Wykład I.2

① Kłopoty z mechaniką klasyczną

② Postulaty mechaniki kwantowej

1. Stan układu – funkcja falowa $\psi(x)$, $|\psi(x)|^2$ – interpretacja probabilistyczna

2. Wielkości fizyczne – operatory hermitowskie (obserwable)

3. Jedyny wynik pomiaru – wartości własne
$\hat{\Omega}\phi(x) = \omega\phi(x)$ – równanie własne ,
$\{\omega_n\}$ – zbiór wartości własnych (widmo operatora),
$\{\phi_n(x)\}$ – funkcje własne.

4. Zupełność układu funkcji własnych
$\psi(x) = \sum_n a_n\phi_n(x)$,
$|a_n|^2$ - prawdopodobieństwo uzyskania wyniku ω_n.
Średnia z pomiarów na identycznych kopiach układu w stanie $\psi(x)$
$\bar{\Omega} = \sum_n |a_n|^2\omega_n = \int \psi(x)^*\hat{\Omega}\psi(x)dx \equiv < \Omega >_\psi$ – średnia kwantowa operatora w stanie $\psi(x)$.

5. Ewolucja w czasie – równanie Schrödingera
$i\hbar\partial_t\psi(x,t) = \hat{H}\psi(x,t)$,
$\hat{H}$ – operator energii, hamiltonian , $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$.
$\hat{A}^\dagger$ – op. sprzężony po hermitowsku do $\hat{A}$ tzn. taki, że
$(\hat{A}^\dagger f, g) = (f, \hat{A}g)$.
Liniowość $\Longrightarrow$ zasada superpozycji.
Hermitowskość $\hat{H} \Longrightarrow$ zachowanie normy stanu z czasem – unitarność ewolucji.

Wykład I.3

③ Ewolucja w czasie układu izolowanego

Układ izolowany, separacja zmiennych, rozwiązania stacjonarne, niezależne od czasu równanie Schrödingera. Rozwiązanie ogólne równania zależnego od czasu, warunki początkowe. Rozwiązanie operatorowe.

④ **Niezależne od czasu równanie Schrödingera**

Postać hamiltonianu w reprezentacji położen, reguły korespondencji, zasada korespondencji Bohra. Warunki brzegowe dla widma dyskretnego (stany związane - zlokalizowane), warunki regularności (zszycia), warunki brzegowe dla widma ciągłego (stany nienormowalne - niezlokalizowane). Równanie ciągłości, strumień prądu prawdopodobieństwa.

⑤ **Uzupełnienia matematyczne**

Wartości własne i funkcje własne operatorów hermitowskich, rzeczywistość, ortogonalność, zupełność, przykład. Degeneracja wartości własnych, podprzestrzeń odpowiadająca zdegenerowanej wartości własnej. Operatory przemienne (komutujące), kompletny układ komutujących obserwabli. Fizyczne znaczenie przemienności operatorów.

Wykład I.4

⑥ **Ruch cząstki swobodnej**

Rozwiązanie r. Schrödingera niezależnego od czasu - fala de Broglie'a.

Problem z normalizowalnością, superpozycja, pakiet falowy.

Warunek początkowy, pakiet gaussowski.

Transformacje Fouriera, transformacja odwrotna, całki gaussowskie. Zasada nieoznaczonosci.

Ewolucja pakietu w czasie, rozszerzanie się pakietu i jego interpretacja.

Pakiet z prędkością początkowa. Prędkość fazowa a prędkość grupowa.

⑦ **Dystrybucja δ Diraca**
Granica punktowa rozkładu gaussowskiego.
Własności funkcji $\delta(x - x_0)$.
$\delta(x - x_0)$ jako funkcjonał.
Inne modele funkcji δ - rozkłady Lorentza.

Wykład I.5

⑦ cd. **Dystrybucja δ Diraca**
Rodzina krzywych Lorentza jako model funkcji $\delta(x)$, krzywa Lorentza jako funkcjonał, residua.
δ Diraca a transformacje Fouriera, normalizacja fal płaskich, zwiazek z reprezentacją Lorentza, przepis-ϵ.
⑧ **Notacja Diraca**
Iloczyn skalarny jako amplituda znalezienia stanu w stanie. Funkcja falowa w reprezentacji położeń, $\Psi(x)$, jako amplituda znalezienia stanu własnego operatora położenia w stanie ψ. Funkcja falowa $\psi(x)$ jest iloczynem skalarnym $< x|\psi >$. Funkcje własne położenia w reprezentacji położeń. Normalizacja stanów własnych położenia.
Wektory stanu w abstrakcyjnej przestrzeni Hilberta, kety, bra. Alternatywne oznaczenia ketów własnych. Rozkład ketu na stany własne danej obserwabli. Mnożenie ketów i bra - iloczyn skalarny. Sprzeżenie hermitowskie ketów i bra.
Warunek zupełności, rozkład operatora jednostkowego. Operatory rzutowe i ich własności, widmo i funkcje własne operatora rzutowego, iloczyn diadyczny $|f >< g|$. Warunek zupełności a reprezentacja iloczynu skalarnego w określonej bazie stanów własnych. Funkcja falowa w określonej reprezen-

tacji jako współrzedne wektora stanu w bazie związanej z tą reprezentacją. Bazy dyskretne, funkcja falowa w reprezentacji dyskretnej.
Operatory w abstrakcyjnej przestrzeni Hilberta, działanie operatora na kety, działanie operatora na wektory bra. Łącznośc mnożenia bra-operatory-kety. Sprzeżenie hermitowskie iloczynów skalarnych, elementy macierzowe operatora między stanami bra i ket. Sprzężenie hermitowskie elementów macierzowych operatora, analogia ze skończonymi macierzami.

Wykład I.6

⑨ **Zasada nieoznaczoności**
Średnia statystyczna z wyników pomiaru a średnia kwantowa.
Dyspersja wyników pomiaru, reprezentacja dyspersji przez średnie kwantowe, dyspersja jako norma pewnego stanu.
Iloczyn dyspersji dwóch operatorów, zasada nieoznaczoności.
Zasada nieoznaczoności a pakiety gaussowskie.
Mikroskop Heisenberga.
⑩ **Dystrybucje cd.**
Dystrybucja $1/(x+i\epsilon)$, całki konturowe, wartość główna całki, dystrybucja $P(1/x)$.
Modele dystrybucji $\delta(x), \Theta(x), \delta'(x)$ i $P(1/x)$.
⑪ **Zależność średnich kwantowych od czasu**
Stany zależne od czasu w notacji Diraca, r.Schrödingera w notacji Diraca.
Zmiana z czasem średnich kwantowych a komutator z hamiltonianem.
Przykład: ewolucja czasowa średniego pędu i położenia, równania Ehrenfesta.

Kiedy ewolucja średnich kwantowych jest identyczna z ruchem klasycznym. Fluktuacje kwantowe, granica klasyczna mechaniki kwantowej.
Algebra komutatorów. Komutator z operatorem położenia jako pochodna operatorowa po pędzie i na odwrót.

Wykład I.7

11 cd.**Dalsze podobieństwa z mechaniką klasyczną**
Komutatory położenia i pędu z hamiltonianem a pochodne po pędzie i współrzędnej. Analogie i różnice między sprzężoną kanonicznie parą $(\hat{x}, \hat{p})$ a parą (t, E) .
Równania Ehrenfesta a klasyczne równania Hamiltona.
Komutatory a nawiasy Poissona.
Przykład operatora przemiennego z hamiltonianem: odbicie przestrzenne.
Definicja operatora parzystości, jego własności. Wartości własne, parzystość jako liczba kwantowa. Hamiltonian niezmienniczy względem odbić przestrzennych, jak $\hat{P}$ działa na $\hat{H}$. Zachowanie parzystości.

12 **Całki ruchu**
Trzy konsekwencje przemienności z hamiltonianem:
1) zależność średnich kwantowych od czasu (powt.),
2) 'zachowanie' wartości własnych - ewolucja kwantowa jest ograniczona do podprzestrzeni Hilberta, oraz
3) elementy macierzowe $\hat{H}$ - rozpad hamiltonianu na bloki numerowane wartościami własnymi całek ruchu.
Przyklad: parzystość. Konstrukcja bazy funkcji o określonej parzystości.

13 **Oscylator harmoniczny**

Równanie Schrödingera, zmienne bezwymiarowe, energia charakterystyczna dla tego problemu (skala energii).
Postać asymptotyczna bezwymiarowego (znormalizowanego) równania Schrödingera. Zachowanie asymptotyczne rozwiązań. Zmiana zmiennej zależnej, równanie Hermite'a. Warunek normalizowalności, rozwiązania wielomianowe, warunek istnienia rozwiązań wielomianowych, energie własne. Wielomiany Hermite'a i ich podstawowe właściwości, funkcje Hermite'a. Metoda szeregów, relacje rekursyjne, wyprowadzenie warunku kwantowania.

Wykład I.8

13 cd.**Oscylator harmoniczny - cd.**
Metoda szeregów dla pierwotnego równania Schrödingera.
Inna postać warunków brzegowych: warunek normalizowalności dla szeregów nieskończonych. Związek z wielomianami Hermite'a.
Kwantowanie, metoda strzałów.
Przykład: oscylator anharmoniczny. Potencjały anharmoniczne wyższych rzędów, granica studni potencjału.
14 **Oscylator harmoniczny - metoda operatorowa**
Operatory kreacji i anihilacji, wyrażenie hamiltonianu przez $a^\dagger$ i a. Operator liczby cząstek, algebra (reguły komutacji) operatorów a, $a^\dagger$ i N. Konsekwencje tej algebry, widmo operatora N. Stan podstawowy, konstrukcja stanów $|n>$ ze stanu próżni. Konstrukcja funkcji własnych w reprezentacji położeń.

Wykład I.9

15 **Operatory w notacji Diraca**

Operatory jako nieskończone macierze.
Reprezentacje operatorów w bazach ciągłych, przekształcenia i jądra całkowe.
Reprezentacja spektralna operatorów.
Zmiana baz, transformacja reprezentacji wektora stanu (funkcji falowej) przy zmianie bazy, transformacja odwrotna, unitarność transformacji zmiany bazy.
Przykłady: zmiana bazy $\{|p>\}$ na bazę $\{|x>\}$, zmiana $\{|x>\}$ na bazę oscylatora harmonicznego $\{|n>\}$.
Przekształcenie reprezentacji operatora przy zmianie bazy.
Niezmienniczość wartości własnych. Ślady operatorów, związek miedzy śladami a wartościami własnymi. Niezmienniczość śladów operatorów przy zmianie baz.

16 Obrazy ewolucji czasowej

Powtórzenie: zmiana bazy - jak transformują się stany, a jak operatory (tzn. ich reprezentacje danej bazie).
Niezmienniczość średnich kwantowych przy zmianach baz.
Twierdzenie o operatorach unitarnych.
Ewolucja w czasie jako zmiana bazy. Obrazy ewolucji w mechanice kwantowej. Obraz Schrödingera, równanie ruchu a) dla stanów , b) dla operatorów. Równanie Schrödingera dla operatora ewolucji czasowej.
Obraz Heisenberga, równanie ruchu a) dla stanów, b) dla operatorów.
Zasada nieoznaczoności między czasem a energią. Przykład: stan stacjonarny.
Całki ruchu.
Obraz oddziaływania (Tomonagi), "mały"dodatek do hamiltonianu. Równania ruchu a) dla stanów, b) dla operatorów. Operatorowe rozwiązanie równania Schrödingera jeśli hamiltonian zależy od czasu - eksponenta operatorowa

uporządkowana w czasie.

Wykład I.10

(17) Zagadnienia trójwymiarowe
Operatory składowych kartezjańskich pędu i położenia oraz ich relacje komutacji.
Hamiltonian, niezależne od czasu równanie Schrödingera jako cząstkowe równanie eliptyczne drugiego rzędu. Warunki brzegowe.
Metody rozwiązywania prostych przypadków: separacja zmiennych, wykorzystanie symetrii problemu. Przykłady: cząstka swobodna, trojwymiarowy oscylator harmoniczny. Rozwiązanie operatorowe, trzy operatory kreacji i anihilacji, iloczyn kartezjański ketów. Widmo oscylatora trójwymiarowego. Degeneracja, kompletny układ obserwabli. Degeneracja a symetria. Symetria względem obrotów.
(18) Symetria obrotowa w trzech wymiarach
Własności operatora krętu: komutacje różnych składowych momentu pędu $[L_i, L_j]$, komutator składowych krętu i kwadratu krętu $[L_i, L^2]$. Stany własne kwadratu kętu i jego rzutu na *jedną* oś (oś kwantowania). Interpretacja istnienia stanów $|\lambda_{L^2}, \lambda_{L_z}>$ jako precesji kwantowej.

Wykład I.11

(18) cd.**Widmo L^2 i L_z - podejście operatorowe**
Operatory podnoszenia i opuszczania, ich reguły komutacji, związek z L^2, analogia z operatorami kreacji i anihilacji.
Zapis wartości własnej L^2 jako wybór numerującego ją parametru λ.

Wielokrotne stosowanie operatorów $L_\pm$, normalizacja tak otrzymanych stanów, warunki konsystencji.
Widmo l i m. Kwadrat kwantowy, precesja kwantowa.
Wartości połówkowe a jednoznaczność funkcji falowej. Kręt całkowity, kręt orbitalny i kręt wewnętrzny (spin), fermiony i bozony.
Orbitalny moment pędu w reprezentacji położeń. Operatory L_k i L^2 w zmiennych kątowych. Konstrukcja funkcji własnych w reprezentacji położeń. Warunek anihilacji stanu maksymalnego przez L_+ i postać $Y_l^l(\theta, \phi)$. Rekursywna konstrukcja funkcji falowych o niższych m.

Wykład I.12

19 Widmo L^2 i L_z - podejście analityczne

Różniczkowe równanie własne dla L^2. Separacja zmiennych θ i ϕ. Zmiana zmiennej θ, stowarzyszone równanie Legendre'a, jego punkty osobliwe. Zachowanie asymptotyczne rozwiązań wokół punktów osobliwych, równanie charakterystyczne, eksponenty krytyczne. Zmiana zmiennej zależnej, równanie dla pochodnej, równanie Legendgre'a. Rozwiązanie metodą szeregów, warunek regularności w $t = \pm 1$ dla rozwinięcia wokół $t = 0$. Warunek kwantowania. Wielomiany Legendre'a, stowarzyszone wielomiany Legendre'a, funkcje kuliste. Zależność funkcji kulistych od θ, interpretacja, związek z precesją kwantową. Związek stowarzyszonego równania Legendre'a z równaniem hipergeometrycznym. Szereg Gaussa i warunek na jego obcięcie.

20 Hamiltoniany sferycznie symetryczne

Separacja zmiennych kątowych. Pęd radialny, związek en-

ergii kinetycznej z kwadratem pędu radialnego i operatorem całkowitego krętu, bariera centryfugalna. Dziwne własności pędu radialnego i pędu azymutalnego - operatory, które nie są obserwablami.
Radialne równanie Schrödingera. Twierdzenie o niezależności energii własnych od m.

(21) Trójwymiarowy oscylator harmoniczny
Równanie radialne, zmienne bezwymiarowe, punkty osobliwe, asymptotyka rozwiązań wokół tych punktów.

Wykład I.13

(21) Trójwymiarowy oscylator harmoniczny - cd.
Zdegenerowane (konfluentne) równanie hipergeometryczne, metoda szeregów, funkcja hipergeometryczne konfluentna, kwantowanie energii. Widmo trójwymiarowego oscylatora harmonicznego, porównanie energii własnych wyrażonych przez sferyczne i kartezjańskie liczby kwantowe. Degeneracja związane z symetrią a degeneracje przypadkowe.

(22) Ruch w polu kulombowskim - atom wodoru
Potencjał, separacja zmiennych, równanie radialne, charakterystyczne stałe wymiarowe (skala energii i skala długości), zmienne bezwymiarowe, równanie radialne w zmiennych bezwymiarowych, zachowania asymptotyczne w zerze i w nieskończoności, zmiana funkcji , równanie hipergeometryczne, kwantowanie energii. Widmo atomu wodoru, liczby kwantowe, degeneracja, liczba stanów o danej energii. Funkcje własne, wielomiany Laguerre'a.

Wykład I.14

(23) Układ okresowy pierwiastków

Różnice między statycznym polem kulombowskim a rzeczywistym atomem. A) ruch centrum masy, B) spin elektronu, C) zasada wykluczenia Pauliego i D) problem wielu ciał.
Powłoki (orbitale) elektronowe a kolejne pierwiastki układu okresowego. Wodór, hel, lit (dlaczego hel jest nieaktywny a lit aktywny chemicznie). Naura gazów szlachetnych.
Od berylu do neonu. Czemu fluor jest aktywny?
Od sodu do argonu, anomalia tlenu (czemu energia wiazania tlenu jest mniejsza od sąsiadów?
Od potasu do cynku (czemu najpierw zapełnia się powłoka 3d a nie 4s ?)
Kierunkowość wiązań chemicznych (H_2O, NH_3).

(24) Atom wodoru - cd.

Granica klasyczna, zachowanie $\delta r/ < r >$ dla $n \to \infty$.
Historia widma wodoru: Balmer, Rydberg, Ritz, model atomu Bohra, stara teoria kwantów, emisja fotonów. Warunek Bohra stabilności orbit, interpretacja kwantowania krętu w języku fali de Broglie'a.
Przybliżenie WKB