Mechanika kwantowa I

Opracowanie:
Barbara Pac, Piotr Petelenz

Zwyczajowo, podstawy mechaniki kwantowej formułowane są w postaci kilku postulatów, których numeracja i konkretna postać są różne w różnych ujęciach. W niniejszym zbiorze za punkt wyjścia przyjmujemy następujące sformułowanie:

Postulat 1

Stan układu kwantowo-mechanicznego opisany jest przez funkcję $\Psi(q_1, q_2, ...q_{fn}, t)$ współrzędnych n cząstek zawartych w układzie (przy czym każda cząstka ma f stopni swobody) oraz czasu, lub funkcję $\Phi(p_1, p_2, ...p_{fn}, t)$ pędów wszystkich cząstek zawartych w układzie oraz czasu. Funkcja ta nosi nazwę funkcji falowej w reprezentacji, odpowiednio, współrzędnych lub pędów, i jest zdefiniowana przez tę właściwość, że kwadrat jej modułu zadaje *gęstość prawdopodobieństwa* (w_q lub w_p) znalezienia układu w danym punkcie przestrzeni konfiguracyjnej lub pędowej:

$$\Psi^*(q_1, q_2, ...q_n, t)\Psi(q_1, q_2, ...q_n, t) = |\Psi|^2 = w_q(q_1, q_2, ...q_n, t) \qquad \text{[W.3.1a]}$$

$$\Phi^*(p_1, p_2, ...p_n, t)\Phi(p_1, p_2, ...p_n, t) = |\Phi|^2 = w_p(p_1, p_2, ...p_n, t) \qquad \text{[W.3.1b]}$$

Postulat 2

zadaje relację pomiędzy funkcjami falowymi w reprezentacji współrzędnościowej i w reprezentacji pędowej, mianowicie

$$\Psi = h^{-\frac{1}{2}nf} \int ... \int \Phi^* e^{-\frac{i}{\hbar}\sum_{i=1}^{nf} q_i p_i} d\tau_p \qquad \text{[W.3.2]}$$

Postulat 3

Wartość spodziewana wielkości mechanicznej F wyraża się wzorem

$$\overline{F} = \int \Psi^* \hat{F} \Psi d\tau_q \qquad \text{[W.3.3]}$$

gdzie $\hat{F}$ oznacza operator tej wielkości mechanicznej, skonstruowany według reguł Jordana, mianowicie

a) w klasycznym wzorze określającym wielkość $F(q, p)$ jako funkcję współrzędnych i pędów zastępujemy wszędzie współrzędną q przez operator $\hat{q}$ mnożenia przez tę współrzędną:

$$\hat{q} \rightarrow q\bullet \qquad \text{[W.3.4]}$$

b) w klasycznym wzorze określającym wielkość $F(q, p)$ jako funkcję współrzędnych i pędów zastępujemy wszędzie pęd p przez operator $-i\hbar \frac{\partial}{\partial q}$, gdzie q oznacza odpowiednią współrzędną.

$$p \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial q} \qquad \text{[W.3.5]}$$

Postulat 4

żąda, aby funkcja falowa układu spełniała następujące *równanie Schrödingera zawierające czas*

$$\hat{H}\Psi = ih \frac{\partial}{\partial t} \Psi \qquad \text{[W.3.6]}$$

gdzie $\hat{H}$ jest operatorem energii układu (operatorem Hamiltona, hamiltonianem), skonstruowanym według podanych wyżej reguł Jordana.

Konsekwencje i komentarze:

1. Funkcja falowa w pełni charakteryzuje *stan kwantowo-mechaniczny układu*, tj. zawiera maksimum informacji o układzie, dostępnej na gruncie opisu kwantowo-mechanicznego.

2. *Prawdopodobieństwo* znalezienia układu w pewnej objętości przestrzeni konfiguracyjnej lub pędowej dane jest całką po tej objętości

$$W_{Vq} = \int_{Vq} \Psi^*(q_1, q_2, ...q_N, t)\Psi(q_1, q_2, ...q_N, t)d\tau_q = \int_{Vq} |\Psi|^2 d\tau_q = \int_{Vq} w_q(q_1, q_2, ...q_N, t)d\tau_q \qquad \text{[W.3.7a]}$$

$$W_{Vp} = \int_{Vp} \Phi^*(p_1, p_2, ...p_N, t)\Phi(p_1, p_2, ...p_N, t)d\tau_p = \int_{Vp} |\Phi|^2 d\tau_p = \int_{Vp} w_p(p_1, p_2, ...p_N, t)d\tau_p \qquad \text{[W.3.7b]}$$

W przypadku, gdy jest to całkowita objętość dostępna układowi (np. w skrajnym przypadku cała przestrzeń), powyższe całki musza być równa jedności (układ na pewno znajduje się *gdzieś* i ma *jakiś* pęd), co nazywamy warunkiem normalizacji.

$$\int_{\tau_q} |\Psi|^2 d\tau_q = 1 \qquad \text{[W.3.8a]}$$

$$\int_{\tau_p} |\Phi|^2 d\tau_p = 1 \qquad \text{[W.3.8b]}$$

W dalszym ciągu skoncentrujemy się na funkcjach falowych Ψ w reprezentacji współrzędnościowej. Są one z reguły uzyskiwane przez rozwiązanie równań różniczkowych, co powoduje pojawienie się odpowiednich stałych całkowania. Jedna z nich (nazwijmy ją *N*) wyznaczana jest z warunku normalizacji. Przypuśćmy, że rozwiązanie odpowiedniego równania prowadzi do funkcji Ψ'; wówczas unormowana funkcja falowa ma postać

$$\Psi = N\Psi' \qquad \text{[W.3.9]}$$

$$N = \left(\frac{1}{\int_{\tau_q} |\Psi'|^2 d\tau_q} \right)^{1/2} \qquad \text{[W.3.10]}$$

gwarantuje spełnienie wymagania normalizacji.
Uwaga: Warunek normalizacji dla tzw. stanów niezwiązanych ma nieco inną postać i nie będzie tu omawiany.

3. Z oczywistych przyczyn fizycznych, funkcje falowe muszą być tzw. *funkcjami porządnymi*, inaczej *funkcjami klasy Q*. Z definicji oznacza to, że muszą być *skończone, ciągłe i jednoznaczne*.

4. Istnieje odpowiednik wyrażenia [W.3.3] dla funkcji falowych zadanych w przestrzeni pędów, ale nie będzie on tu używany. Podobnie, równanie Schrödingera analogiczne do [W.3.6] można również zapisać dla funkcji falowej Φ (w reprezentacji pędowej).

5. Operatory odpowiadające mierzalnym wielkościom mechanicznym (obserwablom) muszą być *liniowe* i *hermitowskie*.

Operator nazywamy *liniowym*, jeśli dla każdej pary funkcji u_1 i u_2

$$\hat{F}(au_1 + bu_2) = a\hat{F}u_1 + b\hat{F}u_2 \qquad \text{[W.3.11]}$$

Operator nazywamy *hermitowskim*, jeśli spełnia on warunek

$$\int u_1^* \hat{F}u_2 d\tau = \int u_2 (\hat{F}u_1)^* d\tau \qquad \text{[W.3.12]}$$

6. Dla każdej pary operatorów *F*, *G* definiujemy ich *komutator*

$$[\hat{F},\hat{G}]=\hat{F}\hat{G}-\hat{G}\hat{F} \qquad \text{[W.3.13]}$$

Mnożenie operatorów jest na ogół nieprzemienne, z wyjątkiem przypadku, gdy komutator tych operatorów jest równy zeru.

7. Z powyższego powodu, jeśli w klasycznym wzorze określającym wielkość F(q,p) jako funkcję współrzędnych i pędów pojawia się iloczyn pędu i odpowiadającej mu współrzędnej, to konstruując odpowiedni operator według reguł Jordana wyrażenie to *symetryzujemy*, tj. zastępujemy iloczyn średnią dwóch iloczynów, w których pęd i współrzędna zapisane są w przeciwnej kolejności.

8. Operator hermitowski posiada pewien *układ funkcji własnych*, tj. takich, że

$$F\,\phi_i = F_i\,\phi_i \qquad \text{[W.3.14]}$$

W powyższym wyrażeniu ϕ_i jest zwana *funkcją własną*, a liczba F_i *wartością własną*. Funkcje własne operatora hermitowskiego tworzą zbiór
a) *ortonormalny*, tj.

$$\int \phi_i^* \phi_j d\tau_q = \delta_{ij} \qquad \text{[W.3.15]}$$

gdzie $\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & dla \quad i=j \\ 0 & dla\, i \neq j \end{cases}$ [W.3.16]

b) *zupełny*, co oznacza w praktyce (ścisła definicja nie jest tu konieczna), że dowolna (dostatecznie regularna) funkcja g daje się przedstawić jako szereg funkcji własnych ϕ_i operatora F

$$g=\sum_{i=1}^{\infty} c_i\phi_i \qquad \text{[W.3.17]}$$

gdzie $c_l = \int g\phi_l^* d\tau_q$ [W.3.18]

9. *Pojedynczy pomiar* wielkości mechanicznej *F* może dać jako wynik jedynie *jedną z wartości własnych* F_i *operatora F*. W długiej serii takich pomiarów poszczególne wartości własne F_i pojawiają się z *prawdopodobieństwem* równym $|c_i|^2$.

10. Wartość wielkość mechanicznej *F* jest *ostro zadana* (tj. każdy kolejny jej pomiar daje ten sam wynik F_i) wtedy i tylko wtedy, gdy *układ znajduje się w stanie własnym operatora F*, tj. gdy opisująca go funkcja falowa *g* jest jedną z funkcji falowych ϕ_i spełniających równanie $\hat{F}\phi_i = F_i\phi_i$.

11. Dwie wielkości mechaniczne są *równocześnie ostro mierzalne* wtedy i tylko wtedy, gdy *ich operatory kwantowo-mechaniczne ze sobą komutują*, gdyż tylko w tym przypadku operatory te mają *wspólny układ funkcji własnych*.
Z tego powodu wartości komutatorów są bardzo istotne, gdyż determinują fizykę rozwiązywanego problemu kwantowomechanicznego. Przy ich wyprowadzaniu przydatne są następujące zależności:

$$[\hat{F},\hat{G}]=-[\hat{G},\hat{F}] \qquad \text{[W.3.19]}$$

$$[\hat{F},(\hat{G}+\hat{H})]=[\hat{F},\hat{G}]+[\hat{F},\hat{H}] \qquad \text{[W.3.20]}$$

$$[\hat{F},\hat{G}\hat{H}]=[\hat{F},\hat{G}]\hat{H}+\hat{G}[\hat{F},\hat{H}] \qquad \text{[W.3.21]}$$

12. Równanie [W.3.6] jest *podstawowym równaniem ruchu* mechaniki kwantowej. Jego rozwiązanie pozwala wyznaczyć funkcję falową, tj. zdobyć o układzie wszelkie możliwe informacje, i jest głównym problemem teoretycznego opisu układów mikroskopowych.

13. Gdy hamiltonian układu nie zależy od czasu, równanie [W.3.6] posiada rozwiązania w postaci

$$\Psi = \psi \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \qquad \text{[W.3.22]}$$

przy czym funkcja ψ *jest niezależna od czasu* i spełnia *równanie Schrödingera nie zawierające czasu (niezależne od czasu*)

$$\hat{H}\psi = E\psi \qquad \text{[W.3.23]}$$

Rozwiązania postaci [W.3.22] odpowiadają tzw. *stanom stacjonarnym* (nazwa wynika z faktu, że wielkości mierzalne są w takich stanach stałe w czasie).

Przykład 1

Dany jest zbiór unormowanych funkcji własnych jednowymiarowego oscylatora harmonicznego

$\chi_0(Q) = \pi^{-\frac{1}{4}} e^{-Q^2/2}$ $\quad\chi_1(Q) = \sqrt{2}\pi^{-1/4} Q e^{-Q^2/2}$ $\quad\chi_2(Q) = \frac{1}{\sqrt{2}}\pi^{-1/4}(2Q^2-1)e^{-Q^2/2}$ $\quad$ gdzie $Q \in R$

1. Wykaż bezpośrednim rachunkiem, że funkcja $\chi_0(Q)$ jest unormowana.
2. Wykaż bezpośrednim rachunkiem, że funkcje $\chi_1(Q)$ i $\chi_2(Q)$ są ortogonalne.
3. Sprawdź, czy funkcja $\chi_0(Q)$ jest funkcją własną operatora $\hat{F} = \frac{1}{Q}\frac{d}{dQ}$
4. Dla stanu opisanego funkcją $\chi_0(Q)$ znajdź wartość Q, dla której gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki jest maksymalna.
5. Dana jest kombinacja liniowa funkcji własnych oscylatora harmonicznego

$$X^a = \chi_0(Q) + \chi_1(Q) + \chi_2(Q)$$

a) Określ, czy funkcja X^a jest unormowana. Jeżeli nie - unormuj ją.

b) Oblicz wartość średnią Q w stanie X^a.

c) Zakładając, że stanom własnym $\chi_0(Q), \chi_1(Q), \chi_2(Q)$ odpowiadają wartości energii E_1, E_2, E_3 określ:

- Jakie wartości energii i z jakim prawdopodobieństwem otrzyma się w wyniku długiej serii pomiarów, jeżeli układ znajduje się w stanie opisanym funkcją: $\chi_0(Q), \chi_1(Q), \chi_2(Q)$, X^a.
- Jakie są wartości średnie energii w stanach: $\chi_0(Q), \chi_1(Q), \chi_2(Q)$, X^a.

Ad. 1

Funkcja unormowana musi spełniać warunek dany wzorem [W.3.8a]. W takim razie:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \chi_0^*(Q)\chi_0(Q)dQ = 1 \qquad [3.1.1]$$

Wstawiając jawną postać funkcji $\chi_0(Q)$ mamy:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \chi_0^*(Q)\chi_0(Q)dQ = \pi^{-\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-Q^2/2} e^{-Q^2/2} dQ = \pi^{-\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-Q^2} dQ = \pi^{-\frac{1}{2}}\pi^{\frac{1}{2}} = 1 \qquad [3.1.2]$$

Funkcja $\chi_0(Q)$ spełnia warunek [3.1.1] a zatem jest funkcją unormowaną.

Ad. 2

Warunek ortogonalności funkcji falowych opisany jest wzorami [W.3.15] i [W.3.16]. W naszym przypadku chodzi o funkcje $\chi_1(Q)$ i $\chi_2(Q)$ - muszą one spełniać warunek:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \chi_1^*(Q)\chi_2(Q)dQ = 0 \qquad [3.1.3]$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \chi_1^*(Q)\chi_2(Q)dQ = \sqrt{2}\pi^{-1/4}\frac{1}{\sqrt{2}}\pi^{-1/4}\int_{-\infty}^{+\infty} Qe^{-Q^2/2}(2Q^2-1)e^{-Q^2/2}dQ = \pi^{-1/2}\int_{-\infty}^{+\infty} Q(2Q^2-1)e^{-Q^2}dQ = 0 \qquad [3.1.4]$$

Zerowa wartość całki (potwierdzająca ortogonalność funkcji $\chi_1(Q)$ i $\chi_2(Q)$) jest tu konsekwencją nieparzystości funkcji podcałkowych.

Ad.3

Funkcja $\chi_0(Q)$ jest funkcją własną operatora $\hat{F} = \frac{1}{Q}\frac{d}{dQ}$, jeżeli spełniony jest warunek [W.3.14], który w naszym przypadku zapiszemy w postaci:

$$\hat{F}\chi_0(Q) = F\chi_0(Q) \qquad [3.1.5]$$

$$\hat{F}\chi_0(Q) = \frac{1}{Q}\frac{d}{dQ}\pi^{-\frac{1}{4}}e^{-Q^2/2} = \pi^{-\frac{1}{4}}\frac{1}{Q}(-Q)e^{-Q^2/2} = -\pi^{-\frac{1}{4}}e^{-Q^2/2} = -\chi_0(Q) \qquad [3.1.6]$$

Działając operatorem $\hat{F} = \frac{1}{Q}\frac{d}{dQ}$ na funkcję $\chi_0(Q)$ uzyskaliśmy funkcję $\chi_0(Q)$ pomnożoną przez „-1". Funkcja ta jest zatem funkcją własną operatora $\hat{F} = \frac{1}{Q}\frac{d}{dQ}$ (a odpowiadającą jej wartością własną jest „-1").

Ad. 4

Gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki dana jest przez kwadrat modułu funkcji falowej (postulat 1, wzór [W.3.1a]). Kwadrat (modułu) funkcji $\chi_0(Q)$ to funkcja:

$$|\chi_0(Q)|^2 = \pi^{-\frac{1}{2}}e^{-Q^2} \qquad [3.1.7]$$

Maksymalna wartość gęstości prawdopodobieństwa znalezienia cząstki odpowiada takiej wartości *Q*, dla której powyższa funkcja osiąga maksimum.

$$\frac{d}{dQ}\left(\pi^{-\frac{1}{2}}e^{-Q^2}\right) = -2\pi^{-\frac{1}{2}}Qe^{-Q^2} = 0 \qquad [3.1.8]$$

Warunek ten jest spełniony jedynie dla *Q*=0 i właśnie dla tej wartości *Q* gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki jest maksymalna.

Ad. 5a

Aby funkcja X^a była funkcją unormowaną musi być spełniony warunek [W.3.8a]. Mamy zatem:

$$N^2\int (X^a)^*(X^a)dQ = 1 \qquad [3.1.9]$$

Obliczmy wartość powyższej całki:

$$\int (X^a)^*(X^a)dQ = \int(\chi_0(Q)+\chi_1(Q)+\chi_2(Q))^*(\chi_0(Q)+\chi_1(Q)+\chi_2(Q))dQ =$$
$$= \int\chi_0(Q)^*\chi_0(Q)dQ + \int\chi_0(Q)^*\chi_1(Q)dQ + \int\chi_0(Q)^*\chi_2(Q)dQ + \int\chi_1(Q)^*\chi_0(Q)dQ + \int\chi_1(Q)^*\chi_1(Q)dQ +$$
$$+ \int\chi_1(Q)^*\chi_2(Q)dQ + \int\chi_2(Q)^*\chi_0(Q)dQ + \int\chi_2(Q)^*\chi_1(Q)dQ + \int\chi_2(Q)^*\chi_2(Q)dQ = 3$$

(Niezerowe i równe jedności wkłady do powyższej sumy całek dały (zgodnie z warunkami [W.3.15] i [W.3.16]) jedynie trzy człony).
W takim razie nasz warunek [3.1.9] ma postać:
$3N^2 = 1$
a wartość stałej normującej *N* wynosi $\frac{1}{\sqrt{3}}$.
Funkcja unormowana (X^A) ma postać:

$$X^A = NX^a = \frac{1}{\sqrt{3}}X^a = \frac{1}{\sqrt{3}}(\chi_0(Q)+\chi_1(Q)+\chi_2(Q)) \qquad [3.1.10]$$

Zwróćmy uwagę, że, po uwzględnieniu stałej normującej, suma kwadratów (modułu) współczynników stających przy funkcjach własnych daje wartość 1. Jest to konsekwencją ich fizycznego znaczenia (opisanego w komentarzu 9) a równocześnie pozwala od razu ocenić, czy dana kombinacja liniowa jest funkcją unormowaną czy nie.

Ad.5b

Wartość średnią (spodziewaną) Q obliczymy korzystając ze wzoru [W.3.3], który w naszym przypadku będzie miał postać:

$$\overline{Q} = \int (X^A)^* Q (X^A) dQ \qquad [3.1.11]$$

W takim razie:

$$\overline{Q} = \tfrac{1}{3} \int (\chi_0(Q) + \chi_1(Q) + \chi_2(Q))^* Q (\chi_0(Q) + \chi_1(Q) + \chi_2(Q)) dQ \qquad [3.1.12]$$

Podstawiając jawne postaci funkcji $\chi_0(Q)$, $\chi_1(Q)$ i $\chi_2(Q)$ mamy:

$$\overline{Q} = \tfrac{1}{3} \int (\pi^{-\frac{1}{4}} e^{-Q^2/2} + \sqrt{2}\pi^{-1/4} Q e^{-Q^2/2} + \tfrac{1}{\sqrt{2}} \pi^{-1/4} (2Q^2 - 1) e^{-Q^2/2}) Q (\pi^{-\frac{1}{4}} e^{-Q^2/2} + \sqrt{2}\pi^{-1/4} Q e^{-Q^2/2} + \tfrac{1}{\sqrt{2}} \pi^{-1/4} (2Q^2 - 1) e^{-Q^2/2}) dQ$$

[3.1.13]

Uwzględniając dalej tylko parzyste funkcje podcałkowe otrzymujemy:

$$\overline{Q} = \tfrac{2\sqrt{2}}{3} \pi^{-1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} Q^2 e^{-Q^2} dQ + 2\pi^{-1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} (2Q^2 - 1) Q^2 e^{-Q^2} dQ = \tfrac{\sqrt{2}+2}{3} \qquad [3.1.14]$$

Ad. 5c

Jeżeli układ znajduje się w stanie własnym hamiltonianu, to wartość energii w tym stanie jest ostro zadana- każdy kolejny pomiar energii da tę samą jej wartość równą wartości własnej hamiltonianu w tym stanie (porównaj: komentarz 10). W przypadku stanów własnych opisanych funkcjami $\chi_0(Q), \chi_1(Q), \chi_2(Q)$ będą to (odpowiednio) wartości E_1, E_2, E_3:

$$\hat{H}\chi_n = E_n \chi_n \qquad [3.1.15]$$

Wartość średnia mierzonej energii w danym stanie własnym będzie oczywiście równa wartości własnej hamiltonianu.

Układ opisany funkcją X^a nie znajduje się w stanie własnym hamiltonianu. Wartość średnią energii w tym stanie możemy zatem obliczyć korzystając ze wzoru [W.3.3], który w naszym przypadku ma postać:

$$\overline{E} = \int (X^A)^* \hat{H} (X^A) dQ \qquad [3.1.16]$$

Mamy zatem:

$$\overline{E} = \tfrac{1}{3} \int (\chi_0(Q) + \chi_1(Q) + \chi_2(Q))^* \hat{H} (\chi_0(Q) + \chi_1(Q) + \chi_2(Q)) dQ =$$

$$= \tfrac{1}{3} (\int \chi_0(Q) \hat{H} \chi_0(Q) dQ + \int \chi_0(Q) \hat{H} \chi_1(Q) dQ + \int \chi_0(Q) \hat{H} \chi_2(Q) dQ + \int \chi_1(Q) \hat{H} \chi_0(Q) dQ + \int \chi_1(Q) \hat{H} \chi_1(Q) dQ +$$

$$+ \int \chi_1(Q) \hat{H} \chi_2(Q) dQ + \int \chi_2(Q) \hat{H} \chi_0(Q) \chi_0(Q) dQ + \int \chi_2(Q) \hat{H} \chi_1(Q) dQ + \int \chi_2(Q) \hat{H} \chi_2(Q) dQ)$$

Wykorzystując równanie Schrödingera niezależne od czasu ([W.3.23], [3.1.15]) oraz warunek ortonormalności funkcji własnych ([W.3.15] i [W.3.16]) mamy:

$$\overline{E} = \tfrac{1}{3} (E_1 + E_2 + E_3) \qquad [3.1.17]$$

Wynik ten był łatwy do przewidzenia. Zgodnie z informacją zawartą w komentarzu 9 *pojedynczy pomiar* energii może dać jako wynik jedynie *jedną z wartości własnych E_i hamiltonianu.* Skoro funkcja falowa układu ma postać [3.1.10] to w długiej serii pomiarów poszczególne wartości własne E_i pojawiają się z *prawdopodobieństwem* równym $|\frac{1}{\sqrt{3}}|^2$.

Przykład 2

Operator składowej *zetowej* momentu pędu ma postać:

$$\hat{M}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \qquad [3.2.1]$$

Oblicz wartość komutatora $[\hat{M}_z, \varphi^2]$ a następnie sprawdź, czy jest on a) liniowy b) hermitowski.

Korzystając ze wzoru [W.3.21] nasz komutator zapiszemy w postaci następującej sumy:

$$[\hat{M}_z, \varphi^2] = \varphi[\hat{M}_z, \varphi] + [\hat{M}_z, \varphi]\varphi \qquad [3.2.2]$$

Wartość operatora $[\hat{M}_z, \varphi]$ będzie łatwiej obliczyć, jeżeli będziemy nim działać na pewną funkcję próbną ζ. Korzystając ponadto z definicji [W.3.13] mamy:

$$[\hat{M}_z, \varphi]\zeta = [-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}, \varphi]\zeta = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}\varphi - \varphi(-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi})\right)\zeta = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial \varphi}\varphi\zeta - \varphi\frac{\partial}{\partial \varphi}\zeta\right) = -i\hbar\left(\zeta + \varphi\frac{\partial}{\partial \varphi}\zeta - \varphi\frac{\partial}{\partial \varphi}\zeta\right) = -i\hbar\zeta$$

[3.2.3]

W takim razie:

$$[\hat{M}_z, \varphi] = -i\hbar \qquad [3.2.4]$$

Wstawiając powyższą wartość do sumy [3.2.2] otrzymujemy ostatecznie:

$$[\hat{M}_z, \varphi^2] = \varphi(-i\hbar) - i\hbar\varphi = -2i\hbar\varphi \qquad [3.2.5]$$

Operator jest *liniowy*, jeżeli jest spełniony warunek [W.3.11]. Dla operatora $[\hat{M}_z, \varphi^2]$ zapiszemy go w następujący sposób:

$$-2i\hbar\varphi(au_1 + bu_2) \stackrel{?}{=} a(-2i\hbar\varphi)u_1 + b(-2i\hbar\varphi)u_2 \qquad [3.2.6]$$

Równość prawej i lewej strony nie budzi wątpliwości; operator $[\hat{M}_z, \varphi^2]$ jest zatem operatorem liniowym.

Operator jest *hermitowski*, jeśli spełnia on warunek [W.3.12]. W naszym przypadku:

$$\int u_1 * (-2i\hbar\varphi)u_2 d\tau \stackrel{?}{=} \int u_2 (-2i\hbar\varphi u_1) * d\tau \qquad [3.2.7]$$

Ponieważ:

$$\int u_2 (-2i\hbar\varphi u_1) * d\tau = -\int u_1 * (-2i\hbar\varphi)u_2 d\tau \neq \int u_1 * (-2i\hbar\varphi)u_2 d\tau \qquad [3.2.8]$$

operator nie spełnia warunku [3.2.7] a więc nie jest hermitowski.

Zadania do samodzielnego rozwiązania

Zadanie 1

Dany jest zbiór unormowanych funkcji własnych jednowymiarowego oscylatora harmonicznego

$\chi_0(Q) = \pi^{-\frac{1}{4}} e^{-Q^2/2}$ $\chi_1(Q) = \sqrt{2}\pi^{-1/4} Q e^{-Q^2/2}$ $\chi_2(Q) = \frac{1}{\sqrt{2}}\pi^{-1/4}(2Q^2-1)e^{-Q^2/2}$ gdzie $Q \in R$

1. Wykaż bezpośrednim rachunkiem, że funkcje $\chi_1(Q)$ i $\chi_2(Q)$ są unormowane.
2. Wykaż bezpośrednim rachunkiem, że funkcje $\chi_0(Q)$ i $\chi_2(Q)$ są ortogonalne.
3. Sprawdź, czy funkcje $\chi_1(Q)$ i $\chi_2(Q)$ są funkcjami własnymi operatora $\hat{F} = \frac{1}{Q}\frac{d}{dQ}$
4. Dla stanów opisanych funkcjami $\chi_1(Q)$ i $\chi_2(Q)$ znajdź wartość Q, dla której gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki jest maksymalna.
6. Dane są dwie kombinacje liniowe funkcji własnych oscylatora harmonicznego

$$\mathrm{X}^b = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\chi_0(Q) + \tfrac{1}{\sqrt{3}}\chi_1(Q) + \tfrac{1}{\sqrt{6}}\chi_2(Q)$$
$$\mathrm{X}^c = \tfrac{1}{3}\chi_0(Q) + \tfrac{1}{\sqrt{3}}\chi_1(Q) + \tfrac{1}{\sqrt{2}}\chi_2(Q)$$

d) Która z funkcji (X^b czy X^c) jest unormowana? Unormuj funkcję nienormowaną.

e) Oblicz wartość średnią Q, Q^2 w stanach: X^b, X^c.

f) Zakładając, że stanom własnym $\chi_0(Q), \chi_1(Q), \chi_2(Q)$ odpowiadają wartości energii E_1, E_2, E_3 określ:

- Jakie wartości energii i z jakim prawdopodobieństwem otrzyma się w wyniku długiej serii pomiarów, jeżeli układ znajduje się w stanie opisanym funkcją:, X^b, X^c.
- Jakie są wartości średnie energii w stanach: X^b, X^c.

Zadanie 2

Dany jest zbiór unormowanych funkcji własnych

a) składowej *zetowej* momentu pędu (M_z)

$\Phi_0(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ $\Phi_1(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\varphi}$ $\Phi_2(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{2i\varphi}$ gdzie $\phi \in (0,2\pi)$

b) hamiltonianu rotatora sztywnego

$Y_1^0(\vartheta,\varphi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\cos\vartheta$ $Y_1^{-1}(\vartheta,\varphi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\sin\vartheta \cdot e^{-i\varphi}$ $Y_1^1(\vartheta,\varphi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\sin\vartheta \cdot e^{i\varphi}$

gdzie $\phi \in (0,2\pi)$, $\vartheta \in (0,\pi)$

Operator składowej *zetowej* momentu pędu ma postać:

$$\hat{M}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

a hamiltonian rotatora sztywnego zapisany we współrzędnych sferycznych ma postać:

$$\hat{H}(\vartheta,\varphi) = -\frac{\hbar^2}{2I}\left(\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)$$

1. Wykaż bezpośrednim rachunkiem, że funkcje:, $\Phi_0(\phi)$ oraz $Y_1^1(\vartheta,\varphi)$ są unormowane.
2. Wykaż bezpośrednim rachunkiem, że funkcje $\Phi_0(\phi)$ i $\Phi_1(\phi)$ są ortogonalne.

3. Sprawdź, czy funkcje $\Phi_1(\varphi)$ i $Y_1^1(\vartheta,\varphi)$ są funkcjami własnymi

a) hamiltonianu rotatora sztywnego
b) składowej zetowej momentu pędu.
Jeśli tak, określ wartości własne poszczególnych operatorów w obu stanach.

4. Korzystając z podanej wyżej postaci operatora $\hat{H}(\vartheta,\varphi)$ zapisz postać operatora kwadratu momentu pędu ($\hat{M}^2$) we współrzędnych sferycznych.

5. Operatory $\hat{M}_z$, $\hat{M}^2$ i $\hat{H}(\vartheta,\varphi)$ mają ten sam zbiór funkcji własnych. Korzystając (gdzie jest to możliwe) z tej informacji oblicz wartości komutatorów:

$[\hat{M}_z,\hat{H}]$	$[\hat{M}_z^2,\hat{H}]$	$[\hat{M}_z^2,\hat{H}^5]$	$[\hat{M}_z,\varphi]$
$[\hat{M}_z,\varphi^2+5]$	$[\hat{M}_z\varphi,\hat{H}]$	$[\hat{M}^2,\hat{H}]$	$[\hat{M}_z^2\hat{M}^2,\hat{H}]$

6. Sprawdź bezpośrednim rachunkiem czy podane niżej operatory są: a) liniowe, b) hermitowskie
$\hat{M}_z$; $[\hat{M}_z,\hat{H}]$; $[\hat{M}_z,\varphi]$