КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Решение задач по теме 3:

«Эрмитовы операторы. Коммутатор операторов»

Задачи

1. Найдите правило эрмитового сопряжения произведения операторов.

Правило получим, пользуясь следующими преобразованиями матричных элементов операторов $\hat{L}$ и $\hat{M}$.

$$\left(\left(\hat{L}\hat{M}\right)^+\right)_{nk} = \left(\psi_n;\left(\hat{L}\hat{M}\right)^+\psi_k\right) = \left(\left(\hat{L}\hat{M}\right)\psi_n;\psi_k\right) =$$

$$= \left(\psi_k;\left(\hat{L}\hat{M}\right)\psi_n\right)^* = \sum_m \left(\psi_k;\hat{L}\psi_m\right)^*\left(\psi_m;\hat{M}\psi_k\right)^* =$$

$$= \sum_m \left(\hat{L}\psi_m;\psi_k\right)\left(\hat{M}\psi_k;\psi_m\right) = \sum_m \left(\psi_m;\hat{L}^+\psi_n\right)\left(\psi_k;\hat{M}^+\psi_m\right) =$$

$$= \sum_m \left(\psi_k;\hat{M}^+\psi_m\right)\left(\psi_m;\hat{L}^+\psi_n\right) = \left(\psi_k;\hat{M}^+\hat{L}^+\psi_n\right) = \left(\psi_k;\hat{M}^+\hat{L}^+\psi_n\right),$$

$$\left(\hat{L}\hat{M}\right)^+ = \hat{M}^+\hat{L}^+ .$$

Ответ: $\left(\hat{L}\hat{M}\right)^+ = \hat{M}^+\hat{L}^+$.

2. Докажите, что оператор Лапласа является самосопряженным.

Воспользуемся равенствами

$$\Delta\varphi = div\nabla\varphi \text{ и } div\left(\varphi\vec{B}\right) = \varphi div\vec{B} + \vec{B}\cdot\nabla\varphi .$$

Рассмотрим произвольные функции ψ_1 и ψ_2, интегрируемые с квадратом модуля и равные нулю на бесконечности. Найдем

$$\left(\psi_1;\Delta\psi_2\right) = \int\psi_1^*\Delta\psi_2 dV = \int\psi_1^* div\left(\nabla\psi_2\right)dV =$$

$$= \int div\left(\psi_1^*\nabla\psi_2\right)dV - \int\nabla\psi_1^*\cdot\nabla\psi_2 dV .$$

$\int div\left(\psi_1^*\nabla\psi_2\right)dV = \oint\psi_1^*\nabla\psi_2\cdot d\vec{s}$ по теореме Остроградского-Гаусса, $\oint\psi_1^*\nabla\psi_2\cdot d\vec{s} = 0$ – по свойству функций.

Тогда

$$\left(\psi_1;\Delta\psi_2\right) = -\int\nabla\psi_1^*\cdot\nabla\psi_2 dV = -\int\nabla\psi_2\cdot\nabla\psi_1^* dV =$$

$$= -\int\left\{div\left(\psi_2\cdot\nabla\psi_1^*\right) - \psi_2 div\nabla\psi_1^*\right\}dV = \int\psi_2\Delta\psi_1^* dV = \int\Delta\psi_1^*\psi_2 dV .$$

Выполняется условие самосопряженности оператора

$$\left(\psi_1;\Delta\psi_2\right) = \left(\Delta\psi_1;\psi_2\right),$$

что требовалось доказать.

3. Оператор $\hat{A}$ эрмитов. Является ли оператор $\hat{B} = C\hat{A}$, где C – произвольная константа, тоже эрмитовым?

Согласно определению эрмитового оператора

$$\left(\psi,\hat{A}\varphi\right) = \left(\hat{A}\psi,\varphi\right),$$

где ψ и φ – произвольные функции. Т.е.

$$\int\psi^*(x)\hat{A}\varphi(x)dx = \int\hat{A}^*\psi^*(x)\varphi(x)dx .$$

Воспользуемся этим определением для оператора $\hat{B}$

$$\int\psi^*(x)C\hat{A}\varphi(x)dx = C\int\psi^*(x)\hat{A}\varphi(x)dx =$$

$$= C\int\hat{A}^*\psi^*(x)\varphi(x)dx = \int C\hat{A}^*\psi^*(x)\varphi(x)dx ,$$

следовательно, $\int\psi^*(x)\hat{B}\varphi(x)dx = \int\hat{B}^*\psi^*(x)\varphi(x)dx$ выполняется для действительных C.

Ответ: является при действительном C.

4. Найдите оператор, сопряженный оператору трансляции координаты x на величину a $\hat{T}_a\psi(x) = \psi(x+a)$.

Воспользуемся определением эрмитовости оператора

$$\left(\psi_1(x);\hat{T}_a\psi_2(x)\right) = \left(\hat{T}_a^+\psi_1(x);\psi_2(x)\right)$$

или в явном виде:

$$\int\psi_1^*(x)\hat{T}_a\psi_2(x)dx = \int\hat{T}_a^+\psi_1^*(x)\psi_2(x)dx .$$

Воспользуемся определением оператора трансляции

$$\hat{T}_a\psi(x) = \psi(x+a):$$

$$\int \psi_1^*(x)\hat{T}_a\psi_2(x)dx = \int \psi_1^*(x)\psi_2(x+a)dx .$$

Поскольку интегрирование ведется по всему координатному пространству, замена $x + a = x'$ не отразится на пределах интегрирования:

$$\int \psi_1^*(x'-a)\psi_2(x')dx' = \int \hat{T}_{-a}\psi_1^*(x')\psi_2(x')dx' ,$$

то есть $\hat{T}_a^+ = \hat{T}_{-a}$.

Ответ: $\hat{T}_a^+ = \hat{T}_{-a}$.

5. Докажите, что собственные значения эрмитового оператора действительны.

Пусть ψ_n и λ_n – собственные функции и собственные значения эрмитового оператора $\hat{L}$. Тогда они связаны определением:

$$\hat{L}\psi_n = \lambda_n\psi_n .$$

Умножим это уравнение слева скалярно на ψ_n:

$$(\psi_n;\hat{L}\psi_n) = (\psi_n;\lambda_n\psi_n) = \lambda_n(\psi_n;\psi_n) = \lambda_n .$$

Умножим это уравнение справа скалярно на ψ_n:

$$(\hat{L}\psi_n;\psi_n) = (\lambda_n^*\psi_n;\psi_n) = \lambda_n^*(\psi_n;\psi_n) = \lambda_n^* .$$

Так как оператор $\hat{L}$ эрмитов, то

$$(\psi_n;\hat{L}\psi_n) = (\hat{L}\psi_n;\psi_n) \text{ и } \lambda_n^* = \lambda_n ,$$

что возможно только для действительных собственных значений.

6. Докажите, что невырожденные собственные функции оператора $\hat{L}$, принадлежащие различным собственным значениям, ортогональны друг другу.

Пусть λ и μ – различные ($\lambda \neq \mu$) собственные значения оператора $\hat{L}$, а ψ и ϕ – его собственные функции, соответствующие этим собственным значениям.

Тогда для ψ и ϕ выполняется определение

$$\hat{L}\psi = \lambda\psi , \tag{1}$$

$$\hat{L}\phi = \mu\phi . \tag{2}$$

Домножим (1) на ϕ справа, а (2) на ψ слева и учтем действительность собственных значений

$$(\hat{L}\psi;\phi) = (\lambda^*\psi;\phi) \;\Rightarrow\; (\hat{L}\psi;\phi) = \lambda(\psi;\phi),$$

$$(\psi;\hat{L}\phi) = (\psi;\mu\phi) \;\Rightarrow\; (\psi;\hat{L}\phi) = \mu(\psi;\phi).$$

Вычтем одно из другого

$$(\hat{L}\psi;\phi) - (\psi;\hat{L}\phi) = (\lambda-\mu)(\psi;\phi). \tag{3}$$

По определению эрмитового оператора левая часть равенства равна 0, по условию $\lambda \neq \mu$, следовательно, $(\psi;\phi) = 0$, что возможно, только если эти функции ортогональны, что требовалось доказать.

7. Докажите, что собственные функции вырожденного состояния ортогональны друг другу.

Пусть оператор $\hat{L}$ обладает дискретным спектром собственных значений и имеет место вырождение:

$$\hat{L}\psi_{ni} = \lambda_n\psi_{ni} , \tag{1}$$

где $i = 1,\ 2,\ ...,\ m_n$. Здесь одному и тому же собственному значению λ_n принадлежит несколько (m_n) собственных функций $\psi_{n1},\ \psi_{n2},\ ...,\psi_{nm_n}$, где m_n – кратность вырождения. Уравнению (1) удовлетворяет также любая линейная комбинация этих функций $\psi_n^j = \sum_{i=1}^{m_n} C_{ij}\psi_{ni}$. Эта функция нормирована на единицу. Покажем, что если данные функции ψ_{ni} неортогональны, то мы можем заменить их последовательностью функций, являющихся их линейной комбинацией, и потребовать, чтобы они были ортогональными.

Рассмотрим случай двукратного вырождения. Пусть имеет место

$$\hat{L}\psi_1 = \lambda\psi_1 ; \quad \hat{L}\psi_2 = \lambda\psi_2 .$$

Допустим, ψ_1 и ψ_2 неортогональны, т. е. $(\psi_1,\psi_2) \neq 0$. Вместо ψ_1 и ψ_2 выберем ортогональные друг другу функции $\psi_1' = \psi_1$ и $\psi_2' = \psi_1 + a\psi_2$, тогда $(\psi_1',\psi_2') = 0$, т. е.

$$(\psi_1, \psi_1 + a\psi_2) = 0; \quad (\psi_1, \psi_1) + a(\psi_1, \psi_2) = 0,$$

откуда $a = -\dfrac{(\psi_1, \psi_1)}{(\psi_1, \psi_2)}$. Аналогично можно провести ортогонализацию собственных функций и при m_n-кратном вырождении.

8. Покажите, что унитарный оператор $\hat{U}$ можно представить в виде $\hat{U} = e^{i\hat{\Phi}}$, где $\hat{\Phi}$ – некоторый эрмитов оператор.

Если $\hat{U} = e^{i\hat{\Phi}}$, то $\hat{U}^{-1} = e^{-i\hat{\Phi}}$.

Покажем, что $\hat{U}^{-1} = \hat{U}^{+}$. Разложим экспоненту в ряд

$$\hat{U} = e^{i\hat{\Phi}} = 1 + i\hat{\Phi} + \frac{i^2}{2!}\hat{\Phi}^2 + \frac{i^3}{3!}\hat{\Phi}^3 + \ldots$$

$$\hat{U}^{-1} = e^{-i\hat{\Phi}} = 1 - i\hat{\Phi} + \frac{i^2}{2!}\hat{\Phi}^2 - \frac{i^3}{3!}\hat{\Phi}^3 + \ldots$$

Поскольку оператор $\hat{\Phi}$ эрмитов, то $\hat{\Phi}^{+} = \hat{\Phi}$ и его любая степень $\hat{\Phi}^n = \left(\hat{\Phi}^n\right)^{+} = \left(\hat{\Phi}^{+}\right)^{n}$, собирая члены разложения опять в экспоненту, получим $\hat{U}^{-1} = \hat{U}^{+}$.

9. Докажите следующие равенства для коммутаторов:

а) $[\hat{p}_x; \hat{x}] = -i\hbar$; б) $[\hat{p}_y; \hat{x}] = 0$; в) $[f(\hat{x})\hat{p}_x; f(\hat{x})] = -i\hbar\dfrac{\partial f(\hat{x})}{\partial x}$, где $f(\hat{x})$ – функция оператора $\hat{x}$;

г) $[\hat{a};[\hat{b};\hat{c}]] + [\hat{b};[\hat{c};\hat{a}]] + [\hat{c};[\hat{a};\hat{b}]] = 0$.

а) Найдем коммутатор, действуя им на некоторую произвольную функцию $\psi(x, y, z)$.

$$[\hat{p}_x; \hat{x}]\psi.$$

Раскроем коммутатор и подставим явный вид операторов $\hat{x} = x$, $\hat{p}_x = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$.

$$[\hat{p}_x; \hat{x}]\psi = \hat{p}_x\hat{x}\psi - \hat{x}\hat{p}_x\psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(x\psi) + xi\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi =$$
$$= -i\hbar\psi - i\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial x} + i\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial x} = -i\hbar\psi.$$

Поскольку функция была выбрана произвольно, то равенство доказано.

б) Аналогично пункту а)

$$[\hat{p}_y; \hat{x}]\psi = \hat{p}_y\hat{x}\psi - \hat{x}\hat{p}_y\psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}(x\psi) + xi\hbar\frac{\partial}{\partial y}\psi =$$
$$= -i\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial y} + i\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial y} = 0.$$

в) Покажем, что действие коммутатора на произвольную функцию $\psi(x, y, z)$ равносильно умножению этой функции на правую часть равенства

$$[f(\hat{x})\hat{p}_x; f(\hat{x})]\psi = -\psi i\hbar\frac{\partial f(\hat{x})}{\partial x}.$$

Для этого раскроем коммутатор и подставим явный вид операторов $\hat{x} = x$, $\hat{p}_x = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$.

$$[\hat{p}_x; f(\hat{x})]\psi = \hat{p}_x f(\hat{x})\psi - f(\hat{x})\hat{p}_x\psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(f(\hat{x})\psi) + f(\hat{x})i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi =$$

$$= -i\hbar\frac{\partial f(\hat{x})}{\partial x}\psi - i\hbar f(\hat{x})\frac{\partial\psi}{\partial x} + i\hbar f(\hat{x})\frac{\partial\psi}{\partial x} = -i\hbar\psi\frac{\partial f(\hat{x})}{\partial x},$$

что требовалось доказать.

г) Раскроем коммутаторы

$$[\hat{a};[\hat{b};\hat{c}]] + [\hat{b};[\hat{c};\hat{a}]] + [\hat{c};[\hat{a};\hat{b}]] =$$
$$= \hat{a}(\hat{b}\hat{c} - \hat{c}\hat{b}) - (\hat{b}\hat{c} - \hat{c}\hat{b})\hat{a} + \hat{b}(\hat{c}\hat{a} - \hat{a}\hat{c}) - (\hat{c}\hat{a} - \hat{a}\hat{c})\hat{b} + \hat{c}(\hat{a}\hat{b} - \hat{b}\hat{a}) - (\hat{a}\hat{b} - \hat{b}\hat{a})\hat{c} =$$
$$= \underline{\hat{a}\hat{b}\hat{c}} - \underline{\underline{\hat{a}\hat{c}\hat{b}}} - \hat{b}\hat{c}\hat{a} + \hat{c}\hat{b}\hat{a} + \hat{b}\hat{c}\hat{a} - \hat{b}\hat{a}\hat{c} - \hat{c}\hat{a}\hat{b} + \underline{\underline{\hat{a}\hat{c}\hat{b}}} + \hat{c}\hat{a}\hat{b} - \hat{c}\hat{b}\hat{a} - \underline{\hat{a}\hat{b}\hat{c}} + \hat{b}\hat{a}\hat{c} = 0.$$

Для наглядности подчеркнуты некоторые одинаковые слагаемые с разными знаками.

10. Найдите коммутаторы операторов

а) $\left[\hat{L}_x;\hat{x}\right]$**; б)** $\left[\hat{L}_x;\hat{y}\right]$**; в)** $\left[\hat{L}_x;\hat{z}\right]$**; г)** $\left[\hat{L}_x;\hat{p}_x\right]$**; д)** $\left[\hat{L}_x;\hat{p}_y\right]$**;**
е) $\left[\hat{L}_x;\hat{p}_z\right]$**; ж)** $\left[\hat{L}_x;\hat{L}_y\right]$**; з)** $\left[\hat{L}_x;\hat{L}_z\right]$**; и)** $\left[\hat{L}_x;\hat{L}^2\right]$**.**

а) Найдем коммутатор операторов, используя соотношение между операторами проекции момента импульса и проекции импульса и координаты

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y .$$

$$\left[\hat{L}_x;\hat{x}\right] = \hat{L}_x\hat{x} - \hat{x}\hat{L}_x = \left(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y\right)\hat{x} - \hat{x}\left(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y\right) =$$
$$= \hat{y}\hat{p}_z\hat{x} - \hat{z}\hat{p}_y\hat{x} - \hat{x}\hat{y}\hat{p}_z + \hat{x}\hat{z}\hat{p}_y = \hat{x}\hat{y}\hat{p}_z - \hat{x}\hat{z}\hat{p}_y - \hat{x}\hat{y}\hat{p}_z + \hat{x}\hat{z}\hat{p}_y = 0 .$$

б) Аналогично пункту а)

$$\left[\hat{L}_x;\hat{y}\right] = \hat{L}_x\hat{y} - \hat{y}\hat{L}_x = \left(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y\right)\hat{y} - \hat{y}\left(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y\right) =$$

$$= \hat{y}\hat{p}_z\hat{y} - \hat{z}\hat{p}_y\hat{y} - \hat{y}\hat{y}\hat{p}_z + \hat{y}\hat{z}\hat{p}_y = \hat{y}\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\left(\hat{y}\hat{p}_y - i\hbar\right) - \hat{y}\hat{y}\hat{p}_z + \hat{y}\hat{z}\hat{p}_y = i\hbar\hat{z}$$
.

Здесь использованы результаты предыдущей задачи. Из коммутатора $\hat{p}_y\hat{y} - \hat{y}\hat{p}_y = -i\hbar$ следует $\hat{p}_y\hat{y} = \hat{y}\hat{p}_y - i\hbar$.

в) Аналогично пункту б)

$$\left[\hat{L}_x;\hat{z}\right] = -i\hbar\hat{y} .$$

г) $$\left[\hat{L}_x;\hat{p}_x\right] = \left(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y\right)\hat{p}_x - \hat{p}_x\left(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y\right) =$$
$$= \hat{y}\hat{p}_z\hat{p}_x - \hat{z}\hat{p}_y\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{y}\hat{p}_z + \hat{p}_x\hat{z}\hat{p}_y =$$
$$= \hat{y}\hat{p}_z\hat{p}_x - \hat{z}\hat{p}_x\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_z\hat{p}_x + \hat{z}\hat{p}_x\hat{p}_y = 0.$$

д) $$\left[\hat{L}_x;\hat{p}_y\right] = \left(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y\right)\hat{p}_y - \hat{p}_y\left(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y\right) =$$
$$= \hat{y}\hat{p}_z\hat{p}_x - \hat{z}\hat{p}_y\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{y}\hat{p}_z + \hat{p}_x\hat{z}\hat{p}_y =$$
$$= \hat{y}\hat{p}_z\hat{p}_y - \hat{z}\hat{p}_y\hat{p}_y - \left(\hat{y}\hat{p}_y - i\hbar\right)\hat{p}_z + \hat{z}\hat{p}_x\hat{p}_y = i\hbar\hat{p}_z .$$

е) Аналогично пункту д)

$$\left[\hat{L}_x;\hat{p}_z\right] = -i\hbar\hat{p}_y .$$

ж) Используем результаты предыдущих пунктов и соотношения $\hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z$, $\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$.

$$\left[\hat{L}_x;\hat{L}_y\right] = \hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x = \hat{L}_x\left(\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z\right) - \left(\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z\right)\hat{L}_x =$$

$$= \hat{L}_x\hat{z}\hat{p}_x - \hat{L}_x\hat{x}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_x\hat{L}_x + \hat{x}\hat{p}_z\hat{L}_x =$$
$$= \left(\hat{z}\hat{L}_x - i\hbar\hat{y}\right)\hat{p}_x - \hat{x}\hat{L}_x\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_x\hat{L}_x + \hat{x}\hat{p}_z\hat{L}_x =$$
$$= \hat{z}\hat{p}_x\hat{L}_x - i\hbar\hat{y}\hat{p}_x - \hat{x}\left(\hat{p}_z\hat{L}_x - ih\hat{p}_y\right) - \hat{z}\hat{p}_x\hat{L}_x - \hat{x}\hat{p}_z\hat{L}_x =$$
$$= -i\hbar\hat{y}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z\hat{L}_x + ih\hat{x}\hat{p}_y + \hat{x}\hat{p}_z\hat{L}_x = ih\left(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x\right) = i\hbar\hat{L}_z .$$

з) Аналогично пункту ж)

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

и) Используем результаты предыдущих пунктов

$$\left[\hat{L}_x;\hat{L}^2\right] = \hat{L}_x\hat{L}^2 - \hat{L}^2\hat{L}_x = \hat{L}_x\left(\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2\right) - \left(\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2\right)\hat{L}_x =$$
$$= \hat{L}_x\hat{L}_x^2 + \hat{L}_x\hat{L}_y^2 + \hat{L}_x\hat{L}_z^2 - \hat{L}_x^2\hat{L}_x - \hat{L}_y^2\hat{L}_x - \hat{L}_z^2\hat{L}_x =$$

$$= \hat{L}_x^2\hat{L}_x + \left(\hat{L}_y\hat{L}_x + i\hbar\hat{L}_z\right)\hat{L}_y + \left(\hat{L}_z\hat{L}_x - i\hbar\hat{L}_y\right)\hat{L}_z - \hat{L}_x^2\hat{L}_x - \hat{L}_y^2\hat{L}_x - \hat{L}_z^2\hat{L}_x =$$
$$= i\hbar\left(\hat{L}_z\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_z\right) + \hat{L}_y\left(\hat{L}_y\hat{L}_x + i\hbar\hat{L}_z\right) + \hat{L}_z\left(\hat{L}_z\hat{L}_x - i\hbar\hat{L}_y\right) -$$
$$- \hat{L}_y^2\hat{L}_x - \hat{L}_z^2\hat{L}_x = i\hbar\left(\hat{L}_z\hat{L}_y + \hat{L}_y\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_z\right) = 0 .$$

Ответ: а) $\left[\hat{L}_x;\hat{x}\right] = 0$, б) $\left[\hat{L}_x;\hat{y}\right] = i\hbar\hat{z}$, в) $\left[\hat{L}_x;\hat{z}\right] = -i\hbar\hat{y}$,
г) $\left[\hat{L}_x;\hat{p}_x\right] = 0$, д) $\left[\hat{L}_x;\hat{p}_y\right] = i\hbar\hat{p}_z$, е) $\left[\hat{L}_x;\hat{p}_z\right] = -i\hbar\hat{p}_y$,
ж) $\left[\hat{L}_x;\hat{L}_y\right] = i\hbar\hat{L}_z$, з) $\left[\hat{L}_x;\hat{L}_y\right] = i\hbar\hat{L}_z$, и) $\left[\hat{L}_x;\hat{L}^2\right] = 0$.

11. Докажите, что $\left[\hat{p}_x;f(\hat{x})\right]=\hat{p}_x f(\hat{x})-f(\hat{x})\hat{p}_x=\dfrac{\hbar}{i}\dfrac{\partial f}{\partial x}$, где $f(\hat{x})$ – функция оператора $\hat{x}$.

Воспользуемся явным видом оператора импульса $\hat{p}_x=-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$ и подействуем коммутатором $\left[\hat{p}_x;f(\hat{x})\right]$ на произвольную дифференцируемую функцию $\psi(x)$:

$$\left[\hat{p}_x;f(\hat{x})\right]\psi(x)=\hat{p}_x f(\hat{x})\psi(x)-f(\hat{x})\hat{p}_x\psi(x)=$$

$$=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\left(f(x)\psi(x)\right)-f(x)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x)=$$

$$=-i\hbar\frac{\partial f}{\partial x}\psi-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}f+i\hbar f\frac{\partial\psi}{\partial x}=-i\hbar\frac{\partial f}{\partial x}\psi=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial f}{\partial x}\psi,$$

поскольку функция произвольная, то равенство доказано.

12. Докажите, что физические величины L и M одновременно могут быть точно измерены тогда и только тогда, когда операторы этих величин $\hat{L}$ и $\hat{M}$ коммутируют.

Пусть у этих операторов существует произвольная общая собственная функция ψ, и собственные значения операторов, которым соответствует эта функция λ и μ тогда

$$\hat{L}\hat{M}\psi=\hat{L}\mu\psi=\lambda\mu\psi,\ \hat{M}\hat{L}\psi=\hat{M}\lambda\psi=\mu\lambda\psi,$$

вычтем одно равенство из другого

$$\hat{M}\hat{L}\psi-\hat{L}\hat{M}\psi=\mu\lambda\psi-\lambda\mu\psi=0,$$

тогда $\left[\hat{M};\hat{L}\right]=\hat{M}\hat{L}-\hat{L}\hat{M}=0$, что требовалось доказать.

13. Перейдите от классической скобки Пуассона к квантовой, считая, что ее свойства сохраняются и для операторов.

Используем свойство классической скобки Пуассона

$$(f;g\varphi)=g(f;\varphi)+(f;g)\varphi,$$

где f,g,φ – функции, представляющие физические величины. По первой аксиоме квантовой механики это же соотношение справедливо и для операторов физических величин $\hat{f},\hat{g},\hat{\varphi}$. Используем это соотношение для операторов, считая сначала произведением первое слагаемое, а затем – второе. Получим:

$$\left(\hat{f}_1\hat{f}_2;\hat{g}\right)=\left(\hat{f}_1;\hat{g}\right)\hat{f}_2+\hat{f}_1\left(\hat{f}_2;\hat{g}\right),$$
$$\left(\hat{f};\hat{g}_1\hat{g}_2\right)=\left(\hat{f};\hat{g}_1\right)\hat{g}_2+\hat{g}_1\left(\hat{f};\hat{g}_2\right).$$

Положим в первом равенстве $\hat{g}=\hat{g}_1\hat{g}_2$ и используем второе равенство, получим

$$\left(\hat{f}_1\hat{f}_2;\hat{g}_1\hat{g}_2\right)=\left(\hat{f}_1;\hat{g}_1\hat{g}_2\right)\hat{f}_2+\hat{f}_1\left(\hat{f}_2;\hat{g}_1\hat{g}_2\right)=$$
$$=\left(\left(\hat{f}_1;\hat{g}_1\right)\hat{g}_2+\hat{g}_1\left(\hat{f}_1;\hat{g}_2\right)\right)\hat{f}_2+\hat{f}_1\left(\left(\hat{f}_2;\hat{g}_1\right)\hat{g}_2+\hat{g}_1\left(\hat{f}_2;\hat{g}_2\right)\right)=$$
$$=\left(\hat{f}_1;\hat{g}_1\right)\hat{g}_2\hat{f}_2+\hat{g}_1\left(\hat{f}_1;\hat{g}_2\right)\hat{f}_2+\hat{f}_1\left(\hat{f}_2;\hat{g}_1\right)\hat{g}_2+\hat{f}_1\hat{g}_1\left(\hat{f}_2;\hat{g}_2\right).$$

Положим во втором равенстве $\hat{f}=\hat{f}_1\hat{f}_2$ и используем первое равенство, получим

$$\left(\hat{f}_1\hat{f}_2;\hat{g}_1\hat{g}_2\right)=\left(\hat{f}_1\hat{f}_2;\hat{g}_1\right)\hat{g}_2+\hat{g}_1\left(\hat{f}_1\hat{f}_2;\hat{g}_2\right)=$$
$$=\left(\left(\hat{f}_1;\hat{g}_1\right)\hat{f}_2+\hat{f}_1\left(\hat{f}_2;\hat{g}_1\right)\right)\hat{g}_2+\hat{g}_1\left(\left(\hat{f}_1;\hat{g}_2\right)\hat{f}_2+\hat{f}_1\left(\hat{f}_2;\hat{g}_2\right)\right)=$$
$$=\left(\hat{f}_1;\hat{g}_1\right)\hat{f}_2\hat{g}_2+\hat{f}_1\left(\hat{f}_2;\hat{g}_1\right)\hat{g}_2+\hat{g}_1\left(\hat{f}_1;\hat{g}_2\right)\hat{f}_2+\hat{g}_1\hat{f}_1\left(\hat{f}_2;\hat{g}_2\right).$$

Сравнивая правые части, получаем равенство

$$\left(\hat{f}_1;\hat{g}_1\right)\left[\hat{f}_2\hat{g}_2-\hat{g}_2\hat{f}_2\right]=\left[\hat{f}_1\hat{g}_1-\hat{g}_1\hat{f}_1\right]\left(\hat{f}_2;\hat{g}_2\right),$$

справедливое для любых самосопряженных операторов. Следовательно,

$$\left(\hat{f};\hat{g}\right)=C\left[\hat{f}\hat{g}-\hat{g}\hat{f}\right].$$

В силу самосопряженности $\hat{f}^+=\hat{f},\hat{g}^+=\hat{g}$, получаем, что $C^*=-C$. (Размерность C должна быть обратной размерности действия по аналогии с классической скобкой Пуассона $(f;g)=\sum\limits_{i=1}^{\infty}\left(\dfrac{\partial f}{\partial p_i}\dfrac{\partial g}{\partial q_i}-\dfrac{\partial g}{\partial p_i}\dfrac{\partial f}{\partial q_i}\right)$, величина $C=\dfrac{i}{\hbar}$ вполне удовлетворяет этому свойству.) Квантовая скобка Пуассона

$$\left(\hat{f};\hat{g}\right)=\frac{i}{\hbar}\left[\hat{f}\hat{g}-\hat{g}\hat{f}\right].$$

Ответ: $\left(\hat{f};\hat{g}\right)=\dfrac{i}{\hbar}\left[\hat{f}\hat{g}-\hat{g}\hat{f}\right]$.

14. Докажите, что квантовые скобки Пуассона определяются коммутатором следующим образом:

$$\left\{\hat{F},\hat{Q}\right\}=\frac{i}{\hbar}\left(\hat{F}\hat{Q}-\hat{Q}\hat{F}\right).$$

Квантовые скобки Пуассона для физических величин F и Q определяются условием:

$$\{F,Q\}=\sum\left(\frac{\partial F}{\partial p_i}\frac{\partial Q}{\partial q_i}-\frac{\partial F}{\partial q_i}\frac{\partial Q}{\partial p_i}\right), \quad (1)$$

где p_i, q_i – обобщенные импульсы и координаты соответственно. Рассмотрим $\left\{\hat{F}_1\cdot\hat{F}_2,\hat{Q}\right\}$. Эти квантовые скобки в соответствии с условием (1) имеют значение:

$$\left\{\hat{F}_1\cdot\hat{F}_2,\hat{Q}\right\}=\sum\left(\frac{\partial\left(\hat{F}_1\cdot\hat{F}_2\right)}{\partial p_i}\frac{\partial\hat{Q}}{\partial q_i}-\frac{\partial\left(\hat{F}_1\cdot\hat{F}_2\right)}{\partial q_i}\frac{\partial\hat{Q}}{\partial p_i}\right)=$$

$$=\sum\left(\frac{\partial\hat{F}_1}{\partial p_i}\frac{\partial\hat{Q}}{\partial q_i}\hat{F}_2+\hat{F}_1\frac{\partial\hat{F}_2}{\partial p_i}\frac{\partial\hat{Q}}{\partial q_i}-\frac{\partial\hat{F}_1}{\partial q_i}\frac{\partial\hat{Q}}{\partial p_i}\hat{F}_2-\hat{F}_1\frac{\partial\hat{F}_2}{\partial q_i}\frac{\partial\hat{Q}}{\partial p_i}\right).$$

Рассмотрим первое и третье и второе и четвертое слагаемые, получим:

$$\left\{\hat{F}_1\cdot\hat{F}_2,\hat{Q}\right\}=\hat{F}_1\left\{\hat{F}_2,\hat{Q}\right\}+\left\{\hat{F}_1,\hat{Q}\right\}\hat{F}_2. \quad (2)$$

Аналогично

$$\left\{\hat{F},\hat{Q}_1\cdot\hat{Q}_2\right\}=\hat{Q}_1\left\{\hat{F},\hat{Q}_2\right\}+\left\{\hat{F},\hat{Q}_1\right\}\hat{Q}_2. \quad (3)$$

Рассчитаем произведение $\left\{\hat{F}_1\cdot\hat{F}_2,\hat{Q}_1\cdot\hat{Q}_2\right\}$, используя сначала равенство (2), затем (3):

$$\left\{\hat{F}_1\cdot\hat{F}_2,\hat{Q}_1\cdot\hat{Q}_2\right\}=\hat{F}_1\left\{\hat{F}_2,\hat{Q}_1\cdot\hat{Q}_2\right\}+\left\{\hat{F}_1,\hat{Q}_1\cdot\hat{Q}_2\right\}\hat{F}_2=$$
$$=\hat{F}_1\hat{Q}_1\left\{\hat{F}_2,\hat{Q}_2\right\}+\hat{Q}_1\left\{\hat{F}_1,\hat{Q}_2\right\}\hat{F}_2+\hat{F}_1\left\{\hat{F}_2,\hat{Q}_1\right\}\hat{Q}_2+\left\{\hat{F}_1,\hat{Q}_1\right\}\hat{Q}_2\hat{F}_2. \quad (4)$$

Затем рассчитаем $\left\{\hat{F}_1\cdot\hat{F}_2,\hat{Q}_1\cdot\hat{Q}_2\right\}$, используя сначала равенство (3), затем (2):

$$\left\{\hat{F}_1\cdot\hat{F}_2,\hat{Q}_1\cdot\hat{Q}_2\right\}=\hat{Q}_1\left\{\hat{F}_1\cdot\hat{F}_2,\hat{Q}_2\right\}+\left\{\hat{F}_1\cdot\hat{F}_2,\hat{Q}_1\right\}\hat{Q}_2=$$
$$=\hat{Q}_1\hat{F}_1\left\{\hat{F}_2,\hat{Q}_2\right\}+\hat{F}_1\left\{\hat{F}_2,\hat{Q}_1\right\}\hat{Q}_2+\hat{Q}_1\left\{\hat{F}_1,\hat{Q}_2\right\}\hat{F}_2+\left\{\hat{F}_1,\hat{Q}_1\right\}\hat{F}_2\hat{Q}_2. \quad (5)$$

Вычтем из равенства (4) равенство (5):

$$\left(\hat{Q}_1\hat{F}_1-\hat{F}_1\hat{Q}_1\right)\left\{\hat{F}_2,\hat{Q}_2\right\}-\left\{\hat{F}_1,\hat{Q}_1\right\}\left(\hat{F}_2\hat{Q}_2-\hat{Q}_2\hat{F}_2\right)=0. \quad (6)$$

Чтобы равенство (6) было абсолютным, необходимо, чтобы выполнялись условия:

$$\left\{\hat{F}_1,\hat{Q}_1\right\}=C\left(\hat{Q}_1\hat{F}_1-\hat{F}_1\hat{Q}_1\right),$$
$$\left\{\hat{F}_2,\hat{Q}_2\right\}=C\left(\hat{F}_2\hat{Q}_2-\hat{Q}_2\hat{F}_2\right). \quad (7)$$

Так как условия (7) должны выполняться для любых операторов, то они должны выполняться и для операторов $\hat{p}_x=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ и $\hat{x}=x$. В соответствии с условием (1) и учитывая то, что обобщенные импульс p_x и координата x независимы,

$$\{p_x,x\}=\sum\left(\frac{\partial p_x}{\partial p_x}\frac{\partial x}{\partial x}-\frac{\partial p_x}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial p_x}\right)=1,$$

но так как из (7):

$$\{\hat{p}_x,\hat{x}\}=C(-i\hbar)\left(\frac{\partial}{\partial x}x-x\frac{\partial}{\partial x}\right)=1,$$

то необходимо, чтобы

$$C=\frac{i}{\hbar},$$

то есть $\left\{\hat{F},\hat{Q}\right\}=\frac{i}{\hbar}\left(\hat{F}\hat{Q}-\hat{Q}\hat{F}\right)$.

Квантовые скобки Пуассона пропорциональны коммутатору рассматриваемой пары операторов, причем коэффициент пропорциональности равен $\frac{i}{\hbar}$.

15. Проверьте, является ли импульс $\hat{\vec{p}}$ интегралом движения в центральном поле.

Необходимым и достаточным условием того, что физическая величина является интегралом движения, является равенство нулю производной по времени от соответствующего оператора

$$\frac{d\hat{\vec{p}}}{dt}=\frac{\partial\hat{\vec{p}}}{\partial t}+\left\{\hat{H},\hat{\vec{p}}\right\}=0,$$

где $\left\{\hat{H},\hat{\vec{p}}\right\}=\frac{i}{\hbar}\left[\hat{H},\hat{\vec{p}}\right]$ – квантовые скобки Пуассона, выраженные через коммутатор оператора $\hat{\vec{p}}$ с оператором Гамильтона. В центральном поле оператор Гамильтона имеет вид:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + \hat{U}(r),$$

где r – модуль радиус-вектора. Оператор $\hat{\vec{p}}$ явно не зависит от времени, следовательно, его частная производная равна нулю, он коммутирует со слагаемым кинетической энергии $\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}$, но не коммутирует с оператором потенциальной энергии:

$$\left[\hat{U}(r), \hat{\vec{p}}\right]\psi = \hat{U}(r)\hat{\vec{p}}\psi - \hat{\vec{p}}\hat{U}(r)\psi = -i\hbar\left(\hat{U}(r)\nabla\psi - \nabla\left(\hat{U}(r)\psi\right)\right) =$$
$$= -i\hbar\left(\hat{U}(r)\nabla\psi - \left(\nabla\hat{U}(r)\right)\psi - \hat{U}(r)(\nabla\psi)\right) = -i\hbar\left(\nabla\hat{U}(r)\right)\psi,$$

следовательно, коммутатор

$$\left[\hat{U}(r), \hat{\vec{p}}\right] = -i\hbar\nabla\hat{U}(r).$$

Вывод: оператор импульса не является интегралом движения в центрально симметричном поле.

16. Проверьте, является ли момент импульса $\hat{\vec{L}}$ интегралом движения в центральном поле.

Необходимым и достаточным условием того, что физическая величина является интегралом движения, является равенство нулю производной по времени от соответствующего оператора

$$\frac{d\hat{\vec{L}}}{dt} = \frac{\partial\hat{\vec{L}}}{\partial t} + \left\{\hat{H}, \hat{\vec{L}}\right\} = 0,$$

где $\left\{\hat{H}, \hat{\vec{L}}\right\} = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}, \hat{\vec{L}}\right]$ – квантовые скобки Пуассона, выраженные через коммутатор оператора $\hat{\vec{L}}$ с оператором Гамильтона. Оператор $\hat{\vec{L}}$ явно не зависит от времени, следовательно, его частная производная равна нулю. В центральном поле оператор Гамильтона имеет вид:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + \hat{U}(r),$$

где r – модуль радиус-вектора. Найдем коммутатор оператора одной из проекций импульса $\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$ с оператором Гамильтона:

$$\left[\hat{H}, \hat{L}_z\right] = \frac{1}{2m}\left[\left(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2\right), \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x\right] + \left[\hat{U}(r), \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x\right].$$

Операторы $\hat{x}\hat{p}_y$ и $\hat{y}\hat{p}_x$ коммутируют с $\hat{p}_z$. Воспользуемся соотношением $\left[\hat{p}_x, \hat{x}\right] = -i\hbar$ и $\left[\hat{p}_x, \hat{p}_y\right] = 0$.

$$\left[\hat{H}, \hat{L}_z\right] = \frac{\hat{p}_y}{2m}\left[\hat{p}_x^2, \hat{x}\right] - \frac{\hat{p}_x}{2m}\left[\hat{p}_y^2, \hat{y}\right] + \hat{x}\left[\hat{U}(r), \hat{p}_y\right] - \hat{y}\left[\hat{U}(r), \hat{p}_x\right] =$$

$$= -i\hbar\left(\frac{\hat{p}_y\hat{p}_x}{m} - \frac{\hat{p}_x\hat{p}_y}{m} + \hat{x}\left(\hat{U}(r)\frac{\partial}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y}\hat{U}(r)\right) - \hat{y}\left(\hat{U}(r)\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}\hat{U}(r)\right)\right) =$$

$$= -i\hbar\left(\hat{x}\left(\hat{U}(r)\frac{\partial}{\partial y} - \frac{\partial\hat{U}(r)}{\partial y} - \hat{U}(r)\frac{\partial}{\partial y}\right) - \hat{y}\left(\hat{U}(r)\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial\hat{U}(r)}{\partial x} - \hat{U}(r)\frac{\partial}{\partial x}\right)\right) = 0.$$

Аналогично можно показать, что $\left[\hat{H}, \hat{L}_x\right] = 0$ и $\left[\hat{H}, \hat{L}_x\right] = 0$.

Вывод: оператор момента импульса является интегралом движения в центральном поле.

17. Проверьте, является ли квадрат момента импульса $\hat{L}^2$ интегралом движения в центральном поле.

Поскольку оператор $\hat{L}^2$ явно не зависит от времени, следовательно, его частная производная равна нулю. Тогда необходимым и достаточным условием того, что физическая величина является интегралом движения, является равенство нулю скобки Пуассона соответствующего квантового оператора с оператором Гамильтона.

$$\left\{\hat{H}; \hat{L}^2\right\} = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}; \hat{L}^2\right] = \frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}\hat{L}^2 - \hat{L}^2\hat{H}\right).$$

Оператор Гамильтона для частицы в центральном поле имеет вид:

$$\hat{H} = \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + U(r),$$

где $\hat{L}^2 = -\frac{\hbar^2}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial^2\varphi}$ – оператор, содержащий только производные по угловым переменным, следовательно, он коммутирует с любой функцией радиальной переменной.

Тогда

$$\left[\hat{H};\hat{L}^2\right] = \left[\frac{\hat{L}^2}{2mr^2};\hat{L}^2\right] + \left[\hat{U}(r);\hat{L}^2\right] = 0,$$

следовательно, момент количества движения является интегралом движения. В классическом случае модуль момента импульса сохраняется.

18. Покажите, что квадрат момента количества движения свободной частицы является интегралом движения.

Поскольку оператор $\hat{L}^2$ явно не зависит от времени, следовательно, его частная производная равна нулю. Тогда необходимым и достаточным условием того, что физическая величина является интегралом движения, является равенство нулю скобки Пуассона соответствующего квантового оператора с оператором Гамильтона.

$$\left\{\hat{H};\hat{L}^2\right\} = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H};\hat{L}^2\right] = \frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}\hat{L}^2 - \hat{L}^2\hat{H}\right).$$

Оператор Гамильтона для свободной частицы имеет вид:

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m}.$$

Поскольку коммутатор

$$\left[\hat{H};\hat{L}^2\right] = \left[\frac{\hat{P}^2}{2m};\hat{L}^2\right] = \frac{1}{2m}\left[\hat{P}^2;\hat{L}^2\right] = 0,$$

следовательно, момент количества движения является интегралом движения свободной частицы. В классическом случае модуль момента импульса свободной частицы сохраняется.