<u>Лекція № 5</u>

МАТЕМАТИЧНИЙ АПАРАТ КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ

Лінійна алгебра, теорія лінійних просторів, теорія лінійних операторів

1. Визначення лінійного простору. Задано дві дії: додавання й множення на число, які не виводять за межі множини елементів M та задовольняють 4-м аксіомам кожне:

$$\textit{Додавання}: f+g=w; \quad f,g,w\in M;$$

$$1).\, f+g=g+f; \quad 2).(f+g)+h=f+g+h; \quad 3).\, f+0=f; \quad 4).\, f+(-f)=0.$$

$$\textit{Множення на число}: g=\lambda f; \quad f,g\in M;$$

$$1).\, 1\cdot f=f; \quad 2).\, \alpha(\beta f)=(\alpha\beta)f; \quad 3).\, \alpha(f+g)=\alpha f+\alpha g; \quad 4).\, (\alpha+\beta)f=\alpha f+\beta f.$$

Декілька прикладів лінійних просторів:

V_3 – *тривимірний простір векторів*, K_n – *простір впорядкованих числових послідовностей*

$$f=\begin{pmatrix} f_1\\ f_2\\ \vdots\\ f_n\end{pmatrix}; \quad f^*=(f_1^*, f_2^*,..., f_n^*),$$

$R(a,b)$ – *простір функцій дійсної змінної x неперервних на від*різку $a\le x\le b$,

P_n – *простір поліномів ступеня не вище* n.

2. Лінійна комбінація векторів:

$$f=\alpha_1 f_1+\alpha_2 f_2+...+\alpha_k f_k.$$

Лінійна залежність системи векторів: існує такий набір $\alpha_i, i=1,2,...,k$, серед яких є нерівні нулю, а лінійна комбінація $f=0$.

Лінійна незалежність системи векторів: лінійна комбінація $f=0$ тоді й тільки тоді, коли всі $\alpha_i=0, i=1,2,...,k$. Розмірність лінійного простору – максимальна кількість лінійно незалежних векторів. Базис – будь-яка система з n лінійно незалежних векторів.

3. **Простір називається метричним**, якщо в ньому заданий скалярний добуток. Кожній парі векторів ставиться у відповідність комплексне число: $(\varphi,\psi)=\lambda,$ яке називається скалярним добутком двох векторів. Якщо цей добуток задовольняє 4 аксіомам

$$1.\,(f,g)=(g,f)^*;\quad 2.\,(f_1+f_2,g)=(f_1,g)+(f_2,g);$$

$$3.\,(f,\alpha g)=\alpha(f,g);\,(\alpha f,g)=\alpha^*(f,g);$$

$$4.\,(f,f)\geq 0,\quad (f,f)=0,\ f=0,$$

простір називається евклідовим.

Два важливих приклади скалярних добутків

Евклідів простір впорядкованих числових послідовностей E_n.

$$(f,g)=\sum_{i=1}^{n} f_i^* g_i.$$

Має розмірність *n*. Його ортонормований базис:

$$(e_i,e_k)=\delta_{ik}=\begin{cases}1, i=k;\\ 0, i\neq k;\end{cases}\quad i,k=1,2,...n.$$

4. Гільбертов простір – це нескінченновимірний евклідів простір. Позначається, як $\mathscr{L}^2$. Це простір функцій квадратично інтегрованих на дійсній осі $-\infty<x<\infty$

$$(\varphi,\psi)=\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi^*(x)\psi(x)dx;\quad (\varphi,\varphi)=\int_{-\infty}^{+\infty}|\varphi(x)|^2\,dx<\infty.$$

Поняття повної системи функцій для нескінченновимірних просторів (узагальнення поняття базису): це система функцій, по якій довільну функцію, яка належить даному простору, можна розкласти в ряд Фур'є.

5. Визначення лінійного оператора $\hat{L}\left(\alpha f+\beta g\right)=\alpha\hat{L}f+\beta\hat{L}g$. Лінійність операторів квантової механіки забезпечує виконання принципу суперпозиції.

6. Способи завдання лінійних операторів: правило відповідності, інтегральна форма, матрична форма.

Правило відповідності (приклади лінійних операторів):

а) $\hat{I}\psi(x)=\psi(-x)$ – оператор інверсії (відбиття);

б) $\hat{T}_a\psi(x)=\psi(x+a)$ – оператор трансляції (зсуву);

в) $\hat{M}_c\psi(x)=\sqrt{C}\psi(Cx),\quad C>0$ – оператор зміни масштабу;

г) $\hat{K}\psi(x)=\psi^*(x)$ – оператор комплексного спряження;

д) $\hat{P}_{12}\psi(x_1,x_2)=\psi(x_2,x_1)$ – оператор перестановки двох координат е) $\hat{x} = x; \hat{d} = \frac{d}{dx}$ – оператор диференціювання;

ж) $\nabla = \vec{i}\,\frac{\partial}{\partial x} + \vec{j}\,\frac{\partial}{\partial y} + \vec{k}\,\frac{\partial}{\partial z}$ – оператор «набла»;

з) $\Delta = \nabla \cdot \nabla = \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ – оператор Лапласа.

Оператори-матриці: $\tilde{f}_i = \sum_{k=1}^{n} L_{ik} f_k, \quad L_{ik}$. – матриця оператора.

Інтегральні оператори: $\tilde{\varphi}(x) = \hat{L}\varphi = \int_{-\infty}^{\infty} L(x,x')\varphi(x')dx', \quad L(x,x')$ – ядро оператора.

7. **Дії з операторами**.

7.1. Одиничний оператор: $\hat{1} = 1; \quad \hat{1} f = 1 \cdot f = f,$

нульовий оператор: $\hat{0} = 0; \quad \hat{0} f = 0 \cdot f = 0.$

7.2. Сума операторів:

$$(\hat{A} + \hat{B})\psi = \hat{A}\psi + \hat{B}\psi = \hat{B}\psi + \hat{A}\psi = (\hat{B} + \hat{A})\psi; \quad \hat{A} + \hat{B} = \hat{B} + \hat{A}.$$

7.3. Добуток операторів:

$$\hat{A}\hat{B}\psi = \hat{A}(\hat{B}\psi); \quad \hat{B}\hat{A}\psi = \hat{B}(\hat{A}\psi); \quad \hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}!$$

7.4. Комутатор двох операторів: $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A},$

і антикомутатор: $[\hat{A}, \hat{B}]_+ = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}.$

7.5. Обернений оператор: $\hat{A}^{-1}\hat{A} = \hat{A}\hat{A}^{-1} = 1.$

Нормальний оператор – оператор, що має обернений, який комутирує з вихідним оператором: $[\hat{A}^{-1}, \hat{A}] = 0.$

Оператор, обернений до добутку операторів: $\hat{A}$ та $\hat{B}$

$$(\hat{A}\hat{B})^{-1} = \hat{B}^{-1}\hat{A}^{-1}.$$

7.6. Визначення ермітово спряженого оператора:

$$(\varphi, \hat{A}\psi) = (\psi, \hat{A}^{\dagger}\varphi)^* = (\hat{A}^{\dagger}\varphi, \psi).$$

З самого визначення ермітово спряженого оператора випливає, що:

$$(\hat{L}^{\dagger})^{\dagger} = \hat{L}; \quad (\alpha\hat{L})^{\dagger} = \alpha^* \hat{L}^{\dagger}; \quad (\hat{A}\hat{B})^{\dagger} = \hat{B}^{\dagger}\hat{A}^{\dagger}.$$

Матриця ермітово спряженого оператора – це транспонована комплексно спряжена матриця $(A^{\dagger})_{ik} = A^{*}_{ki}$

Аналогічно для ядра довільного оператора: $L^{\dagger}(x, x') = L^{*}(x', x).$

7.7. Визначення ермітового (самоспряженого) оператора: $\hat{L}^{\dagger} = \hat{L}$. Антиермітов оператор: $\hat{L}^{\dagger} = -\hat{L}.$

Будь-який оператор можна представити у вигляді суми ермітової та антиермітової частин

$$\hat{A} = \hat{M} + i\hat{N}; \quad \hat{M} = \frac{1}{2}\left(\hat{A} + \hat{A}^{\dagger}\right); \quad \hat{N} = \frac{i}{2}\left(\hat{A}^{\dagger} - \hat{A}\right).$$

Матриця ермітового оператора має дійсні елементи по головній діагоналі, а всі інші елементи задовольняють рівності $L_{ki} = L^{*}_{ik}$.

Для ядра ермітового оператора виконується співвідношення $L(x, x') = L^{*}(x', x).$

7.8. Визначення унітарного оператора $\hat{U}^{\dagger}\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^{\dagger} = 1, \hat{U}^{-1} = \hat{U}^{\dagger}.$

Для унітарних матриць виконується співвідношення

$$(\hat{U}^{\dagger})_{ik}\hat{U}_{kl} = U^{*}_{ki}U_{kl} = \delta_{il}; \quad U^{*}_{ik}U_{lk} = \delta_{il} \ –$$

сума добутків різних рядків (стовпців) дорівнює 0, а сума квадратів модулів елементів одного рядка (стовпця) дорівнює 1. Визначник унітарної матриці $|\,\mathrm{Det}\hat{U}\,| = 1.$

8. Рівняння на власні функції (ВФ) і власні значення (ВЗ)

$$\hat{A}\psi = \lambda\psi$$

8.1. Властивості ВЗ і ВФ ермітового оператора. ВЗ – дійсні, ВФ ортонормовані. Наведемо доказ.

$$\hat{L}\psi_n = \lambda_n\psi_n; \quad \hat{L}\psi_m = \lambda_m\psi_m;$$

$$(\psi_m, \hat{L}\psi_n) = (\psi_n, \hat{L}\psi_m)^{*}; \quad (\psi_m, \lambda_n\psi_n) = (\psi_n, \lambda_m\psi_m)^{*};$$

$$\lambda_n(\psi_m, \psi_n) = \lambda_m^{\ *}(\psi_m, \psi_n); \quad (\lambda_n - \lambda_m^{\ *})(\psi_m, \psi_n) = 0;$$

$$m = n, \quad (\psi_n, \psi_n) > 0, \Rightarrow \lambda_n = \lambda_n^{\ *};$$

$$m \neq n, \lambda_n - \lambda_m \neq 0, \quad (\lambda_n - \lambda_m)(\psi_m, \psi_n) = 0, \Rightarrow (\psi_m, \psi_n) = 0.$$

З урахуванням нормування на одиницю маємо ортонормовану систему власних функцій $(\psi_m, \psi_n) = \delta_{mn}$. Умова ортонормування – це умова повноти системи функцій.

8.2. Властивості ВФ унітарного оператора. ВЗ по модулю рівні 1.

$$\hat{U}\psi = \lambda\psi;$$

$$(\psi, \hat{U}^{\dagger}\hat{U}\psi) = (\psi,\psi); \quad (\hat{U}\psi, \hat{U}\psi) = (\psi,\psi);$$

$$(\lambda\psi, \lambda\psi) = (\psi,\psi); \quad |\lambda|^2 = 1; \quad \lambda = e^{i\alpha}, \quad \alpha - \text{дійсне.}$$

8.3. Унітарне перетворення (аналог канонічного перетворення в класичній механіці):

$$\hat{a} = \hat{U}^{\dagger}\hat{A}\hat{U}; \quad \varphi = \hat{U}^{\dagger}\psi;$$

$$\hat{A} = \hat{U}\hat{a}\hat{U}^{\dagger}; \quad \psi = \hat{U}\varphi;$$

Унітарне перетворення зберігає ермітовість:

$$\hat{L}^{\dagger} = \hat{L}; \quad \hat{l} = \hat{U}^{\dagger}\hat{L}\hat{U}; \quad \hat{l}^{\dagger} = (\hat{U}^{\dagger}\hat{L}\hat{U})^{\dagger} = \hat{U}^{\dagger}\hat{L}^{\dagger}\hat{U} = \hat{U}^{\dagger}\hat{L}\hat{U} = \hat{l}.$$

Зберігає ВЗ:

$$\hat{L}\psi = \lambda\psi;$$

$$(\hat{U}^{\dagger}\hat{L}\psi) = \lambda(\hat{U}^{\dagger}\psi); \quad (\hat{U}^{\dagger}\hat{L}\hat{U})(\hat{U}^{\dagger}\psi) = \lambda(\hat{U}^{\dagger}\psi);$$

$$\hat{l}\varphi = \lambda\varphi.$$

Зберігає комутаційні співвідношення

$$[\hat{L}, \hat{M}] = \hat{N}; \quad \hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L} = \hat{N};$$

$$\hat{U}^{\dagger}\hat{L}\hat{M}\hat{U} - \hat{U}^{\dagger}\hat{M}\hat{L}\hat{U} = \hat{U}^{\dagger}\hat{N}\hat{U}; \quad \hat{U}^{\dagger}\hat{L}\hat{U}\hat{U}^{\dagger}\hat{M}\hat{U} - \hat{U}^{\dagger}\hat{M}\hat{U}\hat{U}^{\dagger}\hat{L}\hat{U} = \hat{U}^{\dagger}\hat{N}\hat{U};$$

$$\hat{l}\hat{m} - \hat{m}\hat{l} = \hat{n}; \quad [\hat{l}, \hat{m}] = \hat{n}.$$

Зберігає матричні елементи операторів

$$(\psi_1, \hat{L}\psi_2) = (\psi_1, \hat{U}\hat{U}^{\dagger}\hat{L}\hat{U}\hat{U}^{\dagger}\psi_2) = (\hat{U}^{\dagger}\psi_1, \hat{U}^{\dagger}\hat{L}\hat{U}\hat{U}^{\dagger}\psi_2) = (\varphi_1, \hat{l}\varphi_2).$$