Mechanika Kwantowa - kurs duży
egzamin pisemny
16.6.2021 godz. 14-17

1. Znaleźć energie cząstki o masie m poruszającej się w nieskończonej studni potencjału:
$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{dla} \quad x < 0 \\ 0 & \text{dla} \quad 0 \le x \le 1 \\ \infty & \text{dla} \quad 1 < x \end{cases} .$$
Oszacować energię stanu podstawowego korzystając z zasady wariacyjnej, przyjmując jako funkcję próbną:
$$\psi(x) = Ax(1-x).$$
Jak dokładne jest to oszacowanie?

Rozwiązanie

Rozwiązanie dokładne $\psi = A \sin kx$, gdzie $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ daje w $x = 1$
$$\sin k = 0 \ \rightarrow \ k = n\pi \ \rightarrow \ E_n = \frac{n^2\pi^2}{2}\frac{\hbar^2}{m}.$$
Energia stanu podstawowego:
$$E_1 = \frac{\pi^2}{2}\frac{\hbar^2}{m} = 4.93\frac{\hbar^2}{m}.$$
Unormowanie funkcji próbnej
$$A^2 \int\limits_0^1 dx\, x^2(1-x)^2 = \frac{A^2}{30} \ \rightarrow \ A^2 = 30.$$
Druga pochodna funkcji próbnej:
$$\frac{d^2}{dx^2}\psi = -2A.$$
Średnia z hamiltonianu
$$\int\limits_0^1 dx\, \psi \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi\right) = A^2\frac{\hbar^2}{m}\int\limits_0^1 dx\, x(1-x) = \frac{30}{6}\frac{\hbar^2}{m} = 5\frac{\hbar^2}{m}.$$
Dokładność 1.4 %.

---

2. Dwuwymiarowy oscylator harmoniczny

$$H = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2) + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2)$$

poddany jest zaburzeniu

$$H' = \omega(p_x y - x p_y).$$

W pierwszym rzędzie rachunku zaburzeń obliczyć poprawkę do energii stanu podstawowego i pierwszego stanu wzbudzonego. Przedyskutować degenerację otrzymanego spektrum.

WSKAZÓWKA

$$\begin{aligned} \hat{a} &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}\hat{p}, \\ \hat{a}^\dagger &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}\hat{p}. \end{aligned}$$

Rozwiązanie

$$E_{n_x,n_y} = \hbar\omega(n_x + n_y + 1)$$

Stan podstawowy ma energię $E_0^{(0)} = \hbar\omega$ i jest niezdegenerowany.

Pierwszy stan wzbudzony ma energię $E_1^{(0)} = 2\hbar\omega$ i jest dwukrotnie zdegenerowany:

$$|\psi_1\rangle = |1,0\rangle\ ,\ |\psi_2\rangle = |0,1\rangle$$

w notacji $|n_x, n_y\rangle$.

Wyrażamy zaburzenie przez operatory kreacji i anihilacji

$$\hat{r}_i = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\hat{a}_i^\dagger + \hat{a}_i\right),\ \hat{p}_k = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\left(\hat{a}_k^\dagger - \hat{a}_k\right).$$

Mamy

$$\begin{aligned} H' &= \omega\frac{i\hbar}{2}\left(\left(\hat{a}_x^\dagger - \hat{a}_x\right)\left(\hat{a}_y^\dagger + \hat{a}_y\right) - \left(\hat{a}_x^\dagger + \hat{a}_x\right)\left(\hat{a}_y^\dagger - \hat{a}_y\right)\right) \\ &= \omega\frac{i\hbar}{2}\left(\underbrace{\hat{a}_x^\dagger\hat{a}_y^\dagger} + \underline{\hat{a}_x^\dagger\hat{a}_y} - \overline{\hat{a}_x\hat{a}_y^\dagger} - \overbrace{\hat{a}_x\hat{a}_y} - \underbrace{\hat{a}_x^\dagger\hat{a}_y^\dagger} + \underline{\hat{a}_x^\dagger\hat{a}_y} - \overline{\hat{a}_x\hat{a}_y^\dagger} + \overbrace{\hat{a}_x\hat{a}_y}\right) \end{aligned}$$

i otrzymujemy:

$$H' = -i\hbar\omega\left(a_x a_y^\dagger - a_x^\dagger a_y\right)$$

pamiętając, że opearotory a_x i $a_y^\dagger$ komutują. Obliczamy macierz H' w bazie zdegenerowanych funkcji falowych oscylatora niezaburzonego (stan podstawowy jest anihilowany przez H', zatem $E_0^{(1)} = 0$)

$$H' = -i\hbar\omega \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Zdiagonalizować

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{bmatrix}.$$

Stąd poprawka do pierwszego stanu wzbudzonego wynosi

$$E_1^{(1)} = \mp\hbar\omega$$

i całkowita energia

$$E_1^{(-)} = \hbar\omega, \ E_1^{(+)} = 3\hbar\omega.$$

Obserwacja: stan podstawowy staje się dwukrotnie zdegenerowany. Okazuje się, że jeżeli policzyć rozszczepienia wszystkich poziomów, to degeneracja będzie nieskończona. To jest metoda na poziomy Landaua.

---

3. Cząstka o masie m porusza się w potencjale $V(x)$ (w jednym wymiarze). Spełnione jest równanie Schrödingera

$$H\left|n\right\rangle = E_n \left|n\right\rangle.$$

Udowodnić, że

$$\sum_n (E_n - E_0) \left|\left\langle n\right| x \left|0\right\rangle\right|^2 = \text{const.}$$

WSKAZÓWKA

Zbadać średnią komutatora

$$\left\langle k\right| \left[\left[H, x\right], x\right] \left|k\right\rangle$$

i skorzystać z faktu, że stany $\left|n\right\rangle$ tworzą układ zupełny.

Rozwiązanie

$$\begin{aligned} [H, x] &= \frac{1}{2m}[p^2, x] = \frac{1}{2m}\left(p\left[p, x\right] + \left[p, x\right]p\right) = -i\frac{\hbar}{m}p, \\ \left[\left[H, x\right], x\right] &= -i\frac{\hbar}{m}\left[p, x\right] = -\frac{\hbar^2}{m}. \end{aligned}$$

Z drugiej strony

$$
\begin{aligned}
\langle k| \left[[H,x],x\right] |k\rangle &= \langle k| [Hx,x] - [xH,x] |k\rangle \\
&= \langle k| Hx^2 - 2xHx + x^2H |k\rangle \\
&= 2E_k \langle k| x^2 |k\rangle - 2 \langle k| xHx |k\rangle \\
&= 2E_k \sum_n \langle k| x |n\rangle \langle n| x |k\rangle - 2\sum_{n,l} \langle k| x |n\rangle \langle n| H |l\rangle \langle l| x |k\rangle \\
&= 2E_k \sum_n |\langle n| x |k\rangle|^2 - 2\sum_n E_n |\langle n| x |k\rangle|^2 \\
&= 2\sum_n (E_k - E_n) |\langle n| x |k\rangle|^2 .
\end{aligned}
$$

Stąd mamy

$$
2\sum_n (E_n - E_k) |\langle n| x |k\rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{m} = \text{const.}
$$

Kładziemy $k = 0$ i mamy wzór z zadania.

---

4. Wzór Rodriguesa dla wielomianów Legendre'a. Wykazać, że n-ta pochodna funkcji

$$
f_n(x) = (x^2 - 1)^n
$$

spełnia równanie Legendre'a

$$
\frac{d}{dx}\left[\left(1 - x^2\right)\frac{dP(x)}{dx}\right] + n(n+1)\,P(x) = 0.
$$

WSKAZÓWKA

Skorzystać ze wzoru Leibniza:

$$
\frac{d^n}{dx^n}\left(g(x)h(x)\right) = \sum_{k=0}^{n} \frac{n!}{k!(n-k)!}\left[\frac{d^k}{dx^k}g(x)\right]\left[\frac{d^{n-k}}{dx^{n-k}}h(x)\right].
$$

Rozwiązanie

Przepiszmy równanie Legendre'a

$$
\left(1 - x^2\right)P'' - 2xP' + n(n+1)P = 0.
$$

Zróżniczkujmy f_n po x:

$$
f_n'(x) = 2nx(x^2 - 1)^{n-1}.
$$

Mnożąc stronami przez (x^2-1) dostajemy równanie różniczkowe na f_n:

$$(1-x^2)f_n'(x)+2nxf_n(x)=0.$$

Zróżniczkujemy jeszcze raz

$$(1-x^2)f_n''(x)+2(n-1)xf_n'(x)+2nf_n(x)=0. \tag{1}$$

Zastosujmy wzór Leibniza. W przypadku kiedy $g(x)=x^2$ wkład dają tylko pierwsze trzy człony:

$$\frac{d^n}{dx^n}\left(x^2f''(x)\right)=x^2\frac{d^{n+2}}{dx^{n+2}}f(x)+2nx\frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}}f(x)+n(n-1)\frac{d^n}{dx^n}f(x)$$

a w przypadku $g(x)=x$ pierwsze dwa:

$$\frac{d^n}{dx^n}\left(xf'(x)\right)=x\frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}}f(x)+n\frac{d^n}{dx^n}f(x)$$

Stosując te wzory do (1) dostajemy

$$\begin{aligned}0 &= (1-x^2)f_n^{n+2}-2nxf_n^{n+1}-n(n-1)f_n^n+2(n-1)xf_n^{n+1}+2n(n-1)f_n^n+2nf_n^n\\ &= (1-x^2)f_n^{n+2}-2xf_n^{n+1}+n(n+1)f_n^n.\end{aligned}$$

Otrzymane równanie jest równaniem Legendre'a dla

$$P_n=A_n\frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n.$$

Stałą normalizacyjną (nie należy to do zadania) najlepiej obliczyć z warunku $P_n(1)=1$. Mając na uwadze, że

$$\frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n=2^nn!x^n+\mathcal{O}(x^2-1)$$

dostajemy

$$A_n=\frac{1}{2^nn!}.$$