

ZESTAW 6

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#fkis_ft

Tematyka: Operatory, reguły komutacji, funkcje falowe, wartość oczekiwana, równanie Kleina-Gordona.

Przestrzeń Hilberta

W mechanice kwantowej układ fizyczny opisujemy w przestrzeni Hilberta. Jest to zespolona, liniowa przestrzeń wektorowa z dobrze określonym iloczynem skalarnym z zupełną (przeliczalną i ortonormalną) bazą. Promieniami tej przestrzeni są zespolone funkcje wektorowe argumentu rzeczywistego, należące do zbioru funkcji całkowalnych z kwadratem $\mathcal{L}^2$.

6.1. Operatory

- (a) Proszę znaleźć funkcje i wartości własne operatorów: $\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}\right)$ oraz $\left(x + \frac{d}{dx}\right)$, gdzie m jest stałą.
- (b) Proszę sprawdzić, czy operator $\frac{d}{dx}$ jest hermitowski. Na tej podstawie ustalić, ile wynosi $\left(\frac{d}{dx}\right)^\dagger$.
Wskazówki: (1) Warunek hermitowskości operatora $\hat{A}$ jest następujący: $(\hat{A}f, g) = (f, \hat{A}g)$.
(2) Wykorzystać definicję iloczynu skalarnego w przestrzeni funkcji $\mathcal{L}^2$, czyli $(f, g) = \int_{\mathbb{R}} f^* g$.
- (c) Znaleźć funkcje własne operatora pędu w jednym wymiarze i (*) unormować je. *Uwaga. Przy normowaniu funkcji dla fali płaskiej korzystamy z funkcji delta Diraca $\delta(x)$ - patrz **Uzupełnienie** na końcu Zestawu.*

6.2. Komutatory

Proszę obliczyć komutatory $(\hat{p}_k - \text{składowa } k \text{ operatora pędu}, \hat{H}_0 - \text{hamiltonian cząstki swobodnej})$:

- (a) $[x_i, x_j], [\hat{p}_i, \hat{p}_j], [x_i, \hat{p}_j], [x_i^2, \hat{p}_j]$
- (b) $[x_i, \hat{H}_0], [\hat{p}_i, \hat{H}_0]$
- (c) [Brojan 1.1. zad. 50] $[\hat{H}, \hat{p}_x^2]$ jeśli $\hat{H}$ jest hamiltonianem cząstki w polu potencjału $V(x)$.
- (d) [Brojan 1.1. zad. 3] Dowieść, że operator parzystości $\hat{O}\psi(x) = \psi(-x)$ jest przemienny z operatorem energii $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)$, o ile $V(x) = V(-x)$.
- (e) Udowodnij twierdzenie: Jeżeli dwa operatory $\hat{A}$ i $\hat{B}$ komutują i jeśli ψ jest stanem własnym $\hat{A}$, to wektor $\psi' = \hat{B}\psi$ jest także stanem własnym $\hat{A}$ odpowiadającym tej samej wartości własnej. Innymi słowy: operatory komutujące mają wspólną bazę funkcji własnych.

6.3. Funkcja falowa

- (a) Funkcja falowa dana jest wzorem (β – rzeczywisty i dodatni parametr):

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{-\beta x} & x \geq 0 \\ e^{\beta x} & x \leq 0 \end{cases}$$

Proszę unormować funkcję i znaleźć prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w przedziale $(\frac{1}{\beta}, \frac{2}{\beta})$.

- (b) [Matthews 3.6.] Funkcja stanu cząstki opisana jest funkcją falową:

$$\psi(x) = \begin{cases} \left(\frac{1}{2a}\right)^{\frac{1}{2}} & |x| \leq a \\ 0 & |x| > a \end{cases}$$

Proszę znaleźć prawdopodobieństwo, że pomiar pędu cząstki da wynik p , a następnie wykazać, że stosunek prawdopodobieństw otrzymania przy pomiarze pędu cząstki wyników 0 i $\frac{\pi\hbar}{2a}$ wynosi $\frac{4}{\pi^2}$.

Wskazówka. Należy rzutować stan ψ na funkcję własną operatora pędu (poprzez iloczyn skalarny) i wtedy liczyć prawdopodobieństwo. Funkcja własna operatora pędu: $\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{p}{\hbar}x}$.

6.4. Wartość oczekiwana

- (a) Oblicz wartość oczekiwaną $\langle x \rangle_\psi$ położenia oraz $\langle p \rangle_\psi$ pędu cząstki w stanie opisanym funkcją falową z zad. 6.3.a.

- (b) [Brojan 1.1. zad. 42] W stanie opisanym funkcją falową $\psi(x)$ wartości średnie położenia i pędu wynoszą odpowiednio $\langle x \rangle$ i $\langle p \rangle$. Udowodnić, że funkcja falowa

$$\varphi(x) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\langle p \rangle x\right) \psi(x + \langle x \rangle)$$

opisuje stan, w którym wartości średnie położenia i pędu są równe zeru.

- (c) [Brojan 1.1. zad. 44] Obliczyć wartość średnią pędu w stanie własnym operatora $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$, gdzie $V(x)$ jest dowolnym potencjałem. *Wskazówka. Wyraż operator pędu przez Hamiltonian, np. poprzez jakiś komutator, wiążący $\hat{p}_x$ i $\hat{H}$.*

6.5. Równanie Kleina-Gordona

Próba wyjścia naprzeciw znalezieniu równania dobrze opisującego ruch fali płaskiej (fali de Broglie'a), a więc znalezieniu postaci równania falowego w mechanice kwantowej, jest równanie Kleina-Gordona. Jest to równanie falowe dla bezspinowej cząstki relatywistycznej.

- (a) Sprawdź, że równanie fali płaskiej postaci $\psi(\vec{r}, t; \vec{k}) = e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$ nie spełnia równania falowego d'Alemberta:

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}\right) \psi(\vec{r}, t; \vec{k}) = 0$$

- (b) Wykorzystując przedstawienie energii i pędu za pomocą operatorów (postulaty mechaniki kwantowej), wyprowadź r. Kleina-Gordona z niezmiennika relatywistycznego.
- (c) Sprawdź, że równanie fali płaskiej spełnia równanie Kleina-Gordona.
- (d) Sprawdź, że równanie Kleina-Gordona jest liniowe.
- (e*) Sprawdź, że funkcje typu $\phi(\vec{r}, t) = \Phi(\vec{r}) e^{\pm iEt/\hbar}$ (gdzie $\Phi(\vec{r})$ – pewna funkcja rzeczywista unormowana) są rozwiązaniami r. Kleina-Gordona. Oblicz relatywistyczną gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w stanie opisywanym funkcją $\phi(\vec{r}, t)$ jako $\rho = i\hbar \left(\phi^* \frac{\partial \phi}{\partial t} - \phi \frac{\partial \phi^*}{\partial t}\right)$. Czy taka probabilistyczna interpretacja funkcji $\phi(\vec{r}, t)$ jak w mechanice schrödingerskiej jest możliwa?

Uzupełnienie

Funkcja delta Diraca $\delta(x)$ (właściwie nie jest to funkcja, a „dystrybucja”) jest odpowiednikiem delty Kroneckera dla zmiennej ciągłej, o własności:

$$\delta(x) = \begin{cases} +\infty, & x = 0 \\ 0, & x \neq 0 \end{cases} \quad \text{oraz} \quad \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1 \quad (1)$$

Deltę Diraca można zdefiniować także poprzez jej następującą własność w „działaniu” z dowolną funkcją:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x) dx = f(0) \quad (2)$$

Z tej definicji wynika szereg ciekawych i ważnych własności $\delta(x)$. W obliczeniach wykorzystuje się wiele reprezentacji delty Diraca, np. jako granicę przy $\epsilon \rightarrow 0$ pewnych funkcji $f(x; \epsilon)$, które wyrazić można na wiele sposobów (np. jako funkcję prostokątną, Gaussa czy Lorentza). My skorzystamy z takiej reprezentacji:

$$\delta(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\sin\left(\frac{x}{\epsilon}\right)}{\pi x} \quad (3)$$

Proszę wykazać, że tak zdefiniowana funkcja spełnia warunki (1) i (2). Następnie wykorzystać reprezentację (3) do wykazania ortogonalności funkcji własnych operatora pędu $\psi_k(x) = A e^{ikx}$ dla różnych k i k' w przedziale $x \in (-\infty, \infty)$ oraz unormowania funkcji $\psi_k(x)$.

Uwaga. Warunek ortogonalności i unormowania wygląda następująco: $\langle \psi_k(x), \psi_{k'}(x) \rangle = \delta(k' - k)$.

Na temat delty Diraca i warunku ortonormalności funkcji własnej operatora pędu można przeczytać także w [Matthews §12.3.].