Chemia kwantowa B – zadania domowe

Zestaw 2. – odpowiedzi

Zadanie 1. Operatory podnoszenia ($\hat{L}_+$) i opuszczania ($\hat{L}_-$) momentu pędu zdefiniowane są zależnością

$$\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y. \tag{1.1}$$

Obliczyć komutator

$$[\hat{L}_+; \hat{L}_-]. \tag{1.2}$$

Rozwiązanie 1. Na ćwiczeniach wyznaczyliśmy komutator

$$[\hat{L}_x; \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z. \tag{1.3}$$

Korzystając z (1.3) i z własności komutatora obliczamy

$$[\hat{L}_+; \hat{L}_-] = [\hat{L}_x + i\hat{L}_y; \hat{L}_x - i\hat{L}_y] = \underbrace{[\hat{L}_x; \hat{L}_x]}_{0} - \underbrace{i[\hat{L}_x; \hat{L}_y]}_{-\hbar\hat{L}_z} + \underbrace{i[\hat{L}_y; \hat{L}_x]}_{-i[\hat{L}_x;\hat{L}_y]=\hbar\hat{L}_z} + \underbrace{[\hat{L}_y; \hat{L}_y]}_{0} = 2\hbar\hat{L}_z. \tag{1.4}$$

Zadanie 2. Znaleźć stałą normalizacyjną N funkcji ($\alpha > 0$)

$$\psi(x) = Ne^{-\alpha x^2} \tag{2.1}$$

w przestrzeni $\mathbb{R}$ oraz wyznaczyć wartość całki

$$\langle x \rangle = \langle \psi | \hat{x} | \psi \rangle. \tag{2.2}$$

Rozwiązanie 2. Całka z funkcji Gaussa wynosi

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2}\, dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}. \tag{2.3}$$

Z warunku normalizacji dostajemy

$$1 = \langle \psi | \psi \rangle = |N|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha x^2}\, dx = |N|^2 \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}}, \tag{2.4}$$

skąd w ogólności

$$N = \pm \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{i\varphi}. \tag{2.5}$$

Przyjmując dodatnią rzeczywistą wartość dla stałej N, znormalizowana funkcja ma postać

$$\psi(x) = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\alpha x^2}. \tag{2.6}$$

Obliczamy średnią wartość położenia cząstki opisanej funkcją falową ψ:

$$\langle x \rangle = |N|^2 \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-2\alpha x^2} = 0, \tag{2.7}$$

co jest oczywiste, jeśli zauważyć, że funkcja podcałkowa w wyrażeniu (2.7) jest nieparzysta.

Zadanie 3. Potęgowanie operatora zdefiniowane jest zależnością

$$e^{\hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^n}{n!} = \hat{1} + \hat{A} + \frac{\hat{A}^2}{2} + \frac{\hat{A}^3}{6} + \dots \tag{3.1}$$

Znając wartość komutatora

$$[\hat{A}; \hat{B}] = c, \tag{3.2}$$

obliczyć wartość komutatora $[e^{\hat{A}}; \hat{B}]$.
Wskazówka: skorzystać z zależności

$$[\hat{A}\hat{B}; \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}; \hat{C}] + [\hat{A}; \hat{C}]\hat{B}. \tag{3.3}$$

Rozwiązanie 3. Szukany komutator ma postać

$$\begin{aligned}[\hat{A}; \hat{B}] &= \left[\hat{1} + \hat{A} + \frac{\hat{A}^2}{2} + \frac{\hat{A}^3}{6} + \frac{\hat{A}^4}{24} \dots ; \hat{B}\right] = \\ &= \underbrace{[\hat{1}; \hat{B}]}_{0} + \underbrace{[\hat{A}; \hat{B}]}_{c} + \frac{1}{2}[\hat{A}^2; \hat{B}] + \frac{1}{6}[\hat{A}^3; \hat{B}] + \frac{1}{24}[\hat{A}^4; \hat{B}] + \dots\end{aligned} \tag{3.4}$$

Korzystając z zależności (3.3) obliczamy komutatory

$$[\hat{A}^2; \hat{B}] = \hat{A}\underbrace{[\hat{A}; \hat{B}]}_{c} + \underbrace{[\hat{A}; \hat{B}]}_{c}\hat{A} = 2c\hat{A}, \tag{3.5}$$

$$[\hat{A}^3; \hat{B}] = \hat{A}^2\underbrace{[\hat{A}; \hat{B}]}_{c} + \underbrace{[\hat{A}^2; \hat{B}]}_{2c\hat{A}}\hat{A} = 3c\hat{A}^2, \tag{3.6}$$

$$[\hat{A}^4; \hat{B}] = \hat{A}^3\underbrace{[\hat{A}; \hat{B}]}_{c} + \underbrace{[\hat{A}^2; \hat{B}]}_{3c\hat{A}^2}\hat{A} = 4c\hat{A}^3, \tag{3.7}$$

itd. Jak łatwo zauważyć, w ogólnym przypadku

$$[\hat{A}^n; \hat{B}] = nc\hat{A}^{n-1}. \tag{3.8}$$

Wstawiając (3.8) do (3.4) otrzymujemy

$$[\hat{A}; \hat{B}] = c + c\hat{A} + \frac{c\hat{A}^2}{2} + \frac{c\hat{A}^3}{6} + \dots = c\left(\hat{1} + \hat{A} + \frac{\hat{A}^2}{2} + \frac{\hat{A}^3}{6} + \dots\right) = ce^{\hat{A}}. \tag{3.9}$$