МИНИСТЕРСТВО ПРОСВЕЩЕНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ПСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ПЕДАГОГИЧЕСКИЙ
ИНСТИТУТ им. С.М. КИРОВА

ЛИНЕЙНЫЕ ОПЕРАТОРЫ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

(Учебно-методическое пособие)

ПСКОВ
2002

ББК 22.314я73
К 435

Печатается по решению кафедры алгебры и геометрии,
и редакционно-издательского совета ПГПИ им. С.М. Кирова

Рецензент: доктор физ. мат. наук, профессор Розман Г.А.

Автор-составитель: Кирсанов А.А.
Линейные операторы в квантовой механике. Псков: ПГПИ, 2002-48с.

Учебно-методичесое пособие предназначено студентам
физико-математического факультета, изучающим
нерелятивистскую квантовую механику.

К 435

§1. Линейные самосопряжённые операторы

Основой математического аппарата квантовой механики является теория линейных самосопряженных операторов. Каждой динамической переменной, т.е. физической величине, зависящей от состояния частицы или системы частиц, в квантовой механике сопоставляется некоторый линейный самосопряженный оператор. Говорят, что физические величины изображаются операторами. Изображение физических величин операторами – основной постулат квантовой механики. Чтобы понять смысл этого постулата рекомендуется прочитать вначале первую часть следующего параграфа (до формулы 11), а затем изучить математический аппарат, изложенный ниже в данном параграфе, после чего продолжить изучение квантовой механики на основе знаний теории линейных операторов.

Оператором в математике как известно называется правило, по которому любой функции $u(x)$ из некоторого множества функций M сопоставляется другая функция $f(x)$ из того же множества. Число независимых переменных может любым. Мы будем обозначать операторы латинскими буквами со значком ^ над буквой.

В квантовой механике для изображения физических величин используются линейные операторы. Оператор $\hat{L}$ называется линейным, если для любых функций $u_1, u_2, ..., u_n,...$ из множества функций M, на которые может действовать оператор, и любых постоянных $c_1, c_2,...,c_n,...$ выполняется равенство:

$$\hat{L}(c_1u_1 + c_2u_2 + ... + c_nu_n) = c_1\hat{L}u_1 + c_2\hat{L}u_2 + ... + c_n\hat{L}u_n. \quad (1)$$

Это равенство означает, что результат действия линейного оператора на сумму функций равен сумме результатов действия на каждую функцию и что постоянные множители можно выносить за знак линейного оператора.

Примеры линейных операторов:

$\frac{d}{dx}$, $\int ...dx$, $\frac{\partial^2}{\partial x \partial y}$, оператор Лапласа $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$.

Одним из видов линейного оператора является оператор умножения $\hat{V} = V(x, y, z)$. Действие этого оператора на функцию $u(x, y, z)$ состоит в том, что функция u умножается на функцию $V(x, y, z)$:

$$\hat{V}u = V(x, y, z) \cdot u(x, y, z). \qquad (2)$$

Операторы, изображающие физические величины должны обладать также свойством самосопряженности или эрмитовости (Эрмит – французский математик XIX века). Линейный оператор $\hat{L}$ называют самосопряженным (эрмитовым), если для любых функций u_1 и u_2 рассматриваемого класса выполняется равенство:

$$\int u_1^*(x) \hat{L} u_2(x) dx = \int u_2(x) \hat{L}^* u_1^*(x) dx, \qquad (3)$$

где интегрирование производится по области определения функций, причём на границе области определения функции u_1 и u_2 должны обращаться в нуль. Если функции u_1 и u_2 определены в неограниченной области, то они должны стремиться к нулю при удалении точки на бесконечность. Значком * обозначены комплексно-сопряженные функции и операторы. Комплексно-сопряженный оператор $\hat{L}^*$ образуется так же, как комплексно-сопряженная величина, т.е. путём замены мнимой единицы i в выражении оператора на $-i$. Очевидно, что оператор умножения на вещественную функцию $\hat{V} = V(x, y, z)$ является самосопряженным, так как для вещественных величин $V = V^*$. Легко показать, что операторы $i\dfrac{\partial}{\partial x}$, оператор Лапласа Δ (в одномерном случае $\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}$) – эрмитовые операторы, а оператор $\dfrac{d}{dx}$ - не эрмитовый.

Проверим, например, что оператор $\hat{L} = i\dfrac{d}{dx}$ эрмитовый. Подставляя этот оператор в (3) и производя интегрирование по частям по области определения функции $[a,b]$, получим

$$\int_a^b u_1^* i\frac{du_2}{dx}dx = iu_1^*u_2\Big|_a^b - i\int_a^b u_2\frac{du_1^*}{dx}dx = \int_a^b u_2\left(i\frac{d}{dx}\right)^* u_1^* dx. \quad (4)$$

(Член $iu_1^*u_2\Big|_a^b = 0$, так как на границах области определения функции u_1 и u_2 обращаются в нуль).

§2. Действия над операторами

Суммой операторов $\hat{A}+\hat{B}$ называется оператор $\hat{C} = \hat{A}+\hat{B}$, действие которого на функцию $u(x)$ выражается равенством:

$$\hat{C}u(x) = (\hat{A}+\hat{B})u(x) = \hat{A}u(x) + \hat{B}u(x). \quad (5)$$

Например, суммой операторов $\hat{A} = x^2$ и $\hat{B} = \dfrac{d^2}{dx^2}$ является оператор $x^2 + \dfrac{d^2}{dx^2}$, действующий на функцию $u(x)$ следующим образом:

$$(\hat{A}+\hat{B})u(x) = x^2u(x) + \frac{d^2}{dx^2}u(x). \quad (6)$$