Занятия 2-4. Математический аппарат квантовой механики

2.1. Векторы линейного пространства, скалярное произведение

2.1.1. Пусть $|\psi\rangle = \begin{vmatrix} 1 \\ 2 \end{vmatrix}$ и $|\varphi\rangle = \begin{vmatrix} 3 \\ 4 \end{vmatrix}$. Вычислить $\langle\psi|\varphi\rangle$ и $|\varphi\rangle\langle\psi|$.

2.1.2. Доказать *неравенство Шварца*: для любых векторов $|\alpha\rangle$ и $|\beta\rangle$

$$\langle\alpha|\alpha\rangle\langle\beta|\beta\rangle \geq |\langle\alpha|\beta\rangle|^2.$$

2.1.3. Пусть состояния $|1\rangle$, $|2\rangle$,$|3\rangle$ образуют ортонормированный базис, а оператор $\hat{G}$ задается выражениями

$$\hat{G}|1\rangle = 2|1\rangle - 4|2\rangle + 7|3\rangle,$$
$$\hat{G}|2\rangle = -2|1\rangle + 3|3\rangle,$$
$$\hat{G}|3\rangle = 11|1\rangle + 2|2\rangle - 6|3\rangle.$$

Найти матричное представление $\hat{G}$ в базисе $|1\rangle$, $|2\rangle$,$|3\rangle$.

2.1.4. * Оператор системы задан выражением

$$\hat{H} = a(|1\rangle\langle 1| - |2\rangle\langle 2| + |1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|).$$

Найти собственные значения $\hat{H}$ и соответствующие им собственные вектора.

2.1.5. (также в разделе 10) Пусть состояния $|1\rangle$, $|2\rangle$,$|3\rangle$ образуют ортонормированный базис, а оператор $\hat{P}_2$ определяется как $\hat{P}_2 = |2\rangle\langle 2|$. Найти матричное представление $\hat{P}_2$, а также его собственные значения и собственные вектора. Для состояния

$$|A\rangle = \frac{1}{\sqrt{83}}(-3|1\rangle + 5|2\rangle + 7|3\rangle)$$

найти $\hat{P}_2|A\rangle$.

2.1.6. Примером базиса в пространстве $\mathbb{L}_2$ (пространстве функций действительной переменной, интегрируемых с квадратом модуля) является система функций Эрмита

$$\Phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!\cdot 2^n\sqrt{\pi}}} H_n(x) e^{-x^2/2},$$

где $H_n(x)$ – полиномы Эрмита, определенные выражением

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}.$$

Зададим функцию $\psi(x)$ формулами

$$\psi(x) = 0 \quad \left(|x| > \frac{1}{2}\right), \quad \psi(x) = 1 \quad \left(|x| \leq \frac{1}{2}\right)$$

Она представляет собой нормированный вектор в пространстве $\mathbb{L}_2$ и может быть разложена по базису $\{\Phi_n(x)\}$.

При каком минимальном значении N частичная сумма такого разложения

$$\psi_N\left(x\right)=\sum_{n=0}^{N}a_n\Phi_n\left(x\right)$$

представит функцию $\psi\left(x\right)$ с фиделити **F** ≥ 0.9?

2.1.7. Оператор $\hat{Q}$, действуя на функцию ψ, делает ψ^2. Проверить линейность оператора.

2.2. Эрмитово сопряжение

2.2.1. * При каких значениях параметров x и y матрица

$$\hat{A}=\begin{vmatrix} 0.3 & 0.4i \\ x & y \end{vmatrix},$$

будет **а)** эрмитовой; **б)** унитарной?

2.2.2. Вычислить коммутатор операторов $\hat{A}$ и $\hat{A}^{+}$:

$$\hat{A}\ =\hat{x}\ +\ \hat{d},\ \ \hat{A}^{+}\ =\ \hat{x}-\hat{d},$$

где $\hat{d}$ – оператор дифференцирования.

2.2.3. Эрмитова матрица общего вида в пространстве $\mathbb{C}_2$ имеет вид

$$\hat{L}=\begin{vmatrix} p & q \\ q^* & r \end{vmatrix},$$

где p и r – вещественные параметры, а q и q^* – комплексно сопряженные. Собственные значения этой матрицы

$$\lambda_{1,2}=\frac{1}{2}\left(p+r\pm\sqrt{p-r^2+4|q|^2}\right).$$

Найти соответствующие этим собственным значениям нормированные собственные векторы. Исследовать их структуру при $|q|\to 0$ и при $|q|\to\infty$.

2.2.4. (также в разделе 12) Эрмитовы операторы $\hat{A},\hat{B},\hat{L}$ удовлетворяют следующим коммутационным соотношениям: $[\hat{A},\hat{L}]=0$, $[AB,\hat{L}]=0$, $[\hat{A},\hat{B}]\neq 0$. Показать, что среди собственных значений оператора $\hat{L}$ обязательно есть вырожденные.

2.3. Унитарные операторы

2.3.1. Доказать унитарность оператора Фурье.

2.3.2. * Оператор сдвига определяется следующим образом:

$$\hat{T}_a\psi(x)\stackrel{\text{def}}{=}\psi(x-a),$$

где $\psi(x)$ – произвольная волновая функция. Найти аналитический вид этого оператора и показать его унитарность.

2.4. Спектр и собственные функции

2.4.1. Вычислить собственные значения оператора

$$\hat{H}(V)=\begin{vmatrix} E_1 & V & 0 \\ V & E_2 & V \\ 0 & V & E_3 \end{vmatrix}.$$

Построить графики зависимости собственных значений H_i ($i=1,2,3$) от V. Сколько собственных значений увеличивается с ростом V?
Указание: при решении секулярного уравнения пользоваться не формулами Кардано, а приближенными методами.

2.4.2. * Найти собственные значения и собственные функции указанных неэрмитовых операторов и выяснить их свойства:

а) $x-\frac{d}{dx}$; б) $x+\frac{d}{dx}$; в) $\hat{a}=\begin{vmatrix}1 & i\\ 0 & 0\end{vmatrix}$ г) $\hat{b}=\begin{vmatrix}0 & 1\\ 0 & 0\end{vmatrix}$;

2.4.3. При каком значении α оператор

$$\begin{vmatrix}\sin^2\alpha & \mathrm{tg}^2\,\alpha\\ \mathrm{ctg}^2\,\alpha & \cos^2\alpha\end{vmatrix}$$

будет иметь равные СЗ?

2.4.4. На пространстве функций $\mathbb{L}_2(0,1)$, интегрируемых с квадратом модуля на отрезке от 0 до 1, ортогонализовать и нормировать систему функций

$$\psi_1=1,\quad \psi_2=x,\quad \psi_3=x^2.$$

2.4.5. (также в разделе 10) Оператор ортогонального проектирования определяется соотношениями $\hat{P}^2=\hat{P}$, $\hat{P}=\hat{P}^+$. Показать, что
а) оператор $\hat{I}-\hat{P}$ также является проектором,
б) для любого нормированного состояния $0\le\left\langle\hat{P}\right\rangle\le 1$,
в) если $\hat{P},\hat{Q}$ являются проекторами в M,N, оператор $\hat{P}\hat{Q}$ является проектором только если $\hat{P}$ и $\hat{Q}$ коммутируют. Показать, что в этом случае $\hat{P}\hat{Q}$ является проектором на $M\cap N$.
г) если $\hat{P}_1,\hat{P}_2,\ldots,\hat{P}_N$ – операторы проектирования, то оператор $\hat{P}_1+\hat{P}_2+\ldots+\hat{P}_N$ является проектором только при выполнении условия $\hat{P}_i\hat{P}_j=\delta_{ij}\hat{P}_i$.

2.4.6. Дано состояние $\left|\alpha\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{83}}(-3\left|1\right\rangle+5\left|2\right\rangle+7\left|3\right\rangle)$, где $\left|1\right\rangle,\left|2\right\rangle,\left|3\right\rangle$ образуют ортонормированный базис. Каковы возможные результаты измерения в этом базисе

$$\hat{Y}=\begin{vmatrix}2 & 0 & 0\\ 0 & 3 & 0\\ 0 & 0 & 6\end{vmatrix}$$

и какова вероятность их реализации?

2.4.7. Пусть наблюдаемой величине соответствует оператор

$$\hat{R}=\begin{vmatrix}6 & -2\\ -2 & 9\end{vmatrix},$$

а $\psi=\begin{vmatrix}a\\ b\end{vmatrix}$, ($|a|^2+|b|^2=1$) – некоторое произвольное состояние. Получить $\left\langle\hat{R}^2\right\rangle$ двумя способами:
а) прямым расчетом $\left\langle\hat{R}^2\right\rangle=\langle\psi|\hat{R}^2|\psi\rangle$,

б) найдя собственные значения (r_1, r_2) и собственные вектора $|r_1\rangle, |r_2\rangle$ $\hat{R}^2$ или $\hat{R}$, представив $|\psi\rangle$ в виде линейной комбинации собственных векторов, вычислить $\langle \hat{R}^2 \rangle = r_1^2 |c_1|^2 + r_2^2 |c_2|^2$.

2.4.8. Найти собственные значения и собственные векторы бесконечной трехдиагональной матрицы $\hat{A}$, элементы A_{nm} ($n, m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) которой заданы соотношениями (параметры E и V вещественны):

$$A_{nn} = E$$

(все элементы на главной диагонали одинаковы и равны E),

$$A_{n,\, n\pm 1} = V$$

(все элементы на обеих диагоналях, примыкающих к главной, одинаковы и равны V),

$$A_{nm} = 0 \text{ при } m \neq n,\ m \neq n \pm 1$$

(все остальные элементы равны 0).

2.4.9. Найти собственные значения и собственные векторы бесконечной трехдиагональной матрицы $\hat{A}$, элементы A_{nm} ($n, m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) которой заданы соотношениями (параметры ε, E и V вещественны):

$$A_{00} = \varepsilon,$$

$$A_{nn} = E \text{ при } |n| \geq 1$$

$$A_{n,\, n\pm 1} = V,$$

$$A_{nm} = 0 \text{ при } m \neq n,\ m \neq n \pm 1.$$

2.5. Произведение операторов, функции от операторов

2.5.1. Вычислить оператор $\hat{R}_1(\alpha) = \exp(i\alpha\hat{\sigma}_1)$, где

$$\hat{\sigma}_1 = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}$$

есть первая матрица Паули.

2.5.2. Вычислить результат действия оператора

$$\hat{T}(\lambda) = \exp\left(\lambda \frac{d}{dx}\right)$$

на гладкую функцию $f(x)$.

2.5.3. Пусть

$$\hat{H}(V) = \begin{vmatrix} E_1 & V \\ V & E_2 \end{vmatrix}$$

Вычислить матрицу оператора

$$\hat{U}(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right).$$

Указание: перейти в базис, в котором матрица $\hat{H}$ диагональна.

2.5.4. (также в разделе 12) Пусть операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ таковы, что их коммутатор $\hat{C}=\left[\hat{A},\hat{B}\right]$ коммутирует и с $\hat{A}$, и с $\hat{B}$ $\left(\left[\hat{A},\hat{C}\right]=\left[\hat{B},\hat{C}\right]=0\right)$. Доказать, что при этих условиях выполняется равенство

$$e^{\hat{A}+\hat{B}}=e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}e^{-\frac{1}{2}\left[\hat{A},\hat{B}\right]}$$

2.5.5. * Представить матрицу $\hat{M}=\left(a\hat{I}+b\hat{\sigma}_i\right)^{-1}$ ($\hat{I}$ - единичная матрица, $\hat{\sigma}_i$ - одна из матриц Паули) в виде линейной комбинации $\hat{I}$ и $\hat{\sigma}_i$.

2.5.6. Операторы координаты $\hat{q}$ и импульса $\hat{p}$ связаны соотношением $\left[\hat{p},\hat{q}\right]=-i\hbar$. Доказать, что унитарный оператор сдвига начала отсчета координаты и импульса $\hat{q}\to\hat{q}+q_0$ и $\hat{p}\to\hat{p}+p_0$ имеет вид

$$\hat{U}\left(q_0,p_0\right)=\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(p_0\hat{q}-q_0\hat{p}\right)+i\varphi\right],$$

где φ - произвольное действительное число.

2.5.7. Предполагая λ малой величиной, найти разложение оператора $\left(\hat{A}-\lambda\hat{B}\right)^{-1}$ по степеням λ.

2.5.8. Доказать тождество Бекера–Кэмпбела–Хаусдорфа:

$$e^{\hat{F}}\hat{G}e^{-\hat{F}}=\hat{G}+[\hat{F},\hat{G}]+\frac{1}{2!}[\hat{F},[\hat{F},\hat{G}]]+\frac{1}{3!}[\hat{F},[\hat{F},[\hat{F},\hat{G}]]]+\ldots$$

2.5.9. Пусть $\left|q\right\rangle$ - собственный вектор оператора $\hat{Q}$, которому соответствует собственное значение q. Показать, что $\left|q\right\rangle$ является также собственным вектором операторов $\hat{Q}^n$ и $e^{\hat{Q}}$. Найти соответствующие $\left|q\right\rangle$ собственные значения.

2.6. Алгебра операторов, коммутационные соотношения

2.6.1. Пусть оператор $\hat{a}$ таков, что

$$\hat{a}^2=0,\qquad \hat{a}\hat{a}^{+}+\hat{a}^{+}\hat{a}=1.$$

Найти спектр оператора $\hat{n}=\hat{a}^{+}\hat{a}$. Найти вид матриц операторов $\hat{a}$ и $\hat{a}^{+}$ в пространстве $\mathbb{C}_2$.

2.6.2. Может ли существовать оператор $\hat{c}$ такой, что $\hat{c}\hat{c}^{+}+\hat{c}^{+}\hat{c}=-1$?

2.6.3. * Пусть оператор $\hat{a}$ таков, что

$$\hat{a}\hat{a}^{+}-\hat{a}^{+}\hat{a}=\hat{I}.$$

Показать, что среди комплексных матриц – операторов в пространстве $\mathbb{C}_2$ **нет** оператора, удовлетворяющего этому соотношению.

2.6.4. а) Доказать тождество Якоби

$$[\hat{A},[\hat{B},\hat{C}]]+[\hat{C},[\hat{A},\hat{B}]]+[\hat{B},[\hat{C},\hat{A}]]=0.$$

б) Используя тождество Якоби, найти $[\hat{B},\hat{C}]$, если $[\hat{C},\hat{A}]=\lambda\hat{A}$, $[\hat{A},\hat{B}]=\hat{C}$.

2.6.5. Эрмитов оператор $\hat{F}$ имеет N различных собственных значений. Показать, что оператор $\hat{F}^N$ линейно выражается через операторы $\hat{I}, \hat{F}, \ldots, \hat{F}^{N-1}$.

2.6.6. Пусть $\hat{A}, \hat{B}$ и $\hat{C}$ – эрмитовы операторы. Могут ли они быть связаны коммутационным соотношением $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{C}$?

2.6.7. Пусть $\hat{p}$ и $\hat{q}$ – операторы с коммутационным соотношением $[\hat{p}, \hat{q}] = -i\hbar$. Вычислить коммутатор $[\hat{p}^2, \hat{q}^2]$.

2.7. Интегральные операторы

2.7.1. * Оператор инверсии $\hat{P}$ меняет направление осей системы координат. В одномерном случае $\hat{P}f(x) = f(-x)$. Представить $\hat{P}$ в виде интегрального оператора.

2.7.2. Ядро $L(x, x')$ оператора $\hat{L}$ является функцией вида:
а) $L = f(x + x')$; б) $L = f(x - x')$; в) $L = f(x)g(x')$.
Какие ограничения на функции $f(x)$ и $g(x)$ вытекают из эрмитовости оператора $\hat{L}$

2.8. След

2.8.1. Для матриц плотности $\hat{\rho}$ (некоторого подкласса эрмитовых матриц) энтропия S определяется соотношением

$$S = -\mathrm{Sp}\ \hat{\rho} \ln \hat{\rho},$$

где Sp $\hat{A}$ – след матрицы $\hat{A}$ (сумма диагональных элементов). Вычислить (с двумя десятичными знаками) энтропию S для матрицы плотности

$$\hat{\rho} = \begin{vmatrix} 0.3 & 0.4i \\ -0.4i & 0.7 \end{vmatrix}$$

2.8.2. * а) Доказать, что след матрицы не меняется при унитарном преобразовании.
б) Могут ли две матрицы $\hat{A}$, $\hat{B}$ конечного ранга N удовлетворять коммутационному соотношению $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = -i\hat{I}$?

2.8.3. Пусть $\hat{A}$ – матрица $n{\times}n$. Доказать, что $\det\left(\exp\left(\hat{A}\right)\right) = \exp\left(\mathrm{Sp}\left(\hat{A}\right)\right)$.

2.9. Преобразование Фурье

2.9.1. Пусть $\hat{A} = \hat{x} + \hat{d}$ (где $\hat{x}$ и $\hat{d}$ определены в задаче 2.2.2). Доказать, что если $f(x)$ - СФ оператора Фурье, то $\hat{A}f(x)$ и $\hat{A}^{+}f(x)$ тоже являются СФ того же оператора.

2.9.2. Вычислить $\phi = \hat{\boldsymbol{F}}\psi$ для следующих функций $\psi(x)$:

а) $\psi_1(x) = \exp(-\alpha|x|)$, b) $\psi_2(x) = \dfrac{a}{a^2 + x^2}$,

c) $\psi_3(x) = \exp\left(-\dfrac{\beta x^2}{2}\right)$, d) $\psi_4(x) = \mathrm{ch}^{-1}(\gamma x)$.

Оператор Фурье определен соотношением $\hat{\boldsymbol{F}}f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int e^{ixy}f(x)dy$.

2.9.3. * Найти вид оператора $\hat{x} = x$ в импульсном представлении.

2.10. Проекционные операторы

2.10.1. * Оператор проектирования (проектор; проекционная матрица) обладает свойством

$$\hat{P}^2 = \hat{P}, \quad \hat{P}^{+} = \hat{P}$$

Найти его спектр. Найти вид соответствующих матриц в пространстве $\mathbb{C}_2$.

2.10.2. При каких значениях параметра λ оператор

$$\hat{M} = \begin{vmatrix} \frac{1}{2} & \lambda \\ \frac{1}{4\lambda} & \frac{1}{2} \end{vmatrix}$$

является проектором?

2.10.3. Пусть $\hat{T}$ – эрмитова матрица из $\mathbb{C}_2$ с неравными собственными значениями, $\lambda_1 \neq \lambda_2$, а $\hat{I}$ - единичная матрица. Показать, что матрицы

$$\hat{P}_1 = \frac{1}{\lambda_1 - \lambda_2}\left(\hat{T} - \lambda_2 \hat{I}\right), \; \hat{P}_2 = \frac{1}{\lambda_2 - \lambda_1}\left(\hat{T} - \lambda_1 \hat{I}\right)$$

являются проекционными. Показать, что

$$\hat{T}^2 = \lambda_1^2 \hat{P}_1 + \lambda_2^2 \hat{P}_2.$$

2.11. Матрицы Паули

2.11.1. * Для матриц Паули, заданных соотношениями

$$\hat{\sigma}_1 = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}, \quad \hat{\sigma}_2 = \begin{vmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{vmatrix}, \quad \hat{\sigma}_3 = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix},$$

вычислить попарные коммутаторы

$$\hat{C}_{ij} = [\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j].$$

2.11.2. Вычислить матрицы

$$\hat{\tau}_i = \sqrt{\hat{\sigma}_i},$$

где $\hat{\sigma}_i$ $(i = 1,2,3)$ – матрицы Паули.

2.11.3. Показать, что для любых c_i верно соотношение:

$$(c_1\hat{\sigma}_1 + c_2\hat{\sigma}_2 + c_3\hat{\sigma}_3)^2 = (c_1^2 + c_2^2 + c_3^2)\hat{I},$$

где $\hat{\sigma}_i$ – матрицы Паули.