Министерство образования и науки Российской Федерации
Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Кемеровский государственный университет»

Кафедра теоретической физики

Математический аппарат квантовой теории

Учебно-методическое пособие

Составитель: доцент кафедры теоретической физики КемГУ, М.Л. Золотарев

Кемерово 2006

Оглавление

ВВЕДЕНИЕ

Математический аппарат квантовой теории необходим не только для описания различных количественных соотношений внутри теории, но и для точной формулировки самих основных принципов этой теории. При изложении квантовой физики в учебниках обычно используют один из двух методов. Наиболее распространен метод координат или метод представлений, который оперирует с системой чисел, соответствующих фундаментальным величинам теории (волновая квантовая механика Шредингера, матричная квантовая механика Гейзенберга). Преимущество такого изложения заключается в том, что требуемые разделы математики более привычны, такой метод более приспособлен для практических расчетов. Кроме того, именно таким путем шло историческое развитие квантовой физики. Другой метод – символический, непосредственно оперирующий в абстрактной форме с указанными фундаментальными величинами. Он позволяет глубже понять природу явлений, выразить физические законы в ясной и сжатой форме. Но реализация этого метода требует более сложной математики.

Цель данного пособия – познакомить с математическим языком символьного метода, привить некоторые навыки владения им, показать органическую связь с методом координат. Данное пособие впервую очередь предназначено студентам-физикам, впервые знакомящимся с квантовой теорией, поэтому мы не стремились к полной математической строгости. Мы опускали совершенно необходимые для математиков вопросы фактического (а не формального) существования и сходимости обсуждаемых выражений и конструкций (например, формальное использование δ - функции Дирака). Мы также сознательно пошли на упрощение некоторых используемых конструкций (понятие гильбертова пространства, дуальных пространств, спектра оператора и т.п.), чтобы провести ясную аналогию между гильбертовым пространством кет-векторов и хорошо знакомым пространством обычных трехмерных векторов.

Данное пособие является незначительной переработкой аналогичных методических указаний, выпущенных автором в 90-х годах прошлого века [2]. Оно состоит из шести глав, где сначала мы вводим понятие кет- и бра-векторов, понятие гильбертова пространства и его расширения. Определяем операторы в этом пространстве и рассматриваем алгебру операторов. Более подробно останавливаемся на важных для квантовой теории классах операторов. Наряду с абстрактными понятиями, везде рассматриваются и конкретные представления. Далее излагается проблема собственных значений и собственных векторов линейных операторов, более подробно разбирается теория представлений, вводятся и рассматриваются понятия функционала и операторно-числового функционала. Каждая глава пособия содержит упражнения с решением типичных задач. В конце пособия собраны приложения с общими сведениями из теории специальных функций.

1. ГИЛЬБЕРТОВО ПРОСТРАНСТВО

§1. Векторные свойства функций. Понятие кет- и бра-векторов.

Рассмотрим множество однозначных непрерывных комплексных функций от действительных переменных $\Psi_a(x)$. Функции будем различать символом "a", который назовем *индексом функции*. Символ x будет обозначать совокупность действительных переменных и его назовем *индексом представления*. Для простоты мы будем часто понимать под x одну обычную координату, изменяющуюся в пределах $(-\infty;+\infty)$, хотя всю теорию легко обобщить на случай нескольких переменных и переменных другого смысла.

Множество функций одних и тех же аргументов x обладает рядом свойств, аналогичных свойствам обычных трехмерных векторов. Различные функции Ψ_a, Ψ_b, Ψ_k, как и векторы $\vec{a}, \vec{b}$ можно складывать друг с другом, причем:

1. Сложение коммутативно	$\vec{a}+\vec{b}=\vec{b}+\vec{a}$	$\Psi_a+\Psi_b=\Psi_b+\Psi_a$
2. Сложение ассоциативно	$\vec{a}+(\vec{b}+\vec{k})=(\vec{a}+\vec{b})+\vec{k}$	$\Psi_a+(\Psi_b+\Psi_k)=(\Psi_a+\Psi_b)+\Psi_k$
3. Как и нулевой вектор, существует нулевая функция	$\vec{a}+\vec{0}=\vec{a}$	$\Psi_a+0=\Psi_a$
4.Существует противоположная функция (как и обратный вектор)	$\vec{a}+(-\vec{a})=\vec{0}$	$\Psi_a+(-\Psi_a)=0$

Функции можно умножать на комплексные числа C_1, C_2 ..., (как векторы – на действительные), причем:

5. Умножение ассоциативно	$C_1\cdot(C_2\cdot\vec{a})=(C_1\cdot C_2)\cdot\vec{a}$	$C_1\cdot(C_2\cdot\Psi_a)=(C_1\cdot C_2)\cdot\Psi_a$
6. Определено умножение на единицу	$1\cdot\vec{a}=\vec{a}$	$1\cdot\Psi_a=\Psi_a$

Операции сложения и умножения связаны между собой дистрибутивными законами:

7.	$(C_1+C_2)\cdot\vec{a}=C_1\cdot\vec{a}+C_2\cdot\vec{a}$	$(C_1+C_2)\cdot\Psi_a=C_1\cdot\Psi_a+C_2\cdot\Psi_a$
8.	$C\cdot(\vec{a}+\vec{b})=C\cdot\vec{a}+C\cdot\vec{b}$	$C\cdot(\Psi_a+\Psi_b)=C\cdot\Psi_a+C\cdot\Psi_b$

Таким образом, как и векторы, множество функций одинакового аргумента образуют линейное векторное пространство, а сами функции являются "векторами" этого пространства, независимо от конкретного смысла их аргументов. Для того чтобы явно выделить векторные свойства функций, Дирак предложил использовать скобочный символ и специальное название – *кет-вектор*. Обозначение внутри скобочного символа указывает на определенный кет-вектор. Например, кет-вектор, который соответствует функции с индексом a ($\Psi_a(x)$), записывается в виде $|a\rangle$.

Численно, обычный вектор можно задать через его координаты, которые удобно записывать упорядоченными в виде столбца. Например, в декартовой системе координат

$$\vec{a}=a_x\cdot\vec{i}+a_y\cdot\vec{j}+a_z\cdot\vec{k}\rightarrow\begin{pmatrix}a_x\\a_y\\a_z\end{pmatrix} \tag{1.1}$$

Аналогично, кет-вектор $|a\rangle$, соответствующий функции $\Psi_a(x)$, можно представить в виде бесконечного столбца из значений функции в каждой "точке" x:

$$|a\rangle \to \begin{pmatrix} \cdot \\ \cdot \\ \Psi_a(x) \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix} \qquad (1.2)$$

т.е. роль координат кет-вектора $|a\rangle$ играют все значения функции $\Psi_a(x)$.

Наряду с данным линейным пространством кет-векторов можно ввести так называемое "дуальное" пространство, которое получается, если каждому кет-вектору $|a\rangle$ сопоставить, как говорят, сопряженный ему вектор, который обозначим символом $\langle a|$ и назовем *бра-вектором*. Бра-вектор получается из кет-вектора операцией эрмитова сопряжения, т.е. транспонированием и комплексным сопряжением:

$$\langle a| \equiv |a\rangle^{+} \to (\ldots\Psi_a^{*}(x)\ldots) \qquad (1.3)$$

Другими словами, если $|a\rangle$ – столбец из $\Psi_a(x)$, то $\langle a|$ – строка из $\Psi_a^{*}(x)$. Видно, что кет- и бра-векторы имеют различную природу. Они принадлежат разным пространствам – столбцов и строк, поэтому их нельзя смешивать, в частности, складывать. Очевидно, соответствие между кет- и бра-векторами антилинейно, т.е. кет-вектору $|a\rangle = c_1|a_1\rangle + c_2|a_2\rangle$ соответствует бра-вектор $\langle a| = c_1^{*}\langle a_1| + c_2^{*}\langle a_2|$:

$$\left(c_1|a_1\rangle + c_2|a_2\rangle\right)^{+} = c_1^{*}\langle a_1| + c_2^{*}\langle a_2| \qquad (1.4)$$

Заметим, что введенные Дираком названия бра- и кет- соответствует двум частям английского слова bracket (скобки): < бра | кет >.

§2. Скалярное произведение и его свойства. Норма кет-вектора.

Любым двум кет-векторам $|a\rangle$ и $|b\rangle$ можно сопоставить комплексное число, которое назовем *скалярным произведением* и обозначим $\langle a|b\rangle$. По аналогии с трехмерными векторами, для которых скалярное произведение выражается через координаты как

$$(\vec{a}\cdot\vec{b}) = a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z = \sum_{i=1}^{3} a_i b_i \qquad (1.5)$$

определим скалярное произведение кет-векторов $|a\rangle$ и $|b\rangle$

$$\langle a|b\rangle = \langle a|\cdot|b\rangle = \left(\ldots\Psi_a^{*}(x)\ldots\right)\cdot\begin{pmatrix} \cdot \\ \Psi_b(x) \\ \cdot \end{pmatrix} = \int_{-\infty}^{\infty}\Psi_a^{*}(x)\Psi_b(x)dx \qquad (1.6)$$

т.е. заменим в определении обычного произведения непрерывной строки на непрерывной строки на непрерывный столбец, суммирование интегрированием по всей области изменения аргумента.

Из определения скалярного произведения (1.6) вытекают следующие его свойства.

1. Положительность скалярного квадрата

$$\langle a|a\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}|\Psi_a(x)|^2\,dx \ge 0 \qquad (1.7)$$

причем равенство нулю возможно лишь при $\Psi_a(x) = 0$ или $|a\rangle = 0$.

2. Условие взаимности (симметрии)

$$\langle a|b\rangle = \langle b|a\rangle^{*} \qquad (1.8)$$

3. Линейность:

Если $|b\rangle = c_1|d\rangle + c_2|f\rangle$, где c_1 и c_2 – комплексные числа, то

$$\langle a|b\rangle = c_1\langle a|d\rangle + c_2\langle a|f\rangle,$$
$$\langle b|a\rangle = c_1^*\langle d|a\rangle + c_2^*\langle f|a\rangle. \tag{1.9}$$

Два кет-вектора $|a\rangle$ и $|b\rangle$, или соответствующие им функции называются *ортогональными*, если их скалярное произведение равно нулю

$$\langle a|b\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_a^*(x)\,\Psi_b(x)\,dx = 0 \tag{1.10}$$

Нормой кет-вектора $|a\rangle$, или соответствующей ему функции $\Psi_a(x)$, называется число $\|a\|$, равное положительному квадратному корню из скалярного произведения $\langle a|a\rangle$, т.е.

$$\|a\| = +\sqrt{\langle a|a\rangle} = +\sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_a(x)|^2\,dx} \tag{1.11}$$

Очевидно, что норма является обобщением понятия длины обычных векторов.

Кет-вектор $|a\rangle$ (или соответствующая функция $\Psi_a(x)$) называется *нормированным* (на единицу), если квадрат нормы равен единице

$$\|a\|^2 = \langle a|a\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_a(x)|^2\,dx = 1 \tag{1.12}$$

Норма может быть конечной или бесконечной. Если квадрат нормы конечен

$$\langle a|a\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_a(x)|^2\,dx < \infty \tag{1.13}$$

то функция $\Psi_a(x)$ называется суммируемой в квадрате. Такие функции всегда можно нормировать на единицу, т.е. ввести новый кет-вектор (или функцию)

$$|a'\rangle = \frac{1}{\|a\|}|a\rangle = \frac{|a\rangle}{\sqrt{\langle a|a\rangle}} \tag{1.14}$$

что $\|a'\| = 1$.

§3. Гильбертово пространство. Базис.

Множество кет-векторов с конечной нормой (или суммируем в квадрате функций) образует линейное пространство, которое называется *гильбертовым* и обозначается L^2 (для пространства функций после символа L^2 в скобках указывают область изменения аргумента). Сравним выше определенное гильбертово пространство кет-векторов $|a\rangle$ с линейным пространством обычных векторов $\vec{a}$. Мы говорим, что пространство обычных векторов *трехмерное*, потому что в нем можно выбрать *три* линейно независимых вектора, образующих базис (например, декартовы орты $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$), так что любой вектор однозначно представим в виде их линейной комбинации (1.1). В выбранном базисе любой вектор $\vec{a}$ задается тремя числами – координатами, которые записываются в виде *трехмерного* столбца (1.1). Кет-вектор $|a\rangle$ задается в виде *бесконечного* столбца (1.2), причем роль координат играет *бесконечное* число значений определяющей функции $\Psi_a(x)$ во всех точках области изменения аргумента x. Проводя аналогию с пространством обычных векторов, видим, что пространство кет-векторов бесконечномерное. Но бесконечные множества бывают двух типов: *счетные* – соответствующие множеству целых чисел и *континуальные* – соответствующие множеству всех действительных чисел или точек прямой. Если на значения функции не накладываются никакие ограничения, то пространство кет-векторов $|a\rangle$ будет континуальным:

число "координат" $\Psi_a(x)$ кет-вектора $|a\rangle$ будет совпадать с "числом" различных значений аргумента x. Если же на значения функций накладываются дополнительные условия, то, "координат" кет-вектора, т.е. "независимых" значений функции $\Psi_a(x)$ будет "меньше", чем значений аргумента x и размерность пространства кет-векторов будет счетной. Условие (1.13) принадлежности к гильбертову пространству L^2 как раз и накладывает дополнительные условия на значения функций $\Psi_a(x)$ (§1), поэтому размерность гильбертова пространства будет счетной, т.е. в нем можно выбрать счетное множество кет-векторов, образующих базис.

Рассмотрим вопрос о базисе в гильбертовом пространстве более подробно. Пронумеруем каким-либо образом кет-векторы из L^2. Тогда выражение вида $\sum_n C_n|n\rangle$ (или соответствующее $\sum_n C_n\Psi_n(x)$), где C_n – комплексные числа, называется *линейной комбинацией* кет-векторов (или функций $\Psi_n(x)$). Эти кет-векторы (функции) называются *линейно-независимыми*, если из равенства

$$\sum_n C_n|n\rangle = 0 \quad \left(\sum_n C_n\Psi_n(x) = 0\right) \tag{1.15}$$

следует, что $C_n = 0$ для всех n. В противном случае кет-векторы (функции) называются *линейно-зависимыми*.

Базисом гильбертова пространства L^2 называется *счетное множество линейно независимых* векторов $|n\rangle$ (функций $\Psi_n(x)$) таких, что *любой* кет-вектор $|a\rangle$ пространства (каждая функция $\Psi_a(x)$) *однозначно* представляется в виде их линейной комбинации:

$$|a\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} C_n^a|n\rangle \quad \left(\Psi_a(x) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n^a\Psi_n(x)\right), \tag{1.16}$$

где числа C_n^a – коэффициенты разложения, зависящие от индексов функции разлагаемого и базисных векторов.

Базис называется *ортонормированным*, если

$$\langle n|n'\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^*(x)\Psi_n(x)\,dx = \delta_{nn'} = \begin{cases} 1, & n = n' \\ 0, & n \neq n' \end{cases} \tag{1.17}$$

Коэффициенты разложения по ортонормированному базису находятся по кет-векторам $|a\rangle$ и $|n\rangle$ (или соответствующим им функциям $\Psi_a(x)$ и $\Psi_n(x)$) особенно просто. Действительно, умножая (1.16) скалярно на $|n'\rangle$ и учитывая линейность скалярного произведения (1.9), получаем

$$\langle n'|a\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} C_n^a\langle n'|n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} C_n^a\delta_{nn'} = C_{n'}^a,$$

или

$$C_n^a = \langle n|a\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^*(x)\Psi_a(x)\,dx \tag{1.18}$$

Очевидно, что набор коэффициентов $C_n^a = \langle n|a\rangle$, так же как и значения функции в (1.2) полностью определяет кет-вектор $|a\rangle$:

$$|a\rangle \to \begin{pmatrix} \langle 0|a\rangle \\ \langle 1|a\rangle \\ \vdots \\ \langle n|a\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{1.19}$$

Формула (1.18) является обобщенным аналогом известной формулы для проекций (координат) обычного вектора $\vec{a}$ на базисные векторы, скажем, декартовы орты $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ (1.1):

$$a_x = (\hat{i}, \hat{a}),\ \ a_y = (\hat{j}, \hat{a}),\ \ a_z = (\hat{k}, \hat{a}). \qquad (1.20)$$

Приведем примеры базисных функций, известных из курса "Методы математической физики".

1. Пространство L^2 (0,2π)

$$\Psi_n(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{in\varphi},\ n = 0, \pm 1, \pm 2, ... \qquad (1.21)$$

2. Пространство L^2 (-∞, +∞)

$$\Psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} e^{-\frac{x^2}{2}} H_n(x),\ n = 0,\ 1,\ 2,\ \ldots \qquad (1.22)$$

– функции Чебышева-Эрмита, где

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} \qquad (1.23)$$

полиномы Эрмита.

3. Пространство L^2 (0, +∞)

$$\Psi_n(r) = \frac{1}{\sqrt{n!}} e^{-\frac{r}{2}} L_n(r),\ n = 0,\ 1,\ 2,\ \ldots \qquad (1.24)$$

– функции Лагерра, где

$$L_n(r) = e^r \frac{d^n}{dr^n}(r^n e^{-r}) \qquad (1.25)$$

полиномы Лагерра.

4. Пространство L^2 (0≤Ω≤4π), где **Ω** – телесный угол на сфере единичного радиуса, $d\Omega = \sin(\theta) d\theta d\varphi$, 0≤$\varphi$≤2π, 0≤$\theta$≤π.

$$\Psi_n(\Omega) = Y_l^m(\theta, \varphi) = \alpha_m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos\theta) e^{im\varphi}, \qquad (1.26)$$

– сферические функции. Здесь

$$l = 0,\ 1,\ 2,\ 3,\ \ldots;\ \ m = -l,\ -(l-1),\ \ldots,\ -1,\ 0,\ 1,\ \ldots,\ (l-1),\ l\ ,\ \ \alpha_m = \begin{cases} (-1)^m,\ m \ge 0 \\ 1,\ \ m < 0 \end{cases}$$

$$P_l^m(\xi) = \frac{1}{2^l l!}(1-\xi^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^{l+m}}{d\xi^{l+m}}(\xi^2 - 1)^l \qquad (1.27)$$

– присоединенные полиномы Лежандра, (определение и свойства специальных функций приведены в Приложении 1-4).

Ниже мы подробнее остановимся на методах получения базисных функций и выведем критерий полноты базиса.

§4. Расширение гильбертова пространства. Непрерывный базис.

Именно кет-векторы гильбертова пространства используются в квантовой физике, им, в известной мере, можно придать физический смысл. Кет-векторы с бесконечной нормой не принадлежат гильбертову пространству – размерность их пространства континуальная (§3). Индекс функции таких кет-векторов $|p\rangle$ обязательно принимает непрерывные значения, т.е. кет-векторы с бесконечной нормой являются функциями от индекса функции. Некоторые из таких кет-векторов, а именно так называемые *нормированные на δ-функцию*, удобно использовать в физике. Это кет-векторы с бесконечной нормой, для которых скалярное произведение равно

$$\langle p|p'\rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \Psi^*_p(x)\Psi_{p'}(x)dx = \delta(p-p') \qquad (1.28)$$

Хотя такие кет-векторы и не принадлежат гильбертову пространству, их «непрерывная» линейная комбинация

$$|p,\Delta p\rangle = \frac{1}{\sqrt{\Delta p}}\int\limits_{p}^{p+\Delta p} |p'\rangle dp' \qquad (1.29)$$

принадлежит гильбертову пространству для любого отличного от нуля Δp. (С похожей ситуацией мы сталкиваемся в электродинамике. Известно, что реальные физические источники электромагнитных волн испускают их в виде волновых пакетов, представляющих суперпозицию отдельных монохроматических волн. Хотя отдельная плоская волна в природе не реализуется, ее удобно использовать для математического анализа физических свойств явлений). Действительно,
используя определение δ-функции, получаем

$$\langle p,\Delta p|p,\Delta p\rangle = \frac{1}{\Delta p}\int\limits_{p}^{p+\Delta p} dp' \int\limits_{p}^{p+\Delta p} \langle p'|p''\rangle dp'' = \frac{1}{\Delta p}\int\limits_{p}^{p+\Delta p} dp' \int\limits_{p}^{p+\Delta p} \delta(p'-p'')dp'' = \frac{1}{\Delta p}\int\limits_{p}^{p+\Delta p} dp' = 1, \qquad (1.30)$$

т.е. $\|(p,\Delta p)\| = 1$.

Множество кет-векторов гильбертова пространства с добавлением векторов, нормированных условием (1.28), иногда называют *оснащенным гильбертовым пространством* $\tilde{L}^2$. Так как добавленные кет-векторы ортогональны между собой, их можно использовать как непрерывный базис в оснащенном гильбертовом пространстве.

Непрерывный базис, например $|p\rangle$, определяется как множество кет-векторов “занумерованных” непрерывным индексом p, удовлетворяющих условию нормировки (1.28) и таких, что любой кет-вектор $|a\rangle$ может быть однозначно разложен по ним следующим образом:

$$|a\rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \Psi_a(p)|p\rangle dp \quad \left(\Psi_a(x) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \Psi_a(p)\Psi_p(x)dp\right) \qquad (1.31)$$

Коэффициенты разложения $\Psi_a(p)$ являются уже функциями от непрерывного индекса функции базисных кет-векторов и вычисляются аналогично (1.18):

$$\langle p'|a\rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \Psi_a(p)\langle p'|p\rangle dp = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \Psi_a(p)\delta(p-p')dp = \Psi_a(p'),$$

или

$$\Psi_a(p) = \langle p|a\rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \Psi^*_p(x)\Psi_a(x)dx. \qquad (1.32)$$

Очевидно, что и функции $\Psi_a(p) = \langle p|a\rangle$ также полностью определяет кет-вектор $|a\rangle$, т.е. и $\langle n|a\rangle$ (1.18) и $\langle p|a\rangle$ (1.32) являются разными представителями одного и того же кет-вектора $|a\rangle$.

Более того, и функцию в обычном виде $\Psi_a(x)$ можно записать в виде (1.18) или (1.32)

$$\Psi_a(x) = \langle x|a\rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \Psi^*_x(x')\Psi_a(x')dx', \qquad (1.33)$$

Предположив, что функции

$$\Psi_x(x') = \langle x'|a\rangle = \delta(x-x') \qquad (1.34)$$

являются представителями базисных кет-векторов непрерывного базиса x в своем собственном представлении x.

Примером других непрерывных базисных функций в оснащенном гильбертовом пространстве $\tilde{L}^2$ (-∞<x, y, z<+∞) могут служить «плоские волны»

$$\Psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} e^{i(\vec{p}\cdot\vec{r})}. \tag{1.35}$$

§5. Различные представления кет-векторов.

Подобно тому, как обычный вектор может быть задан своими координатами в некотором базисе, причем в разных базисах координаты одного и того же вектора разные, кет-вектор $|a\rangle$ также можно задать его проекциями (1.18), (1.32), (1.33) либо на базисные векторы $|n\rangle$, либо $|p\rangle$, либо $|x\rangle$. При этом говорят, что мы имеем дело с n-, либо с p-, либо с *x-представлением* кет-вектора $|a\rangle$. (Как видно из (1.18), (1.32), (1.33) индекс функции базисных векторов превращается в индекс представления (аргумент), рассматриваемого кет-вектора.) Так как базисов в не одномерном пространстве неограниченно много, число представлений одного и того же кет-вектора неограниченно.

Очевидно, что комплексно-сопряженные функции

$$\Psi_a^*(x) = \langle x|a\rangle^* = \langle a|x\rangle,\ \ \Psi_a^*(p) = \langle a|p\rangle,\ \ C_n^{a*} = \langle a|n\rangle \tag{1.36}$$

являются соответственно x -, p - и n – представлениями бра-вектора $\langle a|$.

Теперь еще раз вернемся к определению скалярного произведения кет-векторов (1.6), которое записано в x - представлении. В новых обозначениях (1.6) перепишется в виде

$$\langle a|b\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_a^*(x)\Psi_b(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} \langle x|a\rangle^* \langle x|b\rangle dx = \int_{-\infty}^{\infty} \langle a|x\rangle\langle x|b\rangle dx \tag{1.37}$$

Если разложить функции $\Psi_a(x)$ и $\Psi_b(x)$ по дискретному базису $\Psi_n(x)$ (1.16), то для скалярного произведения получаем выражение

$$\begin{aligned} \langle a|b\rangle &= \sum_{n,n'=0}^{\infty} C_n^{a*}C_{n'}^{b} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^*(x)\Psi_{n'}(x)dx = \sum_{n,n'=0}^{\infty} C_n^{a*}C_{n'}^{b}\langle n|n'\rangle = \\ &= \sum_{n,n'=0}^{\infty} C_n^{a*}C_{n'}^{b}\delta_{nn'} = \sum_{n=0}^{\infty}\langle n|a\rangle^*\langle n|b\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}\langle a|n\rangle\langle n|b\rangle \end{aligned} \tag{1.38}$$

Из рассмотренных примеров (1.37), (1.38) видим, что скалярное произведение в различных представлениях вычисляется единообразно: записывается произведение соответствующих бра- и кет-векторов в нужном представлении и суммируются (или интегрируются) по индексу представления, при этом зависимость от конкретного представления исчезает. Хотя в §2 мы определили скалярное произведение кет-векторов в x-представлении, в действительности оно зависит от них самих, а не от конкретных представлений. Аналогично не зависит от конкретного представления и норма кет-вектора.

В заключении отметим, что представление играет ту же самую роль, что и система координат в обычном векторном анализе. Любые задачи векторного анализа можно решить с помощью векторов без использования конкретной координатной системы и, следовательно, в общем виде. Однако при проведении конкретных вычислений удобно выбрать подходящую систему координат, в которой вычисления упрощаются. Точно так же в квантовой теории при изложении общетеоретических вопросов удобнее использовать дираковский формализм бра- и кет-векторов, независящих от какого-либо конкретного представления. При этом достигается необходимая полнота и общность. Именно в этом заключается цель дираковского формализма. Однако при проведении конкретных вычислений и решении конкретных задач все же необходимо использовать неоспоримое преимущество подходящего конкретного представления.

Упражнения 1

1. Принадлежит ли гильбертову пространству

а) $L^2(-\infty,+\infty)$, *функция* $\Psi_k(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx}$;

б) $L^2(-\infty,+\infty)$, $\Psi_a(x)=\frac{a}{x^2}$;

в) $L^2(-\infty,+\infty)$, $\Psi_a(x)=\frac{1}{1+(ax)^2}$,

где a –вещественная константа;

г) $L^2(0,2\pi)$, $\Psi_b(\varphi)=Ae^{ib\varphi}$;

д) $L^2(-\infty,+\infty)$, $\Psi_p(x)=Ae^{-px}$.

Решение. *в)* Функция принадлежит гильбертову пространству, если она однозначна, непрерывна и конечна во всей области определения и обладает конечной нормой. Указанная функция удовлетворяет этим критериям. Найдем ее норму $\|a\|^2=\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{dx}{\left(1+(ax)^2\right)^2}$. Этот несобственный интеграл можно взять с использованием теории вычетов. $\|a\|^2=2\pi i\sum\limits_k \operatorname*{Res}\limits_{\operatorname{Im} az_k>0}\frac{1}{\left(1+(az)^2\right)^2}$. В верхней полуплоскости функция имеет одну особую точку - $z=\frac{i}{|a|}$, которая является полюсом второго порядка. Поэтому,

$$\|a\|^2=2\pi i\operatorname*{Res}_{z=\frac{i}{|a|}}\frac{1}{\left(1+(az)^2\right)^2}=2\pi i\lim_{z\to\frac{i}{|a|}}\frac{d}{dz}\left[\left(z-\frac{i}{|a|}\right)^2\frac{1}{\left(1+(az)^2\right)^2}\right]=\frac{2\pi i}{a^4}\lim_{z\to\frac{i}{|a|}}\frac{d}{dz}\left[\frac{1}{\left(z+\frac{i}{|a|}\right)^2}\right]=\frac{\pi}{4|a|}$$

Таким образом, при любом вещественном a, функция $\Psi_a(x)=\frac{1}{1+(ax)^2}$ принадлежит $L^2(-\infty,+\infty)$.

2. Построить графики:

а) Функции Чебышева-Эрмита (1.22) для $n = 0, 1, 2$;

б) функции Лагерра (1.24) для $n = 0, 1, 2$;

в) квадрата модуля сферических функций (1.26) для $l = 0, 1$.

3. Доказать свойства скалярного произведения:

а) взаимности (1.8);

б) линейности (1.9).

4. Найти

а) скалярное произведение функций $\Psi_p(x)=\frac{e^{ipx}}{\sqrt{2\pi}}$ и $\Psi_1(x)$ – первой функции Чебышева-Эрмита (1.22);

б) норму функции $\Psi_2(x)$ – второй функции Лагерра (1.24).

(Заметим, что $\int\limits_0^\infty x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}}$.)

5. Нормировать функции из оснащенного гильбертова пространства:

а) $\Psi_m(\varphi) = Ce^{im\varphi}$, где m – целые числа, C – некоторая константа;

б) $\Psi_E(p) = Ce^{i(Ep-p^3)}$;

в) $\Psi_{\vec p}(\vec r) = Ce^{i(\vec p \cdot \vec r)}$.

Решение. б) норма ||E|| этой функции равна ∞:

$$\langle E | E \rangle = |C|^2 \int\limits_{-\infty}^{\infty} dp = \infty.$$

Нормируем эту функцию на δ-функцию:

$$\langle E | E' \rangle = \delta(E - E').$$

Используя интегральное представление δ-функции (Приложение 5):

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{ipx} dp$$

получаем

$$\langle E | E' \rangle = |C|^2 \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{i(E'-E)p} dp = |C|^2 \, 2\pi\delta(E - E')$$

т.е. константу C надо выбрать так, чтобы $|C|^2 2\pi = 1$. Таким образом, нормированная функция будет

$$\Psi_E(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(Ep-p^3)}.$$

6. Записать в p-представлении (представлении базиса $\Psi_p(x) = \frac{e^{ipx}}{\sqrt{2\pi}}$) кет-векторы, которые в x-представлении задаются функциями:

а) $|x\rangle, \langle x | x' \rangle = \delta(x - x')$;

б) $|1\rangle, \langle x | 1 \rangle = \Psi_1(x)$.

$\Psi_1(x)$ – первая функция Чебышева-Эрмита (1.22).

7. Прямым вычислением убедиться, что функция $\Psi_a(p)$ (1.32) – коэффициент разложения кет-вектора $|a\rangle$ с конечной нормой по непрерывному базису (1.28) обладает конечной нормой.

2. ОПЕРАТОРЫ

§1. Определение и примеры

Если в пространстве кет-векторов задано правило L, позволяющее одному кет-вектору $|a\rangle$ сопоставить другой кет-вектор

$$|a\rangle \xrightarrow{L} |La\rangle \tag{2.1}$$

то говорят, что задан *оператор* $\hat{L}$. Оператор помечают буквой со шляпкой и говорят, что оператор $\hat{L}$ действует на кет-вектор $|a\rangle$ и в результате дает новый вектор $|La\rangle$:

$$\hat{L}|a\rangle = |La\rangle \tag{2.2}$$

Общие свойства операторов удобно изучать через абстрактное действие его на кет-векторы (2.2), но конечный вид операторов удобнее задавать через действие его на представители кет-векторов в том или ином представлении, т.е. на функции. Например, представитель кет-вектора $|a\rangle$ в x-представлении – обычная функция $\Psi_a(x) \equiv \langle x|a\rangle$. В этом случае (2.2) перепишется в виде

$$\hat{L}(x)\Psi_a(x) = \Psi_{La}(x) \tag{2.3}$$

(индекс новой функции, получаемой после действия оператора $\hat{L}$ на функцию $\Psi_a(x)$ согласно §1 Главы 1 удобно помечать символом “La”). Оператор $\hat{L}(x)$ называют *x-представителем* абстрактного оператора $\hat{L}$.

В качестве примера рассмотрим несколько простейших операторов

1. Единичный (тождественный) оператор $\hat{1}$:

$$\hat{1}|a\rangle = |a\rangle \tag{2.4}$$

2. Оператор изменения знака аргумента (оператор инверсии) $\hat{I}(x)$:

$$\hat{I}(x)\Psi_a(x) = \Psi_a(-x) \tag{2.5}$$

3. Оператор дифференцирования $\hat{\partial}_x$:

$$\hat{\partial}_x\Psi_a(x) = \frac{d\Psi_a(x)}{dx} \tag{2.6}$$

4. Оператор умножения (на переменную представления) $\hat{x}$:

$$\hat{x}\Psi_a(x) = x\Psi_a(x) \tag{2.7}$$

5. Оператор трансляции (сдвиг аргумента на число ε) $\hat{T}_\varepsilon(x)$:

$$\hat{T}_\varepsilon(x)\Psi_a(x) = \Psi_a(x+\varepsilon) \tag{2.8}$$

6. Интегральный оператор $\hat{\Omega}(x)$:

$$\hat{\Omega}(x)\Psi_a(x) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x-x')^2}\Psi_a(x')dx' \tag{2.9}$$

Функция $\hat{\Omega}(x,x') = e^{-(x,x')^2}$, определяющая интегральный оператор в данном примере, называется *ядром* интегрального оператора.

7. Оператор комплексного сопряжения $\hat{K}(x)$:

$$\hat{K}(x)\Psi_a(x) = \Psi_a^*(x) \tag{2.10}$$

8. Оператор возведения в квадрат $\hat{Q}(x)$:

$$\hat{Q}(x)\Psi_a(x) = \Psi_a^2(x) \tag{2.11}$$

Оператор $\hat{L}$ (или его представитель $\hat{L}(x)$) называется линейным, если для любой линейной комбинации кет-векторов $|k\rangle$ (функций $\Psi_k(x)$) имеет место равенство

$$\hat{L}(\sum_k C_k |k\rangle) = \sum_k C_k \hat{L}|k\rangle \quad (\hat{L}(x)\left(\sum_k C_k \Psi_k(x)\right) = \sum_k C_k \hat{L}(x)\Psi_k(x)) \tag{2.12}$$

Таким образом, линейный оператор действует только на кет-векторы в линейной комбинации, а числа оставляет без изменения. Легко проверить, что операторы (2.4) – (2.9) являются линейными, а операторы (2.10) –(2.11) – нет.

В квантовой теории используются только линейные операторы. Поэтому в дальнейшем мы будем только их и рассматривать.

§2. Алгебра операторов.

С операторами можно проводить определенные алгебраические операции и таким способом получать новые операторы.

Два оператора $\hat{L}$ и $\hat{M}$ называются равными (тождественными), если при действии этих операторов на один и тот же произвольный кет-вектор получаются также одинаковые кет-векторы:

$$\hat{L}|a\rangle = \hat{M}|a\rangle \tag{2.13}$$

Оператор $\hat{L}$ называется нулевым (обозначается $\hat{0}$), если $\hat{L}|a\rangle = 0$ для любого $|a\rangle$.

Суммой (разностью) операторов $\hat{L}$ и $\hat{M}$ называется оператор $\hat{L} \pm \hat{M}$ такой, что

$$\left(\hat{L} \pm \hat{M}\right)|a\rangle = \hat{L}|a\rangle \pm \hat{M}|a\rangle \tag{2.14}$$

Например, оператор, переводящий функцию $\Psi_a(x)$ в функцию $\Psi_a(x)+\Psi_a(-x)$ есть сумма единичного $\hat{1}$ и оператора инверсии $\hat{I}(x)$.

Очевидно, что сложение операторов является операцией ассоциативной и коммутативной.

Под произведением операторов $\hat{L}$ и $\hat{M}$ понимаем оператор $(\hat{L}\hat{M})$, заключающийся в последовательном применении сначала оператора $\hat{L}$, а затем $\hat{M}$:

$$(\hat{L}\hat{M})|a\rangle = \hat{L}|Ma\rangle \tag{2.15}$$

Например, произведение операторов инверсии $\hat{I}(x)$ и трансляции $T_\varepsilon(x)$ есть оператор $\hat{I}(x)T_\varepsilon(x)$, действующий следующим образом

$$\hat{I}(x)\hat{T}_\varepsilon(x)\Psi_a(x) = \hat{I}(x)\Psi_a(x+\varepsilon) = \Psi_a(-x-\varepsilon) \tag{2.16}$$

Умножение операторов ассоциативно, дистрибутивно по отношению к сумме, но, и в этом основное отличие от обычной алгебры чисел, умножение не коммутативно, т.е. в общем случае

$$\hat{L}\hat{M} \neq \hat{M}\hat{L} \tag{2.17}$$

Например, произведение $T_\varepsilon(x)\hat{I}(x)$, действуя на $\Psi_a(x)$ дает

$$T_\varepsilon(x)\hat{I}(x)\Psi_a(x) = \hat{T}(x)\Psi_a(-x) = \Psi_a(-x+\varepsilon) \tag{2.18}$$

Сравнивая (2.16) и (2.18) видим, что

$$T_\varepsilon(x)\hat{I}(x) \neq \hat{I}(x)T_\varepsilon(x)$$

Если $\hat{L}\hat{M} = \hat{M}\hat{L}$ то операторы $\hat{L}$ и $\hat{M}$ называются коммутирующими или перестановочными. Например, операторы дифференцирования $\hat{\partial}_x$ и трансляции $T_\varepsilon(x)$ коммутируют.

Если $\hat{L}\hat{M} \neq \hat{M}\hat{L}$ то говорят, что операторы $\hat{L}$ и $\hat{M}$ не коммутируют между собой или что они не перестановочны.

Если $\hat{L}\hat{M} = -\hat{M}\hat{L}$ то операторы $\hat{L}$ и $\hat{M}$ называются антикоммутирующими. Например, оператор инверсии $\hat{I}(x)$ и оператор умножения $\hat{x}$ – антикоммутируют.

Оператор
$$\left[\hat{L},\hat{M}\right]=\hat{L}\hat{M}-\hat{M}\hat{L} \tag{2.19}$$
называется *коммутатором* операторов $\hat{L}$ и $\hat{M}$, оператор
$$\left[\hat{L},\hat{M}\right]_{+}=\hat{L}\hat{M}+\hat{M}\hat{L} \tag{2.20}$$
– *антикоммутатором*.

Например, $\left[\hat{\partial}_x,\hat{x}\right]=\hat{1}$, $\left[\hat{I}(x),\hat{x}\right]_{+}=\hat{0}$. Очевидно, что если коммутатор операторов равен нулю, то операторы коммутируют, т.е. в произведении их можно переставлять местами.

Для коммутаторов справедливы следующие полезные соотношения, которые легко доказываются из определения (2.19):
$$\left[\hat{L},\hat{M}\right]=-\left[\hat{M},\hat{L}\right]; \tag{2.21}$$
$$\left[\hat{L},\hat{M}+\hat{N}\right]=\left[\hat{L},\hat{M}\right]+\left[\hat{L},\hat{N}\right]; \tag{2.22}$$
$$\left[\hat{L},\hat{M}\hat{N}\right]=\left[\hat{L},\hat{M}\right]\hat{N}+\hat{M}\left[\hat{L},\hat{N}\right]; \tag{2.23}$$
$$\left[\hat{L},\left[\hat{M},\hat{N}\right]\right]+\left[\hat{M}\left[\hat{N},\hat{L}\right]\right]+\left[\hat{N},\left[\hat{L},\hat{M}\right]\right]=\hat{0} \tag{2.24}$$
Например, докажем (2.23). Из (2.19) следует
$$\left[\hat{L},\hat{M}\hat{N}\right]=\hat{L}(\hat{M}\hat{N})-(\hat{M}\hat{N})\hat{L} \tag{2.25}$$
Добавим к правой части (2.25) и вычтем член $\hat{M}\hat{L}\hat{N}$, затем сгруппируем слагаемые, тогда
$$\left[\hat{L},\hat{M}\hat{N}\right]=\left(\hat{L}\hat{M}\hat{N}-\hat{M}\hat{L}\hat{N}\right)+\left(\hat{M}\hat{L}\hat{N}-\hat{M}\hat{N}\hat{L}\right)=\left[\hat{L},\hat{M}\right]\hat{N}+\hat{M}\left[\hat{L},\hat{N}\right];$$
что и требовалось доказать.

Под произведением оператора $\hat{L}$ на комплексное число “*c*” понимают оператор $c\hat{L}$, результат действия которого на любой кет-вектор $|a\rangle$ равен
$$c\hat{L}|a\rangle=c\left|\hat{L}a\right\rangle \tag{2.26}$$
Произведение оператора на число есть частный случай произведения двух операторов, одним из которых является оператор умножения на это число. Для линейных операторов, которые только мы и рассматриваем
$$c\hat{L}=\hat{L}c \tag{2.27}$$
Вернемся снова к определению оператора (2.1). Если соответствие между $|a\rangle$ и $\left|\hat{L}a\right\rangle$ (2.1) взаимнооднозначное, т.е.
$$|a\rangle\leftrightarrow\left|\hat{L}a\right\rangle \tag{2.28}$$
то можно ввести для оператора $\hat{L}$ *обратный* оператор, обозначаемый $\hat{L}^{-1}$, такой что
$$\hat{L}^{-1}\left|\hat{L}a\right\rangle=|a\rangle \tag{2.29}$$
Сам оператор $\hat{L}$ в этом случае называется неособенным. Легко видеть, что
$$\hat{L}^{-1}\hat{L}=\hat{L}\hat{L}^{-1}=\hat{1} \tag{2.30}$$
Если $\hat{L}$ и $\hat{M}$ – два неособенных оператора, то
$$\left(\hat{L}\hat{M}\right)^{-1}=\hat{M}^{-1}\hat{L}^{-1} \tag{2.31}$$
Действительно, умножая тождество $\hat{L}\hat{M}\left(\hat{L}\hat{M}\right)^{-1}=\hat{1}$ слева сначала на $\hat{L}^{-1}$, а затем на $\hat{M}^{-1}$ и используя (2.30), получим (2.31).

Произведение *n* одинаковых операторов $\hat{L}$ обозначают через
$$\underbrace{\hat{L}\cdot\hat{L}...\hat{L}}_{n}=\hat{L}^{n} \tag{2.32}$$

и называют *n-ой степенью оператора* $\hat{L}$. По определению, оператор в нулевой степени считается тождественно равным единичному

$$\hat{L}^0 = \hat{1} \tag{2.33}$$

Определив степени оператора, можно ввести понятие *функции от оператора*. Пусть *f(x)* – функция, разложимая в окрестности нуля в ряд Тейлора:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} f^{(n)}(x) x^n \tag{2.34}$$

где $f^{(n)}(0)$ – производные *n*-го порядка в точке *x* = 0. Образуем оператор

$$f(\hat{L}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} f^{(n)}(0) \hat{L}^n \tag{2.35}$$

заменив в разложении (2.34) переменную *x* оператором $\hat{L}$. Полученный таким образом оператор $f(\hat{L})$ называется функцией f от оператора $\hat{L}$. Например

$$e^{\hat{L}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \hat{L} \tag{2.36}$$

Если оператор $\hat{L}$ – неособенный, то аналогично можно ввести отрицательную степень оператора и рассмотреть функции, разложимые в ряд не только по положительным, но и по отрицательным степеням.

Заметим, что

$$\left[\hat{L}, f(\hat{L})\right] = 0 \tag{2.37}$$

В заключение этого параграфа отметим, что алгебра коммутирующих операторов похожа на обычную алгебру. Например, если $\hat{L}\hat{M} = \hat{M}\hat{L}$ то

$$\left(\hat{L} + \hat{M}\right)^2 = \hat{L}^2 + 2\hat{L}\hat{M} + \hat{M}^2 \tag{2.38}$$

но если операторы не коммутируют, то даже простейшие правила обычной алгебры не применимы. В частности равенство (2.38) не верно. Поэтому при работе с некоммутирующими операторами нужна определенная осторожность. Докажем, поэтому, несколько полезных теорем о свойствах некоммутирующих операторов.

Теорема 2.1. Пусть операторы $\hat{L}$ и $\hat{M}$ не коммутируют и $\hat{L}$ – неособенный. Тогда имеют место следующие равенства

$$\hat{B}\hat{L}^n\hat{B}^{-1} = \left(\hat{B}\hat{L}\hat{B}^{-1}\right)^n \tag{2.39}$$

$$\hat{B}f(\hat{L})\hat{B}^{-1} = f\left(\hat{B}\hat{L}\hat{B}^{-1}\right) \tag{2.40}$$

Докажем (2.39)**.** Запишем правую часть в виде произведения *n*-сомножителей и учтем (2.30). Тогда

$$\left(\hat{B}\hat{L}\hat{B}^{-1}\right)^n = \underbrace{\hat{B}\hat{L}\hat{B}^{-1}\hat{B}\hat{L}\hat{B}^{-1}...\hat{B}\hat{L}\hat{B}^{-1}}_{n} = \hat{B}\hat{L}^n\hat{B}^{-1}$$

что и требовалось доказать. Используя определение функции от операторов (2.35) и доказанное равенство, легко показать и (2.40).

Теорема 2.2. Пусть $\hat{A}$ и $\hat{B}$ – некоммутирующие операторы, тогда

$$e^{\hat{A}}Be^{-\hat{A}} = \hat{B} + \left[\hat{A}, \hat{B}\right] + \frac{1}{2}\left[\hat{A}, \left[\hat{A}, \hat{B}\right]\right] + ... \quad \text{(формула Ли)} \tag{2.41}$$

Доказательство:

Рассмотрим операторную функцию

$$f(x) = e^{x\hat{A}}\hat{B}e^{-x\hat{A}}, \ f(0) = \hat{B} \tag{2.42}$$

где *x*- числовой параметр. Производные этой функции по *x* будут равны

$$f^{(1)}(x)=\hat{A}e^{x\hat{A}}\hat{B}e^{-x\hat{A}}-e^{x\hat{A}}\hat{B}\hat{A}e^{-x\hat{A}}=e^{x\hat{A}}\left[\hat{A}\hat{B}\right]e^{-x\hat{A}}=\left[\hat{A},f(x)\right];$$
$$f^{(1)}(0)=\left[\hat{A},\hat{B}\right];$$
$$f^{(2)}(x)=\left[\hat{A},f^{(1)}(x)\right];$$
$$f^{(2)}(0)=\left[\hat{A},\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right]...$$

Тогда разложение *f(x)* в ряд Тейлора даст

$$e^{x\hat{A}}\hat{B}e^{-x\hat{A}}=f(0)+f^{(1)}(0)x+\frac{1}{2!}f^{(2)}(0)x^2+K=\hat{B}+\left[\hat{A},\hat{B}\right]x+\frac{1}{2}\left[\hat{A},\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right]x^2+... \quad (2.43)$$

и при $x = 1$ получаем соотношение (2.41).

Теорема 2.3. Пусть $\hat{A}$ и $\hat{B}$ – некоммутирующие операторы, удовлетворяющие условиям

$$\left[\hat{A},\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right]=\left[\hat{B},\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right]=0 \quad (2.44)$$

Тогда имеет место тождество Вейля

$$e^{\hat{A}+\hat{B}}=e^{\hat{A}}e^{\hat{B}-\frac{1}{2}\left[\hat{A},\hat{B}\right]} \quad (2.45)$$

Доказательство: Рассмотрим функцию

$$f(x)=e^{x\hat{A}}e^{x\hat{B}},$$
$$f(1)=e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}, \quad (2.46)$$
$$f(0)=\hat{1}.$$

Продифференцируем ее по параметру x:

$$\frac{df(x)}{dx}=\hat{A}e^{x\hat{A}}e^{x\hat{B}}+e^{x\hat{A}}\hat{B}e^{x\hat{B}}=\left(\hat{A}+e^{x\hat{A}}\hat{B}e^{-x\hat{A}}\right)f(x) \quad (2.47)$$

Но по (2.43) с учетом (2.44)

$$e^{x\hat{A}}\hat{B}e^{-x\hat{A}}=\hat{B}+x\left[\hat{A},\hat{B}\right], \quad (2.48)$$

т.е.

$$\frac{df(x)}{dx}=\left(\hat{A}+\hat{B}+x\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right)f(x). \quad (2.49)$$

Из условия теоремы (2.44) следует, что оператор $\hat{A}+\hat{B}$ коммутирует с оператором $\left[\hat{A},\hat{B}\right]$, поэтому уравнение (2.49) можно интегрировать обычным образом с начальным условием $f(0)=\hat{1}$. При этом решение этого уравнения имеет вид

$$f(x)=e^{x\left(\hat{A}+\hat{B}\right)}e^{\frac{x^2}{2}\left[\hat{A},\hat{B}\right]}, \quad (2.50)$$

откуда при $x=1$ получим

$$e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}=e^{\hat{A}+\hat{B}}e^{\frac{1}{2}\left[\hat{A},\hat{B}\right]}, \quad (2.51)$$

и, следовательно, искомое соотношение (2.45).

§3. Представления операторов.

Рассмотрим подробнее работу с операторами в пространстве кет-векторов с фиксированным базисом. В этом случае кет-векторы задаются своими представителями. В случае непрерывного базиса, например $|x\rangle$ (1.34), x – представители кет-векторов – обычные функции $\langle x|a\rangle=\Psi_a(x)$, значения которых образуют непрерывный столбец (см. §5 Главы 1). Хотя можно придумать сколь угодно много различных операторов, действующих в пространстве функций (представителей $\hat{L}(x)$ абстрактных операторов $\hat{L}$), справедливо следующее утверждение. Любой линейный оператор $\hat{L}(x)$ можно представить в виде интегрального оператора

$$\hat{L}(x)\Psi_a(x)=\int_{-\infty}^{\infty}L(x,x')\Psi_a(x')dx' \tag{2.52}$$

с ядром

$$L(x,x')=\hat{L}(x)\delta(x-x') \tag{2.53}$$

Действительно, подействуем оператором $\hat{L}(x)$ на тождество

$$\Psi_a(x)=\int_{-\infty}^{\infty}\Psi_a(x)\delta(x-x')dx' \tag{2.54}$$

и учтем, что в силу линейности оператора $\hat{L}(x)$ его можно внести под знак интеграла. Тогда

$$\hat{L}(x)\Psi_a(x)=\hat{L}(x)\int_{-\infty}^{\infty}\Psi_a(x')\delta(x-x')dx'=\int_{-\infty}^{\infty}\Psi_a(x')\hat{L}(x)\delta(x-x')dx'=\int_{-\infty}^{\infty}\Psi_a(x')\hat{L}(x,x')dx' \tag{2.55}$$

где ядро интегрального оператора определяется равенством (2.53).

Приведем ядра, рассмотренные выше в §1 конкретных операторов (2.4) - (2.9).

$$\begin{array}{c|l}
\textit{Операторы} & \textit{Ядра} \\
\hat{1} & 1(x,x')=\delta(x-x') \\
\hat{I}(x) & I(x,x')=\delta(x+x') \\
\hat{\partial}_x & \partial_x(x,x')=\dfrac{\partial}{\partial x}\delta(x-x') \\
\hat{x} & x(x,x')=x\delta(x-x') \\
T_\varepsilon(x) & T_\varepsilon(x,x')=\delta(x+\varepsilon-x') \\
\hat{\Omega}(x) & \Omega(x,x')=e^{-(x-x')^2}
\end{array} \tag{2.56}$$

Введем новое понятие. *Матричным элементом* оператора $\hat{L}$ по кет-векторам $|a\rangle$ и $|b\rangle$ называется число $\langle a|\hat{L}|b\rangle$, равное скалярному произведению кет-векторов $|a\rangle$ и $|Lb\rangle$:

$$\langle a|\hat{L}|b\rangle=\langle a|Lb\rangle \tag{2.57}$$

Покажем, что ядро линейного оператора $\hat{L}(x)$ можно представить в виде матричного элемента оператора $\hat{L}$ следующего вида

$$L(x,x')=\langle x|\hat{L}|x'\rangle \tag{2.58}$$

Действительно, перепишем определение оператора $\hat{L}(x)$ (2.3), заменив функции $\Psi_a(x)$ на x-представление кет-вектора $\langle x|a\rangle$:

$$\hat{L}(x)\langle x|a\rangle=\langle x|La\rangle=\langle x|\hat{L}|a\rangle \tag{2.59}$$

Положим здесь $|a\rangle=|x'\rangle$ и, учитывая условие ортонормировки непрерывного базиса (1.34), получаем

$$\hat{L}(x)\langle x|x'\rangle=\hat{L}(x)\delta(x-x')=L(x,x')=\langle x|\hat{L}|x'\rangle \tag{2.60}$$

Таким образом, любой линейный оператор $\hat{L}(x)$, действующий в пространстве функций (в пространстве кет-векторов с базисом $|x\rangle$, т.е. в x-представлении) полностью задается своим ядром, равным матричному элементу оператора на базисных векторах $|x\rangle$. Совокупность значений

$\langle x|\hat{L}|x'\rangle$ для всех $|x\rangle$ образует бесконечную непрерывную матрицу, полностью определяющую оператор $\hat{L}$ в x-представлении.

Непрерывные матрицы являются простым обобщением понятия обычной матрицы, нужно только уточнить определение диагональной матрицы в случае непрерывно изменяющихся индексов. По определению непрерывная матрица $L(x,x')$ диагональная, если она имеет форму

$$L(x,x') = d(x)\delta(x-x') \tag{2.61}$$

где $d(x)$ есть произвольная функция индекса x. Тогда единичная матрица имеет форму

$$I(x,x') = \delta(x-x') \tag{2.62}$$

Заметим, что непрерывная матрица $\frac{d}{dx}\delta(x-x')$ не является диагональной.

Равенство (2.52), переписанное в виде

$$\hat{L}(x)\langle x|a\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\langle x|\hat{L}|x'\rangle\langle x'|a\rangle dx' = \langle x|La\rangle \tag{2.63}$$

показывает, что действие операторов на кет-векторы, заданные через представители в непрерывном базисе в виде бесконечных столбцов, сводится к произведению непрерывной квадратной матрицы $\langle x|\hat{L}|x'\rangle$ на столбец $\langle x'|a\rangle$ (с заменой суммирования интегрированием в обычном определении произведения матриц). В результате такого произведения вновь получается столбец $\langle x|La\rangle$. Аналогичное утверждение справедливо и для любого непрерывного базиса (т.е. любого непрерывного представления).

В случае дискретного базиса $|n\rangle$ (1.17), оператор $\hat{L}$ задается обычной бесконечной матрицей

$$\langle n|\hat{L}|n'\rangle = \langle n|Ln'\rangle \tag{2.64}$$

а его действие – обычным произведением матрицы на столбец. Действительно, раскладывая кет-вектор $|La\rangle$ по базису $|n\rangle$ (1.16), (1.18), получаем

$$|La\rangle = \sum_{m=0}^{\infty}\langle m|La\rangle|m\rangle = \sum_{m=0}^{\infty}\langle m|\hat{L}|a\rangle|m\rangle \tag{2.65}$$

Подставляя сюда разложение кет-вектора $|a\rangle$ по этому же базису $|n\rangle$ и учитывая линейность оператора $\hat{L}$, (2.65) перепишется в виде

$$|La\rangle = \sum_{m,n'=0}^{\infty}\langle m|\hat{L}|n'\rangle\langle n'|a\rangle|m\rangle \tag{2.66}$$

Тогда с учетом линейности скалярного произведения (1.9) и условии ортонормировки базиса (1.17)

$$\langle n|La\rangle = \sum_{m,n'=0}^{\infty}\langle m|\hat{L}|n'\rangle\langle n'|a\rangle\langle n|m\rangle = \sum_{m,n'=0}^{\infty}\delta_{mn}\langle m|\hat{L}|n'\rangle\langle n'|a\rangle = \sum_{n'=0}^{\infty}\langle m|\hat{L}|n'\rangle\langle n'|a\rangle \tag{2.67}$$

Покажем теперь, что матрицы операторов (операторы в заданном представлении) подчиняются правилам действия с матрицами:

1. При сложении матриц матричные элементы складываются:

$$(A+B)_{mn} = A_{mn} + B_{mn} \tag{2.68}$$

2. Умножение матриц подчиняется закону

$$(AB)_{mn} = \sum_{l} A_{ml}B_{ln} \tag{2.69}$$

Сумма операторов $\hat{M}+\hat{L}$ в дискретном базисе задается матрицей

$$\langle m|(\hat{M}+\hat{L})|n\rangle = \langle m|(\hat{M}|n\rangle + \hat{L}|n\rangle) = \langle m|\hat{M}|n\rangle + \langle m|\hat{L}|n\rangle \tag{2.70}$$

т.е. матрица суммы операторов сумме соответствующих матриц.

Аналогично произведение операторов $\hat{L}\hat{M}$ задается матрицей $\langle m|\hat{L}\hat{M}|n\rangle = \langle m|\hat{L}|Mn\rangle$. Кет-вектор $|Mn\rangle$ разложим по базису $|l\rangle$. Тогда

$$|Mn\rangle = \sum_l \langle l|Mn\rangle |l\rangle = \sum_l \langle l|\hat{M}|n\rangle |l\rangle \tag{2.71}$$

$$\hat{L}|Mn\rangle = \sum_l \langle l|\hat{M}|n\rangle |Ll\rangle \tag{2.72}$$

$$\langle m|\hat{L}\hat{M}|n\rangle = \sum_l \langle l|\hat{M}|n\rangle \langle m|Ll\rangle = \sum_l \langle m|\hat{L}|l\rangle \langle l|\hat{M}|n\rangle \tag{2.73}$$

т.е. матрица от произведения операторов равна произведению соответствующих матриц операторов.

Аналогично показываются соотношения для непрерывных матриц (представления операторов в непрерывном базисе):

$$\left(\hat{L}\hat{M}\right)(x,x') = \langle x|\hat{L}\hat{M}|x'\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} L(x,x'')M(x'',x')\,dx'' = \int_{-\infty}^{\infty} \langle x|\hat{L}|x''\rangle \langle x''|\hat{M}|x'\rangle\,dx'' \tag{2.74}$$

§4. Сопряженные операторы.

До сих пор мы рассматривали действие линейных операторов в пространстве кет-векторов. Но в Главе 1 пространство кет-векторов мы взаимно однозначно сопоставили с дуальным пространством бра-векторов. Поэтому из соответствия $|a\rangle \xrightarrow{L} |La\rangle$ в пространстве кет-векторов следует соответствие между бра-векторами в дуальном пространстве

$$\langle a| \xrightarrow{L} \langle La| \tag{2.75}$$

Это соответствие осуществляет так называемый *эрмитово сопряженный* оператору $\hat{L}$ оператор, который мы будем обозначать $\hat{L}^+$, а само сопоставление (2.75) записывать в виде

$$\langle a|\hat{L}^+ = \langle La| \tag{2.76}$$

из определений (2.14) и (2.15) алгебры операторов и эрмитова сопряжения (2.76) следует, что

$$\left(\hat{L}+\hat{M}\right)^+ = \hat{L}^+ + \hat{M}^+ \tag{2.77}$$

$$\left(\hat{L}\cdot\hat{M}\right)^+ = \hat{M}^+\cdot\hat{L}^+ \tag{2.78}$$

(на бра-вектор сначала действует оператор $\hat{M}^+$, потом $\hat{L}^+$). Используя эти свойства, во многих случаях можно легко получить сопряженные операторы к более сложным операторам.

Так как соответствие между кет- и бра-векторами антилинейное (1.4), то

$$\left(c\hat{L}\right)^+ = c^*\hat{L}^+ \tag{2.79}$$

Аналогично, из-за того, что соответствие между кет- и бра-векторами в дуальных пространствах взаимно однозначное

$$\begin{array}{ccc} |a\rangle & \xrightarrow{\hat{L}} & |La\rangle \\ \updownarrow & & \updownarrow \\ \langle a| & \xrightarrow{\hat{L}^+} & \langle La| \end{array} \tag{2.80}$$

Исходный оператор $\hat{L}$, действующий в пространстве кет-векторов, будет эрмитово сопряжен оператору $\hat{L}^+$, действующему в пространстве бра-векторов, т.е.

$$\left(\hat{L}^+\right)^+ = \hat{L}. \tag{2.81}$$

С другой стороны, если $\hat{L}$ - сопряженный оператор, то он может действовать и на бра-векторы

$$\langle a|\hat{L} = \langle a|\left(\hat{L}^{+}\right)^{+} = \langle L^{+}a| \tag{2.82}$$

Аналогично и оператор $\hat{L}^{+}$ может действовать и на кет-векторы

$$\hat{L}^{+}|a\rangle = |L^{+}a\rangle = \left(\langle L^{+}a|\right)^{+} \tag{2.83}$$

Причем действия операторов $\hat{L}$ и $\hat{L}^{+}$ на кет-векторы (и соответственно на бра-векторы) будет различно

$$\hat{L}^{+}|a\rangle \neq \hat{L}|a\rangle, \tag{2.84}$$

т.е. $\hat{L}^{+} \neq \hat{L}$ в общем случае.

Покажем, как связаны меду собой эрмитово сопряженные операторы, для этого умножим обе части равенства (2.76) на произвольный кет-вектор $|b\rangle$. Тогда

$$\langle a|\hat{L}^{+}|b\rangle = \langle La|b\rangle = \langle b|La\rangle^{*} = \langle b|\hat{L}|a\rangle^{*},$$

т.е.

$$\langle a|\hat{L}^{+}|b\rangle = \langle b|\hat{L}|a\rangle^{*} \tag{2.85}$$

для любых кет-векторов $|a\rangle$ и $|b\rangle$.

Зачастую это равенство матричных элементов принимают в качестве определения эрмитово сопряженного оператора $\hat{L}^{+}$. Действительно, оно помогает по заданному оператору $\hat{L}(x)$, действующему в пространстве функций, найти эрмитово сопряженный оператор $\hat{L}^{+}(x)$, действующий в том же пространстве.

Как было показано в предыдущем параграфе, оператор $\hat{L}^{+}(x)$, представим в виде интегрального, и задается своим ядром $L(x,x') = \langle x|\hat{L}|x'\rangle$. Тогда ядро оператора $\hat{L}^{+}$ будет $L^{+}(x,x') = \langle x|\hat{L}^{+}|x'\rangle$, а согласно (2.85)

$$L^{+}(x,x') = L^{*}(x,x') \tag{2.86}$$

Следовательно, операция эрмитова сопряжения совпадает с эрмитовым сопряжением матриц и сводится к транспортированию (т.е. замене $x \leftrightarrow x'$) и комплексному сопряжению ядра оператора $\hat{L}(x)$. Соотношение (2.86) позволяет по ядру исходного оператора $\hat{L}(x)$ найти ядро сопряженного ему оператора, а, следовательно, и сам сопряженный оператор $\hat{L}^{+}(x)$. Например, ядро оператора дифференцирования $\hat{\partial}_x$, согласно (2.56), равно $\frac{d}{dx}\delta(x-x')$. Производя транспонировние $x \leftrightarrow x'$ и учитывая определение производной от δ-функции (Приложение 5), получаем ядро сопряженного оператора $\hat{\partial}_x^{+}$, которое равно $-\frac{d}{dx}\delta(x-x')$. Таким образом, ядра $\hat{\partial}_x(x,x')$ и $\hat{\partial}_x^{+}(x,x')$ различаются только знаком. Следовательно, отличаются только знаком и сами операторы, т.е.

$$\hat{\partial}_x^{+} = -\hat{\partial}_x \tag{2.87}$$

Аналогично можно показать, что для рассмотренных выше операторов (2.4)-(2.9), сопряженные совпадают с исходными:

$$\begin{aligned}&\hat{1}^{+}=\hat{1};\\&\hat{I}^{+}(x)=\hat{I}(x);\\&\hat{T}_{\varepsilon}^{+}(x)=\hat{T}_{-\varepsilon}(x);\\&\hat{\Omega}^{+}(x)=\hat{\Omega}(x).\end{aligned}\tag{2.88}$$

В заключение снова вернемся к представлению операторов. Как было показано в §3, в пространстве с базисом, оператор задается в виде бесконечной матрицы (непрерывной для непрерывного базиса и обычной – для дискретного), а его действие на представители кет-векторов (столбцы) сводится к матричному умножению матрицы на столбец. Эрмитово сопряжение оператора $\hat{L}$ означает, что оператор действует на бра-векторы, т.е. перемножается строка (представители бра-векторов) на эрмитово сопряженную матрицу оператора $\hat{L}$, что в результате снова дает строку – представитель бра-вектора $\langle La|$, сопряженный кет-вектору $|La\rangle$. Это видно, если взять комплексное сопряжение от обеих частей равенства (2.63)

$$\int_{-\infty}^{\infty}\langle x|\hat{L}|x'\rangle^{*}\langle x'|a\rangle^{*}dx'=\langle x|La\rangle$$

Учитывая (1.8) и (2.85), получаем

$$\int_{-\infty}^{\infty}\langle a|x'\rangle\langle x'|\hat{L}^{+}|x\rangle dx'=\langle La|x\rangle.\tag{2.89}$$

Если оператор $\hat{L}^{+}$ действует на кет-вектор, т.е. перемножается матрица оператора на столбец

$$\int_{-\infty}^{\infty}\langle x|\hat{L}^{+}|x'\rangle\langle x'|a\rangle dx'=\langle x|L^{+}a\rangle,\tag{2.90}$$

то получается новый столбец, прямо не связанный с кет-вектором $|La\rangle$.

Упражнения 2

1. Расписать операторы $\hat{L}(x)$

а) $\left(\hat{x}+\hat{\partial}_x\right)^2$;

б) $\left(\hat{\partial}_x+\dfrac{\hat{1}}{x}\right)^3$.

Решение. ***а)*** Определить оператор $\hat{L}(x)$ – это значит показать, как он действует на любые функции $\Psi(x)$. Учитывая определения (2.14) и (2.15) алгебры операторов, получаем

$$\left(\hat{x}+\hat{\partial}_x\right)^2\Psi(x)=\left(\hat{x}+\hat{\partial}_x\right)\left(x\Psi+\Psi'\right)=x^2\Psi+\Psi+2x\Psi'+\Psi''$$

Таким образом, оператор $\hat{L}(x)=\left(\hat{x}+\hat{\partial}_x\right)^2=x^2+2x\hat{\partial}_x+\hat{\partial}_x^2+\hat{1}$.

2. Доказать линейность операторов (2.4) - (2.9).

Решение. Докажем линейность, например, оператора инверсии $\hat{I}(x)$. Линейная комбинация функций $\sum_k C_k\Psi_k(x)=f(x)$ является функцией. Поэтому

$$\hat{I}(x)f(x)=f(-x)=\sum_k C_k\Psi_k(-x),\ \text{т.е.}\ \hat{I}(x)\left(\sum_k C_k\Psi_k(x)\right)=\sum_k C_k\hat{I}(x)\Psi_k(x)$$

и выполняется условие линейности (2.12).

3. Доказать свойства (2.21), (2.22), (2.24) для коммутаторов.

4. Найти коммутатор операторов $\hat{b}$ и $\hat{c}$, если $[\hat{c},\hat{a}]=\lambda\hat{a}$; $\left[\hat{a},\hat{b}\right]=\hat{c}$.

Указание: воспользоваться равенством (2.24)

Ответ: $\left[\hat{b},\hat{c}\right]=\lambda\hat{b}+\gamma\hat{a}$, где γ - любое число.

5. Пусть коммутаторы операторов $\hat{L}_i$ (i = 1,2,3) равны $\left[\hat{L}_i,\hat{L}_j\right]=i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k$ (ε_{ijk} – полностью антисимметричный тензор Леви-Чивиты, по повторяющимся индексам идет суммирование). Показать, что оператор $\hat{L}^2=\hat{L}_k^2$, коммутирует с любым оператором $\hat{L}_i$. (Воспользоваться равенством (2.23) и свойством $\varepsilon_{ijk}=-\varepsilon_{ijk}$).

6. Записать в явном виде оператор $\sin\left(a\hat{\partial}_x\right)$.

Указание: $\left(\sin(x)=\sum_{k=0}^{\infty}\dfrac{(-1)^k}{(2k+1)!}x^{2k+1}\right)$.

7. Выразить оператор трансляции $\hat{T}_\varepsilon(x)$ (2.8) через дифференциальный оператор.

Решение. По определению оператора $\hat{T}_\varepsilon(x)$ (2.8)

$\hat{T}_\varepsilon(x)\Psi(x)=\Psi(x+\varepsilon)$.

Правую часть этого равенства разложим в ряд Тейлора по ε в окрестности точки x.

$$\Psi(x+\varepsilon)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\Psi^{(n)}(x)\varepsilon^n.$$

Производную n-порядка можно представить как результат действия оператора $\left(\hat{\partial}_x\right)^n$ на функцию $\Psi(x)$. Тогда $\hat{T}_\varepsilon(x)\Psi(x)=\sum_{n=0}^{\infty}\dfrac{\varepsilon^n}{n!}\dfrac{d^n}{dx^n}\Psi(x)=\sum_{n=0}^{\infty}\dfrac{1}{n!}\left(\varepsilon\hat{\partial}_x\right)^n\Psi(x)$, т.е. $\hat{T}_\varepsilon(x)=e^{\varepsilon\hat{\partial}_x}$.

8. Пусть $\hat{A}$ - неособенный оператор. Предполагая λ малой величиной, найти оператор $\left(\hat{A}-\lambda\hat{B}\right)^{-1}$.

Решение. Представим искомый оператор в виде $\left(\hat{A}-\lambda\hat{B}\right)^{-1}=\sum_{n=0}^{\infty}\lambda^n\hat{C}^n$.

Подействуем на обе части этого равенства оператором $\left(\hat{A}-\lambda\hat{B}\right)$ слева. Тогда

$\hat{1}=\left(\hat{A}-\lambda\hat{B}\right)\sum_{n=0}^{\infty}\lambda^n\hat{C}_n=\sum_{n=0}^{\infty}\lambda^n\hat{A}\hat{C}_n-\sum_{n=0}^{\infty}\lambda^{n+1}\hat{B}\hat{C}_n=\hat{A}\hat{C}_0+\sum_{n=0}^{\infty}\lambda^{n+1}(\hat{A}\hat{C}_{n+1}-\hat{B}\hat{C}_n)$.

Приравняем члены при одинаковых степенях λ.

$\hat{A}\hat{C}_0=\hat{1}$; $\hat{A}\hat{C}_{n+1}-\hat{B}\hat{C}_n=0$, т.е. $\hat{C}_0=\hat{A}^{-1}$; $\hat{C}_{n+1}=\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{C}_n$.

Таким образом, $\left(\hat{A}-\lambda\hat{B}\right)^{-1}=\hat{A}^{-1}+\lambda\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\lambda^2\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\ldots=\hat{A}^{-1}\sum_{n=0}^{\infty}\lambda^n(\hat{B}\hat{A}^{-1})^n$.

9. Исходя из равенства (2.85), доказать свойства эрмитова сопряжения (2.77) – (2.79), (2.81).

Решение. Докажем, например, свойство (2.78). По (2.85) для произведения операторов $\hat{L}\hat{M}$

$$\langle a|\left(\hat{L}\hat{M}\right)^{+}|b\rangle = \langle b|\hat{L}\hat{M}|a\rangle^{*} = \langle b|\hat{L}|Ma\rangle^{*} = \langle Ma|\hat{L}^{+}|b\rangle =$$
$$= \left\langle Ma\middle|\hat{L}^{+}b\right\rangle = \left\langle \hat{L}^{+}b\middle|\langle M|a\rangle^{*} = \langle a|\hat{M}^{+}\middle|\hat{L}^{+}b\right\rangle = \langle a|\hat{M}^{+}\hat{L}^{+}|b\rangle .$$

Так как кет – векторы $|a\rangle$ и $|b\rangle$ – любые, то $\left(\hat{L}\hat{M}\right)^{+} = \hat{M}^{+}\hat{L}^{+}$.

10. Найти операторы эрмитово сопряженные для
а) операторов (2.4) – (2.9),
б) оператора $i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$,
в) оператора Лапласа $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$.

Решение. а) найдем, например, $\hat{T}_{\varepsilon}^{+}$. Согласно (2.56), ядро $\hat{T}_{\varepsilon}$ будет равно $\delta\left(x+\varepsilon-x'\right)$. Тогда ядро сопряженного оператора $\hat{T}_{\varepsilon}^{+}$ по (2.86) будет равно $\hat{T}_{\varepsilon}^{+}\left(x,x'\right) = \hat{T}_{\varepsilon}^{*}\left(x',x\right) = \delta\left(x'+\varepsilon-x\right)$;

Так как δ-функция четная, то $\hat{T}_{\varepsilon}^{+}\left(x,x'\right) = \delta\left(x-\varepsilon-x'\right) = \hat{T}_{-\varepsilon}\left(x,x'\right)$,

т.е. является ядром оператора трансляции на величину -ε. Таким образом, $\hat{T}_{\varepsilon}^{+}\left(x\right) = \hat{T}_{-\varepsilon}\left(x\right)$.

Указания для б) и в)**:** воспользоваться свойствами эрмитова сопряжения (2.78) и (2.79), а также значением $\hat{\partial}_{x}^{+}$ (2.87).

11. Доказать, что для неособенного оператора $\left(\hat{A}^{-1}\right)^{+} = \left(\hat{A}^{+}\right)^{-1}$.

Решение. По определению обратного оператора, $\hat{A}^{-1}\cdot\hat{A} = \hat{1}$. Возьмем эрмитово сопряжение от обеих частей этого равенства: $\left(\hat{A}^{-1}\cdot\hat{A}\right)^{+} = \hat{1}$. Учитывая свойство (2.78), получаем $\hat{A}^{+}\cdot\left(\hat{A}^{-1}\right)^{+} = \hat{1}$ или $\left(\hat{A}^{-1}\right)^{+} = \left(\hat{A}^{+}\right)^{-1}$.

3. НЕКОТОРЫЕ КЛАССЫ ОПЕРАТОРОВ

§1. Эрмитовы операторы

Оператор $\hat{L}$ и эрмитово сопряженный ему оператор $\hat{L}^{+}$, вообще говоря, являются разными операторами. Но, как показывают рассмотренные выше примеры, существуют операторы, для которых они совпадают,

$$\hat{L}^{+} = \hat{L} \tag{3.1}$$

(оператор одинаковым образом действует как в пространстве кет-, так и в пространстве бра-векторов). Такие операторы называются *эрмитовыми* или *самосопряжеными*. Для эрмитовых операторов выполняется равенство

$$\langle a|\hat{L}|b\rangle = \langle b|\hat{L}|a\rangle^{*} \tag{3.2}$$

при любых $|a\rangle$ и $|b\rangle$. Ядра эрмитовых операторов не меняются при транспонировании и комплексном сопряжении

$$L(x,x') = L^{*}(x',x). \tag{3.3}$$

Формулы (3.2) и (3.3) непосредственно получаются из (3.1) и (2.85), (2.86). Из этих формул следует, что представление эрмитова оператора в некотором базисе есть матрица, у которой матричные элементы, симметричные относительно главной диагонали, комплексно сопряженные между собой, а диагональные матричные элементы вещественны. Такие матрицы также называют эрмитовыми.

Оператор $\hat{A}$ называется *антиэрмитовым*, если

$$\hat{A}^{+} = -\hat{A}. \tag{3.4}$$

Любой линейный оператор $\hat{L}$ может быть представлен (и единственным образом) в виде суммы эрмитова и антиэрмитова операторов

$$\hat{L} = \hat{H}_L + \hat{A}_L, \tag{3.5}$$

где

$$\hat{H}_L = \frac{1}{2}\left(\hat{L} + \hat{L}^{+}\right) \tag{3.6}$$

эрмитов оператор, а

$$\hat{A}_L = \frac{1}{2}\left(\hat{L} - \hat{L}^{+}\right) \tag{3.7}$$

– антиэрмитов.

Очевидно, что любая линейная комбинация эрмитовых операторов с вещественными коэффициентами есть эрмитов оператор.

Произведение двух эрмитовых операторов не обязательно эрмитов оператор, ибо согласно (2.78) и (3.1)

$$\left(\hat{L}\hat{M}\right)^{+} = \hat{M}^{+}\hat{L}^{+} = \hat{M}\hat{L} \tag{3.8}$$

Произведение будет эрмитовым оператором, если эрмитовы операторы коммутируют.
Коммутатор эрмитовых операторов есть антиэрмитов оператор:

$$\left[\hat{L},\hat{M}\right]^{+} = \left(\hat{L}\hat{M}\right)^{+} - \left(\hat{M}\hat{L}\right)^{+} = \hat{M}\hat{L} - \hat{L}\hat{M} = -\left[\hat{L},\hat{M}\right]. \tag{3.9}$$

Аналогично показывается, что антикоммутатор эрмитовых операторов – эрмитов оператор:

$$\left[\hat{L},\hat{M}\right]_{+}^{+} = \left[\hat{L},\hat{M}\right]_{+}. \tag{3.10}$$

Учитывая (3.9), (3.10), разложение (3.5) для произведения операторов можно записать в виде

$$\hat{L}\hat{M} = \frac{1}{2}\left(\left[\hat{L},\hat{M}\right]_{+} + \left[\hat{L},\hat{M}\right]\right). \tag{3.11}$$

Любая вещественная функция от эрмитова оператора есть также эрмитов оператор.

Из рассмотренных ранее примеров (2.4) - (2.9) эрмитовыми операторами являются: $\hat{1}, \hat{I}(x), \hat{x}, \hat{\Omega}(x)$. Оператор дифференцирования $\hat{\partial}_x$ является антиэрмитовым.

Эрмитовы операторы образуют очень важный класс операторов в математическом аппарате квантовой теории. С каждой физической величиной в квантовой механике связывается определенный самосопряженный или эрмитов оператор.

§2. Унитарные операторы

Другим важным классом операторов, имеющим широкое применение в квантовой теории, является класс унитарных операторов.

По определению, оператор $\hat{U}$ называется унитарным, если

$$\hat{U}^{+} = \hat{U}^{-1}. \tag{3.12}$$

Определение (3.12) можно переписать и в виде

$$\hat{U}^{+}\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^{+} = 1. \tag{3.13}$$

Примером унитарного оператора может служить оператор

$$\hat{U} = e^{i\hat{L}}, \tag{3.14}$$

где $\hat{L}$ – эрмитов. Действительно,

$$\hat{U}^{+} = \left(\sum_n \frac{i^n}{n!} \hat{L}^n \right)^{+} = \sum_n \frac{(-i)^n}{n!} \hat{L}^n = e^{-i\hat{L}} = \hat{U}^{-1}. \tag{3.15}$$

Из ранее приведенных примеров (2.4) - (2.9) унитарными операторами являются $\hat{I}(x)$ и $\hat{T}_\varepsilon(x)$.

Рассмотрим в пространстве кет-векторов два различных ортонормированных базиса $|n\rangle$ и $|\overline{n}\rangle$, между которыми существует взаимнооднозначное соответствие, т.е. кет-векторы обоих базисов нумеруются одной системой индексов. Два кет-вектора $|n\rangle$ и $|\overline{n}\rangle$ из разных базисов, но с одинаковым индексом как-то соответствуют друг другу. Это соответствие выражается оператором

$$|\overline{n}\rangle = \hat{U}|n\rangle, \tag{3.16}$$

который является унитарным. Действительно, из условия ортонормировки базиса $|\overline{n}\rangle$ следует

$$\delta_{mn} = \langle \overline{m}|\overline{n}\rangle = \langle Um|Un\rangle = \langle m|\hat{U}^{+}\hat{U}|n\rangle, \tag{3.17}$$

Но базис $|n\rangle$ также ортонормирован, т.е. $\langle m|n\rangle = \delta_{mn}$. Поэтому в (3.17) $\hat{U}^{+}\hat{U} = 1$ или $\hat{U}^{+} = \hat{U}^{-1}$, т.е. $\hat{U}$ – унитарный оператор. Таким образом, переход от одного базиса к другому, а, следовательно, и смена представлений, осуществляется унитарным оператором. (Отметим только, что нельзя ввести унитарный оператор, переводящий дискретный базис в непрерывный и наоборот).

Рассмотрим представление унитарного оператора $\hat{U}$ (3.16) в базисе $|n\rangle$:

$$\langle m|\hat{U}|n\rangle = \langle m|\overline{n}\rangle. \tag{3.18}$$

Видим, что матрица унитарного преобразования состоит из столбцов, которые являются представителями кет-векторов нового базиса $|\overline{n}\rangle$ в старом $|n\rangle$. Аналогично, матрица для обратного к унитарному оператору состоит из столбцов, которые являются представителями кет-векторов старого базиса $|n\rangle$ в новом $|\overline{n}\rangle$. В этом легко убедиться, если взять комплексное сопряжение от обеих частей равенства (3.18):

$$\langle m|\overline{n}\rangle^{*} = \langle \overline{n}|m\rangle = \langle m|\hat{U}|n\rangle^{*} = \langle n|\hat{U}^{+}|m\rangle. \tag{3.19}$$

В том случае, когда можно построить унитарный оператор $\hat{U}$, можно определить и операцию, которая является в некотором смысле дополнительной к операции изменения представления.

Вместо того чтобы преобразовывать один базис в другой унитарным оператором $\hat{U}$ (3.16) можно осуществить преобразование самих кет-векторов и операторов следующим образом:

$$|a'\rangle = \hat{U}|a\rangle, \tag{3.20}$$

$$\hat{L}' = \hat{U}\hat{L}\hat{U}^{+}. \tag{3.21}$$

Такие преобразования называются *унитарными преобразованиями* кет-векторов и операторов, операторы $\hat{L}$ и $\hat{L}'$ называют *унитарно-эквивалентными.*

Унитарное преобразование кет-векторов не меняет скалярного произведения: если $|a'\rangle = \hat{U}|a\rangle$, $|b'\rangle = \hat{U}|b\rangle$, то

$$\langle a'|b'\rangle = \langle Ua|Ub\rangle = \langle a|\hat{U}^{+}\hat{U}|b\rangle = \langle a|b\rangle. \tag{3.22}$$

В частности, унитарное преобразование не меняет норму кет-вектора. Эти свойства станут очевидными, если вспомнить, что унитарный оператор осуществляет переход от одного базиса к другому, а скалярное произведение от выбора базиса не зависит.

Унитарное преобразование не меняет и любых операторных соотношений. Например, если $\left[\hat{L},\hat{M}\right] = \hat{N}$, то коммутатор унитарно-эквивалентных операторов $\hat{L}'$ и $\hat{M}'$ будет унитарно эквивалентен $\hat{N}'$. Действительно, умножая обе части коммутатора справа на $\hat{U}$, а слева на $\hat{U}^{+}$ получаем

$$\hat{U}\left[\hat{L},\hat{M}\right]\hat{U}^{+} = \hat{U}\hat{N}\hat{U}^{+} = \hat{N}'. \tag{3.23}$$

С другой стороны, так как $\hat{U}^{+}\hat{U} = \hat{1}$, то

$$\hat{U}\left[\hat{L},\hat{M}\right]\hat{U}^{+} = \hat{U}\left(\hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L}\right)\hat{U}^{+} = \hat{U}\hat{L}\hat{U}^{+}\hat{U}\hat{M}\hat{U}^{+} - \hat{U}\hat{M}\hat{U}^{+}\hat{U}\hat{L}\hat{U}^{+} = \left[\hat{L}',\hat{M}'\right] \tag{3.24}$$

Если $\hat{L}$ – эрмитов оператор, то унитарно-эквивалентный ему оператор $\hat{L}'$ также эрмитов

$$\left(\hat{L}'\right)^{+} = \left(\hat{U}\hat{L}\hat{U}^{+}\right)^{+} = \left(\hat{U}^{+}\right)^{+}\hat{L}^{+}\hat{U}^{+} = \hat{U}\hat{L}\hat{U}^{+} = \hat{L}'. \tag{3.25}$$

Произведение унитарных операторов также унитарный оператор

$$\left(\hat{U}_1\hat{U}_2\right)\left(\hat{U}_1\hat{U}_2\right)^{+} = \hat{U}_1\hat{U}_2\hat{U}_2^{+}U_1^{+} = \hat{U}_1\hat{U}_1^{+} = \hat{1}. \tag{3.26}$$

Если унитарный оператор “бесконечно близок” к единичному, то такой оператор называется *инфинитезимальным*. В этом случае $\hat{U}$ можно записать в виде

$$\hat{U} = \hat{1} + i\varepsilon\hat{F}, \tag{3.27}$$

где ε – бесконечно малое вещественное число. Условие унитарности (3.13) в этом случае принимает вид

$$\left(\hat{1} - i\varepsilon\hat{F}^{+}\right)\left(\hat{1} + i\varepsilon\hat{F}\right) = \left(\hat{1} + i\varepsilon\hat{F}\right)\left(\hat{1} - i\varepsilon\hat{F}^{+}\right) = \hat{1}, \tag{3.28}$$

из которого, сохраняя члены только первого порядка малости по ε, получаем $\hat{F}^{+} = \hat{F}$, т.е. $\hat{F}$ – эрмитов.

При инфинитезимальном преобразовании кет-векторы и операторы преобразуются по формулам

$$|a'\rangle = |a\rangle + i\varepsilon\hat{F}|a\rangle, \tag{3.29}$$

$$\hat{A}' = \left(\hat{1} + i\varepsilon\hat{F}\right)\hat{A}\left(\hat{1} - i\varepsilon\hat{F}\right) = \hat{A} + i\varepsilon\left[\hat{F},\hat{A}\right]. \tag{3.30}$$

§3. Положительно определенные операторы.

По определению, оператор $\hat{A}$ называется *положительно определенным*, если

$$\langle a|\hat{A}|a\rangle \geq 0 \tag{3.31}$$

для любых кет-векторов $|a\rangle$. Положительно определенные операторы символически обозначают как $\hat{A} > 0$. Примером положительно определенного оператора может служить оператор $\hat{F}^+\hat{F}$, где $\hat{F}$ – произвольный оператор. Действительно,

$$\langle a|\hat{F}^+\hat{F}|a\rangle = \langle Fa|Fa\rangle \geq 0 \tag{3.32}$$

для любого $|a\rangle$. Следовательно,

$$\hat{F}^+\hat{F} > 0. \tag{3.33}$$

Отсюда, в частности, следует, что квадрат любого эрмитого оператора есть положительно определенный оператор.

§4. Проекционные операторы. Условие полноты базиса.

Пусть $|k\rangle$ – нормированный на единицу кет-вектор. Рассмотрим оператор, переводящий любой кет-вектор $|a\rangle$ в кет-вектор, пропорциональный $|k\rangle$:

$$|a\rangle \to |k\rangle\langle k|a\rangle = \hat{P}_k|a\rangle, \tag{3.34}$$

где $\langle k|a\rangle$ – скалярное произведение. Очевидно, что оператор $\hat{P}_k$ определяется кет-вектором $|k\rangle$ и его символически можно записать в виде:

$$\hat{P}_k = |k\rangle\langle k|. \tag{3.35}$$

Тогда его действие на кет-вектор $|a\rangle$ сводится к формальному образованию скалярного произведения $\langle k|a\rangle$, которое умножается на кет-вектор $|k\rangle$.

По определению (3.34), оператор $\hat{P}_k$ переводит любой кет-вектор $|a\rangle$, не ортогональный кет-вектору $|k\rangle$, в кет-вектор, пропорциональный $|k\rangle$. Ортогональный к $|k\rangle$ кет-вектор он переводит в нуль. На определяющий кет-вектор $|k\rangle$ $\hat{P}_k$ действует как единичный оператор:

$$\hat{P}_k|k\rangle = |k\rangle\langle k|k\rangle = |k\rangle. \tag{3.36}$$

Аналогом оператора $\hat{P}_k$ в обычном трехмерном пространстве является операция проектирования вектора $\vec{a}$ на направление, определяемое единичным вектором $\vec{k}$. По этой причине оператор $\hat{P}_k$ называют *оператором проектирования* на одномерное пространство, определяемое кет-вектором $|k\rangle$ или просто *проекционным оператором* (или *проектором*).

Очевидно, что $\hat{P}_k$ – линейный оператор, поэтому его действие в пространстве функций (скажем в *x*-представлении) можно представить в виде интегрального оператора (2.51) с ядром

$$P_k(x,x') = \langle x|\hat{P}_k|x'\rangle = \langle x|k\rangle\langle k|x'\rangle = \langle x|k\rangle\langle x'|k\rangle^* = \Psi_k(x)\Psi_k^*(x'), \tag{3.37}$$

т.е. в виде

$$\hat{P}_k(x)\Psi_a(x) = \int_{-\infty}^{\infty} P_k(x,x')\Psi_a(x')dx' = \Psi_k(x)\int_{-\infty}^{\infty}\Psi_k^*(x')\Psi_a(x')dx' = \langle k|a\rangle\Psi_k(x) \tag{3.38}$$

Таким образом, $\hat{P}_k(x)$ переводит функцию $\Psi_a(x)$ в функцию, пропорциональную $\Psi_k(x)$.

Проекционный оператор обладает следующими тремя характерными свойствами:

1) является эрмитовым

$$\hat{P}_k^+ = \hat{P}_k; \tag{3.39}$$

2) идемпотентным

$$\hat{P}_k^2 = \hat{P}_k; \tag{3.40}$$

3) положительно определенным

$$\hat{P}_k > 0. \tag{3.41}$$

Действительно,

$$\hat{P}_k^+ = \left(|k\rangle\langle k|\right)^+ = \langle k|^+ \cdot |k\rangle^+ = |k\rangle\langle k| = \hat{P}_k; \tag{3.42}$$

$$\hat{P}_k^2 = |k\rangle\langle k|k\rangle\langle k| = |k\rangle\langle k| = \hat{P}_k; \tag{3.43}$$

$$\langle a|\hat{P}_k|a\rangle = \langle a|k\rangle\langle k|a\rangle = \left|\langle k|a\rangle\right|^2 \geq 0. \tag{3.44}$$

Оператор проектирования $\hat{P}_k$ – особенный оператор, не имеющий обратного.

Пусть теперь $|k\rangle$, $k = 0,...,\infty$ – дискретный ортонормированный базис. Свяжем с ним проекционные операторы $\hat{P}_k = |k\rangle\langle k|$ и их сумму

$$\sum_{k=0}^{\infty} \hat{P}_k = \sum_{k=0}^{\infty} |k\rangle\langle k|. \tag{3.45}$$

Подействуем этой суммой (3.45) на произвольный кет-вектор $|a\rangle$, получим

$$\sum_{k=0}^{\infty} \hat{P}_k |a\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} |k\rangle\langle k|a\rangle = |a\rangle, \tag{3.46}$$

поскольку промежуточная сумма в (3.46) есть разложение кет-вектора $|a\rangle$ по ортонормированному базису $|k\rangle$ с явно записанными коэффициентами разложения (1.16) и (1.18). Следовательно, сумма всех операторов проектирования, связанных с ортонормированным базисом, равна единичному оператору

$$\sum_{k=0}^{\infty} \hat{P}_k = \sum_{k=0}^{\infty} |k\rangle\langle k| = \hat{1}. \tag{3.47}$$

Это операторное равенство можно записать и как равенство соответствующих ядер

$$\sum_{k=0}^{\infty} \hat{P}(x, x') = 1(x, x'), \tag{3.48}$$

или с учетом (3.37) и (2.56)

$$\sum_{k=0}^{\infty} \Psi_k(x)\Psi_k^*(x') = \delta(x - x'). \tag{3.49}$$

Равенство (3.47) является необходимым и достаточным *условием полноты базиса* $|k\rangle$, а (3.49) – необходимое и достаточное условие полноты ортонормированных базисных функций $\Psi_k(x)$. Действительно, необходимость была доказана выше. Докажем достаточность. Пусть равенство (3.47) имеет место. Тогда имеет место и равенство (3.46) для любого кет-вектора $|a\rangle$. Последнее же означает, что любой кет-вектор $|a\rangle$ может быть разложен по кет-векторам $|k\rangle$ и, следовательно, кет-векторы $|k\rangle$ образуют базис.

Представлением оператора проектирования в непрерывном базисе является непрерывная матрица (3.37). В своем собственном базисе оператор проектирования $\hat{P}_k$ задается обычной бесконечной матрицей

$$\langle n|\hat{P}_k|m\rangle = \langle n|k\rangle\langle k|m\rangle = \delta_{nk}\delta_{mk}, \tag{3.50}$$

состоящей из всех нулей, кроме k-го элемента на главной диагонали, который равен единице.

Аналогично проекторам на кет-векторах из гильбертова пространства L^2 можно построить соответствующие проекторы на кет-векторах из оснащенного гильбертова пространства, т.е. на кет-векторах с бесконечной нормой. Пусть $|p\rangle$ – такой кет-вектор, где индекс p принимает непрерывные значения. Тогда вместо оператора проектирования (3.35) вводят оператор

$$\delta\hat{P}_p = \int_p^{p+dp} |p'\rangle\langle p'|dp', \tag{3.51}$$

который называется *дифференциальным проектором*. Его действие на любой кет-вектор $|a\rangle$ дает

$$\delta\hat{P}_p|a\rangle = \int_p^{p+dp} \langle p'|a\rangle|p'\rangle dp' \tag{3.52}$$

“волновой пакет”. Действие (3.51) на определяющий кет-вектор $|p\rangle$ эквивалентно действию единичного оператора:

$$\delta\hat{P}_p|p\rangle = \int_p^{p+dp} \langle p'|p\rangle|p'\rangle dp' \int_p^{p+dp} \delta(p-p')|p'\rangle = |p\rangle. \tag{3.53}$$

Легко проверить, что свойства проектора (3.39)-(3.41) выполняются и для дифференциального проектора (3.51). Условия полноты (3.47) и (3.49) для непрерывного базиса перепишутся в виде

$$\int_{-\infty}^{\infty} |p\rangle\langle p|dp = \hat{1} \tag{3.54}$$

или

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_p(x)\Psi_p^*(x')dp = \delta(x-x'). \tag{3.55}$$

§5. Квазипроекторы. Квазиспектральное разложение операторов.

Естественным обобщением оператора проектирования (3.35) является оператор вида

$$\hat{P}_{kk'} = |k\rangle\langle k'|, \tag{3.56}$$

где $|k\rangle$ и $|k'\rangle$, вообще говоря, разные базисные векторы. Его действие на произвольный кет-вектор $|a\rangle$ дает

$$\hat{P}_{kk'} = |a\rangle = |k\rangle\langle k'|a\rangle, \tag{3.57}$$

т.е. он также как и проектор переводит произвольный кет-вектор $|a\rangle$ в кет-вектор, пропорциональный $|k\rangle$. Однако кет-вектор $|a\rangle$, ортогональный $|k\rangle$, он не обращает в нуль, а при действии на $|k\rangle$ дает нуль. Такие операторы (3.56) называются *квазипроекционными операторами* или *квазипроекторами*. При $|k\rangle \neq |k'\rangle$ квазипроектор не обладает свойствами (3.39)-(3.41).

Ядро квазипроектора (3.56) очевидно равно

$$P_{kk'}(x,x') = \Psi_k(x)\Psi_{k'}(x'). \tag{3.58}$$

Пусть $|k\rangle$ – ортонормированный базис. Тогда любой линейный оператор $\hat{L}$ может быть представлен в виде разложения по квазипроекторам $\hat{P}_{kk'}$, а именно

$$\hat{L} = \sum_{k,k'=0}^{\infty} \langle k|\hat{L}|k'\rangle \hat{P}_{kk'}. \tag{3.59}$$

Это разложение называется *квазиспектральным разложением* оператора $\hat{L}$. Для доказательства соотношения (3.59) подействуем оператором $\hat{L}$ на левую и правую часть разложения произвольного кет-вектора $|a\rangle$ по базисным кет-векторам $|k'\rangle$:

$$\left|a\right\rangle = \sum_{k'=0}^{\infty} \left|k'\right\rangle \left\langle k'\middle|a\right\rangle. \tag{3.60}$$

В силу линейности, оператор $\hat{L}$ проносится под знак суммы и действует на базисные кет-векторы

$$\hat{L}\left|a\right\rangle = \sum_{k'=0}^{\infty} \left\langle k'\middle|a\right\rangle \hat{L}\left|k'\right\rangle. \tag{3.61}$$

Снова разложим кет-вектор $\hat{L}\left|k\right\rangle$ по базисным кет-векторам:

$$\hat{L}\left|k'\right\rangle = \left|Lk'\right\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \left|k\right\rangle \left\langle k\middle|Lk'\right\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \left|k\right\rangle \left\langle k\right|\hat{L}\left|k'\right\rangle. \tag{3.62}$$

Подставляя это разложение в (3.61), получаем

$$\hat{L}\left|a\right\rangle = \sum_{k,k'=0}^{\infty} \left|k\right\rangle \left\langle k\right|\hat{L}\left|k'\right\rangle \left\langle k'\middle|a\right\rangle = \sum_{k,k'=0}^{\infty} \left\langle k\right|\hat{L}\left|k'\right\rangle \hat{P}_{kk'}\left|a\right\rangle, \tag{3.63}$$

откуда в силу произвольности $\left|a\right\rangle$ имеем искомое соотношение (3.59).

Соотношение (3.59), переписанное для ядер операторов $\hat{L}$ и $\hat{P}_{kk'}$ принимает вид

$$L(x,x') = \sum_{k,k'=0}^{\infty} \left\langle k\right|\hat{L}\left|k'\right\rangle \Psi_k(x)\Psi_{k'}(x') \tag{3.64}$$

и выражает тот очевидный факт, что ядро $L(x,x')$, как функция переменных x и x', всегда может быть разложена в ряд по базисной системе функций.

В заключение приведем аналог квазиспектрального разложения оператора $\hat{L}$ (3.59) в случае непрерывного базиса

$$\hat{L} = \int_{-\infty}^{\infty} dp \int_{-\infty}^{\infty} dp' \left\langle p\right|\hat{L}\left|p'\right\rangle \left|p\right\rangle \left\langle p'\right|. \tag{3.65}$$

Упражнения 3

1. Показать, что если оператор $\hat{C}$ – эрмитов, то оператор $\hat{C}' = \hat{A}\hat{C}\hat{A}$ также будет эрмитовым.

2. Показать, что произвольный оператор $\hat{F}$ можно представить в виде $\hat{F} = \hat{A} + i\hat{B}$, где $\hat{A}$ и $\hat{B}$ – эрмитовы операторы.
(**Ответ:** $\hat{A} = \frac{1}{2}\left(\hat{F} + \hat{F}^{+}\right)$, $\hat{B} = \frac{1}{2i}\left(\hat{F} - \hat{F}^{+}\right)$).

3. Оператор $\hat{F}$ – не эрмитов оператор. В каком случае $\hat{F}^2$ является эрмитовым?
Решение: представим $\hat{F}$ в виде $\hat{F} = \hat{A} + i\hat{B}$, где $\hat{A}$ и $\hat{B}$ – эрмитовы операторы (упражнение 3.2). Тогда $\hat{F}^2 = \hat{A}^2 - \hat{B}^2 + i\left[\hat{A},\hat{B}\right]_+$. Следовательно, если эрмитова и антиэрмитлва части оператора $\hat{F}$ антикоммутируют, то $\hat{F}^2$ – эрмитов.

4. Ядро оператора $\hat{L}$ является функцией вида:
а) $L(x,x') = f(x + x')$;
б) $L(x,x') = f(x - x')$;
в) $L(x,x') = f(x)g(x')$.
Какие ограничения на функции $f(x)$ и $g(x)$ вытекают из эрмитовости оператора $\hat{L}$.
Решение: *в)* Если $\hat{L}$ – эрмитов оператор, то $L(x,x') = L^*(x',x)$ или
$f(x)g(x') = f^*(x')g^*(x)$. Это возможно, если $f(x) = cg^*(x)$, где c – вещественное число.

5. Унитарный оператор $\hat{U}$ удовлетворяет уравнению $\hat{U}^2 = \hat{U}$. Найти явный вид этого оператора.

6. Оператор $\hat{U}$ – унитарный. В каком случае оператор $\hat{U}' = c\hat{U}$, где c – некоторое число, также является унитарным? (**Ответ**: $c = e^{i\alpha}$).

7. Может ли унитарный оператор одновременно являться и эрмитовым?

8. Если операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}^{-1}$ коммутируют, то их произведение можно записать в виде дроби $\frac{\hat{A}}{\hat{B}}$. Показать, что если $\hat{A}$ и $\hat{B}$ – эрмитовы операторы, то оператор $\hat{U} = \frac{\hat{A}+i\hat{B}}{\hat{A}-i\hat{B}}$ является унитарным. Представить в указанном виде оператор $\hat{U} = e^{i\hat{F}}$, где $\hat{F}$ – эрмитов.

Решение: т.к. $\left(\hat{A}^{-1}\right)^+ = \left(\hat{A}^+\right)^{-1}$ (упражнение 2.2), то

$$\hat{U}^+ = \left\{\left(\hat{A}+i\hat{B}\right)\left(\hat{A}-i\hat{B}\right)^{-1}\right\}^+ = \left\{\left(\hat{A}+i\hat{B}\right)^+\right\}^{-1}\left(\hat{A}+i\hat{B}\right)^+.$$

Учитывая, что $\hat{A}$ и $\hat{B}$ – эрмитовы, а также свойство (2.79) эрмитова сопряжения, далее получаем

$$\hat{U}^+ = \left(\hat{A}+i\hat{B}\right)^{-1}\left(\hat{A}-i\hat{B}\right) = \frac{\hat{A}-i\hat{B}}{\hat{A}+i\hat{B}} = \hat{U}^{-1},$$

т.е. $\hat{U}$ – действительно унитарный.

Представим в виде дроби оператор $\hat{U} = e^{i\hat{F}}$:

$$e^{i\frac{\hat{F}}{2}} = \left(e^{-i\frac{\hat{F}}{2}}\right)^{-1} = \frac{\cos\left(\frac{\hat{F}}{2}\right) + i\sin\left(\frac{\hat{F}}{2}\right)}{\cos\left(\frac{\hat{F}}{2}\right) - i\sin\left(\frac{\hat{F}}{2}\right)}.$$

9. Для операторов $\hat{x}$ и $\hat{\partial}_x$ найти унитарно эквивалентные при унитарных преобразованиях, осуществляемых операторами:

а) инверсии $\hat{I}(x)$,

б) трансляции $\hat{T}_\varepsilon(x)$.

Решение: б) $\hat{x}' = \hat{T}_\varepsilon \cdot \hat{x} \cdot \hat{T}_\varepsilon^+ = \hat{T}_\varepsilon \cdot \hat{x} \cdot \hat{T}_{-\varepsilon}$. Подействуем оператором $\hat{x}'$ на произвольную функцию $\Psi(x)$:

$$\hat{x}'\Psi(x) = \hat{T}_\varepsilon(x)\hat{x}\hat{T}_{-\varepsilon}(x)\Psi(x) = \hat{T}_\varepsilon(x)\left(x\Psi(x-\varepsilon)\right) = (x+\varepsilon)\Psi(x),$$

таким образом, x' - оператор умножения на число $x+\varepsilon$.

Аналогично, $\hat{\partial}'_x\Psi(x) = \hat{T}_\varepsilon(x)\hat{\partial}_x\hat{T}_{-\varepsilon}(x)\Psi(x) = \hat{T}_\varepsilon(x)\Psi'(x-\varepsilon) = \Psi'(x) = \hat{\partial}_x\Psi(x)$

т.е. $\hat{\partial}'_x = \hat{\partial}_x$.

10. Записать условие полноты базиса для

а) функций Чебышева – Эрмита (1.22);

б) функций Лагерра (1.24);

в) сферических функций (1.26)

Ответ: $\sum\limits_{l=0}^{\infty}\sum\limits_{m=-l}^{l} Y_l^{m*}(\theta,\varphi)\cdot Y_l^m(\theta',\varphi') = \delta(\Omega-\Omega') = \dfrac{\delta(\theta-\theta')\delta(\varphi-\varphi')}{\sin(\theta)}$

11. Показать, что функции $\Psi_p(\vec{r}) = \dfrac{1}{\left(\sqrt{(2\pi)^3}\right)} e^{i(\vec{p}\vec{r})}$ образуют непрерывный базис (для них выполняется условие полноты).

12. Найти представление квазипроектора $\hat{P}_{kk'}$, в свом базисе $|k\rangle$.

4. СОБСТВЕННЫЕ ВЕКТОРЫ И СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ ОПЕРАТОРОВ

§ 1. Общие определения и теоремы

Пусть $\hat{L}$ — линейный оператор. Среди векторов, на которые может действовать $\hat{L}$ могут оказаться такие, которые «существенно» не меняются под действием оператора, а просто умножаются на некоторое комплексное число:

$$\hat{L}\left|l\right\rangle = l\left|l\right\rangle . \tag{4.1}$$

По определению, комплексное число l называется *собственным значением* оператора $\hat{L}$, а кет-вектор $\left|l\right\rangle$ — *собственным кет-вектором, принадлежащим собственному значению* l (обычно удобно помечать собственные кет-вектора тем же числом, что и собственное значение, к которому они принадлежат).

Если собственные кет-векторы оператора принадлежат оснащенному гильбертову пространству $\tilde{L}^2$, то соответсвующие им собственные значения называются *главными собственными значениями*, а множество всех главных значений оператора – его *спектром*.

Ясно, что соотношению (4.1) при заданном $\hat{L}$ может удовлетворять отнюдь не всякий кет-вектор $\left|l\right\rangle$. Иными словами, соотношение (4.1) является уравнением для определения собственных кет-векторов $\left|l\right\rangle$.

На практике удобнее иметь дело не с абстрактными кет-векторами, а с их представителями, например, функциями $\psi_l(x)$. При этом уравнение (4.1) переходит в уравнение на собственные функции (представление для собственных кет-векторов):

$$\hat{L}(x)\psi_l(x) = l\psi_l(x) . \tag{4.2}$$

Если $\hat{L}(x)$ — дифференциальный оператор, то (4.2) — дифференциальное уравнение. Например, пусть

$$\hat{L} = \hat{\partial}_x + \hat{x} . \tag{4.3}$$

Тогда (4.2) будет дифференциальным уравнением

$$\left(\frac{d}{dx} + x\right)\psi_l(x) = l\psi_l(x) \text{ или } \frac{d\psi_l(x)}{dx} + (x-l)\psi_l(x) = 0 . \tag{4.4}$$

Решением уравнения (4.4) является собственная функция

$$\psi_l(x) = Ce^{-\frac{x}{2}(x-2l)} , \tag{4.5}$$

принадлежащая собственному значению l, которое может быть любым комплексным числом. (C — константа интегрирования, также произвольное комплексное число). Видно, что собственная функция (4.5) при любых l принадлежит гильбертову пространству (ее норма $\left\|\psi_l(x)\right\|^2 = \left|C\right|^2 e^{2(\mathrm{Re}\,l)^2} < \infty$), т.е. все комплексные l являются главными и спектр оператора (4.3) – множество всех комплексных чисел.

В общем случае для линейного оператора $\hat{L}(x)$, согласно (2.52), (4.2) — интегральное уравнение.

Одной из важнейших задач в физической теории является отыскание спектров определенных операторов. Поэтому подчеркнем следующее: нахождение спектра операторов состоит из двух шагов – а) нахождение собственных векторов (или функций) из решения уравнения (4.1) или (4.2); б) определения, для каких собственных значений собственные вектора (или собственные функции) принадлежат оснащенному гильбертову пространству. Например, если вместо оператора

(4.3) рассмотреть оператор

$$\hat{L} = \hat{\partial}_x - \hat{x}\,, \tag{4.6}$$

то у него собственные функции

$$\psi_l(x) = Ce^{+\frac{x}{2}(x+2l)}\,, \tag{4.7}$$

которые принадлежат комплексным собственным значениям l, но в отличие от оператора (4.3) спектра у оператора (4.6) нет, так как ни при каких l функция (4.7) не принадлежит оснащенному гильбертову пространству.

И еще. Как хорошо видно из рассмотренных примеров, собственные кет-векторы (и собственные функции), определяемые из уравнений (4.1) или (4.2) задаются неоднозначно собственным значением l, а с точностью до константы C. Эту неоднозначность можно устранить, если потребовать, чтобы собственные кет-вектора или собственные функции были нормированы. Но возможен и такой случай, когда одному собственному значению l будет соответствовать не один, а несколько линейно независимых кет-векторов, т.е.

$$\hat{L}\left|l,i\right\rangle = l\left|l,i\right\rangle,\ i = 1,2,...,N_l \tag{4.8}$$

Здесь второй индекс у кет-вектора нумерует различные линейно независимые собственные кет-векторы, принадлежащие одному и тому же собственному значению l. В этом случае говорят, что собственное значение l –– *вырождено*. Число N_l различных собственных векторов, принадлежащих собственному значению l называют *кратностью вырождения* собственного значения. Если хотя бы одно главное собственное значение оператора вырождено, то спектр оператора будет *вырожден*, в противном случае –– *невырожден.* Отметим также, что собственные кет-векторы, принадлежащие одному собственному значению, образуют линейное пространство размерности, равной кратности вырождения собственного значения. Примеры операторов с вырожденным спектром подробнее мы рассмотрим далее, а сейчас заметим только, что представления таких операторов действуют в пространстве функций нескольких переменных, и примером такого оператора является известный оператор Лапласа Δ.

Если $\left|l\right\rangle$ — собственный кет-вектор $\hat{L}$, принадлежащий l, то соответствующий бра-вектор $\left\langle l\right|$ есть собственный бра-вектор оператора $\hat{L}^{+}$, принадлежащий комплексно сопряжённому собственному значению l^*:

$$\left\langle l\right|\hat{L}^{+} = l^{*}\left\langle l\right|. \tag{4.9}$$

В этом нетрудно убедиться, если взять эрмитово сопряжение от двух частей равенства (4.1):

$$(\hat{L}\left|l\right\rangle)^{+} = \left|Ll\right\rangle^{+} = \left\langle Ll\right| = \left\langle l\right|\hat{L}^{+} = (l\left|l\right\rangle)^{+} = l^{*}\left|l\right\rangle^{+} = l^{*}\left\langle l\right|. \tag{4.10}$$

Спектр оператора не меняется при унитарных преобразованиях. Действительно, подействуем на обе части (4.1) унитарным оператором $\hat{u}$ ($\hat{u}^{+}\hat{u} = 1$). Тогда

$$\hat{u}\hat{L}\left|l\right\rangle = \hat{u}(l\left|l\right\rangle) \text{ или } (\hat{u}\hat{L}\hat{u}^{+})\hat{u}\left|l\right\rangle = l\hat{u}\left|l\right\rangle, \tag{4.11}$$

что, согласно обозначениям (3.20)-(3.21), можно записать и так:

$$\hat{L}'\left|l'\right\rangle = l\left|l'\right\rangle, \tag{4.12}$$

т. е. у унитарно эквивалентных операторов (3.21) один и те же собственные значения, а значит один и тот же спектр. Собственные кет-векторы этих операторов изменяются по общему правилу унитарных преобразований кет-векторов (3.20). Таким образом, спектр оператора не зависит от выбора базиса пространства, т. е. не зависит от представления, в котором мы решаем уравнение (4.1).

Докажем характерные свойства собственных значений операторов, рассмотренных в Главе 3.

1. Эрмитовы операторы имеют вещественные собственные значения.

Доказательство. Из определения эрмитова оператора $\hat{L}$ (3.1) следует, что $\langle l|\hat{L}^{+}|l\rangle = \langle l|\hat{L}|l\rangle$. Поэтому, если умножить (4.1) на бра-вектор $\langle l|$, а (4.9) на кет-вектор $|l\rangle$, то левые части полученных равенств совпадут, а для правых получим:

$$l^{*}\langle l|l\rangle = l\langle l|l\rangle \text{ или } l^{*} = l, \tag{4.13}$$

т. е. l — вещественно.

2. У положительно определённых операторов собственные значения неотрицательны.

Доказательство. Пусть $\hat{A} > 0$, тогда по определению (3.31) $\langle a|\hat{A}|a\rangle \geq 0$ для любого кет-вектора $|a\rangle$. В качестве этого вектора выберем собственный кет-вектор $\hat{A}$, принадлежащий собственному значению a. Тогда

$$\langle a|\hat{A}|a\rangle = a\langle a|a\rangle \geq 0. \tag{4.14}$$

Так как $\langle a|a\rangle \geq 0$, то и $a \geq 0$.

3. Главные собственные значения унитарного оператора по модулю равны единице.

Доказательство. Если $\hat{u}$ — унитарный оператор, $|u\rangle$ — собственный кет-вектор, принадлежащий собственному значению u, то, с одной стороны, согласно (4.1) и (4.9),

$$\langle u|\hat{u}^{+}\hat{u}|u\rangle = u^{*}\langle u|u\rangle u = |u|^{2}\langle u|u\rangle, \tag{4.15}$$

а с другой стороны — унитарный оператор не меняет скалярного произведения, т. е.

$$\langle u|\hat{u}^{+}\hat{u}|u\rangle = \langle u|u\rangle. \tag{4.16}$$

Таким образом, $|u|^{2} = 1$.

4. Собственные значения оператора проектирования $\hat{P}_k$ равны 0 и 1.

Доказательство. Пусть p — собственное значение $\hat{P}_k$ (3.35), а $|p\rangle$ — один из соответствующих кет-векторов, принадлежащих собственному значению p, т. е.

$$\hat{P}_k|p\rangle = p|p\rangle. \tag{4.17}$$

Так как $\hat{P}_k$ — идемпотентный (3.40), то

$$0 = (\hat{P}_k^{2} - \hat{P}_k)|p\rangle = (p^{2} - p)|p\rangle. \tag{4.18}$$

$|p\rangle \neq 0$, поэтому $p^2 - p = 0$, откуда $p = 0, 1$. Собственное значение $p = 1$ — не вырождено, ему, очевидно, принадлежит определяющий проекционный оператор кет-вектор $|k\rangle$. Собственное значение $p = 0$ имеет бесконечную кратность вырождения.

В заключение этого параграфа докажем одну важную теорему.

Теорема 4.1. Если два линейных оператора коммутируют, то всегда найдётся для них общая система собственных кет-векторов.

Доказательство.

а) Случай невырожденных собственных значений.

Дано: $\left[\hat{L},\hat{M}\right] = 0$ или $\hat{L}\hat{M} = \hat{M}\hat{L}$, $\hat{L}|l\rangle = l|l\rangle$, где $|l\rangle$ — собственные кет-векторы оператора $\hat{L}$, принадлежащие собственным значениям l. Докажем, что $|l\rangle$ — собственные кет-векторы и оператора $\hat{M}$.

Используя перестановочность операторов, видим:

$$\hat{L}\hat{M}|l\rangle = \hat{M}\hat{L}|l\rangle = l\hat{M}|l\rangle, \tag{4.19}$$

т.е. кет-вектор $\hat{M}|l\rangle$ является собственным кет-вектором оператора $\hat{L}$, принадлежащим собственному значению l. Но так как собственные значения оператора $\hat{L}$ не вырождены, то кет-вектор $\hat{M}|l\rangle$ может отличаться от $|l\rangle$ только на константу, например m_l, т. е.

$$\hat{M}\left|l\right\rangle = m_l\left|l\right\rangle, \tag{4.20}$$

а это и означает, что $\left|l\right\rangle$, являясь собственным кет-вектором оператора $\hat{L}$, принадлежащим собственному значению l, одновременно является и собственным кет-вектором оператора $\hat{M}$, принадлежащим собственному значению m_l.

б) Вырожденные собственные значения.

Пусть собственное значение l оператора $\hat{L}$ N_l - кратно вырождено. Применяя к обеим частям (4.8) оператор $\hat{M}$ и используя перестановочность операторов $\hat{L}$ и $\hat{M}$, получим, как и прежде, что все кет-векторы $\hat{M}\left|l,i\right\rangle$, $i=1,2,...,N_l$ являются собственными кет-векторами оператора $\hat{L}$, принадлежащими собственному значению l, т. е. оператор $\hat{M}$ действует на подпространстве кет-векторов, относящихся к собственному значению l и кет-векторы из этого подпространства не выводит. В общем случае при действии оператора $\hat{M}$ на $\left|l,i\right\rangle$ получается некоторая линейная комбинация кет-векторов из этого подпространства, т. е.

$$\hat{M}\left|l,i\right\rangle = \sum_{j=1}^{N_l} M_{ji}\left|l,j\right\rangle,\ i=1,2,...,N_l. \tag{4.21}$$

Теперь перейдём от кет-векторов $\left|l,i\right\rangle$, $i=1,2,...,N_l$ к новым кет-векторам

$$\left|l,\alpha\right\rangle = \sum_{i=1}^{N_l} C_{i\alpha}\left|l,i\right\rangle,\ \alpha=1,2,...,N_l, \tag{4.22}$$

где $C_{i\alpha}$ — произвольные пока числа. Ясно, что новые кет-векторы $\left|l,\alpha\right\rangle$, как линейная комбинация старых, по-прежнему будут собственными кет-векторами оператора $\hat{L}$, принадлежащими собственному значению l, т. е.

$$\hat{L}\left|l,\alpha\right\rangle = l\left|l,\alpha\right\rangle,\ \alpha=1,2,...,N_l \tag{4.23}$$

при любых $C_{i\alpha}$. С другой стороны, произвольные числа $C_{i\alpha}$, $\alpha=1,2,...,N_l$ можно подобрать так, чтобы кет-векторы $\left|l,\alpha\right\rangle$ были собственными векторами оператора $\hat{M}$, т. е. выполнялось условие

$$\hat{M}\left|l,\alpha\right\rangle = m\left|l,\alpha\right\rangle,\ \alpha=1,2,...,N_l. \tag{4.24}$$

Действительно, подставляя в (4.24) разложение (4.22), учитывая линейность $\hat{M}$ и результат его действия на $\left|l,\alpha\right\rangle$ (4.21), получаем

$$\hat{M}\left|l,\alpha\right\rangle = \hat{M}\sum_{i=1}^{N_l} C_{i\alpha}\left|l,i\right\rangle = \sum_{i=1}^{N_l} C_{i\alpha}\sum_{j=1}^{N_l} M_{ji}\left|l,j\right\rangle = m\sum_{i=1}^{N_l} C_{i\alpha}\left|l,i\right\rangle. \tag{4.25}$$

Меняя в последнем члене индекс суммирования i на j, далее получаем

$$\sum_{j=1}^{N_l}\left\{\sum_{i=1}^{N_l} C_{i\alpha}M_{ji} - mC_{j\alpha}\right\}\left|l,j\right\rangle = 0,\ \alpha=1,2,...,N_l. \tag{4.26}$$

Так как $\left|l,j\right\rangle$ — линейно независимы, то для нахождения неизвестных коэффициентов $C_{i\alpha}$ получаем однородную систему линейных алгебраических уравнений

$$\sum_{i=1}^{N_l}\left\{M_{ji} - m\delta_{j,i}\right\}C_{i\alpha} = 0,\ \alpha, j=1,2,...,N_l. \tag{4.27}$$

Эта система имеет нетривиальное решение, если

$$\det\left\|M_{ji} - m\delta_{ji}\right\| = 0,\ i,j=1,2,...,N_l \tag{4.28}$$

Секулярное уравнение (4.28) имеет N_l корней m_α, $\alpha=1,2,...,N_l$. Каждый корень m_α определяет из системы уравнений (4.27) свой набор коэффициентов $C_{i\alpha}$, $i=1,2,...,N_l$ т.е. свой кет-вектор $\left|l,\alpha\right\rangle$ (4.22). Таким образом

$$\hat{M}\left|l,\alpha\right\rangle = m_\alpha \left|l,\alpha\right\rangle,\ \alpha = 1,2,...,N_l, \tag{4.29}$$

т.е. собственный вектор $\left|l,\alpha\right\rangle$ оператора $\hat{L}$, принадлежащий N_l - кратно вырожденному собственному значению l (4.23) одновременно является и собственным вектором коммутирующего с ним $\hat{M}$ (4.29), принадлежащим собственному значению m_α этого оператора. Теорема доказана.

Если среди корней $m_1, m_2, ..., m_{N_l}$ секулярного уравнения (4.28) в доказанной теореме нет равных, (т.е. собственные значения оператора $\hat{M}$ не вырождены), то паре собственных значений l и m_i операторов $\hat{L}$ и $\hat{M}$ соответствует только один собственный кет-вектор $\left|l,i\right\rangle$. В этом случае говорят, что оператор $\hat{M}$ *полностью снимает вырождение* оператора $\hat{L}$, а совокупность операторов $\hat{L}$ и $\hat{M}$ образует *полный набор*. Если среди $m_1, m_2, ..., m_{N_l}$ есть равные корни, то оператор $\hat{M}$ снимает вырождение лишь частично. Это свидетельствует о том, что к операторам $\hat{L}$ и $\hat{M}$ можно добавить один или несколько коммутирующих с $\hat{L}$, $\hat{M}$ и друг с другом операторов $\hat{B},...,\hat{F}$, полностью снимающих вырождение. Все они имеют общую систему собственных кет-векторов

$$\begin{aligned}
&\hat{L}\left|l,j,k,...,s\right\rangle = l\left|l,j,k,...,s\right\rangle \\
&\hat{M}\left|l,j,k,...,s\right\rangle = m_j\left|l,j,k,...,s\right\rangle \\
&\hat{B}\left|l,j,k,...,s\right\rangle = b_k\left|l,j,k,...,s\right\rangle \\
&\vdots \\
&\hat{F}\left|l,j,k,...,s\right\rangle = f_s\left|l,j,k,...,s\right\rangle,
\end{aligned} \tag{4.30}$$

и фиксированной совокупности собственных значений $\left\{l, m_j, b_k, ..., f_s\right\}$ соответствует только один общий собственный кет-вектор $\left|l,j,k,...,s\right\rangle$. Такие операторы называются *полным набором*.

§ 2. Эрмитовы операторы в гильбертовом пространстве. Наблюдаемые.

В физических теориях наибольшее применение находят эрмитовы (самосопряженные) операторы (3.1). Можно показать, что у таких операторов всегда имеется спектр и главные собственные значения всегда вещественны (4.13). В этом параграфе рассмотрим такие эрмитовы операторы, у которых собственные кет-векторы, определяемые из уравнения (4.1) и принадлежащие главным собственным значениям, имеют конечную норму, т.е. принадлежат строго гильбертову пространству. В этом случае справедлива следующая теорема.

Теорема 4.2. Собственные кет-векторы эрмитовых операторов, принадлежащие разным собственным значениям, ортогональны.

Доказательство. Пусть $\hat{L}$ — эрмитов оператор, тогда для него, согласно (3.2), справедливо условие

$$\left\langle a\middle|\hat{L}\middle|b\right\rangle^* = \left\langle b\middle|\hat{L}\middle|a\right\rangle. \tag{4.31}$$

Пусть $\left|a\right\rangle = \left|l\right\rangle$, $\left|b\right\rangle = \left|l'\right\rangle$ — собственные кет-векторы, принадлежащие, вещественным собственным значениям l и l'. Тогда из (4.31) следует, что

$$\left\langle l\middle|\hat{L}\middle|l'\right\rangle^* = l'\left\langle l\middle|l'\right\rangle^* = l\left\langle l'\middle|l\right\rangle, \tag{4.32}$$

или

$$(l'-l)\left\langle l'\middle|l\right\rangle = 0. \tag{4.33}$$

Так как l и l' по условию разные собственные значения, т. е. $(l - l') \neq 0$, то

$$\left\langle l'\middle|l\right\rangle = 0, \tag{4.34}$$

т.е. собственные кет-векторы эрмитова оператора $\left|l\right\rangle$ и $\left|l'\right\rangle$ — ортогональны.

Из доказанной теоремы следует, что собственные кет-векторы эрмитовых операторов, принадлежащие разным собственным значениям, линейно независимы. Но в гильбертовом пространстве линейно независимых векторов не больше, чем в счетном множестве (§3 Главы 1). Поэтому все различные главные собственные значения таких эрмитовых операторов можно пронумеровать целыми числами и несколько упростить обозначения в (4.1):

$$\hat{L}|i\rangle = l_i|i\rangle,\, i = 0,1,2,... \tag{4.35}$$

Здесь $|i\rangle \equiv |l_i\rangle$ - собственный кет-вектор, принадлежащий собственному значению l_i. В этом случае говорят, что эрмитов оператор имеет *дискретный спектр*. Так как собственные кет-векторы операторов с дискретным спектром принадлежат гильбертову пространству, их всегда можно нормировать (1.14) и условие ортогональности собственных векторов (4.34) переписать в виде:

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij} \tag{4.36}$$

Если собственное значение l_i эрмитова оператора вырождено, например, N_i-кратно, то собственные линейно независимые кет-векторы $|i,\alpha\rangle$, $\alpha = 1,2,...,N_i$, принадлежащие собственному значению l_i, получающиеся из решения уравнения (4.1) или (4.2) не обязательно ортогональны. Однако всегда можно добиться, чтобы они были нормированы на единицу и ортогональны друг другу. Например, это можно сделать процедурой *ортогонализации Шмидта*. Её суть в следующем. Пусть у нас n линейно независимых, но не ортогональных кет-векторов $|i\rangle$, $i = 1,2,...,n$. Определим новый кет-вектор $|\bar{1}\rangle$ равенством

$$|\bar{1}\rangle = C_1|1\rangle, \tag{4.37}$$

где постоянную C_1 находим из условия нормировки $\langle\bar{1}|\bar{1}\rangle = 1$, т. е. $C_1 = \dfrac{1}{\sqrt{\langle 1|1\rangle}}$. построим проектор $\hat{P}_1 = |\bar{1}\rangle\langle\bar{1}|$. Определим $|\bar{2}\rangle$ из условия

$$|\bar{2}\rangle = C_2(\hat{1} - \hat{P}_1)|2\rangle. \tag{4.38}$$

Правая часть (IV.35) не равна нулю, так как кет-векторы $|1\rangle$ и $|2\rangle$ линейно независимы, а в правой части стоит их линейная комбинация:

$$(\hat{1} - \hat{P}_1)|2\rangle = |2\rangle - |C_1|^2|1\rangle\langle 1|2\rangle. \tag{4.39}$$

Ясно, что $\langle\bar{1}|\bar{2}\rangle = 0$, так как $\hat{P}_1$ действует на определяющий бра-вектор $\langle\bar{1}|$ как единичный оператор (3.36). $\hat{C}_2$ находим из условия нормировки $\langle\bar{2}|\bar{2}\rangle = 1$. Аналогично строим проектор $\hat{P}_2 = |\bar{2}\rangle\langle\bar{2}|$ и определяем

$$|\bar{3}\rangle = C_3(\hat{1} - \hat{P}_1 - \hat{P}_2)|3\rangle. \tag{4.40}$$

Этот кет-вектор не равен нулю, ортогонален $|\bar{1}\rangle$, $|\bar{2}\rangle$ и нормирован соответствующим выбором C_3. И так далее. Полученные таким образом n кет-векторов $|\bar{i}\rangle$, $i = 1,2,...,n$ образуют совокупность ортонормированных кет-векторов

$$\langle\bar{n}|\bar{m}\rangle = \delta_{nm}. \tag{4.41}$$

С учетом изложенного, мы можем записать условие ортогональности собственных кет-векторов эрмитовых операторов (4.36) и для вырожденного спектра:

$$\hat{L}|i,j\rangle = l_i|i,j\rangle,\quad \langle i,j|i',j'\rangle = \delta_{i,i'}\delta_{j,j'},\ i,i' = 0,1,2,...;\quad j,j' = 1,2,...,N_i \tag{4.42}$$

Если мы рассматриваем полный набор операторов, то их общие собственные кет-векторы (4.30) все будут ортогональны между собой.

Так как все собственные кет-векторы эрмитова оператора ортогональны и нормированы (или могут быть сделаны таковыми), то они линейно независимы. Можно было бы думать, что они образуют базис в гильбертовом пространстве. Но в общем случае это не так. В дальнейшем мы будем рассматривать только эрмитовы операторы, для которых это утверждение справедливо — собственные кет-векторы этих операторов образуют базис в гильбертовом пространстве. Такие операторы называются *наблюдаемыми*, и именно они используются в квантовой теории. Условием того, что эрмитов оператор является наблюдаемой, есть условие полноты (3.47) его собственных кет-векторов. Таким образом, эрмитов оператор $\hat{L}$ (4.42) будет наблюдаемой, если его собственные ортонормированные кет-векторы удовлетворяют дополнительному условию

$$\sum_{i=0}^{\infty}\sum_{j=1}^{N_i}\left|i,j\right\rangle\left\langle i,j\right|=\hat{1} \tag{4.43}$$

Заметим, что определение, является ли тот или иной эрмитов оператор наблюдаемой — довольно сложная математическая задача.

§ 3. Спектральное разложение наблюдаемой.

Любой линейный оператор может быть представлен в виде квазиспектрального разложения (3.59). В частности, это можно сделать и для наблюдаемой $\hat{L}$. В этом случае в качестве базисной системы кет-векторов $\left|k\right\rangle$ могут быть выбраны собственные кет-векторы $\left|i,\alpha\right\rangle$ (4.42), α = 1, 2, …, n_i, где n_i — кратность вырождения соответствующего собственного значения l_i. Тогда квазиспектральное разложение (3.59) можно записать в виде

$$\hat{L}=\sum_i l_i\sum_{\alpha=1}^{n_i}\hat{P}_{\alpha i}\,,\ \hat{P}_{\alpha i}=\left|i,\alpha\right\rangle\left\langle i,\alpha\right|. \tag{4.44}$$

Такое разложение наблюдаемой $\hat{L}$ называется её *спектральным разложением*.

В частности, условие полноты базиса (3.47) можно рассматривать как спектральное разложение единичного оператора, у которого все собственные значения равны единице. Это разложение (3.47) в дальнейшем будем называть разложением единицы.

Используя спектральное разложение (4.44), можно обобщить понятие функции от оператора (2.35) на случай, когда функция не представима в виде ряда Тейлора. Пусть *f(x)* такая функция, а $\hat{L}$ — наблюдаемая со спектральным разложением (4.44). Тогда, по определению, оператор со спектральным разложением

$$f(\hat{L})=\sum_i f(l_i)\sum_{\alpha=1}^{n_i}\hat{P}_{\alpha i} \tag{4.45}$$

называется *функцией f от наблюдаемой* $\hat{L}$. Нетрудно убедиться, что новое определение функции от оператора для аналитических функций совпадает со старым (2.35).

Рассмотрим представление наблюдаемой в своём собственном базисе. Тогда наблюдаемая $\hat{L}$ будет представляться матрицей

$$\left\langle n\right|\hat{L}\left|m\right\rangle=l_m\left\langle n|m\right\rangle=l_m\delta_{nm}\,, \tag{4.46}$$

которая является диагональной с собственными значениями на диагонали матрицы. Поскольку унитарное преобразование не меняет собственных значений оператора, то в принципе дискретный спектр любой наблюдаемой можно найти следующим образом. Взяв произвольный базис $\left|i\right\rangle$ (скажем, в x-представлении $\left\langle x|i\right\rangle$ это полный набор функций $\psi_i(x)$), строим матрицу наблюдаемой

$$\left\langle i\right|\hat{L}\left|k\right\rangle=\int\psi_i^*(x)\hat{L}\psi_k(x)dx\,, \tag{4.47}$$

затем подбираем такую унитарную матрицу u_{ik} оператора $\hat{u}$, чтобы унитарное преобразование $\hat{u}\hat{L}\hat{u}^+$ приводило матрицу (4.47) к диагональному виду. Тогда элементы полученной матрицы будут собственными значениями оператора $\hat{L}$. Столбцы найденной унитарной матрицы u_{ik} будут давать собственные кет-векторы наблюдаемой $\hat{L}$ в заданном представлении. Однако любой базис в гильбертовом пространстве содержит бесконечное число членов. Это означает, что все преобразования будут приводить к матрицам бесконечного порядка. Поэтому этот способ решения уравнения (4.1) не всегда является лучшим.

Теорема 4.3. Если наблюдаемые $\hat{A}$, $\hat{B}$, $\hat{L}$ удовлетворяют следующим коммутационным соотношениям: $\left[\hat{A},\hat{L}\right]=\left[\hat{B},\hat{L}\right]=0$, $\left[\hat{A},\hat{B}\right]\neq 0$, то спектр наблюдаемой $\hat{L}$ вырожден.

Доказательство. Предположим противное. Пусть спектр наблюдаемой $\hat{L}$ не вырожден:

$$\hat{L}\left|i\right\rangle = l_i\left|i\right\rangle. \tag{4.48}$$

Так как $\hat{L}$ коммутирует с операторами $\hat{A}$ и $\hat{B}$, то собственные кет-векторы $\left|i\right\rangle$ оператора $\hat{L}$ являются и собственными кет-векторами операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$, т. е.

$$\hat{A}\left|i\right\rangle = a_i\left|i\right\rangle,\ \hat{B}\left|i\right\rangle = b_i\left|i\right\rangle. \tag{4.49}$$

Тогда

$$(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A})\left|i\right\rangle = (a_i b_i - b_i a_i)\left|i\right\rangle = 0. \tag{4.50}$$

Так как собственные кет-векторы наблюдаемой образуют базис, то (4.50) справедливо для любых кет-векторов, т.е. $\left[\hat{A},\hat{B}\right]=0$, что противоречит условию теоремы. Следовательно, спектр наблюдаемой $\hat{L}$ вырожден.

В заключение этого параграфа рассмотрим пример (имеющий важное значение в квантовой физике), показывающий, что спектр операторов и его собственные кет-векторы иногда можно находить в общем виде, не решая уравнения (4.2) в том или ином представлении, а опираясь только на конкретные свойства операторов и доказанные теоремы.

Пример. Пусть имеется три наблюдаемые $\hat{L}_i$ ($i = 1, 2, 3$), таких, что

$$\left[\hat{L}_i,\hat{L}_j\right] = i\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k. \tag{4.51}$$

Здесь ε_{ijk} — единичный антисимметричный псевдотензор Леви-Чивиты:

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} 1, \quad \text{если подстановка} \begin{pmatrix} 1\,2\,3 \\ i\ j\ k \end{pmatrix} \text{четная} \\ -1, \quad \text{если подстановка} \begin{pmatrix} 1\,2\,3 \\ i\ j\ k \end{pmatrix} \text{нечетная} \\ 0, \text{если среди индексов есть одинаковые} \end{cases} \tag{4.52}$$

(По повторяющимся индексам (по k) в (4.51) идёт суммирование). Найти спектр и собственные кет-векторы операторов $\hat{L}_3$ и $\hat{L}^2 = \hat{L}_k\hat{L}_k$.

Решение. Оператор $\hat{L}^2$ коммутирует со всеми операторами $\hat{L}_i$. Действительно, учитывая (2.23) и (4.51) и меняя индексы суммирования, получаем

$$\left[\hat{L}^2,\hat{L}_i\right] = \left[\hat{L}_k\hat{L}_k,\hat{L}_i\right] = \hat{L}_k\left[\hat{L}_k,\hat{L}_i\right] + \left[\hat{L}_k,\hat{L}_i\right]\hat{L}_k = i\varepsilon_{kij}\hat{L}_k\hat{L}_j + i\varepsilon_{kij}\hat{L}_j\hat{L}_k =$$

$$= i\varepsilon_{kij}\hat{L}_k\hat{L}_j + i\varepsilon_{jik}\hat{L}_k\hat{L}_j = i\hat{L}_k\hat{L}_j(\varepsilon_{kij} - \varepsilon_{kij}) = 0. \tag{4.53}$$

Поэтому, согласно Теореме 4.1, у операторов $\hat{L}^2$ и $\hat{L}_i$ общий набор собственных кет-векторов. Но так как операторы $\hat{L}_i$ между собой не коммутируют, но каждый коммутирует с $\hat{L}^2$, то, согласно Теореме 4.3, собственные значения $\hat{L}^2$ — вырождены, т. е.

$$\hat{L}^2\left|\mu,\nu\right\rangle = \mu\left|\mu,\nu\right\rangle, \tag{4.54}$$

$$\hat{L}_3\left|\mu,\nu\right\rangle = \nu\left|\mu,\nu\right\rangle. \tag{4.55}$$

Введём не эрмитов оператор

$$\hat{A} = \hat{L}_1 - i\hat{L}_2. \tag{4.56}$$

Ясно, что

$$\hat{A}^{+} = \hat{L}_1 + i\hat{L}_2, \tag{4.57}$$

$$\left[\hat{L}_3, \hat{A}\right] = \left[\hat{L}_3, \hat{L}_1\right] - i\left[\hat{L}_3, \hat{L}_2\right] = i\hat{L}_2 - \hat{L}_1 = -\hat{A}. \tag{4.58}$$

Аналогично

$$\left[\hat{L}_3, \hat{A}^{+}\right] = \hat{A}^{+}. \tag{4.59}$$

Положительно определённые (3.33) операторы

$$\hat{A}^{+}\hat{A} = (\hat{L}_1 + i\hat{L}_2)(\hat{L}_1 - i\hat{L}_2) = \hat{L}_1^{\,2} + \hat{L}_2^{\,2} + i\left[\hat{L}_2, \hat{L}_1\right] = \hat{L}^2 - \hat{L}_3^{\,2} + \hat{L}_3, \tag{4.60}$$

$$\hat{A}\hat{A}^{+} = \hat{L}^2 - \hat{L}_3^{\,2} - \hat{L}_3 \tag{4.61}$$

являются функциями от операторов $\hat{L}^2$ и $\hat{L}_3$, поэтому собственные кет-векторы $\left|\mu,\nu\right\rangle$ (4.54) и (4.55) являются собственными векторами и этих операторов

$$\begin{aligned} &\hat{A}^{+}\hat{A}\left|\mu,\nu\right\rangle = (\hat{L}^2 - \hat{L}_3^{\,2} + \hat{L}_3)\left|\mu,\nu\right\rangle = (\mu - \nu^2 + \nu)\left|\mu,\nu\right\rangle \\ &\hat{A}\hat{A}^{+}\left|\mu,\nu\right\rangle = (\mu - \nu^2 - \nu)\left|\mu,\nu\right\rangle \end{aligned}, \tag{4.62}$$

причём, так как они положительно определенные, то согласно (4.14)

$$\begin{aligned} &\mu - \nu^2 + \nu \ge 0 \\ &\mu - \nu^2 - \nu \ge 0 \end{aligned}. \tag{4.63}$$

Отсюда следует, что $\mu - \nu^2 \ge 0$, т.е. при фиксированном μ, собственное значение ν изменяется в пределах

$$-\sqrt{\mu} \le \nu \le \sqrt{\mu}. \tag{4.64}$$

Обозначим минимальное возможное значение ν через λ, а максимальное — через Λ, т.е. $\lambda \le \nu \le \Lambda$.

Рассмотрим кет-вектор $\hat{A}\left|\mu,\nu\right\rangle$. Он является собственным кет-вектором оператора $\hat{L}_3$: действительно, согласно (4.58) и (4.55)

$$\hat{L}_3(\hat{A}\left|\mu,\nu\right\rangle) = (\hat{A}\hat{L}_3 - \hat{A})\left|\mu,\nu\right\rangle = \hat{A}(\hat{L}_3 - \hat{1})\left|\mu,\nu\right\rangle = (\nu - 1)\hat{A}\left|\mu,\nu\right\rangle. \tag{4.65}$$

Таким образом, этот собственный кет-вектор оператора $\hat{L}_3$, принадлежащий собственному значению (ν – 1). Поэтому, согласно системе обозначений (4.1), мы должны записать

$$\hat{A}\left|\mu,\nu\right\rangle = \left|\mu,\nu-1\right\rangle, \tag{4.66}$$

а так как λ — минимальное значение ν, то мы должны потребовать, что бы выполнялось

$$\hat{A}\left|\mu,\lambda\right\rangle = 0. \tag{4.67}$$

Аналогично показывается, что

$$\hat{A}^{+}\left|\mu,\nu\right\rangle = \left|\mu,\nu+1\right\rangle, \tag{4.68}$$

$$\hat{A}^{+}\left|\mu,\Lambda\right\rangle = 0. \tag{4.69}$$

Таким образом, оператор $\hat{A} = \hat{L}_1 - i\hat{L}_2$ является «понижающим» (или «оператором уничтожения»), а оператор $\hat{A}^{+} = \hat{L}_1 + i\hat{L}_2$ - «повышающим» (или «оператором рождения») для собственных кет-векторов операторов $\hat{L}^2$ и $\hat{L}_3$.

С учетом (4.62), мы можем записать

$$\begin{aligned} &\hat{A}^{+}\hat{A}\left|\mu,\lambda\right\rangle = (\mu - \lambda^2 - \lambda)\left|\mu,\lambda\right\rangle = 0 \\ &\hat{A}\hat{A}^{+}\left|\mu,\Lambda\right\rangle = (\mu - \Lambda^2 - \Lambda)\left|\mu,\Lambda\right\rangle = 0 \end{aligned}, \tag{4.70}$$

что возможно, только если

$$\begin{aligned} &\mu - \lambda^2 + \lambda = 0 \\ &\mu - \Lambda^2 - \Lambda = 0 \end{aligned}. \tag{4.71}$$

Отсюда получаем уравнение для нахождения минимального и максимального (4.64) собственных значений оператора $\hat{L}_3$:

$$\Lambda^2 + \Lambda - \lambda^2 + \lambda = 0, \text{ или } (\Lambda + \lambda)(\Lambda - \lambda + 1) = 0. \qquad (4.72)$$

Так как $\Lambda \geq \lambda$, то из двух корней оставляем только $\Lambda = -\lambda$. Таким образом, максимальное и минимальное собственные значения оператора $\hat{L}_3$ связаны между собой. Переобозначив $\Lambda \equiv l$, мы можем через эту новую величину l выразить и собственные значения оператора $\hat{L}^2$. Действительно, из (4.71) следует, что собственное значение оператора $\hat{L}^2$ (4.54)

$$\mu = l(l+1). \qquad (4.73)$$

При заданном μ, согласно (4.66) и (4.68), ν принимает значения, отличающиеся на единицу от минимального значения $\lambda = -l$ до максимального $\Lambda = l$, поэтому их разность $\Lambda - \lambda = 2l$ должна быть целым числом, а это возможно, если l принимает целые $l = 0, 1, 2, \ldots$, или полуцелые $l = 1/2, 3/2, \ldots$значения. Переобозначая и собственные значения оператора $\hat{L}_3$ принятым в физике способом: $\nu \equiv m$, мы окончательно получаем вместо предполагавшихся (4.54) и (4.55)

$$\hat{L}^2 \left| l,m \right\rangle = l(l+1)\left| l,m \right\rangle, \; l = 0, \tfrac{1}{2}, 1, \tfrac{3}{2}, 2, \ldots, \qquad (4.74)$$

$$\hat{L}_3 \left| l,m \right\rangle = m \left| l,m \right\rangle, \; m = -l, -l+1, \ldots, l-1, l; \qquad (4.75)$$

Таким образом, собственные значения оператора $\hat{L}^2$ равны 0, 3/4, 2, 15/4, 6, и т.д., каждое собственное значение $2l + 1$ раз кратно вырождено, а оператор $\hat{L}_3$ полностью снимает вырождение, т.е. операторы $\hat{L}^2$ и $\hat{L}_3$ образуют полный набор.

Собственные кет-векторы этих операторов определяются следующим образом. Из (4.67), записанного в новых обозначениях

$$\hat{A}\left| l,-l \right\rangle = 0, \; \left\langle l,-l \middle| l,-l \right\rangle = 1 \qquad (4.76)$$

Или из (4.69)

$$\hat{A}^+ \left| l,l \right\rangle = 0, \; \left\langle l,l \middle| l,l \right\rangle = 1, \qquad (4.77)$$

находится начальный нормированный кет-вектор, например $\left| l,-l \right\rangle$. (Подчеркнем, что (4.76) полностью задает начальный кет-вектор из гильбертова пространства, таким образом, он считается известным). Тогда по этому кет-вектору можно построить все остальные собственные кет-векторы, последовательным действием заданного оператора $\hat{A}^+$ (4.57):

$$(\hat{A}^+)^k \left| l,-l \right\rangle = \left| l,-l+k \right\rangle. \qquad (4.78)$$

Правда, получаемые таким образом (4.78) кет-векторы будут не нормированы. Действительно, квадрат нормы кет-вектора (4.78)

$$\left\langle l,-l+k \middle| l,-l+k \right\rangle = \left\langle l,-l+k-1 \right| \hat{A}\hat{A}^+ \left| l,-l+k-1 \right\rangle \qquad (4.79)$$

Но как действует оператор $\hat{A}\hat{A}^+$ на свой собственный кет-вектор $\left| l,-l+k-1 \right\rangle$ мы знаем ((4.70), (4.74), (4.75)):

$$\begin{aligned} \hat{A}\hat{A}^+ \left| l,-l+k-1 \right\rangle &= (\hat{L}^2 - \hat{L}_3^2 - \hat{L}_3)\left| l,-l+k-1 \right\rangle = \left[l(l+1) - (-l+k-1)^2 + (-l+k-1) \right]\left| l,-l+k-1 \right\rangle = \\ &= k(2l-k+1)\left| l,-l+k-1 \right\rangle \end{aligned} \qquad (4.80)$$

Следовательно,

$$\begin{aligned} &\left\langle l,-l+k \middle| l,-l+k \right\rangle = \left\langle l,-l+k-1 \right| \hat{A}\hat{A}^+ \left| l,-l+k-1 \right\rangle = \\ &= k(2l-k+1)\left\langle l,-l+k-1 \middle| l,-l+k-1 \right\rangle = k(2l-k+1)\left\langle l,-l+k-2 \right| \hat{A}\hat{A}^+ \left| l,-l+k-2 \right\rangle. \end{aligned} \qquad (4.81)$$

Проводя аналогичные (4.81) вычисления еще раз, получаем

$$\begin{aligned}\langle l,-l+k|l,-l+k\rangle &= k(2l-k+1)\langle l,-l+k-2|\hat{A}\hat{A}^{+}|l,-l+k-2\rangle = \\ &= k(2l-k+1)\left[l(l+1)-(-l+k-2)^{2}-(-l+k-2)\right]\langle l,-l+k-2|l,-l+k-2\rangle = \\ &= k(2l-k+1)(k-1)(2l-k+2)\langle l,-l+k-2|l,-l+k-2\rangle = \\ &= k(k-1)(2l-k+1)(2l-k+2)\langle l,-l+k-3|\hat{A}\hat{A}^{+}|l,-l+k-3\rangle\end{aligned} \qquad (4.82)$$

На k-том шаге получим:

$$\begin{aligned}\langle l,-l+k|l,-l+k\rangle &= k!(2l-k+1)(2l-k+2)...2l\langle l,-l|l,-l\rangle = \\ &= \frac{k!(2l)!}{(2l-k)!}\end{aligned} \qquad (4.83)$$

так как начальный кет-вектор $|l,-l\rangle$ нормирован (4.76). Таким образом, норма кет-вектора $|l,-l+k\rangle$ равна $\sqrt{\frac{k!(2l)!}{(2l-k)!}}$. Тогда нормированный кет-вектор будет определяться как

$$|l,-l+k\rangle = \sqrt{\frac{(2l-k)!}{k!(2l)!}}(\hat{A}^{+})^{k}|l,-l\rangle. \qquad (4.84)$$

Обозначим $-l+k=m$, тогда нормированные кет-векторы оператора $\hat{L}^2$ (4.74) и $\hat{L}_3$ (4.75) будут определяться через начальный кет-вектор (4.76) следующим образом:

$$|l,m\rangle = \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!(2l)!}}(\hat{A}^{+})^{l+m}|l,-l\rangle. \qquad (4.85)$$

Он получается последовательным действием «повышающего» оператора (4.68) на начальный кет-вектор, получаемый из (4.76). Но нужно заметить следующее – действия «понижающего» и «повышающего» операторов $\hat{A}$ и $\hat{A}^{+}$ на нормированные кет-векторы (4.85) будет отличаться на константу от (4.66) и (4.68). Действительно,

$$\begin{aligned}\hat{A}|l,m\rangle &= \hat{A}\sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!(2l)!}}(\hat{A}^{+})^{l+m}|l,-l\rangle = \\ &= \hat{A}\hat{A}^{+}\sqrt{\frac{(l-m+1)!}{(l+m-1)!(2l)!(l+m)(l-m+1)}}(\hat{A}^{+})^{l+m-1}|l,-l\rangle = \\ &= \hat{A}\hat{A}^{+}\frac{1}{\sqrt{(l+m)(l-m+1)}}|l,m-1\rangle = \frac{l(l+1)-(m-1)^{2}-(m-1)}{\sqrt{(l+m)(l-m+1)}}|l,m-1\rangle\end{aligned} \qquad (4.86)$$

или, после преобразования,

$$\hat{A}|l,m\rangle = \sqrt{(l+m)(l-m+1)}|l,m-1\rangle \qquad (4.87)$$

Аналогично показывается и

$$\hat{A}^{+}|l,m\rangle = \sqrt{(l+m+1)(l-m)}|l,m+1\rangle \qquad (4.88)$$

Ну и для полноты рассмотренного примера выпишем рассмотренные операторы в представлении базиса (4.85). Учитывая условия ортонормированности базиса

$$\langle l,m|l',m'\rangle = \delta_{ll'}\delta_{mm'} \qquad (4.89)$$

получаем

$$\begin{aligned}\langle l,m|\hat{L}^{2}|l',m'\rangle &= l(l+1)\delta_{ll'}\delta_{mm'} \\ \langle l,m|\hat{L}_{3}|l',m'\rangle &= m\delta_{ll'}\delta_{mm'}\end{aligned} \qquad (4.90)$$

- диагональные матрицы. Для нахождения представления оставшихся операторов $\hat{L}_1$ и $\hat{L}_2$ заметим, что их можно выразить через операторы $\hat{A}$ и $\hat{A}^{+}$ из (4.56) и (4.57):

$$\hat{L}_1 = \frac{1}{2}\left(\hat{A} + \hat{A}^{+}\right)$$
$$\hat{L}_2 = \frac{i}{2}\left(\hat{A} - \hat{A}^{+}\right) \tag{4.91}$$

Учитывая, что матричные элементы операторов $\hat{A}$ и $\hat{A}^{+}$ равны

$$\langle l,m|\hat{A}|l',m'\rangle = \sqrt{(l'+m')(l'-m'+1)}\,\delta_{ll'}\delta_{m,m'-1}$$
$$\langle l,m|\hat{A}^{+}|l',m'\rangle = \sqrt{(l'+m'+1)(l'-m')}\,\delta_{ll'}\delta_{m,m'+1} \tag{4.92}$$

(что непосредственно вытекает из (4.87)-(4.89)), для $\hat{L}_1$ и $\hat{L}_2$ получаем

$$\langle l,m|\hat{L}_1|l',m'\rangle = \frac{1}{2}\delta_{ll'}\left(\sqrt{(l'+m')(l'-m'+1)}\,\delta_{m,m'-1} + \sqrt{(l'+m'+1)(l'-m')}\,\delta_{m,m'+1}\right)$$
$$\langle l,m|\hat{L}_2|l',m'\rangle = \frac{i}{2}\delta_{ll'}\left(\sqrt{(l'+m')(l'-m'+1)}\,\delta_{m,m'-1} - \sqrt{(l'+m'+1)(l'-m')}\,\delta_{m,m'+1}\right) \tag{4.93}$$

§ 4. Непрерывный спектр наблюдаемых

Может оказаться, что уравнение (4.1) для некоторых операторов не имеет решений в гильбертовом пространстве. Тогда для нахождения главных собственных значений таких операторов необходимо искать собственные кет-векторы с бесконечной нормой

$$\langle l|l\rangle = \infty\,. \tag{4.94}$$

Теперь собственное значение l может быть любым, т.е. изменяться непрерывным образом в определенной области. Если оператор $\hat{L}$ - эрмитов, то его собственные кет-векторы, принадлежащие разным вещественным собственным значениям (разным точкам вещественной оси) согласно Теореме 4.2 будут ортогональны

$$\langle l|l'\rangle = 0\,,\ l \neq l' \tag{4.95}$$

(4.94) и (4.95) можно записать совместно в виде

$$\langle l|l'\rangle = \delta(l-l')\,, \tag{4.96}$$

но именно кет-векторы, нормированные условием (4.96) принадлежат оснащённому гильбертову пространству $\tilde{L}^2$, любая непрерывная их комбинация (1.29) имеет конечную норму и принадлежит гильбертову пространству. Поэтому такие собственные значения эрмитовых операторов будут главными, т.е. будут принадлежать спектру оператора.

Поскольку собственные значения l изменяются непрерывным образом, то спектр собственных значений оператора $\hat{L}$ оказывается *непрерывным* и такие операторы называются *операторами с непрерывным спектром*.

Собственные значения l непрерывного спектра могут быть вырождены, причём подпространство, относящееся к собственному значению l, может быть как конечномерное (существует конечное число линейно независимых кет-векторов, нумеруемых дискретным индексом, принадлежащим непрерывному собственному значению l: $|l,n\rangle$, $n = 1, 2, \ldots, N_l$, где N_l, — кратность вырождения собственного значения l), так и бесконечномерное (с линейно независимыми кет-векторами $|l,\rho\rangle$, «нумеруемыми» непрерывным индексом, изменяющимся в определенных пределах $\rho_1 \le \rho \le \rho_2$). Возможен случай и смешанного вырождения, когда собственному значению l принадлежат кет-векторы $|l,\rho,n\rangle$. Как и в случае дискретного спектра для эрмитовых операторов, эти кет-векторы можно сделать ортонормированными

$$\langle l,\rho,n|l',\rho',n'\rangle = \delta(l-l')\delta(\rho-\rho')\delta_{nn'}\,. \tag{4.97}$$

Наличие дискретного и непрерывного вырождения собственных кет-векторов эрмитова оператора говорит о том, что полный набор операторов, полностью снимающих вырождение и обладающих общей системой собственных кет-векторов, включает в себя как операторы с непрерывным, так и операторы с дискретным спектром.

Для того чтобы эрмитов оператор с непрерывным спектром был наблюдаемой, необходимо, чтобы для его собственных кет-векторов выполнялось условие полноты (3.54), которое для вырожденного спектра переписывается так

$$\sum_{n=1}^{N_l}\int_{-\infty}^{\infty} dl \int_{\rho_1}^{\rho_2} d\rho |l,\rho,r\rangle\langle l,\rho,r| = \hat{1}\,. \tag{4.98}$$

Отметим, что в общем случае наблюдаемые могут иметь спектр собственных значений, который содержит ряд дискретных (возможно и вырожденных) значений l_m с собственными кет-векторами $|m,i\rangle$, а также непрерывную часть l, изменяющуюся в определённых пределах $l_1 \le l \le l_2$ с кет-векторами $|l,\rho,n\rangle$. В этом случае соотношение ортонормированности для собственных кет-векторов записывается в виде

$$\begin{gathered}\langle m,i|m',i'\rangle = \delta_{mm'}\delta_{ii'}\,,\\ \langle m,i|l,\rho,n\rangle = 0\,,\\ \langle l,\rho,n|l',\rho',n'\rangle = \delta(l-l')\delta(\rho-\rho')\delta_{nn'}\,,\end{gathered} \tag{4.99}$$

а условие полноты

$$\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{i=1}^{N_n}|n,i\rangle\langle n,i| + \int_{l_1}^{l_2} dl \int_{\rho_1}^{\rho_2} d\rho \sum_{j=1}^{N_l}|l,\rho,j\rangle\langle l,\rho,j| = \hat{1}\,. \tag{4.100}$$

В заключение параграфа докажем простую теорему - критерий наличия непрерывного спектра у наблюдаемой.

Теорема 4.4. Если для наблюдаемой $\hat{L}$ можно найти другую $\hat{M}$, такую, что

$$\left[\hat{L},\hat{M}\right] = iC\,, \tag{4.101}$$

где C – вещественное число, то спектр наблюдаемой $\hat{L}$ - непрерывный.

Доказательство от противного**.** Предположим противное, у $\hat{L}$ - спектр дискретный, т.е. $\hat{L}|n\rangle = l_n|n\rangle, \langle n|n\rangle = 1, n = 0,1,2,...$ Построим диагональные матричные элементы на собственных векторах наблюдаемой от операторов левой и правой частей (4.101):

$$\langle n|\left[\hat{L},\hat{M}\right]|n\rangle = \langle n|iC|n\rangle\,. \tag{4.102}$$

Слева получаем

$$\langle n|\left[\hat{L},\hat{M}\right]|n\rangle = \langle n|\left(\hat{L}\hat{M}-\hat{M}\hat{L}\right)|n\rangle = \langle n|\hat{L}\hat{M}|n\rangle - \langle n|\hat{M}\hat{L}|n\rangle = l_n\langle n|\hat{M}|n\rangle - l_n\langle n|\hat{M}|n\rangle = 0\,, \tag{4.103}$$

(так как для эрмитова оператора $\langle n|\hat{L} = \langle n|\hat{L}^{+} = l_n^{*}\langle n| = l_n\langle n|$), а справа iC, т.е. не ноль. Таким образом, исходное предположение о дискретном спектре $\hat{L}$ не верно, у $\hat{L}$ спектр непрерывный.

Упражнения 4.

1. Определить тип оператора и найти его спектр.

а) $\dfrac{d}{dx}$;

б) $i\dfrac{d}{dx}$;

в) $i\dfrac{d}{d\varphi}$, ($0 \le \varphi \le 2\pi$);

г) $x - \dfrac{d}{dx}$;

д) $x + \dfrac{d}{dx}$;

е) $\dfrac{d^2}{dx^2} + \dfrac{2}{x}\dfrac{d}{dx}$ (**Указание**: ввести новую функцию $u(x) = x\psi(x)$. **Ответ**: оператор общего типа, $\psi_\beta(x) = C\dfrac{\sin(\beta x)}{x}$, где β — вещественно; спектр действительный непрерывный).

ж) оператора трансляции $\hat{T}_\varepsilon(x)$.

Решение. в) Оператор $i\dfrac{d}{d\varphi}$ в пространстве функций $\psi(\varphi)$, $0 \le \varphi \le 2\pi$ - эрмитов: $\left(i\dfrac{d}{d\varphi}\right)^+ = -i\left(\dfrac{d}{d\varphi}\right)^+ = i\dfrac{d}{d\varphi}$, согласно (2.79) и (2.87), поэтому у него главные собственные значения вещественны. Уравнение на собственные функции

$$i\frac{d}{d\varphi}\psi_l(\varphi) = l\psi_l(\varphi)$$

Решение этого уравнения

$$\psi_l(\varphi) = Ce^{-il\varphi}.$$

Собственная комплексная функция $\psi_l(\varphi)$ будет иметь конечную норму, если она однозначна, т.е. если $\psi_l(0) = \psi_l(2\pi)$, что возможно, только при целых l. Таким образом, спектр оператора $l = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$, а соответствующие нормированные собственные функции $\psi_l(\varphi) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-il\varphi}$.

Решение. **ж)** Оператор трансляции $\hat{T}_\varepsilon(x)$ унитарный, следовательно, его главные собственные значения по модулю равны единице. Для решения уравнения на собственные значения

$$\hat{T}_\varepsilon(x)\psi_l(x) = l\psi_l(x)$$

представим оператор $\hat{T}_\varepsilon(x)$ в дифференциальной форме (см. Упражнение 1.7):

$$\hat{T}_\varepsilon(x) = e^{\varepsilon\frac{d}{dx}} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\varepsilon^n}{n!}\frac{d^n}{dx^n}$$

и подставим в уравнение на собственные значения. В итоге получаем простое дифференциальное уравнение бесконечного порядка с постоянными коэффициентами:

$$\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\varepsilon^n}{n!}\frac{d^n\psi_l(x)}{dx^n} = l\psi_l(x).$$

Его решение ищем в виде $\psi_l(x)=e^{\lambda x}$. Подставляя эту функцию в исходное уравнение, получаем характеристическое уравнение для нахождения параметра λ:

$$l=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\varepsilon^n}{n!}(\lambda)^n=e^{\lambda\varepsilon}.$$

Беря логарифм от обеих частей этого равенства и учитывая, что логарифм от комплексного числа

$$\ln(z)=\ln\left(|z|e^{i\arg(z)+i2\pi k}\right)=\ln(|z|)+i\left(A\operatorname{rg}(z)+2\pi k\right)$$

находим λ:

$$\lambda_k=\frac{1}{\varepsilon}\left(\ln|l|+i\left(\varphi+2\pi k\right)\right),$$

где $\varphi=A\operatorname{rg}(l)$, $k=0,\pm1,\pm2,...$

Таким образом, собственные функции оператора трансляции будут

$$\psi_{l,k}(x)=C_k e^{\frac{1}{\varepsilon}\left(\ln|l|+i(\varphi+2\pi k)\right)x}.$$

Если $\ln(|l|)\neq 0$, то эти функции не принадлежат оснащенному гильбертову пространству, поэтому для главных собственных значений $|l|=1$. В этом случае их можно нормировать на δ-функцию:

$$\langle l|l'\rangle=|C_k|^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{i(\varphi'-\varphi)\frac{x}{\varepsilon}}dx=2\pi\varepsilon|C_k|^2\,\delta(\varphi-\varphi'),$$

выбрав $C_k=\frac{1}{\sqrt{2\pi\varepsilon}}$.

Таким образом, спектр оператора трансляций $l=e^{i\varphi}$, $0\le\varphi<2\pi$ - комплексный, непрерывный, бесконечно кратно вырожденный, собственные функции для главных собственных значений равны $\psi_{l(\varphi),k}(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\varepsilon}}e^{i(\varphi+2\pi k)\frac{x}{\varepsilon}}$, $k=0,\pm1,\pm2,...$

2. Эрмитов оператор $\hat{F}$ удовлетворяет соотношению $\hat{F}^2=C\hat{F}$, где C — некоторое вещественное число. Каковы собственные значения такого оператора?

(**Ответ**: 0, C).

3. Найти собственные значения и собственные функции эрмитова оператора $\hat{F}$, ядро которого имеет вид: $F(x,x')=f(x)f^*(x')$. Какова кратность вырождения собственных значений этого оператора?

Решение. Уравнение на собственные значения для интегрального оператора будет

$$\int_{-\infty}^{\infty}F(x,x')\psi_l(x')\,dx'=l\psi_l(x),$$

или, подставляя явный вид ядра $F(x,x')$,

$$f(x)\int_{-\infty}^{\infty}f^*(x')\psi_l(x')\,dx'=l\psi_l(x).$$

Если $l\neq 0$, то имеется одна собственная функция $\psi_l(x)=C_l f(x)$, где C_l — константа, равная интегралу, деленному на l, отвечающая собственному значению

$$l = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x') f(x')\, dx' > 0 .$$

Если l = 0, то для этого собственного значения $\int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)\psi_0(x)\, dx = 0$, или $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_l^*(x)\psi_0(x)\, dx = 0$, т.е. этому собственному значению будет принадлежать бесконечное число функций $\psi_{0,i}$, ортогональных найденной собственной функции $\psi_l(x) = C_l f(x)$, т.е. собственное значение l = 0 бесконечно кратно вырождено.

4. Показать, что для аналитической функции определение функции от наблюдаемой (4.45) и определение функции от оператора (2.35) совпадают. (**Указание**: сначала показать, что $\hat{L}^n = \sum_i l_i^n \hat{P}_i$, воспользовавшись спектральным разложением наблюдаемой).

5. Получить выражение для нормированных собственных кет-векторов $|l,m\rangle$ операторов $\hat{L}^2$ и $\hat{L}_3$, рассмотренных в примере §3:

$\hat{L}^2 |l,m\rangle = l(l+1)|l,m\rangle$, $l = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \ldots$

$\hat{L}_3 |l,m\rangle = m|l,m\rangle$, m = -l, -l +1, …, l-1, l;

через начальный кет-вектор $|l,l\rangle$ (4.77) и «понижающий» оператор $\hat{A}$ (4.66).

6. Задан не эрмитов оператор $\hat{a}$ общего типа, такой, что $\left[\hat{a}, \hat{a}^+\right] = \hat{1}$. (Такие операторы называются операторами Бозе). Найти спектр и собственные функции оператора $\hat{N} = \hat{a}^+\hat{a}$. Пояснить, почему указанные операторы называются: $\hat{N}$ — оператор числа частиц, $\hat{a}$ — оператор «уничтожения», $\hat{a}^+$ — оператор «рождения». (**Указание:** задача решается аналогично примеру, рассмотренному в § 3.)

(**Ответ**: спектр оператора $\hat{N}$ — целые положительные числа n: $\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$. Нормированные собственные кет-векторы $|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^+)^n |0\rangle$, где начальный кет-вектор $|0\rangle$ находится из условия $\hat{a}|0\rangle = 0$ и $\langle 0|0\rangle = 1$).

5. ЭЛЕМЕНТЫ ТЕОРИИ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ

Обобщим понятия кет-векторов и операторов, рассмотренные в предыдущих разделах.

§ 1. Представление кет-векторов

Рассмотрим полный набор наблюдаемых в оснащённом гильбертовом пространстве. Совокупность операторов, полностью снимающих вырождение, может содержать как операторы с непрерывным спектром, обозначим их через $\hat{X}_1, \hat{X}_2, ..., \hat{X}_n$, так и операторы с дискретным спектром — $\hat{\Sigma}_1, \hat{\Sigma}_2, ..., \hat{\Sigma}_m$. Все операторы коммутируют между собой. Их собственные кет-векторы

$$\begin{aligned}
&\hat{X}_1 \left| x_1, ..., x_n, \sigma_1, ..., \sigma_m \right\rangle = x_1 \left| x_1, ..., x_n, \sigma_1, ..., \sigma_m \right\rangle \\
&\vdots \\
&\hat{X}_n \left| x_1, ..., x_n, \sigma_1, ..., \sigma_m \right\rangle = x_n \left| x_1, ..., x_n, \sigma_1, ..., \sigma_m \right\rangle \\
&\hat{\Sigma}_1 \left| x_1, ..., x_n, \sigma_1, ..., \sigma_m \right\rangle = \sigma_1 \left| x_1, ..., x_n, \sigma_1, ..., \sigma_m \right\rangle \\
&\vdots \\
&\hat{\Sigma}_m \left| x_1, ..., x_n, \sigma_1, ..., \sigma_m \right\rangle = \sigma_m \left| x_1, ..., x_n, \sigma_1, ..., \sigma_m \right\rangle
\end{aligned} \tag{5.1}$$

однозначно определяются набором непрерывных x_i, $i = 1, \ldots, n$ и дискретных $\sigma_i = 1, \ldots, m$ собственных значений этих операторов. Они ортонормированны

$$\left\langle x_1, ..., x_n, \sigma_1, ..., \sigma_m \middle| x_1', ..., x_n', \sigma_1', ..., \sigma_m' \right\rangle = \delta(x_1 - x_1')...\delta(x_n - x_n')\delta_{\sigma_1\sigma_1'}...\delta_{\sigma_m\sigma_m'} \tag{5.2}$$

и образуют базис

$$\sum_{\sigma_1...\sigma_m} \int dx_1 ... \int dx_n \left| x_1, ..., x_n, \sigma_1, ..., \sigma_m \right\rangle \left\langle x_1, ..., x_n, \sigma_1, ..., \sigma_m \right| = \hat{1}. \tag{5.3}$$

Чтобы не писать такие громоздкие формулы, введём обобщённые обозначения. Совокупность всех собственных значений операторов полного набора обозначим одним символом x:

$$x = \{x_1, ..., x_n; \sigma_1, ..., \sigma_m\}. \tag{5.4}$$

Введём обобщённую δ-функцию

$$\delta(x - x') = \delta(x_1 - x_1')...\delta(x_n - x_n')\delta_{\sigma_1\sigma_1'}...\delta_{\sigma_m\sigma_m'} \tag{5.5}$$

и обобщённый интеграл

$$\int dx = \int dx_1 ... \int dx_n \sum_{\sigma_1} ... \sum_{\sigma_m} \ , \tag{5.6}$$

т.е. под обобщённым интегрированием будем понимать интегрирование по всем значениям непрерывных переменных и суммирование по всем значениям дискретных.

Тогда выражение (5.1)-(5.3) перепишутся в виде

$$\hat{X}_i \left| x \right\rangle = x_i \left| x \right\rangle, \ i = 1,...n; \ \hat{\Sigma}_i \left| x \right\rangle = \sigma_i \left| x \right\rangle, \ i = 1, ..., m, \tag{5.7}$$

$$\left\langle x \middle| x' \right\rangle = \delta(x - x'), \tag{5.8}$$

$$\int dx \left| x \right\rangle \left\langle x \right| = \hat{1}, \tag{5.9}$$

где теперь согласно (5.4)-(5.6) $x = \{x_1, ..., x_n; \sigma_1, ..., \sigma_m\}$.

Любой кет-вектор $\left| a \right\rangle$ может быть разложен по собственным кет-векторам полного набора наблюдаемых (5.7)-(5.9), образующим базис в оснащённом гильбертовом пространстве

$$\left| a \right\rangle = \int dx \left| x \right\rangle \left\langle x \middle| a \right\rangle, \ x = \{x_1, ..., x_n; \sigma_1, ..., \sigma_m\}. \tag{5.10}$$

Коэффициенты разложения $\left\langle x \middle| a \right\rangle$ полностью определяют кет-вектор $\left| a \right\rangle$ в этом базисе. Совокупность этих коэффициентов, т. е. функция

$$\psi_a(x) = \langle x|a\rangle,\ x = \{x_1,...,x_n;\sigma_1,...,\sigma_m\}, \tag{5.11}$$

называется x-представлением кет-вектора $|a\rangle$. Совокупность переменных $x = \{x_1,...,x_n;\sigma_1,...,\sigma_m\}$ называется индексом представления. Он определяется выбором полного набора операторов.

Аналогично, если $\hat{P}_1,...,\hat{P}_n;\hat{\theta}_1,...\hat{\theta}_m$, есть другой полный набор наблюдаемых и $|p\rangle$ — их общие собственные кет-векторы, образующие базис, то тот же самый кет-вектор может быть разложен и по этому базису

$$|a\rangle = \int dp|p\rangle\langle p|a\rangle, \tag{5.12}$$

где совокупность коэффициентов разложения, т. е. функция

$$\psi_a(p) = \langle p|a\rangle,\ p = \{p_1,...,p_n;\theta_1,...,\theta_m\}, \tag{5.13}$$

называется p-представлением кет-вектора $|a\rangle$.

Если выбрать в качестве кет-вектора $|a\rangle$ собственный кет-вектор $|x'\rangle$ операторов полного набора $\hat{X}_1,...,\hat{\Sigma}_m$, то x-представлением будет функция

$$\psi_{x'}(x) = \langle x|x'\rangle = \delta(x-x'), \tag{5.14}$$

равная, в силу ортонормированности (5.8), обобщённой δ-функции (5.5). Аналогично, если в качестве $|a\rangle$ взять собственный кет-вектор $|p'\rangle$ операторов $\hat{P}_1,...,\hat{\theta}_m$ другого полного набора, то p-представлением этого кет-вектора снова будет обобщенная δ-функция

$$\psi_{p'}(p) = \langle p|p'\rangle = \delta(p-p'). \tag{5.15}$$

Таким образом, кет-векторы в своих собственных представлениях есть обобщённые δ-функции соответствующих переменных.

Для того чтобы установить связь между представлениями (5.11) и (5.13) одного и того же кет-вектора, умножим разложение (5.10) кет-вектора $|a\rangle$ на кет-вектор $|p\rangle$

$$\langle p|a\rangle = \int dx\langle p|x\rangle\langle x|a\rangle = \int \langle x|p\rangle^* \langle x|a\rangle dx, \tag{5.16}$$

или

$$\psi_a(p) = \int \psi_p{}^*(x)\,\psi_a(x)\,dx, \tag{5.17}$$

где $\psi_a(p)$ и $\psi_a(x)$ — p- и x-представители кет-вектора $|a\rangle$, а $\psi_p(x)$ — x-представитель базисного кет-вектора $|p\rangle$. Фактически (5.17) есть запись скалярного произведения $\langle p|a\rangle$ через x-представители кет-векторов $|p\rangle$ и $|a\rangle$. Зная эти представители, по формуле (5.17) можно находить p-представления кет-вектора $|a\rangle$.

Заметим, что переход от одного представления к другому (5.16) формально можно получить, вставляя в скалярное произведение $\langle p|a\rangle$ вместо разделительной черты « | » разложение единицы (5.9):

$$\langle p|a\rangle = \langle p|\hat{1}|a\rangle \equiv \langle p|\int dx|x\rangle\langle x|a\rangle = \int dx\langle p|x\rangle\langle x|a\rangle = \int dx\langle x|p\rangle^* \langle x|a\rangle \tag{5.18}$$

§ 2. Представление операторов

Пусть зада линейный оператор $\hat{L}$, который, действуя на кет-вектор $|a\rangle$, переводит его в кет-вектор $|La\rangle$:

$$\hat{L}|a\rangle = |La\rangle. \tag{5.19}$$

Запишем это равенство в x-представлении:

$$\langle x|\hat{L}|a\rangle = \langle x|La\rangle. \tag{5.20}$$

Вставив перед оператором $\hat{L}$ единичный оператор (5.9)

$$\hat{1} = \int dx' \left| x' \right\rangle \left\langle x' \right|, \tag{5.21}$$

получаем

$$\left\langle x \middle| La \right\rangle = \int dx' \left\langle x \middle| \hat{L} \middle| x' \right\rangle \left\langle x' \middle| a \right\rangle, \tag{5.22}$$

или

$$\psi_{La}(x) = \int dx' \left\langle x \middle| \hat{L} \middle| x' \right\rangle \psi_a(x'). \tag{5.23}$$

Таким образом, $\left\langle x \middle| \hat{L} \middle| x' \right\rangle$ — ядро $L(x,x')$ некоторого оператора $\hat{L}(x)$, переводящего x-образ кет-вектора $\left| a \right\rangle$, т.е. функцию $\psi_a(x)$ в x-образ преобразованного кет-вектора $\left| La \right\rangle$ — функцию $\psi_{La}(x)$. Символически это действие можно записать в виде

$$\hat{L}(x)\psi_a(x) = \psi_{La}(x). \tag{5.24}$$

Формально (5.24) можно получить из (5.23), положив

$$\left\langle x \middle| \hat{L} \middle| x' \right\rangle = \hat{L}(x)\delta(x - x'). \tag{5.25}$$

Оператор $\hat{L}(x)$ называется x-представлением абстрактного оператора $\hat{L}$. (5.24) есть просто запись (5.19) в x-представлении.

Любая наблюдаемая в своём собственном представлении является оператором умножения. Действительно, пусть $\hat{X}_i$ — наблюдаемая из полного набора (5.1) с собственными значениями x_i и собственными кет-векторами $\left| x \right\rangle$, $x = \{x_1,...,x_n;\sigma_1,...,\sigma_m\}$, образующими ортонормированный базис. Тогда ядро оператора $\hat{X}_i(x)$ равно

$$X_i(x,x') = \left\langle x \middle| \hat{X}_i \middle| x' \right\rangle = x_i \left\langle x \middle| x' \right\rangle = x_i\delta(x - x'), \tag{5.26}$$

а сам оператор $\hat{X}_i(x)$, согласно (2.56), является оператором умножения на переменную x_i:

$$\hat{X}_i(x) = x_i. \tag{5.27}$$

Аналогично, если $\hat{P}_1...\hat{\theta}_m$ — полный набор наблюдаемых с собственными кет-векторами $\left| p \right\rangle$, то p-представлением оператора $\hat{L}$ будет оператор $\hat{L}(p)$, определяемый ядром

$$L(p,p') = \left\langle p \middle| \hat{L} \middle| p \right\rangle. \tag{5.28}$$

Операторы $\hat{L}(x)$ и $\hat{L}(p)$ являются двумя различными представлениями одного и того же оператора $\hat{L}$. Установим связь между x- и p-представлениями оператора $\hat{L}$, т. е. связь между ядрами (5.25) и (5.28). Её формально легко можно получить, если в выражении $\left\langle p \middle| \hat{L} \middle| p' \right\rangle$ оператор $\hat{L}$ слева и справа умножить на единичные операторы

$$\hat{1} = \int dx \left| x \right\rangle \left\langle x \right|,\ \hat{1} = \int dx' \left| x' \right\rangle \left\langle x' \right|: \tag{5.29}$$

$$\left\langle p \middle| \hat{L} \middle| p' \right\rangle = \int dx \int dx' \left\langle p \middle| x' \right\rangle \left\langle x \middle| \hat{L} \middle| x' \right\rangle \left\langle x' \middle| p' \right\rangle, \tag{5.30}$$

или

$$\begin{aligned} L(p,p') &= \int dx \int dx' \psi_p^*(x) L(x,x')\, \psi_{p'}(x') = \\ &= \int dx \int dx' \psi_p^*(x)\, \hat{L}(x)\delta(x - x')\, \psi_{p'}(x') = \int dx\, \psi_p^*(x)\hat{L}(x)\psi_{p'}(x) \end{aligned} \tag{5.31}$$

Формула (5.31) позволяет получить ядро оператора $\hat{L}$ в p-представлении, если известно ядро или сам оператор в x-представлении и известны базисные собственные функции $\psi_p(x)$ полного набора операторов $\hat{P}_1...\hat{\theta}_m$ в этом же представлении. Фактически (5.31) есть запись матричного элемента $\left\langle p \middle| \hat{L} \middle| p' \right\rangle$ как скалярного произведения (1.6) через x-представители кет-векторов $\left| p \right\rangle$ и $\left| Lp' \right\rangle$.

В квантовой механике выбор того или иного представления определяется или конкретными физическими требованиями, или из соображений простоты решений соответствующей физической задачи в данном представлении. Рассмотрим пример, иллюстрирующий сказанное.

Пример. Найти спектр l и собственные функции $\psi_l(x)$ эрмитова оператора $\hat{L}$, который в x-представлении задаётся в виде

$$\hat{L}(x) = x + \frac{d^2}{dx^2}, \tag{5.32}$$

(x — обычная координата).

Уравнением на собственные значения (4.2) этого оператора будет дифференциальное уравнение

$$\frac{d^2\psi_l(x)}{dx^2} + (x-l)\,\psi_l(x) = 0, \tag{5.33}$$

уравнение второго порядка с непостоянными коэффициентами. Решение этого уравнения хорошо известно в математике, оно выражается через интегральную функцию Эйри.

Решим эту задачу более простым, с точки зрения дифференциальных уравнений, путём. Рассмотрим эрмитов оператор

$$\hat{p}(x) = -i\frac{d}{dx}, \tag{5.34}$$

обладающий непрерывным вещественным спектром $-\infty < p < \infty$ и собственными функциями

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ipx} \tag{5.35}$$

(см. задачу 4.1б), образующими базис.

Исходный оператор $\hat{L}$ выражается через $\hat{p}$:

$$\hat{L}(x) = -\hat{p}^2(x) + \hat{x}, \tag{5.36}$$

и нахождение его спектра в x-представлении сводится к решению уравнения (5.33).

Рассмотрим оператор (5.36) в p-представлении. Оператор $\hat{p}$ тогда будет оператором умножения

$$\hat{p}^2(p) \equiv p^2, \tag{5.37}$$

а вид оператора $\hat{x}(p)$ найдём, воспользовавшись формулами связи (5.31). Ядро

$$x(p,p') = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi_p^{\,*}(x)\,\hat{x}(x)\,\psi_{p'}(x) = \frac{1}{2\pi}\int x e^{-i(p-p')x} dx = i\frac{\partial}{\partial p}\left(\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(p-p')x} dx)\right) = i\frac{\partial}{\partial p}\delta(p-p') \tag{5.38}$$

Тогда, согласно (2.56),

$$\hat{x}(p) = i\frac{d}{dp} \tag{5.39}$$

с собственными функциями

$$\psi_x(p) \equiv \psi_p^{\,*}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ipx}. \tag{5.40}$$

Следовательно, оператор $\hat{L}$ в p-представлении будет равен

$$\hat{L}(p) = i\frac{d}{dp} - p^2, \tag{5.41}$$

а уравнение на собственные значения

$$i\frac{d\psi_l(p)}{dp} - (p^2 + l)\,\psi_l(p) = 0. \tag{5.42}$$

В отличие от (5.33), (5.42) уже уравнение первого порядка, которое всегда интегрируется:

$$\psi_l(p) = Ce^{-i(\frac{p^2}{3}+l)p}, \tag{5.43}$$

где константу интегрирования C найдём из условия нормировки (1.28):

$$\langle l | l' \rangle = \delta(l - l') . \tag{5.44}$$

Легко видеть, что она равна $1/\sqrt{2\pi}$.

Таким образом, оператор $\hat{L}$ имеет непрерывные вещественные собственные значения l и собственные функции (5.43), записанные в p-представлении.

Если необходимы собственные функции этого оператора в x-представлении, воспользуемся формулами связи представлений (5.18):

$$\psi_l(x) \equiv \langle x | l \rangle = \int dp \langle x | p \rangle \langle p | l \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_x^*(p)\, \psi_l(p)\, dp . \tag{5.45}$$

Подставляя в (5.45) (5.40) и (5.43), получаем

$$\psi_l(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(\frac{p^2}{3}+l-x)p} dp = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \cos((\frac{p^2}{3} + l - x)p) dp = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \Phi(l - x), \tag{5.46}$$

где

$$\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \cos\left(zx + \frac{z^3}{3}\right) dz \tag{5.47}$$

функция Эйри, значения которой можно найти в таблицах специальных функций.

Упражнения 5

1. Показать, что переход от x-представления к p-представлению, рассмотренный в примере последнего параграфа, есть унитарное преобразование.

Решение. Переход от x-представления к p-представлению, согласно (5.17) и (5.35),

$$\psi_a(p) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi_p^{\,*}(x)\, \psi_a(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx} \psi_a(x)\, dx \equiv \hat{u}\, \psi_a(x)$$

осуществляется интегральным оператором $\hat{u}$ с ядром $u(p,x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ipx}$. Ядро оператора обратного преобразования

$$\psi_a(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dp\, \psi_x^{\,*}(p)\, \psi_a(p) = \int_{-\infty}^{\infty} dp\, \psi_p(x)\, \psi_a(p) = \hat{u}^{-1} \psi_a(p)\,,$$

согласно (5.40) и (2.86), равно

$$\hat{u}^{-1}(p,x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ipx} = u^*(x,p) = u^+(p,x)\,.$$

Таким образом, $\hat{u}^{-1} = \hat{u}^+$, и, согласно (3.12), $\hat{u}$ — унитарный оператор.

2. Три оператора $\hat{L}_i$, $i = 1, 2, 3$, в координатном представлении задаются в виде

$$\hat{L}_i = -i\varepsilon_{ijk} x_j \frac{\partial}{\partial x_k}, \qquad \begin{cases} \hat{L}_1(x,y,z) = i(y\dfrac{\partial}{\partial z} - z\dfrac{\partial}{\partial y}) \\ \hat{L}_2(x,y,z) = i(z\dfrac{\partial}{\partial x} - x\dfrac{\partial}{\partial z}) \\ \hat{L}_3(x,y,z) = i(x\dfrac{\partial}{\partial y} - y\dfrac{\partial}{\partial x}) \end{cases}$$

где ε_{ijk} — единичный псевдотензор Леви-Чивиты (по повторяющимся индексам идёт суммирование).

а) Показать, что эти операторы удовлетворяют коммутационным соотношениям $\left[\hat{L}_i, \hat{L}_j\right] = i\varepsilon_{ijk} \hat{L}_k$.

б) Найти спектр и собственные функции оператора $\hat{L}^2 = \hat{L}_k \hat{L}_k$.

Решение.

а) Используя свойства коммутаторов (2.22)-(2.23), получаем

$$\left[\hat{L}_i, \hat{L}_j\right] = \left[-i\varepsilon_{jkl} x_k \frac{\partial}{\partial x_l}, -i\varepsilon_{jmn} x_m \frac{\partial}{\partial x_n}\right] = -\varepsilon_{ikl}\varepsilon_{jmn}\left[x_k \frac{\partial}{\partial x_l}, x_m \frac{\partial}{\partial x_n}\right] =$$

$$= -\varepsilon_{ikl}\varepsilon_{jmn}\left\{x_k x_m \left[\frac{\partial}{\partial x_l}, \frac{\partial}{\partial x_n}\right] + x_k \left[\frac{\partial}{\partial x_l}, x_m\right]\frac{\partial}{\partial x_n} + x_m\left[x_k, \frac{\partial}{\partial x_n}\right]\frac{\partial}{\partial x_l} + \left[x_k, x_m\right]\frac{\partial}{\partial x_l}\frac{\partial}{\partial x_n}\right\}$$

Учитывая значения элементарных коммутаторов:

$$\left[x_k, x_m\right] = 0, \left[\frac{\partial}{\partial x_l}, \frac{\partial}{\partial x_n}\right] = 0, \left[x_i, \frac{\partial}{\partial x_i}\right] = -\left[\frac{\partial}{\partial x_i}, x_i\right] = -\delta_{ij}\,, \tag{1}$$

далее получаем

$$\left[\hat{L}_i, \hat{L}_j\right] = -\varepsilon_{ikl}\varepsilon_{jmn}(x_k \frac{\partial}{\partial x_n}\delta_{lm} - x_m \frac{\partial}{\partial x_l}\delta_{kn}) = -\varepsilon_{ikm}\varepsilon_{jmn} x_k \frac{\partial}{\partial x_n} + \varepsilon_{inl}\varepsilon_{jmn} x_m \frac{\partial}{\partial x_l}$$

(δ-символы сняли соответствующие суммирования).

Заменим в первом слагаемом индексы суммирования $k \to m, \quad n \to l, \quad m \to n$, тогда

$$\left[\hat{L}_i,\hat{L}_j\right]=(-\varepsilon_{imn}\varepsilon_{jnl}+\varepsilon_{inl}\varepsilon_{jmn})x_m\frac{\partial}{\partial x_l}.$$

Для псевдотензора ε_{ijk} справедливы соотношения

$$\varepsilon_{ikl}\varepsilon_{lmn}=\delta_{im}\delta_{kn}-\delta_{in}\delta_{km},\ \varepsilon_{ikl}=-\varepsilon_{ilk}, \tag{2}$$

из которых следует, что

$$(-\varepsilon_{imn}\varepsilon_{jnl}+\varepsilon_{inl}\varepsilon_{jmn})=\delta_{ij}\delta_{ml}-\delta_{il}\delta_{mj}-\delta_{ji}\delta_{lm}+\delta_{lj}\delta_{mi}=\delta_{im}\delta_{lj}-\delta_{il}\delta_{jm}=\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{kml}.$$

Поэтому

$$\left[\hat{L}_i,\hat{L}_j\right]=\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{kml}x_m\frac{\partial}{\partial x_l}=i\varepsilon_{ijk}(-i\varepsilon_{kml}x_m\frac{\partial}{\partial x_l})=i\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k,$$

что и требовалось доказать.

б) Найти собственные функции оператора $\hat{L}^2$ можно двумя способами:

1. Записать уравнение на собственные функции (4.2) для оператора $\hat{L}^2$ в x-представлении и решить его.
2. Воспользоваться примером в § 3 Главы 4, где найдены собственные кет-векторы таких операторов (4.85) и записать их в x-представлении.

Начнем с **первого** способа. Запишем оператор $\hat{L}^2$ в координатном представлении.

$$\hat{L}^2=\hat{L}_i\hat{L}_i=(-i\varepsilon_{ijk}x_j\frac{\partial}{\partial x_k})(-i\varepsilon_{imn}x_m\frac{\partial}{\partial x_n})=-\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{imn}x_j\frac{\partial}{\partial x_k}x_m\frac{\partial}{\partial x_n}$$

Из коммутационных соотношений (1) следует, что

$$\frac{\partial}{\partial x_k}x_m=x_m\frac{\partial}{\partial x_k}+\delta_{km},$$

тогда

$$\hat{L}^2=-\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{imn}x_jx_m\frac{\partial}{\partial x_k}\frac{\partial}{\partial x_n}-\varepsilon_{ijm}\varepsilon_{imn}x_j\frac{\partial}{\partial x_n}.$$

Учитывая (2) и вытекающее из него соотношение

$$\varepsilon_{jmi}\varepsilon_{imn}=-2\delta_{jn},$$

далее получаем

$$\hat{L}^2(x)=-\delta_{jm}\delta_{kn}x_jx_m\frac{\partial}{\partial x_k}\frac{\partial}{\partial x_n}+\delta_{jn}\delta_{km}x_jx_m\frac{\partial}{\partial x_k}\frac{\partial}{\partial x_n}+2\delta_{jn}x_j\frac{\partial}{\partial x_n}=-x_j^{\,2}\frac{\partial^2}{\partial x_k^{\,2}}+x_jx_m\frac{\partial}{\partial x_m}\frac{\partial}{\partial x_j}+2x_j\frac{\partial}{\partial x_j}= \tag{3}$$

$$=-r^2\Delta+(\vec{r},(\vec{r},\nabla)\nabla)+2(\vec{r},\nabla)$$

а уравнение (4.2) на собственные функции будет

$$-r^2\Delta\psi_L(\vec{r})+\left(\vec{r},(\vec{r},\nabla)grad\left(\psi_L(\vec{r})\right)\right)+2\left(\vec{r},grad\left(\psi_L(\vec{r})\right)\right)=L\psi_L(\vec{r}) \tag{4}$$

- уравнением в частных производных второго порядка. Здесь L –собственные значения. Переменные в этом уравнении разделяются в сферической системе координат (r,θ,φ):

$$\begin{aligned} x&=r\sin\theta\cos\varphi \qquad & r&=\sqrt{x^2+y^2+z^2}\\ y&=r\sin\theta\sin\varphi & \varphi&=\mathrm{arctg}(y/x)=\mathrm{arcctg}(x/y)\\ z&=r\cos\theta & \theta&=\arccos(z/r)\end{aligned} \tag{5}$$

Так как в сферической системе координат

$$\Delta=\frac{\partial}{\partial x_i}\frac{\partial}{\partial x_i}=\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\Delta_{\theta,\varphi}, \tag{6}$$

где

$$\Delta_{\theta,\varphi}=\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta})+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}, \tag{7}$$

и

$$\left(\vec{r},\nabla\right)=r\frac{\partial}{\partial r}, \tag{8}$$

то из (3) получаем:

$$\hat{L}^2\left(x\right)=-\Delta_{\theta,\varphi}, \tag{9}$$

а уравнение будет

$$-\Delta_{\theta,\varphi}\psi_L\left(r,\theta,\varphi\right)=L\psi_L\left(r,\theta,\varphi\right) \tag{10}$$

Решение этого уравнения хорошо известно из курса «Методы математической физики». Функции $\psi_L\left(r,\theta,\varphi\right)$ будут из гильбертова пространства (ограниченные решения), если $L=l\left(l+1\right)$, где l – целые числа. В этом случае решение – сферические функции (см. Приложение 4)

$$Y_{l,m}(\theta,\varphi)=\alpha_m\sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}}\cdot e^{im\varphi}P_l^{|m|}(\cos\theta), \tag{11}$$

где m = 0, ±1, …, $\pm l$ и $\alpha_m=\begin{cases}(-1)^m, m\geq 0\\ 1, \quad m<0\end{cases}$

Второй способ. В рассмотренном в § 3 Главы 4 примере мы показали, что если операторы $\hat{L}_i$, i = 1, 2, 3 удовлетворяют коммутационным соотношениям, доказанным в а), то операторы $\hat{L}^2$ и $\hat{L}_3$ обладают общим набором кет-векторов $\left|l,m\right\rangle$, и нашли спектр этих операторов

$$\hat{L}^2\left|l,m\right\rangle=l(l+1)\left|l,m\right\rangle,$$

$$\hat{L}_3\left|l,m\right\rangle=m\left|l,m\right\rangle,$$

где l = 0, 1/2, 1, 3/2, … ; m = $-l$, $-l$+1, …, l-1, l.

Собственные кет-векторы $\left|l,m\right\rangle$ находятся согласно (4.85) действием оператора $\hat{A}^+=\hat{L}_1+i\hat{L}_2$ на начальный кет-вектор $\left|l,-l\right\rangle$:

$$\left|l,m\right\rangle=\sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!(2l)!}}(\hat{A}^+)^{l+m}\left|l,-l\right\rangle, \tag{12}$$

а сам начальный кет-вектор находится из уравнений

$$\hat{A}\left|l,-l\right\rangle=0,\ \left\langle l,-l\middle|l,-l\right\rangle=1, \tag{13}$$

$$\hat{L}_3\left|l,-l\right\rangle=-l\left|l,-l\right\rangle. \tag{14}$$

Заметим, что соотношение (12) справедливо как для кет-векторов, так и для любых их представителей. Поэтому, переписав его в x-представлении, получим выражение для искомой собственной функции:

$$\left\langle x\middle|l,m\right\rangle=\sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!(2l)!}}\hat{A}^+\left(x\right)^{l+m}\left\langle x\middle|l,-l\right\rangle \quad \text{или} \quad \psi_{l,m}\left(\vec{r}\right)=\sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!(2l)!}}\hat{A}^+\left(x\right)^{l+m}\psi_{l,-l}\left(\vec{r}\right), \tag{15}$$

где согласно условию задачи

$$\hat{A}^+\left(x\right)=\hat{L}_1\left(x\right)+i\hat{L}_2\left(x\right)=-(x+iy)\frac{\partial}{\partial z}+z\left(\frac{\partial}{\partial x}+i\frac{\partial}{\partial y}\right). \tag{16}$$

Таким образом, нам неизвестна пока только функция $\psi_{l,-l}\left(\vec{r}\right)$, которая находится из уравнений (13)-(14), записанных в x-представлении, т.е. в виде $\hat{A}\left(x\right)\psi_{l,-l}\left(\vec{r}\right)=0$, $\hat{L}_3\left(x\right)\psi_{l,-l}\left(\vec{r}\right)=-l\psi_{l,-l}\left(\vec{r}\right)$ или с учетом явного вида операторов $\hat{A}\left(x\right)=\hat{L}_1\left(x\right)-i\hat{L}_2\left(x\right)$ и $\hat{L}_3\left(x\right)$

$$(x-iy)\frac{\partial\psi_{l,-l}(\vec r)}{\partial z}-z(\frac{\partial\psi_{l,-l}(\vec r)}{\partial x}-i\frac{\partial\psi_{l,-l}(\vec r)}{\partial y})=0$$
$$-i\left(x\frac{\partial\psi_{l,-l}(\vec r)}{\partial y}-y\frac{\partial\psi_{l,-l}(\vec r)}{\partial x}\right)=-l\psi_{l,-l}(\vec r) \qquad (17)$$

с условием нормировки

$$\langle l,-l|l,-l\rangle=\int\limits_{V_\infty}\left|\psi_{l,-l}(\vec r)\right|^2 dV=1\,. \qquad (18)$$

Система уравнений (17) - это система уравнений в частных производных первого порядка. Переменные здесь разделяются в сферической системе координат (5). Действительно, для операторов производных

$$\frac{\partial}{\partial x_i}=\frac{\partial r}{\partial x_i}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial\theta}{\partial x_i}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{\partial\varphi}{\partial x_i}\frac{\partial}{\partial\varphi}\,,$$

где согласно (5)

$$\frac{\partial r}{\partial x_i}=\frac{x_i}{r};$$

$$\frac{\partial\varphi}{\partial x}=\frac{d}{dx}\mathrm{arcctg}\left(\frac{x}{y}\right)=-\frac{y}{x^2+y^2}=-\frac{\sin\varphi}{r\sin\theta};\quad \frac{\partial\varphi}{\partial y}=\frac{d}{dy}\mathrm{arctg}\left(\frac{y}{x}\right)=\frac{x}{x^2+y^2}=\frac{\cos\varphi}{r\sin\theta};\quad \frac{\partial\varphi}{\partial z}=0;$$

$$\frac{\partial\theta}{\partial x}=\frac{d}{dx}\arccos\left(\frac{z}{r}\right)=-\frac{1}{\sqrt{1-\left(\frac{z}{r}\right)^2}}\frac{d}{dx}\left(\frac{z}{r}\right)=\frac{xz}{r^2\sqrt{x^2+y^2}}=\frac{1}{r}\cos\theta\cos\varphi;$$

$$\frac{\partial\theta}{\partial y}=\frac{yz}{r^2\sqrt{x^2+y^2}}=\frac{1}{r}\cos\theta\sin\varphi;\quad \frac{\partial\theta}{\partial z}=\frac{d}{dz}\arccos\left(\frac{z}{r}\right)=-\frac{\sqrt{x^2+y^2}}{r^2}=-\frac{1}{r}\sin\theta$$

Тогда

$$\frac{\partial}{\partial x}=\sin\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\cos\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{1}{r}\frac{\sin\varphi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}$$
$$\frac{\partial}{\partial y}=\sin\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\cos\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{1}{r}\frac{\cos\varphi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} \qquad (19)$$
$$\frac{\partial}{\partial z}=\cos\theta\frac{\partial}{\partial r}-\frac{1}{r}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}$$

Подставляя (19) в (16)-(18) получаем все нужные операторы в сферической системе координат:

$$\hat L_3=-i(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x})=-i\frac{\partial}{\partial\varphi}\,, \qquad (20)$$

$$\hat A=\hat L_1-i\hat L_2=(x-iy)\frac{\partial}{\partial z}-z(\frac{\partial}{\partial x}-i\frac{\partial}{\partial y})=e^{-i\varphi}(-\frac{\partial}{\partial\theta}+ictg\frac{\partial}{\partial\varphi})\,, \qquad (21)$$

$$\hat A^+=e^{i\varphi}(\frac{\partial}{\partial\theta}+ictg\theta\frac{\partial}{\partial\varphi})\,. \qquad (22)$$

(Заметим, что в общем случае операторы (20)-(22) можно до множить на единичный оператор $\hat 1(r)$ с ядром $1(r,r')=\frac{1}{r^2}\delta(r-r')$, а оператор $\hat L_3(\vec r)$ (20) ещё и на $\hat 1(\theta)$ с ядром $1(\theta,\theta')=\frac{1}{\sin\theta}\delta(\theta-\theta')$).

Система уравнений (17) теперь запишется в виде

$$e^{-i\varphi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta}+ictg\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\psi_{l,-l}(\theta,\varphi)=0 \qquad (23)$$
$$-i\frac{\partial\psi_{l,-l}(\theta,\varphi)}{\partial\varphi}=-l\psi_{l,-l}(\theta,\varphi),$$

а условие нормировки (18)

$$\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\pi}\sin\theta\left|\psi_{l,-l}(\theta,\varphi)\right|^2d\theta=1. \qquad (24)$$

Переменные в (17) легко разделяются: $\psi_{l,-l}(\theta,\varphi)=\Phi_{-l}(\varphi)\cdot\Theta_l(\theta)$, $\Phi_{-l}(\varphi)$ находим из второго уравнения (23):

$$\Phi_{-l}(\varphi)=C_1e^{-il\varphi}. \qquad (25)$$

При полуцелых l комплексная функция Φ_{-l} двухзначная (см. задачу 1в Упражнений 4), ее можно сделать однозначной, введя понятие *спинора*, но это выходит за рамки данного пособия. Поэтому остановимся только на целых m и l. В этом случае Φ_{-l} однозначная функция: $\Phi_{-l}(\varphi+2\pi)\equiv\Phi_l(\varphi)$ (принадлежит гильбертову пространству). Из условия нормировки (24) $C_1=1/\sqrt{2\pi}$.

Для функции $\Theta_l(\theta)$ из (23) получаем уравнение

$$\frac{d\Theta_l(\theta)}{d\theta}-l\operatorname{ctg}\theta\cdot\Theta_l(\theta)=0, \qquad (26)$$

из которого также легко находим

$$\Theta_l(\theta)=C_2\sin^l\theta. \qquad (27)$$

C_2 снова находим из условия нормировки (24):

$$1=\int_0^{\pi}\sin\theta\cdot\Theta_l^2d\theta=C_2^2\int_0^{\pi}\sin^{2l+1}\theta d\theta=C_2^2\int_{-1}^{1}(1-x^2)^l\,dx.$$

Последний интеграл легко берётся l раз по частям:

$$\int_{-1}^{1}(1-x^2)^l\,dx=(1-x^2)^l\cdot x\,|_{-1}^{1}+\frac{l\cdot2}{1}\int_{-1}^{1}(1-x^2)^{l-1}x^2dx=\frac{l(l-1)\cdot2^2}{1\cdot3}\int_{-1}^{1}(1-x^2)^{l-2}x^4dx=$$
$$=...=\frac{l!2^l}{1\cdot3...(2l-1)}\int_{-1}^{1}x^{2l}dx=\frac{l!2^{l+1}}{1\cdot3\cdot5...(2l-1)(2l+1)}$$

Умножая числитель и знаменатель на $2^l l!$, получаем

$$\int_{-1}^{1}(1-x^2)^l dl=\frac{(l!)^2\,2^{2l+1}}{(2l+1)!}.$$

Таким образом, $C_2=\sqrt{\frac{(2l+1)!}{2}}\cdot\frac{1}{2^l l!}$, а начальная функция

$$\psi_{l,-l}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}}\cdot\frac{1}{2^l l!}e^{-il\varphi}\sin^l\theta. \qquad (28)$$

Таким образом, собственные функции операторов $\hat{L}_3(\vec{r})$ и $\hat{L}^2(\vec{r})$, относящиеся к собственным значениям m и $l(l+1)$, где l – натуральное число, m = - l , …,+l согласно (15) и (22), равны

$$\left\langle\vec{r}\,\middle|\,l,m\right\rangle\equiv\psi_{l,m}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{(2l+1)!(l-m)!}{4\pi(l+m)!(2l)!}}\frac{1}{2^l l!}\left[e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}+ictg\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\right]^{l+m}e^{-il\varphi}\sin^l\theta. \qquad (29)$$

Это так же сферические функции (11), но записанные в несколько иной форме, чем принято в математике. Их можно записать и в стандартной форме (11). Для этого подробнее рассмотрим действие оператора (22):

$$\hat{A}^{+}e^{-il\varphi}f(\theta)=\left[e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}+i\mathrm{ctg}\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\right]e^{-il\varphi}f(\theta)=e^{i(-l+1)\varphi}\left(\frac{d}{d\theta}+l\,\mathrm{ctg}\theta\right)f(\theta),\qquad(30)$$

здесь *f(θ)* — произвольная функция. Так как

$$\frac{df(\theta)}{d\theta}=\frac{1}{\sin^{l}\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin^{l}\theta\cdot f(\theta)\right)-l\,\mathrm{ctg}\theta\cdot f(\theta)$$

и

$$\frac{d}{d\theta}=\frac{d\cos\theta}{d\theta}\frac{d}{d\cos\theta}=-\sin\theta\frac{d}{d\cos\theta},$$

то

$$\frac{d}{d\theta}+l\,\mathrm{ctg}\theta=\frac{1}{\sin^{l}\theta}\frac{d}{d\theta}\sin^{l}\theta=-\sin^{1-l}\theta\frac{d}{d\cos\theta}\sin^{l}\theta.$$

Тогда из (30) следует, что

$$\hat{A}^{+}e^{-il\varphi}f(\theta)=-e^{i(-l+1)\varphi}\sin^{(-l+1)}\theta\frac{d}{d\cos\theta}\left(\sin^{l}\theta\cdot f(\theta)\right).\qquad(31)$$

Аналогично,

$$\left(\hat{A}^{+}\right)^{2}e^{-il\varphi}f(\theta)=-\left[e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}+i\mathrm{ctg}\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\right]e^{i(-l+1)\varphi}\sin^{(-l+1)}\theta\frac{d}{d\cos\theta}\left(\sin^{l}\theta\cdot f(\theta)\right)=$$

$$=-e^{i(-l+2)\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}+(l-1)\mathrm{ctg}\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\sin^{(-l+1)}\theta\cdot\frac{d}{d\cos\theta}\left(\sin^{l}\theta\cdot f(\theta)\right)=$$

$$=e^{i(-l+2)\varphi}\sin^{(-l+2)}\theta\cdot\frac{d}{d\cos\theta}\left(\sin^{l-1}\theta\cdot\sin^{(-l+1)}\theta\cdot\frac{d}{d\cos\theta}\left(\sin^{l}\theta\cdot f(\theta)\right)\right)=$$

$$=e^{i(-l+2)\varphi}\sin^{(-l+2)}\theta\cdot\frac{d^{2}}{d(\cos\theta)^{2}}\sin^{l}\theta\cdot f(\theta)$$

Поэтому

$$(\hat{A}^{+})^{k}e^{-il\varphi}f(\theta)=(-1)^{k}e^{i(-l+k)\varphi}\sin^{(-l+k)}\theta\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^{k}\left(\sin^{l}\theta\cdot f(\theta)\right).\qquad(32)$$

Тогда

$$\psi_{l,m}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!(2l)!}}\left(\hat{A}^{+}\right)^{l+m}\cdot\sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}}\frac{1}{2^{l}l!}e^{-il\varphi}\sin^{l}\theta=$$

$$=\sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}}\cdot\frac{(-1)^{l+m}}{2^{l}l!}\cdot e^{im\varphi}\sin^{m}\theta\frac{d^{l+m}}{d\cos^{l+m}\theta}\sin^{2l}\theta=\qquad(33)$$

$$=(-1)^{m}\sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}}e^{im\varphi}\frac{1}{2^{l}l!}\left(1-\cos^{2}\theta\right)^{\frac{m}{2}}\frac{d^{l+m}}{d\cos^{l+m}\theta}\left(\cos^{2}\theta-1\right)^{l}$$

Для положительных *m*

$$\psi_{l,m}(\theta,\varphi)=(-1)^{m}\sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}}P_{l}^{m}(\cos\theta)e^{im\varphi}\equiv Y_{l,m}(\theta,\varphi),\qquad(34)$$

где $P_{l}^{m}(\cos\theta)$ — присоединённые полиномы Лежандра (1.27) (или Приложение3).

3. Найти спектр и собственные функции оператора

$\hat{N}=\hat{a}^{+}\hat{a}$, где $\hat{a}=\frac{1}{2}\left(x+\frac{d}{dx}\right)$ - оператор Бозе.

(**Указание**. Задачу можно решать двумя способами:

1) Прямым решением дифференциального уравнения на собственные значения

$$\frac{d^2\psi_n(x)}{dx^2}+(n+1-x^2)\,\psi_n(x)=0\,.$$

Решение этого уравнения хорошо известно из методов математической физики: при целых положительных n

$$\psi_n(x)=\frac{1}{\sqrt{2^n n!\sqrt{\pi}}}\cdot e^{-\frac{x^2}{2}}H_n(x)\,,$$

где $H_n(x)$ — полиномы Чебышева-Эрмита (1.23).

2) Аналогично решению Задачи 5.2. Оператор $\hat{a}=\frac{1}{2}\left(x+\frac{d}{dx}\right)$ удовлетворяет условию $\left[\hat{a},\hat{a}^+\right]=\hat{1}$, поэтому $\hat{N}=\hat{a}^+\hat{a}$ — оператор числа частиц (см. Задачу 4.6), его собственные значения n — положительные числа, а собственные кет-векторы $\left|n\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\hat{a}^+\right)^n\left|0\right\rangle$ находятся по начальному кет-вектору $\left|0\right\rangle$ действием n раз оператора рождения $\hat{a}^+$. Для нахождения собственных функций (собственных векторов в x-представлении) необходимо найти начальную собственную функцию $\psi_0(x)\equiv\left\langle x\middle|0\right\rangle$ из соответствующего уравнения $\left(x+\frac{d}{dx}\right)\psi_0(x)=0$, а затем записать $\left|n\right\rangle$ в x-представлении.)

6. ФУНКЦИОНАЛЫ

До сих пор основное внимание мы акцентировали на свойства отображений из одного подмножества кет-векторов (или соответствующих функций) гильбертова пространства на другое такое же подпространство, т.е. операторы. В данной главе мы познакомимся с новыми отображениями.

§ 1. Числовой функционал

По определению, любое правило, которое каждому кет-вектору $|a\rangle$ или его представителю — функции $\psi_a(x)$, сопоставляет определённое комплексное число, называется *числовым функционалом*, или просто *функционалом*. Функционалы будем обозначать Ф[ ], а различать индексами: Φ_s[ ]. Таким образом, функционал — это правило (отображение) с областью определения, линейное пространство кет-векторов, и областью значений — линейное пространство чисел:

$$\begin{matrix} |a\rangle \\ (\psi_a(x)) \end{matrix} \xrightarrow[\Phi_s[\psi_a(x)]]{\Phi_s[|a\rangle]} (\textit{число}) \tag{6.1}$$

Примером функционала является норма кет-вектора (функции) (1.11): каждому кет-вектору $|a\rangle$ (или соответствующей функции ψ_a) сопоставляется число $\|a\|$ — его (её) норма.

Функционал $\Phi_s\left[|a\rangle\right]$ называется *линейным*, если для любой линейной комбинации кет-векторов $\sum\limits_p C_p|p\rangle$ имеет место равенство

$$\Phi_s\left[\sum_p C_p|p\rangle\right] = \sum_p C_p\Phi_s\left[|p\rangle\right]. \tag{6.2}$$

Заметим, что норма не является линейным функционалом.

Теорема Рисса. Любой линейный функционал может быть представлен в виде скалярного произведения

$$\Phi_s\left[|a\rangle\right] = \langle s|a\rangle, \tag{6.3}$$

где кет-вектор $|s\rangle$ или его представитель — функция $\psi_s(x)$, полностью определяет данный функционал Φ_s[ ].

Доказательство. Разложим кет-вектор $|a\rangle$ в аргументе линейного функционала по некоторому базису $|p\rangle$ и воспользуемся линейностью функционала (6.2):

$$\Phi_s\left[|a\rangle\right] = \Phi_s\left[\int dp|p\rangle\langle p|a\rangle\right] = \int dp\langle p|a\rangle\Phi_s\left[|p\rangle\right] = \left(\int dp\Phi_s\left[|p\rangle\right]\langle p|\right)|a\rangle. \tag{6.4}$$

Введём бра-вектор

$$\langle s| = \int dp\Phi_s\left[|p\rangle\right]\langle p|, \tag{6.5}$$

или сопряжённый ему кет-вектор

$$|s\rangle = \int dp\Phi_s^*\left[|p\rangle\right]|p\rangle, \tag{6.6}$$

или, наконец, x-представитель этого кет-вектора

$$\psi_s(x) \equiv \langle x|s\rangle = \int dp\psi_p(x)\Phi_s^*\left[\psi_p\right], \tag{6.7}$$

которые полностью определяют вид функционала Φ_s[ ], так как они определяются по значениям данного функционала на всех базисных кет-векторах $|p\rangle$ (или ψ_p). Тогда из (6.4) и (6.5) непосредственно следует (6.3).

Скалярное произведение (6.3) можно расписать в явном виде: в x-представлении

$$\Phi_s\left[|a\rangle\right] = \langle s|a\rangle = \int \psi_s^*(x)\,\psi_a(x)\,dx, \tag{6.8}$$

где определяющая функция $\psi_s(x)$ определена в (6.7); в определяющем p-представлении

$$\Phi_s\left[|a\rangle\right]=\langle s|a\rangle=\int\Phi_s\left[\psi_p\right]\psi_a(p)dp\,. \tag{6.9}$$

Важным примером функционала, которым мы уже неоднократно пользовались, является функционал, который каждой функции $\psi_a(x)$ сопоставляет число, равное значению этой функции в данной фиксированной «точке» x_0:

$$\psi_a(x)\xrightarrow{\Phi_{x_0}[\psi_a]}\psi_a(x_0)\,. \tag{6.10}$$

Очевидно, что такой функционал линейный, поэтому по теореме Рисса

$$\Phi_{x_0}\left[\psi_a\right]=\langle x_0|a\rangle=\int dx\,\psi_{x_0}\left(x\right)^*\psi_a(x)\,, \tag{6.11}$$

где определяющая функционал функция $\psi_{x_0}(x)$ определяются согласно (6.7) и (6.10) через базисные функции в оснащенном гильбертовом пространстве

$$\psi_{x_0}(x)=\int dp\,\psi_p{}^*(x)\,\psi_p(x)\,. \tag{6.12}$$

С другой стороны, согласно определению функционала (6.10) $(\Phi_{x_0}\left[\psi_a\right]\equiv\psi_a(x_0))$ и (6.11),

$$\psi_a(x_0)=\int dx\,\psi_{x_0}(x)^*\,\psi_a(x)\,, \tag{6.13}$$

а свойством «снятия интегрирования» обладает δ-функция, которую мы постоянно используем и свойства которой приведены в Приложении 5. Таким образом,

$$\psi_{x_0}{}^*(x)=\langle x_0|x\rangle=\delta(x-x_0)\,. \tag{6.14}$$

Конечно, более последовательно (и именно так делается в математике) необходимо рассматривать δ-функцию как функционал (или *обобщённую функцию*) определяемый согласно (6.10) и (6.12), а не как обычную функцию, и исходя из строгого определения доказывать соответствующие свойства. Для физики зачастую хватает формального определения (Приложение 5), но использовать δ-функцию необходимо с достаточной осторожностью.

§ 2. Операторно-числовой функционал

Расширим понятие функционала. Как мы видели, множество линейных операторов образует линейное пространство (на этом множестве определены оперции сложения (2.13) и умножения на число (2.26)). Мы также можем ввести отображение из линейного пространства линейных операторов на пространство комплексных чисел. Всякое правило, которое каждому линейному оператору $\hat{L}$ относит определённое число $\Phi(\hat{L})$, будем называть операторно-числовым функционалом.

$$(\textit{Операторы}(\hat{L}))\xrightarrow[\substack{\textit{операторно-числовой}\\ \textit{функционал}}]{\Phi(\hat{L})}(\textit{число}) \tag{6.15}$$

Функционал называется *линейным*, если

$$\Phi(\sum_k C_k\hat{L}_k)=\sum_k C_k\Phi(\hat{L}_k)\,, \tag{6.16}$$

где C_k — числа, $\hat{L}_k$ — операторы.

Важнейшим операторно-числовым функционалом является *шпур* (*след*) оператора, который будем обозначать $Sp\hat{L}$. По определению, шпуром оператора называется сумма всех диагональных матричных элементов оператора относительно некоторого базиса $|x\rangle$, т. е.

$$Sp\hat{L}=\int dx\langle x|\hat{L}|x\rangle\,. \tag{6.17}$$

Интегрирование здесь понимается как и раньше в обобщённом смысле, т. е. как интегрирование по непрерывным переменным и суммирование по дискретным переменным, входящим в x.

Покажем, что шпур оператора обладает следующими тремя характерными свойствами: 1) инвариантности; 2) линейности; 3) цикличности.

Инвариантность шпура означает, что он не зависит от выбора базиса, в котором вычисляется, т.е.

$$Sp\hat{L}=\int dx\langle x|\hat{L}|x\rangle=\int dp\langle p|\hat{L}|p\rangle\,, \tag{6.18}$$

где $|x\rangle$ — кет-векторы одного базиса, $|p\rangle$ — кет-векторы другого базиса. Таким образом, $Sp\hat{L}$ является операторно-числовым функционалом. Для доказательства подставим вместо второй разделительной черты в скалярное произведение $\langle x|\hat{L}|x\rangle$ разложение единицы (3.54) $\int dp|p\rangle\langle p|=\hat{1}$:

$$\int dx\langle x|\hat{L}|x\rangle = \int dx\int dp\langle x|\hat{L}|p\rangle\langle p|x\rangle = \int dp\int dx\langle p|x\rangle\langle x|\hat{L}|p\rangle . \tag{6.19}$$

Используя то же самое условие полноты (3.54), но теперь для системы базисных кет-векторов $|x\rangle$, получим искомое соотношение (6.18).

Линейность шпура означает, что

$$Sp(\sum_k C_k\hat{L}_k) = \sum_k C_k Sp\hat{L}_k , \tag{6.20}$$

т. е. $Sp\hat{L}$ — линейный операторно-числовой функционал. Линейность шпура непосредственно вытекает из линейности скалярного произведения (1.9).

Цикличность шпура означает, что шпур не меняется при циклической перестановке операторов, т. е.

$$\begin{gathered} Sp(\hat{L}\hat{M}) = Sp(\hat{M}\hat{L}) \\ Sp(\hat{L}\hat{M}\hat{N}) = Sp(\hat{N}\hat{L}\hat{M}) = Sp(\hat{M}\hat{N}\hat{L}) \end{gathered} \tag{6.21}$$

и т. д. Действительно,

$$\begin{aligned} Sp(\hat{L}\hat{M}) &= \int dx\langle x|\hat{L}\hat{M}|x\rangle = \int dx\int dx'\langle x|\hat{L}|x'\rangle\langle x'|\hat{M}|x\rangle = \int dx'\int dx\langle x'|\hat{M}|x\rangle\langle x|\hat{L}|x'\rangle = \\ &= \int dx'\langle x'|\hat{M}\hat{L}|x'\rangle\, Sp(\hat{M}\hat{L}) \end{aligned} \tag{6.22}$$

Аналогичным образом доказывается полезное соотношение

$$Sp(\hat{L}\hat{P}_{ab}) = \langle b|\hat{L}|a\rangle , \tag{6.23}$$

где $\hat{P}_{ab}=|a\rangle\langle b|$ — квазипроектор (3.56). Действительно,

$$Sp(\hat{L}\hat{P}_{ab}) = \int dx\langle x|\hat{L}|a\rangle\langle b|x\rangle = \int dx\langle b|x\rangle\langle x|\hat{L}|a\rangle = \langle b|\hat{L}|a\rangle . \tag{6.24}$$

Из (6.23) можно получить ряд более частных соотношений. Так, полагая $a = b$, имеем

$$Sp(\hat{L}\hat{P}_a) = \langle a|\hat{L}|a\rangle , \tag{6.25}$$

где $\hat{P}_a=|a\rangle\langle a|$ — проектор (3.35).

Из (6.25), в свою очередь, при $\hat{L}=\hat{1}$, получим

$$Sp\hat{P}_a = \langle a|a\rangle = 1 , \tag{6.26}$$

если кет-вектор $|a\rangle$ нормирован на единицу.

В заключение докажем аналог Теоремы Рисса для линейных операторно-числовых функционалов.

Теорема. Всякий линейный операторно-числовой функционал может быть представлен в виде шпура

$$\Phi(\hat{L}) = Sp(\hat{L}\hat{\rho}) , \tag{6.27}$$

где $\hat{\rho}$ — некоторый оператор, определяющий вид этого функционала.

Доказательство. Представим линейный оператор $\hat{L}$ в виде квазиспектрального разложения (3.59), а матричный элемент в этом разложении заменим согласно (6.23):

$$\hat{L} = \sum_{k,k'}\langle k|\hat{L}|k'\rangle\hat{P}_{kk'} = \sum_{k,k'}\hat{P}_{kk'}Sp(\hat{L}\hat{P}_{k'k}) \tag{6.28}$$

(для простоты рассматриваем дискретный базис $|k\rangle$).

Подставляя это разложение в функционал $\Phi(\hat{L})$ и используя свойство линейности функционала (6.16) и линейности шпура (6.20), получим

$$\Phi(\hat{L}) = \sum_{k,k'} \Phi(\hat{P}_{kk'}) Sp(\hat{L}\hat{P}_{k'k}) = Sp(\hat{L}\hat{\rho}), \tag{6.29}$$

где

$$\hat{\rho} = \sum_{k,k'} \Phi(\hat{P}_{kk'}) \hat{P}_{k'k}, \tag{6.30}$$

оператор, определяющий вид линейного операторно-числового функционала, так как он полностью определяется по значению функционала Φ на всех базисных кет-векторах $|k\rangle$.

ПРИЛОЖЕНИЯ

Приложение 1. *Полиномы Чебышева-Эрмита.*

Определение: $H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \left(\dfrac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} \right)$ $(n = 0, 1, 2, ..., \infty)$.

$H_n(x)$ есть полином степени n и чётности $(-1)^n$, обладающий n нулями между $-\infty$ и $+\infty$.

Дифференциальное уравнение:

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - 2x\frac{d}{dx} + 2n \right) H_n(x) = 0 .$$

Производящая функция:

$$e^{-s^2+2sx} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} H_n(x) .$$

Соотношения ортонормированности:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_n(x)\, H_m(x)\, dx = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{nm} .$$

Рекуррентные соотношения:

$$\frac{d}{dx} H_n = 2nH_{n-1}$$

$$\left(2x - \frac{d}{dx} \right) H_n = H_{n-1}$$

$$2xH_n = H_{n+1} + 2nH_{n-1}$$

Явные выражения первых полиномов:

$$H_0 = 1$$

$$H_1 = 2x$$

$$H_2 = 4x^2 - 1$$

$$H_3 = 8x^3 - 12x$$

$$H_4 = 16x^4 - 48x^2 + 12$$

$$H_5 = 35x^5 - 160x^3 + 120x$$

Приложение 2. *Полиномы Лагерра.*

Определение:

$$L_n(r) \equiv L_n^0(r) = e^r \frac{d^n}{dr^n}\left(r^n e^{-r}\right);\; L_n^k = (-1)^k \frac{d^k}{dr^k} L_{n+k}(r) \quad (n,k = 0,1,2,...,\infty).$$

(Иногда L_n^k называют присоединёнными полиномами Лагерра). L_n^k есть полином степени *n*, обладающий *n* нулями между 0 и + ∞:

$$L_n^k(r) = \sum_{s=0}^{n} (-1)^s \frac{\left[(n+k)!\right]^2}{(n-s)!(k+s)!s!} r^s .$$

Дифференциальное уравнение:

$$\left(r\frac{d^2}{dr^2} + (k+1-r)\frac{d}{dr} + n \right) L_n^k = 0 .$$

Производящая функция:

$$\frac{e^{-\frac{rt}{1-t}}}{(1-t)^{k+1}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{(n+k)!} L_n^k(r),\; (|t| < 1).$$

Соотношения ортонормированности:

$$\int_0^\infty e^{-r} r^k L_n^k(r) L_m^k(r) dr = \frac{\left[(n+k)!\right]^3}{n!} \delta_{nm} .$$

Явные выражения первых полиномов:

$L_0 = 1$
$L_1 = 1 - r$
$L_2 = 2 - 4r + r^2$
$L_3 = 6 - 18r + 9r^2 - r^3$
$L_4 = 24 - 96r + 72r^2 - 16r^3 + r^4$
$L_5 = ...$

$L_0^1 = 1$
$L_1^1 = 2(2 - r)$
$L_2^1 = 3(6 - 6r + r^2)$
$L_3^1 = 4(24 - 38r + 12r^2 - r^3)$
$L_4^1 = ...$

$L_0^2 = 2$
$L_1^2 = 6(3 - r)$
$L_2^2 = 12(12 - 8r + r^2)$
$L_3^2 = ...$

$L_0^3 = 6$
$L_1^3 = 24(4 \cdot r)$
$L_2^3 = ...$

$L_0^4 = 24$
$L_1^4 = ...$

Приложение 3. *Полиномы и функции Лежандра.*

Определения:

Полином Лежандра $P_l(u)=\frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{du^l}(u^2-1)^l$ $(l=0,1,2,...,\infty)$ есть полином степени l, чётности $(-1)^l$, обладающий l нулями в интервале (–1, +1).

Функция Лежандра (присоединённый полином Лежандра)

$$P_l^m(u)=(1-u^2)^{\frac{m}{2}}\frac{d^m}{du^m}P_l(u)=\frac{1}{2^l l!}(1-u^2)^{\frac{m}{2}}\frac{d^{l+m}}{du^{l+m}}(u^2-1)^l \quad (-1\le u\le 1; l=0,1,2,...,\infty; m=0,1,2,...,l)$$

есть произведение $(1-u^2)^{\frac{m}{2}}$ на полином степени $l-m$ нулями в интервале (–1, +1).

Дифференциальное уравнение:

$$\left[(1-u^2)\frac{d^2}{du^2}-2u\frac{d}{du}+l(l+1)-\frac{m^2}{1-u^2}\right]P_l^m=0\,.$$

Производящие функции:

$$\frac{1}{\sqrt{1-2tu+t^2}}=\sum_{l=0}^{\infty}t^l P_l(u) \quad (|t|<1)$$

$$(2m-1)!!(1-u^2)^{\frac{m}{2}}\frac{t^m}{(1-2tu+t^2)^{m+\frac{1}{2}}}=\sum_{l=m}^{\infty}t^l P_l^m(u)\,.$$

Соотношение ортонормированности:

$$\int_{-1}^{1}P_k^m(u)P_l^m(u)du=\frac{2}{2l+1}\cdot\frac{(l+m)!}{(l-m)!}\delta_{kl}\,.$$

Рекуррентные соотношения:

$$(2l+1)u\,P_l^m(u)=(l+1-m)P_{l+1}^m(u)+(l+m)P_{l-1}^m(u)$$

$$\left(1-u^2\right)\frac{d}{du}P_l^m(u)=-l\,u\,P_l^m(u)+(l+m)P_{l-1}^m(u)=(l+1)u\,P_l^m(u)-(l+1-m)P_{l+1}^m(u)$$

Явные выражения первых полиномов:

$P_l(1)=1$, $P_l(-1)=(-1)^l$.

$P_l^m(1)=P_l^m(-1)=0$ $(m\ne 0)$,

$$P_l^m(0)=\begin{cases}(-1)^p\dfrac{(2p+2m)!}{2^l p!(p+m)!}, & l-m=2p\\ 0, & l-m=2p+1\end{cases}$$

$$P_0=1$$

$$P_1=u$$

$$P_2=\frac{1}{2}(3u^2-1)$$

$$P_3=\frac{1}{2}(5u^3-3u)$$

$$P_4=\frac{1}{8}(35u^4-30u^2+3)$$

…

Приложение 4. ***Сферические функции.***

Определение сферических функций $Y_l^m(\theta,\varphi)$:

Сферические функции $Y_l^m(\theta,\varphi)$ являются общими собственными функциями операторов

$\hat{L}_3 = -i\dfrac{\partial}{\partial\varphi}$ и $\hat{L}^2 = -\Delta_{\theta,\varphi}$,

$\Delta_{\theta,\varphi} = \dfrac{1}{\sin\theta}\cdot\dfrac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\dfrac{\partial}{\partial\theta} + \dfrac{1}{\sin^2\theta}\dfrac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$ — угловая часть оператора Лапласа Δ:

$$\hat{L}^2 Y_l^m = l(l+1)Y_l^m$$

$$\hat{L}_3 Y_l^m = mY_l^m$$

$$(l = 0,1,2,...,\infty;\ m = 0,\pm1,...,\pm l)$$

Соотношения ортонормированности и замкнутости:

$$\int Y_l^{m*}Y_{l'}^{m'}d\Omega \equiv \int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\pi}\sin\theta\,d\theta\,Y_l^{m*}(\theta,\varphi)\,Y_{l'}^{m'}(\theta,\varphi) = \delta_{mm'}\delta_{ll'}$$

$$\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}Y_l^{m*}(\theta,\varphi)\,Y_l^m(\theta',\varphi') = \frac{\delta(\theta-\theta')\delta(\varphi-\varphi')}{\sin\theta} = \delta(\Omega-\Omega')$$

Рекуррентные соотношения:

$$\cos\theta\,Y_l^m = \sqrt{\frac{(l+1+m)(l+1-m)}{(2l+1)(2l+3)}}\,Y_{l+1}^m + \sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}}\,Y_{l-1}^m$$

Чётность при пространственном отражении $(\theta,\varphi)\to(\pi-\theta,\varphi+\pi)$

$$Y_l^m(\pi-\theta,\varphi+\pi) = (-1)^l\,Y_l^m(\theta,\varphi)$$

Комплексное сопряжение:

$$Y_l^{m*}(\theta,\varphi) = (-1)^m\,Y_l^{-m}(\theta,\varphi)$$

Связь с функциями Лежандра (*m* ≥ *0*):

$$Y_l^m(\theta,\varphi) = (-1)^m\sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}}P_l^m(\cos\theta)\,e^{im\varphi}$$

В частности,

$$Y_l^0 = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\,P_l(\cos\theta)$$

$$Y_l^l = (-1)^l\sqrt{\frac{(2l+1)(2l)!}{4\pi 2^{2l}(l!)^2}}\sin^l\theta\,e^{il\varphi}$$

Шаровые функции (гармонические полиномы):

По определению полином $h(x,y,z)$ есть гармонический полином, если он однороден по x, y, z и удовлетворяет уравнению $\Delta h = 0$.

Полиномы степени l

$$u_l^m(\vec{r}) \equiv r^l Y_l^m(\theta,\varphi)\quad (m = 0,\pm1,...,\pm l)$$

образуют последовательность $2l+1$ линейно независимых гармонических полиномов степени l.

Явные выражения первых сферических функций:

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$$

$$Y_1^{\pm1} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\left(8\cos^2\theta - 1\right)$$

$$Y_2^{\pm1} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta\, e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_2^{\pm2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta\, e^{\pm i2\varphi}$$

$$Y_3^0 = \sqrt{\frac{7}{16\pi}}\left(5\cos^3 - 3\cos\theta\right)$$

$$Y_3^{\pm1} = -\sqrt{\frac{21}{64\pi}}\sin\theta\left(5\cos^2\theta - 1\right)e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_3^{\pm2} = -\sqrt{\frac{105}{32\pi}}\sin^2\theta\cos\theta\, e^{\pm i2\varphi}$$

…

Приложение 5. *δ-функция.*

а) *Определение.*

В физике принято использовать обозначение $\delta(x-x_0)$ вместо более корректного обозначения $\delta_{x_0}[\varphi]$. При этом не упоминают понятие обобщённой функции, т. е., соблюдая некоторые предосторожности, манипулируют с символом $\delta(x-x_0)$ как с обычной функцией. Это значительно упрощает все формулы.

По определению, если *f(x)* произвольная непрерывная функция, то

$$\int_a^b f(x)\,\delta(x-x_0)dx = \begin{cases} f(x_0), x_0 \in (a,b) \\ 0, \qquad x_0 \notin [a,b] \end{cases}$$

Таким образом, формально

$$\delta(x-x_0) = \begin{cases} 0, x \neq x_0 \\ \infty, x = x_0 \end{cases} \text{ и } \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-x_0)dx = 1$$

Символ $\delta(x-x_0)$ является обобщением символа Кронекера

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 0, m \neq n \\ 1, m = n \end{cases}$$

$\delta(x-x_0)$ можно рассматривать как предельную форму функции, принимающей отличные от нуля значения только в некоторой малой области около точки x_0, где она обнаруживает резкий положительный максимум, причём интеграл от функции по всему пространству остаётся всё время равным 1.

Например:

$$\delta(x-x_0) = \frac{1}{\pi}\lim_{L\to\infty}\frac{\sin L(x-x_0)}{x-x_0} =$$

$$= \frac{1}{\pi}\lim_{\kappa\to\infty}\frac{1-\cos\kappa(x-x_0)}{\kappa(x-x_0)^2} =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\pi}}\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{1}{\varepsilon}e^{-\frac{(x-x_0)^2}{\varepsilon^2}} =$$

$$= \frac{1}{\pi}\lim_{\varepsilon\to +0}\frac{\varepsilon}{(x-x_0)^2+\varepsilon^2} =$$

$$= \lim_{\eta\to 0}\frac{\theta(x-x_0+\eta)-\theta(x-x_0)}{\eta}$$

В последнем выражении $\theta(x)$ есть ступенчатая функция Хевисайда:

$$\theta(x) = \begin{cases} 1, x > 0 \\ 0, x < 0 \end{cases}$$

(Обобщённая функция δ есть производная обобщённой функции Хевисайда).

б) *Основные свойства δ-функции.*

$$\delta(x) = \delta(-x)$$

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x)$$

$$\delta(\varphi(x)) = \sum_{i=1}^{n}\frac{\delta(x-x_i)}{|\varphi'(x_i)|} \quad \left(\varphi(x_i) = 0, \varphi'(x_i) \neq 0\right),$$

где n — число нулей функции $\varphi(x)$.

$$x\delta(x) \equiv 0$$

$$f(x)\delta(x-a) = f(a)\delta(x-a)$$

$$\int \delta(x-y)\delta(y-a)dy = \delta(x-a)$$

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx}dk$$

$$\delta(\vec{r}-\vec{r}_0) \equiv \delta(x-x_0)\delta(y-y_0)\delta(z-z_0)$$

$$\Delta\left(\frac{1}{r}\right) = -4\pi\delta(\vec{r})$$

$$(\Delta+k^2)\frac{e^{ikr}}{r} = -4\pi\delta(\vec{r})$$

$$(\Delta+k^2)\frac{\cos kr}{r} = -4\pi\delta(\vec{r})$$

в) *Производные δ-функции.*

δ-функция имеет производные всех порядков. При этом m-я производная определяется равенством

$$\int_a^b \delta^{(m)}(x-x_0)f(x)dx = \begin{cases} (-1)^m f^{(m)}(x_0), & x_0 \in (a,b) \\ 0, & x_0 \notin [a,b] \end{cases}$$

г) *Свойства производных δ-функции.*

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta'(x)f(x)dx = -f'(0)$$

$$\delta'(x) = -\delta'(-x)$$

$$\int \delta'(x-y)\delta(y-a)dy = \delta'(x-a)$$

$$x\delta'(x) = -\delta(x)$$

$$x^2\delta'(x) = 0$$

$$\delta'(x) = \frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} ke^{ikx}dk$$

$$\delta^{(m)}(x) = (-1)^m\delta^{(m)}(-x)$$

$$\int \delta^{(m)}(x-y)\delta^{(n)}(y-a)dy = \delta^{(m+n)}(x-a)$$

$$x^{m+1}\delta^{(m)}(x) = 0$$

ЛИТЕРАТУРА

1. Кучин В.А. Основные принципы нерелятивистской квантовой теории. – Изд. ТГУ, Томск, 1982.

2. Золотарев М.Л. Математический аппарат квантовой механики, ч.1, 2. Методические указания для самостоятельной работы студентов. – Ротапринт КемГУ, Кемерово, 1988-90.

3. Мессиа А. Квантовая механика, т.1, 2. –М: Наука, 1978.

4. Дирак П.А. Принципы квантовой механики. – М: Физматгиз, 1960.

5. Фон Нейман. Математические основы квантовой механики. – М: Наука, 1964.

6. Ахиезер Н.И., Глазман И.М. Теория линейных операторов в гильбертовом пространстве. – М: Наука, 1966.

7. Елютин П.В., Кривченков В.Д. Квантовая механика. – М: Наука, 1976.

8.Галицкий В.М., Карнаков Б.М., Коган Б.И. Задачи по квантовой механике. – М: Наука, 1981.