odpowiadają wartościom własnym Hamiltonianu. Obliczając wartości własne (11.15), dostajemy następujące energie własne

$$E_1 = \hbar^2(B+C), \quad E_2 = \hbar^2(A+C), \quad E_3 = \hbar^2(A+B). \quad (11.16)$$

Dla każdej z wyznaczonych energii własnych znajdujemy odpowiedni wektor własny. Bez wdawania się w szczegóły rachunków, dostajemy następujące unormowane stany własne

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad |\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix}, \quad |\psi_3\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (11.17)$$

Wartość średnią z -towej składowej operatora spinu na każdym ze stanów (11.17) obliczamy wprost z definicji,

$$\begin{aligned} \langle \psi_1 | \hat{S}_z | \psi_1 \rangle &= \frac{\hbar}{2} [1 \ 0 \ 1] \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = 0, \\ \langle \psi_2 | \hat{S}_z | \psi_2 \rangle &= \frac{\hbar}{2} [1 \ 0 \ -1] \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix} = 0, \\ \langle \psi_3 | \hat{S}_z | \psi_3 \rangle &= \hbar [0 \ 1 \ 0] \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = 0. \end{aligned} \quad (11.18)$$

Zadanie 3

Hamiltonian opisujący układ dwóch spoczywających cząstek o spinie $1/2$ wynosi

$$\hat{H} = \frac{a}{\hbar^2} \hat{s}_1 \cdot \hat{s}_2 + \frac{b}{\hbar} (\hat{s}_{1,z} - \hat{s}_{2,z}), \quad (11.19)$$

gdzie $\hat{s}_1$ i $\hat{s}_2$ oznaczają odpowiednio spin pierwszej i drugiej cząstki, natomiast a, b są to stałe. Wyznaczyć energie własne układu.

Rozwiązanie:

Przekształćmy Hamiltonian korzystając z faktu, że operatory spinu wyrażają się przez macierze Pauliego,

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{a}{\hbar^2} \hat{s}_1 \cdot \hat{s}_2 + \frac{b}{\hbar} (\hat{s}_{1,z} - \hat{s}_{2,z}) \\ &= \frac{a}{4} (\hat{\sigma}_{1x} \otimes \hat{\sigma}_{2x} + \hat{\sigma}_{1y} \otimes \hat{\sigma}_{2y} + \hat{\sigma}_{1z} \otimes \hat{\sigma}_{2z}) + \frac{b}{2} (\hat{\sigma}_{1z} \otimes \hat{1}_2 - \hat{1}_1 \otimes \hat{\sigma}_{2z}) \\ &= \frac{a}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{b}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} - \frac{b}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \frac{a}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{a}{4} + b & \frac{a}{2} & 0 \\ 0 & \frac{a}{2} & -\frac{a}{4} - b & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{a}{4} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (11.20)$$

Znalezienie energii własnych tego układu sprowadza się do policzenia wartości własnych otrzymanej macierzy (11.20). Widać, że mamy dwukrotnie zdegenerowaną wartość własną

$$E_{1,2} = \frac{a}{4}. \quad (11.21)$$

Mamy również dwie niezdegenerowane wartości własne,

$$E_3 = -\sqrt{b^2 + \frac{a^2}{4}} - \frac{a}{4}, \quad E_4 = \sqrt{b^2 + \frac{a^2}{4}} - \frac{a}{4}. \quad (11.22)$$

Zadanie 4

Układ składający się z cząstki o spinie $3/2$ i cząstki o spinie 1 znajduje się w stanie iloczynowym $|\chi\rangle = |s_1 = 3/2, m_1 = 3/2\rangle |s_2 = 1, m_2 = -1\rangle$. Obliczyć wartości oczekiwane $\hat{s}^2$ i $\hat{s}_z$ na zadanym stanie $|\chi\rangle$, gdzie $\hat{s} = (\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z)$ jest operatorem całkowitego spinu.

Rozwiązanie:

Układ znajduje się w stanie

$$|\chi\rangle = |s_1 = 3/2, m_1 = 3/2\rangle |s_2 = 1, m_2 = -1\rangle. \quad (11.23)$$

Wartość oczekiwaną operatora zetowej składowej całkowitego spinu obliczamy z definicji

$$\langle \hat{s}_z \rangle = \langle \chi | \hat{s}_z | \chi \rangle = \langle \chi | \hat{s}_{1z} + \hat{s}_{2z} | \chi \rangle, \quad (11.24)$$

gdzie $\hat{s}_{iz}$ jest operatorem zetowej składowej spinu i -tej cząstki ($i = 1, 2$). Bezpośredni rachunek prowadzi do

$$\begin{aligned} \langle \hat{s}_z \rangle &= \langle 3/2, 3/2 | \langle 1, -1 | (\hat{s}_{1z} + \hat{s}_{2z}) | 3/2, 3/2 \rangle | 1, -1 \rangle \\ &= \langle 3/2, 3/2 | \hat{s}_{1z} | 3/2, 3/2 \rangle \langle 1, -1 | 1, -1 \rangle + \langle 3/2, 3/2 | 3/2, 3/2 \rangle \langle 1, -1 | \hat{s}_{2z} | 1, -1 \rangle \\ &= \frac{3}{2} \hbar - \hbar = \frac{1}{2} \hbar. \end{aligned} \quad (11.25)$$

Zatem wartość oczekiwana operatora zetowej składowej całkowitego spinu na stanie $|\chi\rangle$ wynosi $\langle \hat{s}_z \rangle = \frac{1}{2} \hbar$.

Wartość oczekiwaną operatora $\hat{s}^2$ obliczymy podobnie jak wyżej. Mianowicie,

$$\begin{aligned}\langle \hat{s}^2 \rangle &= \langle \chi | \hat{s}^2 | \chi \rangle = \langle \chi | (\hat{s}_{1z} + \hat{s}_{2z})^2 | \chi \rangle = \langle \chi | \hat{s}_1^2 + 2\hat{s}_{1z}\hat{s}_{2z} + \hat{s}_2^2 | \chi \rangle \\ &= \langle \chi | \hat{s}_1^2 + 2\hat{s}_{1x}\hat{s}_{2x} + 2\hat{s}_{1y}\hat{s}_{2y} + 2\hat{s}_{1z}\hat{s}_{2z} + \hat{s}_2^2 | \chi \rangle.\end{aligned}\quad (11.26)$$

W dalszej analizie problemu skorzystamy z operatorów drabinkowych, przy czym

$$\hat{s}_{1+} = \hat{s}_{1x} + i\hat{s}_{1y}, \quad \hat{s}_{1-} = \hat{s}_{1x} - i\hat{s}_{1y}, \quad (11.27)$$

$$\hat{s}_{2+} = \hat{s}_{2x} + i\hat{s}_{2y}, \quad \hat{s}_{2-} = \hat{s}_{2x} - i\hat{s}_{2y}. \quad (11.28)$$

Po zastosowaniu powyższych operatorów, wyrażenie (11.26) przyjmuje postać

$$\langle \hat{s}^2 \rangle = \langle \chi | \hat{s}_1^2 + \hat{s}_{1+}\hat{s}_{2-} + \hat{s}_{1-}\hat{s}_{2+} + 2\hat{s}_{1z}\hat{s}_{2z} + \hat{s}_2^2 | \chi \rangle. \quad (11.29)$$

Drugi i trzeci składnik sumy w powyższym wzorze dają zero, ponieważ zadziałanie operatorem podwyższającym na stan, gdzie liczba magnetyczna jest równa liczbie orbitalnej daje zero. Ostatecznie,

$$\langle \hat{s}^2 \rangle = \langle \chi | \hat{s}_1^2 | \chi \rangle + \langle \chi | \hat{s}_2^2 | \chi \rangle + 2 \langle \chi | \hat{s}_{1z}\hat{s}_{2z} | \chi \rangle = \frac{15}{4}\hbar^2 + 2\hbar^2 - 3\hbar^2 = \frac{11}{4}\hbar^2. \quad (11.30)$$

Zadanie 5

Układ dwóch cząstek o spinach $s_1 = 3/2$ i $s_2 = 1/2$ jest w stanie o całkowitym spinie $s = 2$ i jego z -towej składowej równej $m = -1$. Oblicz prawdopodobieństwo, że pomiar z -towej składowej spinu drugiej cząstki w zadanym stanie kwantowym wyniesie $-\hbar/2$.

Rozwiązanie:

Aby znaleźć prawdopodobieństwo, o które chodzi w zadaniu musimy rozłożyć stan $|s = 2, m = -1\rangle$ (czyli stan o dobrze określonym całkowitym spinie i jego z -towej składowej) w bazie stanów iloczynowych $|s_1, m_1\rangle \otimes |s_2, m_2\rangle$. Sprowadza się to do wyznaczenia współczynników Clebscha-Gordana.

Wektor o maksymalnym całkowitym spinie i maksymalnie ujemnym rzucie na z dany jest jednoznacznie poprzez

$$|s = 2, m = -2\rangle = |s_1 = 3/2, m_1 = -3/2\rangle \otimes |s_2 = 1/2, m_2 = -1/2\rangle, \quad (11.31)$$

co dla wygody zapisywać będziemy jako

$$|2, -2\rangle = |-3/2\rangle \otimes |-1/2\rangle, \quad (11.32)$$

gdzie ket z dwiema liczbami oznacza stan o dobrze określonym całkowitym spinie i rzucie, zaś kety z jedną liczbą oznaczają stany pojedynczych cząstek, tj. ich rzuty na oś z , przy czym ten występujący najpierw odnosi się do cząstki o spinie $3/2$.

Przywołajmy działanie operatora podwyższającego $\hat{L}_+$:

$$\hat{L}_+ |\ell, m\rangle = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m+1)} |\ell, m+1\rangle. \quad (11.33)$$

Zgodnie z tym przepisem,

$$\hat{L}_+ |2, -2\rangle = \hbar \sqrt{2(3) - (-2)(-1)} |2, -1\rangle = 2\hbar |2, -1\rangle. \quad (11.34)$$

Jednocześnie zachodzi

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_{1+} + \hat{L}_{2+}, \quad (11.35)$$

gdzie operator z indeksem i działa na i -tą cząstkę. Działamy nim na stan iloczynowy,

$$\begin{aligned}\hat{L}_+ |2, -2\rangle &= \hat{L}_+ (|-3/2\rangle \otimes |-1/2\rangle) = (\hat{L}_{1+} + \hat{L}_{2+}) (|-3/2\rangle \otimes |-1/2\rangle) \\ &= (\hat{L}_{1+} |-3/2\rangle) \otimes |-1/2\rangle + |-3/2\rangle \otimes (\hat{L}_{2+} |-1/2\rangle) \\ &= \hbar \sqrt{\frac{3}{2} \cdot \frac{5}{2} - \frac{3}{2} \cdot \frac{1}{2}} |-1/2\rangle \otimes |-1/2\rangle \\ &\quad + \hbar \sqrt{\frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2}} |-3/2\rangle \otimes |1/2\rangle \\ &= \hbar \left(\sqrt{3} |-1/2\rangle \otimes |-1/2\rangle + |-3/2\rangle \otimes |1/2\rangle \right).\end{aligned}\quad (11.36)$$

Łącząc (11.34) z (11.36), otrzymujemy

$$2\hbar |2, -1\rangle = \hbar \left(\sqrt{3} |-1/2\rangle \otimes |-1/2\rangle + |-3/2\rangle \otimes |1/2\rangle \right), \quad (11.37)$$

co oznacza

$$|s = 2, m = -1\rangle = \sqrt{\frac{3}{4}} |m_1 = -1/2, m_2 = -1/2\rangle + \frac{1}{2} |m_1 = -3/2, m_2 = 1/2\rangle. \quad (11.38)$$

Znaleźliśmy tym samym rozkład stanu o dobrze określonym całkowitym momencie pędu i jego z -towej składowej w bazie stanów o dobrze określonych z -towych składowych momentów pędu dla każdej z cząstek. Innymi słowy, wyznaczyliśmy odpowiednie współczynniki Clebscha-Gordana. W związku z tym prawdopodobieństwo, że pomiar spinu drugiej cząstki wyniesie $-\hbar/2$ (czyli $m_2 = -1/2$) wynosi $3/4$.

12 Seria 12

Zadanie 1

Cząstka o masie m i ładunku q porusza się w stałych, skrzyżowanych polach magnetycznym $\vec{\mathcal{B}} = \mathcal{B}\vec{e}_z$ i elektrycznym $\vec{\mathcal{E}} = \mathcal{E}\vec{e}_x$. Używając cechowania, w którym potencjał wektorowy i skalarny wynoszą odpowiednio: $\vec{A}(\vec{r}, t) = \mathcal{B}x\vec{e}_y$ i $\phi(\vec{r}, t) = -\mathcal{E}x$, wyznaczyć poziomy energetyczne cząstki i przedyskutować ogólną postać odpowiadających im funkcji własnych. Zaniedbać spin cząstki.

Rozwiązanie:

Hamiltonian oddziaływania cząstki o ładunku q z polem elektromagnetycznym przyjmuje postać

$$\hat{H} = \frac{(\hat{\vec{p}} - q\vec{A})^2}{2m} + q\phi, \quad (12.1)$$

gdzie ϕ oraz $\vec{A}$ to potencjały skalarny i wektorowy opisujące pole. W naszym przypadku, wynoszą one odpowiednio,

$$\phi = -\mathcal{E}\hat{x}, \quad \vec{A} = \begin{pmatrix} 0 \\ \mathcal{B}\hat{x} \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (12.2)$$

Podstawiając te wielkości do (12.1), dostajemy

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} [\hat{p}_x^2 + (\hat{p}_y - q\mathcal{B}\hat{x})^2 + \hat{p}_z^2] - q\mathcal{E}\hat{x}. \quad (12.3)$$

Od razu możemy zauważyć, że operatory $\hat{p}_y$ oraz $\hat{p}_z$ komutują z Hamiltonianem (12.3), i w sposób oczywisty komutują ze sobą wzajemnie. W związku z tym możemy znaleźć stany własne będące jednoczesnymi stanami własnymi operatorów: $\{\hat{p}_y, \hat{p}_z, \hat{H}\}$. To oznacza, że stanów własnych Hamiltonianu możemy szukać w postaci

$$\psi(\vec{r}) = e^{\frac{i}{\hbar}(p_y y + p_z z)} \psi_x(x), \quad (12.4)$$

gdzie p_y, p_z są wartościami własnymi operatorów $\hat{p}_y, \hat{p}_z$ (jak wiadomo, fale płaskie są stanami własnymi operatora pędu, $\hat{p}_y e^{\frac{i}{\hbar}p_y y} = -i\hbar\partial_y e^{\frac{i}{\hbar}p_y y} = p_y e^{\frac{i}{\hbar}p_y y}$ i analogicznie dla $\hat{p}_z$). Podstawiając (12.3) oraz (12.4) do równania

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \quad (12.5)$$

dostajemy

$$\left[\frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + (p_y - q\mathcal{B}\hat{x})^2 + p_z^2) - q\mathcal{E}\hat{x} \right] \psi_x(x) = E\psi_x(x), \quad (12.6)$$

gdzie wykonaliśmy działanie operatorów $\hat{p}_y$ i $\hat{p}_z$ na ich funkcje własne, a następnie uprościliśmy to równanie dzieląc je stronami przez $e^{\frac{i}{\hbar}(p_y y + p_z z)}$.

W dalszej kolejności, przekształcamy powyższe równanie, grupując wyrazy i uzupełniając je do pełnego kwadratu w operatorze $\hat{x}$. Dzięki temu, dostajemy równanie

$$\left[\frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{q^2\mathcal{B}^2}{2m} \left(\hat{x} - \frac{1}{q\mathcal{B}} \left(p_y + m\frac{\mathcal{E}}{\mathcal{B}} \right) \right)^2 \right] \psi_x(x) = \left(E - \frac{1}{2m}(p_y^2 + p_z^2) + \frac{1}{2m} \left(p_y + m\frac{\mathcal{E}}{\mathcal{B}} \right)^2 \right) \psi_x(x). \quad (12.7)$$

Jest to równanie jednowymiarowego oscylatora harmonicznego drgającego wokół położenia

$$x_0 = \frac{1}{q\mathcal{B}} \left(p_y + m\frac{\mathcal{E}}{\mathcal{B}} \right), \quad (12.8)$$

z częstością $\omega = \frac{|q|\mathcal{B}}{m}$. Stąd, funkcje falowe $\psi_x(x)$ wyrażają się przez funkcje Gausowskie pomnożone przez wielomiany Hermite'a H_n ,

$$\psi_x(x) = A_n e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x-x_0)^2} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} (x - x_0) \right). \quad (12.9)$$

Z kolei energia oscylatora harmonicznego jest skwantowana i wynosi $\hbar\omega(n+1/2)$, co prowadzi do warunku

$$E - \frac{1}{2m}(p_y^2 + p_z^2) + \frac{1}{2m} \left(p_y + m \frac{\mathcal{E}}{\mathcal{B}} \right)^2 = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}), \quad (12.10)$$

gdzie $n = 0, 1, 2, \dots$

Ostatecznie, możemy zapisać, że widmo energetyczne cząstki w zadanym polu elektromagnetycznym wynosi

$$E_{np_y p_z} = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) + \frac{1}{2m}(p_y^2 + p_z^2) - \frac{1}{2m} \left(p_y + m \frac{\mathcal{E}}{\mathcal{B}} \right)^2 \quad (12.11)$$

i jest numerowane trzema liczbami kwantowymi $n = 0, 1, 2, \dots$ oraz $p_y, p_z \in \mathbb{R}$. Energiom tym odpowiadają funkcje własne

$$\psi_{np_y p_z}(\vec{r}) = A_n e^{\frac{i}{\hbar}(p_y y + p_z z)} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x-x_0)^2} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}(x-x_0) \right). \quad (12.12)$$

Zadanie 2

Rozważyć cząstkę w nieskończonej studni potencjału t.j. $V(x) = 0$ dla $0 \leq x \leq a$ i $V(x) = \infty$ dla pozostałych x . Potencjał w zakresie $0 \leq x \leq a$ zmienia się w czasie na skutek zaburzenia,

$$\hat{H}' = V_0 \left(\hat{x} - \frac{a}{2} \right) \Theta(t) \sin \omega t, \quad (12.13)$$

gdzie $\Theta(t)$ to funkcja schodkowa.

(a) Oblicz prawdopodobieństwo przejścia cząstki ze stanu podstawowego do pierwszego stanu wzbudzonego spowodowane tym zaburzeniem.

(b) Ile wynosi prawdopodobieństwo przejścia do drugiego stanu wzbudzonego?

(c) Rozważyć granice tych wyników, gdy $\omega \rightarrow 0$.

Rozwiązanie:

(a) W zadanym potencjale, stan podstawowy i pierwszy wzbudzony to, odpowiednio,

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right), \quad \psi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right). \quad (12.14)$$

Amplituda prawdopodobieństwa przejścia ze stanu podstawowego do pierwszego stanu wzbudzonego zadana jest wzorem,

$$c^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t e^{i(E_2-E_1)t'/\hbar} \langle \psi_2 | \hat{H}'(t') | \psi_1 \rangle dt', \quad (12.15)$$

gdzie $E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$ oraz $E_2 = \frac{2\hbar^2 \pi^2}{ma^2}$ to energie odpowiednich stanów własnych studni potencjału. Obliczamy element macierzowy,

$$\begin{aligned} & \langle \psi_0 | \hat{H}'(t') | \psi_1 \rangle \\ &= \frac{2V_0 \sin(\omega t')}{a} \left(\int_0^a x \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) dx - \frac{a}{2} \int_0^a \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) dx \right) \\ &= -\frac{16V_0 a \sin(\omega t')}{9\pi^2}. \end{aligned} \quad (12.16)$$

Wobec tego wyrażenie (12.15) przybiera postać

$$c^{(1)}(t) = \frac{16i}{9\pi^2} \frac{V_0 a}{\hbar} \int_0^t e^{i(E_2-E_1)t'/\hbar} \sin(\omega t') dt', \quad (12.17)$$

gdzie w dalszym ciągu będziemy używać oznaczenia $\Omega = (E_2 - E_1)/\hbar$. Przekształcając powyższe wyrażenie, dostajemy

$$c^{(1)}(t) = \frac{8V_0 a}{9\pi^2 \hbar} \int_0^t \left(e^{i(\Omega+\omega)t'} - e^{i(\Omega-\omega)t'} \right) dt'. \quad (12.18)$$

Wykonanie powyższej całki prowadzi do

$$c^{(1)}(t) = \frac{8V_0a}{9\pi^2\hbar} \left[\frac{e^{i(\Omega+\omega)t'}}{i(\Omega+\omega)} \Big|_0^t - \frac{e^{i(\Omega-\omega)t'}}{i(\Omega-\omega)} \Big|_0^t \right] = \frac{8V_0a}{9\pi^2\hbar} \left[\frac{e^{i(\Omega+\omega)t} - 1}{i(\Omega+\omega)} - \frac{e^{i(\Omega-\omega)t} - 1}{i(\Omega-\omega)} \right]. \quad (12.19)$$

Stąd, prawdopodobieństwo przejścia ze stanu podstawowego do pierwszego stanu wzbudzonego w chwili czasu t wynosi

$$p^{(1)}(t) = |c^{(1)}(t)|^2 = \left(\frac{8V_0a}{9\pi^2\hbar} \right)^2 \left[\frac{\sin^2\left(\frac{\Omega+\omega}{2}t\right)}{\left(\frac{\Omega+\omega}{2}\right)^2} + \frac{\sin^2\left(\frac{\Omega-\omega}{2}t\right)}{\left(\frac{\Omega-\omega}{2}\right)^2} - \frac{2\cos(\omega t) \sin\left(\frac{\Omega+\omega}{2}t\right) \sin\left(\frac{\Omega-\omega}{2}t\right)}{\frac{\Omega+\omega}{2} \frac{\Omega-\omega}{2}} \right]. \quad (12.20)$$

(b) Funkcja falowa drugiego stanu wzbudzonego w studni danej w treści zadania to $\psi_3(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right)$, zatem przeprowadzając obliczenia analogiczne jak w punkcie (a) należy obliczyć całki

$$\int_0^a x \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right) dx, \quad \int_0^a \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right) dx. \quad (12.21)$$

Zauważamy, że obie te całki się zerują, zatem również prawdopodobieństwo przejścia ze stanu podstawowego do drugiego stanu wzbudzonego wynosi 0.

(c) Przechodząc do granicy $\omega \rightarrow 0$ w wyrażeniu (12.20) otrzymujemy zerowe prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w stanie wzbudzonym. Takiego wyniku należało się spodziewać, ponieważ w granicy tej zaburzenie H' dąży do zera.

Zadanie 3

Rozważyć rozpraszanie cząstki o masie m i pędzie $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ na studni potencjału $V(r) = -V_0$ dla $r < R$ i $V(r) = 0$ dla pozostałych r .

(a) Przyjmując, że $q = 2k \sin(\theta/2)$ pokazać, że amplituda rozpraszania w przybliżeniu Borna wynosi w tym przypadku,

$$f_B(\theta) = \frac{2mV_0}{\hbar^2 q^3} (\sin(qR) - qR \cos(qR)). \quad (12.22)$$

(b) Pokazać, że różniczkowy przekrój czynny na rozpraszanie na tej studni w granicy, gdy $qR \ll 1$ nie zależy od k i θ .

Rozwiązanie:

(a) Zgodnie z przybliżeniem Borna, dla potencjału o symetrii sferycznej, amplituda rozpraszania wynosi

$$f_B(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2 q} \int_0^\infty r V(r) \sin(qr) dr. \quad (12.23)$$

Wstawiamy $V(r)$ i dokonujemy zamiany zmiennych $\rho = qr$, po czym całkujemy przez części,

$$\begin{aligned} f_B(\theta) &= \frac{2mV_0}{\hbar^2 q} \int_0^R r \sin(qr) dr = \frac{2mV_0}{\hbar^2 q^3} \int_0^{qR} \rho \sin \rho d\rho \\ &= \frac{2mV_0}{\hbar^2 q^3} \left([-\rho \cos \rho]_0^{qR} + \int_0^{qR} \cos \rho d\rho \right) = \frac{2mV_0}{\hbar^2 q^3} (\sin(qR) - qR \cos(qR)). \end{aligned} \quad (12.24)$$

Tym samym udowodniliśmy wzór (12.22).

(b) Różniczkowy przekrój czynny dany jest przez kwadrat modułu amplitudy rozpraszania. W celu obserwacji jego zachowania dla $qR \ll 1$, rozwijamy $\sin(qR)$ i $\cos(qR)$ do drugiego rzędu:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_B(\theta)|^2 \simeq \frac{4m^2 V_0^2}{\hbar^4 q^6} \left(qR - \frac{q^3 R^3}{6} - qR \left(1 - \frac{q^2 R^2}{2} \right) \right)^2 \simeq \frac{4m^2 V_0^2}{\hbar^4 q^6} \frac{q^6 R^6}{9} = \frac{4m^2 V_0^2 R^6}{9\hbar^4}. \quad (12.25)$$

Jak widać, wynik nie zależy od q , a zatem jest stały ze względu na k i θ .