```
> restart;
```

| РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ |
|---|
| (В.М.ГАЛИЦКИЙ, Б.М.КОРНАКОВ, В.И.КОГАН. |
| ЗАДАЧИ ПО КВАНТОВОЙ МЕХНИКЕ |
| Журавлев В.М. |
| Ульяновский государственный университет, 2020 |

# ОПЕРАТОРЫ

```
> with(plots):
  with(plottools):
```

## Формат графиков

```
> frm:=axes=boxed,gridlines=true,labeldirections=[horizontal,vertical],labelfont=[TIMES,
  BOLD,16],titlefont=[TIMES,BOLD,18],symbol=solidcircle,symbolsize=18,size=[900,600];
```

$$frm := axes = boxed, gridlines = true, labeldirections = [horizontal, vertical], labelfont = [TIMES, BOLD, 16], titlefont = [TIMES, BOLD, 18], symbol = solidcircle, symbolsize = 18, size = [900, 600] \tag{1}$$

## Определение операторов

1. Оператор - это правило, с помощью которого каждая функция из функционального пространства $\mathcal{H}$ сопоставляется другой функции из того же пространства.

2. Линейный оператор: Оператор $\hat{A}$ называется линейным, если для любых двух функций ψ(x) и φ(x) из пространства $\mathcal{H}$: $\psi,\varphi \in \mathcal{H}$ и произвольных комплексных чисел a и b ($a,b \in \mathbb{C}$) выполняется равенство:

$$\hat{A}\,(a\psi(x)+b\varphi(x))=a\hat{A}\,\psi+b\hat{A}\,\phi$$

3. Сопряженный оператор. Оператор $\hat{A}^{+}$ называется сопряженным (*эрмитово сопряженным*) оператору $\hat{A}$, если для любых двух функций $\psi(x)$ и $\phi(x)$ из пространства $\mathcal{H}$: $\psi, \phi \in \mathcal{H}$ выполняется равенство :

$$(\psi, \hat{A}\,\phi) = (\hat{A}^{+}\,\psi, \phi)$$

4. Оператор $\hat{A}$ называется самосопряженным (*эрмитовым*), если

$$\hat{A}^{+} = \hat{A}$$

---

## Оператор инверсии

$$\hat{I}\,\psi(x) = \psi(-x)$$

```
>
> pf1:=plot([sin(x),-sin(x)], x=-Pi..Pi, frm,labels=["x","f(x)"], color=[red,blue]):
> t1:=textplot([Pi/2,0.25,"f=sin(x)"],font=[TIMES,BOLD,20]):
> pf2:=plot([exp(x),exp(-x)], x=-2..2, frm,labels=["x","f(x)"], color=[red,blue]):
> t2:=textplot([1,4.5,"f=exp(x)"],font=[TIMES,BOLD,20]):
> f:=(x)->(x^2+x+2)/(x^2+1);
```

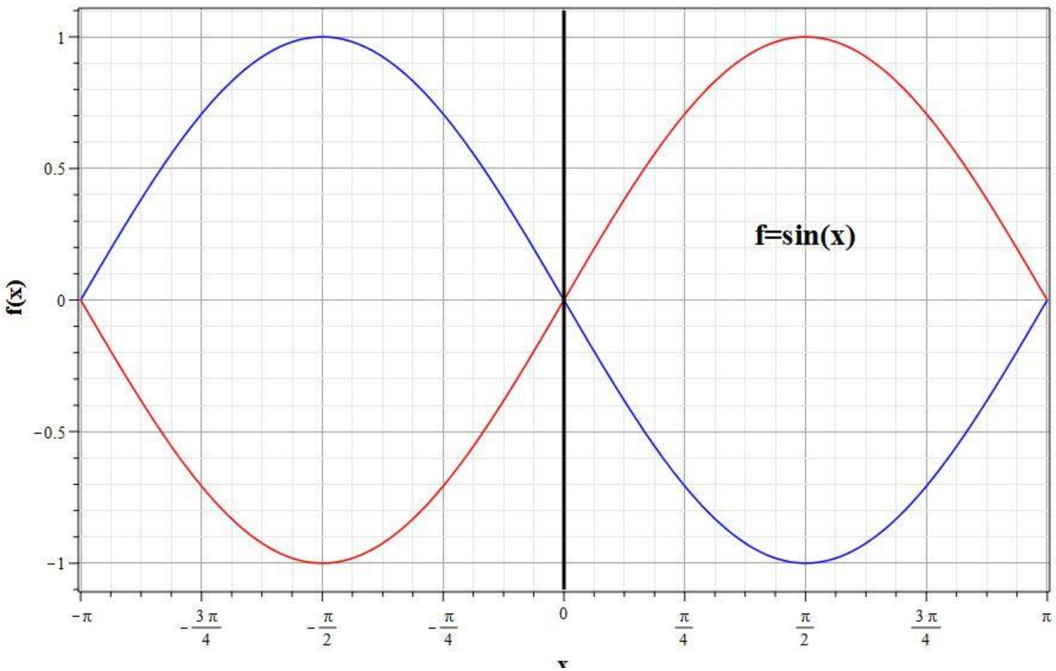
$$f := x \rightarrow \frac{x^2 + x + 2}{x^2 + 1} \qquad (2)$$

```
> pf3:=plot([f(x),f(-x)], x=-4..4, frm,labels=["x","f(x)"], color=[red,blue]):
> t3:=textplot([2,0.5,"f=(x^2+2x+2)/(x^2+1)"],font=[TIMES,BOLD,20]):
> Lv0:=(hb,ht)->line([0,hb],[0,ht],color=black,thickness=3);
```

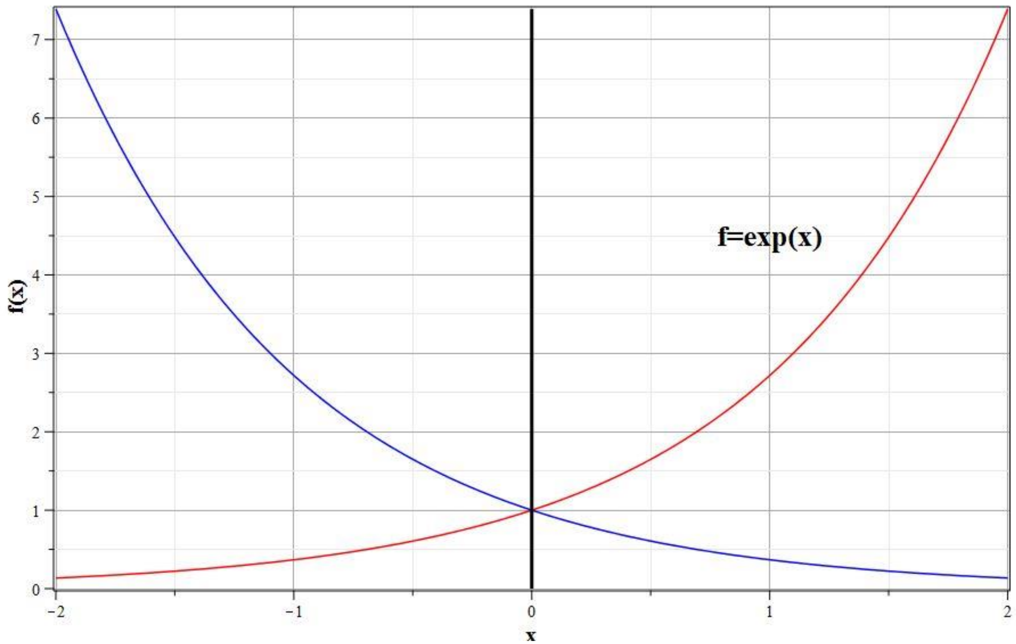
$$Lv0 := (hb, ht) \rightarrow plottools\text{:-}line([0, hb], [0, ht], color = black, thickness = 3) \qquad (3)$$

```
> display(pf1,Lv0(-1.1,1.1),t1);
```

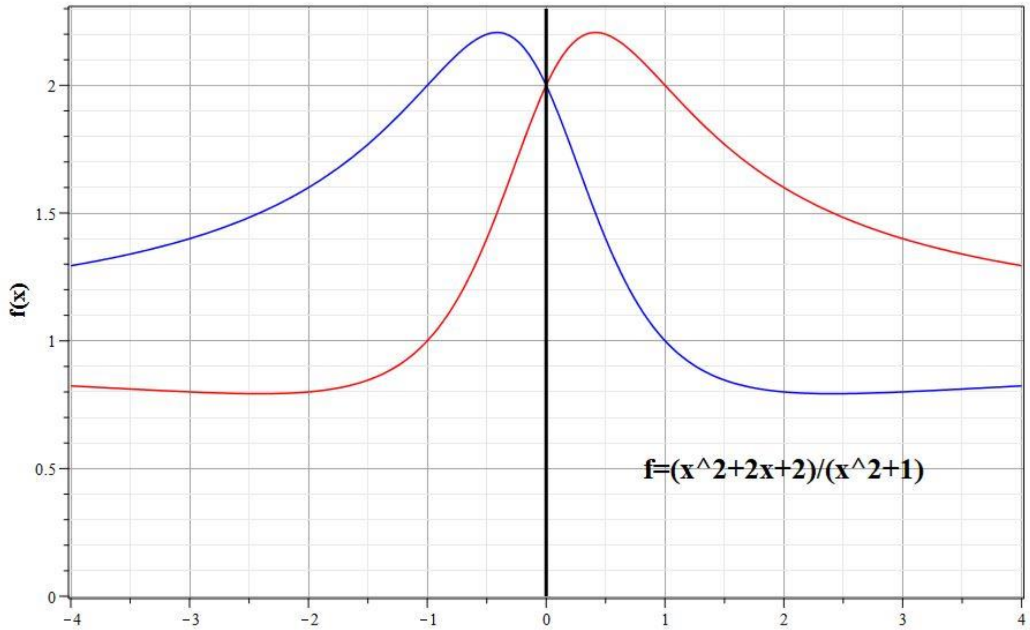
```
> display(pf1,Lv0(-1.1,1.1),t1);
```



```
> display(pf2,Lv0(0,exp(2)),t2);
```



```
> display(pf3,Lv0(0,2.3),t3);
```



x

# Оператор сдвига (трансляции)

$$\hat{T}_a \psi(x) = \psi(x+a),\ \mathrm{Im}(a) = 0$$

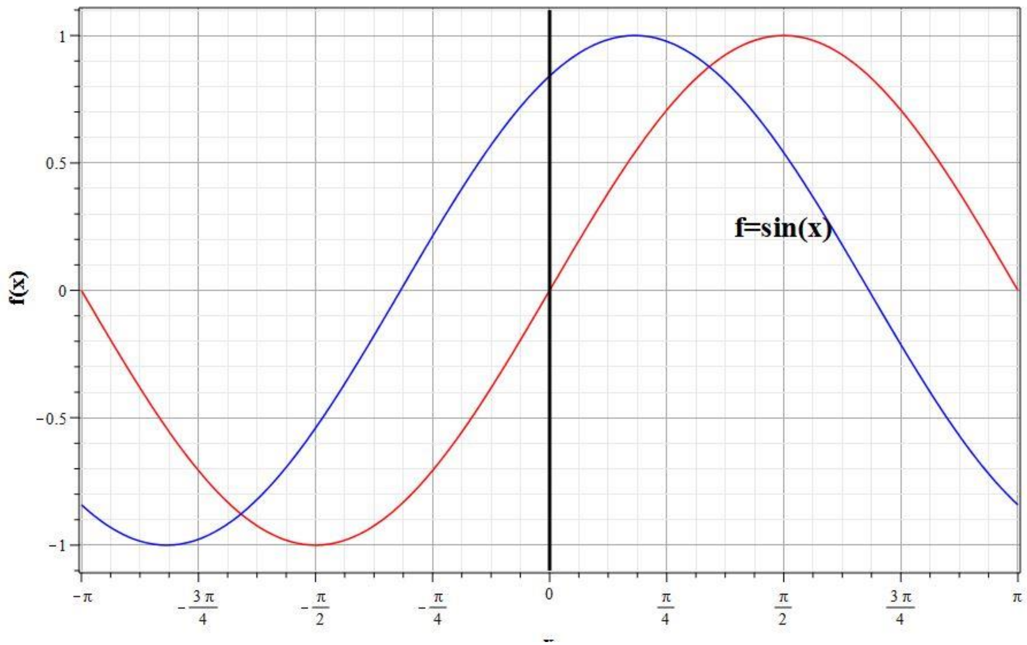
```
> pf1:=plot([sin(x),sin(x+1)], x=-Pi..Pi, frm,labels=["x","f(x)"], color=[red,blue]):
> t1:=textplot([Pi/2,0.25,"f=sin(x)"],font=[TIMES,BOLD,20]):
> pf2:=plot([exp(x),exp(x+2)], x=-2..2, frm,labels=["x","f(x)"], color=[red,blue]):
> t2:=textplot([1,4.5,"f=exp(x)"],font=[TIMES,BOLD,20]):
> f:=(x)->(x^2+x+2)/(x^2+1);
```

$$f := x \rightarrow \frac{x^2 + x + 2}{x^2 + 1} \quad (4)$$

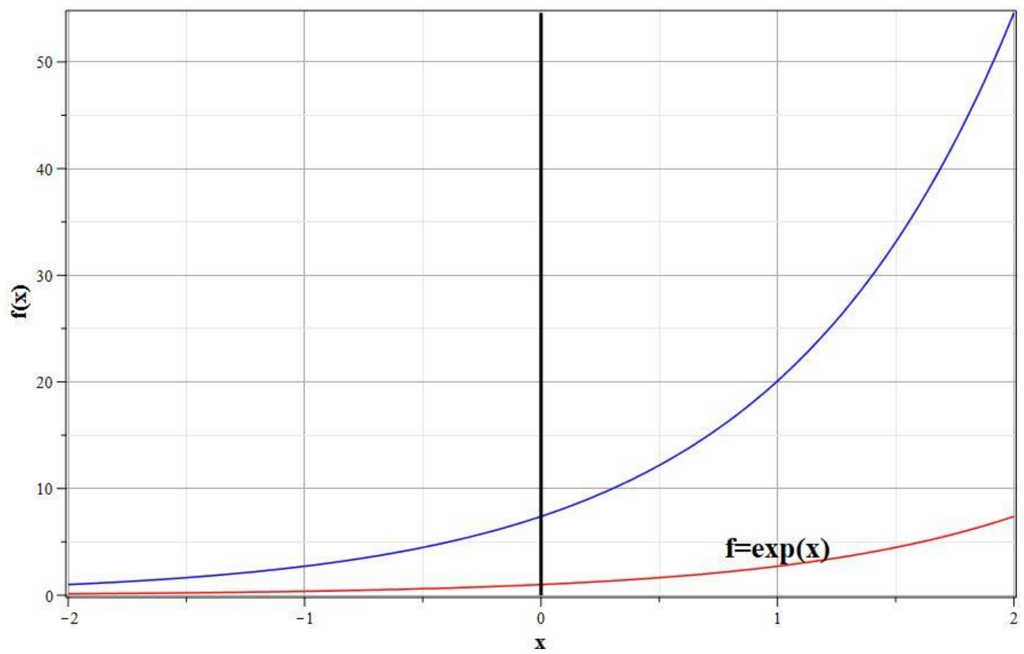
```
> pf3:=plot([f(x),f(x+2)], x=-4..4, frm,labels=["x","f(x)"], color=[red,blue]):
> t3:=textplot([2,0.5,"f=(x^2+2x+2)/(x^2+1)"],font=[TIMES,BOLD,20]):
> Lv0:=(hb,ht)->line([0,hb],[0,ht],color=black,thickness=3);
```

$$Lv0 := (hb, ht) \rightarrow plottools\text{:-}line([0, hb], [0, ht], color = black, thickness = 3) \quad (5)$$

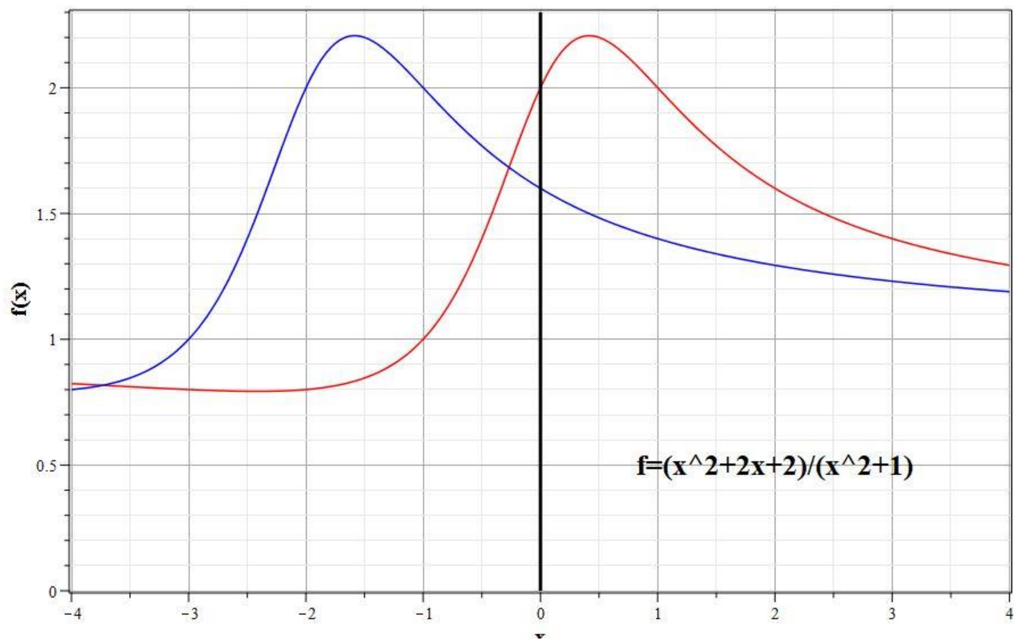
```
> display(pf1,Lv0(-1.1,1.1),t1);
```



```
> display(pf2,Lv0(0,exp(4)),t2);
```



```
> display(pf3,Lv0(0,2.3),t3);
```



## Оператор масштабирования

$$\widehat{M}_c\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{c}}\psi(cx),\ c > 0$$

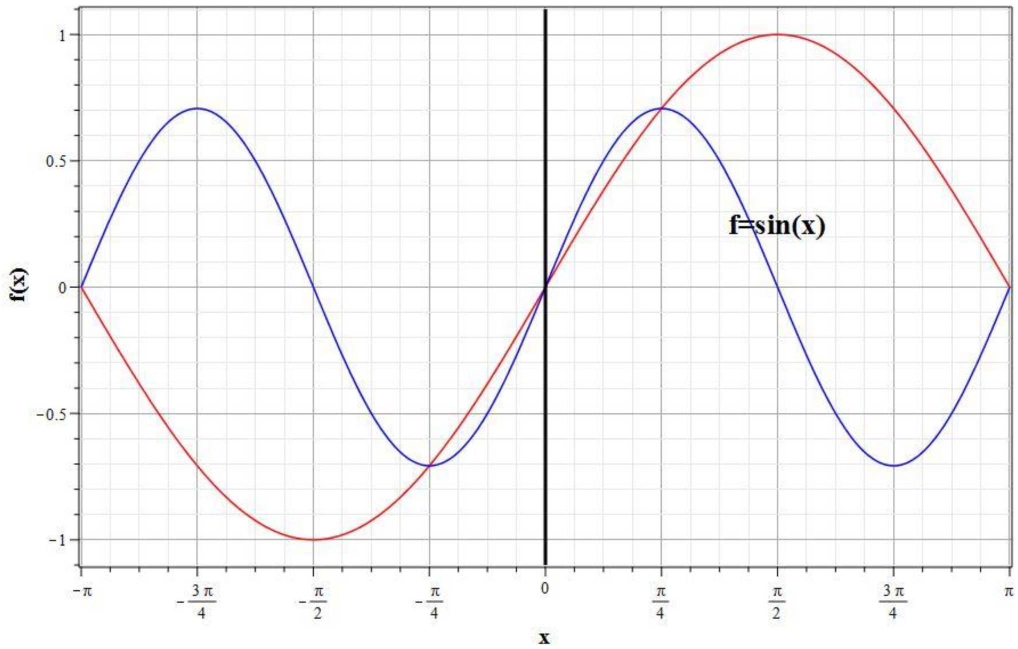
```
> pf1:=plot([sin(x),sin(2*x)/sqrt(2)], x=-Pi..Pi, frm,labels=["x","f(x)"], color=[red,
  blue]):
> t1:=textplot([Pi/2,0.25,"f=sin(x)"],font=[TIMES,BOLD,20]):
> pf2:=plot([exp(x),exp(2*x)/sqrt(2)], x=-2..2, frm,labels=["x","f(x)"], color=[red,blue]
  ):
> t2:=textplot([1,4.5,"f=exp(x)"],font=[TIMES,BOLD,20]):
> f:=(x)->(x^2+x+2)/(x^2+1);
```

$$f := x \rightarrow \frac{x^2 + x + 2}{x^2 + 1} \qquad (6)$$

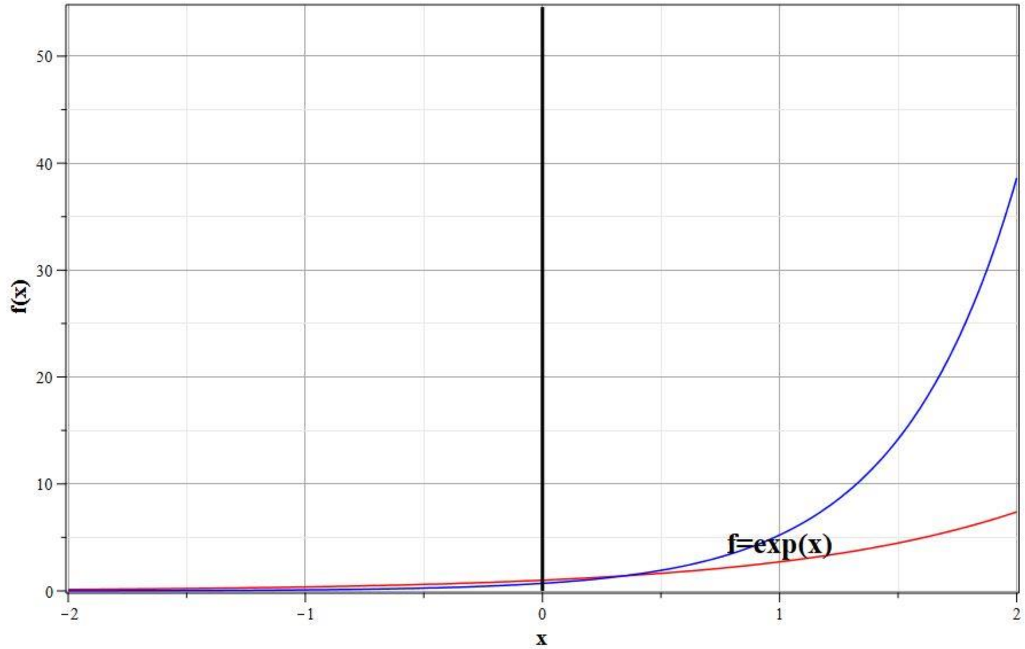
```
> pf3:=plot([f(x),f(2*x)/sqrt(2)], x=-4..4, frm,labels=["x","f(x)"], color=[red,blue]):
> t3:=textplot([2,0.5,"f=(x^2+2x+2)/(x^2+1)"],font=[TIMES,BOLD,20]):
> Lv0:=(hb,ht)->line([0,hb],[0,ht],color=black,thickness=3);
```

$$Lv0 := (hb, ht) \rightarrow plottools{:}\text{-}line([0, hb], [0, ht], color = black, thickness = 3) \qquad (7)$$

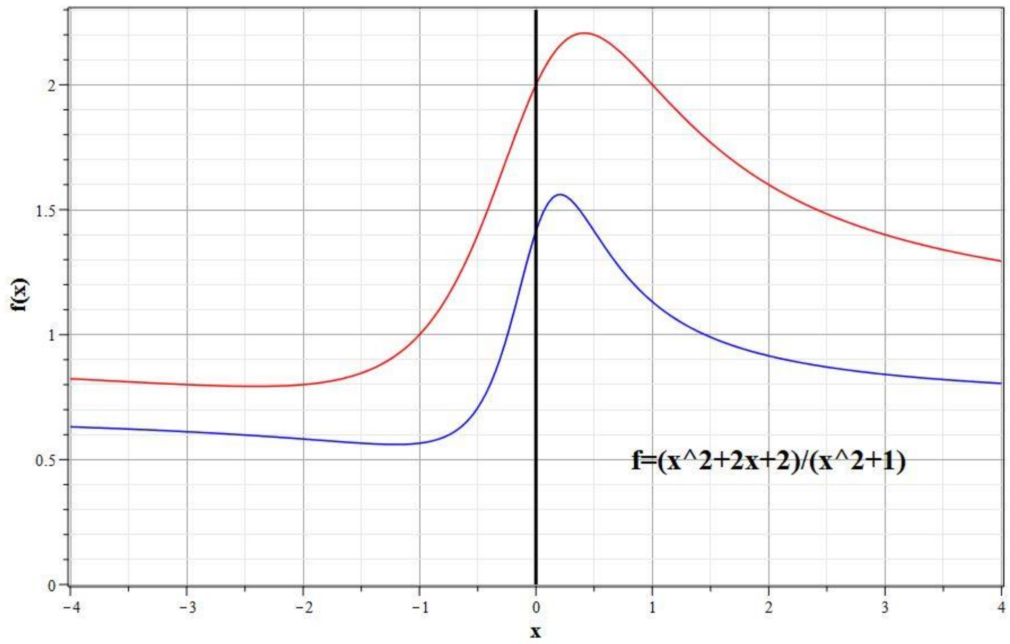
```
> display(pf1,Lv0(-1.1,1.1),t1);
```



```
> display(pf2,Lv0(0,exp(4)),t2);
```



```
> display(pf3,Lv0(0,2.3),t3);
```



## Оператор дифференцирования

$$\widehat{\mathrm{D}}_x \psi(x) = \frac{d}{dx}\psi(x),$$

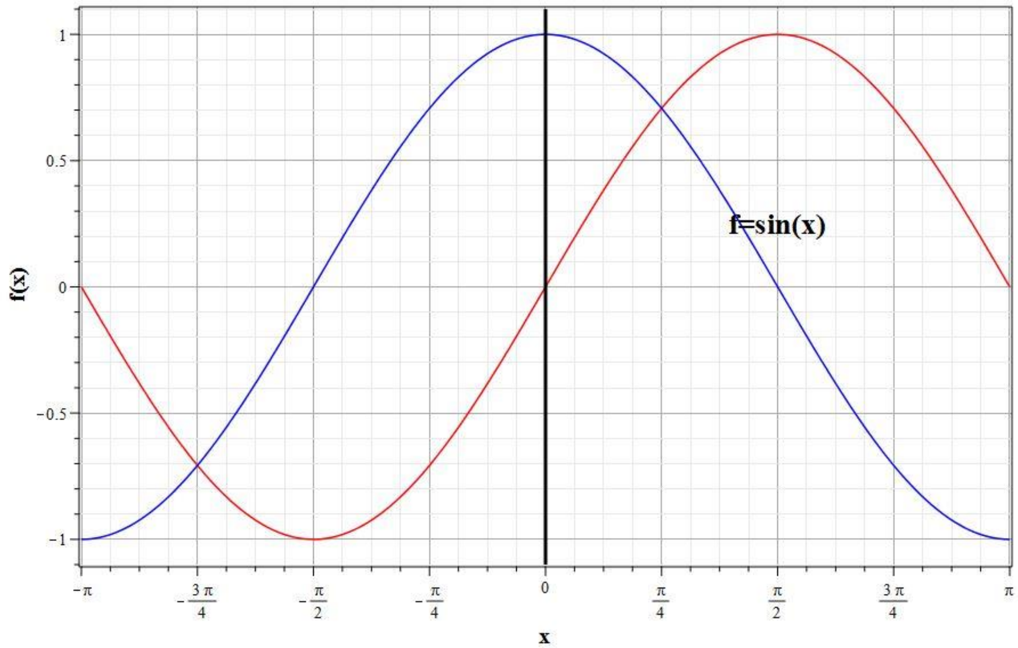
```
> pf1:=plot([sin(x),cos(x)], x=-Pi..Pi, frm,labels=["x","f(x)"], color=[red,blue]):
> t1:=textplot([Pi/2,0.25,"f=sin(x)"],font=[TIMES,BOLD,20]):
> pf2:=plot([exp(2*x),2*exp(2*x)], x=-2..2, frm,labels=["x","f(x)"], color=[red,blue]):
> t2:=textplot([1,4.5,"f=exp(x)"],font=[TIMES,BOLD,20]):
> f:=(x)->(x^2+x+2)/(x^2+1);
```

$$f := x \rightarrow \frac{x^2 + x + 2}{x^2 + 1} \qquad (8)$$

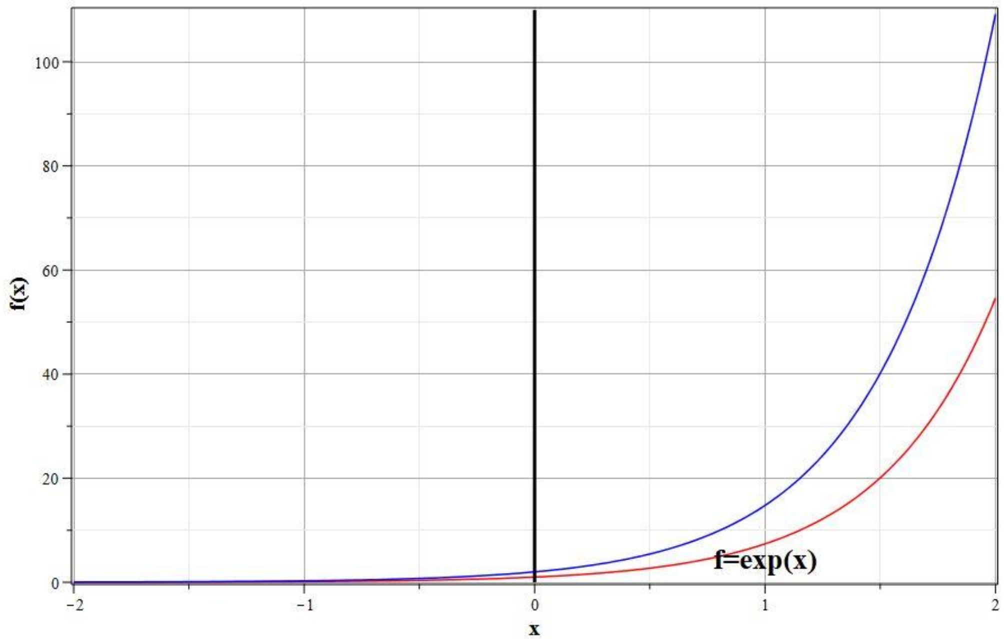
```
> pf3:=plot([f(x),diff(f(x),x)], x=-4..4, frm,labels=["x","f(x)"], color=[red,blue]):
> t3:=textplot([2,0.5,"f=(x^2+2x+2)/(x^2+1)"],font=[TIMES,BOLD,20]):
> Lv0:=(hb,ht)->line([0,hb],[0,ht],color=black,thickness=3);
```

$$Lv0 := (hb, ht) \rightarrow plottools{:-}line([0, hb], [0, ht], color = black, thickness = 3) \qquad (9)$$

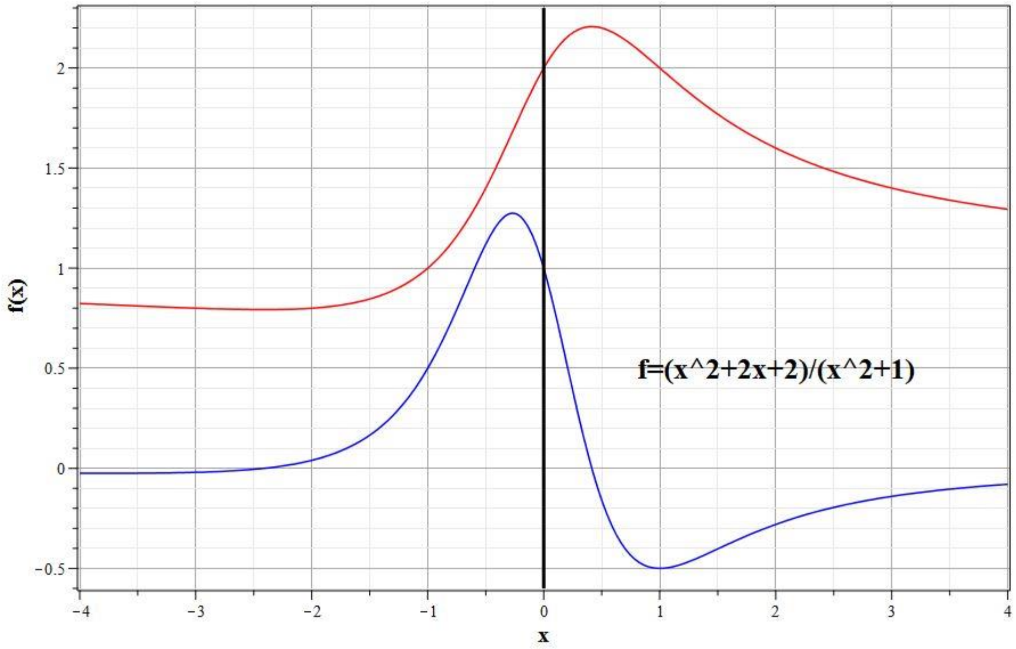
```
> display(pf1,Lv0(-1.1,1.1),t1);
```



```
> display(pf2,Lv0(0,exp(4.7)),t2);
```



```
> display(pf3,Lv0(-0.6,2.3),t3);
```



## Функции от операторов

Под функцией от оператора понимается степенной ряд оператора с коэффициентами, равными коэффициентам ряда Тейлора данной функции:

$$F(\hat{A}) = F(0)\,\hat{1} + \frac{1}{1!}F^{[1]}(0)\,\hat{A} + \frac{1}{2!}F^{[2]}(0)\,\hat{A}^2 + \frac{1}{3!}F^{[3]}(0)\,\hat{A}^3 + \cdots = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}F^{[k]}(0)\,\hat{A}^k$$

```
> #                                Примеры
```

### Ряды Тейлора

```
> Order:=7;
```

$$Order := 7 \tag{10}$$

```
> series(exp(x),x);
```

$$1 + x + \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{6}x^3 + \frac{1}{24}x^4 + \frac{1}{120}x^5 + \frac{1}{720}x^6 + O(x^7) \tag{11}$$

```
> series(cos(x),x);
```

$$1 - \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{24}x^4 - \frac{1}{720}x^6 + O(x^8) \tag{12}$$

```
> series(cosh(x),x);
```

$$1 + \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{24}x^4 + \frac{1}{720}x^6 + O(x^8) \tag{13}$$

```
> series(sin(x),x);
```

$$x-\frac{1}{6}x^3+\frac{1}{120}x^5+O\left(x^7\right) \quad (14)$$

```
> series(sinh(x),x);
```

$$x+\frac{1}{6}x^3+\frac{1}{120}x^5+O\left(x^7\right) \quad (15)$$

```
> series((1+x)^(-1),x);
```

$$1-x+x^2-x^3+x^4-x^5+x^6+O\left(x^7\right) \quad (16)$$

## Оператор инверсии

$$F(\hat{I})=F(0)\,\hat{1}+\frac{1}{1!}F^{[1]}(0)\,\hat{I}+\frac{1}{2!}F^{[2]}(0)\,\hat{I}^2+\frac{1}{3!}F^{[3]}(0)\,\hat{I}^3+\cdots=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}F^{[k]}(0)\,\hat{I}^k=$$

$$=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{(2k)!}F^{[2k]}(0)\,\hat{1}+\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{(2k-1)!}F^{[2k-1]}(0)\,\hat{I}$$

$$F^{(2k)}(0)\,\hat{1}\cosh(1)+F^{(2k-1)}(0)\,\hat{I}\sinh(1) \quad (17)$$

```
>
```

>

## Примеры функций

**exp(x):** exp( $\hat{1}$ )=cosh(1) $\hat{1}$ + isinh(1) $\hat{1}$

**exp(iπx)**: exp(iπ $\hat{1}$ )=cos(π) $\hat{1}$ + i sin(π) $\hat{1}$ =- $\hat{1}$

**sin(x)**: sin( $\hat{1}$ )=sin(1) $\hat{1}$

**cos(*x*) :** cos( $\hat{1}$ )=cos(1) $\hat{1}$

$$\hat{I}$$

$$\cosh(1)\,\hat{1} + isinh(1)\,\hat{I}$$

$$i\pi\,\hat{I}$$

$$\hat{1} = -\hat{1}$$

$$\hat{I}$$

$$\hat{I}$$

$$\cos(1)\,\hat{1} \tag{18}$$

$(\mathbf{x} + \mathbf{1})^{-1}$ **: Не существует**

## Оператор сдвига

$$F(\hat{T}_a) = F(0)\,\hat{1} + \frac{1}{1!}F^{[1]}(0)\,\hat{T}_a + \frac{1}{2!}F^{[2]}(0)\,\hat{T}_a^{\,2} + \frac{1}{3!}F^{[3]}(0)\,\hat{T}_a^{\,3} + \cdots = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}F^{[k]}(0)\,\hat{T}_a^{\,k} =$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{(k)!}F^{[k]}(0)\,\hat{T}_{ka}$$

**Примеры**

$$\hat{T}_a\psi(x)=\psi(x+a)=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}a^k\frac{d^k}{dx^k}\psi(x) = \exp\left(a\frac{d}{dx}\right)\psi(x)$$

$$\cosh\left(a\frac{d}{dx}\right)\psi(x) = \frac{1}{2}\exp\left(a\frac{d}{dx}\right)\psi(x) + \frac{1}{2}\exp\left(-a\frac{d}{dx}\right)\psi(x) = \frac{1}{2}\big(\psi(x+a) + \psi(x-a)\big) =$$

$$= \frac{1}{2}\left(\hat{T}_a + \hat{T}_{-a}\right)\psi(x)$$

## Определение действия операторов

```
> oIphi:=(x)->phi(-x);
```

$$oIphi := x \rightarrow \phi(-x) \tag{19}$$

```
> oTphi:=(x,a)->phi(x+a);
```

$$oTphi := (x, a) \rightarrow \phi(x + a) \tag{20}$$

```
> oMphi:=(x,c)->phi(c*x)/sqrt(c);
```

$$oMphi := (x, c) \rightarrow \frac{\phi(c\,x)}{\sqrt{c}} \tag{21}$$

```
> oDxphi:=(x)->subs(z=x,diff(phi(x),x));
```

$$oDxphi := x \rightarrow subs\left(z = x, \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\,\phi(x)\right) \tag{22}$$

```
> oPxphi:=(x,hbar)->-I*hbar*oDxphi(x);
```

$$oPxphi := (x, \hbar) \rightarrow -\mathrm{I}\,\hbar\; oDxphi(x) \tag{23}$$

```
> oEkphi:=(x,hbar,m)->-hbar^2*subs(z=x,diff(phi(x),x,x))/(2*m);
```

$$oEkphi := (x, \hbar, m) \rightarrow -\frac{1}{2}\,\frac{\hbar^2\, subs\left(z = x, \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\,\phi(x)\right)}{m} \tag{24}$$

```
> oIeta:=(x)->eta(-x);
```

$$oIeta := x \rightarrow \eta(-x) \tag{25}$$

```
> oTeta:=(x,a)->eta(x+a);
```

$$oTeta := (x, a) \rightarrow \eta(x + a) \tag{26}$$

```
> oMeta:=(x,c)->eta(c*x)/sqrt(c);
```

$$oMeta := (x, c) \rightarrow \frac{\eta(c\,x)}{\sqrt{c}} \tag{27}$$

```
> oDxeta:=(x)->subs(z=x,diff(eta(x),x));
```

$$oDxeta := x \rightarrow subs\left(z = x, \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\,\eta(x)\right) \tag{28}$$

```
> oPxeta:=(x,hbar)->-I*hbar*oDxeta(x);
```

$$oPxeta := (x, \hbar) \rightarrow -\mathrm{I}\,\hbar\,oDxeta(x) \tag{29}$$

```
> oEketa:=(x,hbar,m)->-hbar^2*subs(z=x,diff(eta(x),x,x))/(2*m);
```

$$oEketa := (x, \hbar, m) \rightarrow -\frac{1}{2}\,\frac{\hbar^2\,subs\left(z = x, \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\,\eta(x)\right)}{m} \tag{30}$$

```
>
```

================================================================================

## Задаем вид волновой функции

================================================================================

```
> phi:=(x)->exp(-x^2/2);
  eta:=(x)->exp(I*x);
```

$$\phi := x \rightarrow e^{-\frac{1}{2} x^2}$$

$$\eta := x \rightarrow e^{I x} \tag{31}$$

```
> oTphi(x,1);
```

$$e^{-\frac{1}{2} (x+1)^2} \tag{32}$$

```
> oPxphi(x,h);
```

$$I\, h\, x\, e^{-\frac{1}{2} x^2} \tag{33}$$

```
> oEkphi(x,h,1);
```

$$-\frac{1}{2} h^2 \left( -e^{-\frac{1}{2} x^2} + x^2 e^{-\frac{1}{2} x^2} \right) \tag{34}$$

## Проверка (само)сопряженности

$$\int_{-\infty}^{\infty} (\mathrm{eta}(x))^* \ \hat{\mathrm{I}}\,\mathrm{phi}(x)\,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{\mathrm{I}}\,\mathrm{eta}(x))^* \ \mathrm{phi}(x)\,\mathrm{d}x$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} (\mathrm{eta}(x))^* \ \hat{T}_a\mathrm{phi}(x)\,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\hat{T}_{-a}\mathrm{eta}(x)\right)^* \ \mathrm{phi}(x)\,\mathrm{d}x$$

```
> int(conjugate(eta(x))*oIphi(x),x=-infinity..infinity)-int(conjugate(oIeta(x))*phi(x),x=
  -infinity..infinity); # Оператор инверсии
```

$$0 \tag{35}$$

```
> int(conjugate(eta(x))*oTphi(x,2),x=-infinity..infinity)-int(conjugate(oTeta(x,-2))*phi
  (x),x=-infinity..infinity);
```

$$0 \tag{36}$$