Квантовая теория

Семестр I

Журавлев В.М.

Кафедра теоретической физики, УлГУ, 2009

Лекция IV

Свойства операторов и принцип неопределенности Гейзенберга

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

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

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

$$\hat{Q}(a\psi_1 + b\psi_2) = a\hat{Q}\psi_1 + b\hat{Q}\psi_2.$$ 2

$\forall \psi_1, \psi_2 \in$ H и $\forall$a, b $\in$ C

I. Свойства операторов

I.2 Самосопряженность операторов

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

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

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:

$$Q^*(x,x') = \sum_{q\in Q} q\psi_q^*(x,t)\psi_q(x',t) =$$ 4

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

II. Свойства собственных функций самосопряженных операторов

II.1 Вещественность собственных значений

Собственные значения эрмитовых операторов вещественны.

$$q = q^*$$

5

II.1 Вещественность собственных значений

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

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

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

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

6

II. Свойства собственных функций самосопряженных операторов

II.2 Ортогональность

Собственные функции эрмитовых операторов ортогональны:

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

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

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

7

II. Свойства собственных функций самосопряженных операторов

II.2 Ортогональность

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

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

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

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

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

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

II. Свойства собственных функций самосопряженных операторов

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

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

8

Принцип неопределенности

Когда измерения совместны?

III. Принцип неопределенности

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

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C} \qquad (9)$$

Тогда имеет место следующее соотношение:

$$\overline{(\hat{A} - \overline{A})^2}\,\overline{(\hat{B} - \overline{B})^2} \geq \frac{\overline{C}^2}{4} \qquad (10)$$

III. Принцип неопределенности

$$I(\lambda) = \int_V |\hat{A}\Psi + i\lambda\hat{B}\Psi|^2 dxdydz =$$

$$= \int_V (\hat{A}\Psi + i\lambda\hat{B}\Psi)^* (\hat{A}\Psi + i\lambda\hat{B}\Psi) dxdydz =$$

$$= \int_V (\hat{A}\Psi)^* \hat{A}\Psi dxdydz + \lambda^2 \int_V (\hat{B}\Psi)^* \hat{B}\Psi dxdydz +$$

$$+ \lambda \int_V \left(-i(\hat{B}\Psi)^* \hat{A}\Psi + i(\hat{A}\Psi)^* \hat{B}\Psi \right) dxdydz =$$

$$= \alpha\lambda^2 + \beta\lambda + \gamma \geq 0$$

11

III. Принцип неопределенности

$$\gamma = \int_V \Psi^* \hat{A}^2 \Psi dxdydz = \overline{A^2},$$

$$\alpha = \int_V \Psi^* \hat{B}^2 \Psi dxdydz = \overline{B^2}$$

$$\beta = -i \int_V \left(\Psi^* [\hat{B}, \hat{A}] \Psi \right) dxdydz =$$

$$= -\int_V \left(\Psi^* \hat{C} \Psi \right) dxdydz = -\overline{C}$$

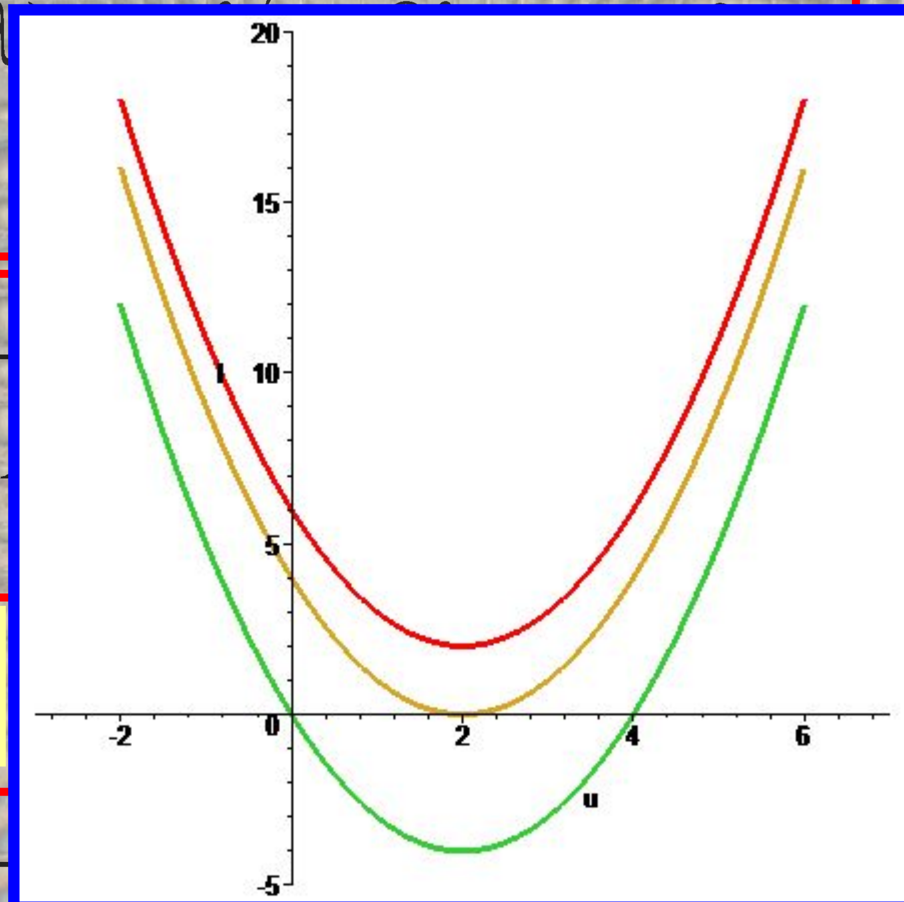
12

III. Принцип неопределенности

$I(\lambda$

β^2

13



Посколь ку: **то:**

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

14

III. Принцип неопределенности

Пример

Операторы координаты и импульса

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

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

$$[\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}}]\Psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\left(x\Psi\right) + i\hbar x \frac{\partial}{\partial x}\left(\Psi\right) =$$

$$= -i\hbar\Psi$$

III. Принцип неопределенности

Пример
Операторы координаты и импульса

$$[\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}}] = -i\hbar \qquad (16)$$

$$\overline{(\hat{p} - \overline{p})^2}\,\overline{(\hat{x} - \overline{x})^2} \geq \frac{\hbar^2}{4} \qquad (17)$$

Свойства коммутирующих операторов

Что означает коммутативность?

Теорема 1.

Два произвольных эрмитовых оператора $\hat{A}$ и $\hat{B}$ обладают полным набором общих собственных функций тогда и только тогда, когда их коммутатор равен нулю:

$$\boxed{[\hat{A},\hat{B}]=0}$$

18

Теорема I. Доказательство

<u>Прямое утверждение</u>. Пусть операторы

Обладают полным набором общих собственных функций:

$$\hat{A}\psi_k = a_k\psi_k, \; \hat{B}\psi_k = b_k\psi_k, \; k = 1, \ldots$$

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 ψ_k, то отсюда следует, что коммутатор равен нулю

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

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 $\hat{A}$:

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

Теорема I. Доказательство

Имеем:

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

Тогда функция $\Phi_k = \mathcal{B}\Psi_k$ удовлетворяет уравнению:

$$\hat{A}\Phi_k = a_k \Phi_k, \; k = 1,2\ldots$$

Теорема I. Доказательство

Следовательно :

$$\boxed{\Phi_k = \lambda_k \Psi_k}$$

Отсюда:

$$\boxed{\hat{B}\Psi_k = \lambda_k \Psi_k, \;\; k = 1,2\ldots}$$

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

Теорема 2.

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

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

Теорема II. Доказательство

<u>Прямое утверждение</u>. Пусть операторы обладают одной общей собственной функцией Ψ_0:

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

Тогда:

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

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

<u>Обратное утверждение</u>. 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 :

$$\boxed{\Phi_0 = \lambda_k \Psi_0}$$

Отсюда:

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

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

Теорема II. Следствие

Из (20) имеем:

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

Пусть

$$\hat{A}\psi_k = a_k\psi_k, \; k = 1,2\ldots$$

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 $\Phi_k = \mathcal{B}\Psi_k$ являются собственными функциями оператора $\mathcal{A}_1$:

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

22

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

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

23

Пример

Метод Дарбу

Пример.

Рассмотрим следующие операторы:

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

Вычислим коммутатор:

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

Пример.

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

$$= -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(\frac{\partial\psi}{\partial x} + \xi(x)\psi\right) + \hbar^2\left(\frac{\partial}{\partial x} + \xi(x)\right)\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} =$$

25

$$= -\hbar^2 \frac{\partial^3\psi}{\partial x^3} - \hbar^2\xi(x)\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - 2\hbar^2\frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial\xi}{\partial x} - \hbar^2\psi(x)\frac{\partial^2\xi}{\partial x^2} +$$

$$+ \hbar^2 \frac{\partial^3\psi}{\partial x^3} + \hbar^2\xi(x)\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = \boxed{-2\hbar^2\frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial\xi}{\partial x} - \hbar^2\psi(x)\frac{\partial^2\xi}{\partial x^2}}$$

При каких условиях коммутатор равен

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

Пример.

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

$$= -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(\frac{\partial \psi}{\partial x} + \xi(x)\psi\right) + \hbar^2\left(\frac{\partial}{\partial x} + \xi(x)\right)\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} =$$

$$= -\hbar^2 \frac{\partial^3\psi}{\partial x^3} - \hbar^2\xi(x)\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - 2\hbar^2\frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial\xi}{\partial x} - \hbar^2\psi(x)\frac{\partial^2\xi}{\partial x^2} +$$

$$+ \hbar^2 \frac{\partial^3\psi}{\partial x^3} + \hbar^2\xi(x)\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = \boxed{-2\hbar^2\frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial\xi}{\partial x} - \hbar^2\psi(x)\frac{\partial^2\xi}{\partial x^2}}$$

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

Пример.

Ответ:

коммутатор равен

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

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

Пример.

Найдем собственные функции оператора A

$$\hat{A}\psi = -\hbar^2 \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = -p^2\psi \quad (26)$$

$$\psi(k,x) = ae^{-kx} + be^{kx}, \quad p = \hbar k \quad (27)$$

Пример.

При каких условиях собственная функция ψ_0 оператора А есть собственная функция В?

$$\hat{B}\psi_0 = \frac{\partial \psi_0}{\partial x} + \xi(x)\psi_0 = 0 \qquad (28)$$

Пример.

Отсюда находим:

$$\xi(x) = -\frac{1}{\psi_0}\frac{\partial\psi_0}{\partial x} = -\frac{\partial \ln\psi_0}{\partial x} \quad (29)$$

Или:

$$\xi(x) = -\frac{1}{\psi_0}\frac{\partial\psi_0}{\partial x} = k_0\frac{ae^{-k_0x} - be^{k_0x}}{ae^{-k_0x} + be^{k_0x}} \quad (30)$$

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

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

31

Пример.

Тогда

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

$$=v(x)\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}+\xi(x)\psi\right)=v(x)\frac{\partial\psi}{\partial x}+v(x)\xi(x)\psi$$

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

$$v(x) = -2\square^2 \frac{\partial \xi}{\partial x}, \qquad (33)$$

II

$$\frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} - 2\frac{\partial \xi}{\partial x}\xi(x) = 0 \qquad (34)$$

$$v(x) = -2\square^2 \frac{\partial \xi}{\partial x} = -2\square^2 k_0 \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{ae^{-k_0 x} - be^{k_0 x}}{ae^{-k_0 x} + be^{k_0 x}}\right), \qquad (35)$$

Пример.

Окончательно:

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

$$= 2\square^2 k_0^2 \left(1 - \frac{\left(ae^{-k_0 x} - be^{k_0 x}\right)^2}{\left(ae^{-k_0 x} + be^{k_0 x}\right)^2} \right) = 2\square^2 k_0^2 \frac{4ab}{\left(ae^{-k_0 x} + be^{k_0 x}\right)^2},$$

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

Пример.

При каких условиях собственная функция φ_{oo} оператора А есть собственная функция В?

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

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

Пример.

При каких условиях собственная функция φ_{oo} оператора A есть собственная функция B?

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

Являются функции:

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

Пример.

Окончательно, функции

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

$$=be^{kx}\left(k+k_0\frac{ae^{-k_0x}-be^{k_0x}}{ae^{-k_0x}+be^{k_0x}}\right)-ae^{-kx}\left(k-k_0\frac{ae^{-k_0x}-be^{k_0x}}{ae^{-k_0x}+be^{k_0x}}\right), \quad (39)$$

Являются собственными функциями

$$-\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}-2\hbar^2k_0^2\frac{4ab}{\left(ae^{-k_0x}+be^{k_0x}\right)^2}\psi=-\hbar^2k, \quad (40)$$

Следующая лекция

Стационарное уравнение Шредингера

Следующая лекция:

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