Opgaven bij het college Kwantummechanica 2
Week 1

Opgave 1: Verband tussen matrixelementen en verwachtingswaarden

Beschouw een lineaire operator $\hat{A}$. Bewijs het volgende: "als de verwachtingswaarden $\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$ bekend zijn voor alle mogelijke toestandsfuncties $|\psi\rangle$, dan zijn automatisch de matrixelementen $\langle\psi_1|\hat{A}|\psi_2\rangle$ bekend voor alle mogelijke toestandsfuncties $|\psi_1\rangle$ en $|\psi_2\rangle$."

Hint: probeer $\langle\psi_1|\hat{A}|\psi_2\rangle$ te schrijven als een lineaire combinatie van verwachtingswaarden voor $|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle$, $|\psi_1+\psi_2\rangle$ en $|i\psi_1+\psi_2\rangle$.

> *Gevolg: de verwachtingswaarden van een meetbare dynamische variabele $\mathcal{A}$ leggen de volledige werking van de bijbehorende operator $\hat{A}$ eenduidig vast! Hiermee is te bewijzen dat reële meetresultaten een hermitische $\hat{A}$ impliceren.*

Opgave 2: Commutator-algebra

Stel $\hat{A}$, $\hat{B}$ en $\hat{C}$ zijn drie lineaire operatoren. Laat zien dat geldt:

(i) $\big[\hat{A},\hat{B}\big] = -\big[\hat{B},\hat{A}\big]$.

(ii) $\big[\hat{A},\hat{B}+\hat{C}\big] = \big[\hat{A},\hat{B}\big] + \big[\hat{A},\hat{C}\big]$.

(iii) $\big[\hat{A},\hat{B}\hat{C}\big] = \big[\hat{A},\hat{B}\big]\,\hat{C} + \hat{B}\,\big[\hat{A},\hat{C}\big]$.

(iv) $\big[\hat{A},\big[\hat{B},\hat{C}\big]\big] + \big[\hat{B},\big[\hat{C},\hat{A}\big]\big] + \big[\hat{C},\big[\hat{A},\hat{B}\big]\big] = 0$.

Beschouw vervolgens de situatie van een deeltje dat zich langs de x-as beweegt. De relevante kanoniek geconjugeerde plaats- en impulsoperatoren zijn dan $\hat{x}$ en $\hat{p}_x \equiv \hat{p}$. Stel dat de operatoren $F(\hat{x},\hat{p})$ en $G(\hat{x},\hat{p})$ kunnen worden geschreven als

$$F(\hat{x},\hat{p}) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n(\hat{x})\,\hat{p}^{\,n} \qquad \text{en} \qquad G(\hat{x},\hat{p}) = \sum_{n=0}^{\infty} g_n(\hat{p})\,\hat{x}^{\,n} \,.$$

Leid dan de volgende twee identiteiten af die nog veelvuldig gebruikt gaan worden.

(v) Laat zien dat geldt $\big[\hat{x},F(\hat{x},\hat{p})\big] = i\hbar\,\dfrac{\partial}{\partial\hat{p}}\,F(\hat{x},\hat{p})$.

Hint: bewijs eerst met behulp van volledige inductie dat $\big[\hat{x},\hat{p}^{\,n}\big] = i\hbar n\,\hat{p}^{\,n-1}$ en gebruik vervolgens dat $\big[\hat{x},f_n(\hat{x})\big] = 0$.

(vi) Op analoge wijze kan worden bewezen dat $\big[\hat{p},\hat{x}^{\,n}\big] = -\,i\hbar n\,\hat{x}^{\,n-1}$. Laat dit bewijs achterwege, maar toon wel aan dat hieruit volgt dat $\big[\hat{p},G(\hat{x},\hat{p})\big] = -\,i\hbar\,\dfrac{\partial}{\partial\hat{x}}\,G(\hat{x},\hat{p})$.

Opgave 3: **Commuterende observabelen!!!**

Beschouw twee observabelen $\hat{A}$ en $\hat{B}$ die met elkaar commuteren, d.w.z. $\big[\hat{A},\hat{B}\big] = 0$. Neem verder aan dat beide observabelen discrete spectra hebben.

(i) Stel $|\psi_n\rangle$ is een eigenfunctie van $\hat{A}$ bij de eigenwaarde a_n.
Laat dan zien dat ook $\hat{B}|\psi_n\rangle$ een eigenfunctie is van $\hat{A}$ bij dezelfde eigenwaarde.

(ii) Leid hieruit af dat voor het speciale geval van een niet-ontaarde eigenwaarde a_n moet gelden dat $|\psi_n\rangle$ ook een eigenfunctie is van $\hat{B}$.

(iii) Stel $|\psi_k\rangle$ is een andere eigenfunctie van $\hat{A}$ bij de eigenwaarde $a_k \neq a_n$.
Bewijs rechtstreeks uit de commutatoridentiteit $\big[\hat{A},\hat{B}\big] = 0$ dat $\langle\psi_k|\hat{B}|\psi_n\rangle = 0$, hetgeen wil zeggen dat eigentoestanden van $\hat{A}$ bij verschillende eigenwaarden niet door $\hat{B}$ kunnen worden gemengd.

Opmerking: dit aspect zal nog uitgebreid gebruikt gaan worden bij de bespreking van de consequenties van symmetrieën in de QM.

(iv) Laat $\{|\psi_{n,r}\rangle,\ r = 1,\cdots,\alpha_n\}$ de orthonormale basis zijn van de α_n-dimensionale eigenruimte behorende bij de eigenwaarde a_n van $\hat{A}$. De matrix van de operator $\hat{B}$ wordt vervolgens binnen deze eigenruimte gediagonaliseerd door over te gaan op een nieuwe orthonormale basis $\{|\chi_{n,r}\rangle,\ r = 1,\cdots,\alpha_n\}$ waarvoor geldt

$$\langle\chi_{n,s}|\hat{B}|\chi_{n,r}\rangle \;=\; b_{nr}\,\delta_{rs} \qquad (b_{nr} \in \mathbb{R})\ .$$

Dit volgt uit een lineaire-algebra concept: binnen de eigenruimte behorende bij een ontaarde eigenwaarde zijn alle vectoren automatisch eigenvectoren, zodat de orthonormale basis in deze eigenruimte vrij te kiezen is!

- Leg uit dat de volgende relatie geldt:

$$\sum_{k\neq n}\sum_{s=1}^{\alpha_k} |\psi_{k,s}\rangle\langle\psi_{k,s}| \;+\; \sum_{s=1}^{\alpha_n} |\chi_{n,s}\rangle\langle\chi_{n,s}| \;=\; \hat{1}\ ,$$

  waarbij $\{|\psi_{k,s}\rangle,\ s = 1,\cdots,\alpha_k$ en $k \neq n\}$ de orthonormale bases zijn van de eigenruimten behorende bij de andere eigenwaarden $a_k \neq a_n$ van $\hat{A}$.
- Uitdaging: gebruik deze relatie en het matrixelement uit onderdeel (iii) om zo te bewijzen dat $\hat{B}|\chi_{n,r}\rangle = b_{nr}|\chi_{n,r}\rangle$, zodat $|\chi_{n,r}\rangle$ een eigenfunctie is van $\hat{A}$ en $\hat{B}$.
- Ben je dit procédé al eens tegengekomen?

Hiermee is bewezen: $\hat{A}$ *en* $\hat{B}$ *zijn commuterende observabelen*
$\Rightarrow$ $\exists$ *complete set van simultane eigenfuncties van de observabelen* $\hat{A}$ *en* $\hat{B}$.