Содержание:

Введение

I. Понятие состояния квантово-механической системы. Принцип суперпозиции.

1.1 Описание состояний квантовомеханической системы. Волновая функция (амплитуда вероятности).

1.2 Принцип суперпозиции состояний.

1.3 Понятие гильбертова пространства.

II. Операторы квантовой механики.

2.1 Операторы динамических переменных.

2.2 Алгебраические действия с операторами.

2.3 Собственные функции и собственные значения операторов.

2.4 Свойства собственных значений и собственных функций эрмитовых операторов.

2.5 Операторы с непрерывным спектром собственных значений.

2.6 Дельта-функция Дирака.

2.7 Операторы координаты и импульса.

2.8 Соотношение неопределенности.

Литература

I. Понятие состояния квантовомеханической системы. Принцип суперпозиций состояний

1.1 Описание состояний квантовомеханической системы. Волновая функция (амплитуда вероятности)

Опираясь на гипотезу де Бройля о том, что свободной частице соответствует монохроматическая волна, а также на многочисленные экспериментальные факты, свидетельствующие о наличии и смысле волновых свойств у частиц вещества, формулируем 1-ый постулат квантовой механики:

Состояние квантовомеханической системы определяется -функцией (вообще говоря, комплексной), которая называется волновой функцией или амплитудой вероятности.

-функция может зависеть от пространственных координат квантовомеханической системы и времени. Для одной частицы в декартовых координатах в таком случае имеем

Квадрат модуля -функции

есть вероятность обнаружить частицу в точке с координатами в момент времени . Задавая координаты и момент времени можно определить значение -функции, а, следовательно, и плотность вероятности локализации частицы в том или ином месте пространства. Таким образом, квантовомеханическое описание состояния системы связано одновременно со всем пространством. Вероятность обнаружить частицу в элементе объема (т.е. вероятность того, что ее координаты заключены в пределах от до , от до , от до ) определяется выражением

 (1.1.1)

Предположим для простоты, что волновая функция зависит только от координаты . Тогда среднее значение этой координаты в момент времени определяется выражением

. (1.1.2)

Для произвольной функции

 (1.1.2а)

Интегрирование проводится по всей области изменений независимой переменной.

Хотя термин "волновая функция" используется очень часто, -функция может не иметь ничего общего с функцией, описывающей волну в классическом понимании. Она не обязательно должна зависеть от пространственных координат, но может являться функцией других динамических переменных, например, импульса, энергии и т.д. Например, есть вероятность того, что в момент времени квантовомеханическая система имеет импульс . Поэтому -функцию лучше называть амплитудой вероятности. С помощью -функции можно найти все распределения вероятностей для результатов измерения над системой.

Поскольку квадрат модуля -функции есть плотность вероятности соответствующего значения динамической переменной в определенный момент времени, она (-функция) должна быть однозначной, непрерывной и конечной. Совокупность перечисленных требований называют стандартными условиями.

Проинтегрировав левую и правую часть выражения (1.1.1) по всей области изменения независимых переменных получаем:

, (1.1.3)

поскольку – плотность вероятности локализации частиц в данной точке и частица обязательно где-то находится. Это соотношение называется условием нормировки -функции (на единицу). Так как независимыми переменными могут быть не только координаты, но и другие физические величины в общем случае имеем

, (1.1.4)

где – произведение дифференциалов независимых переменных. Например, если -функция зависит от импульса частицы, то .

Условие нормировки накладывает на -функцию требование квадратичной интегрируемости:

 (1.1.5)

Это означает что -функция должна быстро убывать при стремлении независимых переменных (например, координат) к бесконечности. Бывают ситуации, когда -функция не является квадратично интегрируемой. В таком случае применяются другие способы нормировки, целесообразные с физической точки зрения. Для таких квантовомеханических систем не имеет смысла плотности вероятности, но может быть интерпретирована как величина пропорциональная ей.

1.2 Принцип суперпозиции состояний

Опыт показывает, что между возможными состояниями квантовомеханической системы в любой момент времени существует определённая связь. Выражают её математически в виде соотношения между соответствующими –функциями и называют принципом суперпозиции.

Если квантовомеханическая система может находится в состоянии , в котором физическая величина имеет значение либо в состоянии , в котором та же величина имеет значение , то она может находиться и в состоянии , в котором при измерении величины получают либо , либо .

Это утверждение обобщается на любое число различных состояний:

, (1.2.1)

где постоянные являются, вообще говоря, комплексными числами. Таким образом, в состоянии величина является неопределённой.

Предположим, что состояния одинаковы: . Это означает, что физическая величина в этих состояниях имеет одно и тоже значение . Из принципа суперпозиции следует:

Следовательно, при измерении величины в состоянии мы получим значение . Это значит, что состояния и одинаковы. Таким образом, -функцию можно умножать на произвольное комплексное число и при этом состояние квантовомеханической системы не изменяется. Это постоянное число выбирают таким образом, чтобы выполнялось условие нормировки волновой функции. Поэтому его обычно называют нормировочным коэффициентом или постоянной нормировки.

Суперпозиция часто встречается в классической физике. (Например, суперпозиция классических волн, напряжённостей электрического поля и т.д.) С точки зрения математики классическая и квантовая суперпозиции аналогичны. Поэтому иногда используют аналогию квантовых систем с классическими (колеблющиеся струны, мембраны и т.д.). Эти классические системы также описываются линейными уравнениями и, следовательно, подчиняются принципу суперпозиции. «Важно помнить, однако, что суперпозиция, которая встречается в квантовой механике, существенным образом отличается от суперпозиции, встречающейся в любой классической теории» [1,с31]. Например, в результате суперпозиции двух классических волн появляется новая волна с новыми свойствами (например, новой амплитудой). Суперпозиция же двух квантовых состояний, в которых некоторая физическая величина имеет значение (в первом) и (во втором), не приводит к появлению состояния с новым значением . При измерении этой величины в суперпозиционном состоянии будем получать либо , либо . Результат конкретного измерения предсказать нельзя. Можно лишь найти вероятность того или иного результата. Неопределённость результатов измерения – принципиальное отличие квантовой суперпозиции от классической. «Промежуточный характер состояния, образованного в результате суперпозиции, выражается в том, что вероятность того или иного результата измерения будет промежуточной между соответствующими вероятностями для исходных состояний, а не в том, что сам результат будет промежуточным между соответствующими результатами для исходных состояний» [1,с.30]

1.3 Понятие гильбертова пространства.

Из принципа суперпозиции следует, что уравнения квантовой механики должны быть линейными. Действительно, если являются решением такого уравнения, то также должно быть его решением.

Из принципа суперпозиции следует также, что состояния системы в квантовой механике должны описываться такими математическими величинами, которые можно складывать, умножать на комплексные числа и при этом получать величины такого же типа.

Таким образом, величины, характеризующие состояние квантовомеханической системы, можно считать элементами некоторого линейного функционального пространства. Что же это за пространство? Ранее мы показали, что -функции являются, как правило, квадратично-интегрируемыми, т.е. такими, что

(Здесь – произведение дифференциалов независимых переменных от которых зависит -функция. Интегрирование проводится по всей области изменения этих переменных). Следовательно, каждой -функции можно сопоставить число

 (1.3.1)

Это число называется нормой функции.

Существует аналогия между и абсолютной величиной вещественного или комплексного числа. С помощью абсолютной величины производится измерение расстояний на числовой оси

Аналогично понятие нормы даёт возможность множество элементов (функций) рассматривать как некоторые «пространство», в котором также можно проводить измерения. Расстояние между элементами и определяется числом

Таким образом, множество функций, характеризующих состояние квантовомеханической системы, образуют метрическое пространство. Оно называется пространством Гильберта. В этом пространстве можно определить скалярное произведение функций:

. (1.3.2)

Если скалярное произведение равно нулю:

то функции и считают ортогональными. Норма определяется через скалярное произведение функции саму на себя:

.

Свойства скалярного произведения:

 (1.3.3а)

 (1.3.3б)

, только если (1.3.3в)

Из соотношения (1.3.3а) следует, что скалярное произведение комплексной функции саму на себя вещественно:

Указанные свойства -функции аналогичны свойствам векторов в евклидовом пространстве. Эту аналогию рассмотрим подробнее при изучении операторов квантовой механики.

Итак, множество состояний квантовомеханической системы может быть представлено как пространство Гильберта.

Гильбертово пространство есть множество элементов (в нашем случае – функций, характеризующих состояние квантовой системы), на котором определены операции сложения, умножения на число и скалярное произведение с указанными выше свойствами (1.3.3).

Вопросы для самопроверки

1. Сформулировать первый постулат квантовой механики.

2. Какая связь между -функцией системы и вероятностью результатов измерения физических величин в данном состоянии?

3. Сформулировать принцип суперпозиции состояний.

4. Объяснить, чем квантовомеханическая суперпозиция отличается от классической?

5. Охарактеризуйте понятие "пространство Гильберта".

Упражнения

1.1. Частица локализована в области на оси и ее состояние описывается функцией . Найти коэффициент нормировки.

1.2. Состояние частицы, локализованной на оси в интервале описывается функцией . Найти вероятность ее обнаружения в области .

1.3. Состояние частицы в данный момент времени описывается волновой функцией , представляющей собой суперпозицию волн де Бройля с одинаковыми амплитудами и мало отличающимися волновыми числами в интервале . Определить распределение плотности вероятности местонахождения частицы и размер области ее локализации.

1.4. В момент времени волновая функция частицы имеет вид , где и – постоянные. Определить нормировочный коэффициент , изобразить примерный вид зависимости от и область локализации частицы.

Указание. Распределение вероятностей, описываемое плотностью вида

называется нормальным или гауссовским, – среднее значение случайной величины, – ее дисперсия.

1.5. Частица локализована на оси в области и ее состояние описывается функцией

Вычислить среднее значение ее координаты и дисперсию .

2. Операторы квантовой механики

2.1 Операторы динамических переменных

Функция есть рецепт, позволяющий по данному числу x найти другое число . Подобно этому оператор – рецепт, позволяющий по заданной функции найти другую функцию . Оператор определен на некотором множестве функций, если указано действие, с помощью которого каждой функции множества сопоставляется другая функция: . (Оператор будем обозначать буквой со “шляпкой”).

Примеры:

1. Если функция получается из с помощью операции дифференцирования, то это можно записать следующим образом:

,

где - оператор, действующий на функцию .

2. В физике часто используют оператор Лапласа:

.

3. Оператор умножения на независимую переменную x:

.

Физика имеет дело с наблюдаемыми процессами, явлениями, объектами. Наблюдения, измерения всегда связаны со взаимодействием изучаемого объекта с чем-то внешним (окружением, прибором, наблюдателем). Это взаимодействие всегда сопровождается возмущением изучаемого объекта. В классической физике предполагалось, что это возмущение можно сделать как угодно малым и им пренебречь. Однако существование кванта действия означает, что есть предел малости возмущения, которым для микрообъектов пренебречь нельзя. Измерение в квантовой механике – взаимодействие макроприбора с микроскопической системой – существенно меняет состояние последней. Физической процедуре измерения в математическом формализме теории соответствует оператор, действующий на -функцию, характеризующую состояние системы. Измерение меняет состояние системы, оператор изменяет -функцию, характеризующую состояние.

Следующее утверждение считается одним из постулатов квантовой механики:

каждой физической величине в квантовой механике соответствует оператор . Он определяется таким образом, чтобы среднее значение этой величины в состоянии выражалось соотношением

 (2.1.1)

или в скобочной форме

 (2.1.1а)

Здесь q – набор независимых переменных, от которых зависит -функция, – произведение дифференциалов этих переменных. Интегрирование проводится по всей области изменения независимых переменных. Операторы динамических переменных обозначают теми же буквами, что и соответствующие физические величины, но со “шляпкой” над ними. Например, оператор координаты , оператор импульса , оператор энергии и т.п.

Чтобы не нарушался принцип суперпозиции, операторы динамических переменных в квантовой механике должны быть обязательно линейными. Применение оператора к суперпозиции функций и должно равняться суперпозиции результатов действия этого оператора к каждой из функций и . Оператор называется линейным, если он удовлетворяет условиям:

,

где с – произвольная постоянная. Эти условия можно объединить

.

Типичные примеры линейных операторов: умножение на независимую переменную , дифференцирование по x .

Операторы динамических переменных должны быть обязательно самосопряженными (эрмитовыми). Это следует из требования, чтобы измеряемые в процессе опытов физические величины выражались действительными числами. Следовательно, среднее значение физической величины, представляемой оператором , также должно быть действительным числом, т.е.

.

Используя соотношение (2.1.1) запишем это равенство в интегральной форме

 (2.1.2)

или с помощью скобок

 (2.1.2а)

Операторы, для которых выполняется это соотношение, считаются самосопряженными (эрмитовыми). Дадим общее определение такого оператора.

Каждому оператору можно привести в соответствие другие: комплексно сопряженный с ним , транспонированный , сопряженный .

Оператор является комплексно сопряженным с оператором , если выполняется соотношение: .

Операторы и называют транспонированными друг с другом, если выполняется соотношение

 (2.1.3)

или в скобочной форме

. (2.1.3а)

Оператор называют сопряженным оператору . Следовательно, для произвольной пары функций и и операторов и имеет место соотношение

 (2.1.4)

или в интегральной форме

. (2.1.4а)

Самосопряженным называется оператор, если он равен своему сопряженному: =.

Из соотношения (2.1.4) следует, что для самосопряженного оператора и произвольной пары функций и должно выполняться равенство:

 (2.1.5)

или

 (2.1.5а)

Пример. Найти оператор, сопряженный с . Является ли этот оператор самосопряженным?

Подставим оператор в левую часть равенства (2.1.4а) и проинтегрируем полученный интеграл по частям:

.

Так как , имеем

.

Сравнивая это соотношение с (2.1.4а), получаем . В данном случае , поэтому оператор не является самосопряженным.

2.2 Алгебраические действия с операторами

Имея в распоряжении несколько простых операторов можно получить из них более сложные.

Суммой операторов и называют оператор , который определяется следующим образом:

.

Символически это записывается так:

.

Например,

Произведением операторов и будем называть оператор , который определяется следующим образом:

,

причем на функцию сначала действуем ближайшим к ней оператором, а потом на полученный результат – следующим,

.

Символически произведение операторов записывается в виде .

Например, . Подействуем произведением этих операторов на функцию :

.

Если действие одного и того же оператора повторяется n раз, это записывается в виде степени этого оператора:

.

Например,

.

Произведение операторов зависит от порядка множителей. Например, если , то Но . Очевидно, что в этом случае . Таким образом, операторы, вообще говоря, являются некоммутативными (неперестоновочными). Если , то операторы называют комутирующими. В этом случае . Выражение называют коммутатором.

2.3 Собственные функции и собственные значения оператора

В результате действия оператора на функцию иногда получается та же самая функция, умноженная на некоторое число а:

 (2.3.1)

Например,

.

Если имеет место уравнение (2.3.1) и функции удовлетворяют стандартным условиям (конечность, непрерывность, однозначность), то называют собственной функцией оператора , а число – его собственным значением, соответствующим данной собственной функции . Соотношение (2.3.1) называют уравнением собственных значений оператора. Совокупность чисел , при которых это уравнение имеет решение, удовлетворяющее стандартным условиям, называют спектром собственных значений оператора. Спектр собственных значений может быть как дискретным, так и непрерывным множеством. Если спектр собственных значений дискретный, то собственные функции и собственные значения нумеруют:

, n = 1, 2, 3,…

Число n называют квантовым.

Иногда одному и тому же собственному значению соответствует несколько собственных функций. В таком случае говорят, что собственное значение является вырожденным. Число разных функций, принадлежащих одному и тому же собственному значению, называют кратностью вырождения.

Перейдем к физической интерпретации рассмотренных выше математических понятий. Отклонение физической величины A от ее среднего значения есть: . Введем оператор, соответствующий этой величине: . Тогда по формуле (2.1.1) можно найти среднее квадратичное отклонение физической величины от ее среднего значения в состоянии :

.

Пользуясь самосопряженностью операторов квантовой механики, преобразуем интеграл в правой части этого соотношения:

,

следовательно

 (2.3.2)

Теперь мы имеем возможность найти состояния, в которых физическая величина А имеет точно определенное значение. В таких состояниях среднее квадратичное отклонение должно равняться нулю, т.е. . Следовательно,

=0.

Поскольку под интегралом находится положительная величина, последнее равенство возможно при условии

, т.е. или

 (2.3.3)

Так как в состоянии , удовлетворяющем уравнению (2.3.3) физическая величина точно определена, она равна своему среднему значению. Обозначая это значение физической величины буквой а, можем записать = и . Т.е. является собственным значением оператора , соответствующим собственной функции . Таким образом, в состоянии, которое описывается собственной функцией оператора ,соответствующая физическая величина имеет точно определенное значение, равное собственному значению этого оператора. Если же -функция, описывающая состояние системы, не является собственной функцией оператора физической величины, то при ее измерении в этом состоянии будем получать различные значения из спектра собственных значений данного оператора. Это утверждение обычно формулируют в виде одного из постулатов квантовой механики.

Собственные значения оператора, сопоставляемого данной физической величине, являются теми значениями этой величины, которые реализуются в процессах измерения.

Это утверждение (3-й постулат) имеет очень большое значение для физической интерпретации математического аппарата квантовой механики. Требование, чтобы собственные функции оператора удовлетворяли стандартным условиям часто ограничивает возможные значения физической величины. Учет этих требований приводит к дискретному спектру собственных значений. Таким образом, мы имеем дело с математическим отображением процесса квантования в физике.

2.4 Свойства собственных значений и собственных функций эрмитовых операторов

а) Докажем, что собственные значения самосопряженных операторов являются действительными числами.

Доказательство. Напишем уравнение собственных значений

и комплексно с ним сопряженное

Умножим левую и правую часть первого уравнения слева на , второго на и проинтегрируем их по всей области изменения независимых переменных

,

.

Поскольку операторы самосопряженные, левые части этих равенств одинаковы (см. соотношение (2.1.2)). Вычитая почленно второе соотношение из первого, получаем

.

Поскольку функции квадратично интегрируемы и интеграл в левой части, по условию нормировки, равен единице, получаем или . Это означает, что собственные значения самосопряженных операторов – действительные числа. Поэтому в квантовой механике могут использоваться только самосопряженные операторы – при измерении физических величин можно получить только действительные значения.

б) Докажем, что собственные функции самосопряженных операторов, соответствующие разным собственным значениям, взаимно ортогональны. Для определенности принимаем, что спектр собственных значений оператора дискретный и вырождение отсутствует.

Доказательство. Напишем уравнения собственных значений для операторов и :

,

,

Умножаем левую и правую часть на слева, второго – на справа и интегрируем по всей области изменения независимых переменных:

,

.

Вычитаем почленно второе уравнение из первого и, учитывая эрмитовость оператора , (см. равенство (2.1.4а)), получаем

 (2.4.1)

Если , то и из этого соотношения следует

 (2.4.2)

или

, (2.4.2а)

что и требовалось доказать. Если , скобка в соотношении (2.4.1) равна нулю, а интеграл, по условию нормировки, должен равняться единице:

 (2.4.3)

Формулы (2.4.2) и (2.4.3) можно объединить в одну

, (2.4.4)

или

, (2.4.4а)

где - символ Кронекера,

Аналогичное соотношение имеет место для ортов прямоугольных координатных осей в евклидовом пространстве:

.

Функции, удовлетворяющие условию (2.4.4) называют ортонормированными.

Физический смысл ортогональности собственных функций и оператора заключается в том, что при измерении физической величины в этих состояниях мы обязательно получим разные значения: - в состоянии , - в состоянии . В дальнейшем мы вернемся к обсуждению значения ортогональности собственных функций эрмитовых операторов в структуре квантовой теории.

в) Докажем, что совокупность собственных функций эрмитового оператора является полной (замкнутой) системой. Это означает, что не существует еще какой-то другой функции, которая была бы ортогональна к собственным функциям данного эрмитового оператора.

Доказательство. Пусть - собственные функции оператора с дискретным спектром собственных значений, а - произвольная квадратично интегрируемая функция. (Для простоты рассуждений независимой переменной будем считать координату х).

Разложим -функцию в ряд по собственным функциям :

. (2.4.5)

Сумма в правой части равенства содержит первых членов разложения, - остаток. Коэффициенты нужно определить так, чтобы получить возможно меньшую погрешность (остаток). Мера погрешности:

.

Так как собственные функции ортонормированы, интеграл в правой части можно преобразовать следующим образом:

квантовый механический система функция импульс

.

Будем искать минимум , приравнивая нулю производные по и . Из условия минимума, учитывая ортонормированность собственных функций , получаем следующие выражения для этих коэффициентов:

 или (2.4.6)

 или (2.4.6а)

Найдем соответствующее им значение погрешности:

Если для любой квадратично интегрируемой функции в пределе имеет место равенство

,

т.е. , (2.4.7)

то система собственных функций называется замкнутой (полной). Поскольку -функция нормирована на единицу, то

. (2.4.8)

Соотношение (2.4.7) называют условием полноты системы собственных функций. Оно означает, что система собственных функций эрмитового оператора достаточна для представления любой -функции в виде суммы ряда

 (2.4.9)

Таким образом, любое состояние, описываемое амплитудой вероятности , может быть представлено в виде суперпозиции (2.4.9) состояний, являющихся собственными для оператора какой-либо физической величины. Т.е. математическое условие полноты системы собственных функций эрмитовых операторов превращается в физический принцип суперпозиции состояний.

Выражение (2.4.9) аналогично разложению вектора в бесконечномерном евклидовом пространстве с базисными векторами в ортогональной системе координат . Проекция вектора на направление, задаваемое ортом определяется скалярным произведением

и аналогично выражению (2.4.6). Поэтому собственные функции оператора физической величины называют базисными волновыми функциями, описывающими базисные состояния.

Таким образом, выбор процедуры измерения, т.е. выбор прибора, способного измерить интересующую нас физическую величину (в математической схеме – выбор оператора), являются выбором системы базисных состояний. В математической схеме это аналогично выбору системы координат в евклидовом пространстве. Базисные состояния, соответствующие собственным функциям оператора исследуемой физической величины, характеризуются тем, что в этих состояниях эта физическая величина имеет точно определенное значение. В процессе измерения физической величины, представляемой оператором , квантовомеханическая система всегда переходит в состояние, собственное для данного оператора, т.е. в базисное.

г) Выясним физический смысл коэффициентов . Представим - функцию характеризирующую состояние системы в виде суммы ряда (2.4.9) собственных функций оператора . Затем подставим эту сумму в выражение (2.1.1), определяющее среднее значение физической величины:

.

Подействуем оператором на суперпозицию состояния, стоящую справа. Используя уравнение собственных значений

получаем:

Перемножаем скобки и представляем выражение как сумму интегралов вида

.

Поскольку собственные функции эрмитовых операторов ортонормированы, т.е. (см. формулу (2.4.4)), получаем

. (2.4.10)

Из соотношений (2.4.8) и (2.4.10) следует, что квадрат модуля коэффициента определяет вероятность того, что в результате измерения физической величины в состоянии мы получим значение , соответствующее собственной функции .

Таким образом, аналогично тому, как есть плотность вероятности локализации квантовомеханической системы в точке , есть плотность вероятности того, что при измерении физической величины реализуется значение . Т.е. есть амплитуда вероятности (волновая функция), если независимой переменной является величина . В первом случае () говорят о координатном представлении, во втором – об -представлении.

2.5 Операторы с непрерывным спектром собственных значений

Если оператор имеет непрерывный спектр собственных значений, то собственные функции нельзя перенормировать числами 1, 2, 3,…. Они зависят от собственных значений как от параметра. Если оператор обозначаем буквой , а собственные значения - , то можно записать

(Для простоты рассуждений независимой переменной считаем координату ). Собственные функции нельзя нормировать на единицу, как в случае дискретного спектра. Интеграл расходится, так как не обращается быстро в нуль на бесконечности. Реальные системы, т.е. системы с конечными радиусом действия, находятся в ограниченной области пространства и имеют дискретный спектр энергии. Следовательно, волновые функции возможных состояний достаточно быстро убывают к нулю вне этой области. Поэтому для таких систем всегда имеет конечное значение и собственные функции операторов с дискретным спектром всегда можно нормировать на единицу. Если же квантовомеханическая система находится в состоянии , то она совершает неограниченное (инфинитное) движение во всем пространстве. Это движение характеризуется определенным значением физической величины . Например, волновая функция свободной частицы, движущейся вдоль оси и имеющей импульс имеет вид

Соотношения, описывающие свойства собственных функций дискретного спектра, обобщаются на случай непрерывного спектра. Подобно тому, как произвольная функция может быть представлена в виде суммы ряда собственных функций оператора с дискретным спектром, она может быть разложена также и по полной системе собственных функций оператора с непрерывным спектром. Только сумму следует заменить интегралом

. (2.5.1)

Интегрирование производится по всей области значений, которые может принимать величина .

Естественно считать вероятностью того, что рассматриваемая физическая величина в состоянии, описываемом функцией имеет значение в интервале от оси до . Как известно, сумма вероятностей всех возможных значений случайной величины должна равняться единице:

. (2.5.2)

Условие полноты (2.4.7) для системы собственных функций оператора с непрерывного спектра имеет вид

. (2.5.3)

(Сумма величин заменена интегралом).

Воспользовавшись разложением (2.5.1) преобразуем последнее выражение

.

Тогда условие полноты принимает вид

.

Отсюда следует

. (2.5.4)

(Сравните с (2.4.6)). Подставим интеграл (2.5.1) в (2.5.4):

. (2.5.5)

Это соотношение должно выполняться при любых , т.е. оно должно выполняться тождественно. Для этого необходимо, во-первых, чтобы интеграл обращался в нуль, если . Во-вторых, при этот интеграл должен обращаться в бесконечность, так как иначе правая часть равенства (2.5.5) будет равна нулю. Таким образом, интеграл зависит от разности . Он обращается в нуль, если разность отлична от нуля и в бесконечность, если она равна нулю. Выражение с такими свойствами называют дельта-функцией Дирака. Она была предложена английским физиком П. Дираком. Обозначим ее .

Тогда

. (2.5.6)

.

Таким образом, условие (2.5.3) будет выполняться, т.е выражение можно будет интерпретировать как вероятность обнаружить значение физической величины в интервале от до , если собственные функции непрерывного спектра оператора нормированы на -функцию. Кроме того, система функций, удовлетворяющая условию (2.5.6) ортогональна.

(Это следует из свойств -функции). Формула (2.5.6) является обобщением формулы (2.4.4) на случай непрерывного спектра собственных значений.

2.6 Дельта-функция Дирака

К необходимости введения -функции П. Дирак пришел при рассмотрении величин, содержащих бесконечности. Она определяется следующим образом:

 (2.6.1)

Пределы интегрирования могут быть любые другие, лишь бы точка находилась между ними.

“Для того, чтобы получить наглядное представление о , рассмотрим функцию вещественной переменной , которая обращается в нуль повсюду за исключением малого промежутка … , внутри которого находится точка , причем внутри этого промежутка функция настолько велика, что интеграл от нее по промежутку равен единице. Точное поведение функции внутри промежутка несущественно…” [1, с.90].

Наиболее важное свойство -функции выражается с помощью соотношения

, (2.6.2)

где - произвольная непрерывная функция от , область интегрирования должна содержать точку . Это свойство вытекает из определения -функции (2.6.1). Действительно, левая часть (2.6.2) может зависеть только от тех значений , для которых аргумент близок к нулю. Поэтому можно заменить на . Тогда из (2.6.1) и (2.6.2) получаем

Если в соотношении (2.6.2) перенести начало координат, получим

, (2.6.3)

где -действительное число. Область интегрирования включает точку . (Область интегрирования не обязательно должна быть от до . Она должна включать в себя особую точку, в которой -функция не обращается в нуль).

Приведем еще несколько соотношений, выражающих свойства -функции. Смысл их заключается в том, что если в подынтегральное выражение входит в качестве множителя одна из сторон этих соотношений, то ее без изменения значения интеграла можно заменить другой стороной.

1. Дельта-функция является четной:

. (2.6.4)

2. Часто используют свойство -функции

. (2.6.5)

Докажем его справедливость. Для этого рассмотрим функцию . Согласно свойству (2.6.2)

или

.

Поскольку , имеем

,

откуда и следует свойство (2.6.5).

3. Часто бывает полезным соотношение

 (2.6.6)

Для доказательства сначала воспользуемся свойством (2.6.4), а затем введем новую переменную , :

.

Введем обозначение . Тогда правую часть последнего соотношения можно переписать следующим образом

.

Согласно свойству (2.6.2) интеграл в правой части равен , но :

.

Таким образом

.

Но к такому же результату прийдем, рассмотрев интеграл

.

Таким образом,

,

что и доказывает справедливость свойства (2.6.6).

“Дельта-функция не является функцией от в соответствии с обычным математическим определением функции, когда требуется, чтобы функция имела определенное значение для любого значения аргумента” [1, с. 90]. Она является обобщенной функцией[[1]](#footnote-1).

Из соотношения (2.6.2) видно, что операция умножения функции от на с последующим интегрированием по всем возможным значениям эквивалентна замене на . Таким образом, хотя -функция и не имеет строго определенного значения, но если она содержится в качестве множителя в подынтегральном выражении, то сам интеграл строго определен.

Дельта-функцию можно рассматривать как предел последовательности аналитических функций, например, (рис. 1). При эта функция осциллирует около нулевого значения с затухающей амплитудой. При . Координату т. А на рис. 1 можно найти из условия , откуда следует , .

Если увеличивать , т. на рис. 1 будет подниматься вверх по оси ординат. В пределе получится бесконечно узкий и высокий пик, площадь которого должна равняться единице:

При увеличении функция осциллирует с убывающей амплитудой и с периодом . Быстрые осцилляции при увеличении означают, что весь вклад в интеграл, содержащий эту функцию, обусловлен малой окрестностью точки . Поэтому предел при имеет все свойства -функции: . График функции нарисовать, строго говоря, невозможно. Пришлось бы изображать бесконечно узкий и бесконечно высокий пик в точке , “площадь” под которым конечна и равна единице.

Нетрудно показать, что

. (2.6.7)

(Действительно ), откуда следует соотношение (2.6.7)). Из последнего соотношения получаем:

 (2.6.8)

Соотношение (2.6.8) можно рассматривать как разложение -функции в интеграл Фурье.

Пример. Найти нормировочный множитель волновой функции свободной частицы . Считать момент времени фиксированным и равным нулю.

Для фиксированного момента времени

. (2.6.9)

Поскольку частица свободна, т.е. движется в неограниченном пространстве,

и нормировка на 1 невозможна. В таком случае применяется нормировка на -функцию (см. (2.5.6))

Подставляя в последнее соотношение волновую функцию свободной частицы (2.6.9), получим

.

Из соотношения (2.6.8) следует, что

.

Поэтому ; , где -произвольная фаза. При определении плотности вероятности множитель сокращается. Поэтому обычно полагают , тогда .

Часто волновую функцию свободной частицы записывают в виде

,

при .

При нормировке на -функцию

или

С другой стороны, согласно равенству (2.6.8)

.

Согласно свойству -функции (2.6.6)

.

Поэтому

 (2.6.10)

и

 (с точностью до постоянного фазового множителя). Т.е., если волновая функция свободной частицы нормируется на -функцию от волновых векторов, то ; если нормируется на -функцию от импульсов, то .

2.7 Операторы координаты и импульса

Вид оператора данной физической величины зависит от выбора независимых переменных в функциях, к которым он применяется.

а) Оператор независимой переменной всегда представляет собой операцию умножения на эту переменную. Это вытекает из постулата (в нашем пособии - третьего), согласно которому полученные при измерении значения физической величины совпадают с собственными значениями ее оператора. Например, если в системе с одной степенью свободы независимой переменной является координата , т.е. , то оператором координаты будет операция умножения на : .

При наличии нескольких степеней свободы следует выяснить, любое ли сочетание физических величин может являться набором независимых переменных. Операторы независимых переменных являются умножением на эти переменные. Поэтому они должны коммутировать (быть коммутативными). Следовательно, в качестве независимых переменных можно брать только такие величины, операторы которых между собой коммутируют.

б) Найдем оператор импульса при условии, что координата является независимой переменной. Как известно, (согласно идеям де Бройля, подтвержденным экспериментально), волновая функция свободной частицы есть монохроматическая волна

.

(Момент времени фиксирован).

Для одномерного случая, когда частица движется вдоль оси ,

.

Поскольку частица свободна, т.е. нет никакого взаимодействия, ее импульс сохраняется и равен . Таким образом, собственная функция оператора есть и ей соответствует собственное значение . Поэтому можно записать уравнение собственных значений:

.

Это соотношение будет справедливым если . Действительно,

.

Рассуждая аналогично, получаем

, и .

2.8 Соотношение неопределенностей

Физическая величина с вероятностью равной единице точно определена в собственном состоянии оператора . Если -функция не является собственной для данного оператора, результатом измерения будет какое то значение из его спектра. Неопределенность ее значения, т.е. разброс результатов измерения физической величины, будем характеризовать средним квадратичным отклонением результатов отдельных измерений от среднего значения: . Величине соответствует оператор , величине – оператор .

Установим связь между неопределенностями двух физических величин, если квантовомеханическая система находится в состоянии , т.е. связь между и . Рассмотрим вспомогательный интеграл , где - произвольный вещественный параметр. Очевидно, что . После несложных преобразований (упражнение 7) этот интеграл принимает вид трехчлена

,

где . Этот трехчлен не может быть отрицательным. Выясним при каком условии это возможно. Прибавим к трехчлену и вычтем из него величину :

.

Значение трехчлена будет минимальным, при таком значении , чтобы выражение, стоящее в скобке, равнялось нулю. Поскольку трехчлен неотрицателен, получаем

или

,

. (2.8.1)

Это выражение называется соотношением неопределенностей. Оператор (см. упражнение 6). Поэтому из соотношения (2.8.1) следует вывод: если операторы коммутируют , то соответствующие физические величины одновременно могут иметь точно определенные значения.

Вопросы для самопроверки

1.Определить понятие оператора.

2.Какова математическая природа динамических переменных в квантовой механике? Сформулируйте соответствующий (2-й) постулат квантовой механики.

3.Как, зная состояние системы (-функцию) и оператор физической величины, найти среднее значение этой величины в данном состоянии?

4.Какие операторы называют линейными? Почему в квантовой механике могут использоваться только линейные операторы?

5.Определить понятие комплексно-сопряженного, сопряженного и самосопряженного операторов.

6.Какие функции называют собственными функциями оператора? Свойства собственных функций самосопряженного оператора.

7.Что называют спектром собственных значений оператора? Свойства собственных значений самосопряженных операторов.

8.Почему операторы физических величин должны быть самосопряженными?

9.Какая связь между оператором физической величины и результатом ее измерения?

10.Что понимают под кратностью вырождения собственного значения оператора.

11.Представить произвольную волновую функцию в виде ряда по собственным функциям оператора физической величины. Как определяются коэффициенты разложения ? Каков их физический смысл?

12.Какова связь между условием полноты собственных функций самосопряженных операторов и принципом суперпозиции?

13.Что называют дельта–функцией Дирака? Ее основные свойства.

14.В каком случае собственные функции оператора физической величины нормируют на -функцию?

15.Что собой представляет оператор координаты и оператор импульса в координатном представлении?

16.Сформулировать и записать соотношение неопределенностей.

17.Как, зная операторы физических величин, определить, могут ли они одновременно иметь определенные значения?

Упражнения.

2.1. Являются ли следующие операторы линейными:

а) ;

б) оператор инверсии : ;

в) оператор сдвига вдоль оси : ;

г) оператор комплексного сопряжения: ?

2.2. Найти оператор транспонированный к оператору , комплексно-сопряженный и сопряженный с ним? Является ли этот оператор самосопряженным?

2.3. Является ли оператор комплексного сопряжения эрмитовым?

Решение. Для самосопряженного оператора должно выполняться условие (2.1.5)

Для оператора комплексного сопряжения имеем:

Таким образом, соотношение (2.1.5) для оператора комплексного сопряжения не выполняется, поэтому он не является эрмитовым.

2.4. Показать, что среднее значение квадрата самосопряженного оператора положительно.

Решение. Согласно соотношению (2.1.1)

(Функцию считаем нормированной на единицу). Пользуясь тем, что оператор самосопряженный, получаем

Этот интеграл всегда положителен. Следовательно, .

2.5. Показать, что если операторы и эрмитовы, то оператор тоже эрмитов.

Решение. Для самосопряженного оператора должно выполняться условие

. (2.5а)

Если , то .

Подставим оператор в левый интеграл соотношения (2.5а) и преобразуем его, пользуясь эрмитовостью операторов и :

 (2.5б)

Аналогично преобразуем интеграл, стоящий в правой части соотношения (2.5.а):

 (2.5в)

В процессе преобразования мы сначала воспользовались свойством эрмитовости операторов и , а затем поменяли местами функции стоящие под знаком интеграла.

Сравнивая соотношения (2.5б) и (2.5в) приходим к выводу, что для оператора условие (2.5а) выполняется. Следовательно, если и эрмитовы операторы, то оператор также эрмитов.

2.6. Доказать, что .

Решение. . Подействуем оператором на функцию :

Следовательно, и .

2.7. Доказать, что если операторы и коммутируют, т.е. , то и операторы и также коммутируют.

Решение.

После умножения и сокращения одинаковых величин получаем

.

Таким образом, если , то и .

2.8. Доказать, что интеграл можно преобразовать в трехчлен , где - произвольный вещественный параметр, и, следовательно (см.упр.2.7), .

Решение.

 (2.8)

Пользуясь эрмитовостью оператора преобразуем первый интеграл в правой части равенства:

.

Аналогичным образом преобразуем четвертый интеграл:

.

Второй и третий интегралы преобразуем, пользуясь самосопряженностью операторов и .

Объединим второе и третье слагаемое в правой части соотношения в (2.8) в один интеграл. Получаем . Умножив и разделив это выражение на имеем



.

Таким образом

,

что и требовалось доказать.

2.9. В состоянии квантовомеханической системы, описываемом заданной волновой функцией , физическая величина имеет определенное значение. Имеет ли в этом состоянии определенное значении также и величина в случае, если операторы и : 1) не коммутируют, 2) коммутируют.

2.10. Найти собственные значения и нормированные собственные функции следующих операторов:

а) ,

б) ,

в) .

2.11. Найти собственные функции оператора координаты (в координатном представлении).

Решение. Уравнение собственных значений для оператора имеет вид

,

где, - собственная функция, соответствующая собственному значению . Очевидно, что , если . Воспользуемся свойством -функции (2.6.5): . Напишем это соотношение для аргумента :

.

Раскрывая скобки, получаем или . Следовательно, собственная функция оператора , соответствующая собственному значению есть .

Литература

1. Дирак П. Принципы квантовой механики.–М: Наука, 1979.
2. Вакарчук І. О. Квантова механіка: Підручник.– Львів: ЛДУ ім.. І. Франка, 1998.
3. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики. М.: Наука, 1983.
4. Давыдов А.С. Квантовая механика. М.: Наука, 1973.
5. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Наука, 1989.
6. Юхновський І.К. Квантова механіка. Київ: Либідь, 1995.
7. Федорченко А.М. Теоретична фізика. Київ: Вища школа, 1993, т. 2.
8. Фок В.А. Начала квантовой механики. М.: Наука, 1976.
9. Шифф Л. Квантовая механика. М.: Из-во иностр. лит., 1959.
10. Мессиа А. Квантовая механика: в 2-х томах, М.: Наука, 1978, т. 1.
11. Иродов И.Е. Задачи по квантовой физике. М.: «Высшая школа», 1991.
12. Галицкий В.М., Карнаков Б.М., Коган В.И. Задачи по квантовой механике. М.: Наука, 1981.
13. Арфкен Г. Математические методы в физике. М.: Атомиздат, 1970.
14. Рихтмайер Р. Принципы современной математической физики, М.:1982.
1. Об обобщенных функциях см. Гельфанд И.М., Шилов Г.Е. Обобщенные функции. М., 1958 [↑](#footnote-ref-1)