

ЗА МАТЕМАТИЧЕСКИТЕ ОСНОВИ НА КВАНТОВАТА МЕХАНИКА

- § 7.1. Хилбертово пространство
Безкрайномерно линейно пространство; скалярно произведение на функции; ортонормирани функции; условие за нормировка на суперпозиционните коефициенти. 184
- § 7.2. Средни стойности на динамичните променливи и оператори
Средна стойност на физична величина; изразяване чрез коефициентите C_k ; оператор; средна стойност чрез оператор; оператори и физични величини; пример – оператор на координатата и оператор на импулса. 186
- § 7.3. Оператори в квантовата механика
Определение; линейни оператори; сума; произведение; алгебра на некомутативни величини; комутатор; ермитови оператори. 189
- § 7.4. Собствени функции и собствени стойности на оператори
Собствени стойности и функции; собствени стойности и функции на физични величини и на оператори; ортогоналност на собствените функции на ермитов оператор; пълнота на система от функции; критерий за съвместими величини. 190
- § 7.5. Принцип на Хайзенберг
Несъвместими величини; дисперсия; съотношение на Хайзенберг за дисперсията на две произволни величини; неопределеност на координатата и импулса; експериментална илюстрация с дифракция от процеп. 193
- § 7.6. Суперпозиция на състояния с непрекъсната величина
Нормиране на ψ -функцията на свободна частица и разходимост; δ -функция на Дирак; свойства; определяне на амплитудата на ψ -функцията; суперпозиция от състояния на

свободна частица; импулсна вълнова функция и Фурие-преобразуване; вероятно разпределение на импулса. 195

§ 7.7. Елементи от теорията на представянията

Координатно и импулсно представяне; собствено състояние в собствено представяне; вълнова функция в М-представяне; оператор в М-представяне; матрица; свойства; ермитови матрица и оператори; оператор в собствено представяне. 198

ДОПЪЛНИТЕЛНА ЛИТЕРАТУРА

1. Христов Е., Записки по математически методи във физиката, София, 2003. www.fmi-uni.sofia.bg/fmi/companal/hristov/mmfa.pdf.
2. Greiner W., Quantum Mechanics, vol. 1, Springer-Verlag, 1989, , ch. 4, 5, 10.
3. Райчев П., Физика на атомните системи, Наука и изкуство, 1980, София, § 1 ÷ 3.
4. Eidelman, Y., V. Milman and A. Tzolomitis, Functional Analysis: An Introduction, AMS Providence, Rhode Island, 2004..

Забележка: За математичните основи на квантовата механика математиците имат много богата и хубава литература. В курс по съвременна физика е добре да дадем виждането на физици (квантовата механика е създадена и най-напред активно използвана от физици).

§ 7.1. ХИЛБЕРТОВО ПРОСТРАНСТВО

Да погледнем на принципа на суперпозицията от гледна точка на линейната алгебра. Интересуваме се от физичната величина (динамична променлива или наблюдаема) f . От експеримента знаем собствените ѝ стойности $f_1, f_2, \dots, f_n$, измерени в съответните собствени състояния $\psi_{f_1}, \psi_{f_2}, \dots, \psi_{f_n}$. Съвкупността от всички вълновите функции, можем да разглеждаме като линейно векторно пространство, по осите на което нанасяме самите функции. Вълновите функции са квадратично интегрируеми и те образуват безкрайномерно хилбертово пространство. Отговарят на 3-те условия за линейно векторно пространство (вж. краткото изложение в [2, § 1]).

Вълновите функции са базиси на това пространство. В хилбертовото пространство подобно на скаларното произведение $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$ на два вектора $\mathbf{a}$ и $\mathbf{b}$ ще въведем скаларно произведение на две функции φ и ψ :

$$(\varphi, \psi) = \int \varphi^* \psi dV. \quad (7.1)$$

Ще продължим аналогията. Както два ортогонални вектора в реалното пространство имат нулево скаларно произведение $\mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_k = 0$ (при $\mathbf{x}_i \perp \mathbf{x}_k$, $i \neq k$), така и скаларното произведение на две различни базисни функции от линейното пространство е нула

$$(\psi_{f_i}, \psi_{f_k}) = 0, \quad i \neq k. \quad (7.2)$$

Когато $i = k$, скаларното произведение съгласно условието за нормировка на вълновите функции е равно на единица:

$$(\psi_{f_k}, \psi_{f_k}) = \int \psi_{f_k}^* \psi_{f_k} dV = \int |\psi_{f_k}|^2 dV = 1. \quad (7.3)$$

Равенствата (7.2) и (7.3) могат да бъдат обединени:

$$(\psi_{f_i}, \psi_{f_k}) = \delta_{ik}, \quad \delta_{ik} = \begin{cases} 1, & i = k, \\ 0, & i \neq k. \end{cases} \quad (7.4)$$

Тук δ_{ik} е символът на Кронекер. Собствените функции на една физична величина образуват ортонормирана система от функции. (Условието за ортонормираност на вълнови функции, които описват непрекъснатата величина, се обсъжда в § 7.5.)

Въобще множеството от квадратично интегрируеми функции ψ образува безкрайномерно хилбертово пространство, в което е определено скаларното произведение (7.1).

Всяко състояние ψ може да бъде разложено по базисите на линейното пространство

$$\psi = \sum_l C_l \psi_{f_l}. \quad (7.5)$$

От условието за нормировка, като използваме (7.5), получаваме

$$\begin{aligned} \int \psi^* \psi dV &= \int \left(\sum_k C_k^* \psi_{f_k}^* \sum_l C_l \psi_{f_l} \right) dV = \\ &= \sum_{k,l} C_k^* C_l \int \psi_{f_k}^* \psi_{f_l} dV = \sum_{k,l} C_k^* C_l \delta_{kl} = \sum_k |C_k|^2 = 1. \end{aligned} \quad (7.6)$$

Вече подчертахме, че коефициентите C_k са произволни, но те са нормирани. Условието за нормировка на коефициентите е

$$\sum_k |C_k|^2 = 1. \quad (7.7)$$

Очевидно $|C_k| \leq 1$. Математически условието $\int \psi^* \psi dV = \sum_k |C_k|^2 = 1$ е условие за пълнота на базиса. (Любознателният читател ще намери кратко и сбито изложение на векторните пространства в [4].)

§ 7.2. СРЕДНИ СТОЙНОСТИ НА ДИНАМИЧНИТЕ ПРОМЕНЛИВИ И ОПЕРАТОРИ

В един курс по квантова механика на високо университетско и математично ниво операторите се въвеждат като постулат. Но съвременната физика е общофизически курс и с този параграф искаме да покажем защо физиците са стигнали до възможността да описват физичните величини в квантовата механика с оператори.

В опитите с дифракция на електрони се убедихме, че импулсите им след отвор (отворите) са различни. Импулсът на отделен електрон е непредсказуем. Динамичната променлива може едновременно да притежава различни стойности и при опитите за нейното измерване могат да се получат всяка една от тези стойности с определена вероятност. В редица случаи възниква въпросът, какъв ще бъде средният резултат от многото опити по измерване на стойността на динамичната променлива. Можем ли да намерим средния импулс на електроните? Това е частен случай от по-общ въпрос. Нека системата се намира в несобствено състояние $\psi(\mathbf{r})$ и да измерваме величината f със собствени стойности $f_1, f_2, \dots, f_n$ и с вероятности $W_1, W_2, \dots, W_n$. Въпросът е как можем да намерим нейната средна стойност $\bar{f}$. По определение тя е

$$\bar{f} = \sum_k W_k f_k, \quad (7.8)$$

което съгласно (6.43) може да се запише така:

$$\bar{f} = \sum_k |C_k|^2 f_k = \sum_k C_k C_k^* f_k. \quad (7.9)$$

Коефициентът C_k „описва относителното тегло“ на собственото състояние ψ_k в разглежданото несобствено ψ . Да определим C_k чрез вълновите функции ψ_k и ψ . За целта да намерим скаларното им произведение

$$(\psi_k, \psi) = \int \psi_k^* \psi dV = \int \psi_k^* \sum_i C_i \psi_i dV = \int \psi_k^* C_k \psi_k dV = C_k. \quad (7.10)$$

Вземайки комплексно спрегнатото, за C_k^* получаваме

$$C_k^* = \int (\psi_k^* \psi)^* dV = \int \psi_k \psi^* dV = (\psi, \psi_k). \quad (7.11)$$

Заместваме C_k^* в (7.8):

$$\bar{f} = \sum_k C_k f_k \int \psi_k \psi^* dV = \int \psi^* \sum_k C_k f_k \psi_k dV. \quad (7.12)$$

Ние се интересуваме от състоянието $\psi = \sum C_k \psi_k$. Да положим, че функцията $\sum C_k f_k \psi_k$ в подинтегралния израз на (7.2) се получава в резултат на математическа операция над ψ , т.е.

$$\hat{f}\psi \equiv \sum_k C_k f_k \psi_k. \quad (7.13)$$

С $\hat{f}$ означаваме оператор. За средната стойност $\bar{f}$ от (7.5) получаваме

$$\bar{f} = \int \psi^*(\mathbf{r}) \hat{f} \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (7.14)$$

За намирането на средната стойност на f в несобствено състояние е достатъчно да знаем вълновата функция $\psi(\mathbf{r})$ и оператора $\hat{f}$.

Когато разглежданата система се намира в собствено i -то състояние, тя се описва със собствената вълнова функция ψ_i :

$$\psi = \psi_i, \quad C_i = 1, \quad C_k = 0, \quad k \neq i \quad (7.15)$$

и тогава съгласно (7.13) имаме

$$\hat{f}\psi_i = f_i \psi_i. \quad (7.16)$$

В квантовата механика на всяка физична величина се съпоставя оператор. Между операторите на физичните величини съществуват същите релации и тъждества, които са в сила за съответните класически величини. Тези твърдения представляват вторият постулат на квантовата механика; да припомним първия – състоянието на квантовомеханичен обект се описва с вълнова функция.

Въпросът за съответствието между опитно измерваните физични величини и известни математически категории е основен за всяка физична теория. Но самата физика не може да определи кои математически категории се съпоставят на физичните величини. В класическата механика това са скалари, вектори и тензори в реалното пространство. „Нагледността и осезаемостта“ на класическите явления естествено, почти интуитивно, са довели до това съответствие. В квантовата механика, където интуитивността отсъства, до осъзнаването на факта, че на квантовомеханичните величини се съпоставят оператори, е изминат дълъг и труден път.

Ще разгледаме два примера за оператори. Нека вземем координатата x , която е непрекъсната величина. Тогава средната стойност на x в състояние $\psi(x)$ съгласно (7.8) е

$$\bar{x} = \int_{x_1}^{x_2} x dW(x) = \int_{x_1}^{x_2} x |\psi(x)|^2 dx = \int_{x_1}^{x_2} \psi^*(x) x \psi(x) dx. \quad (7.17)$$

От друга страна, според (7.14)

$$\bar{x} = \int_{x_1}^{x_2} \psi^*(x) \hat{x} \psi(x) dx. \quad (7.18)$$

От сравнението на (7.17) и (7.18) става ясно, че операторът $\hat{x}$ действа на ψ чрез умножение по x , или нестрого можем да кажем, че операторът на координатата x е равен на нейната стойност:

$$\hat{x}\psi = x\psi, \quad \hat{x} \rightarrow x. \quad (7.19)$$

Описаният начин за намиране на средната стойност на величината x обаче е неприложим за импулса p_x на частицата и величините, които зависят от импулса. По аналогия със (7.17) бихме записали

$\bar{p}_x = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* p_x \psi dx$. Тази формула не отчита принципа за неопределеност (вж. § 6.3). Работата е в това, че за извършване на интегрирането импулсът p_x трябва да се изрази като функция на x , но съгласно принципа за неопределеност такава функция $p(x)$ не съществува: щом определим точно стойността на x , то съгласно съотношението $\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2$ (вж. 6.26) по принцип не можем да определим точната стойност на p_x .

До начина за оценка на $\bar{p}_x$ можем да стигнем, диференцирайки по x вълновата функция на свободна частица с импулс p_x :

$$\psi_{p_x} = A \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (Et - p_x x) \right]. \quad (7.20)$$

Тъй като това е собствено състояние, вероятността микрочастицата да има импулс p_x е $|C_{p_x}|^2 = 1$ и съгласно (7.16)

$$\hat{p}_x \psi_{p_x}(x) = p_x \psi_{p_x}(x). \quad (7.21)$$

Диференцирайки (7.20) по x , получаваме

$$\frac{\partial}{\partial x} \psi_{p_x} = \frac{ip_x}{\hbar} \psi_{p_x} \quad \text{или} \quad \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{p_x} = p_x \psi_{p_x}. \quad (7.22)$$

От сравняването на (7.22) с (7.21) за оператора на x -компонентата на импулса получаваме

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \quad (7.23)$$

Останалите две компоненти на импулса се записват по аналогичен начин (вж. § 8.1).

§ 7.3. ОПЕРАТОРИ В КВАНТОВАТА МЕХАНИКА

В най-общ смисъл *операторът е правило, чрез което на една функция се съпоставя друга функция, т.е.*

$$\psi = \hat{A}\varphi, \quad \hat{A} - \text{оператор.} \quad (7.24)$$

Операторът $\hat{A}$ е линеен, ако се изпълнява условието

$$\hat{A}[C_1 u(x) + C_2 v(x)] = C_1 \hat{A}u(x) + C_2 \hat{A}v(x), \quad (7.25)$$

където C_1 и C_2 са произволни константи, а $u(x)$ и $v(x)$ са две произволни функции. Резултатът от действието на оператора върху линейна комбинация от двете функции е равен на линейна комбинация от действието на оператора върху всяка една от функциите.

Операторът $\hat{C}$ е сума от операторите $\hat{A}$ и $\hat{B}$, ако

$$\hat{C}\psi = \hat{A}\psi + \hat{B}\psi \quad (7.26a)$$

или символично записано

$$\hat{C} = \hat{A} + \hat{B}. \quad (7.26b)$$

Операторът $\hat{C}$ е произведение (композиция) на два оператора $\hat{A}$ и $\hat{B}$, ако

$$\hat{C}\psi = \hat{A}\hat{B}\psi \Rightarrow \hat{C} = \hat{A}\hat{B}. \quad (7.27)$$

Произведението на два оператора зависи от реда на множителите.

Например, ако $\hat{A} = i \frac{\partial}{\partial x}$ и $\hat{B} = x$, тогава

$$\begin{aligned} \hat{C}\psi &= \hat{A}(\hat{B}\psi) = i \frac{\partial}{\partial x}(x\psi) = i\psi + ix \frac{\partial \psi}{\partial x} = \left(i + ix \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi, \\ \hat{C}'\psi &= \hat{B}(\hat{A}\psi) = ix \frac{\partial \psi}{\partial x} = \left(ix \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi. \end{aligned} \quad (7.28)$$

Очевидно е, че $\hat{C} \neq \hat{C}'$, т.е. $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$. Алгебрата на линейните оператори в квантовата механика е алгебра на некомутиративни величини. Важно място в нея заема понятието комутатор. *Комутаторът на два оператора $\hat{A}$ и $\hat{B}$ се означава с $[\hat{A}\hat{B}]$ и се определя от разликата на произведенията $\hat{A}\hat{B}$ и $\hat{B}\hat{A}$:*

$$[\hat{A}\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}. \quad (7.29)$$

Ако операторът, т.е. комутаторът е нула, $\hat{A}$ и $\hat{B}$ са комутиращи оператори, ако $[\hat{A}\hat{B}] \neq 0$ – некомутиращи. Два оператора от различни

променливи са винаги комутиращи. Произволен оператор винаги комутира с константа и със себе си.

Ако два оператора удовлетворяват условието

$$\int u^*(x) \hat{A} v(x) dx = \int v(x) \hat{B}^* u^*(x) dx \quad (7.30)$$

те се наричат спрегнати или конюговани (да подчертаем, че функциите $u(x)$ и $v(x)$ са произволни. Когато $\hat{A} = \hat{B}$, тогава (7.30) преминава в

$$\int u^*(x) \hat{A} v(x) dx = \int v(x) \hat{A}^* u^*(x) dx \quad (7.31)$$

и операторът $\hat{A}$ се нарича самоспрегнат или ермитов.

И накрая ще отбележим, че ако $\hat{A}$ и $\hat{B}$ са ермитови оператори, то тяхното произведение в общия случай не е ермитов оператор. То винаги може да бъде представено в следния вид:

$$\hat{C} = \hat{A}\hat{B} = \frac{1}{2}(\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}) + \frac{1}{2}(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) \quad \text{или} \quad (7.32)$$

$$\hat{C} = \hat{F} + \hat{G}, \quad \hat{F} = \frac{1}{2}(\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}), \quad \hat{G} = \frac{1}{2}(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}).$$

Операторът $\hat{F}$ е ермитов, $\hat{G}$ не е ермитов, но $i\hat{G}$ е ермитов:

$$i\hat{G} = \frac{i}{2}(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}). \quad (7.33)$$

Произведението на ермитов оператор $\hat{A}$ с константа, както и квадратът му — $\text{const} \hat{A}$ и $\hat{A}^2$, са ермитови оператори. Функция, зависеща само от координатите, е ермитов оператор. Сумата и разликата от два ермитови оператора са също ермитови оператори.

§ 7.4. СОБСТВЕНИ ФУНКЦИИ И СОБСТВЕНИ СТОЙНОСТИ НА ОПЕРАТОРИ

Да се позовем на уравнение (7.16) и разгледаме случая, когато в резултат на действието на оператора $\hat{f}$ върху функцията ψ последната се умножава по числото f :

$$\hat{f}\psi = f\psi. \quad (7.34)$$

Математически (7.34) представлява уравнение за неизвестната функция ψ . Решението му ще получим, като добавим граничните условия. Това уравнение има решение не за всяко число f . *Функциите, които са решение на уравнение (7.34), се наричат собствени функции*

на оператора $\hat{f}$, а числата f , при които то има решение – собствени стойности на оператора.

Тук е мястото да направим връзка между физическите понятия „собствени функции и собствени стойности на физична величина“, въведени в гл. 6, и математичните понятия „собствени функции и собствени стойности на оператор“, току-що въведени. Спомняме си, че при възпроизводими измервания на величината f описваме системата със собствени функция на величината $f - \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$. При измерването получаваме съответно стойностите $f_1, f_2, \dots, f_n$, които нарекохме собствени стойности на физичната величина f . Математически представяме величината f с оператора $\hat{f}$. Той има собствени функции на оператора $\hat{f}$ (те се оказват собствени функции $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$ на величината f) и собствени стойности на оператора $\hat{f}$ (те се оказват собствени стойности $f_1, f_2, \dots, f_n$ на величината f). Собствените функции на оператора $\hat{f}$ са собствени функции на физичната величина f , а собствените стойности на оператора $\hat{f}$ са собствени стойности на физичната величина f !

Примери: а) вълновата функция ψ на свободна частица удовлетворява уравнението $\hat{p}_x \psi = p_x \psi$ и е собствена функция на оператора $\hat{p}_x$; б) измерваните стойности на енергията на водороден атом $E_n = -R/n^2$ ((5.9) при $Z=1$) са решения на уравнението $\hat{H}\psi = E_n \psi$ и E_n са собствени стойности на оператора на Хамилтон $\hat{H}$ за H-атом (вж. § 12.7)).

Собствените функции на ермитовите оператори са ортогонални. Ще докажем това. Нека ψ_i и ψ_k са две от собствените функции на оператора $\hat{f}$, а f_i и f_k са техните собствени стойности. Тогава можем да запишем уравнението (7.34) за ψ_k и комплексно спрегнатото за ψ_i :

$$\begin{aligned}\hat{f}\psi_k &= f_k\psi_k, \\ \hat{f}^*\psi_i^* &= f_i\psi_i^*.\end{aligned}\tag{7.35}$$

Умножаваме първото уравнение по ψ_i^* , а второто по ψ_k , изваждаме получените уравнения и интегрираме по променливата x :

$$\int \psi_i^* \hat{f} \psi_k dx - \int \psi_k \hat{f}^* \psi_i^* dx = \int (f_k - f_i) \psi_i^* \psi_k dx.\tag{7.36}$$

По силата на ермитовостта на операторите лявата част е равна на нула:

$$\int (f_k - f_i) \psi_i^* \psi_k dx = 0.\tag{7.37}$$

Тъй като $f_i \neq f_k$, от (7.37) следва условието за ортогоналност:

$$\int \psi_i^* \psi_k dx = 0 \quad i \neq k. \quad (7.38)$$

Като добавим и условието за нормировка, получаваме, че *собствените функции на ермитов оператор образуват ортонормирана система* (7.4):

$$\int \psi_i^* \psi_k dx = \delta_{ik}. \quad (7.39)$$

При непрекъснатата величина условието за ортонормираност на собствените функции на ермитов оператор е дадено в § 7.5.

Съвкупността от собствени функции на един ермитов оператор образува пълна система. Всяка вълнова функция може да се представи като линейна комбинация от собствените функции:

$$\psi(x) = \sum_i C_i \psi_i(x). \quad (7.40)$$

В § 6.6 предпологахме възможността за такова разлагане. Сега, основавайки се на свойствата на линейните ермитови оператори, можем да твърдим, че такова разлагане е винаги възможно.

Уравнение (7.21) е пример за това, че при действието на оператор (за (7.21) на оператора на импулса) върху вълновата функция ψ се получава реално число по ψ . В квантовата механика се използват само такива оператори, за които при действие върху вълновата функция се получава реално число по вълновата функция:

$$\hat{f}\psi = f\psi. \quad (7.41)$$

Не всички оператори са подходящи за квантовата механика. За да отразяват адекватно свойствата на микросвета, те трябва да отговарят на някои условия. *Първо, операторите трябва да удовлетворяват принципа на суперпозицията* (§ 6.6). *Второ, както се вижда от (7.35), при действие на оператора върху вълновата функция се получава реално число. На първото изискване отговарят линейни оператори, а на второто – ермитови.* Това, че операторите на физичните величини са ермитови е III постулат на квантовата механика (вж. § 9.5).

Разполагайки с математическия апарат на операторите и техните собствени функции и стойности, ние сме в състояние да отговорим на въпроса, могат ли две физични величини M и N да бъдат измерени едновременно. Нека вълновата функция на състоянието е ψ_i и тя е собствена функция на операторите $\hat{M}$ и $\hat{N}$, т.е.

$$\hat{M}\psi_i = M_i\psi_i, \quad \hat{N}\psi_i = N_i\psi_i. \quad (7.42)$$

Действаме на второто уравнение с оператора $\hat{M}$, а на първото с оператора $\hat{N}$ и от първия резултат изваждаме втория:

$$\begin{aligned} \hat{M}\hat{N}\psi_i - \hat{N}\hat{M}\psi_i &= N_i\hat{M}\psi_i - M_i\hat{N}\psi_i = N_iM_i\psi_i - M_iN_i\psi_i \\ &= (N_iM_i - M_iN_i)\psi_i = 0. \end{aligned} \quad (7.43)$$

Условието е в сила при произволна вълнова функция и следователно

$$\hat{M}\hat{N} - \hat{N}\hat{M} = [\hat{M}, \hat{N}] = 0. \quad (7.44)$$

Две физични величини са едновременно измерими, ако техните оператори комутират.

§ 7.5. ПРИНЦИП НА ХАЙЗЕНБЕРГ

Знаем, че състоянието на една система се описва с вълнова функция, а физичните величини – с оператори. *Когато измерването на една величина е възпроизводимо, в експеримента се получават собствените стойности на нейния оператор, а вълновата функция на състоянието е собствена функция на оператора. В този случай физичната величина е определена. Когато измерването е невъзпроизводимо, получаваме различни стойности, но винаги една от собствените на оператора на величината.* Самата величина е неопределена. Две величини са съвместими, т.е. едновременно измерими, когато техните оператори комутират. Съвкупността от общи собствени функции на тези величини образува пълна система от функции.

Когато операторите на две величини A и B не комутират, те са неопределени. Нека комутаторът на ермитовите оператори $\hat{A}$ и $\hat{B}$ на двете величини удовлетворява съотношението

$$\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = i\hat{C}, \quad (7.45)$$

където $\hat{C} = (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})/i$ е ермитов оператор (вж. (7.33)). Съществува ли връзка между неопределеностите на двете физични величини и в състоянието $\psi(x)$?

Ще характеризираме неопределеностите на двете величини с възможно минималното произведение на флуктуациите им. Като мярка за отклонението на измерваните стойности на A и B от средните им ще изберем средните квадратични отклонения (дисперсиите)

$\Delta A = \sqrt{\delta A^2}$ и $\Delta B = \sqrt{\delta B^2}$. При това

$$\begin{aligned} \delta A &= A - \bar{A}, & \overline{\delta A^2} &= \overline{A^2} - 2\overline{A\bar{A}} + \bar{A}^2 = \overline{A^2} - \bar{A}^2, \\ \delta B &= B - \bar{B}, & \overline{\delta B^2} &= \overline{B^2} - 2\overline{B\bar{B}} + \bar{B}^2 = \overline{B^2} - \bar{B}^2. \end{aligned} \quad (7.46)$$

Без да нарушаваме общността, полагаме

$$\bar{A} = 0, \quad \bar{B} = 0. \quad (7.47)$$

Това е въпрос на избор на координатна система и на начална точка на отчитане. При такова полагане стойностите на величините A и B са равни на техните отклонения:

$$A = \delta A, \quad B = \delta B. \quad (7.48)$$

За да намерим връзката между неопределеностите δA и δB , разглеждаме интеграла

$$I(\alpha) = \int \left| (\alpha \hat{A} - i\hat{B})\psi \right|^2 dx, \quad (7.49)$$

където α е произволно реално число, а интегралът $I(\alpha) \geq 0$.

Представяме подинтегралната функция като произведение от комплексно спрегнати множители и отчитаме свойството (7.30) на ермитовите оператори $\hat{A}$ и $\hat{B}$:

$$\begin{aligned} I(\alpha) &= \int (\alpha \hat{A} - i\hat{B})\psi (\alpha \hat{A}^* + i\hat{B}^*)\psi^* dx = \\ &= \int (\alpha \hat{A} - i\hat{B})\psi \alpha \hat{A}^* \psi^* dx + i \int (\alpha \hat{A} - i\hat{B})\psi \hat{B}^* \psi^* dx = \\ &= \int \psi^* \alpha \hat{A} (\alpha \hat{A} - i\hat{B})\psi dx + \int \psi^* i\hat{B} (\alpha \hat{A} - i\hat{B})\psi dx = \\ &= \int \psi^* \left[\alpha^2 \hat{A}^2 - i\alpha (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) + \hat{B}^2 \right] \psi dx = \\ &= \int \psi^* \left[\alpha^2 \hat{A}^2 + \alpha \hat{C} + \hat{B}^2 \right] \psi dx = \alpha^2 \overline{A^2} + \alpha \overline{C} + \overline{B^2}. \end{aligned} \quad (7.50)$$

При извода отчетохме (7.45).

Необходимо и достатъчно условие интегралът

$$I(\alpha) = \alpha^2 \overline{A^2} + \alpha \overline{C} + \overline{B^2}, \quad (7.51)$$

който е квадратен тричлен по отношение на α , да е положителен, е дискриминантата на тричлена да е отрицателна

$$4\overline{\delta A^2} \overline{\delta B^2} \geq \overline{C}^2 \Rightarrow \overline{\delta A^2} \overline{\delta B^2} \geq \frac{1}{2} \overline{C}^2 \Rightarrow \Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\overline{C}|. \quad (7.52)$$

Условието (7.52) се нарича **съотношение на Хайзенберг** за несъвместими величини. То дава връзката между неопределеностите при измерванията и затова още се нарича **съотношение за неопределеност**. Колкото по-точно измерваме едната величина, толкова по-неопределена се оказва другата и обратно. Съотношението за неопределеност е следствие от основните принципи на квантовата механика и е в сила за двойка физични величини, чиито оператори не комутират.

Да разгледаме един конкретен пример с координатата y и компонентата p_y на импулса. Операторите на тези динамични променливи не комутират и те се подчиняват на принципа на Хайзенберг. Съгласно § 7.2 ($\hat{y} = y$, $\hat{p}_y = -i\hbar \partial / \partial y$) операторът $\hat{C}$ в този случай е

$$\hat{C} = \frac{y\hat{p}_y - \hat{p}_y y}{i} = \hbar \quad (7.53)$$

и съотношението на Хайзенберг се записва в следния вид:

$$\Delta y \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (7.54)$$

Произведението от средните квадратични отклонения на координатата и съответната компонента на импулса е по-голямо или равно на $\hbar/2$. Очевидно невъзможно е да осъществим опит, в който едновременно $\Delta p_y \equiv \sqrt{\delta p_y^2} = 0$ и $\Delta y \equiv \sqrt{\delta y^2} = 0$. Локализацията на частицата води до увеличаване на неопределеността на импулса, а частицата с определен импулс е размазана в пространството.

Горният резултат е много близък с оценката (6.25) в § 6.3 на координатата и импулса в експеримента по дифракция на електрон от процеп (фиг. 6-2). Там подчертахме, съотношението за неопределеност за координатата и импулса е следствие на специфичността на микрообекта, на неговия дуалистичен характер. И в най-общия случай принципът на Хайзенберг е следствие от този двойствен характер.

§ 7.6. СУПЕРПОЗИЦИЯ НА СЪСТОЯНИЯ С НЕПРЕКЪСНАТА ВЕЛИЧИНА

Импулсът на свободно движеща се частица, който може да приема произволни стойности върху интервала $(-\infty, +\infty)$, е непрекъсната величина. В едномерен случай свободно движение се описва с вълновата функция ψ_p (6.11). Да се опитаме да нормираме ψ_p :

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_p|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |A|^2 dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \rightarrow \infty. \quad (!) \quad (7.55)$$

Въз основа на всички наши разсъждения дотук, основани на опита, стигнахме до заключение, че този интеграл представлява вероятността W да открием частицата върху възможния интервал $(-\infty, +\infty)$, а тук $W \rightarrow \infty$, което е явна физична нелепост. Изходът е намерен от Дирак. Нормировката на непрекъснато изменящи се величини трябва да бъде определена по такъв начин, че да се избавим от тази разходимост. Въпросът не е в изменение на вълновата функция и вероятностното разпределение, а в намиране на условие, което да даде подходяща константа пред вълнова функция: $\text{const } \psi_p(\mathbf{r}, t)$. Във връзка с физическия смисъл на вълновата функция искаме да изберем най-удобна константа. При дискретни величини собствените вълнови функции са ортогонални

$$\int \psi_m^* \psi_n dV = \delta_{mn} = \begin{cases} 1, & m = n, \\ 0, & m \neq n. \end{cases} \quad (7.56)$$

По аналогия със (7.56) Дирак въвежда условие за ортонормираност на вълновата функция на състояние с непрекъсната величина. На две фиксирани стойности на импулса p и p' ще съответстват функциите $\psi_p(x, t)$ и $\psi_{p'}(x, t)$. Тогава аналогично на (7.56) имаме

$$\int \psi_{p'}^* \psi_p dx = \delta(p - p'), \quad (7.57)$$

където $\delta(p - p')$ е специална обобщена функция, наречена *делта-функция на Дирак*. Тя притежава следните свойства:

1. $\delta(x - a) = \begin{cases} 0, & x \neq a, \\ \infty, & x = a; \end{cases}$
2. $\int_{x_1}^{x_2} \delta(x - a) dx = \begin{cases} 1, & x_1 \leq a \leq x_2, \\ 0, & a < x_1 \text{ или } a > x_2; \end{cases}$
3. $\int_{x_1}^{x_2} F(x) \delta(x - a) dx = F(a);$
4. $\delta(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dx;$
5. $x\delta(x) = 0.$

Ще подчертаем, че делта-функцията широко се използва в квантовата механика и редица пресмятания в нея съществено се опростяват с помощта на тази обобщена функция.

Използвайки условието за нормировка (7.58) и свойството (4.) на δ -функцията, определяме коефициента A на функцията ψ_p от (7.11):

$$\begin{aligned} \delta(p - p') &= \int_{-\infty}^{\infty} A^* A \exp \left[-i \left(\frac{Et}{\hbar} - \frac{px}{\hbar} \right) \right] \exp \left[i \left(\frac{Et}{\hbar} - \frac{p'x}{\hbar} \right) \right] dx \\ &= \hbar \int_{-\infty}^{\infty} |A|^2 \exp \left[i(p - p') \frac{x}{\hbar} \right] d \left(\frac{x}{\hbar} \right) = \hbar |A|^2 2\pi \delta(p - p') \Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{2\pi \hbar}}. \end{aligned} \quad (7.58)$$

Окончателно за нормираната вълнова функция на вълна на Дьо Бройл, разпространяваща се по оста X , получаваме

$$\psi_p(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi \hbar}} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (Et - px) \right]. \quad (7.59)$$

Във векторен вид нормираната вълнова функция придобива вида

$$\psi_p(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi \hbar)^{3/2}} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}) \right]. \quad (7.60)$$

Суперпозицията от състояния с непрекъснат импулс представяме аналогично на суперпозиция от дискретни състояния, като заменяме сумирането с интегриране:

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} C(p) \psi_p(x, t) dp = A \int_{-\infty}^{\infty} C(p) \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(Et - px)\right] dp \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(p, t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right) dp,\end{aligned}\quad (7.61)$$

където положихме $\varphi(p, t) \equiv C(p) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Et\right)$. Като знаем функцията $\varphi(p, t)$, т.е. $C(p)$, можем да определим $\psi(x, t)$. Ако знаем $\psi(x, t)$, можем да определим $\varphi(p, t)$. Затова е достатъчно да си спомним преобразуванията на Фурие (Fourier) за функциите $U(k)$ и $V(x)$:

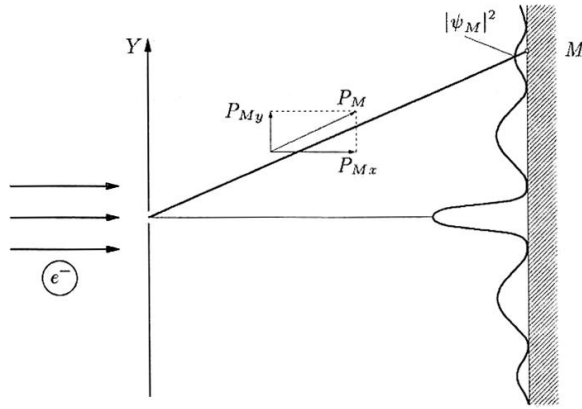
$$\begin{aligned}U(k) &= \left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} V(x) \exp(-i\alpha kx) dx, \\ V(x) &= \left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} U(k) \exp(i\alpha kx) dk.\end{aligned}\quad (7.62)$$

Съгласно тези преобразувания от (7.59) получаваме

$$\varphi(p, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} px\right) dx. \quad (7.63)$$

Тъй като познаването на функцията $\varphi(p, t)$ позволява еднозначно да получим $\psi(x, t)$, то $\varphi(p, t)$ определя състоянието на системата. Тя е пълноправна вълнова функция. Тя зависи от импулса и е определена в „импулсното пространство“ за разлика от $\psi(x, t)$, която е определена в реалното пространство. Така че вълновата функция $\varphi(p, t)$ (или $C(p)$) определя вероятностното разпределение на импулсите на частиците.

От една страна, почерняването на фотоплаката в точката M е пропорционално на броя на частиците с координата x_M , т.е. $\propto |\psi(x_M, t)|^2 dx \equiv |\psi_M|^2 dx$ (фиг. 7-1). От друга страна, почерняването е пропорционално на вероятността частиците да имат импулс p_M , т.е. $\propto |\varphi(p_M, t)|^2 dp$. Така че с еднакъв успех можем да използваме вълновата функция и в координатно представяне $\psi(x, t)$, и в импулсно $\varphi(p, t)$. Координати



Фиг. 7-1. Почерняването в т. M е пропорционално на частиците с координати x_M – $\propto |\psi(x_M, t)|^2 dx$. Но то също така може да бъде определено от броя на частиците с импулс p_M , който е пропорционален на $|\varphi(p_M, t)|^2 dp$.

те и импулсите не са привилегирани динамични променливи и вълновата функция може да бъде изразена в пространството на други величини – например на енергията, момента на импулса и т.н. От гледна точка на линейната алгебра, вълновите функции, зависещи от координатите, не са единственият базис на съответното хилбертово пространство – безброй много различни пълни ортонормирани системи могат да играят ролята на базис. Представянията са разгледани по-подробно в следващия параграф.

§ 7.7. ЕЛЕМЕНТИ ОТ ТЕОРИЯТА НА ПРЕДСТАВЯНИЯТА

В § 7.6 се докоснахме до много важен въпрос от квантовата механика – състоянието на системата може да се описва с две различни функции $\psi(x)$ и $C(p)$ (или $\varphi(p)$). По същество това е една вълнова функция в *различни представяния*. Състоянието на системата, описвана от вълновата функция $\psi(x)$, може да бъде представено като суперпозиция от собствените състояния на свободно движещи се частици с импулс p , които се описват с функцията $\psi_p(x)$ от вида (7.60):

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} C(p) \psi_p(x) dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} C(p) \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right) dp, \quad (7.64)$$

където

$$C(p) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \psi_p^*(x) dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} px\right) dx, \quad (7.65)$$

Функцията $\psi(x)$ е вълнова функция в координатно представяне. Ако знаем $\psi(x)$, можем да определим $C(p)$, използвайки (7.65), и, обратно – ако знаем $C(p)$, можем да определим $\psi(x)$ от (7.64), т.е. с еднакъв успех можем да използваме едната или другата функция. Зависимостите (7.64) и (7.65) определят правилата за преобразуване на вълнова функция от едно представяне в друго (в случая от x -представяне в p -представяне) и, обратно, за състояние с непрекъсната физична величина.

Преди да разгледаме вълнова функция в произволно представяне, ще кажем няколко думи за собствените вълнови функции на непрекъсната физична величина A в A -представяне, т.е. в собствено представяне. Досега обикновено сме записвали вълновите функции в координатно представяне. *В собствено представяне те са винаги δ -функции.* Например собствената функция на свободна частица с импулс p' в x -представяне и в p -представяне е съответно:

$$\begin{aligned} \psi_{p'}(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(+\frac{i}{\hbar} p'x\right), & x\text{-представяне;} \\ \varphi_{p'}(p) &= \delta(p - p'), & p\text{-представяне.} \end{aligned} \quad (7.66)$$

Да разгледаме състояние с физична величина M , приемаща дискретни стойности. Операторът $\hat{M}$ на тази величина има собствени функции

$$\psi_1(x), \psi_2(x), \psi_3(x), \dots, \psi_n(x), \dots \quad (7.67)$$

Ще отбележим, че в общия случай броят на ψ -функциите е безкраен (в § 7.1 подчертахме, че те образуват безкрайномерно линейно векторно пространство). Те образуват пълна затворена система, която можем да използваме като базис. Произволната вълнова функция в координатно представяне може да се разложи по този базис (7.5):

$$\psi(x) = \sum_k C_{M_k} \psi_k(x). \quad (7.68)$$

Собствените функции $\psi_k(x)$ са в координатно представяне. Коефициентите еднозначно определят функцията, т.е. еднозначно определят състоянието. В този смисъл те са също вълнова функция, но вълнова функция в M -представяне. (Ако имаме собствените функции $\psi_{f_k}(x)$ на оператора $\hat{f}$, коефициентите C_{f_k} в разлагането $\psi(x) = \sum_k C_{f_k} \psi_{f_k}(x)$ ще определят вълновата функция в f -представяне.) Очевидно вълновата

функция може да се представи като едноколонна матрица (математиците употребяват безкраен вектор–стълб):

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} C_{M_1} \\ C_{M_2} \\ C_{M_3} \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad (7.69)$$

която определя функцията в M -представяне. И така вълновата функция $\psi(x)$ в M -представяне е едноколонна матрица, чиито членове са суперпозиционните коефициенти в разложението на $\psi(x)$ по собствените функции на оператора $\hat{M}$ на величината.

Оказва се, че като използваме преобразуването на Фурие (7.63) (при непрекъснатата величина) или матрицата (7.69), можем да описваме състоянието на системата в различни представяния. Естествено възниква въпросът, как се променя при това операторът на физичната величина?

Операторът $\hat{N}$ на величината N определяме в x -представяне, като изхождаме от зависимостта $N(x, p)$ и преминаваме към операторно записване $-\hat{N}(x, -i\hbar\partial/\partial x)$. Действайки с оператора $\hat{N}$ на функцията $\psi(x)$, получаваме функцията $\varphi(x)$:

$$\varphi(x) = \hat{N}\left(x, -i\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x). \quad (7.70)$$

Тук функциите $\psi(x)$ и операторът $\hat{N}$ са дадени в x -представяне. Да намерим вида на $\hat{N}$ примерно в M -представяне. Нека собствените функции и собствените стойности на оператора $\hat{M}$ са

$$\begin{array}{l} \psi_1(x), \psi_2(x), \psi_3(x), \dots \psi_n(x), \dots \\ M_1, \quad M_2, \quad M_3, \quad \dots M_n, \quad \dots \end{array} \quad (7.71)$$

Разлагаме функциите $\psi(x)$ и $\varphi(x)$ по базиса $\psi_k(x)$:

$$\begin{aligned} \varphi(x) &= \sum_k b_k \psi_k(x), \\ \psi(x) &= \sum_k c_k \psi_k(x). \end{aligned} \quad (7.72)$$

Тук $b_1, b_2, \dots, b_n$ и $c_1, c_2, \dots, c_n$ са функциите $\varphi(x)$ и $\psi(x)$ в M -представяне. След отчитане на (7. 72) уравнение (7. 70) може да се запише във вида:

$$\sum_k b_k \psi_k(x) = \hat{N} \sum_k c_k \psi_k(x), \quad (7. 73a)$$

или

$$\sum_k b_k \psi_k(x) = \sum_k c_k \hat{N} \psi_k(x). \quad (7. 73b)$$

Умножаваме по $\psi_i^*(x)$ и интегрираме по dx . В резултат получаваме

$$\sum_k b_k \int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^*(x) \psi_k(x) dx = \sum_k c_k \int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^*(x) \hat{N} \psi_k(x) dx. \quad (7. 74)$$

Собствените функции на оператора $\hat{M}$ образуват пълна ортонормирана система и интегралът отляво е равен на δ_{ik} . Следователно

$$\sum_k b_k \int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^*(x) \psi_k(x) dx = \sum_k b_k \delta_{ik} = b_i. \quad (7. 75)$$

Полагаме

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^*(x) \hat{N} \psi_k(x) dx \equiv N_{ik}. \quad (7.76)$$

След отчитане на (7.75) и (7.76) релацията (7.74) придобива вида

$$b_i = \sum_k N_{ik} c_k. \quad (7. 77)$$

Тук b_i е функцията $\varphi(x)$ в M -представяне, а c_k – функцията $\psi(x)$ в M -представяне. Логично е да разглеждаме матрицата N_{ik} (7. 76) като оператора $\hat{N}$ в M -представяне, който в явен вид придобива вида

$$\hat{N} = \|N\| \equiv \begin{pmatrix} N_{11} & N_{12} & N_{13} & \dots \\ N_{21} & N_{22} & N_{23} & \dots \\ N_{31} & N_{32} & N_{33} & \dots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}. \quad (7. 78)$$

(Тук $\|N\|$ е матрица, а в гл. 2 $\|\mathbf{v}\|$ е дължина на вектора $\mathbf{v}$.)

Ще подчертаем, че за да получим матричните елементи N_{ik} , т.е. за да получим оператора $\hat{N}$ в M -представяне, е необходимо в (7.76) да използваме собствените функции на оператора $\hat{M}$.

Установихме, че в квантовата механика е възможно на една величина N вместо оператор да съпоставяме матрицата $\|N\|$. Първоначалното развитие на квантовата механика се е базирало на тази идея, предложена от Хайзенберг.

Наред с матрицата $\|N\|$ се разглеждат и следните други матрици:

1. Матрицата $\|N\|^*$ е конюгована на $\|N\|$, ако всеки елемент от $\|N\|^*$ е получен като комплексно спрегнат на съответния елемент от $\|N\|$:

$$\left(\|N\|^*\right)_{ik} = N_{ik}^*. \quad (7.79)$$

2. Матрицата $\|\tilde{N}\|$ е транспонирана на $\|N\|$, ако редовете на $\|\tilde{N}\|$ са получени от стълбовете на $\|N\|$, а стълбовете на $\|\tilde{N}\|$ – от редовете на $\|N\|$:

$$\left(\|\tilde{N}\|\right)_{ik} \equiv \tilde{N}_{ik} = N_{ki}. \quad (7.80)$$

3. Матрицата $\|N\|^{+}$ е конюговано-транспонирана (ермитово спрегната) на $\|N\|$, ако е получена от нея чрез транспониране и конюговане:

$$\left(\|N\|^{+}\right)_{ik} \equiv N_{ik}^{\dagger} = \tilde{N}_{ik}^* = N_{ki}^*. \quad (7.81)$$

4. Самоспрегната или ермитова матрица $\|N\|$ е онази, която е равна на своята транспонирано-конюгована:

$$\|N\| = \|N\|^{\dagger}. \quad (7.82)$$

Ще покажем, че при това условие операторът $\hat{N}$ е ермитов. За всеки елемент на ермитовата матрица можем да запишем

$$N_{ik} = \left(\|N\|^{\dagger}\right)_{ik} = N_{ki}^*. \quad (7.83)$$

Съгласно (7.76) за матричните елементи N_{ik} и N_{ik}^* имаме

$$N_{ik} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^*(x) \hat{N} \psi_k(x) dx, \quad (7.84)$$

$$N_{ki}^* = \left(\int_{-\infty}^{\infty} \psi_k^*(x) \hat{N} \psi_i(x) dx \right)^* = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_k(x) \hat{N}^* \psi_i^*(x) dx.$$

Заместваме в (7.83) и получаваме

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^*(x) \hat{N} \psi_k(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_k(x) \hat{N}^* \psi_i^*(x) dx. \quad (7.85)$$

Това е условието за ермитовост на оператора $\hat{N}$.

А сега да отговорим на въпроса, как изглежда един оператор в своето собствено представяне. Ще изходим от матричните елементи N_{mn} (7.69) на оператора $\hat{N}$. В собствено представяне функциите $\psi_i(x)$ са собствените функции на самия оператор $\hat{N}$. Тогава

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^*(x) \hat{N} \psi_k(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^*(x) N_k \psi_k(x) dx = N_k \delta_{ik}, \quad (7.86)$$

където N_i са собствените стойности на оператора $\hat{N}$.

В собствено представяне матрицата на оператора има диагонален вид, а стойностите на диагоналните елементи са равни на собствените стойности на оператора:

$$\hat{N} = \|N\| = \begin{pmatrix} N_1 & 0 & . & . & . & . \\ 0 & N_2 & 0 & . & . & . \\ . & 0 & N_3 & 0 & . & . \\ . & . & 0 & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . \end{pmatrix}. \quad (7.87)$$

Ще разгледаме два конкретни примера на оператори в собствено представяне – оператора $\hat{N}$ на частица в безкрайно дълбока потенциална яма и оператора $\hat{H}$ на квантов осцилатор.

Енергетичните нива на потенциалната яма (вж. § 10.2), т.е. собствените стойности на хамилтониана, имат следния вид:

$$E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} = n^2 E_1. \quad (7.88)$$

Следователно в E -представяне операторът $\hat{H}$ придобива вида

$$\hat{H} = \|H\| = E_1 \begin{pmatrix} 1 & 0 & . & . & . & . \\ 0 & 4 & 0 & . & . & . \\ . & 0 & 9 & 0 & . & . \\ . & . & 0 & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . \end{pmatrix}. \quad (7.89)$$

За осцилатора (§ 11.1) собствените стойности на енергията са $E_n = \hbar\omega_0(n+1/2)$ и матрицата на хамилтониана в собствено представяне има следния вид:

$$\hat{H} = \|H\| = \hbar\omega_0 \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & . & . & . & . \\ 0 & 3/2 & 0 & . & . & . \\ . & 0 & 5 & 0 & . & . \\ . & . & 0 & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . \end{pmatrix}. \quad (7.90)$$

Прекрасно изложение на основите на теорията на представянията любознателният читател може да намери в [3].

РЕЗЮМЕ

Вълновите функции, които са квадратично интегрируеми функции, образуват безкрайномерно линейно векторно (хилбертово) пространство. Те са базиси на това пространство. В хилбертовото пространство се въвежда скалярно произведение на две функции φ и ψ :

$$(\varphi, \psi) = \int \varphi^* \psi dV.$$

Вълновите функции на една физична величина образуват ортонормирана система от функции:

$$(\psi_{f_i}, \psi_{f_k}) = \delta_{ik}, \quad \delta_{ik} = \begin{cases} 1, & i = k, \\ 0, & i \neq k. \end{cases}$$

В квантовата механика на всяка физична величина се съпоставя оператор. Между операторите на физичните величини съществуват същите релации и тъждества, които са в сила за съответните класически величини.

Не всички оператори са подходящи за квантовата механика. За да отразяват адекватно свойствата на микросвета, те трябва да отговарят на някои условия. Първо, операторите в квантовата механика трябва да удовлетворяват принципа на суперпозицията. Второ, при действие на оператора върху вълновата функция се получава реално число. На първото изискване отговарят линейни оператори, а на второто – ермитови.

Операторът $\hat{A}$ е ермитов, ако удовлетворява условието

$$\int u^*(x) \hat{A} v(x) dx = \int v(x) \hat{A}^* u^*(x) dx .$$

Средната стойност на физичната величина f се определя от нейния оператор и вълновата функция на състоянието

$$\bar{f} = \int \psi^*(\mathbf{r}) \hat{f} \psi(\mathbf{r}) dV.$$

Собствените функции на един ермитов оператор образуват пълна ортонормирана система от функции.

Дисперсиите (средните квадратични отклонения) ΔA и ΔB на две несъвместими величини A и B удовлетворяват принципа за неопределеност (принцип на Хайзенберг) $\Delta A \Delta B \geq |\bar{C}|/2$, където величината C се определя от оператора $\hat{C} = [\hat{A}\hat{B}]/i$. Приложен към координатата x и импулса $p_x - \Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2$, принципът за неопределеност води до неприложимост на понятието траектория в квантовата механика.

Да се позовем на уравнение (7.16) и разгледаме случая, когато в резултат на действието на оператора $\hat{f}$ върху функцията ψ последната се умножава по числото f :

$$\hat{f} \psi = f \psi.$$

Физичните понятия „собствени функции и собствени стойности на физична величина” и математичните понятия „собствени функции и собствени стойности на оператор” изразяват едно и също нещо. При възпроизводими измервания на величината f описваме системата със собствени функция на величината $f - \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$. При измерването получаваме съответно стойностите $f_1, f_2, \dots, f_n$, които са собствени стойности на величината. Математически представяме величината f с оператора $\hat{f}$. Операторът $\hat{f}$ има собствени функции (те са собствени функции $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$ на величината f) и собствени стойности (те са собствени стойности $f_1, f_2, \dots, f_n$ на величината f). Собствените функции на оператора $\hat{f}$ са собствени функции на величината, а

собствените стойности на оператора $\hat{f}$ са собствени стойности на величината!

Две физични величини са едновременно измерими, ако техните оператори комутират.

При състояние с непрекъсната величина условието за ортонормираност на собствените вълнови функции не е като при дискретни величини. Например на две фиксирани стойности на импулса p и p' с функции $\psi_p(x, t)$ и $\psi_{p'}(x, t)$ условието е

$$\int \psi_{p'}^* \psi_p dx = \delta(p - p'),$$

Вълновите функции и операторите на динамична променлива могат да се представят в пространството на произволна наблюдаема, в което за базиси се вземат собствените вълнови функции на тази динамична променлива в пространството на произволната наблюдаема.

Вълновата функция $\psi(x)$ в M -пространството се представя във вид на едноколонна матрица

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} C_{M_1} \\ C_{M_2} \\ C_{M_3} \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix},$$

където коефициентите C_{M_i} се определят от условието:

$$\psi(x) = \sum_k C_{M_k} \psi_k(x).$$

Операторът $\hat{N}$ в x -представяне се определя в M -представяне чрез матрицата

$$\hat{N} = \|N\| = \begin{pmatrix} N_{11} & N_{12} & N_{13} & \dots \\ N_{21} & N_{22} & N_{23} & \dots \\ N_{31} & N_{32} & N_{33} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix},$$

където матричните елементи са

$$N_{ik} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^*(x) \hat{N} \psi_k(x) dx.$$

В собствено представяне матрицата на оператора има диагонален вид, а стойностите на диагоналните елементи са равни на собствените стойности на оператора.

ВЪПРОСИ

1. Какво пространство образуват вълновите функции?
2. Кои са базисите на това пространство?
3. Кои са условията за линейно пространство?
4. Удовлетворява ли съвкупността от вълнови функции условията за линейно пространство?
5. Кое е условието за пълнота на базиса?
6. Как се изразява средната стойност на физична величина чрез: а) суперпозиционните коефициенти C_k ; б) оператора $\hat{y}$?
7. Какви оператори се използват в квантовата механика и защо?
8. Кои оператори са ермитови?
9. Ако два оператора са ермитови, ермитови ли са: а) тяхната сума; б) тяхното произведение?
10. Какво представлява комутаторът на два оператора?
11. Кои функции и кои стойности са собствени на един оператор?
12. Какво се разбира под пълна система от функции?
13. Кое е необходимото и достатъчно условие две величини да са съвместими?
14. Каква е връзката между неопределеностите на две несъвместими физични величини?
15. Какво означава ортонормираност на вълновите функции?
16. Различава ли се условието за ортонормираност на вълновите функции на дискретни и непрекъснати величини?
17. Как Дирак решава въпроса за ортонормираност на вълновите функции на дискретни и непрекъснати величини?
18. Какво значи да представим една динамична променлива в пространството на друга?
19. Как се представят вълновите функции в друго пространство?
20. Какъв е физичният смисъл на вълновата функция $\varphi(p, t)$ в импулсното пространство?
21. Как се представят операторите в произволно пространство?
22. Какъв е видът на матрицата на представянето в собствено представяне на оператора?
23. Представете матрицата на оператора $\hat{H}$ в E -представяне.

ЗАДАЧИ

1. Докажете, че операторът $\hat{p}_x$ е ермитов.

2. Докажете, че за комутатора на оператора $\hat{p}_x$ и на оператора на произволна величина $f(x, y, z)$, зависеща от координатите, се изпълнява условието $\hat{p}_x \hat{f}(x, y, z) - \hat{f}(x, y, z) \hat{p}_x = -\hbar \partial f / \partial x$.
3. Докажете, че ако $\hat{A}$ и $\hat{B}$ са два ермитови оператора, то $\hat{C} = (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) / i \lim_{x \rightarrow \infty}$ също е ермитов.
4. Като имате предвид, че произведението на два ермитови оператора може да се представи като $\hat{A}\hat{B} = (\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A})/2 + (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})/2 \equiv \hat{F} + \hat{G}$, докажете, че операторите $\hat{F}$ и $i\hat{G}$ са ермитови.
5. Докажете, че операторът на $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + E_p(x)$ е ермитов.
6. Получете оператора на Хамилтон за атома на водорода.
7. Получете оператора на Хамилтон за хармоничен осцилатор.