Cvičení 23. 2. 2022

Téma: Operátory

∞ **Funkce, operátory a lineární algebra**

Funkce a operátory jsou v kvantové mechanice podstatné. Operátory jsou přiřazení

$$\hat{A}f = g\,, \tag{1}$$

kde f a g jsou prvky (různých) prostorů, například funkce. Příkladem operátoru je derivace, komplexní sdružení, vynásobení konstantou atd. Tedy věci, které známe, jen jsme jim operátory neříkali.

V kvantové mechanice potkáváme operátory, které jsou tzv. lineární, platí pro ně $\hat{A}(f+g) = \hat{A}(f) + \hat{A}(g)$ a $\hat{A}(cf) = c\hat{A}(f)$.

$\triangleright$ Ověřte, že derivace je linární operátor a operátor $\hat{A}u = 1/u$ lineární není. (DONE)

V kvantové mechanice často potkáváme funkce normalizované na 1. (Protože obsahují jednu částici.)

Budeme nyní uvažovat funkce $\frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin n\phi$, $\frac{1}{\sqrt{\pi}}\cos n\phi$ a $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ na intervalu $(0, 2\pi)$, s $n \in N$.

$\triangleright$ Ověřte, že funkce $\frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin n\phi$ jsou normalizované na 1. (DONE)

! K tomu, abychom mohli ověřit normalizaci, musíme definovat normu funkce N. Tu definujeme pomocí skalárního součinu následovně

$$N = \int_0^{2\pi} f^*(\phi) f(\phi) \mathrm{d}\phi\,.$$

! K úpravě výrazu $\sin(n\phi)$ a podobných je výhodné využít Eulerova vzorce $e^{i\phi} = \cos\phi + i\sin\phi$.

! Integrál $\int_0^{2\pi} e^{in\phi}\mathrm{d}\phi$, kde $n \in Z$, je nenulový jen tehdy, když $n = 0$.

U předešlých poznámek jsou vykřičníky, protože jsou důležité a budeme je potkávat a využívat téměř neustále.

$\triangleright$ Ověřte, že funkce $\frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin n\phi$ a $\frac{1}{\sqrt{\pi}}\cos n\phi$ jsou na sebe kolmé.

Tady opět využijeme skalární součin, obecně definovaný jako

$$\langle f|g\rangle = \int f^* g\,.$$

Tím jsme mimojiné zjistili, že funkce tvoří ortonormální bázi. To ještě využijeme, ale předtím se podíváme na akci operátorů na funkce. ("Akcí" není myšleno nic speciálního, jen je prostě na funkce pustíme.) Abychom se neupsali, tak budeme ve vhodných chvílích používat následující značení funkcí:

$$\psi_{Sn}(\phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin(n\phi) \tag{2}$$

$$\psi_{Cn}(\phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\cos(n\phi) \tag{3}$$

$$\psi_0(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,, \tag{4}$$

pro obecnou bázovou funkci potom použijeme ψ_i.

Uvažujme nyní operátor derivace vynásobený komplexní jednotkou $\hat{A} = i\frac{d}{d\phi}$.

▷ Vypočtěte, jak působí $\hat{A}$ na funkce $\frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin\phi$, $\frac{1}{\sqrt{\pi}}\cos\phi$ a $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$. Výsledky převeďte do tvaru využívajícího bázi funkcí ψ_i.

Uvažujme nyní operátor $\hat{B} = \sin\phi$, tedy operátor působící jako $\hat{B}f = \sin\phi f$.

▷ Vypočtěte, jak působí $\hat{B}$ na funkce $\frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin\phi$, $\frac{1}{\sqrt{\pi}}\cos\phi$ a $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$. Výsledek opět přepište pomocí funkcí naší báze ψ_i.

Všimněme si, že pro operátor $\hat{A}$ je možné výsledek napsat jako $c\psi_i$, tedy konstanta c krát jedna bázová funkce. U operátoru $\hat{B}$ to neplatí, výsledek je kombinací funkcí ψ_i. To je obecné, tedy $\hat{O}\psi_i = \sum_j c_j\psi_j$. V obou případech (ani pro $\hat{A}$ ani pro $\hat{B}$) nejsou funkce ψ_i vlastními funkcemi operátorů. Výsledkem aplikace $\hat{A}$ na funkci ψ_j je sice jedna z funkcí báze ψ_i, ale odlišná od ψ_j.

▷ Předchozí věta neplatí v jednom případě, v jakém?

Pokud na funkci působí více operátorů postupně, tak nás může zajímat, jestli musíme pořadí dodržet, nebo je možné pořadí upravit. Pokud můžeme operátory prohodit, tedy pokud platí $\hat{C}\hat{D}f = \hat{D}\hat{C}f$, tak spolu operátory komutují.

▷ Ověřte, zda spolu operátory $\hat{A}$ a $\hat{B}$ komutují. Jelikož operátory musíme aplikovat na nějakou funkci, použijeme např. $\frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin\phi$. Tedy vypočteme $\hat{A}\hat{B}\frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin\phi$ a $\hat{B}\hat{A}\frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin\phi$ a výsledky porovnáme.

▷ Nyní místo ψ_{S1} nepoužijeme ve výpočtu konkrétní funkci, ale nějakou obecnou (testovací) funkci f a výpočet zopakujeme.

Pro rychlíky: ▷ Ověřte, že shodný výsledek obdržíme i pro testovací funkce $\frac{1}{\sqrt{\pi}}\cos\phi$ a $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$.

! Výraz $\hat{C}\hat{D} - \hat{D}\hat{C}$ se nazývá komutátor a značí se $[\hat{C},\hat{D}]$. Pokud je komutátor nula, operátory spolu komutují, jinak nekomutují. V kvantové mechanice jsou komutátory důležité. Například kvůli tomu, že dva operátory, které spolu komutují, mají stejné vlastní funkce.

▷ Čemu je roven $[\hat{A},\hat{B}]$ v našem případě?

Jednou ze situací, kdy jsou komutátory užitečné je vyčíslování operátorů složených z mnoha a mnoha dílčích operátorů. V takových situacích můžeme výraz upravit pomocí komutátorů. Například $\hat{D}\hat{C}$ můžeme přepsat jako $\hat{D}\hat{C} = \hat{C}\hat{D} - [\hat{C},\hat{D}]$. V budoucnu to hodně budeme využívat pro kvantový oscilátor, ale nyní si to vyzkoušíme na našem systému.

Uvažujme operátor $(\hat{A}\hat{B})^2$.

▷ Upravte operátor působením na testovací funkci f.

V předešlém výpočtu jsou trochu nepříjemné derivace. Možná by bylo jednodušší je přesunout doprava, co nejblíže k testovací funkci. Derivaci ($\hat{A}$) a $\sin\phi$ ($\hat{B}$) nemůžeme prohodit rovnou, nekomutují spolu. Je třeba přidat komutátor, tedy použijeme $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} + i\cos\phi$.

▷ Upravte operátor $(\hat{A}\hat{B})^2$ pomocí komutátoru tak, aby se derivace přesunuly doprava. Ve výpočtu se objeví také výraz $\frac{d}{d\phi}\cos\phi$, ten je možné upravit zapůsobením na testovací funkci. Tím se nám posune derivace napravo od $\cos\phi$.

V tomto případě se výpočet moc nezjednoduší. Ale můžeme si představit, že operátor $(\hat{A}\hat{B})^2$ potřebujeme aplikovat na mnoho funkcí. Potom je vyčíslení jednodušší.

∞ Další příklady s komutátory

▷ Vypočtěte komutátor $[\hat{A}\hat{B},\hat{C}]$. Vypočtěte $[\hat{A},\hat{B}^2]$, pokud platí $[\hat{A},\hat{B}] = 1$

▷ Vypočtěte $[\frac{d}{dx}, f(x)]$, kde $f(x)$ je (komplexní) funkce. Vypočtěte $[\frac{d}{dx}, x]$. Vypočtěte, jak působí operátor $(\frac{d}{dx} + x)^2$, jednak přímo a potom s použitím předešlého komutátoru.