МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФГБОУ ВО «ТВЕРСКОЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Утверждаю:

Руководитель ООП

_______________ Б.Б.Педько

«21» _______мая_______ 2024 г.

Рабочая программа дисциплины

Квантовая механика

Закреплена за кафедрой:	**Общей физики**
Направление подготовки:	**03.03.03 Радиофизика**
Направленность (профиль):	**Материалы и устройства радиоэлектроники (беспилотные системы, программно-аппаратные**
Квалификация:	**Бакалавр**
Форма обучения:	**очная**
Семестр:	**6,7**

Программу составил(и):

канд. физ.-мат. наук, доц., Зубков Виктор Викторович

Тверь, 2024

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Цели освоения дисциплины (модуля):

Целью освоения дисциплины является формирование у студентов основных представлений об основании и методах, лежащих в основе квантовой парадигмы.

Задачи:

Задачами освоения дисциплины являются:

- изучение основных физических моделей и процессов в рамках как нерелятивистской, так и релятивистской квантовой механики;
- установление связи между различными физическими явлениями, вывод основных законов в виде математических уравнений.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП

Цикл (раздел) ОП: Б1.О

Требования к предварительной подготовке обучающегося:

Раздел теоретической физики «Квантовая механика» излагается в 6-7 семестрах и его главной задачей является создание фундаментальной базы знаний, на основе которой в дальнейшем можно развивать более углубленное и детализированное изучение всех разделов физики в теоретической физики и различных специализированных курсов направления «Физика». Для успешного освоения дисциплины необходимо уверенно владеть математическим аппаратом в рамках курсов, читаемых для студентов-физиков. Некоторые необходимые элементы математического и функционального анализа и алгебры, не входящие в стандартный курс высшей математики, читаемой для физиков, вводятся по мере необходимости.

Интегральные уравнения

Дифференциальные уравнения

Аналитическая геометрия и линейная алгебра

Математический анализ

Векторный и тензорный анализ

Теория функций комплексного переменного

Теория вероятностей и математическая статистика

Атомная физика

Механика

Теоретическая механика

Электродинамика

Методы математической физики

Оптика

Электричество и магнетизм

Физика атомного ядра и элементарных частиц

Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:

Термодинамика и статистическая физика

Нанотехнологии в физике конденсированного состояния

Физика магнитных явлений

Микромагнетизм

Физика магнитных материалов

Физика полупроводников

Основы физического металловедения

Научно-исследовательская работа

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ

Общая трудоемкость	7 ЗЕТ
Часов по учебному плану	252
в том числе:	
аудиторные занятия	108
самостоятельная работа	117
часов на контроль	27

4. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫЕ С ПЛАНИРУЕМЫМИ РЕЗУЛЬТАТАМИ ОСВОЕНИЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

ОПК-1.1: Обладает базовыми знаниями в области физики и радиофизики

ОПК-2.2: Проводит теоретическое изучение объектов, систем и процессов в рамках темы научного исследования

УК-1.1: Анализирует задачу, выделяя ее базовые составляющие

УК-1.2: Определяет, интерпретирует и ранжирует информацию, требуемую для решения поставленной задачи

УК-1.5: Рассматривает и предлагает возможные варианты решения поставленной задачи, оценивая их достоинства и недостатки

5. ВИДЫ КОНТРОЛЯ

Виды контроля в семестрах:	
экзамены	7
зачеты	6

6. ЯЗЫК ПРЕПОДАВАНИЯ

Язык преподавания: русский.

7. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Код занят.	Наименование разделов и тем	Вид занятия	Семестр / Курс	Часов	Источники	Примечание
	Раздел 1. Переход от старой к новой квантовой механике.					
1.1	Старая квантовая механика. Постулаты Нильса Бора. Переход к новой квантовой механике. Правила соответствия Макса Борна.	Лек	6	2	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.6 Л1.7Л2.1 Л2.2 Л2.3	
1.2	Фундаментальное коммутационное соотношение. Уравнение Вернера Гайзенберга.	Лек	6	2	Л1.4 Л1.5 Л1.7	
	Раздел 2. Связь между операторами и измеримыми величинами. Математический аппарат квантовой механики.					

2.1	Связь между операторами и измеримыми величинами. Оператор плотности. Теория измерений.	Лек	6	6	Л1.3 Л1.7	
2.2	Математический аппарат квантовой механики. Гильбертово пространство и векторы состояния. Операторы.	Пр	6	9	Л1.1 Л1.5 Л1.6 Л1.7	
2.3	Эрмитовы и унитарные операторы. Матрица плотности. Теория измерений.	Ср	6	10		
	Раздел 3. Эволюция квантовой системы. Картины Гайзенберга и Шредингера. Постулаты квантовой механики.					
3.1	Эволюция квантовой системы. Картины Гайзенберга и Шредингера. Уравнение Шредингера. Уравнение фон Неймана. Постулаты квантовой механики.	Лек	6	1	Л1.1 Л1.5 Л1.7	
3.2	Координатное и импульсное представления в квантовой механике	Лек	6	1	Л1.1 Л1.6 Л1.7	
3.3	Совместимые наблюдаемые. Полный набор наблюдаемых. Соотношение неопределенностей Гайзенберга.	Лек	6	2	Л1.1 Л1.7	
3.4	Оператор эволюции и пропагатор. Стационарные состояния квантовой системы. Взгляд Фейнмана: интегралы по траекториям	Лек	6	2	Л1.7	
3.5	Эволюция квантовой системы.	Пр	6	4	Л1.1 Л1.5 Л1.6 Л1.7	
3.6	Свободное движение. Волновой пакет. Уравнение непрерывности.	Лек	6	1	Л1.1 Л1.7	
3.7	Гармонический осциллятор. Операторы рождения и уничтожения.	Лек	6	2	Л1.1 Л1.5 Л1.7	
3.8	Симметрии в квантовой механике. Интегралы движения.	Лек	6	2	Л1.1 Л1.7	
3.9	Переход к классической механике. Теорема вириала. Теоремы Эренфеста.	Лек	6	1	Л1.1 Л1.5 Л1.7	
3.10	Гармонический осциллятор. Когерентные состояния.	Пр	6	4	Л1.3 Л1.7	

3.11	Одномерные задачи. Потенциальные ямы и барьеры.	Пр	6	5	Л1.5 Л1.7	
3.12	Эволюция квантовой системы.	Ср	6	9	Л1.1 Л1.2 Л1.5 Л1.6 Л1.7	
3.13	Гармонический осциллятор. Когерентные состояния.	Ср	6	8	Л1.1 Л1.2 Л1.5 Л1.6 Л1.7	
3.14	Одномерные задачи. Потенциальные ямы и барьеры.	Ср	6	10	Л1.1 Л1.5 Л1.6 Л1.7	
	Раздел 4. Эволюция системы в центральном поле.					
4.1	Оператор углового момента в квантовой механике.	Лек	6	2	Л1.1 Л1.5 Л1.7	
4.2	Задача двух тел в квантовой механике.	Лек	6	2	Л1.1 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л1.7	
4.3	Атом водорода.	Лек	6	2	Л1.1 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л1.7	
4.4	Угловой момент. Движение в центральных полях.	Пр	6	6	Л1.1 Л1.5 Л1.6	
4.5	Задача двух тел в квантовой механике.	Ср	6	15	Л1.1 Л1.5 Л1.6 Л1.7	
	Раздел 5. Приближенные методы решения задач в квантовой механике					
5.1	Квазиклассика. ВКБ приближение.	Лек	7	2	Л1.1 Л1.5 Л1.7	
5.2	Стационарная теория возмущений.	Лек	7	3	Л1.1 Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л1.7	
5.3	Нестационарная теория возмущений. Теория переходов.	Лек	7	4	Л1.1 Л1.5 Л1.6 Л1.7	

5.4	Вариационный принцип Ритца и вариационный метод Ритца	Лек	7	1	Л1.1 Л1.7	
5.5	ВКБ приближение в квантовой механике	Пр	7	2	Л1.1 Л1.7	
5.6	Стационарная теория возмущений.	Пр	7	4	Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л1.7	
5.7	Теория переходов	Пр	7	2	Л1.7	
5.8	Стационарная теория возмущений.	Ср	7	20	Л1.1 Л1.5 Л1.6 Л1.7	
5.9	Нестационарная теория возмущений. Теория переходов.	Ср	7	18	Л1.1 Л1.6 Л1.7	
	Раздел 6. Спин. Магнитные взаимодействия с элементами релятивистской квантовой теории					
6.1	Спин. Уравнение Паули.	Лек	7	2	Л1.1 Л1.5 Л1.7	
6.2	Элементы релятивистской квантовой механики. Уравнение Дирака	Лек	7	2	Л1.7	
6.3	Свободная дираковская частица. Античастицы.	Лек	7	2	Л1.7	
6.4	Квазирелятивистское приближение. Спин-орбитальное взаимодействие и контактное взаимодействие.	Лек	7	2	Л1.1 Л1.5 Л1.6 Л1.7	
6.5	Сложение моментов. Коэффициенты Клебша-Гордана.	Лек	7	2	Л1.1 Л1.5 Л1.6 Л1.7	
6.6	Поправки к состоянию атома водорода. Тонкая структура атома. Сверхтонкая структура атома.	Лек	7	2	Л1.1 Л1.7	
6.7	Тождественные частицы. Бозоны и фермионы. Принцип Паули.	Лек	7	1	Л1.1 Л1.7	
6.8	Методы Хартри и Хартри-Фока	Лек	7	2	Л1.1 Л1.7	
6.9	Атом гелия	Лек	7	1	Л1.7	
6.10	Эволюция спина. ЭПР.	Пр	7	2	Л1.1 Л1.5 Л1.6 Л1.7	

6.11	Сложение моментов в квантовой механике	Пр	7	2	Л1.1 Л1.7	
6.12	Атом гелия.Теория возмущений. Вариационный метод Ритца.	Пр	7	4	Л1.7	
6.13	Метод Хартри-Фока.	Пр	7	2	Л1.7	
6.14	LS- и jj-связь	Пр	7	2	Л1.7	
6.15	Движение в магнитном поле.	Пр	7	2	Л1.7	
6.16	Взаимодействие атомов с классическим электромагнитным полем	Пр	7	4	Л1.7	
6.17	LS- и jj-связь	Ср	7	10	Л1.1 Л1.7	
6.18	Взаимодействие атомов с классическим электромагнитным полем	Ср	7	12	Л1.1 Л1.7	
6.19	Метод Хартри-Фока.	Ср	7	5	Л1.1 Л1.6 Л1.7	
	Раздел 7. Контроль					
7.1	Экзамен	Экзамен	7	27		

Образовательные технологии

классические лекции, решение групповых и индивидуальных задач.

Список образовательных технологий

1	Активное слушание

8. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

8.1. Оценочные материалы для проведения текущей аттестации

Смотри приложение

8.2. Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации

см. приложение

8.3. Требования к рейтинг-контролю

Если семестр заканчивается зачетом, то максимальное число баллов 100 за семестр.

Изучение дисциплины в течение семестра подразделено на 2 модуля:

1 модуль: максимум – 40 баллов, из них 30 баллов – текущая работа, 10 баллов – рейтинг-контроль;

2 модуль: максимум – 60 баллов, из них 50 баллов – текущая работа, 10баллов – рейтинг-контроль.

Обучающемуся, набравшему 40 баллов и выше по итогам работы в семестре, выставляется «зачет». Обучающийся, набравший до 39 баллов, сдает зачет.

Если семестр заканчивается экзаменов, всего студент может получить 100 баллов = 60 баллов на модули + 40 баллов на экзамене

В каждом модуле студент может получить максимум 30 баллов, из них 20 баллов за текущую работу, а 10 баллов – за рейтинговый контроль.

Обучающемуся, набравшему 40–54 балла, при подведении итогов семестра (на последнем занятии по дисциплине) в рейтинговой ведомости учета успеваемости и зачетной книжке может быть выставлена оценка «удовлетворительно».

Обучающемуся, набравшему 55–57 баллов, при подведении итогов семестра (на последнем занятии по дисциплине) в графе рейтинговой ведомости учета успеваемости «Премиальные баллы» может быть добавлено 15 баллов и выставлена экзаменационная оценка «хорошо».

Обучающемуся, набравшему 58–60 баллов, при подведении итогов семестра (на последнем занятии по дисциплине) в графе рейтинговой ведомости учета успеваемости «Премиальные баллы» может быть добавлено 27 баллов и выставлена экзаменационная оценка «отлично».

Обучающийся, набравший до 39 баллов включительно, сдает экзамен.

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

9.1. Рекомендуемая литература

9.1.1. Основная литература

Шифр	Литература
Л1.1	Ландау, Лифшиц, Теоретическая физика. Том 3. Квантовая механика (нерелятивистская теория), Москва: Издательская фирма "Физико-математическая литература" (ФИЗМАТЛИТ), 2016, ISBN: 978-5-9221-0530-9, URL: https://znanium.com/catalog/document?id=369173
Л1.2	Львовский, Отличная квантовая механика : решения. Часть 2, Москва: ООО "Альпина нон-фикшн", 2019, ISBN: 978-5-91671-952-9, URL: https://znanium.com/catalog/document?id=368826
Л1.3	Львовский, Отличная квантовая механика : учебное пособие. Часть 1, Москва: ООО "Альпина нон-фикшн", 2019, ISBN: 978-5-91671-952-9, URL: https://znanium.com/catalog/document?id=368791
Л1.4	Ведринский Р.В., Квантовая механика, Ростов-на-Дону: Издательство Южного федерального университета (ЮФУ), 2009, ISBN: 978-5-9275-0706-1, URL: https://znanium.com/catalog/document?id=96700
Л1.5	Краснопевцев, Квантовая механика в приложениях к физике твердого тела, Новосибирск: Новосибирский государственный технический университет (НГТУ), 2010, ISBN: 978-5-7782-1464-4, URL: https://znanium.com/catalog/document?id=52371
Л1.6	Савельев И. В., Основы теоретической физики. В 2 томах. Том 2. Квантовая механика, Санкт-Петербург: Лань, 2023, ISBN: 978-5-507-47138-6, URL: https://e.lanbook.com/book/330521
Л1.7	Киселёв В. В., Квантовая механика: курс лекций, Москва: МЦНМО, 2009, ISBN: 978 -5-94057-497-2, URL: https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=62965

9.1.2. Дополнительная литература

Шифр	Литература
Л2.1	Елютин П. В., Кривченков В. Д., Квантовая механика с задачами, Москва: Физматлит, 2001, ISBN: 978-5-9221-0077-9, URL: https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=68967
Л2.2	Ведринский Р. В., Квантовая механика, Ростов-на-Дону: Южный федеральный университет, 2009, ISBN: 978-5-9275-0706-1, URL: https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=240937

Л2.3	Краснопевцев Е. А., Квантовая механика в приложениях к физике твердого тела, Новосибирск: Новосибирский государственный технический университет, 2010, ISBN: 978-5-7782-1464-4, URL: https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=435995

9.3.1 Перечень программного обеспечения

1	Kaspersky Endpoint Security 10 для Windows
2	Adobe Acrobat Reader
3	Google Chrome
4	OpenOffice
5	WinDjView

9.3.2 Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

1	ЭБС «ZNANIUM.COM»
2	ЭБС «ЮРАИТ»
3	ЭБС «Университетская библиотека онлайн»
4	ЭБС «Лань»
5	Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU (подписка на журналы)
6	Журналы American Chemical Society (ACS)
7	Журналы American Institute of Physics (AIP)
8	Журналы издательства Taylor&Francis
9	Ресурсы издательства Springer Nature
10	Архивы журналов издательства Nature
11	Архивы журналов издательства The Institute of Physics
12	Архивы журналов издательства Oxford University Press

10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Аудит-я	Оборудование
3-218	комплект учебной мебели, переносной ноутбук, проектор, экран
3-226	комплект учебной мебели, Микшерный пульт, Аудиокомплект, Интерактивная система, проектор, Телекоммуникационные шкафы, экран, компьютер
3-228	комплект учебной мебели, переносной ноутбук, проектор, экран
3-227	комплект учебной мебели, переносной ноутбук, проектор, экран

11. МЕТОДИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

Смотри приложение

Типовые контрольные задания для проверки уровня сформированности компетенции

Этап формирования компетенции, в котором участвует дисциплина	**Типовые контрольные задания для оценки знаний, умений, навыков**	**Показатели и критерии оценивания компетенции, шкала оценивания**		
Начальный	***Задания для проверки сформированности знаний:***	***Высокий уровень (3 балла по каждому критерию)***	***Средний уровень (2 балла по каждому критерию)***	***Низкий уровень (1 балл по каждому критерию)***
	Евклидово и гильбертово пространства	Дает определение евклидовому и гильбертову пространствам. Описывает свойства пространств. Понимает их сходство и различие.	Дает определение евклидовому и гильбертову пространствам. Описывает свойства пространств. Затрудняется ответить в чем их сходство и различие.	Дает определение евклидовому и гильбертову пространствам. Испытывает трудности (путается) в описании свойств евклидового и гильбертового пространств. Затрудняется ответить, в чем их сходство и различие.
	Базис. Линейные операторы. Среднее значение оператора. Функции операторов	Имеет четкие представления о физических величинах и их связей с операторами. И умеет оценивать связь измеряемых величин с собственными значениями операторов.	Имеет четкие представления о физических величинах и их связей с операторами. Плохо умеет оценивать связь измеряемых величин с собственными значениями операторов.	Имеет четкие представления о физических величинах и их связей с операторами. Не умеет оценивать связь измеряемых величин с собственными и значениями операторов.
Промежуточный	***Задания для проверки сформированности умений:***	***Высокий уровень***	***Средний уровень***	***Низкий уровень***

		(3 балла по каждому критерию)	***(2 балла по каждому критерию)***	***(1 балл по каждому критерию)***
	Найти вероятность отражения частицы при прохождении над одномерным потенциальным барьером $V\left(x\right)=V_0$ при $\left\|x\right\|>a$; $V\left(x\right)=0$ при $\left\|x\right\|>a$ (энергия частицы больше высоты барьера).	Понимает физику явления, указанного в условии задачи. Знает уравнение Шредингера в применении к стационарному случаю и уверенно применяет ее, записывая необходимые соотношения. Получает решение.	Понимает физику явления, указанного в условии задачи. Знает уравнение Шредингера в применении к стационарному случаю. Неуверенно использует физические условия, накладываемые на волновую функцию при решении уравнения Шредингера, записывая необходимые соотношения. Получает решение.	Понимает физику явления, указанного в условии задачи. Знает уравнение Шредингера в применении к стационарному случаю. С трудом применяет ее, записывая необходимые соотношения.
	Найти дифференциальное сечение упругого рассеяния α-частицы на α-частице (в системе центра масс).	Понимает математический аппарат квантовой теории, и записывает основные соотношения квантовой механики. Умеет получить квантовое решение в приближенном и точном случаях. Сравнение с классическим случаем. Получает	Понимает математический аппарат квантовой теории, но неуверенно записывает основные соотношения квантовой механики. Возникают трудности в получении точного решения и в сравнении с классическим случаем. Получает правильный	Понимает математический аппарат квантовой теории, и с трудом записывает основные соотношения квантовой механики. Получает неправильный ответ.

		правильный ответ.	ответ.	
	Задания для проверки сформированности знаний:	***Высокий уровень (3 балла по каждому критерию)***	***Средний уровень (2 балла по каждому критерию)***	***Низкий уровень (1 балл по каждому критерию)***
	Знать постулаты квантовой механики.	Знает постулаты квантовой механики. Умеет правильно перевести физическую задачу на язык квантовой механики.	Знает постулаты квантовой механики. Неуверенно переводит физическую задачу на язык квантовой механики.	Знает постулаты квантовой механики. Но не умеет правильно связать постулаты квантовой механики с решением квантовой задачи.
	Уравнение Дирака для электрона во внешнем электромагнитном поле. Уравнение Паули.	Знает физический смысл уравнений. Записывает уравнение Дирака и Паули. Выводит их из уравнения Шредингера.	Знает физический смысл уравнений. Записывает уравнение Дирака и Паули. Испытывает трудности при выводе их из уравнения Шредингера.	Знает физический смысл уравнений. Записывает уравнение Дирака и Паули. Не может вывести их из уравнения Шредингера.

Этап формирования компетенции, в котором участвует дисциплина	**Типовые контрольные задания для оценки знаний, умений, навыков**	**Показатели и критерии оценивания компетенции, шкала оценивания**		
Начальный	***Задания для проверки сформированности знаний:***	***Высокий уровень (3 балла по каждому критерию)***	***Средний уровень (2 балла по каждому критерию)***	***Низкий уровень (1 балл по каждому критерию)***
	Свойства скалярного произведения.	Знает определение скалярного произведения. Выводит из определения доказательс	Знает определение скалярного произведения. Испытывает сложность с	Знает определение скалярного произведения. Формулирует свойства скалярного произведени

		тва свойств скалярного произведения. Приводит примеры.	доказательством свойств скалярного произведения, но дает им определение. Приводит примеры.	я. Не может вывести их из определения скалярного произведения.
	Свойства эрмитовых операторов.	Дает определение эрмитову оператору. описывает его свойства. Выводит основные математические формулы для эрмитовых операторов	Дает определение эрмитову оператору. описывает его свойства. Испытывает трудности с выводом основных математических формул для эрмитовых операторов.	Дает определение эрмитову оператору. описывает его свойства. Приводит (без вывода) основные математические формулы для эрмитовых операторов.
Промежуточный	***Задания для проверки сформированности умений:***	***Высокий уровень (3 балла по каждому критерию)***	***Средний уровень (2 балла по каждому критерию)***	***Низкий уровень (1 балл по каждому критерию)***
	Найти уровни энергии и вектора состояния одномерного гармонического осциллятора в постоянном внешнем поле $H = p^2/2m + kx^2/2 - Fx$. Сравнить точный ответ с первой поправкой к осцилляторным уровням энергии, если внешнее поле рассматривается как возмущение.	Понимает физику явления, указанного в условии задачи. Знает математические приемы для получения точного решения гармонического осциллятора. Получает решение.	Понимает физику явления, указанного в условии задачи. Знает математические приемы получения точного решения гармонического осциллятора, но возникаю трудности с получением точного решения. Получает решение.	Понимает физику явления, указанного в условии задачи. Знает математические приемы получения точного решения гармонического осциллятора, но не может получить точное решение.
	Доказать, что если	Понимает	Понимает	Понимает

	$\left[\hat{A},\hat{B}\right]=1$, то $\left[\hat{A},\widehat{B^2}\right]=2\hat{B}$	математический аппарат квантовой теории, и записывает основные соотношения квантовой механики. Получает правильный ответ.	математический аппарат квантовой теории, но неуверенно записывает основные соотношения квантовой механики. Получает правильный ответ.	математический аппарат квантовой теории, и с трудом записывает основные соотношения квантовой механики. Получает неправильный ответ.
	Задания для проверки сформированности знаний:	***Высокий уровень (3 балла по каждому критерию)***	***Средний уровень (2 балла по каждому критерию)***	***Низкий уровень (1 балл по каждому критерию)***
	Знать основные положения волновой механики.	Знает основные положения волновой механики. Умеет правильно оценивать средние значения наблюдаемых физических величин.	Знает основные положения волновой механики. Умеет правильно оценивать средние значения наблюдаемых физических величин в основных частных случаях.	Знает основные положения волновой механики. Но не умеет оценивать средние значения наблюдаемых физических величин.
	Свободное движение релятивистского электрона.	Знает основные положения квантовой физики для свободного движения релятивистского электрона. Записывает и объясняет основные физические формулы.	Знает основные положения квантовой физики для свободного движения релятивистского электрона. Записывает и объясняет некоторые из основных физических формул.	Знает основные положения квантовой физики для свободного движения релятивистского электрона. Не может объяснить основных физических формул.

Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

VII. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины – *планы практических (семинарских) занятий:*

Семинар 1.

1. Найти квадрат оператора $x+\frac{d}{dx}$.
2. Найти квадрат оператора $x\frac{d}{dx}$.
3. Вычислить коммутатор $\left[\frac{d}{dx},x\right]$.
4. Вычислить коммутатор $\left[\frac{d^2}{dx^2},x\frac{d}{dx}\right]$.
5. Проверить, является ли оператор комплексного сопряжения $\hat{K}\psi=\psi^*$ линейным.
6. Проверить, является ли оператор инверсии $\hat{P}\psi\left(x\right)=\psi\left(-x\right)$ линейным.
7. Проверить, является ли оператор сдвига $\hat{T}_a$ на величину a линейным. $\hat{T}_a\psi\left(x\right)=\psi\left(x+a\right)$.
8. Доказать тождества для коммутаторов
   a. $\left[\hat{A}\hat{B},\hat{C}\right]=\hat{A}\left[\hat{B},\hat{C}\right]+\left[\hat{A},\hat{C}\right]\hat{B},\ \left[\hat{A},\hat{B}\hat{C}\right]=\left[\hat{A},\hat{B}\right]\hat{C}+\hat{B}\left[\hat{A},\hat{C}\right]$.
   b. $\left[\hat{A},\left[\hat{B},\hat{C}\right]\right]+\left[\hat{B},\left[\hat{C},\hat{A}\right]\right]+\left[\hat{C},\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right]=\hat{0}$.
   c. $\left[\hat{A}\hat{B},\hat{C}\hat{D}\right]=\hat{A}\left[\hat{B},\hat{C}\right]\hat{D}+\hat{A}\hat{C}\left[\hat{B},\hat{D}\right]+\hat{C}\left[\hat{A},\hat{D}\right]\hat{B}+\left[\hat{A},\hat{C}\right]\hat{D}\hat{B}$.
   d. $\left[\hat{A},\hat{B}\hat{C}\right]=\left[\hat{A},\hat{B}\right]_+\hat{C}-\hat{B}\left[\hat{A},\hat{C}\right]_+$,
9. Для операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$, удовлетворяющих условию $\left[\hat{A},\hat{B}\right]=\hat{I}$, найдите $\left[\hat{A},\hat{B}^2\right]$.
10. Найти коммутатор операторов $\hat{B}$ и $\hat{C}$, если $\left[\hat{C},\hat{A}\right]=\lambda\hat{A}$ и $\left[\hat{A},\hat{B}\right]=\hat{C}$.

Семинар 2

1. Используя фундаментальное коммутационное соотношение, вычислить коммутаторы:

   а) $\left[\mathbf{r},\hat{\mathbf{p}}^2\right]$, б) $\left[\hat{\mathbf{p}},\mathbf{r}^2\right]$, в) $\left[\mathbf{r},\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}}\right]$, г) $\left[\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}},\mathbf{r}^2\right]$, д) $\left[x_\alpha \hat{p}_\beta, x_{\alpha'}\hat{p}_{\beta'}\right]$,

   е) $\left[\hat{x}_\alpha,\hat{L}_\beta\right]$, ж) $\left[\hat{p}_\alpha,\hat{L}_\beta\right]$, з) $\left[\hat{L}_\alpha,\hat{L}_\beta\right]$, и) $\left[\hat{L}_\alpha,\hat{\mathbf{L}}^2\right]$, л) $\left[x_\alpha,\hat{\mathbf{L}}^2\right]$, л) $\left[\hat{p}_\alpha,\hat{\mathbf{L}}^2\right]$.

   Здесь $\hat{\mathbf{L}}=\left[\hat{\mathbf{r}}\times\hat{\mathbf{p}}\right]$ – оператор момента импульса.
2. Доказать тождества

   $\left[\hat{A}^n,\hat{B}\right]=n\hat{A}^{n-1}\left[\hat{A},\hat{B}\right]$, $\left[\hat{A},\hat{B}^n\right]=n\hat{B}^{n-1}\left[\hat{A},\hat{B}\right]$, если $\left[\hat{A},\hat{B}\right]$ коммутирует и с $\hat{A}$ и с $\hat{B}$
3. Найти собственные функции и собственные значения оператора $x+\dfrac{d}{dx}$.
4. Рассматривается одномерное движение частицы вдоль оси x. Найти собственные значения и собственные функции оператора импульса $\hat{p}_x=-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$.
5. Найдите собственные функции и собственные значения оператора $\hat{L}_z=-i\hbar\partial/\partial\varphi$. Это оператор проекции орбитального момента на ось аппликат. φ – азимутальный угол.
6. Показать, что функция $f(x)=\exp\left(-x^2/2\right)$ является собственной функцией оператора $\hat{A}=\dfrac{d^2}{dx^2}-x^2$ и найти соответствующее собственное значение.

Семинар 3

Гильбертово пространство. В лекциях 1-2 мы узнали, что возможные значения энергии, которые могут быть измерены в эксперименте, являются собственными значениями гамильтониана. Эти значения составляют некоторый набор. Если этот набор образует счетное множество, то говорят про дискретный спектр матрицы гамильтона. Например, для гармонического осциллятора, спектр дискретный и, начиная с $n=1$, эквидистантный: $\Delta E_n=\hbar\omega$. Спектр может быть и непрерывным.

Физикам достаточно быстро стало понятно, что матрица – это координатное представление оператора. Задача нахождения собственных значений и собственных векторов этих операторов стала одной из центральных задач как для математиков, так и для физиков-теоретиков.

Собственные векторы являются элементами так называемого гильбертова пространства.

Гильбертово пространство $\mathcal{H}$ – полное пространство с внутренним произведением.

Под внутренним произведением понимаем скалярное произведение элементов векторного пространства, удовлетворяющее свойствам:

а) $\langle f, f\rangle \geq 0$, причем $\langle f, f\rangle = 0 \Leftrightarrow f = 0$

б) $\langle f, \alpha g_1 + \beta g_2\rangle = \alpha\langle f, g_1\rangle + \beta\langle f, g_2\rangle$

в) $\langle f, g\rangle = \langle g, f\rangle^*$

Примеры гильбертовых пространств:

а) Пространство $\mathbb{C}^n$ – множество всех n -мерных векторов с комплексными компонентами. Скалярное произведение: $\langle f, g\rangle = \sum_{\alpha=1}^{n} f_\alpha^* g_\alpha$

б) Пространство $\mathrm{L}_2[a,b]$ – множество комплекснозначных измеримых на конечном интервале $[a,b]$ функций, удовлетворяющих условию $\int_a^b |f(x)|^2\, dx < \infty$. Скалярное произведение определим как $\langle f, g\rangle = \int_a^b f^*(x) g(x)\, dx$.

Векторы гильбертова пространства, следуя Полю Дираку, будем называть кет-векторами и обозначать как $|f\rangle$.

Кет-векторы $|f\rangle$ – векторы гильбертова пространства $\mathcal{H}$.

Можно ввести пространство $\mathcal{H}^*$, дуальное гильбертовому пространству $\mathcal{H}$. Элементы этого пространства будем называть бра-векторами и обозначать $\langle g|$.

Бра-векторы $\langle g|$ – элементы пространства $\mathcal{H}^*$,

дуального к гильбертовому пространству $\mathcal{H}$.

Бра-вектор $\langle g|$ – это линейный функционал ω на кет-векторах:

$$\langle g| \to \omega\big(|f\rangle\big). \tag{1}$$

Так как в гильбертовом пространстве определено внутреннее произведение, то функционал ω можно представить как это самое внутреннее произведение:

$$\omega\left(|f\rangle\right)=\langle g|f\rangle . \tag{2}$$

1. Операторы.

Введем в пространстве $\mathcal{H}$ понятие оператора.

Оператор $\hat{A}$ – правило, сопоставляющее кет-вектору $\lvert f\rangle$ другой вектор этого же пространства $\lvert f'\rangle=\hat{A}\lvert f\rangle$.

Линейный оператор $\hat{L}$ по определению удовлетворяет условию

$$\hat{L}\left(\alpha|f\rangle+\beta|g\rangle\right)=\alpha\hat{L}|f\rangle+\beta\hat{L}|g\rangle . \tag{3}$$

Здесь α и β – комплексные числа.

Задача на собственные значения и собственные векторы оператора: если при действии оператора $\hat{A}$ на некоторый вектор получается тот же самый вектор, умноженный на число, то есть если

$$\hat{A}|f\rangle=\lambda|f\rangle , \tag{4}$$

то такой вектор называют собственным вектором оператора $\hat{A}$, а число λ его собственным значением.

Совокупность всех собственных значений $\{\lambda_\alpha\}$ оператора $\hat{A}$ называют его **спектром**. Если значения $\{\lambda_\alpha\}$ образуют счетное множество, то **спектр дискретный**. В противном случае спектр называется **непрерывным**.

$\hat{A}\lvert f\rangle$ – это также кет-вектор. Под кет-вектором $\lvert\hat{A}f\rangle$ нужно понимать кет-вектор $\hat{A}\lvert f\rangle$.

Если $\langle g|$ – это бра-вектор, то, задав некоторый линейный оператор $\hat{L}$, мы можем построить новый линейный функционал на кет-векторах (новый бра-вектор):

$$\langle g\hat{L}| \quad\rightarrow\quad \tilde{\omega}\left(|f\rangle\right)=\left(\langle g\hat{L}|\right)|f\rangle=\langle g|\left(|\hat{L}f\rangle\right).$$

Т.е. сначала действуем на кет-вектор $|f\rangle$ оператором $\hat{L}$, а затем на получившийся кет-вектор $|\hat{L}f\rangle$ действуем бра-вектором $\langle g|$. Видим, что скалярное произведение бра-вектора $\langle g\hat{L}|$ и кет-вектора $|f\rangle$ может быть записано как $\tilde{\omega}(|f\rangle)=\langle g|\hat{L}|f\rangle$. Т.е. положение круглых скобок не важно.

Введем понятие **эрмитово сопряженного оператора** $\hat{A}^{+}$.

> Если кет-вектору $|f\rangle$ соответствует кет-вектор $|f'\rangle=\hat{A}|f\rangle$,
>
> то бра-вектору $\langle f|$ соответствует бра-вектор $\langle f|'=\langle f|\hat{A}^{+}$.

То, что в исходном пространстве $\mathcal{H}$ было оператором $\hat{A}$, в дуальном пространстве $\mathcal{H}^{*}$ стало оператором $\hat{A}^{+}$ – оператором, **эрмитово сопряженным** к линейному оператору $\hat{A}$.

Так как по определению

$$|f'\rangle=\hat{A}|f\rangle \Leftrightarrow \langle f|'=\langle f|\hat{A}^{+} \tag{5}$$

и свойству в) скалярного произведения

$$\langle f'|g\rangle=\langle g|f'\rangle^{*},$$

то

$$\boxed{\langle f|\hat{A}^{+}|g\rangle=\langle g|\hat{A}|f\rangle^{*}}. \tag{6}$$

Это равенство можно рассматривать как определение эрмитово сопряженного оператора.

Далее,

> Так как кет-вектор $|\hat{A}f\rangle$ совпадает с кет-вектором $\hat{A}|f\rangle$,
>
> то под бра-вектором $\langle\hat{A}f|$ нужно понимать бра-вектор $\langle f|\hat{A}^{+}$.

Заметим, что согласно (6),

$$\langle f|\left(\hat{A}^{+}\right)^{+}|g\rangle=\langle g|\hat{A}^{+}|f\rangle^{*}=\langle f|\hat{A}|g\rangle.$$

Значит,

$$\boxed{\left(\hat{A}^{+}\right)^{+}=\hat{A}}. \tag{7}$$

Поэтому

$$\left\langle \hat{A}^{+} f \right| = \langle f | \hat{A} \ . \tag{8}$$

Следовательно,

$$\left\langle f \,|\, \hat{A} \,|\, g \right\rangle = \left\langle \hat{A}^{+} f \,|\, g \right\rangle. \tag{9}$$

Т.е., перенос оператора налево приводит к эго эрмитову сопряжению.

1. Проверить, является ли оператор $\dfrac{d}{dx}$ эрмитовым.
2. Пусть дан линейный оператор $\hat{L}$. Показать, что следующие операторы являются самосопряженными:

   а) $\hat{L}\hat{L}^{+}$, б) $\hat{L}^{+}\hat{L}$, в) $\hat{L}+\hat{L}^{+}$, г) $i\left(\hat{L}-\hat{L}^{+}\right)$.

3. Доказать, что $\left(\hat{A}^{-1}\right)^{+}=\left(\hat{A}^{+}\right)^{-1}$.
4. Доказать, что, если два эрмитовых оператора $\hat{A}$ и $\hat{B}$ коммутируют, то их произведение также является эрмитовым.
5. Показать, что произвольный линейный оператор $\hat{L}$ можно представить в виде $\hat{L}=\hat{A}+i\hat{B}$, где $\hat{A}$ и $\hat{B}$ – эрмитовы.
6. Показать, что коммутатор любых двух эрмитовых операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ может быть представлен в виде $\left[\hat{A},\hat{B}\right]=i\hat{C}$, где $\hat{C}$ – некоторый эрмитов оператор.
7. Показать, что если оператор $\hat{C}$ – эрмитов, то оператор $\hat{D}=\hat{A}\hat{C}\hat{A}^{\dagger}$ также будет эрмитовым.
8. Показать, что произведение двух эрмитовых операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ всегда можно представить в виде $\hat{A}\hat{B}=\hat{C}+\hat{D}$, где $\hat{C}$ – эрмитов оператор, а $\hat{D}$ удовлетворяет соотношению $\hat{D}^{\dagger}=-\hat{D}$. Найти $\hat{C}$ и $\hat{D}$.

Семинары 4-6

Координатное представление векторов и операторов.

Начнем с рассмотрения дискретного спектра. В гильбертовом пространстве можно выбрать **ортонормированный базис** $\left\{\left|f_{\alpha}\right\rangle\right\}$:

$$\langle f_\alpha | f_\beta \rangle = \delta_{\alpha\beta} . \tag{1}$$

В случае дискретного спектра разложение по базису некоторого кет-вектора имеет вид

$$|\psi\rangle = \sum_\alpha c_\alpha |f_\alpha\rangle . \tag{2}$$

Здесь $c_\alpha = \langle f_\alpha | \psi \rangle$ – компоненты кет-вектора $|\psi\rangle$. Совокупность этих компонент образует вектор-столбец, представляющий вектор $|\psi\rangle$ в базисе $|f_\alpha\rangle$:

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \dots \\ c_\alpha \\ \dots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle f_1 | \psi \rangle \\ \langle f_2 | \psi \rangle \\ \dots \\ \langle f_\alpha | \psi \rangle \\ \dots \end{pmatrix} . \tag{3}$$

При этом говорят, что набор $\{|f_\alpha\rangle\}$ является **полным базисом**.

Так как

$$|\psi\rangle = \sum_\alpha c_\alpha |f_\alpha\rangle = \sum_\alpha \langle f_\alpha | \psi \rangle |f_\alpha\rangle = \sum_\alpha |f_\alpha\rangle \langle f_\alpha | \psi \rangle , \tag{4}$$

то

$$\sum_\alpha |f_\alpha\rangle \langle f_\alpha| = \hat{I} . \tag{5}$$

Это – **условие полноты базиса в дискретном случае**.

Для бра-вектора разложение имеет вид

$$\langle\psi| = \langle\psi|\hat{I} = \langle\psi|\sum_\alpha |f_\alpha\rangle\langle f_\alpha| = \sum_\alpha \langle\psi|f_\alpha\rangle\langle f_\alpha| = \sum_\alpha b_\alpha^* \langle f_\alpha| . \tag{6}$$

Здесь $b_\alpha^* = \langle f_\alpha | \psi \rangle^*$ – компоненты бра-вектора $\langle\psi|$, образующие элементы вектор-строки $\begin{pmatrix} b_1^* & b_2^* & \dots & b_\alpha^* & \dots \end{pmatrix}$.

Произведение кет-вектора на бра вектор $|\psi\rangle\langle\varphi|$ называется **внешним произведением**. В координатном представлении внешнее произведение – это матрица:

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \dots \\ c_\alpha \\ \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1^* & b_2^* & \dots & b_\alpha^* & \dots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 b_1^* & c_1 b_2^* & \dots & c_1 b_\beta^* & \dots \\ c_2 b_1^* & c_2 b_2^* & \dots & c_2 b_\beta^* & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ c_\alpha b_1^* & c_\alpha b_2^* & \dots & c_\alpha b_\beta^* & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}. \tag{7}$$

Матрица – координатное представление оператора. Пусть имеются векторы $|f_i\rangle$, образующие ортонормированный базис в гильбертовом пространстве. Пусть также задан линейный оператор $\hat{A}$. Тогда **матричный элемент оператора** $\hat{A}$ – это комплексное число

$$A_{ik} = \left\langle f_i \middle| \hat{A} \middle| f_k \right\rangle. \tag{8}$$

Если мы знаем компоненты c_β вектора $|\psi\rangle$ в некотором базисе $|f_\alpha\rangle$, то мы можем найти в этом же базисе компоненты c'_β вектора $|\psi'\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$:

$$|\psi'\rangle = \hat{A}|\psi\rangle \Rightarrow \langle f_\alpha | \psi' \rangle = \left\langle f_\alpha \middle| \hat{A} \middle| \psi \right\rangle = \left\langle f_\alpha \middle| \hat{A} \sum_\beta c_\beta \middle| f_\beta \right\rangle = \sum_\beta c_\beta \left\langle f_\alpha \middle| \hat{A} \middle| f_\beta \right\rangle$$

Но $c'_\alpha = \langle f_\alpha | \psi' \rangle$ и $A_{\alpha\beta} = \left\langle f_\alpha \middle| \hat{A} \middle| f_\beta \right\rangle$. Тогда

$$c'_\alpha = \sum_\beta A_{\alpha\beta} c_\beta. \tag{9}$$

Найдем компоненты матрицы эрмитово сопряженного оператора. По определению $\left\langle \varphi | \hat{A} | \psi \right\rangle = \left\langle \psi \middle| \hat{A}^+ \middle| \varphi \right\rangle^*$. С другой стороны

$$\left\langle \varphi | \hat{A} | \psi \right\rangle = \sum_\alpha \left\langle f_\alpha \middle| b_\alpha^* \middle| \hat{A} \middle| \sum_\beta c_\beta \middle| f_\beta \right\rangle = \sum_\alpha \sum_\beta c_\beta b_\alpha^* \left\langle f_\alpha | \hat{A} | f_\beta \right\rangle =$$

$$= \sum_\alpha \sum_\beta c_\beta b_\alpha^* A_{\alpha\beta} = \sum_\alpha \sum_\beta \left(A_{\alpha\beta}^* b_\alpha \right)^* c_\beta \equiv$$

$$\left\langle \psi \middle| \hat{A}^+ \middle| \varphi \right\rangle^* = \left(\sum_\beta \left\langle f_\beta \middle| c_\beta^* \middle| \hat{A}^+ \middle| \sum_\alpha b_\alpha \middle| f_\alpha \right\rangle \right)^* = \left(\sum_\alpha \sum_\beta c_\beta^* b_\alpha \left\langle f_\beta | \hat{A}^+ | f_\alpha \right\rangle \right)^* = \sum_\alpha \sum_\beta \left(A_{\beta\alpha}^+ b_\alpha \right)^* c_\beta$$

Следовательно,

$$\boxed{A_{\alpha\beta}^* = \left(\hat{A}^+ \right)_{\beta\alpha}}. \tag{10}$$

Значит, для получения матрицы эрмитово сопряженного оператора необходимо матрицу транспонировать и от каждого элемента взять комплексное сопряжение.

Пусть линейный оператор $\hat{A}$ задан своим действием на базисные векторы в гильбертовом пространстве: $\hat{A}|f_i\rangle = |g_i\rangle$. Здесь $|g_i\rangle$ – некоторые новые векторы (необязательно нормированные). Тогда

$$\hat{A}|\psi\rangle = \hat{A}\sum_\alpha c_\alpha |f_\alpha\rangle = \sum_\alpha c_\alpha \hat{A}|f_\alpha\rangle =$$
$$= \sum_\alpha c_\alpha |g_\alpha\rangle = \sum_\alpha \langle f_\alpha|\psi\rangle |g_\alpha\rangle = \sum_\alpha |g_\alpha\rangle\langle f_\alpha|\psi\rangle$$

Т.е. оператор $\hat{A}$ может быть представлен в виде

$$\hat{A} = \sum_\alpha |g_\alpha\rangle\langle f_\alpha| \ . \tag{11}$$

Если к тому же векторы $|g_i\rangle$ являются собственными векторами оператора $\hat{A}$, т.е. $\hat{A}|f_\alpha\rangle = |g_\alpha\rangle = \lambda_\alpha |f_\alpha\rangle$, то получим следующее **спектральное представление оператора**

$$\boxed{\hat{A} = \sum_\alpha \lambda_\alpha |f_\alpha\rangle\langle f_\alpha|} \ . \tag{12}$$

1. Пусть векторы $|f_i\rangle$ образуют ортонормированный базис. Пусть также даны два вектора состояния

$$|\psi\rangle = 2i|f_1\rangle - 3|f_2\rangle + i|f_3\rangle,$$
$$|\varphi\rangle = 3|f_1\rangle - 2|f_2\rangle + 4|f_3\rangle.$$

Найти:

а) $\langle\psi|$ и $\langle\varphi|$,

б) скалярное (внутреннее) произведение $\langle\varphi|\psi\rangle$ и убедиться, что $\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle^*$,

в) внешнее произведение $|\varphi\rangle\langle\psi|$.

2. Пусть векторы $|f_i\rangle$ образуют ортонормированный базис. Рассмотрим состояния

$$|\psi\rangle = 9i|f_1\rangle + 2|f_2\rangle,$$
$$|\varphi\rangle = -\frac{i}{\sqrt{2}}|f_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|f_2\rangle.$$

Найти:

а) $\langle\psi|$ и $\langle\varphi|$,

б) скалярное (внутреннее) произведение $\langle\varphi|\psi\rangle$ и убедиться, что $\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle^*$,

в) внешние произведения $|\varphi\rangle\langle\psi|$ и $|\psi\rangle\langle\varphi|$. Равны ли они между собой?

г) Найти эрмитово сопряженные к операторам из предыдущего пункта д) Вычислить $\mathrm{Sp}\left(|\varphi\rangle\langle\psi|\right)$ и $\mathrm{Sp}\left(|\psi\rangle\langle\varphi|\right)$. Равны ли они?

3. Оператор $\hat{A}$ задан своим действием на базисные векторы ортонормированного базиса:

$$\hat{A}|f_1\rangle = 2|f_1\rangle,$$
$$\hat{A}|f_2\rangle = 3|f_1\rangle - i|f_3\rangle,$$
$$\hat{A}|f_3\rangle = -|f_2\rangle.$$

Записать матричное представление оператора.

Собственные значения λ_α оператора $\hat{A}$ ищем так:

$$\hat{A}|g\rangle = \lambda|g\rangle \Rightarrow \left\langle f_\alpha\left|\hat{A}\right|g\right\rangle = \lambda\langle f_\alpha|g\rangle \tag{13}$$

Так как

$$\left\langle f_\alpha\left|\hat{A}\right|g\right\rangle = \left\langle f_\alpha\left|\hat{A}\hat{I}\right|g\right\rangle \overset{\substack{\text{условие}\\ \text{полноты}}}{=} \sum_\beta \left\langle f_\alpha\left|\hat{A}\right|f_\beta\right\rangle\left\langle f_\beta|g\right\rangle,$$

то введя обозначение $\left\langle f_\beta|g\right\rangle = c_\beta$ получим

$$\sum_\beta A_{\alpha\beta}c_\beta = \lambda c_\alpha \Rightarrow \sum_\beta\left(A_{\alpha\beta} - \lambda\delta_{\alpha\beta}\right)c_\beta = 0. \tag{14}$$

Нетривиальное решение существует, если

$$\det\left(\hat{A} - \lambda\hat{E}\right) = 0. \tag{15}$$

Раскрываем определитель и находим корни полученного характеристического уравнения – собственные значения $\{\lambda_\alpha\}$. Для каждого собственного значения ищем собственный вектор. Для этого нужно поочередно подставить λ_α в (14). В случае простого (кратности 1) корня характеристического уравнения в полученной системе из N уравнений будет независимых только $N-1$. Значит, собственный вектор будет зависеть от одной постоянной, которую находим из условия нормировки собственного вектора. Для эрмитового оператора кратность корня характеристического уравнения всегда совпадает с кратностью вырождения собственного значения. Это значит, что если кратность корня характеристического уравнения равна r, то система (14) содержит лишь $N-r$ независимых уравнений. Поэтому собственные векторы будут определяться r постоянными. Например, в случае $r=2$ собственный вектор, отвечающий двукратно вырожденному корню λ_0, может быть записан в виде

$$\left|g_0\left(c_1, c_2\right)\right\rangle = c_1\left|g_0^{(1)}\right\rangle + c_2\left|g_0^{(2)}\right\rangle$$

Здесь $\left|g_0^{(1)}\right\rangle$ и $\left|g_0^{(2)}\right\rangle$ – векторы двумерного подпространства (удовлетворяющие системе (13)), которые можно ортогонализовать методом Грама-Шмидта. Итак, в случае r-кратного вырождения собственному значению соответствует r собственных векторов.

4. В некотором ортонормированном базисе двумерного пространства оператор $\hat{A}$ имеет вид:

$$\hat{A} = |f_1\rangle\langle f_1| + 2|f_1\rangle\langle f_2| + |f_2\rangle\langle f_1|$$

   Записать матрицу оператора $\hat{A}$ и найти собственные значения и собственные векторы оператора $\hat{A}$.

5. Рассмотрим пример так называемого квантового вентиля – преобразование (ворота) Адамара:

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}.$$

   Проверьте, является ли матрица Адамара эрмитовой. Найти собственные векторы и собственные значения этой матрицы. Осуществите спектральное разложение оператора Адамара.

6. Дан оператор $\hat{A} = i\left(\hat{x}^2+1\right)\frac{d}{dx} + i\hat{x}$.

   a. Эрмитов ли он?
   b. Найти состояние $|\psi\rangle$, для которого $\hat{A}|\psi\rangle = 0$.
   c. Нормируйте полученное состояние.

   Ответ: $\langle x|\psi\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{\pi\left(x^2+1\right)}}$

7. Дана матрица поворота

$$\Re(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$$

   - Проверить, является ли матрица поворота эрмитовой.
   - Найти ее собственные значения и собственные векторы. Ответ: $e^{\pm i\theta}$, $|f_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$, $|f_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$.

8. Даны три базиса. Первый, который будем называть *каноническим,*

$$|H\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |V\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

второй

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|H\rangle + |V\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix},$$
$$|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|H\rangle - |V\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix},$$

отвечающий диагональной поляризации света (под углами 45° и -45° соответственно), и базис

$$|R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|H\rangle + i|V\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\i\end{pmatrix},$$
$$|L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|H\rangle - i|V\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-i\end{pmatrix},$$

отвечающий круговой поляризации света (правой и левой соответственно).

а) Разложите векторы канонического базиса по векторам второго и третьего базисов.

б) Найдите матрицу оператора $|+\rangle\langle-|$ в каноническом базисе и базисе круговом.

в) Найдите в каноническом базисе матрицу линейного оператора, отображающего вектор $|H\rangle$ на $|R\rangle$ и вектор $|V\rangle$ на вектор $2|H\rangle$.

9. Матрицы Паули определяются как

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix},\ \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix}0 & -i\\i & 0\end{pmatrix},\ \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}.$$

а) Найти собственные значения и собственные векторы матриц Паули.

б) Являются ли матрицы Паули эрмитовыми?

в) Запишите матрицы Паули в виде линейной комбинации внешних произведений их собственных векторов (спектральное разложение оператора).

10. Пусть $U = \begin{pmatrix}a & b\\c & d\end{pmatrix}$ – эрмитова матрица. Показать, что

- матрица представима в виде $U = \begin{pmatrix}x_3 & x_1 - ix_2\\x_1 + ix_2 & x_4\end{pmatrix}$, где все $x_i \in \mathbb{R}$.
- матрицу U можно представить в виде

$$U = a_0\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix} + a_1\begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix} + a_2\begin{pmatrix}0 & -i\\i & 0\end{pmatrix} + a_3\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix} = a_0\hat{I} + \boldsymbol{a}\hat{\boldsymbol{\sigma}}.$$

Здесь $\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ и $\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ – матрицы Паули, $\boldsymbol{a}\hat{\boldsymbol{\sigma}} = a_i \hat{\sigma}_i$.

11. Показать, что для матриц Паули справедливы следующие соотношения:

- $\det \hat{\sigma}_k = -1$, $Sp(\hat{\sigma}_k) = 0$, $\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_i = \hat{I}$, $\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z = i\hat{I}$
- $\{\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_k\} = 2\delta_{ik}\hat{I}$, $[\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k$.

12. Показать, что для комбинаций типа $\boldsymbol{a}\hat{\boldsymbol{\sigma}} = a_i \hat{\sigma}_i$ справедливо соотношение

$$(\boldsymbol{a}\hat{\boldsymbol{\sigma}})(\boldsymbol{b}\hat{\boldsymbol{\sigma}}) = (\boldsymbol{ab})\hat{I} + i(\hat{\boldsymbol{\sigma}}[\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b}]),$$

если компоненты векторов $\boldsymbol{a}$ и $\boldsymbol{b}$ являются либо числами, либо операторами, коммутирующими со всеми матрицами Паули.

13. Показать, что для матрицы U из задачи 10 коэффициенты разложения (для эрмитовой матрицы они вещественные) определяются соотношениями:

$$a_0 = \frac{1}{2} Sp(\hat{U}), \; a_k = \frac{1}{2} Sp(\hat{U}\hat{\sigma}_k).$$

14. Найти матрицу $\exp(i\alpha\hat{A})$, где $\hat{A} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$. Ответ: $\exp(i\alpha\hat{A}) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} e^{i\alpha}+1 & e^{i\alpha}-1 \\ e^{i\alpha}-1 & e^{i\alpha}+1 \end{pmatrix}$.

Указание: $F(\hat{A}) = \sum_k F(a_k)|f_k\rangle\langle f_k|$.

Пусть $\{a_\alpha\}$ – спектр оператора $\hat{A}$. В базисе собственных функций имеем спектральное представление $\hat{A} = \sum_k a_k |f_k\rangle\langle f_k|$. **Функцией от оператора** $\hat{A}$ называется следующая конструкция

$$\boxed{F(\hat{A}) = \sum_k F(a_k)|f_k\rangle\langle f_k|}. \qquad (16)$$

Формулу (13) можно переписать в иной форме. Для этого нужно $F(a_k)$ представить в виде разложения в ряд Тейлора:

$$F(a_k) = \sum_s \frac{F^{(s)}(0)}{s!} a_k^s.$$

Тогда

$$F(\hat{A}) = \sum_k \sum_s \frac{F^{(s)}(0)}{s!} a_k^s |f_k\rangle\langle f_k| = \sum_s \frac{F^{(s)}(0)}{s!} \sum_k a_k^s |f_k\rangle\langle f_k| = \sum_s \frac{F^{(s)}(0)}{s!} \hat{A}^s.$$

Т.е.

$$F\left(\hat{A}\right)=\sum_s \frac{F^{(s)}(0)}{s!}\hat{A}^s . \qquad (17)$$

Очень часто в учебниках именно в таком виде дают определение функции от оператора.

15. Показать, что для оператора инверсии $\hat{P}$ и вещественного числа a справедливо равенство

$$\exp\left(ia\hat{P}\right)=\hat{I}\cos a+i\hat{P}\sin a .$$

Решите задачу двумя способами: используя определение $F\left(\hat{A}\right)=\sum_k F\left(a_k\right)|f_k\rangle\langle f_k|$ и $F\left(\hat{A}\right)=\sum_s \frac{F^{(s)}(0)}{s!}\hat{A}^s$.

16. Пусть $\mathbf{e}$ – вектор единичной длины. Доказать, что

$$\exp\left(i\alpha\mathbf{e}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right)=\hat{I}\cos\alpha+i\mathbf{e}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\sin\alpha .$$

Указание: Решите задачу на собственные векторы и собственные значения эрмитова оператора $\mathbf{e}\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ и запишите этот оператор в спектральном представлении. Воспользуйтесь также полнотой базиса эрмитова оператора, а также определением функции от оператора $F\left(\hat{A}\right)=\sum_k F\left(a_k\right)|f_k\rangle\langle f_k|$.

17. Найти матрицу $\exp\left(i\alpha\hat{A}\right)$, где $\hat{A}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & 1\end{pmatrix}$. Ответ: $\exp\left(i\alpha\hat{A}\right)=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}e^{i\alpha}+1 & e^{i\alpha}-1\\ e^{i\alpha}-1 & e^{i\alpha}+1\end{pmatrix}$.

18. Показать, что оператор трансляции можно представить в виде $\hat{T}_a=\exp\left(a\frac{d}{dx}\right)$.

19. Найти оператор, эрмитово сопряженный к оператору трансляции $\hat{T}_a$.

20. Найти оператор, эрмитово-сопряженный оператору $\exp\left(ia\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$, где $a=a^*$.

Указание: Используйте разложение в ряд и учтите, что $\left(\frac{\partial^n}{\partial\varphi^n}\right)^\dagger=(-1)^n\frac{\partial^n}{\partial\varphi^n}$.

21. Доказать тождество $\hat{B}f\left(\hat{A}\right)\hat{B}^{-1}=f\left(\hat{B}\hat{A}\hat{B}^{-1}\right)$.

22. Доказать тождество

$$\left[\hat{A},F\left(\hat{B}\right)\right]=\frac{dF\left(\hat{B}\right)}{d\hat{B}}\left[\hat{A},\hat{B}\right], \text{ если } \left[\hat{A},\hat{B}\right] \text{ коммутирует и с } \hat{A} \text{ и с } \hat{B}.$$

23. Доказать тождество $\exp\left(kx^2/2\right)\frac{d^n}{dx^n}\exp\left(-kx^2/2\right)=\left(\frac{d}{dx}-kx\right)^n$.

24. Вычислить коммутатор $\left[f(x),\hat{p}_x\right]$.

25. Доказать тождество $\left[\hat{A},e^{\hat{B}}\right]=\left[\hat{A},\hat{B}\right]e^{\hat{B}}$, если $\left[\hat{A},\hat{B}\right]$ коммутирует и с $\hat{A}$ и с $\hat{B}$.

26. Доказать формулу Ли

$$\exp\left(\hat{A}\right)\hat{B}\exp\left(-\hat{A}\right)=\hat{B}+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}\underbrace{\left[\hat{A},\left[\hat{A},\ldots\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right]\right]}_{n}=$$

$$=\hat{B}+\left[\hat{A},\hat{B}\right]+\frac{1}{2!}\left[\hat{A},\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right]+\frac{1}{3!}\left[\hat{A},\left[\hat{A},\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right]\right]+\ldots$$

Указание: Используйте вспомогательную функцию $f(x)=\exp\left(\hat{A}x\right)\hat{B}\exp\left(-\hat{A}x\right)$. Разложите ее в ряд и учтите, что $f(1)=\exp\left(\hat{A}\right)\hat{B}\exp\left(-\hat{A}\right)$.

27. Доказать, что если операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ перестановочны с $\left[\hat{A},\hat{B}\right]$, то справедливо тождество Бейкера-Хаусдорфа или тождество Вейля:

$$\exp\left(\hat{A}\right)\exp\left(\hat{B}\right)=\exp\left(\hat{A}+\hat{B}\right)\exp\left(\frac{1}{2}\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right).$$

Указание: Используйте вспомогательную функцию $f(x)=\exp\left(\hat{A}x\right)\exp\left(\hat{B}x\right)$. Получите для нее дифференциальное уравнение и решите его. Заметьте, что
$f(1)=\exp\left(\hat{A}\right)\exp\left(\hat{B}\right)$

Семинар 7

1. Покажите, что в чистом состоянии $\mathrm{Sp}\left(\hat{\rho}^2\right)=1$.

2. Покажите, что если наблюдаемая $\hat{A}$ в состоянии $\hat{\rho}$ имеет точное значение, то $\hat{A}$ и $\hat{\rho}$ коммутируют.

Указание: $\left[\hat{A},\hat{\rho}\right]|\psi\rangle=\hat{A}\hat{\rho}|\psi\rangle-\hat{\rho}\hat{A}|\psi\rangle$. Затем учтите, что $\hat{\rho}=\sum_{\alpha}p_{\alpha}|\varphi_{\alpha}\rangle\langle\varphi_{\alpha}|$ и при $p_{\alpha}\neq 0$ $\hat{A}|\varphi_{\alpha}\rangle=\langle\hat{A}\rangle|\varphi_{\alpha}\rangle$.

3. Покажите, что в смешанном состоянии $\mathrm{Sp}\left(\hat{\rho}^2\right)<1$.

Указание: Предварительно убедитесь, что для положительных чисел p_k справедливо условие: $\sum_k p_k^2\leq\left(\sum_k p_k\right)^2$.

4. Предположим, что вектор состояния системы имеет вид

$$|\psi\rangle=\frac{1}{\sqrt{6}}|f_1\rangle+\frac{1}{\sqrt{2}}|f_2\rangle+\frac{1}{2}|f_3\rangle+\frac{1}{\sqrt{12}}|f_4\rangle.$$

Здесь $\left\{|f_1\rangle,|f_2\rangle,|f_3\rangle,|f_4\rangle\right\}$ – собственные векторы оператора Гамильтона, отвечающие собственным значениям $\left\{E,E,2E,4E\right\}$ соответственно.

Вопросы:

1) С какой вероятностью может быть получено значение энергии $2E$?
2) Запишите матрицу плотности для системы до и после измерения, если при селективном измерении получено значение энергии $2E$.
3) С какой вероятностью может быть получено значение энергии E?
4) Запишите матрицу плотности для системы до и после измерения, если при селективном измерении получено значение энергии E.
5) Запишите матрицу плотности для системы после измерения, если проводится неселективное измерение.

5. Фотон приготовлен в состоянии с линейной поляризацией под углом $\pi/6$ к оси Ox. Найдите вероятности результатов каждого измерения, если его поляризация измеряется в каноническом базисе, в диагональном базисе, в круговом базисе.

6. Покажите, что для состояния $|\psi\rangle = |H\rangle \cos\beta + |V\rangle \sin\beta e^{i\delta}$ вектор поляризации имеет компоненты

$$\xi_1 = \sin 2\beta \cos\delta,$$
$$\xi_2 = \sin 2\beta \sin\delta,$$
$$\xi_3 = \cos 2\beta.$$

7. Для некоторого состояния матрица плотности имеет вид:

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} \frac{3}{4} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \end{pmatrix}.$$

Найти компоненты вектора поляризации. Чистому или смешанному состоянию отвечает данная матрица плотности?

8. Для некоторого состояния матрица плотности фотона имеет вид:

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} \frac{3}{4} & \frac{1-i}{8} \\ \frac{1+i}{8} & \frac{1}{4} \end{pmatrix}.$$

- найдите вектор поляризации.
- чистое или смешанное это состояние?
- какова вероятность получения в эксперименте состояния с правой круговой поляризацией (измерительный прибор находится в базисе $|R\rangle$)?

9. В начальный момент времени система находилась в состоянии

$|\psi_0\rangle = \frac{\sqrt{7}}{7}\left(\sqrt{2}|f_1\rangle + \sqrt{3}|f_2\rangle + |f_3\rangle + |f_4\rangle\right)$. Здесь $|f_\alpha\rangle$ – собственные функции гамильтониана: $\hat{H}|f_\alpha\rangle = \alpha^2 E_0 |f_\alpha\rangle$.

a. Если мы измеряем энергию, то какие значения энергии можно получить и с какими вероятностями?

b. Пусть дан оператор $\hat{A}$, заданный своим действием на собственные векторы гамильтониана $\hat{A}|f_\alpha\rangle = (\alpha+1)a_0|f_\alpha\rangle$. Измеряем наблюдаемую $\hat{A}$. Какие значения наблюдаемой можно получить и с какими вероятностями?

c. Пусть измерение энергии дало результат $4E_0$. Если мы тут же проведем измерение наблюдаемой $\hat{A}$, то какое получим значение?

10. Пусть система находится в состоянии

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 4-i \\ -2+5i \\ 3+2i \end{pmatrix}.$$

Оператор Гамильтона имеет вид

$$\hat{H} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 3 & 3 \\ 0 & 3 & 0 \end{pmatrix}.$$

a. Найдите среднее значение энергии в состоянии $|\psi\rangle$.

b. Найдите неопределенность энергии в состоянии $|\psi\rangle$.

c. Найти возможные значения энергии и вероятности их появления в эксперименте.

d. Пусть в эксперименте значение энергии оказалось равным E_1 (выберите сами одно из возможных значений). Найдите снова среднее значение и неопределенность энергии.

Семинар 8

1. Гамильтониан системы явно от времени не зависит, а его собственные векторы $|f_i\rangle$ принадлежат невырожденным собственным значениям $\hbar\omega_f$. В том же самом гильбертовом пространстве состояний определен оператор $\hat{A}$, также обладающий невырожденными собственными значениями: $\hat{A}|a_k\rangle = a_k|a_k\rangle$.

- Сначала система находится в состоянии $|f\rangle$, затем в этой системе производят измерение наблюдаемой $\hat{A}$. Чему равно среднее значение наблюдаемой $\hat{A}$ и какова вероятность обнаружить в результате этого измерения значения наблюдаемой $\hat{A}$, равное a_m?
- Пусть в результате измерения наблюдаемой $\hat{A}$ получено значение a_m. Чему равна вероятность обнаружить это же значение a_m, если спустя время t произвести повторное измерение наблюдаемой $\hat{A}$?

2. Пусть система находится в состоянии

$$|\psi\rangle = \frac{1}{6}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 4 \end{pmatrix}.$$

Даны две наблюдаемые

$$\hat{A} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & i \\ 0 & -i & 1 \end{pmatrix}, \quad \hat{B} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}.$$

a. Проводим измерения. Сначала измеряем наблюдаемую $\hat{A}$, затем тут же наблюдаемую $\hat{B}$. Найти вероятность получить значение 0 для наблюдаемой $\hat{A}$ и значение 1 для наблюдаемой $\hat{B}$.
b. Привели систему в исходное состояние. Теперь сначала измеряем наблюдаемую $\hat{B}$, затем тут же наблюдаемую $\hat{A}$. Найти вероятность получить значение 1 для наблюдаемой $\hat{B}$ и значение 0 для наблюдаемой $\hat{A}$.
c. Проанализируйте результаты пунктов a. и b.

3. Система с гамильтонианом

$$H = \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 5 \\ 0 & 5 & 0 \end{pmatrix}$$

находится в начальном состоянии

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{5}\begin{pmatrix} 3 \\ 0 \\ 4 \end{pmatrix}.$$

a. Если мы измеряем энергию, то какие значения энергии можно получить и с какими вероятностями?
b. Записать вектор начального состояния, разложив его по собственным векторам гамильтониана.
c. Найти вектор состояния в последующие моменты времени.
d. Найти полную энергию системы в начальный момент времени, а также во все остальные моменты времени.

4. Гамильтониан двухуровневой системы в матричном представлении имеет вид:

$$H = \hbar \begin{pmatrix} \omega_1 & \omega_2 \\ \omega_2 & \omega_1 \end{pmatrix}.$$

Пусть базисные векторы есть

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

В начальный момент $|\psi(0)\rangle = |0\rangle$. Найти а) собственные значения и собственные векторы гамильтониана, записав последние в виде разложения по базисным векторам;

а) эволюцию состояния, используя оператор эволюции

б) эволюцию состояния, решив уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle$$

5. Пусть точечная свободная частица массой m движется в одномерном пространстве. Координата и импульс в начальный момент времени $t = 0$ равны соответственно q_0 и p_0. Используя уравнение Гайзенберга, найти $\hat{q}(t)$ и $\hat{p}(t)$. Показать также, что

$$\frac{d\hat{q}^2}{dt} = \frac{2\hat{p}\hat{q}}{m} + \frac{i\hbar}{m}\hat{E}, \qquad \frac{d\hat{p}^2}{dt} = \hat{0}.$$

Определим флуктуацию (неопределенность) величины $\hat{X}$ как квадратный корень из дисперсии:

$$\Delta\hat{X} = \sqrt{\langle \hat{X}^2 \rangle - \langle \hat{X} \rangle^2} = \sqrt{\left\langle \left(\hat{X} - \langle \hat{X} \rangle \hat{E} \right)^2 \right\rangle} \ .$$

Пусть начальные флуктуации координаты и импульса равны $(\Delta q)_0$ и $(\Delta p)_0$.
Используя уравнение Гайзенберга, показать, что

$$\frac{d^2 (\Delta\hat{q})^2}{dt^2} = 2\frac{(\Delta\hat{p})^2}{m^2}.$$

Показать также, что в последующие моменты времени

$$(\Delta\hat{q})^2 = \frac{(\Delta\hat{p})_0^2}{m^2} t^2 + (\Delta\hat{q})_0^2 \ .$$

6. Частица с зарядом e находится в постоянном однородном электрическом поле $\mathscr{E}$. Решить операторные уравнения движения Гайзенберга и установить коммутационные соотношения между операторами координаты и импульса, взятыми в различные моменты времени. Ответ: $\left[\hat{q}(t), \hat{q}(t')\right] = \frac{i\hbar}{m}(t - t')$.

Семинар 9
Гармонический осциллятор

1. Записать и решить уравнение Шредингера для гармонического осциллятора в координатном представлении.
2. Найти волновые функции одномерного осциллятора в импульсном представлении.
3. Написать уравнение Шредингера для осциллятора в импульсном представлении и определить распределение вероятностей различных значений импульса.
4. Введем переменную $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$. Покажите, что тогда в координатном представлении операторы рождения и уничтожения примут вид:
$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right), \qquad \hat{a}^{+} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right).$$
Убедитесь, что волновая функция основного состояния имеет вид
$$\psi_0(\xi) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}}\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right).$$
Проверьте, что $\frac{d}{d\xi} = -\sqrt{2}\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)\hat{a}^{+}\exp\left(\frac{\xi^2}{2}\right)$. Используя этот факт, а также что $|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\hat{a}^{+}\right)^n|0\rangle$, убедитесь, что
$$\psi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\hat{a}^{+}\right)^n\psi_0(\xi) = \frac{1}{\sqrt{n!2^n}}\psi_0(\xi)H_n(\xi),$$
где $H_n(\xi) = (-1)^n\exp\left(\xi^2\right)\frac{d^n}{d\xi^n}\exp\left(-\xi^2\right)$ – полиномы Эрмита.
5. Вычислить:
   a. $\langle n|\hat{x}|n\rangle$ b. $\langle n|\hat{p}|n\rangle$ c. $\langle m|\hat{x}\hat{p}|n\rangle$ d. $\langle n|\hat{x}^2|n\rangle$ e. $\langle n|\hat{p}^2|n\rangle$
6. Покажите, что для неопределенностей координаты и импульса в n-том состоянии гармонического осциллятора имеет место соотношение $\Delta x\Delta p = \hbar\left(n + \frac{1}{2}\right)$.
7. Показать, что для неопределенностей координат в разные моменты времени t и $t+\tau$ справедливо соотношение: $\Delta x(t)\Delta x(t+\tau) \geq \frac{\hbar|\sin(\omega t)|}{2m\omega}$. *Указание:* Решите уравнение Гайзенберга для осциллятора и воспользуйтесь соотношением неопределенностей для двух операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$: $\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} \geq \frac{\left|\langle\hat{C}\rangle\right|}{2}$, где $\hat{C} = -i\left[\hat{A},\hat{B}\right]$.
8. Матрица плотности одномерного гармонического осциллятора имеет вид: $\hat{\rho} = \frac{1}{3}|0\rangle\langle 0| + \frac{2}{3}|1\rangle\langle 1| + \frac{i}{6}|0\rangle\langle 1| - \frac{i}{6}|1\rangle\langle 0|$. Найти средние значения и дисперсии энергии и импульса в этом состоянии.
9. Убедиться, что оператор гамильтониана гармонического осциллятора коммутирует с оператором инверсии (четности). Это значит, что состояния осциллятора

обладают определенной четностью. Основное состояние $|0\rangle$ четно. Показать, что состояние $|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\hat{a}^{+}\right)^{n}|0\rangle$ имеет четность $(-1)^n$:

$$\hat{P}|n\rangle = (-1)^n |n\rangle .$$

10. *Когерентные состояния* – суперпозиция «сфазированных» собственных состояний гармонического осциллятора. Когерентные состояния являются собственными векторами оператора уничтожения с собственными значениями $\alpha = Ae^{i\varphi}$. Покажите, что когерентные состояния могут быть представлены в виде:

$$|\alpha\rangle = \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle .$$

11. Показать, что среднее значение числа квантов в когерентном состоянии равно $|\alpha|^2$.

12. Показать, что средняя энергия осциллятора в когерентном состоянии равна $\langle E\rangle = \hbar\omega\left(|\alpha|^2 + \frac{1}{2}\right)$.

13. Покажите, что для неопределенностей координаты и импульса в когерентном состоянии выполняется соотношение $\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$.

14. Показать, что вероятности обнаружения n квантов в когерентном состоянии $|\alpha\rangle$ распределены по статистическому закону Пуассона: $w(n;\alpha) = \exp\left(-|\alpha|^2\right)\frac{|\alpha|^{2n}}{n!}$.

Семинар 10
Эволюция состояний

определяется уравнением Шредингера

$$i\hbar\frac{d|\psi_S(t)\rangle}{dt} = \hat{H}|\psi_S(t)\rangle$$

В координатном представлении

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t) = \hat{H}\psi(\mathbf{r},t)$$

Если гамильтониан имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\mathbf{r}} + V(\mathbf{r})$$

то уравнение Шредингера

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\mathbf{r}}\psi(\mathbf{r},t) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r},t)$$

В одномерном случае

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t)+V(x)\psi(x,t) \tag{1}$$

Пример 1

Пусть частица в бесконечно глубокой потенциальной яме шириной a в начальном состоянии находится в суперпозиции двух стационарных состояний

$$\psi(x,0)=A\left(\psi_1(x)+\psi_2(x)\right).$$

Найти $\psi(x,t)$.

Примеры заданий к зачету по квантовой механике.

1. Показать, что произведение двух эрмитовых операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ всегда можно представить в виде $\hat{A}\hat{B}=\hat{C}+\hat{D}$, где $\hat{C}$ – эрмитов оператор, а $\hat{D}$ удовлетворяет соотношению $\hat{D}^{\dagger}=-\hat{D}$. Найти $\hat{C}$ и $\hat{D}$.
2. Вывести соотношения для повышающего $\hat{l}_+=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{l}_x+i\hat{l}_y\right)$ и понижающего $\hat{l}_-=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{l}_x-i\hat{l}_y\right)$ операторов:

$$\left(\hat{l}_\pm\right)^+=\hat{l}_\mp,\quad \hat{l}_+\hat{l}_-=\frac{1}{2}\left(\hat{\boldsymbol{l}}^2-\hat{l}_z^2+\hat{l}_z\right),$$
$$\hat{l}_-\hat{l}_+=\frac{1}{2}\left(\hat{\boldsymbol{l}}^2-\hat{l}_z^2-\hat{l}_z\right),\quad \left[\hat{\boldsymbol{l}}^2,\hat{l}_\pm\right]=0,\quad \left[\hat{l}_z,\hat{l}_\pm\right]=\pm\hat{l}_\pm.$$

3. Доказать, что

$$\left[\hat{x}_\alpha,\hat{\mathbf{L}}^2\right]=2i\hbar\left(\hat{\mathbf{r}}^2\hat{p}_\alpha-\left(\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{p}}\right)\hat{x}_\alpha\right).$$

4. Используя формулу Ли, убедиться, что оператор симметрии $\exp\left(-i\hat{l}_z\varphi\right)$ реализует поворот вокруг оси аппликат:

$$\exp\left(i\hat{l}_z\varphi\right)x\exp\left(-i\hat{l}_z\varphi\right)=x\cos\varphi-y\sin\varphi,$$
$$\exp\left(i\hat{l}_z\varphi\right)y\exp\left(-i\hat{l}_z\varphi\right)=y\cos\varphi+x\sin\varphi,$$
$$\exp\left(i\hat{l}_z\varphi\right)z\exp\left(-i\hat{l}_z\varphi\right)=z.$$

5. Пусть система находится в состоянии

$$|\psi\rangle=\begin{pmatrix}4-i\\-2+5i\\3+2i\end{pmatrix}.$$

Оператор Гамильтона имеет вид

$$\hat{H} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 3 & 3 \\ 0 & 3 & 0 \end{pmatrix}.$$

e. Найдите среднее значение энергии в состоянии $|\psi\rangle$.

f. Найдите неопределенность энергии в состоянии $|\psi\rangle$.

g. Найти возможные значения энергии и вероятности их появления в эксперименте.

h. Пусть в эксперименте значение энергии оказалось равным E_1 (выберите сами одно из возможных значений). Найдите снова среднее значение и неопределенность энергии.

6. Пусть квантовая система может находиться только в двух состояниях $|f_0\rangle$ и $|f_1\rangle$, являющихся собственными состояниями наблюдаемой $\hat{F}$, отвечающими собственным значениям 0 и 1 соответственно. Оператор Гамильтона задан своим действием на эти векторы:

$$\hat{H}|f_0\rangle = a|f_0\rangle + b|f_1\rangle,$$
$$\hat{H}|f_1\rangle = b|f_0\rangle + a|f_1\rangle.$$

Здесь a, b – вещественные числа. В начальном состоянии квантовая система находится в состоянии $|\psi(0)\rangle = |f_0\rangle$. Найдите $|\psi(t)\rangle$. Решите задачу двумя способами: а) используя оператор эволюции и б) решив уравнение Шредингера.

7. Запишите уравнения Гайзенберга для оператора координаты и импульса для свободного движения. Решите их. Покажите, что дисперсия координаты изменяется со временем по закону

$$D(x(t)) = D(x) + 2\frac{D(x, p_x)}{m}t + \frac{D(p_x)}{m^2}t^2,$$

в котором $D(x)$ и $D(p_x)$ – дисперсия координаты и импульса в начальный момент времени $t = 0$, $D(x, p_x) = \frac{1}{2}\langle \hat{x}\hat{p}_x + \hat{p}_x\hat{x}\rangle - \langle \hat{x}\rangle\langle \hat{p}_x\rangle$ – ковариация в начальный момент времени $t = 0$.

8. Линейный гармонический осциллятор находится в состоянии $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$. Найти $\langle x(t)\rangle$.

9. Пусть частица в бесконечно глубокой потенциальной яме шириной a в начальном состоянии находится в суперпозиции двух стационарных состояний

$$\psi(x,0) = A\left(\psi_1(x)+\psi_4(x)\right).$$

a. Проведите нормировку функции $\psi(x,0)$,

b. Найти $\psi(x,t)$,

c. Рассчитайте $\langle x(t)\rangle$, $\langle p_x(t)\rangle$ и $\langle H(t)\rangle$.

10. Найти коэффициенты прохождения T и отражения R при одномерном движении частицы над потенциальным барьером $E<V_0$:

$$V(x)=\begin{cases} 0, & x<0, \\ V_0, & 0<x<a, \\ 0, & x>a. \end{cases}$$