<u>Лекція № 6</u>

МАТЕМАТИЧНИЙ АПАРАТ КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ

(*ПРОДОВЖЕННЯ*)

ЕЛЕМЕНТИ ТЕОРІЇ ЗОБРАЖЕНЬ

Ермітові оператори з дискретним спектром мають повну систему функцій

$$\hat{L}\psi_n = \lambda_n \psi_n, \quad \lambda_n = \lambda_n^*, \quad (\psi_m, \psi_n) = \delta_{mn}.$$

Довільну функцію простору L^2 можна представити у вигляді розкладання в ряд Фур'є по ВФ ермітового оператора з дискретним спектром

$$\psi(x) = \sum_n C_n \psi_n(x); \quad C_n = (\psi_n, \psi) = \int \psi_n^*(x)\psi(x)dx.$$

Набір коефіцієнтів $\{C_n\}$ «містить» ту ж інформацію про властивості квантової системи, що й вихідна хвильова функція $\psi(x)$. Можна довести, що коефіцієнти C_m віднормовані на 1 (це ще один зі способів запису умови повноти системи функцій)

$$1 = (\psi, \psi) = \sum_{n,n'} C_n^* C_{n'} (\psi_n, \psi_{n'}) = \sum_{n,n'} C_n^* C_{n'} \delta_{nn'} = \sum_n |C_n|^2;$$

$$\sum_n |C_n|^2 = 1.$$

Підставимо коефіцієнти C_n в розкладання $\psi(x)$. Отримаємо

$$\psi(x) = \sum_n (\psi_n, \psi)\psi_n(x) = \sum_n \left(\int \psi_n(x')\psi(x')dx' \right) \psi_n(x) =$$

$$= \int \left(\sum_n \psi_n(x')\psi_n(x) \right) \psi(x')dx';$$

$$\hat{L}\psi = \int L(x, x')\psi(x')dx'.$$

Сума $\sum_n \psi_n(x')\psi_n(x)$ являє собою ядро одиничного оператора:

$$\sum_n \psi_n(x')\psi_n(x) = \delta(x - x').$$

Це знов таки умова повноти системи власних функцій ермітововго оператора.

Ядро одиничного оператора називають дельта-функцією Дірака.

Властивості дельта-функції Дірака

Дельта-функція відноситься до класу так званих узагальнених функцій. Поводиться незвичайним чином:

$$\delta(x)=\begin{cases}\infty, x=0;\\ 0, x\neq 0;\end{cases} \quad \int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x)dx=1.$$

*Увага! Нам важливо, тільки те, щоб точка x=*0 *була усередині границь інтегрування. Самі границі можуть бути кінцевими.*

1. Парна функція: $\delta(-x)=\delta(x)$.

2. $f(a)=\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x-a)dx.$ (можна розглядати, як визначення дельта-функції)

3. $\delta(\alpha x)=\frac{1}{|\alpha|}\delta(x).$

4. $\delta(\vec{r})=\delta(x)\delta(y)\delta(z)$.

Апроксимація дельта-функції

$$\lim_{\alpha\to 0}\left(\frac{\alpha}{x^2+\alpha^2}\right)=\pi\delta(x).$$

Знайдемо матрицю оператора $\hat{M}$ в дискретному $\hat{L}$-зображенні

$$\psi(x)=\sum_n C_n\psi_n(x); \quad \hat{M}\psi(x)=\sum_n C_n\hat{M}\psi_n(x)=\sum_n \tilde{C}_n\psi_n(x);$$

$$\tilde{C}_n=(\psi_n,\hat{M}\psi(x))=\sum_{n'} C_{n'}(\psi_n,\hat{M}\psi_{n'})=\sum_{n'} M_{nn'}C_{n'};$$

$$\tilde{C}_n=M_{nn'}C_{n'}, \quad M_{nn'}=(\psi_n,\hat{M}\psi_{n'}).$$

$M_{nn'}$ – матричні елементи оператора $\hat{M}$ в дискретному L-*зображенні* (зображенні ВФ оператора $\hat{L}$)

Матриця оператора у своєму власному зображені діагональна. По головній діагоналі стоять ВЗ

$$\hat{L}\psi_n=\lambda_n\psi_n; \quad L_{mn}=(\psi_m,\hat{L}\psi_n)=\lambda_n(\psi_m,\psi_n)=\lambda_n\delta_{mn}.$$

Формули для безперервного зображення

У ермітового оператора з безперервним спектром $\hat{L}\psi_\lambda=\lambda\psi_\lambda$ ВФ нормуються на дельта-функцію (умова повноти)

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

Розкладання по ВФ оператора з безперервним спектром – це розкладання в інтеграл Фур’є

$$\psi(x)=\int C(\lambda)\psi_\lambda(x)d\lambda; \quad C_\lambda=C(\lambda)=(\psi_\lambda,\psi)=\int\psi_\lambda^*(x)\psi(x)dx.$$

Ще одна умова повноти

$$\int \psi_\lambda^*(x)\psi_\lambda(x')d\lambda = \delta(x-x').$$

$\psi(x)$ та $C(\lambda)$ – «рівноправні» способи опису хвильової функції. ВФ $C(\lambda)$ нормована на 1: $\int |C(\lambda)|^2 d\lambda = 1$ за умови, що $\int |\psi(x)|^2 dx = 1$.

Ядро оператора $\hat{M}$ в безперервному L-зображенні

$$\hat{M}\psi(x) = \int C(\lambda)\hat{M}\psi_\lambda(x)\,\mathrm{d}\lambda = \int \tilde{C}(\lambda)\psi_\lambda(x)\,\mathrm{d}\lambda;$$

$$\tilde{C}(\lambda) = (\psi_\lambda, \hat{M}\psi) = \int \psi_\lambda^*(x)\left(\int C(\lambda')\hat{M}\psi_{\lambda'}(x)\,\mathrm{d}\lambda'\right)dx =$$

$$= \int C(\lambda')\left(\int \psi_\lambda^*(x)\hat{M}\psi_{\lambda'}(x)dx\right)\mathrm{d}\lambda' = \int M(\lambda,\lambda')C(\lambda')\,\mathrm{d}\lambda'$$

$$M(\lambda,\lambda') = \int \psi_\lambda^*(x)\hat{M}\psi_{\lambda'}(x)dx.$$

Ядро оператора у власному зображенні

$$L(\lambda,\lambda') = (\psi_\lambda, \hat{L}\psi_{\lambda'}) = \lambda'(\psi_\lambda, \psi_{\lambda'}) = \lambda'\delta(\lambda-\lambda').$$

Оператор у своїй власному зображенні – це оператор множення

$$\hat{L}C(\lambda) = \int L(\lambda,\lambda')C(\lambda')\,\mathrm{d}\lambda' = \int \lambda'\delta(\lambda-\lambda')C(\lambda')\,\mathrm{d}\lambda' = \lambda C(\lambda).$$

Оператор координати в координатному зображенні, очевидно, є $\hat{x} = x$.

Перехід від одного зображення до іншого – це унітарне перетворення. Воно виконується у випадку дискретного зображення за допомогою унітарної матриці (оператора) $\hat{U}$.

$$C_n = \hat{U}^\dagger\psi = (\psi_n, \psi) = \int \psi_n^*(x)\psi(x)dx;$$

$$\hat{a} = \hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{U}; \quad a_{mn} = \int \psi_m^*(x)\hat{A}\psi_n(x)dx$$

Якщо вдається знайти таке унітарне перетворення, яке діагоналізує матрицю оператора, то ми знаходимо ВЗ та ВФ оператора $\hat{A}$. Унітарне перетворення – це квантовий аналог канонічного перетворення в класичній механіці.

ФІЗИЧНІ ВЕЛИЧИНИ ТА ОПЕРАТОРИ

1. Кожній квантовомеханічній величині *A* ставиться у відповідність ермітов оператор $\hat{A}$. Спектр оператора $\hat{A}$ – це спектр усіх можливих (вимірюваних) значень фізичної (квантовомеханічної) величини *A*.

2. Власні функції (ВФ) ψ_A оператора $\hat{A}$ $\left(\hat{A}\psi_A = A\psi_A\right)$ – це ВФ системи в стані, у якому фізична величина A має дане значення A.

Імовірність результату вимірів

Нехай квантова система описується хвильовою функцією $\psi(x)$ у координатному зображенні. Імовірність отримати при вимірюванні координату x в інтервалі $x, x+dx$ дорівнює

$$dW = |\psi(x)|^2\, dx; \quad \rho(x,t) = \frac{dW}{dx} = |\psi(x)|^2 .$$

У дискретному зображенні ВФ оператора $\hat{L}$ хвильова функція – це набір коефіцієнтів $\{C_n\}, \psi(x) = \sum_n C_n \psi_n(x).$ Імовірність одержати при вимір.dfyyz власне значення λ_n:

$$W_n = |\mathrm{C}_n|^2 .$$

Нагадаємо, що $\sum_n |C_n|^2 = 1.$

У безперервному зображенні імовірність одержати при вимірювання фізичну величину λ в інтервалі $\lambda, \lambda + d\lambda$

$$dW = |C(\lambda)|^2\, d\lambda.$$

Середні значення фізичних величин

Використовуємо звичайне визначення середнього значення з теорії ймовірностей

$$\hat{L}\psi_n = \lambda_n \psi_n; \quad \psi(x) = \sum_n C_n \psi_n(x); \quad W_n = |C_n|^2;$$

$$\bar{L} = \sum_n \lambda_n W_n = \sum_n \lambda_n |C_n|^2 = \sum_n \lambda_n C_n C_n^*$$

$$C_n = (\psi_n, \psi), \quad \mathrm{C}_n^* = (\psi, \psi_n); \quad \bar{L} = \sum_n \lambda_n C_n (\psi, \psi_n) = \sum_n C_n (\psi, \lambda_n \psi_n)$$

$$= \sum_n C_n (\psi, \hat{L}\psi_n) == (\psi, \sum_n \hat{L} C_n \psi_n) = (\psi, \hat{L} \sum_n C_n \psi_n);$$

$$\bar{L} = (\psi, \hat{L}\psi).$$

Скористаємося принципом відповідності та перейдемо від класичної функції Гамільтона до квантового оператора Гамільтона (гамільтониана) Hamiltonian. Оператор Гамільтона – ермітовий. Для нерелятивістської частинки в зовнішньому полі функція Гамільтона є сумою кінетичної та потенціальної енергії

$$H = T + U = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + U(\vec{r}),$$

Тому оператор Гамільтона матиме вигляд

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U}; \quad \hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla \cdot \nabla = \frac{(\pm i\hbar)^2}{2m}\nabla \cdot \nabla; \quad \hat{U} = U(\vec{r}).$$

Стаціонарне РШ (яке «вивели» раніше) – це рівняння на ВФ і ВЗ оператора $\hat{H}$

$$\hat{H}\psi = E\psi .$$

Оператор радіус-вектора та оператор імпульсу в координатному зображенні

$$\hat{\vec{r}} = \vec{r} = (x, y, z); \quad \hat{x} = x,\ \hat{y} = y,\ \hat{z} = z;$$

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla = -i\hbar\frac{\partial}{\partial \vec{r}}; \quad \hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x},\ \hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y},\ \hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}.$$

Гамільтоніан системи взаємодіючих частинок у зовнішньому полі

$$\hat{H} = \sum_a \frac{\hat{\vec{p}}_a^{\,2}}{2m_a} + \sum_a U_a(\vec{r}_a, t) + U_{\text{int}}.$$

У нерелятивістській механіці в присутності магнітного поля гамільтоніан записують через скалярний та векторний потенціали поля у вигляді

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 + e\varphi; \quad \vec{\mathrm{E}} = -\nabla\varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{A}}{\partial t}; \quad \vec{\mathrm{H}} = \mathrm{rot}\vec{A}.$$