

Zadatak 1.

Dokažite da vlastiti vektori stanja harmoničkog oscilatora tvore ortonormirani bazu.

Rješenje:

a) Linearna nezavisnost

Prvo moramo dokazati linearu nezavisnost vektora .

Pretpostavimo da postoje skalari c_0, c_1, c_2, \dots od kojih je barem jedan različit od 0, takvi da vrijedi

$$\sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle = 0 \quad (1)$$

Djelujući operatorom N na obje strane ove jednadžbe, dobivamo

$$\sum_{n=0}^{\infty} n c_n |n\rangle = 0 \quad (2)$$

Jednadžba (2) je iste vrste kao i jednadžba (1), samo s promijenjenim skalarima. Označimo te skalare ovako:

$$c_n^{(1)} = n c_n, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

To znači da je $c_0^{(1)} = 0$ i da vektor $|0\rangle$ "ispada iz igre", tj. da ga nema u jednadžbi linearne zavisnosti. Sada možemo na jednadžbu (2) djelovati operatorom $N-1$, i zaključit ćemo da i vektor $|1\rangle$ "ispada iz igre". Postupak možemo nastaviti u beskonačnost pa ćemo zaključiti da svi vektori "ispadaju iz igre", tj. da ne postoji linearna zavisnost među njima.

b) Okomitost (ortogonalnost)

Sada ćemo dokazati da su dva različita vektora, $|n\rangle$ i $|m\rangle$ okomita. Pri tome ćemo iskoristiti svojstvo hermitičnosti operatora N .

$$N|n\rangle = n|n\rangle , \quad \langle m|N = m\langle m|$$

Odavde slijedi:

$$\langle m|N|n\rangle = n\langle m|n\rangle$$

$$\langle m|N|n\rangle = m\langle m|n\rangle$$

Oduzimanjem ovih dviju jednadžbi dobivamo:

$$(n-m)\langle m|n\rangle = 0$$

Budući da je $n \neq m$, slijedi :

$$\langle m|n\rangle = 0$$

To znači da su bilo koja dva različita vektora međusobno okomita.

c) Normiranost

Budući da vrijedi,

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(A^+)^n|0\rangle , \quad \langle n| = \langle 0| A^n \frac{1}{\sqrt{n!}}$$

vrijedi i

$$\langle n | n \rangle = \frac{1}{n!} \langle 0 | A^n (A^+)^n | 0 \rangle$$

Uvedimo pokratu

$$D_n = \langle 0 | A^n (A^+)^n | 0 \rangle$$

Naš zadatak je dovesti operator A skroz na lijevo, tako da djeluje na vektor osnovnog stanja i poništi ga. Za to će nam trebati sljedeće komutacijsko pravilo:

$$\begin{aligned} [A, (A^+)^n] &= [A, A^+ (A^+)^{n-1}] = A^+ [A, (A^+)^{n-1}] + [A, A^+] (A^+)^{n-1} = \\ &= (A^+)^{n-1} + A^+ (A^+ [A, (A^+)^{n-2}] + (A^+)^{n-2}) = \\ &= 2(A^+)^{n-1} + (A^+)^2 [A, (A^+)^{n-2}] = \dots = n(A^+)^{n-1} \end{aligned}$$

Primjenom ovog pravila u definiciji veličine D_n i relacije

$$A|0\rangle = 0$$

dobivamo rekurzivnu relaciju:

$$D_n = n D_{n-1}$$

No, iz ove relacije slijedi

$$D_n = n! \langle 0 | 0 \rangle$$

Iz svega ovoga dobivamo

$$\langle n | n \rangle = \langle 0 | 0 \rangle$$

Prema tome, ako je vektor osnovnog stanja oscilatora normiran na 1, onda su i vektori svih ostalih stanja također normirani na 1. Time je u potpunosti dokazana ortonormiranost vlastitih vektora harmoničkog oscilatora.

Zadatak 2.

Izračunajte umnožak neodređenost položaja i zaleta za određeno stanje harmoničkog oscilatora.

Rješenje:

Izrazit ćemo operatore položaja i zaleta s pomoću operatora stvaranja i poništenja:

$$x = \frac{x_0}{2}(A + A^+) , \quad p = \frac{p_0}{2i}(A^+ - A)$$

Budući da operatori stvaranja i poništenja povisuju odnosno snizuju vrijednost n , koja označava stanje, i zato što su različiti vektori stanja međusobno okomiti, zaključujemo da su srednje vrijednosti operatora položaja i zaleta u bilo kojem vlastitom stanju hamiltonijana harmoničkog oscilatora jednaki 0. To znači da nas zanimaju samo srednje vrijednosti kvadrata tih operatora. Imamo:

$$\begin{aligned} x^2 &= \frac{x_0^2}{4}(A^2 + (A^+)^2 + A A^+ + A^+ A) \\ p^2 &= -\frac{p_0^2}{4}(A^2 + (A^+)^2 - A A^+ - A^+ A) \end{aligned}$$

Srednje vrijednosti kvadrata operatora stvaranja i poništenja jednake su 0 (zašto?). Iskorištavanjem komutacijskog pravila za operatore stvaranja i poništenja i definicije operatora N dobivamo

$$\langle n | x^2 | n \rangle = \frac{x_0^2}{4}(2n+1) , \quad \langle n | p^2 | n \rangle = \frac{p_0^2}{4}(2n+1)$$

Konačno za umnožak neodređenosti dobivamo:

$$\Delta p \Delta x = \sqrt{\left(\frac{p_0^2}{4} (2n+1) \right) \left(\frac{x_0^2}{4} (2n+1) \right)} = \frac{p_0 x_0}{4} (2n+1) = \frac{\hbar}{2} (2n+1)$$

Primjetimo važnu činjenicu: **umnožak neodređenosti za osnovno stanje je najmanji mogući.**

Zadatak 3.

Izračunajte kako operator zaleta P djeluje u vlastitoj bazi operatora položaja X . (ovdje su operatori označeni velikim slovima da bismo ih razlikovali od njihovih vlastitih vrijednosti)

Rješenje:

Za operatore P i X vrijedi komutacijsko pravilo

$$[P, X] = -i\hbar \quad ,$$

a za vlastite vektore operatora X vrijedi

$$X|x\rangle = x|x\rangle \quad .$$

Djelujmo komutatorom na određeni vlastiti vektor operatora X .

$$[P, X]|x\rangle = -i\hbar|x\rangle$$

Dobivamo:

$$(x - X)P|x\rangle = -i\hbar|x\rangle \quad .$$

Iz ove jednadžbe trebamo izračunati vektor $P|x\rangle$. To nije moguće učiniti jednostavno tako da na obje strane jednadžbe djelujemo operatom $(x - X)^{-1}$ zato što operator $x - X$

poništava vektor $|x\rangle$, tj. vrijedi

$$(x - X)|x\rangle = 0 \quad ,$$

i zato **ne postoji** vektor $(x - X)^{-1}|x\rangle$. Zato ćemo uzeti vektor koji je jako blizu vektoru $|x\rangle$, naime vektor $|x + \Delta x\rangle$. Za njega vrijedi

$$(x - X)|x + \Delta x\rangle = -\Delta x|x + \Delta x\rangle$$

Ako uzmemo

$$P|x\rangle = i\hbar \frac{|x + \Delta x\rangle - |x\rangle}{\Delta x}$$

iz komutacijskog pravila ćemo dobiti jednadžbu

$$|x + \Delta x\rangle = |x\rangle \quad ,$$

tj. morali bismo staviti $\Delta x = 0$. No, to nije ništa drugo nego operacija deriviranja

$$P|x\rangle = i\hbar \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{|x + \Delta x\rangle - |x\rangle}{\Delta x} = i\hbar \frac{d}{dx}|x\rangle$$

Primijetite ovdje predznak + ispred imaginarnе jedinice. Mi ne gledamo kako operator zaleta djeluje na funkciju od vlastite vrijednosti operatora položaja nego gledamo kako on djeluje **na vlastiti vektor operatora položaja.**

Idemo vidjeti kako operator zaleta djeluje na opći vektor $|\psi\rangle$ u Hilbertovom prostoru. Takav vektor ćemo prikazati u vlastitoj bazi operatora položaja X .

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} c(x) |x\rangle dx$$

Ovdje su $c(x)$ **koordinate** vektora $|\psi\rangle$ u vlastitoj bazi operatora X . Mi znamo kako operator P djeluje na **vektore** te baze. Dakle,

$$\begin{aligned} P|\psi\rangle &= i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} c(x) \frac{d}{dx} |x\rangle dx = i\hbar c(x) |x\rangle|_{-\infty}^{+\infty} + \\ &+ \int_{-\infty}^{+\infty} \left(-i\hbar \frac{dc(x)}{dx} \right) |x\rangle dx \end{aligned}$$

Ovdje smo iskoristili parcijalnu integraciju i tako smo operaciju deriviranja "prebacili" na koordinate $c(x)$. Prvi član u ovoj jednadžbi iščezava, ako zahtjevamo konačnu normu vektora $|\psi\rangle$. Dakle, operator zaleta je

$$P c(x) = -i\hbar \frac{dc(x)}{dx}$$

kada djeluje na koordinate vektora, odnosno na funkcije realne varijable x .

KVANTNA KEMIJA 3. vježbe