KVANTNA MEHANIKA

Zadaci za vježbe 15. 4. 2025.

9 Postulati kvantne mehanike

9.1 (a) Dokažite sljedeći identitet:

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$$

(b) Upotrijebite fundamentalne komutacijske relacije i dokažite jednakost

$$[x^n, p] = i\hbar n x^{n-1}$$

(c) Svakoj analitičkoj funkciji $F(\xi)$ gdje je ξ varijabla, može se pridružiti operator $F(A)$ gdje je A operator na sljedeći način:

$$F(A) = \sum_n a_n A^n$$

Pokažite da je

$$[F(x), p] = i\hbar F'(x)$$

gdje crtica označava prvu derivaciju.
(d) Zadan je operator $F(A)$ gdje je A hermitski operator. Ako je

$$A|\alpha\rangle = \lambda|\alpha\rangle$$

jednadžba svojstvenih vrijednosti za A, kako glase svojstvene vrijednosti za $F(A)$?

9.2 (a) Pokažite da vrijedi

$$\mathrm{e}^{i\xi p/\hbar}\, q\, \mathrm{e}^{-i\xi p/\hbar} = q + \xi$$

gdje su q i p operatori (generalizirana koordinata i impuls), a ξ je parametar. Eksponencijalne funkcije u gornjem izrazu su operatori definirani na sljedeći način

$$\mathrm{e}^{i\xi p/\hbar} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\left(\frac{i\xi p}{\hbar}\right)^n$$

(b) Uz pomoć gornjeg rezultata pokažite da je

$$\mathrm{e}^{i\xi p/\hbar}\, F(q)\, \mathrm{e}^{-i\xi p/\hbar} = F(q + \xi)$$

za operator F koji je definiran kao

$$F(q) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n q^n$$

gdje su a_n koeficijenti reda.
***Uputa*:** Za operator $G(p)$ oblika (gornja eksponencijalna funkcija je takvog oblika!)

$$G(p) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n p^n$$

i operator q vrijedi relacija

$$[q, G(p)] = i\hbar \frac{\partial G}{\partial p}$$

Iskoristite gornju jednakost za dokaz pod (a).
Operator $\mathbf{T} = \mathrm{e}^{-i\xi p/\hbar}$ naziva se ***operatorom translacije***. Za dokaz pod (b) koristite njegovo svojstvo ***unitarnosti***

$$\mathbf{T}^+ \cdot \mathbf{T} = \mathbf{1}$$

gdje je $\mathbf{1}$ jedinični operator.

9.3 Upotrijebite relaciju za vremensku derivaciju prosječne vrijednosti operatora

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle Q\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [H, Q]\rangle + \left\langle \frac{\partial Q}{\partial t}\right\rangle$$

da pokažete da vrijedi

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle xp\rangle = 2\langle T\rangle - \left\langle x\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\right\rangle$$

gdje je T kinetička energija (hamiltonijan je jednak $H = T + V$). Provjerite da je u stacionarnom stanju lijeva strana gornje jednakosti jednaka nuli. Ono što dobivate je virijalni teorem za kvantnu mehaniku

$$2\langle T\rangle = \left\langle x\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\right\rangle$$

9.4 Zadana su tri hermitska operatora: A, B i C. Pretpostavimo da je

$$[B,C] = iA$$

$$[A,C] = iB$$

Nađite donju granicu za umnožak $\sigma_D\sigma_C$ gdje je hermitski operator $D = (1/2)(AB + BA)$.

9.5 Zamislite sustav u kojem postoje samo dva linearno nezavisna stanja:

$$|1\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \quad ; \quad |2\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} .$$

Tada vektor stanja u najopćenitijem slučaju glasi:

$$|\Psi\rangle = a\,|1\rangle + b\,|1\rangle = \begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix} ,$$

gdje je $|a|^2 + |b|^2 = 1$. Pretpostavimo da je hamiltonijan zadan matricom u bazi $\{|1\rangle, |2\rangle\}$

$$H = \begin{pmatrix}h & g\\ g & h\end{pmatrix} ,$$

gdje su h, g realne konstante.
(a) Nađite svojstvene vrijednosti i normalizirane svojstvene vektore za H.
(b) Pretpostavimo da je sustav u $t = 0$ u stanju $|1\rangle$. Napišite vektor stanja sustava u trenutku t.
(c) Kolika je vjerojatnost da je sustav opisan u (b) u trenutku $t > 0$ u stanju $|2\rangle$?

9.6 Razmotrite hamiltonijan $H = H_0 + V$ gdje su matrice za H_0 i V u bazi koju tvore svojstveni vektori za H_0 , jednake

$$H_0 = \begin{pmatrix}\varepsilon_1 & 0 & \cdots & 0\\ 0 & \varepsilon_2 & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & \varepsilon_n\end{pmatrix}, \quad V = -\beta\begin{pmatrix}1 & 1 & \cdots & 1\\ 1 & 1 & \cdots & 1\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 1 & 1 & \cdots & 1\end{pmatrix}$$

Pokažite da je jednadžba iz koje se mogu izračunati energije E za hamiltonijan H jednaka

$$\sum_{k=1}^{n}\frac{1}{E-\varepsilon_k} + \frac{1}{\beta} = 0 \ .$$

$\boxed{9.1}$

(a) $[AB,C] = (AB)C - C(AB)$

$$= \underline{ABC} - CAB + ACB - \underline{ACB}$$

$$= A(BC - CB) + (AC - CA)B$$

$$= A[B,C] + [A,C]B$$

(b) Matematička indukcija: pretpostavimo da vrijedi

$$[x^{n-1}, p] = i\hbar(n-1)x^{n-2}$$

$$[x^n, p] = [x^{n-1}x, p]$$

$$= x^{n-1}\underbrace{[x,p]}_{i\hbar} + \underbrace{[x^{n-1}, p]}_{i\hbar(n-1)x^{n-2}}x$$

$$= i\hbar x^{n-1} + i\hbar(n-1)x^{n-1}$$

$$= i\hbar n x^{n-1}$$

(c)

$$f(x) = \sum_n a_n x^n$$

$$\left[\sum_n a_n x^n, p\right] = \sum_n a_n [x^n, p]$$

koristili smo svojstvo $[\alpha A, B] = \alpha[A,B]$

$[A+B, C] = [A,C] + [B,C]$

$$= \sum_n a_n i\hbar n x^{n-1}$$

$$= i\hbar \frac{d}{dx}\left(\sum_n a_n x^n\right)$$

$$= i\hbar \frac{df}{dx}$$

(d) $A|\alpha\rangle = \lambda|\alpha\rangle$

$$A^2 = A\cdot A\,; \quad A^2|\alpha\rangle = A(\underbrace{A|\alpha\rangle}_{\lambda|\alpha\rangle}) = \lambda \underbrace{A|\alpha\rangle}_{\lambda|\alpha\rangle} = \lambda^2|\alpha\rangle$$

$$A^n|\alpha\rangle = \lambda^n|\alpha\rangle$$

$$F(A) = \sum_n a_n A^n\,; \quad F(A)|\alpha\rangle = \left(\sum_n a_n A^n\right)|\alpha\rangle$$

$$= \sum_n a_n \underbrace{(A^n|\alpha\rangle)}_{\lambda^n|\alpha\rangle}$$

$$F(A)|\alpha\rangle = \Big(\underbrace{\sum a_n \lambda^n}_{F(\lambda)}\Big)|\alpha\rangle$$

Svojstvene vrijednosti za $F(A)$ glase $F(\lambda)$.

$\boxed{9.2}$

(a) $$[z, e^{-ip\xi/\hbar}] = i\hbar\left(-\frac{i\xi}{\hbar}\right) e^{-i\frac{p\xi}{\hbar}}$$

$$z e^{-ip\xi/\hbar} - e^{-ip\xi/\hbar} z = i\hbar\left(-\frac{i\xi}{\hbar}\right) e^{-i\frac{p\xi}{\hbar}}$$

$$e^{ip\xi/\hbar}\cdot$$

$$e^{i\xi p/\hbar} z e^{-i\xi p/\hbar} - \mathbb{1} z = \xi \mathbb{1}$$

$$\Rightarrow e^{i\xi p/\hbar} z e^{-i\xi p/\hbar} = z + \xi \checkmark$$

(b)

$$e^{i\xi p/\hbar} F(z) e^{-i\xi p/\hbar} = \sum_{n=0}^{\infty} a_n e^{i\xi p/\hbar} z^n e^{-i\xi p/\hbar}$$

$$e^{i\xi p/\hbar} z^n e^{-i\xi p/\hbar} = e^{i\xi p/\hbar} z^{n-1} \cdot e^{-i\xi p/\hbar} \underbrace{e^{i\xi p/\hbar} z e^{-i\xi p/\hbar}}_{z+\xi}$$

$$= e^{i\xi p/\hbar} z^{n-2} e^{-i\xi p/\hbar} \cdot \underbrace{e^{i\xi p/\hbar} z e^{-i\xi p/\hbar}}_{(z+\xi)} (z+\xi)$$

$$= \dots = \sum_{n=0}^{\infty} a_n (z+\xi)^n = F(z+\xi) \checkmark$$

$\boxed{9.3}$

$$[H, xp] = \left[\frac{p^2}{2m} + V(x), xp\right] = \frac{1}{2m}[p^2, xp] + [V, xp]$$

$$[p^2, xp] = x\underbrace{[p^2, p]}_{=0} + [p^2, x]p = \left(\underbrace{[p, x]}_{-i\hbar}p + p\underbrace{[p, x]}_{-i\hbar}\right)p$$

$$= -2i\hbar p^2$$

$$[V, xp] = x[V, p] + \underbrace{[V, x]}_{=0}p = x[V, p]$$

Vrijedi:

$$[V(x), p] = i\hbar \frac{dV}{dx} \quad \text{(dokaz: razvoj u red ili zadatak 19.1(c))}$$

$$\frac{d}{dt}\langle xp\rangle = \frac{i}{\hbar}\left\langle \frac{-2i\hbar}{2m}p^2\right\rangle + \frac{i}{\hbar}\left\langle i\hbar x \frac{dV}{dx}\right\rangle$$

$$= 2\langle T\rangle - \left\langle x\frac{dV}{dx}\right\rangle$$

$\boxed{9.4}$

$$\sigma_D \sigma_C \geq \frac{1}{2} |\langle [D, C] \rangle|$$

$$[D, C] = \frac{1}{2}[AB + BA, C] = \frac{1}{2}[AB, C] + \frac{1}{2}[BA, C]$$

$$= \frac{1}{2}\Big([A, C]B + A[B, C] + [B, C]A + B[A, C]\Big)$$

$$= \frac{1}{2}\left(iB^2 + iA^2 + iA^2 + iB^2\right)$$

$$= i\left(A^2 + B^2\right)$$

$$\sigma_D \sigma_C \geq \frac{1}{2} |\langle A^2 + B^2 \rangle| = \frac{1}{2}|\langle A^2 \rangle| + \frac{1}{2}|\langle B^2 \rangle|$$

jer su $\langle A^2 \rangle$, $\langle B^2 \rangle$ uvijek veći ili jednaki nuli.

$\boxed{9.5}$

(a) $\det\begin{pmatrix} h-\lambda & g \\ g & h-\lambda \end{pmatrix} = 0 \quad ; (h-\lambda)^2 - g^2 = 0$

$\lambda_1 = h + g$

$\lambda_2 = h - g$

$\underline{\lambda_1 = h+g}$

$\begin{pmatrix} -g & g \\ g & -g \end{pmatrix}\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = 0 \qquad -g \cdot v_1 + g v_2 = 0$

$v_1 = 1$

$v_2 = 1$

$|v_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$

$\underline{\lambda_2 = h-g}$

$\begin{pmatrix} g & g \\ g & g \end{pmatrix}\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = 0 \qquad v_1 + v_2 = 0$

$v_1 = 1$

$v_2 = -1$

$|v_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$

$|\psi, t\rangle = a\,|v_1\rangle\, e^{-i\frac{(h+g)\cdot t}{\hbar}} + b\,|v_2\rangle\, e^{-i\frac{(h-g)\cdot t}{\hbar}}$

(b) u $t=0$

$|\psi, t=0\rangle = |1\rangle$

$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = a \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + b \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$

$1 = \frac{a}{\sqrt{2}} + \frac{b}{\sqrt{2}}$

$0 = \frac{a}{\sqrt{2}} - \frac{b}{\sqrt{2}} \Rightarrow a = b$

$a = \frac{\sqrt{2}}{2}$

$|\psi, t\rangle = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} e^{-i\frac{h+g}{\hbar}t} + \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} e^{-i\frac{h-g}{\hbar}t} = e^{-\frac{ih}{\hbar}t}\begin{pmatrix} \cos\left(\frac{g}{\hbar}t\right) \\ -i\sin\left(\frac{g}{\hbar}t\right) \end{pmatrix}$

(c) Pretpostavimo da je sustav u stanju $|\psi, t\rangle$. Amplituda vjerojatnosti da je sustav u $t>0$ u stanju $|2\rangle$ glasi

$$\langle 2|\psi, t\rangle = (0, 1)\begin{pmatrix} \cos\left(\frac{g}{\hbar}t\right) \\ -i\sin\left(\frac{g}{\hbar}t\right)\end{pmatrix} e^{-\frac{ih}{\hbar}t}$$

$$= e^{-\frac{ih}{\hbar}t}(-i)\sin\left(\frac{gt}{\hbar}\right)$$

Vjerojatnost

$$|\langle 2|\psi, t\rangle|^2 = \sin^2\left(\frac{gt}{\hbar}\right)$$

$\boxed{9.6}$

Jednadžbe svojstvenih vrijednosti za H_0 i H glase

$$H_0 |k\rangle = \varepsilon_n |k\rangle$$

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \qquad (*)$$

Matrice za H_0 i V napisane su u bazi $\{|k\rangle\}$. Vektor $|\psi\rangle$ možemo razviti po potpunom skupu vektora $\{|k\rangle\}$

$$|\psi\rangle = \sum_{k=1}^{n} \alpha_k |k\rangle \qquad (**)$$

Imamo iz $(*)$

$$H|\psi\rangle = (H_0 + V)|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

Iz ove je jednadžbe

$$V|\psi\rangle = (E - H_0)|\psi\rangle$$

$$\frac{1}{E - H_0} V|\psi\rangle = |\psi\rangle$$

Uvrstimo $(**)$ u lijevu stranu gornje jednadžbe i pomnožimo skalarno (s lijeva) s vektorom $|e\rangle$ iz skupa $\{|k\rangle\}$

$$\langle e| \frac{1}{E - H_0} V\left(\sum_{k=1}^{n} \alpha_k |k\rangle\right) = \underbrace{\langle e|\psi\rangle}_{\alpha_e}$$

$$\langle e| \frac{1}{E - H_0} = \frac{1}{E - \varepsilon_e} \langle e|$$

$$\frac{1}{E - \varepsilon_e} \sum_{k=1}^{n} \langle e|V|k\rangle \alpha_k = \alpha_e$$

Iz zadane matrice za V je

$$\langle e|V|k\rangle = -3$$

pa je

$$\frac{-z}{E-\varepsilon_\ell}\sum_{k=1}^{n}\alpha_k = \alpha_\ell$$

Suma po ℓ daje

$$\sum_{\ell=1}^{n}\frac{1}{E-\varepsilon_\ell}\sum_{k=1}^{n}\alpha_k = -\frac{1}{z}\sum_{\ell=1}^{n}\alpha_\ell$$

dobivamo

$$\sum_{\ell=1}^{n}\frac{1}{E-\varepsilon_\ell}+\frac{1}{z}=0$$