

1. Przypomnieć sobie z algebry co to są macierze hermitowskie. Co wiemy o wartościach własnych i wektorach własnych macierzy hermitowskich?
2. Dana jest macierz

$$\begin{pmatrix} 1 & i \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (1)$$

znaleźć jej wartości własne, wektory własne, obliczyć ich iloczyn skalarny.

3. Dana jest macierz

$$\begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2} \\ \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \quad (2)$$

znaleźć jej wartości własne, wektory własne, obliczyć ich iloczyn skalarny. Unormować wektory własne macierzy.

4. Która z powyższych macierzy była macierzą hermitowską? Rozwinąć wektor $|x\rangle = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix}$ w bazie zbudowanej z unormowanych wektorów własnych macierzy z zadania 3 (znaleźć ogólny wzór na współczynniki rozwinięcia).
5. Delta Diraca $\delta(x)$. Funkcją (a właściwie *dystrybucją*) $\delta(x)$ nazywamy funkcję o własności:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x)dx = f(0) \quad (3)$$

gdzie $f(x)$ jest dowolną funkcją ciągłą w $x = 0$. Ponadto, $\delta(x) \rightarrow \infty$ dla $x = 0$ oraz $\delta(x) = 0$ dla $x \neq 0$. Delta Diraca jest odpowiednikiem delty Kroneckera dla zmiennej ciągłej. Jest wiele reprezentacji $\delta(x)$, np. funkcja Gaussa lub Lorentza przy odchyleniu standardowym / szerokości połówkowej dążącej do zera. Tutaj skorzystamy z reprezentacji:

$$\delta(x) = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\sin Lx}{\pi x}. \quad (4)$$

Wykazać, że tak zadana $\delta(x)$ spełnia warunek (3). Przy pomocy $\delta(x)$ wykazać ortogonalność funkcji $\psi_k(x) = Ae^{ikx}$ dla różnych k , w przedziale $x \in (-\infty, \infty)$, tzn udowodnić, że

$$\int_{-\infty}^{\infty} Ae^{-ikx} Ae^{ik'x} dx = \text{const} * \delta(k - k'). \quad (5)$$

Unormować funkcję $\psi_k(x)$ (tzn. znaleźć takie A , aby w powyższym równaniu $\text{const} = 1$).

6. Unormować funkcję $f_n(x) = A \sin(nx)$ w przedziale $(0, \pi)$, $n \in N$ (tzn. znaleźć takie A aby $\langle f|f \rangle = 1$, iloczynem skalarnym jest całka na przedziale zmienności). Wykazać, że zbiór funkcji f tworzy ortonormalny układ funkcji na tym przedziale, tzn $\langle f_n|f_m \rangle = \delta_{nm}$. Unormować i rozwinąć funkcję $g(x) = Bx$ w bazie funkcji $f(x)$ (wzór na współczynniki rozwinięcia formalnie ma taką samą postać jak w zadaniu dla wektorów).

Kilka uwag odnośnie operatorów (niektóre z nich to właściwie postulaty mechaniki kwantowej, sens poniższych uwag będzie się wyjaśniał w dalszym ciągu zajęć, ale dobrze to sobie zebrać w jednym miejscu).

Uwaga 1: Stany kwantowe i notacja Diraca. Możliwe stany kwantowe układu fizycznego tworzą (abstrakcyjną) przestrzeń Hilberta, która jest przestrzenią wektorową ze zdefiniowanym iloczynem skalarnym (czyli potrafimy mierzyć w niej długość). Bardzo wygodną formą do przeprowadzania ogólnych obliczeń w przestrzeni Hilberta jest tzw. notacja Diraca. Abstrakcyjny stan ' α ' cząstki kwantowej (np. stan podstawowy elektronu w atomie wodoru) reprezentuje tzw. wektor stanu 'ket' $|\alpha\rangle$. Wektor sprzężony po hermitowsku do $|\alpha\rangle$ to wektor 'bra' $\langle\alpha|$. Normą wektora jest pierwiastek z iloczynu skalarnego $\langle\alpha|\alpha\rangle$. Stan nazywamy unormowanym, jeśli $\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$ (w analogii do unormowanych wektorów).

Uwaga 2: Każdej wielkości fizycznej (np. położenie, pęd, energia) w mechanice kwantowej przypisujemy pewien matematyczny operator, działający we wspomnianej przestrzeni Hilberta. Wszystkie operatory wielkości fizycznych są *operatorami hermitowskimi* i wiele własności funkcji falowych, które będą opisywać stany kwantowe, wynika z faktu, że są funkcjami własnymi operatorów hermitowskich. Sprzężenie hermitowskie definiujemy jako: $\langle\alpha|\hat{\Omega}^\dagger|\beta\rangle = \langle\beta|\hat{\Omega}|\alpha\rangle^*$ (* - sprzężenie zespolone).

W przestrzeni funkcji określonych na danym przedziale (a, b) odpowiednikiem iloczynu skalarnego $\langle f|g\rangle$ jest całka $\langle f|g\rangle = \int_a^b f^* g$, * - sprzężenie zespolone. Dla operatorów różniczkowych sprzężenie hermitowskie (†) operatora określamy jako:

$$\int f^* \hat{A}^\dagger g = \left(\int g^* \hat{A} f \right)^* \quad (6)$$

Uwaga 3: Funkcja własna (bądź wektor własny) operatora $\hat{\Omega}$ (daszek wskazuje, że to operator) spełniają równanie

$$\hat{\Omega}|\alpha\rangle = \lambda_\alpha|\alpha\rangle \quad (7)$$

gdzie λ jest liczbą i jest to tzw. wartość własna. Tak jak w algebrze macierzy.

Uwaga 4: Funkcje własne operatora hermitowskiego tworzą ortonormalną i zupełną bazę funkcji. Wynika z tego że każdą funkcję ciągłą da się przedstawić w postaci ich kombinacji liniowej. W notacji Diraca zapisać to można jako:

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij} \quad (8)$$

$$\sum_i |i\rangle\langle i| = \hat{1} \quad (9)$$

Uwaga 5: Działanie operatora na dowolny wektor stanu zapisujemy jako: $\hat{\Omega}|\alpha\rangle = |\beta\rangle$. Jeśli operator działa na wektor własny to wynikiem działania operatora jest tenże stan własny przemnożony przez wartość własną: $\hat{\Omega}|\alpha\rangle = \lambda_\alpha|\alpha\rangle$, zgodnie z tym co napisano powyżej. Poprzez działanie operatora na stan fizyczny możemy rozumieć np. dokonywanie pomiaru. Zatem pomiar w stanie własnym daje na pewno wynik będący wartością własną przynależną do danego stanu (mierząc energię elektronu w stanie podstawowym atomu wodoru na pewno otrzymamy wartość -13.6 eV). Ale w mechanice kwantowej obiekt może znajdować się w stanie nie będącym stanem własnym danego operatora, albo będącym kombinacją kilku stanów. W takim przypadku konieczne jest zdefiniowanie wartości średniej (oczekiwanej) operatora w dowolnym stanie, która jest równa $\langle\hat{\Omega}\rangle = \langle\alpha|\hat{\Omega}|\alpha\rangle$.

Uwaga 6: Jeśli wektory stanu reprezentujemy poprzez funkcje falowe (np. w tzw. reprezentacji położeniowej gdzie funkcja falowa zależy od położenia), to w przestrzeni funkcji określonych na danym przedziale (a, b) iloczyn skalarny $\langle f|g\rangle$ jest całką $\langle f|g\rangle = \int_a^b f^* g$, wartość oczekiwana operatora $\langle f|\hat{\Omega}|f\rangle = \int_a^b f^* \hat{\Omega} f$ (zakładamy że funkcje są unormowane).

Uwaga 7: Z tego, co napisano powyżej, wynika że pomiar $\hat{\Omega}$ w dowolnym stanie $|\alpha\rangle$, nie będącym stanem własnym, da nam wynik należący do zbioru wartości własnych operatora danego pomiaru z różnymi prawdopodobieństwami. Wartość średnia serii pomiarów na identycznych stanach $|\alpha\rangle$ to podana powyżej $\langle\hat{\Omega}\rangle = \langle\alpha|\hat{\Omega}|\alpha\rangle$. Jeśli stan $|\alpha\rangle$ rozłożymy w bazie stanów własnych operatora $|i\rangle$ (jak policzyć współczynniki rozwinięcia?):

$$|\alpha\rangle = \sum_j c_j |i\rangle \quad (10)$$

to otrzymamy $\langle\hat{\Omega}\rangle = \sum_i |c_i|^2 \lambda_i$, czyli wartość średnia jest średnią ważoną z wartości własnych, a wagami są kwadraty współczynników rozwinięcia. Możemy również obliczyć, jakie jest prawdopodobieństwo otrzymania konkretnego wyniku λ_i (np. jakie jest prawdopodobieństwo, że mierząc pęd cząstki otrzymam wartość 0). Wynik zależy od tego jak bardzo nasz dowolny stan jest 'podobny' do stanu własnego $|i\rangle$ przynależącego do wyniku λ_i . Tutaj należy 'wyrzutować' stan $|\alpha\rangle$ na wektor własny i prawdopodobieństwo będzie równe kwadratowi współczynnika rozwinięcia przy stanie $|i\rangle$:

$$P(\lambda_i) = |\langle i|\alpha\rangle|^2 = \dots = |c_i|^2. \quad (11)$$