

Notatki do ćwiczeń

Andrzej Więckowski

12 czerwca 2019

Spis treści

1	Brakety	2
2	Operatory	2
3	(Anty-)komutator	3
4	Kwantowanie kanoniczne	3
5	Zasada nieoznaczoności	3
6	Zmiana bazy—transformacje	3
7	Reprezentacja położeniowa	4
8	Równanie Schrödingera	5
9	Ewolucja obserwabli	5
10	Podstawowe zadania: studnia, tunelowanie, ...	6
11	Kwantowy oscylator harmoniczny	6
12	Moment pędu, spin	9
	Dodatki	11
A	Iloczyn skalarny, delta Kronecera, iloczyn wektorowy, symbol Leviiego-Civity	11
B	Teoria dystrybucji, delta Diraca	12

1 Brakety

bra: $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \end{pmatrix} = \sum_i \psi_i |i\rangle$, baza $\{|i\rangle\}$: **ortonormalna**: $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$, **zupełna**: $\sum_i |i\rangle\langle i| = \mathbb{1}$; (1)

ket: $\langle\psi| = (\psi_1^* \quad \psi_2^* \quad \psi_3^* \quad \dots) = \sum_i \psi_i^* \langle i|$; (2)

$\langle\psi|\phi\rangle = (\psi_1^* \quad \psi_2^* \quad \psi_3^* \quad \dots) \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \vdots \end{pmatrix} = \left(\sum_i \psi_i^* \langle i|\right) \left(\sum_j \phi_j |j\rangle\right) = \sum_{ij} \psi_i^* \phi_j \delta_{ij} = \sum_i \psi_i^* \phi_i$ (3)

$|\psi\rangle\langle\psi| = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \end{pmatrix} (\psi_1^* \quad \psi_2^* \quad \psi_3^* \quad \dots) = \begin{pmatrix} \psi_1 \phi_1^* & \psi_1 \phi_2^* & \psi_1 \phi_3^* & \dots \\ \psi_2 \phi_1^* & \psi_2 \phi_2^* & \psi_2 \phi_3^* & \dots \\ \psi_3 \phi_1^* & \psi_3 \phi_2^* & \psi_3 \phi_3^* & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} = \sum_{nm} \psi_n \phi_m^* |n\rangle\langle m|$ (4)

2 Operatory

Element macierzowy operatora:

$A_{nm} = \langle n|\hat{A}|m\rangle$ (5)

Operator w bazie $\{|n\rangle\}$:

$\hat{A} = \sum_{nm} \langle n|\hat{A}|m\rangle |n\rangle\langle m| = \sum_{nm} A_{nm} |n\rangle\langle m| = \begin{pmatrix} \langle 1|\hat{A}|1\rangle & \langle 1|\hat{A}|2\rangle & \langle 1|\hat{A}|3\rangle & \dots \\ \langle 2|\hat{A}|1\rangle & \langle 2|\hat{A}|2\rangle & \langle 2|\hat{A}|3\rangle & \dots \\ \langle 3|\hat{A}|1\rangle & \langle 3|\hat{A}|2\rangle & \langle 3|\hat{A}|3\rangle & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$ (6)

Działanie operatora na ket:

$\hat{A}|\psi\rangle = \left(\sum_{nm} A_{nm} |n\rangle\langle m|\right) \left(\sum_k \psi_k |k\rangle\right) = \sum_n \underbrace{\sum_m A_{nm} \psi_m}_{(\hat{A}|\psi)_n} |n\rangle = |\psi'\rangle$ (7)

Wartość oczekiwana w stanie $|\psi\rangle$:

! $\langle A \rangle_\psi = \langle A \rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle = \sum_{nm} A_{nm} \langle\psi|n\rangle\langle m|\psi\rangle = \sum_{nm} \sum_{ij} A_{nm} \psi_i^* \delta_{in} \psi_j \delta_{mj} = \sum_{nm} \psi_n^* A_{nm} \psi_m$ (8)

Zagadnienie własne:

$\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$ (9)

Operator w bazie stanów własnych:

$\hat{A} = \sum_{aa'} \langle a|\hat{A}|a'\rangle |a\rangle\langle a'| = \sum_{aa'} a \delta_{aa'} |a\rangle\langle a'| = \sum_a a |a\rangle\langle a|$ (10)

3 (Anty-)komutator

Własności komutatora $[A, B] = AB - BA$ and anty-komutatora $\{A, B\} = AB + BA$:

1. $[\alpha A + \beta B, C] = \alpha[A, C] + \beta[B, C]$, gdzie α, β to stałe;
2. $[A, B] = -[B, A]$, $\{A, B\} = \{B, A\}$;
3. $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$;
4. $[AB, C] = A\{B, C\} - \{A, C\}B$.

! Uwaga do zadań z komutatorami: w pierwszej kolejności korzystamy z własności komutatorów! W drugim kroku (jeśli istnieje taka potrzeba) korzystamy z definicji operatorów czy definicji komutatora. W szczególnych przypadkach działamy komutatorem na funkcję próbną:

$$[A, B]\varphi(x, t) = (AB - BA)\varphi(x, t) \quad (11)$$

4 Kwantowanie kanoniczne

$$! [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}, \quad [\hat{x}_i, \hat{x}_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0; \quad (12)$$

$$\text{operator położenia: } \hat{x}_i = x_i; \quad (13)$$

$$\text{operator pędu: } \hat{p}_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}; \quad (14)$$

5 Zasada nieoznaczoności

Dla hermitowskich operatorów: $A = A^\dagger, B = B^\dagger$ ($\Delta A = \sqrt{\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle}$):

$$! \Delta A \Delta B \geq |\langle \frac{1}{2i}[A, B] \rangle|, \quad \Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}; \quad (15)$$

6 Zmiana bazy—transformacje

Dane są dwie zupełne, ortonormalne bazy $\{|i\rangle\}_{i=1,2,3,\dots}$ oraz $\{|\tilde{i}\rangle\}$ oraz transformacja unitarna U :

$$U|i\rangle = |\tilde{i}\rangle, \quad U = \sum_j |\tilde{j}\rangle \langle j| \quad (16)$$

Elementy macierzowe U :

$$U_{ij} = \langle i|\left(\sum_{j'} |\tilde{j}'\rangle \langle j'|\right)|j\rangle = \langle i|\tilde{j}\rangle \quad (17)$$

Postać U w bazie $|i\rangle$

$$U = \sum_{ij} U_{ij}|i\rangle \langle j| = \sum_{ij} \langle i|\tilde{j}\rangle |i\rangle \langle j| = \begin{pmatrix} \langle 1|\tilde{1}\rangle & \langle 1|\tilde{2}\rangle & \langle 1|\tilde{3}\rangle & \dots \\ \langle 2|\tilde{1}\rangle & \langle 2|\tilde{2}\rangle & \langle 2|\tilde{3}\rangle & \dots \\ \langle 3|\tilde{1}\rangle & \langle 3|\tilde{2}\rangle & \langle 3|\tilde{3}\rangle & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (18)$$

Transformacja stanu $|\psi\rangle = \sum_i \psi_i |i\rangle$:

$$|\psi\rangle = \sum_i \underbrace{\left(\sum_j |\tilde{j}\rangle \langle \tilde{j}| \right)}_{\mathbb{1}} \psi_i |i\rangle = \sum_j \sum_i \underbrace{\langle \tilde{j}|i\rangle}_{U_{ji}^\dagger} \psi_i |\tilde{j}\rangle = \sum_j (U^\dagger |\psi\rangle)_j |\tilde{j}\rangle \quad (19)$$

Transformacja U jest unitarna i zachowuje normę $|\psi\rangle$:

$$UU^\dagger = \left(\sum_i |\tilde{i}\rangle \langle i| \right) \left(\sum_j |j\rangle \langle \tilde{j}| \right) = \sum_{ij} |\tilde{i}\rangle \delta_{ij} \langle \tilde{j}| = \mathbb{1}; \quad \langle \tilde{\psi} | \tilde{\psi} \rangle = \langle \psi | U^\dagger U | \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle \quad (20)$$

Transformacja operatora $A = \sum_{nm} A_{nm} |n\rangle \langle m|$:

$$A = \sum_{nm} A_{nm} \underbrace{\left(\sum_i |\tilde{i}\rangle \langle i| \right)}_{\mathbb{1}} |n\rangle \langle m| \underbrace{\left(\sum_j |j\rangle \langle \tilde{j}| \right)}_{\mathbb{1}} = \sum_{nmij} A_{nm} |\tilde{i}\rangle \langle \tilde{j}| \underbrace{\langle i|n\rangle}_{U_{in}^\dagger} \underbrace{\langle m|j\rangle}_{U_{mj}} = \sum_{ij} \underbrace{\left(\sum_{nm} U_{in}^\dagger A_{nm} U_{mj} \right)}_{(U^\dagger A U)_{ij}} |\tilde{i}\rangle \langle \tilde{j}| \quad (21)$$

7 Reprezentacja położeniowa

Zagadnienie własne operatora położenia:

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle \quad (22)$$

Elementy macierzowe operatora \hat{x} :

$$\hat{x}_{xy} = \langle x | \hat{x} | y \rangle = x \delta(x-y), \quad \hat{x}_{xy}^n = x^n \delta(x-y) \quad (23)$$

Stany $|x\rangle$ stanowią ortogonalną zupełną ciągłą bazę:

$$\int dx |x\rangle \langle x| = \mathbb{1}, \quad \langle x|y\rangle = \delta(x-y) \quad (24)$$

Funkcja falowa (definicja):

$$\color{red}! \psi(x) = \langle x | \psi \rangle \quad (25)$$

Iloczyn skalarny:

$$\langle \psi | \phi \rangle = \langle \psi | \underbrace{\left(\int dx |x\rangle \langle x| \right)}_{\mathbb{1}} | \phi \rangle = \int dx \langle \psi | x \rangle \langle x | \phi \rangle = \int dx \psi^*(x) \phi(x) \quad (26)$$

Działanie operatora $\hat{\mathcal{O}}$ na funkcję falową $\psi(x)$ —definicja:

$$\hat{\mathcal{O}} \psi(x) = \langle x | \hat{\mathcal{O}} | \psi \rangle = \langle x | \psi' \rangle = \psi'(x) \quad (27)$$

Elementy macierzowe operatora pędu \hat{p} w reprezentacji położeniowej:

$$\hat{p}_{xy} = \langle x | \hat{p} | y \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \delta(x-y), \quad \hat{p}_{xy}^n = \langle x | \hat{p}^n | y \rangle = (-i\hbar)^n \frac{\partial^n}{\partial x^n} \delta(x-y) \quad (28)$$

Wartość oczekiwana operatora:

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle = \langle \psi | \underbrace{\left(\int dx |x\rangle \langle x| \right)}_{\mathbb{1}} A \underbrace{\left(\int dy |y\rangle \langle y| \right)}_{\mathbb{1}} | \psi \rangle = \int \int dx dy \psi^*(x) A_{xy} \psi(y) \quad (29)$$

Wzór (29), kiedy A jest funkcją \hat{x} upraszcza się:

$$\langle A(\hat{x}) \rangle = \int \int dx dy \psi^*(x) A(x) \underbrace{\langle x | y \rangle}_{\delta(x-y)} \psi(y) = \int dx \psi^*(x) A(x) \psi(x) \quad (30)$$

Wzór (29), analogicznie kiedy A jest funkcją \hat{p} upraszcza się:

$$\langle A(\hat{p}) \rangle = \int \int dx dy \psi^*(x) \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{\partial^n A(p)}{\partial p^n} \Big|_{p=0} \hat{p}_{xy}^n \right) \psi(y) = \int dx \psi^*(x) A(p) \psi(x) \quad (31)$$

W ogólności dla dowolnej obserwabli:

$$\langle A \rangle = \int dx \psi^*(x) A \psi(x) \quad (32)$$

8 Równanie Schrödingera

Równanie fundamentalne:

$$\text{! } i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle \quad (33)$$

Równanie falowe:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \hat{H} \psi(x, t) \quad (34)$$

Hamiltonian cząstki o masie m w potencjale $V(x, t)$:

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + V(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x, t) \quad (35)$$

9 Ewolucja obserwabli

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{d}{dt} (\langle \psi | A | \psi \rangle) = \left(\langle \psi | \overleftarrow{\frac{d}{dt}} \right) A | \psi \rangle + \langle \psi | \left(\frac{d}{dt} A \right) | \psi \rangle + \langle \psi | A \left(\frac{d}{dt} | \psi \rangle \right) = \quad (36)$$

$$\stackrel{(33)}{=} -\frac{1}{i\hbar} \langle \psi | HA | \psi \rangle + \langle \dot{A} \rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle \psi | AH | \psi \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle + \langle \dot{A} \rangle \quad (37)$$

$$\text{! } \frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H, A] \rangle + \langle \dot{A} \rangle \quad (38)$$

Twierdzenie Ehrenfesta dla cząstki o masie m (w polu $\vec{F} = -\nabla V(x)$) opisanej $\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + V(x)$:

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{r} \rangle = \frac{1}{m} \langle \vec{p} \rangle \quad (39)$$

$$\frac{d}{dt}\langle \vec{p} \rangle = -\langle \nabla V \rangle \quad (40)$$

10 Podstawowe zadania: studnia, tunelowanie, ...

Przy rozwiązywaniu przyjmujemy, że funkcja falowa $\psi(x)$ oraz jej gradient są:

- jednowartościowe;
- ciągłe;
- skończone.

W konsekwencji prowadzi to do nakładania warunków na funkcję $\psi(x)$, gdzie znajduje się nieciągłość potencjału V . Jeżeli nieciągłość V jest w x_0 to naturalnie nakładamy na zadanie warunki:

$$\lim_{x \rightarrow x_0^-} \psi(x) = \lim_{x \rightarrow x_0^+} \psi(x) \quad (41)$$

$$\lim_{x \rightarrow x_0^-} \frac{d}{dx} \psi(x) = \lim_{x \rightarrow x_0^+} \frac{d}{dx} \psi(x) \quad (42)$$

11 Kwantowy oscylator harmoniczny

Hamiltonian ($k = m\omega^2$), operatory kreacji/anihilacji $a^\dagger = -\frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(p + im\omega x)$, $a = \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(p - im\omega x)$, operator liczby obsadzeń $N = a^\dagger a$:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{kx^2}{2} = \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega = \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \quad (43)$$

Relacje komutacji:

$$\text{! } [a, a^\dagger] = 1 \quad (44)$$

$$[N, a] = -a, [N, a^\dagger] = a^\dagger, [H, a] = -\hbar\omega a, [H, a^\dagger] = \hbar\omega a^\dagger \quad (45)$$

Dowód, że widmo energetyczne $E_n > 0$ dla takiego układu \hat{H} . Zagadnienie własne (baza energetyczna jest zupełna $\sum_n |n\rangle \langle n| = \mathbb{1}$):

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle \quad (46)$$

$$\langle n|p^2|n\rangle = \langle n|p \underbrace{\left(\sum_\ell | \ell \rangle \langle \ell | \right)}_1 p|n\rangle = \sum_\ell \langle n|p|\ell\rangle \langle \ell|p|n\rangle = \sum_\ell |\langle n|p|\ell\rangle|^2 \quad (47)$$

$$\langle n|x^2|n\rangle = \sum_\ell |\langle n|x|\ell\rangle|^2 \quad (48)$$

$$E_n = \langle n|H|n\rangle = \langle n| \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{kx^2}{2} \right) |n\rangle = \frac{1}{2m} \sum_\ell |\langle n|p|\ell\rangle|^2 + \frac{k}{2} \sum_\ell |\langle n|x|\ell\rangle|^2 \geq 0 \quad (49)$$

$$E_n = 0 \leftrightarrow \langle n|x|\ell\rangle = \langle n|p|\ell\rangle = 0 \quad (50)$$

$$\langle n|[x,p]|n\rangle = \langle n|(xp - px)|n\rangle = i\hbar = \underbrace{\sum_{\ell} (\langle n|x|\ell\rangle\langle\ell|p|n\rangle - \langle n|p|\ell\rangle\langle\ell|x|n\rangle)}_{\Sigma \neq 0 \rightarrow i\hbar} \rightarrow E_n > 0 \quad (51)$$

Operator liczby obsadzeń \hat{N} spełnia następujące zagadnienie własne:

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle, \quad \text{gdzie } |n\rangle \text{ to stany własne hamiltonianu (43)} \quad (52)$$

Działanie operatorów a, a^\dagger na $|n\rangle$:

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad (53)$$

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad (54)$$

Równanie (53) [analogicznie (54)] możemy otrzymać w następujący sposób:

$$a^\dagger|n\rangle = C_n|n\rangle \quad |(\dots)^\dagger \quad (55)$$

$$\langle n|a = \langle n|C_n^* \quad (56)$$

$$\langle n|aa^\dagger|n\rangle = C_n C_n^* \langle n|n\rangle \quad (57)$$

$$\langle n|(aa^\dagger - a^\dagger a + a^\dagger a)|n\rangle = |C_n|^2 \quad (58)$$

$$\langle n|([a, a^\dagger] + N)|n\rangle = |C_n|^2 \quad (59)$$

$$1 + n = |C_n|^2 \rightarrow C_n = \sqrt{n+1} \quad (\text{co do fazy zespolonej}) \quad (60)$$

Stan podstawowy $|0\rangle$ (o najniższej energii) definicja:

$$! a|0\rangle = 0 \quad (61)$$

Energia E_0 stanu podstawowego:

$$H|0\rangle = \left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega|0\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega = E_0|0\rangle \quad (62)$$

Widmo energetyczne E_n :

$$! E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad (63)$$

Funkcja falowa stanu podstawowego $\psi_0(x)$:

$$0 = \langle x|a \int dy |y\rangle \underbrace{\langle y|0\rangle}_{\psi_0(y)} = \int dy \langle x|a|y\rangle \psi_0(y) = \int dy \langle x| \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (p - im\omega x)|y\rangle \psi_0(y) = \quad (64)$$

$$= \int dy \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (\langle x|p|y\rangle - im\omega \langle x|x|y\rangle) \psi_0(y) = \quad (65)$$

$$= \int dy \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \delta(x-y) - im\omega x \delta(x-y)) \psi_0(y) = \quad (66)$$

$$= \int dy \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \left[-i\hbar \delta(x-y) \frac{\partial}{\partial y} \psi_0(y) - im\omega x \delta(x-y) \psi_0(y) \right] = \quad (67)$$

$$= \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi_0(x) - im\omega x \psi_0(x) \right] = 0 \quad (68)$$

$$\frac{d}{dx} \psi_0(x) = -\frac{m\omega}{\hbar} x \psi_0(x) \quad (69)$$

Ostatecznie:

$$\text{! } \psi_0(x) = A \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{\hbar}\right), \quad \text{gdzie } A \text{ to stała normalizacyjna} \quad (70)$$

Stany wzbudzone możemy generować rekurencyjnie:

$$\psi_1(x) = \langle x|1\rangle = \langle x|a^\dagger|0\rangle = \langle x|a^\dagger \underbrace{\mathbb{1}}_{\int dy |y\rangle\langle y|} |0\rangle \rightarrow \dots \quad (71)$$

W celu znalezienia reprezentacji macierzowej (baza energetyczna $|n\rangle$) operatorów kreacji i anihilacji wykorzystamy równania (53),(54). Mnożąc równania z lewej strony przez $\langle m|$ otrzymujemy:

$$a_{mn}^\dagger = \langle m|a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1} \langle m|n+1\rangle = \sqrt{n+1} \delta_{m,n+1} \quad (72)$$

$$a_{mn} = \sqrt{n} \delta_{m,n-1} \quad (73)$$

Korzystając dalej z (6):

$$a^\dagger = \sum_{nm} a_{nm}^\dagger |n\rangle\langle m| = \sum_{nm} \sqrt{m+1} \delta_{n,m+1} |n\rangle\langle m| = \sum_m \sqrt{m+1} |m+1\rangle\langle m| \quad (74)$$

$$a = \sum_{nm} a_{nm} |n\rangle\langle m| = \sum_{nm} \sqrt{m} \delta_{n,m-1} |n\rangle\langle m| = \sum_m \sqrt{m} |m-1\rangle\langle m| \quad (75)$$

Reprezentacja macierzowa (baza energetyczna $|n\rangle$) operatorów kreacji i anihilacji:

$$a = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \ddots \end{bmatrix} \quad a^\dagger = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \ddots & \dots \end{bmatrix} \quad (76)$$

12 Moment pędu, spin

Orbitalny moment pędu: $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ (77)

$$L_i = \varepsilon^{ijk} x_j p_k \quad (78)$$

Relacje komutacji: $[L_i, x_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} x_k$; $[L_i, p_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} p_k$; $[L_i, L_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} L_k$;

! $[L_i, \vec{L}^2] = 0$ (79)

Macierze Pauliego:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Spinowy moment pędu: $\vec{S} = \frac{1}{2} \hbar \vec{\sigma}$, $S^i = \frac{1}{2} \hbar \sigma_i$ (80)

Całkowity moment pędu: $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$, $[\vec{L}, \vec{S}] = 0$ (81)

! $\vec{J} \cdot \vec{J} = (\vec{L})^2 + (\vec{S})^2 + \underbrace{2\vec{L} \cdot \vec{S}}_{\text{oddziaływanie spin-orbita}}$ (82)

Operatory drabinkowe:

$$S^\pm = S^x \pm iS^y, \quad (83)$$

Własności:

$$[S^+, S^-] = 2S^z; \quad [S^z, S^\pm] = \pm S^\pm; \quad (84)$$

$$S^2 = \vec{S} \cdot \vec{S} = (S^x)^2 + (S^y)^2 + (S^z)^2 = \frac{1}{2}(S^+ S^- + S^- S^+) + (S^z)^2. \quad (85)$$

Stany $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ są stanami własnymi operatora S^z :

$$S^+ |\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle; \quad S^- |\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle \quad (86)$$

$$S^+ |\uparrow\rangle = 0; \quad S^- |\downarrow\rangle = 0; \quad (87)$$

Ciekawy przykład

Dany jest układ opisany hamiltonianem:

$$\hat{H} = \Delta S^x + J(S^+ S^- + S^- S^+) = \begin{bmatrix} J & \frac{1}{2}\Delta \\ \frac{1}{2}\Delta & J \end{bmatrix} \quad (88)$$

z warunkiem początkowym $|\psi(t=0)\rangle = |\uparrow\rangle$, Δ, J to parametry niezależne od czasu. Zadanie polega na rozwiązaniu równania Schrödingera (33), gdzie $|\psi\rangle = a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle$:

$$\begin{bmatrix} J & \Delta/2 \\ \Delta/2 & J \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = i\hbar \begin{bmatrix} \dot{a} \\ \dot{b} \end{bmatrix} \quad (89)$$

co prowadzi do układu równań różniczkowych:

$$\begin{cases} Ja + \frac{1}{2}\Delta b = i\hbar\dot{a} \\ \frac{1}{2}\Delta a + Jb = i\hbar\dot{b} \end{cases} \quad (90)$$

Policzmy pochodną $\frac{d}{dt}$ pierwszego równania:

$$J\dot{a} + \frac{1}{2}\Delta\dot{b} = i\hbar\ddot{a} \quad (91)$$

Wyraz zawierający \dot{b} wyznaczamy z drugiego równania (90):

$$\dot{b} = \frac{1}{i\hbar}(\frac{1}{2}\Delta a + Jb) \quad (92)$$

Następnie wstawiamy go do (91):

$$J\dot{a} + \frac{1}{2}\Delta\frac{1}{i\hbar}(\frac{1}{2}\Delta a + Jb) = i\hbar\ddot{a} \quad (93)$$

Wyraz b wyznaczamy z pierwszego równania (90):

$$b = \frac{2}{\Delta}(i\hbar\dot{a} - Ja) \quad (94)$$

Następnie wstawiamy to do równania (93):

$$J\dot{a} + \frac{1}{2}\Delta\frac{1}{i\hbar}(\frac{1}{2}\Delta a + J\frac{2}{\Delta}(i\hbar\dot{a} - Ja)) = i\hbar\ddot{a} \quad (95)$$

Po uproszczeniach otrzymujemy równanie różniczkowe jednorodne drugiego rzędu:

$$-i\hbar\ddot{a} + 2J\dot{a} + \frac{1}{i\hbar}[(\frac{\Delta}{2})^2 - J^2]a = 0, \quad (96)$$

które łatwo możemy rozwiązać dokonując podstawienia:

$$a(t) = e^{\lambda t} \quad (97)$$

Otrzymujemy równanie kwadratowe ze względu na parametr λ

$$-i\hbar\lambda^2 + 2J\lambda + \frac{1}{i\hbar}[(\frac{\Delta}{2})^2 - J^2]a = 0 \quad (98)$$

Rozwiązania równania kwadratowego:

$$\lambda = \frac{-2J \pm \Delta}{-2i\hbar} = \frac{i}{\hbar}(-J \pm \frac{\Delta}{2}) \quad (99)$$

Ostatecznie ogólna postać rozwiązania równania (96):

$$a(t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(-J + \frac{\Delta}{2})t} + Be^{\frac{i}{\hbar}(-J - \frac{\Delta}{2})t}, \quad (100)$$

gdzie A, B to pewne stałe, które możemy wyznaczyć z warunku początkowego i warunku normalizacyjnego. Z warunku początkowego mamy:

$$a(t=0) = A + B = 1 \rightarrow B = 1 - A \quad (101)$$

$$a(t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(-J + \frac{\Delta}{2})t} + (1 - A)e^{\frac{i}{\hbar}(-J - \frac{\Delta}{2})t} = Ae^{-\frac{i}{\hbar}Jt} \underbrace{\left[e^{\frac{i}{\hbar}\frac{\Delta}{2}t} - e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\Delta}{2}t} \right]}_{2i\sin(\frac{\Delta}{2\hbar}t)} + e^{\frac{i}{\hbar}(-J - \frac{\Delta}{2})t} \quad (102)$$

$$a(t) = 2iAe^{-\frac{i}{\hbar}Jt} \sin\left(\frac{\Delta}{\hbar}t\right) + e^{\frac{i}{\hbar}\left(-J-\frac{\Delta}{2}\right)t} = e^{-\frac{i}{\hbar}Jt} \underbrace{\left[2iA \sin\left(\frac{\Delta}{\hbar}t\right) + e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\Delta}{2}t}\right]}_{\cos\left(\frac{\Delta}{2\hbar}t\right)} = e^{-\frac{i}{\hbar}Jt} \cos\left(\frac{\Delta}{2\hbar}t\right), \quad (103)$$

gdzie tutaj w ostatnim kroku skorzystano z warunku $a(0) = 1$ oraz niezmienniczości cechowania stanu kwantowego. Ostatni krok to wyznaczenie $b(t)$ z warunku normalizacyjnego:

$$|a|^2 + |b|^2 = 1 \rightarrow |b|^2 = 1 - |a|^2 \quad (104)$$

$$b(t) = -ie^{-\frac{i}{\hbar}Jt} \sin\left(\frac{\Delta}{2\hbar}t\right) \quad (105)$$

Ostatecznie rozwiązaniem zadania jest:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Jt} \begin{bmatrix} \cos\left(\frac{\Delta}{2\hbar}t\right) \\ -i \sin\left(\frac{\Delta}{2\hbar}t\right) \end{bmatrix} \quad (106)$$

A Iloczyn skalarny, delta Kronecera, iloczyn wektorowy, symbol Leviego-Civity

Stosujemy konwencję sumacyjną:

$$\sum_i a_i b_i \equiv a_i b_i \quad (107)$$

Własność delty Kronecera:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases} \quad (108)$$

$$\sum_n f(n) \delta_{nm} = f(m) \quad (109)$$

$$\sum_n \delta_{nn} \equiv \delta_{nn} = 3 \quad (110)$$

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = \left(\sum_i a_i \hat{e}_i \right) \cdot \left(\sum_j b_j \hat{e}_j \right) = \sum_{ij} a_i b_j \underbrace{\hat{e}_i \cdot \hat{e}_j}_{\delta_{ij}} = \sum_i a_i b_i \quad (111)$$

Iloczyn skalarny:

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = \sum_i a_i b_i \equiv a_i b_i \quad (112)$$

Iloczyn wektorowy:

$$(\vec{a} \times \vec{b})_i = \sum_{jk} \epsilon^{ijk} a_j b_k \equiv \epsilon^{ijk} a_j b_k, \quad (113)$$

gdzie ε^{ijk} to symbol Levi-Civita:

$$\varepsilon^{ijk} = \begin{cases} +1 & \text{permutacja parzysta, t.j.: } i, j, k = 1, 2, 3; \quad 2, 3, 1; \quad 3, 1, 2 \\ 0 & \sim \\ -1 & \text{permutacja nieparzysta, t.j.: } i, j, k = 1, 3, 2; \quad 2, 1, 3; \quad 3, 2, 1 \end{cases} \quad (114)$$

Własności ε^{ijk} :

$$\varepsilon^{ijk} \varepsilon^{lmn} = \det \begin{bmatrix} \delta_{il} & \delta_{im} & \delta_{in} \\ \delta_{jl} & \delta_{jm} & \delta_{jn} \\ \delta_{kl} & \delta_{km} & \delta_{kn} \end{bmatrix} \quad (115)$$

$$\varepsilon^{ijk} \varepsilon^{imn} = \delta_{jm} \delta_{kn} - \delta_{jn} \delta_{km} \quad (116)$$

$$\varepsilon^{ijk} \varepsilon^{ijn} = 2\delta_{kn} \quad (117)$$

B Teoria dystrybucji, delta Diraca

Podstawy teorii dystrybucji:

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \varphi(x) = 0 \quad (118)$$

$$\langle \varphi(x), \psi(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi(x) \psi(x) \quad (119)$$

$$\langle \varphi, \frac{d}{dx} \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi(x) \frac{d}{dx} \psi(x) = \underbrace{\varphi(x) \psi(x)}_0 \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{d}{dx} \varphi(x) \psi(x) = - \langle \frac{d}{dx} \varphi(x), \psi(x) \rangle \quad (120)$$

Funkcja schodkowa Heaviside'a:

$$\theta(x) = \begin{cases} 1 & x > 0 \\ 0 & x \leq 0 \end{cases} \quad (121)$$

Delta Diraca:

$$\delta(x) = \frac{d}{dx} \theta(x) \quad (122)$$

Właściwości delty Diraca:

$$\text{supp } f \in [a, b] \rightarrow \int_a^b f(x) \delta(x) = f(0) \quad (123)$$

gdzie $\text{supp } f$ to nośnik funkcji f , czyli dopięcie zbiory argumentów dla których $f(x) \neq 0$. W szczególności:

$$! \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \delta(x) = f(0) \quad (124)$$

Ciekawa własność:

$$\delta(f(x)) = \sum_j \frac{\delta(x - x_j)}{|f'(x_j)|} \quad (125)$$

gdzie x_j to miejsca zerowe $f(x)$.