Содержание

1. Квантовая механика

1.1. Билет 1

1.1.1 Понятие состояния

Квантовая система в силу своей малости не подчиняется законам классич. физики. В классике состояние системы – это набор параметров, которые полностью описывают эволюцию системы.

Однако, в квантовой физике будущее не детерминировано, так как координаты и импульсы не могут быть определены в каждый момент времени одновременно. Если квантово-механическая система в настоящий момент времени определена наиболее полновозможным образом, то поведение системы в следующий момент времени принципиально неоднозначно. Состояние квантово-механической системы - это набор параметров, которые дают наиболее полную информацию о квантово-механической системе.

В нотации Дирака вектор состояния будет $|\Psi>$ (абстрактный вектор, не привязанный к системе координат).

1.1.2 Волновая функция и её физический смысл

Волновая функция Ψ - это комплексная функция, которая описывает состояние квантово-механической системы, и является коэффициентом разложения квантового состояния по базису. Если базис координатный, то это функция $\Psi(x,t)$, аргументами которой являются координаты (м.б. обобщенные), так называемое «x-представление». Аналогично есть импульсное $\Psi(p,t)$ p-представление.

Физ.смысл имеет $|\Psi|^2$ – плотность вероятности.

1.1.3 Как вычислить распределение вероятности какой либо физической величин

$|\Psi(x,t)|^2$ есть плотность вероятности нахождения частицы в координате x (в одномерном пространстве), $|\Psi(p,t)|^2$ плотность вероятности нахождения импульса частицы в p. Каждой наблюдаемой (физической) величине в квантовой физике соответствует свое представление волновой функции.

1.1.4 Преобразования операторов и векторов состояний. Унитарные операторы – операторы сохраняющие ортонормированность.

1.1.5 Задача (отнормировать/нарисовать $\psi(x) = (1 + e^{i\pi/4})/\sqrt{x^2 + a^2}$)

Дана ненормированная волновая функция $\psi(x)$:

$$\psi(x) = \frac{1 + e^{i\pi/4}}{\sqrt{x^2 + a^2}}$$

Отнормируйте и нарисуйте график плотности вероятности величины x.

Решение. Множитель без «x» может быть отброшен (так как домножение на комплексную константу не изменяет ненормированную волновую функцию).

Тогда задача сводится к нормировке следующей функции:

$$\psi'(x) = \frac{1}{\sqrt{x^2 + a^2}}, \qquad \psi_0 = c\psi(x)$$

Предположим, что наша функция есть произведение нормированной ψ_0 на произвольную константу c, найдем ее из условия нормировки:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_0(x)|^2 dx = c^2 \int_{-\infty}^{\infty} |\psi'(x)|^2 dx = 1$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi'(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{x^2 + a^2} dx = \frac{1}{a} \operatorname{atan} \frac{x}{a} \Big|_{-\infty}^{\infty} = \frac{1}{a}(\frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{2}) = \frac{\pi}{a}$$

Тогда $c^2 = \frac{1}{\pi/a} = \frac{a}{\pi} \Rightarrow c = \sqrt{\frac{a}{\pi}}$.

Мы нашли нормированную функцию:

$$\psi_0 = \sqrt{\frac{a}{\pi}} \frac{1}{\sqrt{a^2 + x^2}}, \qquad |\psi_0|^2 = \frac{a}{\pi(a^2 + x^2)}$$

Колокообразный вид функции $|\psi_0|^2$ легко нарисовать, если учесть, что 1) она всегда положительна 2) имеет максимум там, где корень имеет минимум (т.е. в точке $x = 0$, тогда максимум равен $\frac{1}{\pi a}$).

1.2. Билет 2

1.2.1 Уравнение Шредингера. Вывод перехода к классике с появлением уравнения Гамильтона-Якоби

Нестационарное уравнение Шредингера $i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$. Будем искать его решение в виде $\psi = Ae^{i\Theta}$:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = i\hbar\frac{\partial A}{\partial t}e^{i\Theta} - \hbar A\frac{\partial\Theta}{\partial t}e^{i\Theta}$$

Учтем, что

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(r) = \frac{(-i\hbar\nabla)^2}{2m} + U(r) = \frac{-\hbar^2}{2m}\Delta + U(r)$$

и

$$\begin{gathered}\Delta\psi = \nabla^2\left[A\cdot e^{i\Theta}\right] = \nabla\left[\nabla A\cdot e^{i\Theta} + iA\nabla\Theta\cdot e^{i\Theta}\right] = \nabla\left[\nabla A\cdot e^{i\Theta}\right] + \nabla\left[iA\nabla\Theta\cdot e^{i\Theta}\right] = \\ = \left[\Delta A\cdot e^{i\Theta} + i\nabla A\nabla\Theta\cdot e^{i\Theta}\right] + i\left[\nabla A\nabla\Theta + A\Delta\Theta + iA\nabla\Theta\nabla\Theta\right]e^{i\Theta} = \\ = \left[\Delta A + i\nabla A\nabla\Theta + i\nabla A\nabla\Theta + iA\Delta\Theta - A(\nabla\Theta)^2\right]e^{i\Theta} = \\ = \left[\Delta A + 2i\nabla A\nabla\Theta + iA\Delta\Theta - A(\nabla\Theta)^2\right]e^{i\Theta}\end{gathered}$$

Тогда нестационарное уравнение Шредингера принимает вид:

$$i\hbar\frac{\partial A}{\partial t} - \hbar A\frac{\partial\Theta}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\Delta A + 2i\nabla A\nabla\Theta + iA\Delta\Theta - A(\nabla\Theta)^2 + A\cdot U(r)\right]$$

Разделим в нем реальные и мнимые части:

$$\begin{gathered}i\hbar\frac{\partial A}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}(2i\nabla A\nabla\Theta + iA\Delta\Theta) \\ -\hbar A\frac{\partial\Theta}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\Delta A - A(\nabla\Theta)^2\right) + A\cdot U(r)\end{gathered}$$

Работаем в приближении $\Delta A \ll (\nabla\Theta)^2$:

$$\begin{gathered}-\hbar A\frac{\partial\Theta}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(A(\nabla\Theta)^2\right) + A\cdot U(r) \quad \Big| : A \\ -\hbar\frac{\partial\Theta}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m}(\nabla\Theta)^2 + U(r)\end{gathered}$$

Воспользуемся соотношениями де-Бройля $S = \hbar\Theta$, $\nabla S = \vec{p}$:

$$\begin{gathered}\frac{\partial\Theta}{\partial t} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial S}{\partial t}, \qquad \nabla\Theta = \nabla S\frac{1}{\hbar} = \frac{\vec{p}}{\hbar} \\ -\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{p^2}{\hbar^2} + U(\vec{r}) = \frac{p^2}{2m} + U(\vec{r}) = H\end{gathered}$$

Окончательно получаем уравнение Гамильтона-Якоби:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H = 0$$

1.2.2 Оператор в конкретном представлении. Матрица оператора.

В случае, когда спектр оператора является дискретным, возникают матричные представления. Пусть

$$\hat{H}\left|n\right\rangle = E_n \left|n\right\rangle, \ \left|n\right\rangle \underset{def}{=} \left|\psi_n\right\rangle,$$

где $n = 0, 1, 2, \ldots$- индекс состояний дискретного спектра. Из условия полноты

$$\sum_n \left|n\right\rangle \left\langle n\right| = 1$$

следует, что произвольный вектор состояния $\left|\psi\right\rangle$ может быть разложен по собственным векторам $\left|n\right\rangle$ следующим образом:

$$\left|\psi\right\rangle = \sum_n \left|n\right\rangle \left\langle n|\psi\right\rangle$$

Волновая функция $\left\langle n|\psi\right\rangle$ в данном n- представлении является столбцом

$$\left\langle n|\psi\right\rangle = \begin{bmatrix} \left\langle 1|\psi\right\rangle \\ \left\langle 2|\psi\right\rangle \\ \left\langle 3|\psi\right\rangle \\ \ldots \end{bmatrix}$$

Операторы в n-представлении являются матрицами

$$\langle n|\hat{A}|\psi\rangle = \sum_{n'} \langle n|\hat{A}|n'\rangle \left\langle n'|\psi\right\rangle =$$

$$\sum_{n'} A_{nn'} \left\langle n'|\psi\right\rangle = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \ldots \\ A_{21} & A_{22} & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \left\langle 1|\psi\right\rangle \\ \left\langle 2|\psi\right\rangle \\ \ldots \end{bmatrix}$$

Рассмотрим условие эрмитовости оператора $\hat{F}$. По определению,

$$\langle n|\hat{F}|n'\rangle = \left\langle \hat{F}^+ n \middle| n' \right\rangle = \langle n'|\hat{F}^+|n\rangle^*.$$

В матричных обозначениях это переписывается так:

$$F_{nn} = \left(F^+\right)^*_{nn'},$$

или

$$\left(F^+\right)_{n'n} = \left(F_{n'n}\right)^* = \left(F^T\right)^*_{nn'}.$$

Таким образом, оператор эрмитов, то есть $\hat{F} = \hat{F}^+$, то

$$F = \left(F^T\right)^* \underset{def}{=} F^+.$$

Следовательно, эрмитовым операторам соответствуют эрмитовые матрицы.

Найдем результат последовательного действия операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$.

$$\langle n|\hat{A}\hat{B}|n'\rangle = \sum_{n''} \langle n|\hat{A}|n''\rangle \, \langle n''|\hat{B}|n'\rangle = \sum_{n''} A_{nn''}B_{n''n'}$$

Таким образом, матрица оператор, равного произведению операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$, равна произведению матриц, соответствующих этим операторам.

1.2.3 Задача. Отнормировать/нарисовать $\psi(x) = 1/\cosh(\alpha(x - x_0))$

Дана ненормированная волновая функция $\psi(x)$:

$$\psi(x) = \frac{1}{\cosh(\alpha(x - x_0))}$$

Отнормируйте и нарисуйте график плотности вероятности величины x.

Решение. Предположим, что наша функция есть произведение нормированной ψ_0 на произвольную константу c, найдем ее из условия нормировки:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_0(x)|^2 dx = c^2 \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \cosh^{-2}(\alpha(x - x_0))dx =$$
$$\left[y = \alpha(x - x_0), dx = \frac{dy}{\alpha}\right] =$$
$$= \frac{1}{\alpha}\int_{-\infty}^{\infty} \cosh^{-2} y dy = \frac{4}{\alpha}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{(e^y + e^{-y})^2} dy =$$
$$\left[e^y = t, dy = \frac{dt}{t}, t(y = -\infty) = 0, t(y = \infty) = \infty\right] =$$
$$= \frac{4}{\alpha}\int_0^{\infty} \frac{1}{t(t + 1/t)^2} dt = \frac{4}{\alpha}\int_0^{\infty} \frac{t}{(t^2 + 1)^2} dt = \frac{2}{\alpha}\int_0^{\infty} \frac{d[t^2]}{(t^2 + 1)^2} dt = \frac{2}{\alpha}\int_0^{\infty} \frac{d[t^2 + 1]}{(t^2 + 1)^2} dt =$$
$$= -\frac{2}{\alpha}\frac{1}{(t^2 + 1)}\bigg|_0^{\infty} = \frac{2}{\alpha}$$

Тогда $c^2 = \frac{\alpha}{2} \Rightarrow c = \sqrt{\frac{\alpha}{2}}$.

Мы нашли нормированную функцию:

$$\psi_0 = \sqrt{\frac{\alpha}{2}} \frac{1}{\cosh^2(\alpha(x - x_0))}, \qquad |\psi_0|^2 = \frac{\alpha}{2} \frac{1}{\cosh(\alpha(x - x_0))}$$

Колокообразный вид функции $|\psi_0|^2$ легко нарисовать, если учесть, что 1) она всегда положительна 2) имеет максимум там, где cosh имеет минимум (т.е. в точке $x = x_0$, тогда максимум равен $\frac{\alpha}{2}$).

1.3. Билет 3

1.3.1 Сохранение вероятности уравнением Шредингера

1.3.2 Собственные функции и собственные значения. Понятие представления

Пусть $\hat{A}$ – оператор, соотвествущий наблюдаемой (физической) величине. $\exists$ операторное уравнение $\hat{A}\Psi = a\Psi$, где a - неизвестная комплексная величина. $\exists\psi_n$ – решения операторного уравнения (собственные функции) и соотвествущие им a_n (собственные числа).

Спектр a_n может быть как непрерывным, так и дискретным, и отвечает единственно возможным исходам эксперимента, например уровни энергии E_n дискретного спектра атома.

1.3.3 Разложение вф по собств. функциям какого-либо оператора

ψ_n – волновая функция (состояние системы), соотвествущее a_n. $\{\psi_n\}$ составляет базис в Гильбертовом пространстве, и в силу этого любую волновую функцию можно разложить в обобщенный ряд Фурье для дискретного спектра (или интеграл, если спектр непрерывный):

$$\Psi = \sum_n C_n\psi_n, \quad \text{или} \quad \Psi = \int C(a)\psi(a)da$$

В этом ряде $|C_n|^2$ есть вероятность того, что квантовая система с волновой функцией Ψ находится в состоянии ψ_n (принцип суперпозиции). Аналогично в интеграле $|C(a)|^2$ есть плотность вероятности нахождния системы в $[\Psi(a), \Psi(a + da)]$.

Заметим, что здесь мы работали в a - представлении: раскладывали вф по собств. функциям оператора $\hat{A}$ и полученная функция описывает вероятностный характер в пространстве a.

Примечание(не для ответа). Что такое операторное уравнение, его собственные числа и функции. Рассмотрим ДУ

$$\frac{d}{dx}y = ay \quad \Longleftrightarrow \quad \hat{A}y = ay$$

Здесь оператор $\hat{A} = \frac{d}{dx}$ – оператор дифференцирования, a – собственные числа оператора, $y = e^{ax}$ – собственные функции оператора. Здесь спектр a непрерывен.

1.3.4 Задача. Отнормировать/нарисовать $\psi(x) = \Theta(x + L/2) + \Theta(x - L/2)$

Дана ненормированная волновая функция $\psi(x)$:

$$\psi(x) = \psi(x) = \Theta\left(x + \frac{L}{2}\right) - \Theta\left(x - \frac{L}{2}\right)$$

Отнормируйте и нарисуйте график плотности вероятности величины x.

Решение. Предположим, что наша функция есть произведение нормированной ψ_0 на произвольную константу $\frac{1}{c}$, найдем ее из условия нормировки:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_0(x)|^2 dx = c^2 \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$$
$$c^2 \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = c^2 L \quad \Rightarrow \quad c = \frac{1}{\sqrt{L}}$$

Мы нашли нормированную функцию:

$$\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{L}}\left(\Theta\left(x + \frac{L}{2}\right) - \Theta\left(x - \frac{L}{2}\right)\right)$$

$|\psi_0|^2$ имеет вид прямоугольника, высота его $\frac{1}{L}$, ширина от $-L/2$ до $L/2$.

1.4. Билет 4

1.4.1 Вывести соотношения действия/гамильтониана/импульса ($\nabla S = \vec{p}, \frac{\partial S}{\partial t} = -H$)

$$S[q,t] \underset{def}{=} \int\limits_{t}^{t_f} L(q, \dot{q}, t)\, \mathrm{d}t$$

L-функция Лагранжа.

$$\delta S = \int \left[\frac{\partial L}{\partial q} \cdot \delta q + \frac{\partial L}{\partial q} \delta \dot{q}\right] \mathrm{d}t =$$
$$\left\{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{L}{\dot{q}}\delta q\right) = \frac{\partial L}{\partial q}\delta \dot{q} + \delta \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right)\right\}$$
$$\left\{\frac{\partial L}{\partial q}\delta \dot{q} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\delta q\right) - \delta q \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right)\right\}$$
$$= \int \left[\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right)\right] \delta q \mathrm{d}t + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\delta q \bigg|_{t}^{t_f} =$$
$$\int \left[\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right)\right] \delta q \mathrm{d}t = 0$$

Значит
$$\frac{\partial L}{\partial q}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot q}\right)=0$$
$$L=p\cdot\dot q-H,\ p\underset{def}{=}\frac{\partial L}{\partial \dot q}$$
Рассмотрим $S[q,t]$ не как функционал а как функцию верхнего и нижнего предела, то есть $S[q_i,t_i'q_f,t_f]$

$$\delta S=p\delta q+\int\left[\frac{\partial L}{\partial q}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot q}\right)\right]\delta q\mathrm{d}t$$
$$p=\frac{\delta S}{\delta q}$$

Если обобщенных координат много, то $\frac{\partial S}{\partial q_i}=p_i$. Значит $\nabla S=\vec{p}$.

$$\begin{cases}\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}t}=L=p\cdot\dot q-H\\ \frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}t}=\frac{\partial S}{\partial q}\dot q+\frac{S}{t}\end{cases}\Bigg|\Longrightarrow\frac{\partial S}{\partial t}=-H$$

1.4.2 Чему равно среднее физической величины A. Определение через волновую функцию в x – представлении, некотором B представлении, и A представлении

Вариант Ильи:

$$\langle A\rangle=\int\limits_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(x)\hat A\Psi(x)\,\mathrm{d}x-\ \text{квантово-механическое усреднение}$$

Через произвольные функции в x- представлении

$$\langle A\rangle=\int\limits_{-\infty}^{\infty}A|\Psi(A)|^2\,\mathrm{d}A-\ \text{вероятность того, что система принимает состояние}\Psi(A)$$
$$\text{в промежутке}\,\mathrm{d}A$$

$$\langle A\rangle=\int\limits_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(B)\hat A\Psi(B)\,\mathrm{d}B-\text{среднее в некотором представлении },$$
$$\hat A-\text{оператор в B представлении}$$

Вариант Ани:

По определению среднего:

$$\bar{A} = \sum_n C_m |C_n|^2 = \sum_n a_n C_n C_n^*$$

$$\bar{A} = \sum_n a_n \int \Psi(x') \Psi_n^*(x') \, \mathrm{d}x' \int \Psi^*(x') \Psi_n(x') \, \mathrm{d}x' =$$
$$\int \Psi^*(x') \sum_n a_n \Psi_n^*(x') \Psi_n(x') \Psi(x') \, \mathrm{d}x \, \mathrm{d}x' =$$
$$\left\{ K(x, x') = \sum_n a_n \Psi_n^*(x'') \Psi(x') - \text{ядро оператора} \right\}$$
$$= \int \Psi^*(x') K(x, x') \Psi(x') \, \mathrm{d}x \, \mathrm{d}x' = \int \Psi^*(x) \hat{A} \Psi(x) \, \mathrm{d}x$$

$$\hat{A}\Psi(x) = \int K(x, x') \Psi(x') \, \mathrm{d}x'$$

$$\bar{\hat{A}} = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle$$

– определение через волновую функцию в x- представлении.

Пусть есть оператор $\hat{B}$

$$\hat{B}\phi_n(x) = b_n \phi_n(x)$$

$$\phi(x) = \sum_n C_n \phi_n(x)$$
$$\phi^*(x) = \sum_m C_m^* \phi_m^*(x)$$

$$\bar{A} = \int \sum_{n,m} C_m^* C_n (\phi_m^* \hat{A} \phi_n) \, \mathrm{d}x = \sum_{n,m} C_m^* C_n A_{mn}$$

$$\bar{\hat{A}} = \sum_{n,m} C_m^* C_n A_{mn}$$

– определение через B-представление

$$\hat{A}\Psi_n(x) = a_n \Psi_n(x)$$

Скалярно умножим на $\Psi_m^*(x)$

$$\langle \Psi_m | \hat{A} | \Psi_n \rangle = a_m \langle \Psi_m | \Psi_n \rangle = a_m \delta_{mn} = A_{mn}$$

$$\bar{A} = A_{mn}$$

– в собственном представлении.

1.4.3 Задача. Эксп. регуляризацией доказать $\frac{1}{2\pi}\int \exp(-k(x-x'))dk = \delta(x-x') +$ на языке Дирака + две интерп.

1.5. Билет 5

1.5.1 Напишите соотношение де-Бройля

1.5.2 Представление Гейзенберга. Уравнения Гейзенберга

$$\bar{\hat{H}} = \langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle$$

-представление Шредингера

В представлении Гейзенберга:

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t)\,|\Psi(0)\rangle\,,$$

где $\hat{U}(t) = \exp\{-i\frac{H}{\hbar}\}t$- оператор эволюции.

Здесь $\Psi(0)$- е зависит от времени.

Но $\hat{A}^{\Gamma}(t)$ - зависит от времени.

Найдем связь $\hat{A}^{\text{Ш}}$ и $\hat{A}^{\Gamma}$

$$\bar{\hat{A}} = \langle\Psi(0)|\,\hat{U}^{-1}\hat{A^{\text{Ш}}}\hat{U}\,|\Psi(0)\rangle$$

Оператор эволюции унитарен, то есть $\hat{U}^{+} = \hat{U}^{-1}$

$$\langle\Psi(t) = \langle\Psi(0)||\,\hat{U}^{+} = \left\langle\Psi(0)\hat{U}^{-1}\right|$$

Значит

$$\hat{A}^{\,\Gamma} = \hat{U}^{-1}\hat{A}^{\text{Ш}}\,\hat{U}$$

– оператор Гейзенберга.

$$\hat{U} = \exp\left\{-\frac{\hat{H}}{\hbar}t\right\},\;\hat{U}^{-1} = \exp\left\{\frac{\hat{H}}{\hbar}t\right\}$$

$$\hat{\dot{A}}^{\,\Gamma} = \hat{\dot{U}}^{-1}\hat{A}^{\,\text{Ш}}\,\hat{U} + \hat{U}^{-1}\hat{A}^{\,\text{Ш}}\,\hat{\dot{U}} + \hat{U}^{-1}\frac{\partial \hat{A}^{\text{Ш}}}{\partial t}\hat{U} =$$
$$+\frac{i}{\hbar}\hat{H}\hat{\dot{U}}^{-1}\hat{A}^{\text{Ш}}\hat{U} + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)\hat{U}^{-1}\hat{A}^{\text{Ш}}\hat{\dot{U}}\hat{H} + \frac{\partial \hat{A}^{\Gamma}}{\partial t} =$$
$$\frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}\hat{A}^{\Gamma} - \hat{A}^{\Gamma}\hat{H}\right) + \frac{\partial \hat{A}^{\Gamma}}{\partial t}$$

Отсюда получаем

$$\hat{\dot{A}}^{\Gamma} = \frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}\hat{A}^{\Gamma} - \hat{A}^{\Gamma}\hat{H}\right) + \frac{\partial \hat{A}^{\Gamma}}{\partial t}$$

– уравнение Гейзенберга

Если вместо $\hat{A}^{\text{Ш}}$ подставить $H^{\text{Ш}}$ (при этом $\hat{H} = \hat{H}^{\text{Ш}}$), то

$$\hat{H}^{\Gamma} = \exp\left\{-\frac{\hat{H}}{\hbar}t\right\}\hat{H}\exp\left\{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t\right\} = \hat{H}$$

Следовательно, $H^{\text{Ш}} = H^{\Gamma}$

1.5.3 Докажите, что $\int\limits_{-\infty}^{\infty} p|\Psi(p)|^2\,\mathrm{d}p = \int\limits_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(x)\{-i\hbar\nabla\}\Psi(x)\mathrm{d}x$

Доказательство

$$\widetilde{p}\Psi(x) = \int\limits_{-\infty}^{\infty}\alpha(p)\widetilde{p}\phi_p(x,p)\,\mathrm{d}p = \int\limits_{-\infty}^{\infty}\alpha(p)p\phi_p(x,p)\,\mathrm{d}p$$

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(x)\mathrm{d}x\int\limits_{-\infty}^{\infty}\alpha(p)p\phi_p(x,p)\mathrm{d}p = \int\limits_{-\infty}^{\infty}\alpha(p)p\mathrm{d}p\int\limits_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(x)\phi_p(x,p)\,\mathrm{d}x =$$
$$\int\limits_{-\infty}^{\infty}\alpha(p)\alpha^*(p)p\mathrm{d}p\cdot\int\limits_{-\infty}^{\infty}\phi_p(x,p)\phi_p^*(x,p)\mathrm{d}x = \int\limits_{-\infty}^{\infty}|\alpha(p)|^2p\cdot|\phi_p|^2\mathrm{d}p$$

Переобозначим $|\alpha(p)| = |\Psi(p)|$, а также выберем $|\Psi_p|^2 = 1$

И окончательно получим:

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty}|\Psi(p)|^2p\mathrm{d}p = \int\limits_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(x)\hat{p}\Psi(x)\mathrm{d}x$$

□

1.6. Билет 6

1.6.1 Операторы физических величин. Какие значения может принимать физическая величина

1.6.2 Оператор производной физической величины по времени

$$\bar{A} = \langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle$$

Определение: $\bar{\dot{x}} = \dot{\bar{x}}$, где $\dot{x}$- оператор производной по времени.

В общем случае оператор $\hat{A}$ может зависеть от времени. Тогда

$$\dot{\hat{A}} = \left\langle\dot{\Psi}\middle|\hat{A}\middle|\Psi\right\rangle + \left\langle\Psi\middle|\hat{A}\middle|\dot{\Psi}\right\rangle + \langle\Psi|\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}|\Psi\rangle$$

Когда $\hat{A} = \hat{H}$, то нет зависимости от времени оператора, но при этом среднее от времени будет зависеть

$$\dot{\bar{x}} = \left\langle\dot{\Psi}\middle|\hat{x}\middle|\Psi\right\rangle + \left\langle\Psi\middle|\hat{x}\middle|\dot{\Psi}\right\rangle$$

Тогда

$$\left|\dot{\Psi}\right\rangle = \frac{1}{i\hbar}\hat{H}\left|\Psi\right\rangle$$
$$\left|\Psi^{+}\right\rangle = \langle\Psi|$$
$$(\hat{H}\left|\Psi\right\rangle)^{+} = \langle\Psi|\,\hat{H}^{+}$$

Тогда

$$\left\langle\dot{\Psi}\right| = -\frac{1}{i\hbar}\langle\Psi|\,\hat{H}^{+}$$

Учтем, что $\hat{H}^{+} = \hat{H}$

$$\dot{\bar{x}} = \frac{i}{\hbar}\Big(\langle\Psi|\hat{H}\hat{x}|\Psi\rangle - \langle\Psi|\hat{x}\hat{H}|\Psi\rangle\Big) = \frac{i}{\hbar}\langle\Psi|\Big(\hat{H}\hat{x} - \hat{x}\hat{H}\Big)|\Psi\rangle = \bar{\dot{x}}$$
$$\dot{\hat{x}} = \hat{H}\hat{x} - \hat{x}\hat{H} = \hat{V}_x$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)$$

$U(x)x - xU(x) = 0$- U и x коммутируют.

$$\hat{V}_x = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}x - x\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\Psi = -\frac{i\hbar}{2m}\{x\Psi'' + \Psi' + \Psi' - x\Psi''\}$$
$$= -\frac{i\hbar}{m}\frac{\partial}{\partial x}\Psi = \frac{\hat{p}}{m}\Psi$$

Следовательно $\hat{V}_x = \frac{\hat{p}}{x}$

1.6.3 Задача. $\Psi(x)=\Theta(x+L/2)-\Theta(x-L/2)$. Нормировать, перейти $\Psi(x)\to\Psi(p)$. Найти связь ширины в x и p представлениях

Дана ненормированная волновая функция $\Psi(x)$:

$$\Psi(x)=\Psi(x)=\Theta\left(x+\frac{L}{2}\right)-\Theta\left(x-\frac{L}{2}\right)$$

Нормировка. Предположим, что наша функция есть произведение нормированной ψ_0 на произвольную константу $\frac{1}{c}$, найдем ее из условия нормировки:

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\Psi_0(x)|^2dx=c^2\int_{-\infty}^{\infty}|\Psi(x)|^2dx=1$$
$$c^2\int_{-\infty}^{\infty}|\Psi(x)|^2dx=c^2L\quad\Rightarrow\quad c=\frac{1}{\sqrt{L}}$$

Мы нашли нормированную функцию:

$$\Psi_0=\frac{1}{\sqrt{L}}\left(\Theta\left(x+\frac{L}{2}\right)-\Theta\left(x-\frac{L}{2}\right)\right)$$

$|\Psi_0|^2$ имеет вид прямоугольника, высота его $\frac{1}{L}$, ширина от $-L/2$ до $L/2$.

Переход и связь ширин. Переход в p-предст:

$$\Psi(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_0(x)e^{\frac{-ipx}{\hbar}}dx=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar L}}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\Theta\left(x+\frac{L}{2}\right)-\Theta\left(x-\frac{L}{2}\right)\right)e^{\frac{-ipx}{\hbar}}dx=$$
$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar L}}\int_{-L/2}^{+\infty}e^{\frac{-ipx}{\hbar}}dx-\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar L}}\int_{L/2}^{+\infty}e^{\frac{-ipx}{\hbar}}dx=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar L}}\int_{-L/2}^{+L/2}e^{\frac{-ipx}{\hbar}}dx=$$
$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar L}}\frac{\hbar}{(-ip)}e^{\frac{-ipx}{\hbar}}\Big|_{-L/2}^{L/2}=\frac{2\hbar L}{pL\sqrt{2\pi\hbar L}}\sin\frac{pL}{2\hbar}=\frac{L}{\sqrt{2\pi\hbar L}}\operatorname{sinc}\frac{pL}{2\hbar}=\sqrt{\frac{L}{h}}\operatorname{sinc}\frac{pL}{2\hbar}$$

Характерная ширина синка – это ширина первого лепестка:

$\frac{pL}{2\hbar}=\pi$ – первый ноль синка, значит ширина лепестка это расстояние между симметричными нулями: $\Delta p=2p=\frac{2h}{L}$

Учтя, что у нашей вф $\Delta x=L$, окончательно получим:

$$\Delta x\Delta p=2h$$

Верно, соответствует принципу неопределенности с точностью до постоянного множителя.

Выбирая другую характерную ширину синка, больше чем первый лепесток, получим

$$\Delta x\Delta p\geq 2h$$

1.7. Билет 7

1.7.1 Нахождения волновой функции по данным одного из представлений

Найдите $\Psi(p)$ по данным $\Psi(x)$. Найдите связь ширины в x и p представлениях. Сначала найдите нормировочный множитель $\Psi(x) = \exp\{-u|x|\}$

$\Psi_0(x) = C\Psi(x)$ - нормировочная функция.

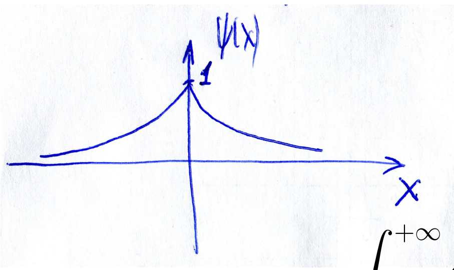


Рис. 1

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi_0(x)| dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x)|^2 C^2 dx = 1$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2u|x|} dx = \int_{-\infty}^{0} e^{2ux} dx + \int_{0}^{+\infty} e^{-2ux} dx = \frac{1}{u}$$

$$\frac{C^2}{u} = 1 \Longrightarrow C = \sqrt{u}$$

$$\Psi_0(x) = \sqrt{u}\exp\{-u|x|\}$$

$$\Psi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_0(x) e^{\frac{-ipx}{\hbar}} dx = \frac{\sqrt{u}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-u|x|} e^{\frac{-ipx}{\hbar}} dx =$$
$$\sqrt{\frac{u}{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(u|x|+\frac{ipx}{\hbar})} dx$$

Когда $x > 0$:

$$\int_{0}^{+\infty} e^{-(ux+\frac{-ipx}{\hbar})} dx = \int_{0}^{+\infty} e^{-x(u+\frac{ip}{\hbar})} dx = -\frac{1}{u+\frac{ip}{\hbar}} e^{-x(u+\frac{ip}{\hbar})}\Big|_{0}^{+\infty} = \frac{\hbar}{\hbar u + ip}$$

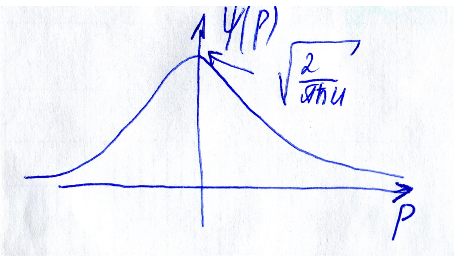
Когда $x < 0$:

$$\int_{-\infty}^{0} e^{-(-ux+\frac{-ipx}{\hbar})} dx = \int_{-\infty}^{0} e^{-x(-u+\frac{ip}{\hbar})} dx = -\frac{1}{-u+\frac{ip}{\hbar}} e^{-x(-u+\frac{ip}{\hbar})}\Big|_{-\infty}^{0} = -\frac{\hbar}{-\hbar u + ip}$$

$$\frac{\hbar}{\hbar u + ip} - \frac{\hbar}{-\hbar u + ip} = \ldots = \frac{2\hbar^2 u}{p^2 + \hbar^2 u^2}$$

$$\Psi(p) = \sqrt{\frac{u}{2\pi\hbar}} \cdot \frac{2\hbar^2 u}{p^2 + \hbar^2 u^2}$$

Ширина находится на уровне половины от максимума.



$$\Psi(p=0) = \sqrt{\frac{2}{u\pi\hbar}}$$

Рис. 2

$$\Psi(p) = \sqrt{\frac{u}{2\pi\hbar}} \cdot \frac{2\hbar^2 u}{(1+\frac{p^2}{\hbar^2 u^2})\hbar^2 u^2}$$

$$= \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar u}} \cdot \frac{2}{(1+\frac{p^2}{\hbar^2 u^2})} =$$

$$\sqrt{\frac{2}{u\pi\hbar}} \cdot \frac{1}{(1+\frac{p^2}{\hbar^2 u^2})} = \Psi(p=0) \cdot \frac{1}{(1+\frac{p^2}{\hbar^2 u^2})}$$

$$\Psi(p^*) = \frac{\Psi(p=0)}{2}$$

$$\frac{1}{(1+\frac{p^{*2}}{\hbar^2 u^2})} = \frac{1}{2} \Longrightarrow p^* = \pm\hbar u$$

$$\Delta p = 2\hbar u$$

Найдем Δx на уровне e^{-1}

$$\Psi(x^*) = \frac{\Psi(p=0)}{e} \Longrightarrow \exp\{-u|x^*|\} = \exp\{-1\} \Longrightarrow x^* = \pm\frac{1}{u}$$

$$\Delta x = \frac{2}{u}$$

$$\Delta x \cdot \Delta p = 4\hbar$$

Соотношение неопределенностей позволяет проверить правильность решения. Произведение должно быть равно $\hbar$ с точностью до числового множителя.

1.7.2 Оператор импульса. Аналогия с классической механикой. Коммутатор с координатой.

Совпадает с билетом 8.

1.8. Билет 8

1.8.1 Оператор импульса. Аналогия с классической механикой. Коммутатор с координатой.

В квантовой механике оператор импульса представляется в виде:

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla$$

Как для любого оператора для него есть операторное уравнение:

$$\hat{p}\Psi_p(x) = p\Psi_p(x)$$

Причём его спектр непрерывен.

Его собственная функция есть:

$$\Psi_p(x) = c\exp\left\{-\frac{ipx}{\hbar}\right\}$$

Нормировка получается из условия:

$$\int_{-\infty}^{\infty} C^2 \exp\left\{-\frac{ipx'}{\hbar}\right\} \exp\left\{+\frac{ipx}{\hbar}\right\} \mathrm{d}p = \delta(x - x')$$

Тогда $\Psi_p = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left\{-\frac{ipx}{\hbar}\right\}$

Вычислим коммутатор с координатой:

$$(xp_x - p_x x) =?$$

Для этого подействуем на функцию $\Psi(x)$

$$x(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\Psi(x) - (-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})x\Psi(x) = -\hbar x\frac{\partial\Psi}{\partial x} + i\hbar\Psi + i\hbar x\frac{\partial\Psi(x)}{\partial x} = i\hbar\Psi$$

Следовательно

$$(xp_x - p_x x) = i\hbar$$

Если же вычислить $p_x x - xp = -i\hbar$.

В общем случае они не коммутируют, а значит одновременно не измеримы.

1.8.2 Напишите разложение единичного оператора по собственным векторам к.л. оператора.

Пусть есть некий оператор $\widehat{A}$.

$$\widehat{A}\left|\psi_n\right\rangle = a_n\left|\psi_n\right\rangle,$$

где $\left|\psi_n\right\rangle$ - собственный вектор оператора.

В абстрактных обозначениях: $\left|\psi_n\right\rangle = \left|n\right\rangle$. Тогда

$$\widehat{1} = \sum_n C_n\left|n\right\rangle$$

Умножим скалярно на $\left\langle\psi_m\right| = \left\langle m\right|$

$$\left\langle m\right|\widehat{1} = \sum_n \left\langle m\right| C_n \left|n\right\rangle$$

Но если $m \neq n$, то $|\psi_n\rangle$ и $|\psi_m\rangle$ ортогональны. Следовательно, сумма отлична от нуля только при $m = n$

$$\langle n|\,\widehat{1} = C_n, \langle m|\,\widehat{1} = \langle n|$$

$$\widehat{1} = \sum_n |n\rangle\,\langle n|$$

1.8.3 Нахождения волновой функции по данным одного из представлений

Найдите $\Psi(p)$ по данным $\Psi(x)$. Найдите связь ширины в x и p представлениях. $\Psi(x) = \frac{1}{x^2+a^2}$.

$$\Psi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x) e^{\frac{-ipx}{\hbar}} dx$$

1) $Imz > 0, \lambda > 0$. Используя лемму Жордана:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{x^2+a^2} e^{\frac{-ipx}{\hbar}} dx = 2\pi i \sum_{k=1}^{n} res[R(z)\exp\{i\lambda z\}],$$

где $R(z) = \frac{1}{z^2+a^2}, \lambda = -\frac{p}{\hbar}$

Найдем особые точки

$$R(z) = \frac{1}{z^2+a^2} = \frac{1}{(z+ia)(z-ia)}$$

$$z_0 = \pm ia$$

Особе точки - полюса первого порядка. Внутри контура L_1 одна особая точка $z_0 = ia$. Для полюса первого порядка

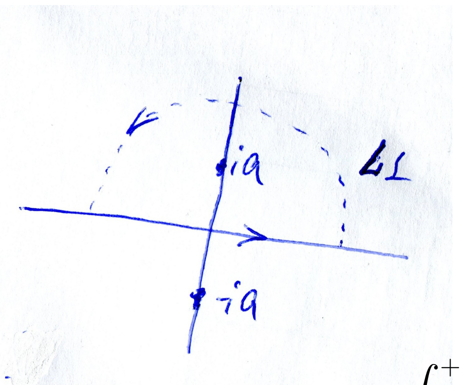


Рис. 3

$$resf(z) = \frac{\varphi(z_0)}{\psi'(z_0)},$$

где $f(z) = R(z)\exp\{i\lambda z\}$, z_0-особая точка, $\varphi(z) = \frac{\exp\{i\lambda z\}}{z+ia}, \psi(z) = z - ia, \psi^{'}(z) = 1$.

$$resf(ia) = \frac{e^{i\lambda ia}}{2ia}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{x^2+a^2} e^{\frac{-ipx}{\hbar}} dx = \frac{2\pi e^{\frac{ap}{\hbar}}}{2ia} = \frac{\pi}{a} e^{\frac{ap}{\hbar}}, p < 0$$

1) $Imz < 0, \lambda < 0, p > 0$.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{x^2+a^2} e^{\frac{-ipx}{\hbar}} dx = -2\pi i \sum_{k=1}^{n} res[R(z)\exp\{i\lambda z\}],$$

Внутри контура L_2 одна особая точка $z_0 = -ia$

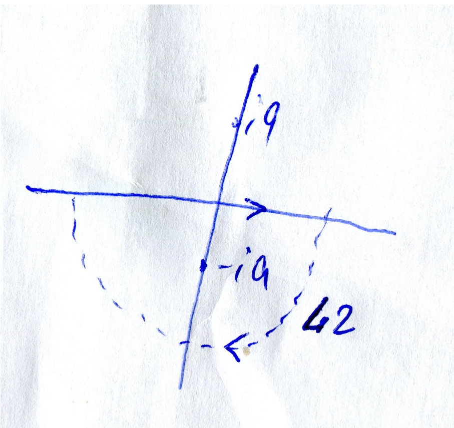


Рис. 4

$$resf(z) = \frac{\varphi(z_0)}{\psi'(z_0)}, \varphi(z) = \frac{\exp\{i\lambda z\}}{z-ia}, \psi(z) = z + ia, \psi'(z) = 1.$$

$$resf(-ia) = \frac{e^{\lambda a}}{-2ia}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{x^2+a^2} e^{\frac{-ipx}{\hbar}} dx = \frac{-2\pi i e^{a\lambda}}{-2ia} = \frac{\pi}{a} e^{a\lambda} = \frac{\pi}{a} e^{\frac{-ap}{\hbar}}, p > 0$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{x^2+a^2} e^{\frac{-ipx}{\hbar}} dx = \frac{\pi}{a} e^{\frac{-a|p|}{\hbar}}$$

$$\Psi(p) = \frac{\pi}{a\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{-a|p|}{\hbar}}$$

Эта функция еще не нормирована. При нормировке амплитуда не важна.

$$\Psi_0(p) = Ce^{\frac{-a|p|}{\hbar}}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi_0|^2 dp = C^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{-a|p|}{\hbar}} dp = 2C^2 \int_{0}^{+\infty} e^{\frac{-ap}{\hbar}} dp = \frac{C^2\hbar}{a}$$

Нормировка $\frac{C^2\hbar}{a} = 1 \Longrightarrow C = \sqrt{\frac{a}{\hbar}}$

$$\Psi_0(p) = \sqrt{\frac{a}{\hbar}} e^{\frac{-a|p|}{\hbar}}$$

Найдем Δp на уровне e^{-1}.

$$-\frac{a|p^*|}{\hbar} = -1 \Longrightarrow p^* = \pm\frac{\hbar}{a} \Longrightarrow \Delta p = \frac{2\hbar}{a}$$

Δx находится на уровне половины от максимума.

$$\Psi(x^*) = \frac{1}{2a^2}$$

$$\frac{1}{2a^2} = \frac{1}{x^{*2}+a^2} \Longrightarrow x^* = \pm a \Longrightarrow \Delta x = 2a$$

$$\Delta x \cdot \Delta p = 4\hbar$$

Соотношение неопределенностей позволяет проверить правильность решения. Произведение должно быть равно $\hbar$ с точностью до числового множителя.

1.9. Билет 9

1.9.1 Разложите $\delta(x)$ по собственным функциям оператора импульса.

$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ipx}{\hbar}}$ - нормированная собственная функция оператора импульса. Разложим по собственным функциям оператора импульса:

$$\delta(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} C(p) e^{\frac{ipx}{\hbar}} dp$$

$$C(p) = \langle \Psi^* | \delta(x) \rangle = \Psi^*(0)$$

$$\Psi^*(0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

$$\delta(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ipx}{\hbar}} dp$$

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{ipx}{\hbar}} dp$$

1.9.2 Построение оператора эволюции путем разложения по собственным функциям стационарного уравнения.

1.9.3 Напишите оператор координаты в импульсном представлении.

Этот вопрос будет рассматриваться позднее в билете 20. Ниже фрагмент двадцатого билета:

$$\langle a|\hat{L}|\widetilde{a}\rangle = \int \mathrm{d}b\, \mathrm{d}\widetilde{b}\, \Psi^*_a(b) \left\langle b \middle| \hat{L} \middle| \widetilde{b} \right\rangle \Psi_{\widetilde{a}}(\widetilde{b}) \tag{1}$$

Проиллюстрируем формулу (1) на примере нахождения явного вида оператора $\hat{x}$ в p-представлении по известному виду этого же оператора в x-представлении. В x-представлении $\langle x|\hat{x}|\widetilde{x}\rangle = x\delta(x - x')$. Из (1) получаем:

$$\langle p|\hat{x}|\widetilde{p}\rangle = \int \mathrm{d}x\, \mathrm{d}\widetilde{x}\, \Psi^(_p x)\, \langle x|\hat{x}|\widetilde{x}\rangle\, \Psi_{\widetilde{p}}(\widetilde{x}) =$$

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \int \mathrm{d}x\, \mathrm{d}\widetilde{x}\, e^{-ipx/\hbar} e^{i\widetilde{p}\widetilde{x}/\hbar} x\delta(x - x') = \frac{1}{2\pi\hbar} \int x \mathrm{d}x e^{-ix(p-\widetilde{p})/\hbar} =$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \int \frac{\mathrm{d}y}{2\pi} e^{-y(p-\widetilde{p})} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \delta(x - x')$$

1.10. Билет 10

1.10.1 Преобразование Фурье как разложение по собственным функциям оператора импульса.

$-i\hbar\frac{\partial\Psi(x)}{\partial x} = p_x\Psi(x)$ - операторное уравнение по собственным функциям импульса.

$-i\hbar\nabla$ - оператор импульса.

$$-i\hbar \mathrm{d}\Psi(x) = p_x \Psi(x) \mathrm{d}x$$

$$-i\hbar \ln(\Psi(x)) = p_x x + C$$

$$\Psi(x) = \widetilde{C} e^{-\frac{p_x x}{i\hbar}}$$

Т.к. $\Psi(x)$ и $\widetilde{C}\Psi(x)$ описывают одно и то же состояние квантовой системы, отбросим константу.

$\Psi(x) = e^{\frac{p_x x}{-i\hbar}} = e^{\frac{ip_x x}{\hbar}}$ - волна Де Бройля, собственная функция оператора импульса. Фурье-образ:

$$\Psi(x) = \int \Psi(p) e^{\frac{ip_x x}{\hbar}} dx$$

С учетом нормировки в одномерном случае:

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \Psi(p) e^{\frac{ip_x x}{\hbar}} dx$$

1.10.2 Докажите, что нормировка сохраняется при замене представления, если использовать нормированные собственные функции

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 \,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(p)|^2 \,\mathrm{d}p$$

По теореме Парсиваля:

$$\int_{-\infty}^{\infty} g^*(x) f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} G^*(p) F(p) \,\mathrm{d}p\,,$$

где $G(p) = F[g(x)]$, $F(p) = F[f(x)]$.

Тогда

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x)^* \Psi(x) \,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(p)^* \Psi(p) \,\mathrm{d}p$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 \,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(p)|^2 \,\mathrm{d}p$$

Что же, осталось только доказать теорему Парсиваля.

Доказательство

Пусть:

$\phi_0 = \phi_1(x)\phi_2(x)$

Известно что:

$\Phi_1(p) = F[\phi_1(x)]$

$\Phi_2(p) = F[\phi_2(x)]$

Найдём: $\Phi_0(p) = F[\phi_1(x) \cdot \phi_2(x)]$

$$\Phi_0(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \phi_1(x)\phi_2(x) \exp\left\{-\frac{ipx}{\hbar}\right\} \mathrm{d}x =$$

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \Phi_1(p') \exp\left\{+\frac{ip'x}{\hbar}\right\} \mathrm{d}p' \cdot \phi_2(x) \exp\left\{-\frac{ipx}{\hbar}\right\} \mathrm{d}x =$$

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \Phi_1(p') \exp\left\{\frac{ix(p'-p)}{\hbar}\right\} \mathrm{d}p' \cdot \phi_2(x) \, \mathrm{d}x =$$

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \phi_2(x) \exp\left\{\frac{ix}{\hbar}(p'-p)\right\} \mathrm{d}x \cdot \Phi_1(p') \, \mathrm{d}p' =$$

$$\left\{ \frac{1}{2\pi\hbar} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \phi_2(x) \exp\left\{\frac{ix}{\hbar}(p'-p)\right\} = \Phi_2(p-p') \right\} =$$

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \Phi_2(p-p')\Phi_1(p') \, \mathrm{d}p'$$

Получили, что

$$\Phi_0 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \Phi_2(p-p')\Phi_1(p') \, \mathrm{d}p' = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \phi_1(x)\phi_2(x) e^{-\frac{ipx}{\hbar}} \, \mathrm{d}x$$

Пусть $p = 0$, тогда

$$\Phi_0(0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \phi_1(x)\phi_2(x) \, \mathrm{d}x$$

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \Phi_2(-p')\Phi_1(p') \, \mathrm{d}p' = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \phi_1(x)\phi_2(x) \, \mathrm{d}x$$

По свойству преобразования Фурье:

$$F[\phi^*(x)] = \Phi^*(-p)$$

Получаем:

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \Phi_2'^*(p)\Phi_1(p') \, \mathrm{d}p' = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \phi_1\phi_2^*(x) \, \mathrm{d}x$$

Что и требовалось доказать. □

1.10.3 Выведите уравнения Гейзенберга для частицы в потенциале. Сформулируйте условие сохранения физической величины. Когда сохраняется энергия? Импульс?

1.11. Билет 11

1.11.1 Нахождения волновой функции по данным одного из представлений

$$\Psi(x) = \exp\left\{-\frac{(x-x')^2}{4b^2}\right\}$$

$$\Psi_{(}p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\frac{(x-x')^2}{4b^2}\right\} \exp\left\{-\frac{ipx}{\hbar}\right\} \mathrm{d}x$$

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\frac{(x-x')^2}{4b^2} - \frac{ipx}{\hbar}\right\} \mathrm{d}x = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\frac{y^2}{4b^2} - \frac{ip(y+x')}{\hbar}\right\} \mathrm{d}y =$$

$$\exp\left\{-\frac{-ipx'}{\hbar}\right\} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\frac{y^2}{4b^2} - \frac{ipy}{\hbar}\right\} \mathrm{d}x =$$

$$\exp\left\{-\frac{-ipx'}{\hbar}\right\} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\left(\frac{y}{2b} + \frac{ipb}{\hbar}\right)^2 + \left(\frac{ipb}{\hbar}\right)^2\right\} \mathrm{d}y =$$

$$\exp\left\{-\frac{ipx'}{\hbar}\right\} \exp\left\{-\left(\frac{ipb}{\hbar}\right)^2\right\} \cdot 2b \int\limits_{-\infty}^{\infty} \exp\{-t^2\} \,\mathrm{d}t =$$

$$\exp\left\{-\frac{ipx'}{\hbar}\right\} \exp\left\{-\left(\frac{ipb}{\hbar}\right)^2\right\} \cdot 2b\sqrt{\pi}$$

Итак, мы нашли ненормированную волновую функцию

$$\Psi(p) = 2b\frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \cdot \exp\left\{-\frac{ipx'}{\hbar} - \left(\frac{ipb}{\hbar}\right)^2\right\}$$

Амплитуда при нормировке не важная (см. замечание 1)

Где-то здесь ошибка в нахождении c, напомните мне её поискать. Спасибо.

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \Psi(p)\Psi^*(p)\,\mathrm{d}p = \frac{1}{c^2}$$

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\frac{2p^2b^2}{\hbar^2}\right\} \mathrm{d}p = \frac{\sqrt{2\pi}b}{\hbar}$$

Отсюда

$$c = \frac{\sqrt{\hbar}}{\sqrt{b}(2\pi)^{1/4}}.$$

1.11.2 Восстановление волнового уравнения для свободной частицы по дисперсионному соотношению.

1.11.3 Нестационарное уравнение Шредингера

1.12. Билет 12

1.12.1 Нахождения волновой функции по данным одного из представлений

$$\Psi(x) = \exp\{-U|x - x'| + ivx\}$$

$\Psi_0(x)$– нормированная функция Ψ. $\Psi_0(x) = c\Psi(x)$.

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} |\Psi_0(x)|^2 \, \mathrm{d}x = 1$$

$$c^2 \int\limits_{-\infty}^{\infty} \Psi(x)^* \cdot \Psi(x) \, \mathrm{d}x =$$

$$\frac{c^2}{2U} \exp\{2U(x - x')\}\Big|_{-\infty}^{x'} - \frac{c^2}{2U} \exp\{-2U(x - x')\}\Big|_{x'}^{\infty}$$

Проводя очевидные действия находим нормировочную постоянную $c = \sqrt{U}$

Тогда $\Psi_0(x) = \sqrt{U} \exp\{-U|x - x'| + ivx\}$.

$$\Psi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \Psi_0(x) \cdot \exp\Big\{-\frac{px}{\hbar}\Big\} \, \mathrm{d}x =$$

$$\sqrt{\frac{U}{2\pi\hbar}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \exp\{-U|x - x'|\} \exp\{-ivx\} \exp\left\{-\frac{ipx}{\hbar}\right\} \mathrm{d}x$$

Обозначим $\widetilde{\Psi}(x) = \sqrt{U} \exp\{-u|x - x'|\}$, тогда $\Psi_0(x) = \widetilde{\Psi}(x) \cdot \exp\{ivx\}$

Преобразуем $\widetilde{\Psi}(x) \longrightarrow \widetilde{\Psi}(p)$

$$\widetilde{\Psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \widetilde{\Psi}(x) \exp\left\{-\frac{ipx}{\hbar}\right\} \mathrm{d}x = \sqrt{\frac{U}{2\pi\hbar}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \exp\{-U|x-x'|\} \exp\left\{-\frac{ipx}{\hbar}\right\} \mathrm{d}x =$$

$$\sqrt{\frac{U}{2\pi\hbar}} \left(\int\limits_{-\infty}^{x'} \exp\{+U(x-x')\} \exp\left\{-\frac{ipx}{\hbar}\right\} \mathrm{d}x + \int\limits_{x'}^{\infty} \exp\{-U(x-x')\} \exp\left\{-\frac{ipx}{\hbar}\right\} \mathrm{d}x \right)$$

$$= \sqrt{\frac{U}{2\pi\hbar}} \exp\left\{-\frac{ipx'}{\hbar}\right\} \left(\int\limits_{-\infty}^{0} e^{Uy} e^{-\frac{ipy}{\hbar}} \mathrm{d}y + \int\limits_{0}^{\infty} e^{-Uy} e^{-\frac{ipy}{\hbar}} \mathrm{d}y \right) =$$

$$\sqrt{\frac{U}{2\pi\hbar}} \exp\left\{-\frac{ipx'}{\hbar}\right\} \left(\frac{1}{U - \frac{ip}{\hbar}} + \frac{1}{U + \frac{ip}{\hbar}} \right) =$$

$$\frac{2}{U\left(1 + \frac{p^2}{U^2\hbar^2}\right)} \sqrt{\frac{U}{2\pi\hbar}} \exp\left\{-\frac{ipx'}{\hbar}\right\} = \sqrt{2U\pi\hbar} \frac{1}{1 + \frac{p^2}{U^2\hbar^2}} \exp\left\{-\frac{ipx'}{\hbar}\right\} = \widetilde{\Psi}(x).$$

Напомним, что $\Psi_0(x) = \widetilde{\Psi}(x) e^{ivx}$. Согласно замечанию 2:

$$\Psi(p) = \widetilde{\Psi}(p - \hbar v)$$

И окончательный ответ:

$$\Psi(p) = \sqrt{\frac{2}{U\pi\hbar}} \cdot \frac{1}{1 + \frac{(p-\hbar v)^2}{U^2\hbar^2}} \exp\left\{-\frac{i(p-\hbar v)x'}{\hbar}\right\}$$

1.12.2 Напишите решение УШ для свободного движения.

1.12.3 Выразить среднее в произвольном представлении

Тоже самое, что и в билете 4, только следует сказать, что волновая функция может быть любой.

1.13. Билет 13

1.13.1 Нахождения волновой функции по данным одного из представлений

$$\Psi(x) = \exp\left\{-\frac{(x-x')^2}{4b^2} + iUx\right\}$$

В этом билете функция нормироваться не будет, так как автору стало лень, а на самом деле её и не просят. К тому же, на полу ширину нормировка не влияет.

$$\Psi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \Psi(x) \exp\left\{-\frac{ipx}{\hbar}\right\} \mathrm{d}x$$

Иначе говоря, $\Psi(p) = F[\Psi(x)]$.

По свойствам преобразования Фурье:

1. $\Psi_1(p - U\hbar) = F[\Psi_1(x)e^{iUx}]$ $\Psi_1(x) = \exp\left\{-\frac{(x-x')^2}{4b^2}\right\}$
2. $\Psi_2(p)\exp\left\{-\frac{ipx'}{\hbar}\right\} = F[\Psi_2(x - x')]$, где $\Psi_2(x) = \exp\left\{-\frac{(x)^2}{4b^2}\right\}$

Найдем преобразование Фурье $\Psi_2(x)$ по определению.

$$\Psi_2(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\frac{x^2}{4b^2} + \frac{-ipx}{\hbar}\right\} =$$

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\left(\frac{x}{2b} + \frac{ipb}{\hbar}\right)^2 + \left(\frac{ipb}{\hbar}\right)^2\right\} \mathrm{d}x =$$

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left\{-\frac{p^2b^2}{\hbar^2}\right\} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\left(\frac{x}{2b} + \frac{ipb}{\hbar}\right)^2\right\} \mathrm{d}x =$$

$$\frac{2b}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left\{-\frac{p^2b^2}{\hbar^2}\right\} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \exp\{-y^2\} \,\mathrm{d}y = \frac{2b\sqrt{\pi}}{\sqrt{2\pi b}} \exp\left\{-\frac{p^2b^2}{\hbar^2}\right\} =$$

$$\sqrt{\frac{2}{\hbar}} b \exp\left\{-\frac{p^2b^2}{\hbar^2}\right\}$$

Получим, что $\Psi_2(p) = \sqrt{\frac{2}{\hbar}} b \exp\left\{-\frac{p^2b^2}{\hbar^2}\right\}$.

$$\Psi_2(p) = F[\exp\left\{-\frac{x^2}{4b^2}\right\}]$$

Согласно свойству (2):

$$\sqrt{\frac{2}{\hbar}} b \exp\left\{-\frac{p^2b^2}{\hbar^2}\right\} \exp\left\{-\frac{px'}{\hbar}\right\} = F[\Psi_2(x - x')] = F\left[\exp\left\{-\frac{(x-x')^2}{4b^2}\right\}\right] = F[\Psi_1(x)]$$

Согласно свойству (1):

$$\sqrt{\frac{2}{\hbar}} b \exp\left\{-\frac{(p - U\hbar)^2 b^2}{\hbar^2}\right\} \exp\left\{-\frac{i(p - U\hbar)x'}{\hbar}\right\} =$$

$$F\left[\exp\left\{-\frac{(x-x')^2}{4b^2}\right\} + iUx\right] = F[\Psi(x)]$$

Что и требовалось найти.

$$\Psi(p) = \sqrt{\frac{2}{\hbar}} b \exp\left\{-\frac{(p-U\hbar)^2 b^2}{\hbar^2} - \frac{i(p-U\hbar)x'}{\hbar}\right\} \tag{2}$$

Теперь найдем Δp. Она в $\Psi(p)$ такая же, как в $\Psi_2(p)$. Ищем полуширину на уровне $\frac{1}{e}$. Тогда

$$\Delta p = \frac{2\hbar}{b}$$

Найдем Δxна уровне $\frac{1}{e}$, при этом отбрасывая фазу.

$$-\frac{(x-x')^2}{4b^2} = -1$$
$$x_1 = 2b + x'$$
$$x_2 = x' - 2b$$
$$\Delta x = x_2 - x_1 = 4b$$

$$\Delta x \cdot \Delta p = \frac{4b \cdot 2\hbar}{b} = 8\hbar$$

1.13.2 На примере конкретного пакета продемонстрируйте соотношение неопределенности. Операторы как матрицы. Непрерывные и дискретные индексы.

Зададим $C(p)$ следующим образом:

$$C(p) = \begin{cases} C_0, & p \in (p_0 - \Delta p, p_0 + \Delta p) \\ 0, & p \in (-\infty, p_0 - \Delta p) \cup (p_0 + \Delta p, \infty) \end{cases} \tag{3}$$

И пусть $\Delta p \ll p_0$ (неопределенность импульса мала). Тогда в окрестности p_0 справедливо

$$E(p) \approx E_0 + (p - p_0)\left(\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}p}\right)\bigg|_{p_0}.$$

Запишем функцию Ψ, отвечающую такой $C(p)$:

$$\Psi(x,t) = C_0 \int\limits_{p_0+\Delta p}^{p_0-\Delta p} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left\{ i\frac{px - Et}{\hbar} \right\} \mathrm{d}p =$$

$$\frac{C_0}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int\limits_{p_0+\Delta p}^{p_0-\Delta p} \exp\left\{ i\frac{px - E_0t - (p-p_0)\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}p}\big|_{p_0}}{\hbar} \right\} \mathrm{d}p =$$

$$\begin{pmatrix} \xi = \frac{p-p_0}{\hbar} \\ \mathrm{d}p = \hbar\,\mathrm{d}\xi \end{pmatrix} = \frac{C_0\hbar}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left\{ i\frac{p_0x - E_0t}{\hbar} \right\} \int\limits_{-\Delta p/\hbar}^{+\Delta p/\hbar} \exp\left\{ i\xi(x - \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}p}\bigg|_{p_0} t) \right\} \mathrm{d}\xi =$$

$$\frac{C_0\hbar}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left\{ i\frac{p_0x - E_0t}{\hbar} \right\} f\left(x - \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}p} t\bigg|_{p_0} \right),$$

где

$$f(\widetilde{x}) = \int\limits_{-\Delta p/\hbar}^{+\Delta p/\hbar} e^{i\xi\widetilde{x}}\,\mathrm{d}x = \frac{1}{i\widetilde{x}}\bigg|_{-\Delta p/\hbar}^{\Delta p/\hbar} = \frac{2\sin\left(\frac{\Delta p\widetilde{x}}{\hbar}\right)}{\widetilde{x}}$$

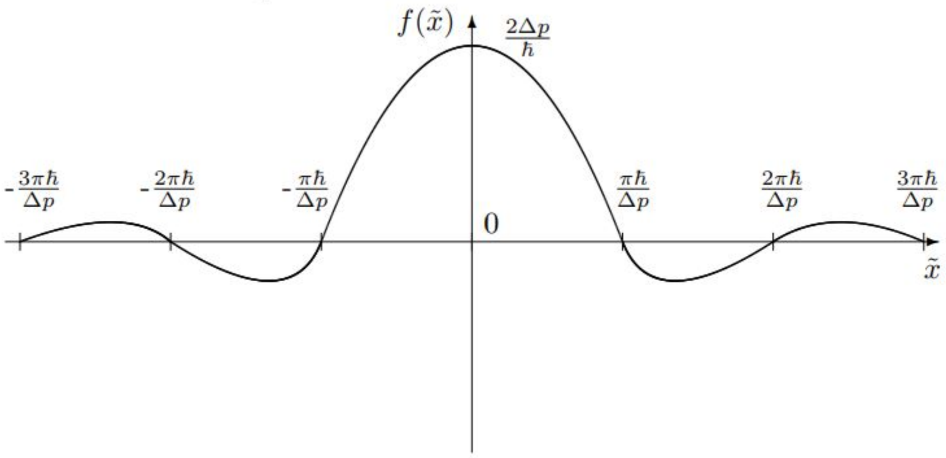


Рис. 5

Из графика сможем найти соотношение неопределенности

$$\Delta p \Delta x = 2\pi$$

1.13.3 Представления операторов умножения и дифференцирования как матриц.

1.14. Билет 14

1.14.1 Амплитуда вероятности. Принцип суперпозиции. Сложение амплитуд. Мысленный эксперимент с двумя щелями

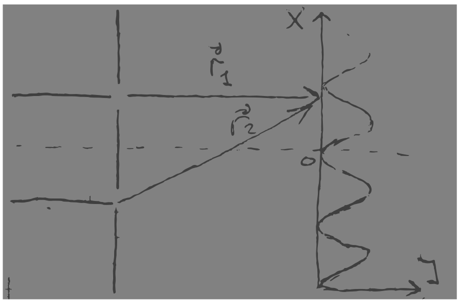


Рис. 6

Предположим, что есть два состояния квантовой системы Ψ_1 и Ψ_2. Тогда, по принципу суперпозиции существует состояние $\Psi_3 = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$,где c_1 и c_2– комплексно значные величины, называемые амплитудами вероятности. Ψ_3 принимает состояние №1 с вероятностью $|c_1^2|$ и состояние №2 с вероятностью $|c_2|^2$. То есть при сложении двух волновых функций мы не получаем чего-то третьего, а получаем либо состояние №1 с вероятностью $|c_1^2|$, либо №2 с вероятностью $|c_2^2|$.

Одним из наблюдаемых следствий является прохождение электрона через две близко расположенные щели. Если две щели открыты одновременно, то на экране наблюдается интерференционная картина. Это объясняется тем, что электрон находится в суперпозиции состояний.

$$\Psi(\vec{r}, t) = [\Psi_1(\vec{r}) + \Psi_2(\vec{r})] \cdot \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \tag{4}$$

Плотность вероятности нахождения электрона вблизи точки $(\vec{r}, t)$ равна:

$$|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = |\Psi_1(\vec{r}) + \Psi_2(\vec{r})|^2 = |\Psi_1(\vec{r}, t)|^2 + |\Psi_2(\vec{r}, t)|^2 + (\Psi_1^*\Psi_2 + \Psi_1\Psi_2^*) =$$
$$|\Psi_2(\vec{r}, t)|^2 + |\Psi_1(\vec{r}, t)|^2 + 2|\Psi_1| \cdot |\Psi_2| \cos(\phi_1 - \phi_2)$$

Последнее слагаемое – интерференционный член. Каждый электрон интерферирует сам с собой, так как он вошел частично в каждую волну и невозможно точно сказать через какую из щелей он проходит.

1.14.2 Сформулируйте, что такое дискретный и непрерывный спектры. Каковы волновые функции, как они нормируются.

1.14.3 Запишите общее решение нестационарного уравнения Шредингера с помощью разложения по стационарным состояниям

1.15. Билет 15

1.15.1 Обозначения Дирака для векторов, волновых функций, операторов и матриц

1.15.2 Стационарные состояния. Энергетическое представление. Различные представления операторов.

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(x,t), \text{где } \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(x,t)$$

–Уравнение Шредингера, $\hat{H}$– оператор Гамильтона

Уравнение Шредингера описывает эволюцию квантово-механической системы. Стационарным называется такое состояние квантово-механической системы, которое не зависит от времени.

$\Psi = \phi(x)\vartheta(t)$– метод разделения переменных

$$i\hbar\phi(x)\frac{\partial\vartheta}{\partial t} = \hat{H}(\phi(x), \vartheta(t))$$

$$i\hbar\phi(x)\frac{\partial\vartheta(t)}{\partial t} = \vartheta(t)\hat{H}\phi(x)$$

$$i\hbar\frac{\vartheta'}{\vartheta} = \frac{\hat{H}\phi(x)}{\phi(x)} = E$$

$$\hat{H}\phi(x) = E\phi(x)$$

-Уравнение на собственные функции.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\phi(x)}{\mathrm{d}x^2} + U(x)\phi(x) = E\phi(x)$$

Решения этого уравнения - пары собственных чисел и собственные функции $E_n \to \phi_n$.

ϕ_n Является базисом, по которому можно раскладывать волновые функции

$\phi \to E_n$–Дискретный случай

$\phi = \phi(E)$ - Непрерывный случай

Так как есть собственные числа базисной функции ϕ_n, то разложение по базису ϕ_n называется энергетическим представлением.

Найдем энергетическое представление Ψ_n

Дискретный случай

$$\Psi(x) = \sum_n \phi_n^E \text{–Разложение } \Psi(x) \text{ по базису } \phi(n)$$

Ψ_n^E- Волновая функция в Е-представлении.

Непрерывный случай

$$\Psi(x) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \Psi^E(E)\phi(x, E)\,\mathrm{d}E$$

Ψ_n^E- Волновая функция в Е-представлении.

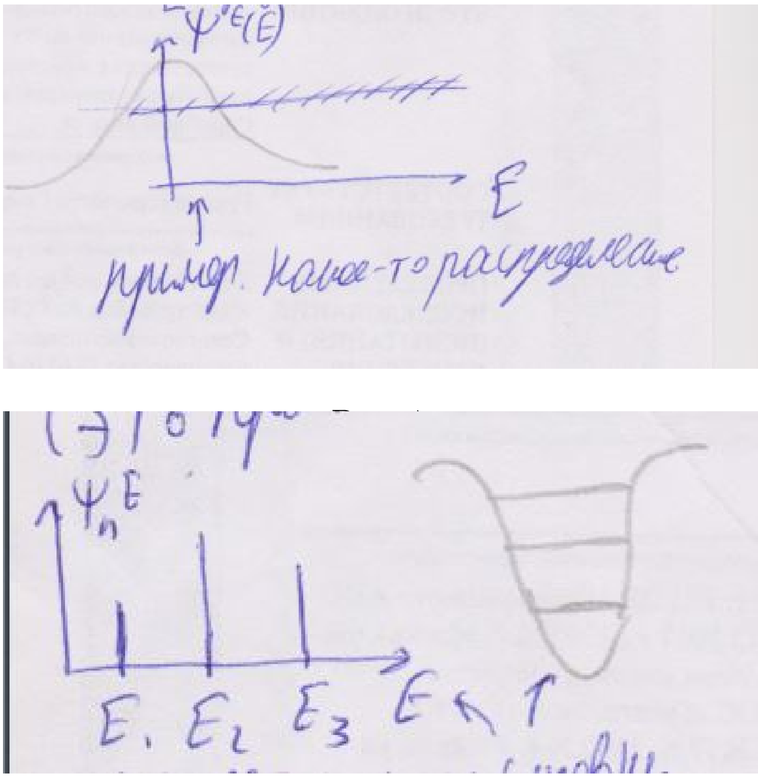


Рис. 8

1.15.3 Докажите, что собственные значения эрмитового оператора действительны.

Рассмотрим уравнение на собственные значения эрмитового оператора A

$$A\left|\psi_n\right\rangle = a_n\left|\psi_n\right\rangle$$

Домножим слева скалярно:

$$\cdot\left\langle\psi_m\right|\Bigg|\quad A\left|\psi_n\right\rangle = a_n\left|\psi_n\right\rangle$$

Сопряжем эрмитово, сменим индекс и домножим справа:

$$\left\langle\psi_m\right| A^+ = a_m^+\left\langle\psi_m\right|\quad\Bigg|\cdot\left|\psi_n\right\rangle$$

Получим

$$\begin{cases}\left\langle\psi_m\right| A\left|\psi_n\right\rangle = a_n\left\langle\psi_m|\psi_n\right\rangle\\ \left\langle\psi_m\right| A^+\left|\psi_n\right\rangle = a_m^+\left\langle\psi_m|\psi_n\right\rangle\end{cases}$$

Вычтем одно из другого:

$$\left\langle\psi_m\right| A\left|\psi_n\right\rangle - \left\langle\psi_m\right| A^+\left|\psi_n\right\rangle = (a_n - a_m^*)\left\langle\psi_m|\psi_n\right\rangle$$

Так как оператор A эрмитов, то $A = A^+ \Rightarrow (a_n - a_m^*)\left\langle\psi_m|\psi_n\right\rangle = 0$

Когда $m = n$, $\left\langle\psi_m|\psi_n\right\rangle \neq 0$, и

$$(a_n - a_n^*) = 0 \quad\Rightarrow\quad a_n = a_n^*$$

$\Rightarrow$ собственные значения эрмитова оператора действительны. $\square$

1.16. Билет 16

1.16.1 От каких переменных может зависеть волновая функция. Полный набор.

Волновая функция должна полным образом описывать систему, а изменение волновой функции от времени полностью описывает эволюцию квантово-механической системы (Уравнение Шредингера).

Существует несколько вариантов представления волновых функций (координатный, импульсный, энергетический и т.д). Соответственно, они могут быть описаны через разные переменные.

Максимальная информация о системе (Полнота описания системы) определяет количество степеней свободы. Чтобы волновая функция полностью описывала систему, необходимо, чтобы количество ее переменных равнялось количеству степеней свободы.

Переменными волновой функции могут быть собственные значения какого-то оператора. Одновременно являться переменными волновой функции могут быть лишь те величины, операторы которых коммутируют между собой. Соответственно, переменные волновой функции могут быть взяты даже из различных операторов, но главное, чтобы выполнялось условие коммутации. Сколько переменных необходимо для полного описания волновой функции? Количество переменных должно равняться количеству степеней свободы.

Дальше идет отсебятина: уверенности нет, но скорее всего это так. говорите на свой страх и риск.

Пример: для описания квантово-механической системы, состоящей из одного свободного электрона, на самом деле недостаточно знать координат или импульсов этой частицы, так как она обладает как минимум еще и спином., что дает ему еще как минимум одну степень свободы. Получаем, что у электрона степеней свободы как минимум 4 (x,y,z, проекции координат или импульсов +спин).

1.16.2 Дайте определение среднего значения физической величины в каком-либо состоянии.

По определению волновой функции $|\Psi(x,t)|^2 \mathrm{d}x$– это вероятность найти частицу в интервале от x до $x + \mathrm{d}x$. Тогда среднее значение координаты есть

$$\langle x \rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} x |\Psi(x,t)|^2 \mathrm{d}x$$

Аналогично

$$\langle p\rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} p|C(p,t)|^2 \mathrm{d}p$$

Преобразуем это выражение:

$$\langle p\rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} p|C(p)|^2\,\mathrm{d}p = \int\limits_{-\infty}^{\infty} pC^*(p)C(p)\mathrm{d}p =$$

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} p\left(\int\limits_{-\infty}^{\infty} \Psi_p(x,t)\Psi^*(x,t)\mathrm{d}x\right)C(p)\mathrm{d}p =$$

$$\left\{p\Psi_p(x,t) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\Psi_p(x,t)\right\} = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\left(\int\limits_{-\infty}^{\infty}\left(-i\hbar\frac{\partial\Psi_p(x,t)}{\partial x}\right)C(p)\mathrm{d}p\right)\mathrm{d}x =$$

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\left(-i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\int\limits_{-\infty}^{\infty}(C(p)\Psi_p(x,t))\mathrm{d}p\right)\mathrm{d}x =$$

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\left(-i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Psi(x,t)\right)\mathrm{d}x$$

Таким образом, мы получили полную формулу для определения $\langle p\rangle$, в которую входит непосредственно волновая функция $\Psi(x,t)$.

Выпишем полученные соотношения

$$\langle x\rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)(\hat{x}\Psi(x,t))\mathrm{d}x$$

$$\langle p\rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)(\hat{p}\Psi(x,t))\mathrm{d}x,\ \hat{p} = -i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$$

Замечание. При переходе от классической к квантовой механике мы теряем однозначность определения $x, p, \ldots$, но приобретаем взаимосвязи между этими физическими величинами. В классической физике траектория и импульс точно определены и не связаны друг с другом. В квантовой механике как траектория, так и импульс точно не определены, но их распределения (амплитуды вероятностей – $\Psi(x,t)$ и $C(p)$) связаны друг с другом.

1.16.3 Докажите теорему о полноте (разложении единицы) $\delta(a-a') = \int \Psi_b^*(a)\Psi_b(a')$ Запишите её в абстрактных Дираковских обозначениях. Какова должна быть нормировка.

1.17. Билет 17

1.17.1 Дайте определение сопряженного по Эрмиту оператора. Ответ сформулируйте в явной интегральной форме в x представлении, в обозначениях Дирака и обычных абстрактных векторных обозначениях.

Сопряженным по Эрмиту оператором называется оператор, который и транспонирован, и сопряжен

$$A^+ = A^{*T}$$

Сопряженным по Эрмиту оператором называется такой оператор, что $(\phi, A\Psi) \underset{def}{=} (A^+\phi, \Psi)$

В интегральной форме:

$$\int \phi^*(x)K(x,x')\Psi(x')\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}x' \underset{def}{=} \int N^*(x,x')\phi(x')\,\mathrm{d}x'\,\Psi(x)\,\mathrm{d}x = *$$

Обозначим ядро оператора A^+ как $N(x,x')$. Тогда $A^+\phi = \int N(x,x)'\phi(x')\,\mathrm{d}x'$

$$* = \int N^*(x',x)\phi^*(x)\,\mathrm{d}x\,\Psi(x')\,\mathrm{d}x'$$

Тогда $N^*(x',x) = K(x,x')$

В обозначениях Дирака:

$$|\Psi\rangle = \hat{A}\,|x\rangle$$

Тогда эрмитово сопряжение:

$$\langle\Psi| \underset{def}{=} \langle x|\,\hat{A}^+$$

В абстрактных векторных обозначениях:

$$|\Psi\rangle^T = |\Psi\rangle^*,\quad \text{но}(T*) = +$$

$$|\Psi\rangle^{T*} = |\Psi\rangle^{**}$$

Значит, что

$$|\Psi\rangle^+ \underset{def}{=} \langle\Psi|$$

1.17.2 Шредингеровское и Гейзенберговское представления квантовой механики. Связь волновых функций и операторов в различных представлениях.

1.17.3 Выведите граничные условия для волновой функции на конечном скачке потенциала

1.18. Билет 18

1.18.1 Докажите, что если операторы коммутируют, то они имеют общие собственные функции.

$$\hat{M}\hat{F} - \hat{F}\hat{M} = 0$$

Пусть Ψ_n образуют полную систему собственных функций оператор $\hat{M}$, то есть $\hat{M}\Psi_n = M_n\Psi_n$.

Подействуем оператором $\hat{F}$

$$\hat{M}\hat{F} = \hat{F}\hat{M}$$

$$\hat{M}\hat{F}\Psi_n = \hat{F}\hat{M}\Psi_n = \hat{F}M_n\Psi_m = M_n\hat{F}\Psi_n$$

$$\hat{M}(\hat{F}\Psi_n) = M_n(\hat{F}\Psi_n), F\hat{\Psi}_n - \text{собственная функция оператора } \hat{M}$$

Следовательно $\hat{F}\Psi_n = \Psi_n$. $\hat{F}\Psi_n$ отличается от собственной функции только на константу, пусть $\mathrm{const} = F_n$

Тогда $\hat{F}\Psi_n = F_n\Psi_n$.

1.18.2 Докажите, что оператор кинетической энергии эрмитов.

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \text{оператор кинетической энергии}$$

$$\hat{T}_x = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \phi^*\hat{T}\Psi\,\mathrm{d}x = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \hat{T}^+\phi^*\Psi\,\mathrm{d}x - \text{определение эрмитовости}$$

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \phi^* \left(\frac{-\hbar^2}{2m}\right)\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi\right) \mathrm{d}x = \begin{bmatrix} U = \phi^* & V = \frac{\partial \Psi}{\partial x} \\ \mathrm{d}U = \frac{\partial \phi^*}{\partial x} & \mathrm{d}V = \frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi \, \mathrm{d}x \end{bmatrix} =$$

$$\phi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x}\Big|_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) - \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right) \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \Psi}{\partial x}\frac{\partial \phi^*}{\partial x} \mathrm{d}x = *$$

В силу физических соображений первое слагаемое дает 0 (на бесконечности функция не может расти, а только спадать).

$$* = -\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right) \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \Psi}{\partial x}\frac{\partial \phi^*}{\partial x} \mathrm{d}x = \begin{bmatrix} U = \frac{\partial \phi^*}{\partial x} & V = \Psi \\ \mathrm{d}U = \frac{\partial^2 \phi^*}{\partial x^2}\mathrm{d}x & \mathrm{d}V = \frac{\partial \Psi}{\partial x}\mathrm{d}x \end{bmatrix} =$$

$$-\Psi \frac{\partial \phi^*}{\partial x}\Big|_{-\infty}^{\infty} \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right) \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^2 \phi^*}{\partial x^2}\Psi \, \mathrm{d}x$$

$$= \int\limits_{-\infty}^{\infty} \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \Psi^* \Psi \, \mathrm{d}x$$

Следовательно, $\hat{T} = \hat{T}^+$. Значит оператор кинетической энергии эрмитов.

1.18.3 Выведите Гейзенберговские уравнения для частицы в потенциале

1.19. Билет 19

1.19.1 Оператор импульса. Связь с оператором сдвига.

Оператор сдвига:

$$\hat{T} f(x) = f(x+a)$$

Пусть сдвиг мал δa.

$$\hat{T_{\delta a}} f(x) = f(x + \delta a)$$

Разложим в ряд Тейлора:

$$f(x+\delta a) = f(x) + \frac{\partial f}{\partial x}\delta a + \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}^2 + \dots$$

Домножим на $-i\hbar$ и поделим на $-i\hbar$:

$$p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$f(x+\delta a) = f(x) + \left(-\frac{\delta a}{i\hbar}\right) p f + \left(-\frac{\delta a}{i\hbar}\right)^2 p^2 f + \dots$$

Получаем:

$$\hat{T}f(x) = \exp\left(-\frac{\delta a}{i\hbar}p\right)f(x) - \text{связь оператора сдвига и импульса}$$

1.19.2 Замена представления. Обозначения Дирака.

1.19.3 Запишите нестационарное уравнение Шредингера в энергетическом представлении. Найдите его общее решение. Как выглядит оператор H в энергетическом представлении

1.20. Билет 20

1.20.1 Какие значения может принимать некоторая физическая величина A и с какой вероятность?

Физическая величина в квантовой механике есть наблюдаемая величина. Каждой наблюдаемой величине соответствует свой оператор. Существует операторное уравнение на собственные функции и собственные числа наблюдаемой A .

$$\hat{A}\Psi = a\Psi$$

Решениями такого операторного уравнения являются пары a_n, Ψ_n.

Если решения такого операторного уравнения счётны, то такой случай является дискретным. В противном случае, когда собственные числа не являются счётными, то такой случай называется непрерывным.

По постулатам квантовой механики: при измерении наблюдаемой величины получаются только собственные значения оператора $\hat{A}$. Если система наблюдается в состоянии Ψ_n, то в результате её измерения получаем a_n с вероятностью 1.

Если система находится в суперпозиции состояния $\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2 + \dots + C_k\Psi_k$, то при измерении системы вероятность получить a_1 есть $|c_1|^2$.

1.20.2 Как преобразуются операторы при смене представления

Пусть $\left\langle b\middle|\hat{L}\middle|\widetilde{b}\right\rangle$- ядро линейного оператора $\hat{L}$ в bпредставлении. Как будет выглядеть ядро этого же оператора в $\langle a|\,\hat{L}\,|\widetilde{a}\rangle$ в a-представлении? С помощью единичных операторов запишем

$$\langle a|\,\hat{L}\,|\widetilde{a}\rangle = \langle a|\,\hat{1}_b\hat{L}\hat{1}_{\widetilde{a}}\left|\widetilde{b}\right\rangle = \int \mathrm{d}b\,\mathrm{d}\widetilde{b}\,\langle a|b\rangle\left\langle b\middle|\hat{L}\middle|\widetilde{b}\right\rangle\left\langle\widetilde{b}\middle|\widetilde{a}\right\rangle.$$

Тогда общая формула перехода от ядра оператора в b-представлении к ядру в a-представле имеет вид

$$\langle a|\hat{L}|\widetilde{a}\rangle = \int \mathrm{d}b\,\mathrm{d}\widetilde{b}\,\Psi_a^*(b)\left\langle b\middle|\hat{L}\middle|\widetilde{b}\right\rangle\Psi_{\widetilde{a}}(\widetilde{b}) \tag{5}$$

Проиллюстрируем формулу (5) на примере нахождения явного вида оператора $\hat{x}$ в p-представлении по известному виду этого же оператора в x-представлении. В x-представлении $\langle x|\hat{x}|\widetilde{x}\rangle = x\delta(x-x')$. Из (5) получаем:

$$\langle p|\hat{x}|\widetilde{p}\rangle = \int \mathrm{d}x\,\mathrm{d}\widetilde{x}\,\Psi_p^(x)\,\langle x|\hat{x}|\widetilde{x}\rangle\,\Psi_{\widetilde{p}}(\widetilde{x}) =$$
$$\frac{1}{2\pi\hbar}\int \mathrm{d}x\,\mathrm{d}\widetilde{x}\,e^{-ipx/\hbar}e^{i\widetilde{p}\widetilde{x}/\hbar}x\delta(x-x') = \frac{1}{2\pi\hbar}\int x\mathrm{d}xe^{-ix(p-\widetilde{p})/\hbar} =$$
$$i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\int\frac{\mathrm{d}y}{2\pi}e^{-y(p-\widetilde{p})} = i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\delta(x-x')$$

1.20.3 Найдите стационарные состояния в бесконечно глубокой яме. Найдите силу с которой частица действует на стенку

1.21. Билет 21

1.21.1 Вычислите оператор, сопряженный к произведению AB . Сформулируйте условие эрмитовости произведения, если A и B эрмитовы.

Оператор A^* называется сопряженным к оператору A если $(\phi, Ax) = (A^*\phi, x)$.

Вычислим оператор, сопряженный к произведению AB.

$$(\phi, ABx) = (A^*\phi, Bx)* = (B^*A^*\phi, x)$$

(*) к $A^*\phi$ относимся как к целому.

Тогда $(AB)^* = B^*A^*$.

Условие эрмитовости произведения, если A и B эрмитовы: произведение двух эрмитовых операторов является эрмитовым, если их коммутатор равен 0.

1.21.2 Докажите, что собственные функции эрмитового оператора, соответствующие разным собственным значениям, ортогональны.

$$A\,|\Psi_n\rangle = a_n\,|\Psi_n\rangle \tag{6}$$

Берем эрмитовое сопряжение:

$$\langle\Psi_n|\,A^+ = a_n^*\,\langle\Psi_n| \tag{7}$$

Заменим в (7) $n \to m$. Уравнение (6) скалярно умножим на $\langle\psi_m|$, (7) умножим на $|\Psi_n\rangle$ и вычтем.

Получаем:

$$\langle\Psi_m| A |\Psi_n\rangle - \langle\Psi_n| A^+ |\Psi_m\rangle = (a_n - a_m^*) \langle\Psi_m|\Psi_n\rangle = 0 \tag{8}$$

n и m - разные, значит $a_n \neq a_m^*$. Следовательно $\langle\Psi_m|\Psi_n\rangle = 0$

$$\langle\Psi_m|\Psi_n\rangle = \int \Psi_m^*(x)\Psi_n(x)\,\mathrm{d}x = (\Psi_m, \Psi_n) = 0$$

1.21.3 Определение стационарных состояний. Уравнение для собственных функций. Разложение произвольной функции. Волновая функция и операторы в энергетическом представлении

1.22. Билет 22

1.22.1 Покажите, что если два оператора, A и B имеют общие собственные функции, то они коммутируют.

$$\hat{B}\cdot \Big| \hat{A}\Psi_n = a_n\Psi_n$$

$$\hat{A}\cdot \Big| \hat{b}\Psi_n = b_n\Psi_n$$

$$\begin{cases} \hat{B}\hat{A}\Psi_n = a_n\hat{B}\Psi_n \\ \hat{A}\hat{B}\Psi_n = b_n\hat{A}\Psi_n \end{cases}$$

$$\begin{cases} \hat{B}\hat{A}\Psi_n = a_n b_n\Psi_n \\ \hat{A}\hat{B}\Psi_n = b_n a_n\Psi_n \end{cases}$$

Вычтем из первого уравнения второе:

$$(\hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B})\Psi = \sum_n a_n(\hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B})\Psi_n = 0$$

Следовательно $\hat{A}$ и $\hat{B}$ коммутируют.

1.22.2 Как выглядит оператор в своём собственном представлении. Как устроены волновые функции в этом представлении?

1.22.3 Напишите уравнение движения квантовой частицы в однородном поле $U = -Fx$ в импульсном представлении

1.23. Замечание 1

При нормировке функции Ψ важна лишь ее форма, а не амплитуда, так как существует лишь один вариант сделать единичную площадь у фигуры заданной формы. Поэтому, при определении нормы амплитуда изначальной функции Ψ не важна, а важна лишь форма, следовательно, амплитуда может быть произвольной и выбираться с точки зрения упрощения решения задачи.

1.24. Замечание 2

$$\Psi_1 = \Psi(x)e^{i\alpha x}$$

$$\Psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \Psi_1(x) e^{-\frac{ipx}{\hbar}} \mathrm{d}x$$

$$\Psi_1(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \Psi(x) e^{i\alpha x} e^{-\frac{ipx}{\hbar}} \mathrm{d}x = \tag{9}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \Psi(x) e^{-\frac{ix}{\hbar}(p-\hbar\alpha)} = \Psi(p - \hbar\alpha) \tag{10}$$