

ZESTAW 1

WSTĘP DO FIZYKI KWANTOWEJ

Kontakt: Radosław Strzałka, pok. 315/D10, mail: strzalka@fis.agh.edu.pl

Zestawy dostępne pod adresem: http://galaxy.agh.edu.pl/~strzalka/#dydaktyka#fk_ft

Tematyka: problem własny, operatory, reguły komutacji, funkcje operatorowe.

1.1. Problem własny: przypomnienie z algebry

- (a) Co to jest macierz hermitowska? Sprawdź czy poniższe macierze są hermitowskie:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & i \\ -1 & i \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix}$$

- (b) Proszę wykazać, że wartości własne macierzy hermitowskich są rzeczywiste, a wektory własne (przynależące do różnych wartości własnych) są ortogonalne.
- (c) Operator Hamiltona (hamiltonian) definiuje całkowitą energię cząstki lub układu i wyraża się przez sumę operatorów energii kinetycznej i potencjalnej: $\hat{H} = \hat{T} + \hat{U}$. Uproszczony hamiltonian jonu H_2^+ można zapisać w postaci macierzy ($E, a \in \mathbb{R}$):

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} E & -a \\ -a & E \end{bmatrix}.$$

Proszę znaleźć wartości własne ϵ_i oraz wektory własne φ_i hamiltonianu $\hat{H}$. Inaczej: proszę rozwiązać problem własny macierzy $\hat{H}$. Następnie rozwiń wektor $\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ w bazie wektorów własnych $\hat{H}$.

- (d) Proszę znaleźć wartości i unormowane wektory własne macierzy:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i \\ 0 & -i & 0 \end{pmatrix}$$

1.2. Operatory

Jeden z postulatów mechaniki kwantowej jest taki: „Każdej mierzalnej wielkości fizycznej (obserwabli) przyporządkowany jest operator hermitowski”. Charakter każdego operatora ujawnia się w jego działaniu na wektory (funkcje). Tak jak w algebrze macierzy, tak w algebrze operatorów definiuje się problem własny: $\hat{A}u = \lambda u$, gdzie u i λ są funkcją własną (wektorem własnym) oraz wartością własną operatora $\hat{A}$. Ogólnie, operator $\hat{A}$ zdefiniowany w jednym wymiarze może być funkcją zmiennej x i pochodnej cząstkowej $\frac{\partial}{\partial x}$, co zapiszemy jako $\hat{A}(x, \frac{\partial}{\partial x})$ - takie operatory będą dla nas najciekawsze z punktu widzenia zastosowań w mechanice kwantowej.

- (a) [Matthews 2.3.] Wykazać, że $u(x) = e^{-x^2/2}$ jest funkcją własną operatora

$$\hat{A}\left(x, \frac{\partial}{\partial x}\right) = \frac{\partial^2}{\partial x^2} - x^2$$

Jakie są wartości własne tego operatora?

- (b) [Matthews 2.4.] Sprawdzić równanie operatorowe

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} + x\right)\left(\frac{\partial}{\partial x} - x\right) = \frac{\partial^2}{\partial x^2} - x^2 - 1$$

Uwaga! Sens operatora wyraża się przez jego działanie na funkcje. Szczególnie w przypadku operatorów różniczkowych należy więc pamiętać, że „za operatorem stoi jakaś funkcja”, na którą ma on działać.

- (c) Rozwiązać problem własny operatora $\hat{A} = -\frac{d^2}{dx^2}$, tzn. znaleźć funkcje własne $f(x)$, które dla danej wartości własnej α spełniają równanie własne: $\hat{A}f(x) = \alpha f(x)$.
- (d) Znaleźć operator różniczkowy $\hat{T}_a$ przeprowadzający funkcję $\psi(x)$ w funkcję $\psi(x+a)$, czyli

$$\hat{T}_a\psi(x) = \psi(x+a)$$

Wskazówka. Proszę wykorzystać rozwinięcie $\psi(x+a)$ w szereg względem $x+a$.

1.3. Reguły komutacyjne

Komutator dwóch operatorów $\hat{A}$ i $\hat{B}$ ma postać: $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$. Operatory, dla których komutator jest równy 0, nazywamy przemiennymi. *Uwaga! Komutator dwóch operatorów też jest operatorem, a zatem jego sens wyraża się przez działanie na funkcje. Obliczając komutator należy o tym pamiętać, szczególnie w przypadku operatorów różniczkowych.*

- (a) Proszę obliczyć komutatory: $[x, \frac{d}{dx}]$, $[x, \frac{d^2}{dx^2}]$. Czy operatory te są przemienne?
- (b) Jakie warunki muszą spełniać operatory $\hat{A}$ oraz $\hat{B}$, aby były przemienne z operatorem: $\hat{C} = \alpha\hat{A} + \beta\hat{B}$, gdzie $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$?
- (c) Pokaż, że prawdziwa jest następująca tożsamość operatorowa: $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$.
Pokaż postać podobnej tożsamości dla $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}]$.
- (d) Niech operatory hermitowskie $\hat{A}$, $\hat{B}$, $\hat{C}$ spełniają następujące związki komutacyjne: $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$, $[\hat{B}, \hat{C}] = i\hat{A}$, $[\hat{C}, \hat{A}] = i\hat{B}$. Definiujemy operator: $\hat{T} = \hat{B} + i\hat{C}$. Obliczyć następujące komutatory: $[\hat{T}, \hat{T}^\dagger]$, $[\hat{A}, \hat{T}]$, $[\hat{T}^\dagger, \hat{A}]$, gdzie $(\)^\dagger$ oznacza sprzężenie hermitowskie.

W zadaniu 1.2.d spotkał się z operatorem postaci $e^{a\frac{\partial}{\partial x}}$. Może on być potraktowany jako funkcja eksponencjalna, w której wykładniku jest operator pochodnej. Takie funkcje, których argumentem jest operator nazywamy funkcjami operatorowymi. Ich najważniejszą własnością jest to, że można je rozwijać w szereg wg schematu:

$$\hat{F} = f(\hat{A}) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n \hat{A}^n$$

gdzie f_n to współczynniki rozwinięcia. Na tej podstawie proszę rozwiązać poniższe zadania.

- (e) Niech $\hat{A}$ i $\hat{B}$ będą dowolnymi operatorami. Udowodnić, że zachodzi następująca relacja operatorowa¹:

$$e^{\lambda\hat{A}}\hat{B}e^{-\lambda\hat{A}} = \hat{B} + \lambda[\hat{A}, \hat{B}] + \frac{\lambda^2}{2!}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \frac{\lambda^3}{3!}[\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]] + \dots$$

gdzie $\lambda \in \mathbb{C}$. Wskazówka. Zwróćmy uwagę, że postać ta przypomina rozwinięcie Taylora.

- (f) Niech $\hat{A}$ będzie operatorem hermitowskim, tzn. $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$. Zbadać unitarność operatora $\hat{B} = e^{i\alpha\hat{A}}$, gdzie $\alpha \in \mathbb{C}$.
Wskazówka. Operator jest unitarny jeśli: $\hat{B}^\dagger = \hat{B}^{-1}$, czyli $\hat{B}^\dagger\hat{B} = \hat{1}$.

¹Relacja ta nosi nazwę wzoru Bakera-Campbella-Hausdorffa, zobacz [link-wiki](#)