ZESTAW 1

Wstęp do fizyki kwantowej i statystycznej

Kontakt: Radosław Strzałka, pok. 315/D10, mail: `strzalka@fis.agh.edu.pl`
Zestawy dostępne pod adresem: `http://galaxy.agh.edu.pl/~strzalka/#dydaktyka#fkis_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:

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

(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 $\hat{H}$.

(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 $\hat{A}\left(x, \frac{\partial}{\partial x}\right)$ - takie operatory będą dla nas najciekawsze z punktu widzenia zastosowań w mechanice kwantowej.

(a) [Matthews 2.3.] Wykazać, że $u(x) = \mathrm{e}^{-x^2/2}$ 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 $\hat{A} = -i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$, 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: $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$. 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: $\left[x, \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right]$, $\left[x, \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\right]$. 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: $\left[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}\right] = \hat{A}\left[\hat{B}, \hat{C}\right] + \left[\hat{A}, \hat{C}\right]\hat{B}$.

Pokaż postać podobnej tożsamości dla $\left[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}\right]$.

(d) Niech operatory hermitowskie $\hat{A}$, $\hat{B}$, $\hat{C}$ spełniają następujące związki komutacyjne: $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = i\hat{C}$, $\left[\hat{B}, \hat{C}\right] = i\hat{A}$, $\left[\hat{C}, \hat{A}\right] = i\hat{B}$. Definiujemy operator: $\hat{T} = \hat{B} + i\hat{C}$. Obliczyć następujące komutatory: $\left[\hat{T}, \hat{T}^\dagger\right]$, $\left[\hat{A}, \hat{T}\right]$, $\left[\hat{T}^\dagger, \hat{A}\right]$, gdzie $()^\dagger$ oznacza sprzężenie hermitowskie.

W zadaniu 1.2.d spotkaliśmy się z operatorem postaci $\mathrm{e}^{a\frac{\partial}{\partial x}}$. 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 operatorowa[1]:

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

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* $\hat{B}^\dagger\hat{B} = \mathbb{1}$.

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