Wojciech Broniowski
Instytut Fizyki, Akademia Świetokrzyska

Mechanika kwantowa - zadania 1 (2007/2008)

1 Elementy algebry (powtórka)

1. **Ortoganalizacja Gramma-Schmidta.**

   Rozważ wektory w przestrzeni R^3

$$v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad v_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad v_3 = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

   (a) Udowodnij, że powyższe wektory tworzą bazę w R^3.

   (b) Z pomocą procedury Gramma-Schmidta znajdź bazę ortogonalną (w_1, w_2, w_3) (nie normuj wektorów).

   (c) Znajdź macierz przejścia P od starej do nowej bazy, tj. macierz o własności $Pv_i = w_i$, $i = 1, 2, 3$. Wskazówka: należy ułożyć wektory kolumnowe v_i w macierz $V = (v_1v_2v_3)$ i podobnie $W = (w_1w_2w_3)$. Wtedy $PV = W$ i $P = WV^{-1}$, co łatwo obliczyć "za jednym zamachem".

   Ogólna uwaga: Do odwrócenia macierzy A wygodnie jest użyć metody Gaussa, gdyż liczba operacji jest mała, bo nie trzeba liczyć wyznaczników. Polega ona na tym, że piszemy macierz pomocniczą, gdzie do macierzu A dopisujemy po prawj stronie macierz jednostkową:

$$A|I = \left(\begin{array}{cccc|cccc} a_{11} & a_{12} & \ldots & a_{1n} & 1 & 0 & \ldots & 0 \\ a_{21} & a_{22} & \ldots & a_{2n} & 0 & 1 & \ldots & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ a_{n1} & a_{n2} & \ldots & a_{nn} & 0 & 0 & \ldots & 1 \end{array}\right).$$

   Mamy do dyspozycji nastepujące operacje: 1) każdy wiersz $A|I$ możemy pomnożyć przez liczbę, 2) do każdego wiersza możemy dodać inny wiersz pomnożony przez liczbę. Operacje 1) i 2) dobieramy (tu trzeba wykazać się sprytem!) tak, aby uzyskać postać

$$I|B.$$

   Cud polega na tym, że uzyskana w ten sposób macierz B to szukana macierz odwrotna,

$$B = A^{-1}.$$

2. **Diagonalizacja macierzy poprzez transformację unitarną.**

   Rozważ macierz
$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

   (a) Czy macierz jest hermitowska?

   (b) Oblicz $\det A$ i $\mathrm{Tr}A$.

   (c) Znajdź macierz A^{-1}.

   (d) Napisz równanie charakterystyczne macierzy A, znajdź wartości własne, λ_1, λ_2, λ_3, oraz odpowiadające im wektory własne v_1, v_2, v_3. Czy wektory własne wyznaczone są jednoznacznie?

   (e) Sprawdź jawnym rachunkiem, że wektory własne są ortogonalne. Jeśli jeszcze tego nie zrobiłeś, unormuj wektory do jedności.

   (f) Skonstruuj macierz diagonalizującą ustawiając obok siebie kolumnowe wektory własne, $U = (v_1 v_2 v_3)$. Czy ta macierz wyznaczona jest jednoznacznie? Sprawdź, jawnym rachunkiem, że macierz U jest unitarna, tj. $U^{-1} = U^\dagger$, czyli $U^\dagger U = UU^\dagger = I$.

   (g) Sprawdź, że $U^\dagger AU = \mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) \equiv \bar{A}$.

   (h) Sprawdź, używając wyników z pkt. 2b, że wyznacznik oraz ślad nie ulegają zmianie przy przekształceniu unitarnym, tj. $\det A = \det \bar{A} = \lambda_1\lambda_2\lambda_3$, $\mathrm{Tr}A = \det \bar{A} = \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3$.

3. **Przypadek zdegenerowany.**

   Powtórz wszystkie punkty powyższego zadanie dla macierzy
$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 \end{pmatrix}.$$

   Poprawny rachunek da dwukrotną wartość własną $\lambda = 2$ i jednokrotną $\lambda = -1$. Wyznacz podprzestrzeń odpowiadającą zdegenerowanej wartości własnej.

4. **Ważne!** Powtarzaj zad. 2, 3, szczególnie znajdowanie wartości i wektorów własnych, dla dowolnie wybranych *hermitowskich* macierzy 2×2 i 3×3 aż do uzyskania biegłości.

5. **Funkcje macierzy.**

   Funkcję macierzy definiujemy poprzez rozwinięcie Taylora, np.
$$e^A = 1 + A + \frac{A^2}{2!} + \frac{A^3}{3!} + \ldots.$$

   (a) Pokaż związek $U^\dagger e^A U = e^{U^\dagger AU} = e^{\bar{A}}$, gdzie $\bar{A} = U^\dagger AU$, z którego wynika użyteczna formuła
$$e^A = Ue^{\bar{A}}U^\dagger.$$

Oznacza to, że aby znaleźć e^A dla macierzu hermitowskiej wystarczy obliczyć $e^{\bar{A}}$, gdzie $\bar{A} = \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$, co daje w wyniku $e^{\bar{A}} = \mathrm{diag}(e^{\lambda_1}, \ldots, e^{\lambda_n})$, a następnie przeprowadzić transformację unitarną.

(b) Oblicz, co jest trywialne, $e^{\bar{A}}$, dla macierzy A z zad. 2. Z pomocą wykazanej wyżej formuły oblicz e^A.

(c) Podobnie oblicz e^{iA}, $\sin A$, oraz $\cos A$. Która z tych macierzy jest unitarna?

(d) Czy ma sens obliczenie $1/(1-A)$?

6. * **Inna metoda obliczania funkcji macierzy**.

Funkcje macierzy można też znajdować bezpośrednio z definicji, jest to jednak zazwyczaj znacznie bardziej czasochłonne niż metoda przekształcenia unitarnego (więc dla macierzy hermitowskich nie polecane!). Metoda polega na znalezieniu jawnego wzoru na A^n i wyliczeniu szeregu dla każdego elementu macierzy, tj. np.

$$\left(e^A\right)_{ij} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(A^n\right)_{ij} .$$

(a) Rozważ macierz A z zad. 2. Wypisz kilka pierwszych poteg A^n, $n = 0, 1, 2, 3, 4, 5, \ldots$ i zauważ prawidłowość.

(b) Sprawdź indukcyjnie, że dla $n = 2k$, $k = 0, 1, 2, 3 \ldots$, zachodzi

$$A^n = \begin{pmatrix} 2^{k-1}(2^k+1) & 2^{k-1}(2^k-1) & 0 \\ 2^{k-1}(2^k-1) & 2^{k-1}(2^k+1) & 0 \\ 0 & 0 & 2^k \end{pmatrix},$$

natomiast dla $n = 2k+1$ mamy

$$A^n = \begin{pmatrix} 2^{2k} & 2^{2k} & 2^k \\ 2^{2k} & 2^{2k} & -2^k \\ 2^k & -2^k & 0 \end{pmatrix}.$$

(c) Pokaż, że

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{a^k}{(2k)!} = \cosh(\sqrt{a})$$

(zastąp $2k$ przez $n = 0, 2, 4, 6, \ldots$).

(d) Z pomocą powyższych wzorów oblicz stosowne szeregi i porównaj z wynikiem zad. 5b.

7. **Użyteczny zwiazek.**

Dla dowolnej macierzy hermitowskiej A pokaż, że formalnie zachodzi związek

$$\log \det A = \mathrm{Tr} \log A.$$

8. **Jednoczesna diagonalizacja**

   Rozważ macierze

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

   (a) Pokaż jawnym rachunkiem, że $[A, B] = 0$. W związku z tym macierze A i B można zdiagonalizować tą samą transformacją unitarną.

   (b) Znajdź wspólne wektory własne macierzy A i B oraz macierz diagonalizującą U. Wskazówka: macierze A i B mają po jednym wektorze niezdegenerowanym. Wybierz te wektory jako dwa wektory własne, a trzeci skonstruuj z pomocą procedury Gramma-Schmidta.

   (c) Sprawdź, że istotnie $U^\dagger AU$ oraz $U^\dagger BU$ sa diagonalne.

   (d) Zauważ, że osobne diagonalizacje A tudzież B zawierają degenerację, natomiast łączna diagonalizacja A i B *usuwa degenerację*, tj. prowadzi do jednoznacznego (z dokładnością do fazy) wyznaczenia ortonormalnych wektorów własnych.

9. **Operatory rzutowe.**

   Wróć do zad. 2. Oznacz otrzymane wektory własne jako $|1\rangle$, $|2\rangle$ i $|3\rangle$.

   (a) Oblicz jawnie macierze $P_i = |i\rangle\langle i|$ dla $i = 1, 2, 3$.

   (b) Sprawdź jawnym rachunkiem, że $P_i P_i = P_i$.

   (c) Podobnie, sprawdź relację *zupełności* $P_1 + P_2 + P_3 = \sum_{i=1}^{3} |i\rangle\langle i| = I$.

   (d) Pokaż, że $P_i|j\rangle = \delta_{ij}|j\rangle$.

   (e) Pokaż, że $A = P_1\lambda_1 + P_2\lambda_2 + P_3\lambda_3$. Jest to tzw. *reprezentacja spektralna* macierzy A. Zgodnie z powyższymi własnościami, $A|i\rangle = \lambda_i|i\rangle$, jak oczywiście powinno być.

10. **Komutatory.**

    Udowodnij, że

    (a) $[A, BC] = B[A, C] + [A, B]C$,

    (b) $[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0$ (tożsamość Jacobiego).

11. **Przestrzeń z iloczynem skalarnym**

    Rozważ przestrzeń liniową V macierzy zespolonych 2×2 z iloczynem skalarnym zdefiniowanym jako

$$\langle a|b\rangle = \mathrm{Tr} a^\dagger b, \quad a, b \in V.$$

    (a) Sprawdź, że ta definicja spełnia aksjomaty iloczynu skalarnego.

    (b) Znajdź normę $\langle a|a\rangle$ dla macierzy a postaci

$$a = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 \\ a_3 & a_4 \end{pmatrix}.$$

(c) Wprowadź dowolna bazę ortonormalną $B = (e_1, e_2, e_3, e_4)$ w przestrzeni V. Pokaż, że w tej bazie elementy V można reprezentować jako czterowymiarowe wektory współczynników rozkładu w bazie B,

$$v = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \end{pmatrix},$$

gdzie $a = v_1 e_1 + v_2 e_2 + v_3 e_3 + v_4 e_4$. Niech również $b = w_1 e_1 + w_2 e_2 + w_3 e_3 + w_4 e_4$. Sprawdź, że

$$\langle a|b\rangle = v_1^* w_1 + v_2^* w_2 + v_3^* w_3 + v_4^* w_4,$$

co jest "zwykłym" iloczynem skalarnym wektorów v i w.

12. **Funkcyjna przestrzeń liniowa o przeliczalnej liczbie wymiarów. Szereg Fouriera.**

Rozważ przestrzeń funkcji ciągłych określonych na przedziale $x \in [0, \pi]$ i przyjmujących wartość 0 na obu jego krańcach. Iloczyn skalarny dwóch funkcji F i G zdefiniowany jest jako

$$\langle G|F\rangle = \int_0^\pi dx\, G^*(x) F(x).$$

(a) Pokaż, że taka przetrzeń jest przestrzenią liniową, oraz że podany iloczyn skalarny spełnia stosowne aksjomaty.

(b) Udowodnij, że zbiór funkcji $\langle x|n\rangle = f_n(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin nx$, $n = 1, 2, 3, \ldots$ jest ortonormalny. Można pokazać, że jest on również zupełny.

(c) Niech

$$g(x) = \begin{cases} x & 0 \le x \le \frac{\pi}{2} \\ \pi - x & \frac{\pi}{2} < x \le \pi \end{cases}.$$

Oblicz współczynniki $\langle n|g\rangle = \int_0^\pi dx\, f_n^*(x) g(x)$, następnie zapisz w sposób jawny szereg $g(x) = \sum_{n=1}^\infty \langle n|g\rangle f_n(x)$.

(d) Powtórz powyższy podpunkt dla funkcji $h(x) = x(\pi - x)$.

(e) Teraz możemy łatwo wyliczać pewne "trudne" szeregi. Używając związku zupełności $\langle g|g\rangle = \sum_{n=1}^\infty \langle g|n\rangle\langle n|g\rangle = \sum_{n=1}^\infty |\langle g|n\rangle|^2$ udowodnij, że

$$\sum_{k=0}^\infty \frac{1}{(2k+1)^4} = \frac{\pi^4}{96}.$$

Zrób to w następujący sposób: oblicz $\langle g|g\rangle = \int_0^\pi dx \langle g|x\rangle\langle x|g\rangle = \int_0^\pi dx g(x)^2$, co jest trywialne. Następnie porównaj ten wynik z szeregiem występującym po prawej stronie, $\sum_{n=1}^\infty |\langle g|n\rangle|^2$. Ponieważ tylko nieparzyste współczynniki są różne od zera, można podstawić $n = 2k + 1$.

(f) Postępujac analogicznie, jak w powyższym podpunkcie, rozważ $\langle g|h\rangle$ i $\langle h|h\rangle$ i wykaż, że

$$\sum_{k=0}^\infty \frac{(-1)^k}{(2k+1)^5} = \frac{5\pi^5}{1536}, \quad \sum_{k=0}^\infty \frac{1}{(2k+1)^6} = \frac{\pi^6}{960}.$$

2 Elementy teorii dystrybucji

1. **Realizacje delty Diraca.**

   (a) Pokaż, że rodzina tzw. funkcji Lorentza, $L(x; x_0, a) = \frac{a}{\pi}\frac{1}{(x-x_0)^2+a^2}$ aproksymuje w granicy $a \to 0$ funkcję $\delta(x - x_0)$, tj.

   $$\lim_{a\to 0}\int dx\, f(x)L(x; x_0, a) = f(x_0).$$

   (b) Powtórz powyższy punkt dla funkcji schodkowej

   $$H(x; x_0, a) = \begin{cases} 1/a, & x_0 - a/2 < x < x_0 + a/2 \\ 0, & x < x_0 - a/2 \text{ lub } x_0 + a/2 < x \end{cases},$$

   (c) .. i jeszcze raz dla funkcji

   $$S(x; x_0, R) = \frac{\sin[R(x - x_0)]}{\pi(x - x_0)},$$

   gdzie $R = \frac{1}{a} \to \infty$.

   (d) Naszkicuj schematycznie powyższe funkcje dla kilku coraz mniejszych wartości a.

   (e) Oblicz całkę

   $$\int_{-R}^{R}\frac{dk}{2\pi}e^{ikx}.$$

   Zauważ, że w granicy $R \to \infty$ przyjmuje ona postać z podpunktu (1c), a zatem uzyskujemy **bardzo ważny** wynik

   $$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dk}{2\pi}e^{ikx} = \delta(x).$$

   (f) Pokaż, że powyższy wzór wynika również ze złożenia transformaty Fouriera i odwrotnej transformaty Fouriera (Shankar 1.10.26).

2. **δ Diraca w większej liczbie wymiarów.**

   (a) Udowodnij, że w dwóch wymiarach przy przejściu do współrzędnych cylindrycznych

   $$\int dx\, dy\, \delta(x)\delta(y)f(x, y) = \int r dr\, d\phi\, \frac{\delta(r)}{2\pi r}f(r\cos\phi, r\sin\phi),$$

   skąd

   $$\delta(x)\delta(y) = \frac{\delta(r)}{2\pi r}.$$

   (b) Wyprowadź analogiczny wzór dla współrzędnych sferycznych w trzech wymiarach.

3. **Funkcja schodkowa Heaviside'a.**

Funkcja ta zdefiniowana jest jako

$$\theta(x) = \begin{cases} 1, & x \geq 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}$$

(a) Sprawdź, że dla $b > a$

$$\theta[(x-a)(b-x)] = \theta(b-x) - \theta(a-x) = \theta(b-x)\theta(x-a).$$

(b) Pokaż, że

$$\frac{d}{dx}\theta(x) = \delta(x)$$

Wskazówka: scałkuj powyższy wzór z dowolną funkcją $f(x)$ na przedziale $(-\infty, R]$, gdzie $R > 0$. Następnie skorzystaj z wzoru na całkowanie przez cześci, nie zapominając o członie powierzchniowym. Ustal granice całkowania, korzystając z definicji funkcji θ. Następnie wykonaj pozostałą całkę, co po uproszczeniu daje żądany wynik.

(c) Pokaż, że

$$\frac{d^2}{dx^2}|x| = 2\delta(x).$$