Лекция 6

Действие линейного оператора $\hat{A}$ можно представить в виде

$$\psi'(q) = \hat{A}\psi(q) = \int K_A(q, q')\psi(q')dq'$$

где $K_A(q, q')$ – ядро оператора $\hat{A}$ (в координатном представлении), аналог матрицы линейного преобразования ~~во~~ конечномерного векторного пр-ва

$$Y_n = \sum_m A_{nm} X_m.$$

Операции с матрицами: сопряжение: $A_{nm} \to A^*_{nm}$

Транспонирование: $A_{nm} \to A_{mn}$

$\hookrightarrow$ эрмитово сопряжение $A_{nm} \to A^*_{mn}$

~~Итак~~ По матрице A можно построить: A^*, A^T, A^+

матрицы: A^* – сопряж., A^T – трансп., A^+ – эрмитово сопр. матр.

Аналогичным образом в непрерывном пределе Гильберт. простр. КМ по $\hat{A}$ – можно построить

операторы $\hat{A}^*$ сопряжен.

$\hat{A}^T$ транспон.

$\hat{A}^+$ эрмитовосопряж.

Пример: оператор $\hat{x}$

$$\hat{x}\,\psi(x) = x\,\psi(x) \quad \Rightarrow \quad K_x(x,x') = x\,\delta(x-x') = x'\,\delta(x-x')$$

$$\hat{x}\,\phi(p) = i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\phi(p) \quad \Rightarrow \quad K_x(p,p') = i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\delta(p-p') =$$

$$= -i\hbar\frac{\partial}{\partial p'}\delta(p-p')$$

$\Rightarrow$ оператор $\hat{x} = \hat{x}^+$ – эрмитов оператор (самосопряженный оператор)

аналогично для оператора импульса

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

Определения A^T, A^+ через интеграл:

$\hat{B} = \hat{A}^T$ если для $\forall\ \psi_1, \psi_2$

$$\int dq\, \psi_1 \hat{A} \psi_2 = \int dq\, \psi_2 \hat{B} \psi_1 = \int dq\, (A^T \psi_1)\,\psi_2$$

и $\hat{B} = \hat{A}^+$ если для $\forall\ \psi_1, \psi_2$

$$\int dq\, \psi_1^* \hat{A} \psi_2 = \int dq\, (\hat{B}\psi_1)^* \psi_2 = \int dq\, (\hat{A}^+ \psi_1)^* \psi_2$$

Спектр $\hat{A}$, задача на собств. ф-ии, собств. значения для $\hat{A}$

собств. функц.

$$\hat{A}\,\psi_a = a\,\psi_a$$

собств. значение

Спектр – множество возможн. значен. a

спектр → дискретный
→ непрерывный
→ вырожденный / невырожденный

← пояснить на примерах, встречавшихся нам ранее

Для эрмитового оператора: $\hat{A} = \hat{A}^+$

1) спектр вещественен $a = a^*$

$$\int dq\, \psi_a^* \underbrace{\hat{A}\, \psi_a}_{a\psi_a} = \int dq\, (\hat{A}^+ \psi_a)^* \psi_a = \int dq\, (\underbrace{A\psi_a}_{a\psi_a})^* \psi_a$$

$$\Downarrow$$

$$a \int dq\, |\psi_a|^2 = a^* \int dq\, |\psi_a|^2 \Rightarrow a = a^*$$

2) если $\hat{A}\psi_1 = a_1 \psi_1$ и $\hat{A}\psi_2 = a_2 \psi_2$

$(\hat{A}\psi_2)^* = a_2 \psi_2^*$ ← поскольку $a_2 = a_2^*$

$$\int dq\, \psi_2^* \hat{A} \psi_1 = a_1 \int dq\, \psi_2^* \psi_1$$

$$\parallel$$

$$\int dq\, (\hat{A}^+ \psi_2)^* \psi_1 = \int dq\, (A\psi_2)^* \psi_1 = a_2 \int dq\, \psi_2^* \psi_1$$

$$\Rightarrow \int dq\, \psi_2^* \psi_1 = 0 \quad \text{если} \quad a_1 \neq a_2$$

собственные функции $\hat{A}$, отвечающие различным собственным значениям, ортогональны.

В случае дискретного спектра $\hat{A}$ — $\int dq\, |\psi_n|^2 = 1$

$\int dq\, \psi_m^* \psi_n = \delta_{mn}$ ← ортонормированный базис

ψ_n образуют ↗

При наличии вырождения, например $2^х$ кратного вырождения,

$$\hat{A}\,\psi_1 = a\,\psi_1$$
$$A\,\psi_2 = a\,\psi_2$$

вырожденные собств. функции образуют линейное подпрост.

$$\psi = \alpha_1 \psi_1 + \alpha_2 \psi_2$$

$$\hat{A}\psi = a\psi \quad \text{для } \forall\ \alpha_1 \text{ и } \alpha_2$$

можно выбрать в этом подпрост. ортогональные базисн. векоря $\tilde{\psi}_1$ и $\tilde{\psi}_2$

$$\int dq\, \tilde{\psi}_1^* \tilde{\psi}_2 = 0$$

$$\int dq\, |\tilde{\psi}_1|^2 = \int dq\, |\tilde{\psi}_2|^2 = 1$$

Непрерывный спектр

на примере оператора импульса

$$-i\hbar \frac{d}{dx}\psi_{p_0}(x) = p_0\,\psi_{p_0}(x)$$ — $-\infty \le p_0 \le +\infty$ спектр непрерывн., невырожд.

$$\psi_{p_0}(x) = \frac{e^{\frac{ip_0 x}{\hbar}}}{(2\pi\hbar)^{1/2}}$$

$$\int dx\, \psi_{p'}^*(x)\,\psi_p(x) = \delta(p-p')$$

δ- функция, обобщ. символа Кронекера δ_{nm} на непрерывный случай.

Так выглядит условие ортонорм. в ~~непрер.~~ случае непрерывн. спектра.

3) Собственные функции эрмитового оператора образуют базис, так что $\forall$ волновая функция может быть разложена по этому базису

$$\psi(q) = \sum_n c_n \psi_n(q)$$

условие ортонорм $\Longrightarrow$

$\int \psi_n^* \psi_m \, dq = \delta_{mn}$

$$c_n = \int \psi_n^* \psi \, dq$$

$$\int |\psi|^2 dq = 1 \Rightarrow \sum_n |c_n|^2 = 1$$

Подставляя c_n в

$$\psi(q) = \sum_n \int \psi_n^*(q') \psi(q') dq' \, \psi_n(q) =$$

$$= \int dq' \left(\sum_n \psi_n^*(q') \psi_n(q) \right) \psi(q')$$ ← должно выполняться для $\forall \, \psi(q)$

$$\Rightarrow \quad \sum_n \psi_n^*(q') \psi_n(q) = \delta(q - q')$$ ← условие полноты базиса

При наличии и непрерывного и дискретн. спектра

$$\sum_n \psi_n^*(q') \psi_n(q) + \int da \, \psi_a^*(q') \psi_a(q) = \delta(q - q')$$

4) средние значения эрмитового оператора — веществ.

$$\langle \hat{A} \rangle = \int dq \, \psi^*(q) \hat{A} \psi(q) = \quad ; \quad \psi(q) = \sum_n c_n \psi_n(q)$$

$$\hat{A} \psi_n = a_n \psi_n$$

$$= \sum_n |c_n|^2 \cdot a_n$$

$|c_n|^2$ — вероятность величине A иметь одно из своих возм. значений a_n

Дираковские обозначения

П. Дирак

bracket - скобка в англ. языке

bra-c-ket

bra и ket - векторы.

На примере 2-мерного простр. (спин)

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$ - кет вектор

$$\langle\psi| = (a^*, b^*)$$ - бра вектор.

Норма

$$\langle\psi|\psi\rangle = |a|^2 + |b|^2 \geqslant 0.$$

скалярное произвед.

$$\langle\chi|\psi\rangle = a_1^* a + b_1^* b$$

$$\langle\chi| = (a_1^*, b_1^*)$$

$$|\chi\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix}$$

очевидно, что

$$\langle\chi|\psi\rangle^* = \langle\psi|\chi\rangle$$

Действие оператора

$$|\phi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$$

$$\langle\phi| = \langle\psi|\hat{A}^+$$

$$\hat{A}|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle$$

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |a_n\rangle$$

иногда ещё упрощают обозначения

$$|n\rangle \equiv |a_n\rangle$$

$\langle m|n\rangle = \delta_{m,n}$ - условие ортонормированности

$$c_n = \langle n|\psi\rangle$$

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

и условие полноты

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = \hat{1}$$

$\hat{P}_n = |n\rangle\langle n|$ – проектор на состоян. $|n\rangle$

$\hat{P}_n |\psi\rangle = |n\rangle \langle n|\psi\rangle$ $\qquad \hat{P}_n^2 = |n\rangle\underbrace{\langle n|n\rangle}_{=1}\langle n| = |n\rangle\langle n| = \hat{P}_n$

$$\hat{A}|\psi\rangle = \sum_n \hat{A}|a_n\rangle\langle a_n|\psi\rangle = \sum_n a_n |a_n\rangle\langle a_n|\psi\rangle$$

$\hat{A} = \sum_n a_n \hat{P}_n$; матричные элементы $\hat{A}_{mn} = \langle a_m|\hat{A}|a_n\rangle = a_n\delta_{mn}$

Другая физическ. величина, другой оператор $\hat{B}$

$$\hat{B} = \hat{1}\hat{B}\hat{1} = \sum_m \sum_n |a_m\rangle\underbrace{\langle a_m|\hat{B}|a_n\rangle}_{B_{mn}}\langle a_n|$$

B_{mn} – матричные элементы оператора $\hat{B}$, в A-представлении

как связаны матричн. элементы оператора в различн. представлениях? $\quad \hat{C}$; $\hat{C}|c_n\rangle = c_n|c_n\rangle$

$B^A_{mn} \equiv \langle a_m|\hat{B}|a_n\rangle =$ ~~$\hat{B} = \hat{1}|a_m\rangle\langle a_m$~~

$= \langle a_m|\hat{1}\hat{B}\hat{1}|a_n\rangle = \sum_{m_1}\sum_{n_1} \langle a_m|c_{m_1}\rangle\langle c_{m_1}|\hat{B}|c_{n_1}\rangle \cdot$

$\cdot \langle c_{n_1}|a_n\rangle =$

$$= \sum_{m_1}\sum_{n_1} \langle a_m|c_{m_1}\rangle B^C_{m_1 n_1} \langle c_{n_1}|a_n\rangle$$

$S^{A\leftarrow C}_{mm_1} \equiv \langle a_m|c_{m_1}\rangle$ $\qquad \left(S^{A\leftarrow C}\right)^+_{mm_1} = \langle c_m|a_{m_1}\rangle$

$$B^A_{mn} = S^{A\leftarrow C}_{mm_1} B^C_{m_1 n_1} \left(S^{A\leftarrow C}\right)^+_{n_1 n}$$