

Квантовая теория

Семестр *I*
Журавлев В.М.



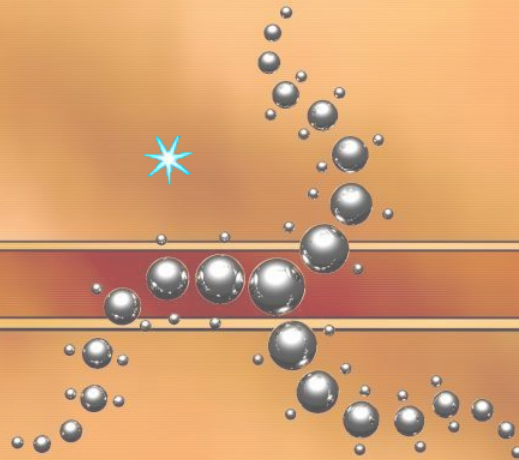
Лекция IV

Свойства операторов и
принцип неопределенности
Гейзенберга

Собственной функцией Ψ_q ,
соответствующей
собственному значению q
оператора Q , называется
функция, являющаяся
решением уравнения

$$\hat{Q}\Psi_q = q\Psi_q$$

Свойства операторов, изображающих динамические переменные



Какие операторы допустимы для
изображения переменных?

I. Свойства операторов

I.1 Линейность операторов.

Любая динамическая переменная изображается линейным оператором Фредгольма

$$Q(x', x'') = \sum_{q \in Q} q \psi_q(x', t) \psi_q^*(x'', t)$$

1

$$\hat{Q}(a\psi_1 + b\psi_2) = a\hat{Q}\psi_1 + b\hat{Q}\psi_2.$$

$$\forall \psi_1, \psi_2 \in H \text{ и } \forall a, b \in \mathbb{C}$$

2

I. Свойства операторов

I.2 Самосопряженность операторов

Вещественная динамическая переменная классической механики в квантовой механике изображается самосопряженным или эрмитовым оператором!

$$(\hat{Q}\Psi, \Phi) = (\Psi, \hat{Q}\Phi) \quad \text{или} \quad \hat{Q} = \hat{Q}^+$$

I.2 Самосопряженность операторов

$$Q(x', x'') = \sum_{q \in Q} q \psi_q(x', t) \psi_q^*(x'', t)$$

3

Поскольку все значения q – вещественные $q=q^*$, то ядро

оператора эрмитово:

$$\begin{aligned} Q^*(x, x') &= \sum_{q \in Q} q \psi_q(x, t) \psi_q^*(x', t) = \\ &= \sum_{q \in Q} q \psi_q(x, t) \psi_q^*(x', t) = Q(x', x) \end{aligned}$$

4

II. Свойства собственных функций самосопряженных операторов

II.1 Вещественность собственных значений

Собственные значения
эрмитовых операторов

вещественны.

$$q = q^*$$

5

II.1 Вещественность собственных значений

$$\hat{Q}\Psi_q = q\Psi_q$$

$$\left(\hat{Q}\Psi_q, \Psi_q\right) = \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{Q}\Psi_q)^* \Psi_q dx = q^* \left(\Psi_q, \Psi_q\right) = q^*,$$

$$\left(\Psi_q, \hat{Q}\Psi_q\right) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_q^* \hat{Q}\Psi_q dx = q \left(\Psi_q, \Psi_q\right) = q,$$

$$\left(\hat{Q}\Psi_q, \Psi_q\right) = \left(\Psi_q, \hat{Q}\Psi_q\right) \quad q = q^*$$

6

II. Свойства собственных функций самосопряженных операторов

II.2 Ортогональность

Собственные функции эрмитовых операторов

ортогональны:

$$\hat{Q}\Psi_q = q\Psi_q$$

$$(\Psi_q, \Psi_{q'}) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_q^* \Psi_{q'} dx = \delta_{qq'},$$

$$(\Psi_q, \Psi_{q'}) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_q^* \Psi_{q'} dx = \delta(q - q').$$

II. Свойства собственных функций самосопряженных операторов

II.2 Ортогональность

$$\hat{Q}\Psi_q = q\Psi_q, \quad \hat{Q}\Psi_{q'} = q'\Psi_{q'}$$

$$\left(\Psi_q, \hat{Q}\Psi_{q'}\right) = q' \left(\Psi_q, \Psi_{q'}\right)$$

$$\left(\hat{Q}\Psi_q, \Psi_{q'}\right) = q \left(\Psi_q, \Psi_{q'}\right) \stackrel{q \neq q'}{=} 0, \quad q \neq q'$$

$$\left(\Psi_q, \hat{Q}\Psi_{q'}\right) = \left(\hat{Q}\Psi_q, \Psi_{q'}\right)$$

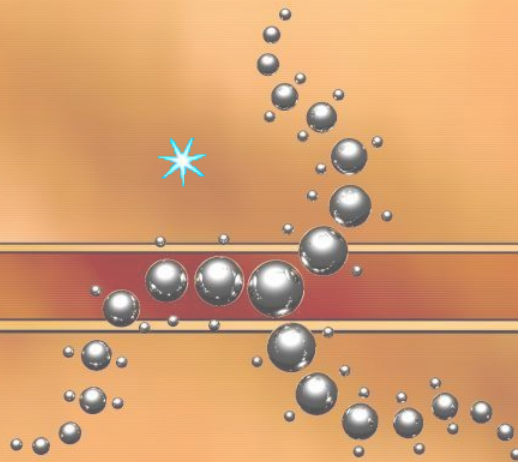
$$(q' - q) \left(\Psi_q, \Psi_{q'}\right) = \left(\Psi_q, \hat{Q}\Psi_{q'}\right) - \left(\hat{Q}\Psi_q, \Psi_{q'}\right) = 0$$

II. Свойства собственных функций самосопряженных операторов

II.3 Собственные функции самосопряженных операторов – представляют состояния с фиксированным значением соответствующей динамической переменной

$$\bar{Q} = (\Psi_q, \hat{Q}\Psi_q) = q$$

Принцип неопределенности



Когда измерения совместны?

III. Принцип неопределенности

Пусть эрмитовы операторы \hat{A} , \hat{B} , \hat{C} связаны соотношением:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$$

9

Тогда имеет место следующее соотношение:

$$\overline{(\hat{A} - \bar{A})^2 (\hat{B} - \bar{B})^2} \geq \frac{\bar{C}^2}{4}$$

10

III. Принцип неопределенности

$$\begin{aligned} I(\lambda) &= \int_V |\hat{A}\Psi + i\lambda\hat{B}\Psi|^2 dx dy dz = \\ &= \int_V (\hat{A}\Psi + i\lambda\hat{B}\Psi)^* (\hat{A}\Psi + i\lambda\hat{B}\Psi) dx dy dz = \\ &= \int_V (\hat{A}\Psi)^* \hat{A}\Psi dx dy dz + \lambda^2 \int_V (\hat{B}\Psi)^* \hat{B}\Psi dx dy dz + \\ &+ \lambda \int_V \left(-i(\hat{B}\Psi)^* \hat{A}\Psi + i(\hat{A}\Psi)^* \hat{B}\Psi \right) dx dy dz = \\ &= \alpha\lambda^2 + \beta\lambda + \gamma \geq 0 \end{aligned}$$

III. Принцип неопределенности

$$\gamma = \int_V \Psi^* \hat{A}^2 \Psi dx dy dz = \overline{A^2},$$

$$\alpha = \int_V \Psi^* \hat{B}^2 \Psi dx dy dz = \overline{B^2}$$

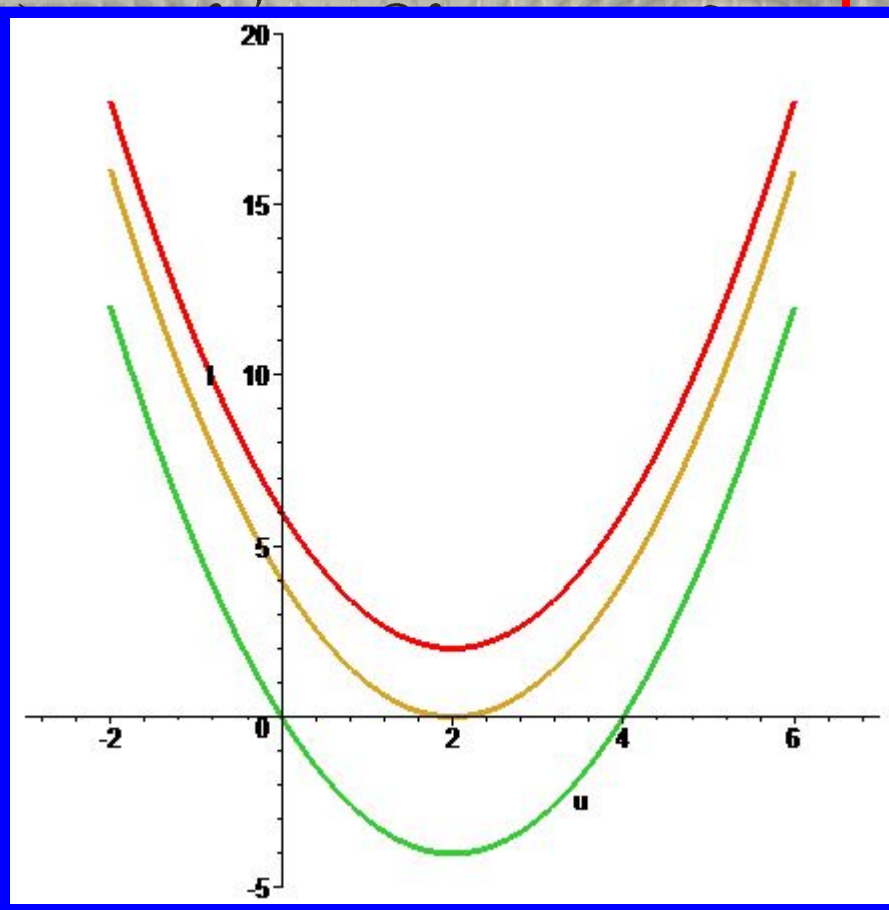
$$\begin{aligned} \beta &= -i \int_V \left(\Psi^* [\hat{B}, \hat{A}] \Psi \right) dx dy dz = \\ &= - \int_V \left(\Psi^* \hat{C} \Psi \right) dx dy dz = -\overline{C} \end{aligned}$$

12

III. Принцип неопределенности

$I(\lambda)$

β^2



13

Посколь

ку:

ТО:

$$(\hat{A} - A)^2 (B - B)^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

14

III. Принцип неопределенности

Пример

Операторы координаты и импульса

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\hat{x} = x \cdot$$

$$\begin{aligned} [\hat{p}, \hat{x}] \Psi &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (x\Psi) + i\hbar x \frac{\partial}{\partial x} (\Psi) = \\ &= -i\hbar \Psi \end{aligned}$$

III. Принцип неопределенности

Пример

Операторы координаты и импульса

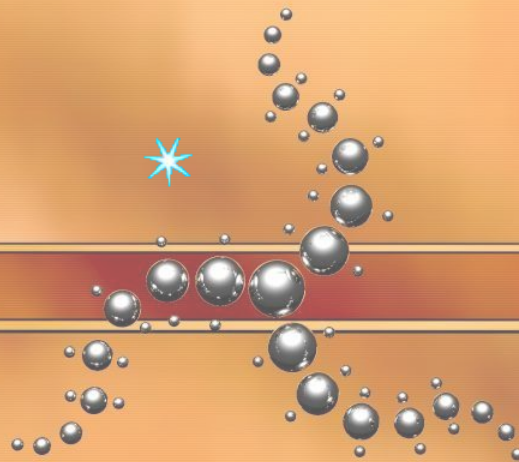
$$[\hat{p}, \hat{x}] = -i\hbar$$

16

$$\overline{(\hat{p} - \bar{p})^2 (\hat{x} - \bar{x})^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

17

Свойства коммутирующих операторов



Что означает коммутативность?

Теорема 1.

Два произвольных эрмитовых оператора A и B обладают полным набором общих собственных функций тогда и только тогда, когда их коммутатор

равен нулю:
 $[A, B] = 0$

18

Теорема I. Доказательство

Прямое утверждение. Пусть операторы

Обладают полным набором общих собственных функций:

$$\hat{A}\psi_k = a_k\psi_k, \quad \hat{B}\psi_k = b_k\psi_k, \quad k = 1, \infty$$

Тогда:

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\psi_k = (a_k b_k - b_k a_k)\psi_k = 0$$

Теорема I. Доказательство

Поскольку это соотношение выполняется для всех функций базиса $\psi_{\mathcal{R}}$ то отсюда следует, что коммутатор равен нулю

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) = [\hat{A}, \hat{B}] = 0$$

Теорема I. Доказательство

Обратное утверждение. Пусть операторы

коммутируют:

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) = [\hat{A}, \hat{B}] = 0$$

Тогда пусть ψ_k - собственные функции оператора \hat{A} :

$$\hat{A}\psi_k = a_k\psi_k, \quad k = 1, 2, \dots$$

Теорема I. Доказательство

Имеем:

$$\hat{B}\hat{A}\psi_k = a_k\hat{B}\psi_k$$

Тогда функция $\Phi_k = \hat{B}\psi_k$
удовлетворяет уравнению:

$$\hat{A}\Phi_k = a_k\Phi_k, \quad k = 1, 2, \dots$$

Теорема I. Доказательство

Следовательно :

$$\Phi_k = \lambda_k \Psi_k$$

Отсюда:

$$\hat{B}\Psi_k = \lambda_k \Psi_k, \quad k = 1, 2 \dots$$

Следовательно собственные функции оператора \mathcal{A} являются собственными функциями

Теорема 2.

Два произвольных эрмитовых оператора \mathcal{A} и \mathcal{B} обладают хотя бы одной общей собственной функцией тогда и только тогда, когда их коммутатор можно представить в следующем виде:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{D}\hat{B}$$

19

Теорема II. Доказательство

Прямое утверждение. Пусть операторы
обладают одной общей

собственной функцией ψ_0 :

$$\hat{A}\psi_0 = a_0\psi_0, \quad \hat{B}\psi_0 = 0$$

Тогда:

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\psi_0 = 0$$

Теорема II. Доказательство

Поскольку любой оператор вида

$$\hat{C} = \hat{D}\hat{B}$$

действует так, что

$$\hat{C}\psi_0 = \hat{D}\hat{B}\psi_0 = 0$$

То всегда найдется оператор \mathcal{D}

такой что

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) = [\hat{A}, \hat{B}] = \hat{D}\hat{B}$$

Теорема II. Доказательство

Обратное утверждение. Пусть операторы

удовлетворяют соотношению:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{D}\hat{B}$$

20

Тогда пусть Ψ_0 - собственная функция оператора \mathcal{B} :

$$\hat{B}\psi_0 = 0$$

21

Теорема II. Доказательство

Из (20) имеем:

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} + \hat{D}\hat{B}$$

а из (21) получаем:

$$\hat{A}\hat{B}\psi_0 = \hat{B}\hat{A}\psi_0 + \hat{D}\hat{B}\psi_0 = \hat{B}\hat{A}\psi_0 = 0$$

Следовательно функция $\Phi_0 = \mathcal{A}\Psi_0$
удовлетворяет уравнению:

$$\hat{B}\Phi_0 = 0$$

Теорема II. Доказательство

Следовательно :

$$\Phi_0 = \lambda_k \Psi_0$$

Отсюда:

$$\hat{A}\Psi_0 = a_0 \Psi_0$$

Следовательно собственная функция Ψ_0 оператора \mathcal{B} является собственной функцией оператора

Теорема II. Следствие

Из (20) имеем:

$$\hat{B}\hat{A} = \hat{A}\hat{B} - \hat{D}\hat{B}$$

Пусть

$$\hat{A}\psi_k = a_k\psi_k, \quad k = 1, 2, \dots$$

Тогда:

$$\hat{B}\hat{A}\psi_k = \hat{A}\hat{B}\psi_k - \hat{D}\hat{B}\psi_k = a_k\hat{B}\psi_k$$

Теорема II. Следствие

Тогда функции $\Phi_k = \hat{B}\Psi_k$ являются собственными функциями

оператора \hat{A}_1 :

$$\hat{A}_1 = \hat{A} - \hat{D}$$

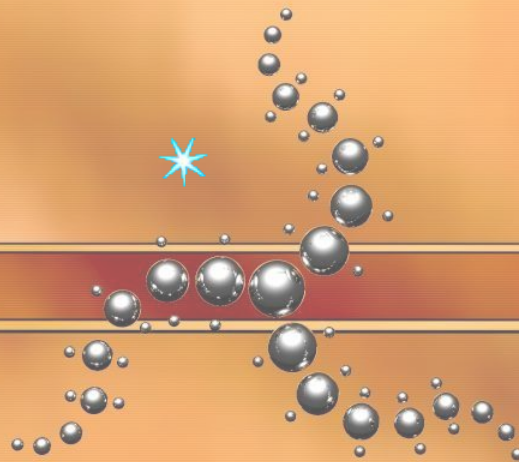
22

$$(\hat{A} - \hat{D})\Phi_k = -a_k \Phi_k, \quad k = 1, 2$$

$$\Phi_k = \hat{B}\Psi_k = 0$$

23

Пример



Метод Дарбу

Пример.

Рассмотрим следующие операторы:

$$\hat{A} = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}, \quad \hat{B} = \frac{\partial}{\partial x} + \xi(x)$$

24

Вычислим коммутатор:

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

Пример.

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{B}]\psi &= \hat{A}(\hat{B}\psi) - \hat{B}(\hat{A}\psi) = \\ &= -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} + \xi(x)\psi \right) + \hbar^2 \left(\frac{\partial}{\partial x} + \xi(x) \right) \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \\ &= -\hbar^2 \frac{\partial^3 \psi}{\partial x^3} - \hbar^2 \xi(x) \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - 2\hbar^2 \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \xi}{\partial x} - \hbar^2 \psi(x) \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} + \\ &+ \hbar^2 \frac{\partial^3 \psi}{\partial x^3} + \hbar^2 \xi(x) \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -2\hbar^2 \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \xi}{\partial x} - \hbar^2 \psi(x) \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} \end{aligned}$$

25

При каких условиях коммутатор

равен

$$[\hat{A}, \hat{B}] = D\hat{B}?$$

Пример.

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{B}] \psi &= \hat{A}(\hat{B}\psi) - \hat{B}(\hat{A}\psi) = \\ &= -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} + \xi(x)\psi \right) + \hbar^2 \left(\frac{\partial}{\partial x} + \xi(x) \right) \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \\ &= -\hbar^2 \frac{\partial^3 \psi}{\partial x^3} - \hbar^2 \xi(x) \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - 2\hbar^2 \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \xi}{\partial x} - \hbar^2 \psi(x) \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} + \\ &+ \hbar^2 \frac{\partial^3 \psi}{\partial x^3} + \hbar^2 \xi(x) \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -2\hbar^2 \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \xi}{\partial x} - \hbar^2 \psi(x) \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} \end{aligned}$$

$$[\hat{A}, \hat{B}] = -2\hbar^2 \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \xi}{\partial x} - \hbar^2 \psi(x) \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2}$$

Пример.

Ответ:

коммутатор равен

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{D}\hat{B}$$

если хотя бы одна
собственная функция
оператора \hat{A} является
собственной и для
оператора \hat{B}

Пример.

Найдем собственные функции оператора \hat{A}

$$\hat{A}\psi = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -p^2 \psi$$

26

$$\psi(k, x) = ae^{-kx} + be^{kx}, \quad p = \hbar k$$

27

Пример.

При каких условиях собственная функция ψ_0 оператора A есть собственная функция B ?

$$\hat{B}\psi_0 = \frac{\partial \psi_0}{\partial x} + \xi(x)\psi_0 = 0$$

28

Пример.

Отсюда находим:

$$\xi(x) = -\frac{1}{\psi_0} \frac{\partial \psi_0}{\partial x} = -\frac{\partial \ln \psi_0}{\partial x}$$

29

Или:

$$\xi(x) = -\frac{1}{\psi_0} \frac{\partial \psi_0}{\partial x} = k_0 \frac{ae^{-k_0 x} - be^{k_0 x}}{ae^{-k_0 x} + be^{k_0 x}}$$

30

Пример.

Результат: если

$$\xi(x) = -\frac{1}{\psi_0} \frac{\partial \psi_0}{\partial x} = k_0 \frac{ae^{-k_0 x} - be^{k_0 x}}{ae^{-k_0 x} + be^{k_0 x}}$$

30

Операторы \mathcal{A} и \mathcal{B} имеют одну общую собственную функцию и поэтому существует оператор \mathcal{D}

такой, что

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{D}\hat{B}$$

Пример.

Вычислим оператор \mathcal{D} .
Будем искать его в виде
оператора умножения на
функцию

$$\hat{D}\psi = v(x)\psi$$

31

Пример.

Тогда

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{B}] &= \hat{D}\hat{B} = -2\hbar^2 \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \xi}{\partial x} - \hbar^2 \psi(x) \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} = \\ &= v(x) \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} + \xi(x) \psi \right) = v(x) \frac{\partial \psi}{\partial x} + v(x) \xi(x) \psi \end{aligned}$$

Отсюда

$$v(x) = -2\hbar^2 \frac{\partial \xi}{\partial x}, \quad v(x) \xi(x) = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2}$$

Пример.

Отсюда следует:

I

$$v(x) = -2\alpha^2 \frac{\partial \xi}{\partial x},$$

33

II

$$\frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} - 2 \frac{\partial \xi}{\partial x} \xi(x) = 0$$

34

$$v(x) = -2\alpha^2 \frac{\partial \xi}{\partial x} = -2\alpha^2 k_0 \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{ae^{-k_0 x} - be^{k_0 x}}{ae^{-k_0 x} + be^{k_0 x}} \right),$$

35

Пример.

Окончательно:

$$\begin{aligned} v(x) &= -2\hbar^2 \frac{\partial \xi}{\partial x} = -2\hbar^2 k_0 \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{ae^{-k_0 x} - be^{k_0 x}}{ae^{-k_0 x} + be^{k_0 x}} \right) = \\ &= 2\hbar^2 k_0^2 \left(1 - \frac{(ae^{-k_0 x} - be^{k_0 x})^2}{(ae^{-k_0 x} + be^{k_0 x})^2} \right) = 2\hbar^2 k_0^2 \frac{4ab}{(ae^{-k_0 x} + be^{k_0 x})^2}, \end{aligned}$$

$$v(x) = 2\hbar^2 k_0^2 \frac{4ab}{(ae^{-k_0 x} + be^{k_0 x})^2},$$

36

Пример.

При каких условиях собственная функция ψ оператора \hat{A} есть собственная функция \hat{B} ?

$$\hat{A}_1 = \hat{A} - \hat{D}$$

$$\hat{A}_1 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} - v(x) = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} - 2\hbar^2 k_0^2 \frac{4ab}{(ae^{-k_0 x} + be^{k_0 x})^2},$$

37

Пример.

При каких условиях собственная функция ψ оператора \hat{A} есть собственная функция \hat{B} ?

$$\hat{A}_1 = \hat{A} - \hat{D}$$

Являются функции:

$$\phi(k, x) = \left(\frac{\partial}{\partial x} + \xi(x) \right) \psi(k, x) = \left(\frac{\partial}{\partial x} + \xi(x) \right) (ae^{-kx} + be^{kx}),$$

Пример.

Окончательно, функции

$$\phi(k, x) = \left(\frac{\partial}{\partial x} + \xi(x) \right) (ae^{-kx} + be^{kx}) =$$

39

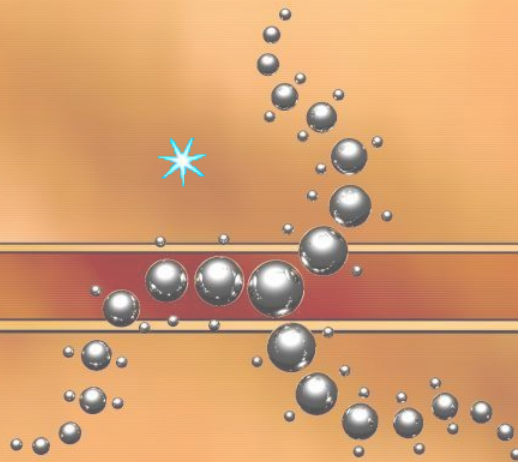
$$= be^{kx} \left(k + k_0 \frac{ae^{-k_0x} - be^{k_0x}}{ae^{-k_0x} + be^{k_0x}} \right) - ae^{-kx} \left(k - k_0 \frac{ae^{-k_0x} - be^{k_0x}}{ae^{-k_0x} + be^{k_0x}} \right),$$

Являются собственными функциями

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - 2\hbar^2 k_0^2 \frac{\mathcal{A}_1}{(ae^{-k_0x} + be^{k_0x})^2} \psi = -\hbar^2 k,$$

40

Следующая лекция



Стационарное уравнение
Шредингера

Следующая лекция:

1. Стационарное уравнение Шредингера
2. Граничные условия для стационарного уравнения Шредингера
3. Одномерное движение