ГЛАВА III

# МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

## § 15. Линейные операторы

Выше мы видели, что при решении уравнения Шредингера можно найти волновые функции и энергию системы. Последняя в некоторых случаях (частица в потенциальной яме) имеет дискретный, в других (свободная частица; частица, проходящая через барьер) непрерывный ряд значений.

Зная волновую функцию $\psi$, мы могли найти вероятность нахождения частицы в данной точке пространства, а также средние значения величин, зависящих от координат. При этом, как это было показано в § 4, координаты и соответствующие проекции импульса частицы одновременно не имеют определенных значений. Однако использованный нами расчетный аппарат был недостаточен для ответа на ряд важных вопросов. В виде примера приведем некоторые из них. Какие именно величины не могут иметь одновременно определенные значения? Как найти среднее значение величин, которые не являются функциями координат? Какие характеристики квантовомеханической системы должны быть заданы для того, чтобы ее состояние было полностью определено?

Своеобразие задач квантовой механики потребовало развития и применения специального математического аппарата.

Математический аппарат квантовой механики должен соответствовать физической постановке задач квантовой механики. Оказалось, что в математике был уже разработан соответствующий математический аппарат — теория линейных операторов. Мы рассмотрим сперва основы этой теории, а в дальнейшем покажем, как аппарат теории линейных операторов может быть связан с задачами квантовой механики.

Под оператором будем понимать рецепт или правило, по которому одной функции $\varphi(x_1, x_2, x_3, \ldots)$ переменных $x_1, x_2, x_3, \ldots$ сопоставляется другая функция $\chi(x_1, x_2, x_3, \ldots)$ тех же переменных.

В дальнейшем операторы мы будем обозначать при помощи букв со шляпкой, например $\hat{F}$. С помощью символа $\hat{F}$ правило перехода от функции $\varphi$ и функции $\chi$ можно записать в виде

$$\chi = \hat{F}\varphi. \tag{15,1}$$

Рассмотрим несколько простейших операторов.

Оператор $\hat{F}$ может, например, означать дифференцирование по какой-либо переменной

$$\chi(x_1, x_2, \ldots) = \frac{\partial}{\partial x_i}\varphi(x_1, x_2, \ldots).$$

Символически этот оператор записывается как

$$\hat{F} = \frac{\partial}{\partial x_i}.$$

Операторы дифференцирования будут встречаться особенно часто. Поэтому мы введем для них специальное наименование дифференциальных операторов. Оператор $\hat{F}$ может также означать умножение на какую-либо величину, возведение в степень и т. д.

Оператор независимой переменной $\hat{x}$ определим как умножение на эту переменную

$$\chi = x\varphi.$$

В операторном виде может быть представлено также и интегральное соотношение между функциями $\varphi$ и $\chi$:

$$\chi(x) = \int K(x, \xi)\,\varphi(\xi)\,d\xi = \hat{F}\varphi. \tag{15,2}$$

Функция $K(x, \xi)$ носит название ядра интегрального оператора $\hat{F}$.

Подчеркнем, что мы и раньше пользовались дифференциальными операторами — оператором $\nabla = \boldsymbol{i}\frac{\partial}{\partial x} + \boldsymbol{j}\frac{\partial}{\partial y} + \boldsymbol{k}\frac{\partial}{\partial z}$, оператором Лапласа $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ и другими.

Определим теперь линейный оператор $\hat{F}$ как такой оператор, для которого выполнены равенства

$$\hat{F}(\varphi_1 + \varphi_2) = \hat{F}\varphi_1 + \hat{F}\varphi_2, \tag{15,3}$$

$$\hat{F}C\varphi = C\hat{F}\varphi, \tag{15,4}$$

где $C$ — произвольная постоянная. Отсюда следует, что

$$\hat{F}(C_1\varphi_1 + C_2\varphi_2) = C_1\hat{F}\varphi_1 + C_2\hat{F}\varphi_2, \tag{15,5}$$

где $C_1$, $C_2$ — произвольные постоянные. Очевидно, что перечисленные выше операторы являлись линейными операторами.

В квантовой механике по причинам, ясным из дальнейшего, мы будем иметь дело исключительно с линейными операторами. Все дальнейшее будет относиться только к линейным операторам.

Комбинируя два заданных оператора $\hat{F}$ и $\hat{R}$, можно определить их сумму и произведение. Под суммой операторов $\hat{F}$ и $\hat{R}$ мы будем понимать оператор $\hat{G}$, определенный соотношением

$$\left.\begin{aligned} \hat{G} &= \hat{F} + \hat{R}, \\ \hat{G}\varphi &= \hat{F}\varphi + \hat{R}\varphi. \end{aligned}\right\} \tag{15,6}$$

Под произведением двух операторов $\hat{F}$ и $\hat{R}$ будем понимать оператор $\hat{L} = \hat{F}\hat{R}$, заключающийся в последовательном применении операторов $\hat{R}$ и $\hat{F}$

$$\hat{L}\varphi = \hat{F}(\hat{R}\varphi). \tag{15,7}$$

Если же сначала применяется оператор $\hat{F}$, а затем оператор $\hat{R}$, то их произведением будет оператор $\hat{L}' = \hat{R}\hat{F}$

$$\hat{L}'\varphi = \hat{R}(\hat{F}\varphi). \tag{15,8}$$

Заметим, что операторы $\hat{L}$ и $\hat{L}'$, вообще говоря, не совпадают между собой, т. е. произведение операторов существенно зависит от порядка сомножителей. В соответствии с этим алгебра операторов — это алгебра некоммутирующих величин. Два оператора называются коммутирующими между собой, сели произведение операторов не зависит от порядка сомножителей, и некоммутирующими в обратном случае. В качестве примера найдем произведение оператора дифференцирования по $x$ на оператор умножения на $x$ при обоих порядках сомножителей, т. е. положим

$$\hat{F} = x,$$

$$\hat{R} = \frac{d}{dx}.$$

Оператор произведения $\hat{L}$ будет равен в соответствии с (15,7)

$$\hat{L} = x\frac{\partial}{\partial x}.$$

Найдем теперь оператор $\hat{L}' = \hat{R}\hat{F}$:

$$\hat{L}'\psi = \frac{\partial}{\partial x}(x\psi) = \left(1 + x\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi.$$

Мы видим, следовательно, что в этом случае оператор $L'$ равен

$$\hat{L}' = 1 + x\frac{\partial}{\partial x}$$

и не совпадает с оператором $\hat{L}$. Таким образом, операторы $\hat{L}$ и $\hat{L}'$ не коммутируют. Используя полученные выражения для операторов $\hat{L}$ и $\hat{L}'$, мы можем написать

$$\frac{\partial}{\partial x}x - x\frac{\partial}{\partial x} = 1.$$

Стоящую в этом операторном соотношении единицу естественно назвать единичным оператором. Если бы в качестве оператора $\hat{F}$ мы взяли оператор умножения на какую-либо другую независимую переменную, скажем на $y$, то оказалось бы, что операторы $\frac{\partial}{\partial x}$ и $y$ коммутируют

$$y\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}y = 0. \tag{15,9}$$

Для некоторых операторов оказывается выполненным соотношение

$$\hat{F}\hat{R} = -\hat{R}\hat{F}. \tag{15,10}$$

В этом случае операторы $\hat{F}$ и $\hat{R}$ называются антикоммутирующими. Оператор, равный $\hat{F}\hat{R}—\hat{R}\hat{F}$, мы будем называть коммутатором операторов $\hat{F}$ и $\hat{R}$ и обозначать при помощи волнистых скобок, т. е.

$$\hat{F}\hat{R} - \hat{R}\hat{F} = \{\hat{F}, \hat{R}\} \tag{15,11}$$

Данному оператору $\hat{F}$ можно сопоставить обратный оператор $\hat{F}^{-1}$. Обратный оператор определяется соотношениями

$$\hat{F}^{-1}\hat{F}\psi = \psi, \quad \hat{F}\hat{F}^{-1}\psi = \psi$$

или

$$\hat{F}\hat{F}^{-1} = \hat{F}^{-1}\hat{F} = 1. \tag{15,12}$$

Если $\hat{F}$ — некоторый дифференциальный оператор, то оператор $\hat{F}^{-1}$, обратный к данному, имеет вид интегрального оператора. Действительно, предположим, что имеет место соотношение

$$\hat{F}\psi(x) = \varphi(x). \tag{15,13}$$

Тогда, действуя на правую и левую части этого равенства оператором $\hat{F}^{-1}$, получим

$$\psi(x) = \hat{F}^{-1}\varphi(x). \tag{15,14}$$

С другой стороны, соотношение (15,14) можно написать в виде

$$\psi(x) = \int G(x, x')\,\varphi(x')\,dx', \tag{15,15}$$

где функция $G(x, x')$, называемая функцией Грина уравнения (15,13), удовлетворяет соотношению

$$\hat{F} G(x, x') = \delta(x - x'). \tag{15,16}$$

Действительно, если мы подействуем на правую и левую части равенства (15,15) оператором $\hat{F}$, то при условии (15,16) мы опять придем к соотношению (15,13). Сравнивая (15,14) и (15,15), мы видим, что функция Грина $G(x, x')$ является ядром интегрального оператора $\hat{F}^{-1}$. Из уравнения (15,16) функция Грина $G(x, x')$ определяется неоднозначно. Для однозначного определения нужно задать еще некоторые условия типа граничных условий.

Соотношение (15,13) можно рассматривать как некоторое уравнение относительно функции $\psi(x)$ с заданной функцией $\varphi(x)$, решение которого дается формулой (15,15). Следует только иметь в виду, что для получения общего решения мы должны добавить к (15,15) общее решение $\psi_0(x)$ однородного уравнения

$$\hat{F}\psi_0(x) = 0.$$

Тогда имеем

$$\psi(x) = \psi_0(x) + \int G(x, x')\,\varphi(x')\,dx'. \tag{15,17}$$

Найденное соотношение понадобится нам в дальнейшем.

## § 16. Собственные значения и собственные функции операторов

Рассмотрим операторное соотношение

$$\hat{F}\psi = F\psi. \tag{16,1}$$

Соотношение (16,1) означает, что при применении оператора $\hat{F}$ к функции $\psi$ снова получается функция $\psi$, умноженная на некоторую постоянную $F$. Совершенно очевидно, что при данном виде оператора $\hat{F}$ соотношению (16,1) может удовлетворять отнюдь не всякая функция $\psi$. Иными словами, соотношение (16,1) является уравнением. Вид функции $\psi$ может быть получен путем решения уравнения (16,1). Если оператор $\hat{F}$ является линейным дифференциальным оператором, то уравнение (16,1) будет дифференциальным уравнением. Поскольку из вида уравнения