ЛЕКЦИЯ 4

МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ. ЭРМИТОВЫ ОПЕРАТОРЫ. ПОСТУЛАТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

На прошлой лекции исходя из принципа суперпозиции состояний было установлено, что любое состояние $|X\rangle$ системы частиц может быть представлено как суперпозиция собственных состояний некоторой физической величины:

$$|X\rangle = \sum_i c_i \, |f_i\rangle \,. \tag{4.1}$$

При этом векторы собственных состояний ортогональны друг другу и могут быть нормированы:

$$\langle f_i | \, f_k\rangle = \delta_{ik}, \qquad \delta_{ik} = \begin{cases} 0, & i \neq k \\ 1, & i = k \end{cases} \tag{4.2}$$

Исходя из этого, коэффициенты c_i в выражении (4.1) можно определить как проекции вектора $|X\rangle$ на орты $|f_i\rangle$.

$$c_i = \langle f_i | \, X\rangle. \tag{4.3}$$

Это выражение можно получить, умножив (4.1) на бра-вектор состояния $\langle f_k|$. Заменив в получившемся выражении $i \leftrightarrow k$, получим в точности выражение (4.3).

Рассмотрим скалярное произведение вектора состояний на самого себя, то есть квадрат нормы

$$\langle X | \, X\rangle = \Big\langle \sum_i c_i f_i \Big| \sum_k c_k f_k \Big\rangle, \tag{4.4}$$

так как суммирование происходит независимо.

В силу того, что скалярное произведение линейно по кет-вектору и антилинейно по бра-вектору (свойства 2,3), то выражение (4.4) примет следующий вид:

$$\langle X|\, X\rangle = \sum_{i,k} c_i^* c_k \langle f_i|\, f_k\rangle = \sum_{i,k} c_i^* c_k \delta_{ik} = \sum_i |c_i|^2.$$

Квадрат модуля коэффициента c_i должен быть равен вероятности нахождения системы в состоянии $|f_i\rangle$. Сумма всех вероятностей должна быть равна единице, так как при измерении физической величины одно из ее значений обязательно будет получено, следовательно:

$$\sum_i |c_i|^2 = 1.$$

Таким образом, физические величины должны описываться вектором состояний с конечным квадратом нормы: если норма конечная, то, поделив на нее, можно нормировать состояние.

Напомним, что физическое основание квантовой механики — корпускулярно-волновой дуализм, а принцип суперпозиции состояний — способ на корпускулярном языке описать волновые явления.

Этот же принцип определяет, какой должен быть математический аппарат квантовой механики, сводящийся к тому, что состояние описывается вектором в особом пространстве, где ортами являются величины $|f_i\rangle$.

Сформулируем следующий постулат:

Определение 4: Первый постулат квантовой механики — *состояние системы полностью описывается вектором состояния, который должен быть однозначно определен (с точностью до общей фазы) и иметь конечную норму.* ♣

Из требований конечности нормы в дальнейшем будет следовать существование дискретных уровней энергии.

В классической механике полное описание системы означало, что, задав все координаты и скорости

$$\{x_i \dots v_i\}_{t_0}$$

в некоторый момент времени t_0, можно

1. Вычислить любую механическую величину (энергию, момент, импульс) в момент времени t_0;

2. Зная силы, действующие на систему можно вычислить те же самые величины

$$\{x_i \dots v_i\}_t$$

   в любой момент времени t.

В квантовой механике в представлении (4.1), где в качестве орт выбраны состояния $|f_i\rangle$ нельзя даже указать величину f_i — можно указать лишь вероятность того, что эта величина примет то или иное значение.

Однако, если задан вектор состояния в определенном базисе $|f_i\rangle$, то можно, согласно первому постулату квантовой механики, вычислить вероятность любых величин. Таким образом, в квантовой механике описание полное в том смысле, что

1. Если задан вектор состояния, то есть амплитуды c_i в некотором базисе, то можно указать вероятности всех физических величин;

2. Если вектор состояния $|\Psi\rangle$ задан в момент времени t_0, то по нему можно найти вектор состояния в любой момент времени:

$$|\Psi\rangle_{t_0} \to |\Psi\rangle_t .$$

Пусть вектор состояния $|\Psi\rangle$ задан с помощью орт, отвечающих собственным состояниям величины f, то

$$|\Psi\rangle = \sum_k c_k |f_k\rangle .$$

Найдем вероятности некоторой величины g.

$$|\Psi\rangle = \sum_k c_k |f_k\rangle = \sum_i b_i |g_i\rangle .$$

Подставляя выражение для $|\Psi\rangle$ в базисе $|f_k\rangle$, получим

$$b_i = \langle g_i | \Psi\rangle = \left\langle g_i \middle| \sum_k c_k f_k \right\rangle = \sum_k c_k \langle g_i | f_k\rangle .$$

Таким образом, зная коэффициенты c_k можно найти амплитуды состояния b_i, и следовательно, вероятности $|b_i|^2$. Для этого необходимо знать скалярное произведение векторов $\langle g_i|$ на $|f_k\rangle$.

Рассмотрим это скалярное произведение с геометрической точки зрения. Пусть в некоторой системе координат задан вектор. Возьмем другую систему координат, повернутую относительно первой.

Чтобы узнать проекции вектора в новой системе координат надо знать углы между старыми и новыми осями координат. Скалярное произведение $\langle g_i|\, f_k\rangle$ — косинусы углов между ортами, где в качестве орт берутся состояния $|f_k\rangle$ и $|g_i\rangle$ соответственно.

Таким образом, зная как собственные состояния двух систем связаны между собой, всегда можно вычислить вектор состояния в любой другой системе координат.

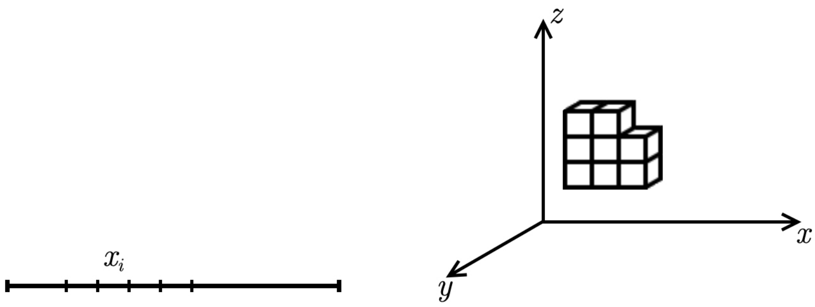

Рис. 4.1

Пример 1 Рассмотрим простейший случай — пусть частица может двигаться только в одном пространственном измерении. Разобьем прямую на малые отрезки x_i. В качестве состояний физической величины будем рассматривать положение частицы в том или ином участке (см. рис. 4.1).

Вектор состояния в этом случае принимает следующий вид:

$$|\Psi\rangle = \sum_k \psi(x_k, t)\, |x_k\rangle\,. \tag{4.5}$$

Таким образом, вектор состояния $|\Psi\rangle$ представлен в координатном (конфигурационном) представлении (в качестве физической величины берется координата частицы).

С другой стороны, можно было бы взять другую физическую величину — например, импульс. В этом случае вектор состояния примет вид:

$$|\Psi\rangle = \sum_i a(p_i, t)\, |p_i\rangle\,. \tag{4.6}$$

В этом случае вектор собственных состояний $|p_i\rangle$, представленный по собственным состояниям $|x_k\rangle$, примет вид:

$$|p_i\rangle = \sum_k \langle x_k|\, p_i\rangle\, |x_k\rangle\,.$$

Подставляя это выражение в (4.6), получим:

$$|\Psi\rangle = \sum_i a(p_i, t)\, \langle x|\, p_i\rangle\, |x\rangle\,.$$

Сравнивая это выражение с (4.5), получим следующее выражение:

$$\psi(x_k, t) = \sum_i a(p_i, t) \langle x_k | p_i \rangle. \tag{4.7}$$

В случае трехмерного движения (см. рис. 4.1), надо разбить пространство на ячейки и суммировать по каждому направлению отдельно. В этом случае в выражении (4.7) появится тройная сумма.

Формула (4.7) позволяет в случае, если вектор состояния представлен в конфигурационном представлении, вычислить его в импульсном представлении. Аналогично можно получить обратную формулу, позволяющую по вектору состояния в импульсном представлении вычислить его в конфигурационном представлении. $*$

На прошлой лекции были рассмотрены свойства линейных операторов и установлено, что действие линейного оператора определяется его матрицей в некотором представлении. Пусть

$$|A\rangle = \sum_k a_k |f_k\rangle, \qquad |B\rangle = \sum_i b_i |f_i\rangle = \hat{L} |A\rangle, \tag{4.8}$$

тогда

$$|B\rangle = \sum_k a_k \hat{L} |f_k\rangle.$$

Следовательно, коэффициент b_i определяется следующим выражением:

$$b_i = \langle f_i | B\rangle = \sum_k a_k \langle f_i | \hat{L} |f_k\rangle.$$

Таким образом, зная коэффициенты разложения a_k вектора $|A\rangle$ можно найти коэффициенты разложения b_i, если известна матрица оператора

$$L_{ik} = \langle f_i | \hat{L} |f_k\rangle.$$

В матричном представлении вектор $|B\rangle$, согласно (4.8), может быть записан следующим образом

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_{11} & \dots & L_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ L_{n1} & \dots & L_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}$$

Введем понятие **суммы операторов** $\hat{L}$ и $\hat{M}$:

$$(\hat{L} + \hat{M})_{ik} = L_{ik} + M_{ik}.$$

Пусть есть вектор $|A\rangle$, результатом действия оператора $\hat{L}$ на который является вектор $|B\rangle$. А результатом действия оператора $\hat{M}$ на вектор $|B\rangle$, в свою очередь, является вектор $|C\rangle$.

$$|A\rangle \xrightarrow{\hat{L}} |B\rangle \xrightarrow{\hat{M}} |C\rangle.$$

Вектору $|A\rangle$ сопоставлены коэффициенты a_i, вектору $|B\rangle$ — коэффициенты b_i, вектору $|C\rangle$ — коэффициенты c_i. В этом случае

$$|C\rangle = \hat{M} |B\rangle = \hat{M} \hat{L} |A\rangle. \tag{4.9}$$

В этом выражении существенен порядок действия операторов $\hat{L}$ и $\hat{M}$. Таким образом, под **произведением операторов** $\hat{L}$ и $\hat{M}$ будем понимать именно такое произведение.

Матрица оператора $\hat{M}\hat{L}$ — произведение матриц операторов $\hat{M}$ и $\hat{L}$. Таким образом, в матричном виде выражение (4.9) примет следующий вид:

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & \dots & M_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ M_{n1} & \dots & M_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{11} & \dots & L_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ L_{n1} & \dots & L_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}$$

Следовательно, в матричном виде **оператор произведения** выражается следующим образом:

$$(\hat{M}\hat{L})_k = \sum_n M_{in} L_{nk}.$$

В общем случае, произведение матриц некоммутативно:

$$ML \neq LM,$$

в отличие от произведения комплексных чисел.

В дальнейшем математический аппарат квантовой механики будем рассматривать по аналогии с комплексными числами. Часто обычные комплексные числа называют **c-числами**, а операторы, в свою очередь, называют **q-числами**.

Пусть некоторое комплексное число z записано в следующем виде

$$z = x + iy, \quad x, y \in \mathbb{R},$$

тогда комплексно сопряженное ему число равно:

$$z^* = x - iy.$$

Нетрудно показать, что произведение этих двух комплексных чисел — действительное число

$$z^* z = x^2 + y^2.$$

Подобно этому, для каждого оператора можно ввести понятие эрмитово сопряженного оператора. Эрмитово сопряжение для q-чисел аналогично комплексному сопряжению для c-чисел.

Рассмотрим скалярное произведение вектора $|A\rangle$ и вектора, являющегося результатом действия некоторого линейного оператора $\hat{L}$ на вектор $|B\rangle$

$$\langle A| \hat{L} |B\rangle .$$

Вектору $|A\rangle$ в этом выражении сопоставим коэффициенты a_i, вектору $|B\rangle$ — коэффициенты b_i. В этом случае выражение для скалярного произведения примет следующий вид:

$$\langle A| \hat{L} |B\rangle = \sum_{i,k} a_i^* L_{ik} b_k.$$

Попробуем обособить в этом выражении произведение $a_i^* L_{ik}$. В этом случае

$$\langle A| \hat{L} |B\rangle = \sum_{i,k} (L_{ik}^* a_i)^* b_k. \tag{4.10}$$

Обозначим через $L^\dagger$ матрицу такую, что

$$L^\dagger_{ki} = L^*_{ik}. \tag{4.11}$$

В этом случае выражение (4.10) примет следующий вид:

$$\langle A|\,\hat{L}\,|B\rangle = \sum_{i,k} (L^\dagger_{ki} a_i)^* b_k = \left\langle \hat{L}^\dagger_{ki} a_i \middle| b_k \right\rangle = \left\langle \hat{L}^\dagger A \middle| B \right\rangle$$

Таким образом, можно записать следующее равенство:

$$\langle A|\,\hat{L}\,|B\rangle = \left\langle \hat{L}^\dagger A \middle| B \right\rangle \tag{4.12}$$

Введенный таким образом оператор $\hat{L}^\dagger$ носит название **эрмитово сопряженного** оператора. Таким образом, оператором $\hat{L}$ можно действовать на левую часть выражения (4.12) (переносить его левее вертикальной черты), если заменить его на эрмитово сопряженный $\hat{L}^\dagger$.

Матрица эрмитово сопряженного оператора, согласно выражению (4.11), есть комплексно-сопряженная транспонированная матрица, поэтому

$$\hat{L}^\dagger = \tilde{\hat{L}}^*.$$

Формула (4.12) является определением эрмитова сопряжения.

Рассмотрим следующее произведение:

$$\langle A|\,\hat{L}\hat{M}\,|B\rangle\,. \tag{4.13}$$

Оператор $\hat{L}$ можно перенести за черту, поставив вместо него эрмитово сопряженный оператор $\hat{L}^\dagger$, следовательно, выражение (4.13) примет вид:

$$\langle A|\,\hat{L}\hat{M}\,|B\rangle = \left\langle \hat{L}^\dagger A \middle| \hat{M}\,|B\right\rangle.$$

Аналогичным образом можно перенести оператор $\hat{M}$, поставив его перед $\hat{L}^\dagger$. Следовательно, выражение (4.13) примет вид:

$$\langle A|\,\hat{L}\hat{M}\,|B\rangle = \left\langle \hat{M}^\dagger \hat{L}^\dagger A \middle| B \right\rangle \tag{4.14}$$

С другой стороны, можно было бы в выражении (4.13) перенести за черту сразу произведение операторов $(\hat{L}\hat{M})$, тогда

$$\langle A|\,\hat{L}\hat{M}\,|B\rangle = \left\langle (\hat{L}\hat{M})^\dagger A \middle| B \right\rangle$$

Сравнивая это выражение с (4.14), получим, что

$$(\hat{L}\hat{M})^\dagger = \hat{M}^\dagger \hat{L}^\dagger, \tag{4.15}$$

то есть **эрмитово сопряжение произведения** — произведение эрмитово сопряженных операторов, взятое в обратном порядке.

Легко обобщить это определение на любое количество операторов:

$$(\hat{L}\hat{M}\ldots\hat{N})^\dagger = \hat{N}^\dagger \ldots \hat{M}^\dagger \hat{L}^\dagger$$

Действительное число — такое число, которое равно своему комплексно сопряженному

$$z = z^*.$$

Аналогичным образом можно определить **эрмитовы (самосопряженные) операторы**.

Определение 5: *Оператор $\hat{K}$ эрмитов, если*

$$\hat{K}^\dagger = \hat{K}.$$

Для комплексных чисел

$$z^* z = |z|^2,$$

а для эрмитовых операторов, согласно формуле (4.15),

$$(\hat{A}^\dagger \hat{A})^\dagger = \hat{A}^\dagger \hat{A},$$

то есть оператор $\hat{A}^\dagger \hat{A}$ также эрмитов.

Для рассмотрения свойств эрмитовых операторов нужно предварительно ввести два понятия.

Определение 6: *Пусть есть некотрое состояние $|A\rangle$.* ***Среднее значение*** *$\overline{L}$ оператора $\hat{L}$ определяется следующим выражением:*

$$\overline{L} = \langle A| \hat{L} |A\rangle .$$

Определение 7: *Если результат действия оператора $\hat{L}$ на некоторый вектор состояния $|f_i\rangle$ с точностью до множителя равен самому вектору $|f_i\rangle$, причем $|f_i\rangle$ — ненулевой вектор*

$$\hat{L} |f_i\rangle = f_i |f_i\rangle , \qquad |f_i\rangle \neq 0, \tag{4.16}$$

то вектор $|f_i\rangle$ — ***собственный вектор*** *оператора $\hat{L}$, а f_i —* ***собственное значение*** *этого оператора.* ♣

Для удобства собственный вектор принято обозначать тем собственным значением, к которому он принадлежит. Применив операции транспонирования и комплексного сопряжения к каждой из частей равенства (4.16), получим, что

$$\langle f_i| \hat{L}^\dagger = f_i^* \langle f_i| . \tag{4.17}$$

Применив эти понятия к эрмитову оператору $hatK$, получим свойства эрмитовых операторов.

Свойство 8 Среднее значение эрмитова оператора действительно. ∗

Док-во: Действительно, согласно определению 6

$$\overline{K} = \langle A | \hat{K} | A \rangle = \left\langle \hat{K}^{\dagger} A \middle| A \right\rangle = \left\langle \hat{K} A \middle| A \right\rangle.$$

По свойству скалярного произведения:

$$\langle A | \hat{K} | A \rangle = \left\langle \hat{K} A \middle| A \right\rangle = \langle A | \hat{K} A \rangle^{*},$$

то есть некоторая величина равна своему комплексно сопряженному значению.

Следовательно, эта величина действительная, то есть среднее значение эрмитова оператора $\hat{K}$ действительно, что и требовалось доказать. ■

Свойство 9 Собственные значения эрмитова оператора действительны. *

Док-во: Рассмотрим действие оператора $\hat{K}$ на некоторый собственный вектор $ketf_i$

$$\hat{K} |f_i\rangle = f_i |f_i\rangle .$$

Умножив обе части этого выражения слева на $\langle f_i|$, получим, что

$$\langle f_i | \hat{K} | f_i \rangle = \overline{K} = f_i \langle f_i | f_i \rangle.$$

По свойству 8 среднее значение эрмитова оператора действительно, а квадрат нормы $\langle f_i | f_i \rangle$ всегда действителен, поэтому значение f_i также действительное число, что и требовалось доказать. ■

Свойство 10 Собственные вектора эрмитова оператора ортогональны если они принадлежат разным собственным значениям. *

Док-во: Пусть

$$\hat{K} |f_i\rangle = f_i |f_i\rangle ,$$

а второй собственный вектор запишем в виде (4.17):

$$\langle f_k | \hat{K} = f_k \langle f_k | .$$

Умножим первое равенство слева на $\langle f_k|$, а второе справа на $|f_i\rangle$ и вычтем из первого равенства второе. Левые части получившихся выражений равны, поэтому, вычитая правые части, получим:

$$0 = f_i \langle f_k | f_i \rangle - f_k \langle f_k | f_i \rangle = (f_k - f_i) \langle f_k | f_i \rangle.$$

Из этого выражения следует, что если

$$f_i \neq f_k \quad \Rightarrow \quad \langle f_k | f_i \rangle = 0,$$

то есть вектора $|f_i\rangle$ и $|f_k\rangle$, принадлежащие разным собственным значениям, ортогональны. ■

Возможен случай вырождения: оператор $\hat{K}$ может иметь несколько собственных векторов, собственные значения которых равны f_i

$$K\left|f_{i\alpha}\right\rangle = f_i\left|f_{i\alpha}\right\rangle, \qquad \alpha = 1, 2, \ldots, r,$$

где r — кратность вырождения.

В этом случае можно составить линейную комбинацию

$$\sum_{\alpha} c_\alpha \left|f_{i\alpha}\right\rangle,$$

которая по-прежнему будет собственным вектором оператора $\hat{K}$:

$$\hat{K}\left(\sum_{\alpha} c_\alpha \left|f_{i\alpha}\right\rangle\right) = f_i \sum_{\alpha} c_\alpha \left|f_{i\alpha}\right\rangle.$$

Таким образом в случае, когда есть вырождение, любая линейная комбинация собственных векторов также является собственным вектором, имеющим то же самое собственное значение f_i.

Следовательно, в случае вырождения вектора, принадлежащие вырожденному значению, составляют линейное подпространство. В линейном подпространстве всегда можно провести процедуру ортогонализации векторов, поэтому в общем случае (и вырожденном, и невырожденном) можно считать, что собственные вектора эрмитового оператора ортогональны друг другу.

Свойство 11 Собственные вектора эрмитового оператора составляют полный базис в n-мерном дискретном пространстве. Следовательно, любой вектор может быть разложен по этому базису. *

Док-во: Пусть существует эрмитов оператор

$$\hat{K}^\dagger = \hat{K}.$$

Базис в этом пространстве обозначим следующим образом:

$$\left|e_i\right\rangle, \quad i = 1, 2, \ldots, n,$$

где n — размерность этого пространства.

Будем записывать собственные вектора оператора $\hat{K}$ в следующем виде:

$$\left|f\right\rangle = \sum_i c_i \left|e_i\right\rangle. \tag{4.18}$$

Для нахождения $\left|f\right\rangle$ необходимо найти коэффициенты c_i. Подействовав оператором $\hat{K}$ на выражение (4.18), получим:

$$\hat{K}\left|f\right\rangle = \sum_i c_i \hat{K}\left|e_i\right\rangle = \lambda \sum_k c_k \left|e_k\right\rangle.$$

Умножим это равенство слева на $\langle e_k|$. В этом случае, учитывая, что

$$\left\langle e_{k'}\right| c_k \left|e_k\right\rangle = \delta_{kk'},$$

получим

$$\sum_i \langle e_k | \hat{K} | e_i \rangle c_i = \lambda c_k.$$

Это равенство — система уравнений для коэффициентов c. Обозначив матрицу

$$\langle e_k | \hat{K} | e_i \rangle = K_{ki},$$

получим следующее выражение:

$$\sum_i K_{ki} c_i = \lambda c_k, \quad k = 1, \dots, n.$$

Рассмотрим вид этих уравнений

$$\begin{matrix} k=1: \\ k=2: \\ \vdots \\ k=n: \end{matrix} \quad \begin{cases} K_{11}c_1 + K_{12}c_2 + \dots + K_{1n}c_n = \lambda c_1 \\ K_{21}c_1 + K_{22}c_2 + \dots + K_{2n}c_n = \lambda c_2 \\ \vdots \\ K_{n1}c_1 + K_{n2}c_2 + \dots + K_{nn}c_n = \lambda c_n \end{cases} \tag{4.19}$$

■

Эта система — система линейных однородных уравнений относительно коэффициентов c. Эта система имеет нетривиальное (ненулевое) решение, когда детерминант системы (4.19) равен нулю. Перенося правую часть уравнений (4.19) влево, получим матричную запись этого требования:

$$\left\| K_{ki} - \lambda\delta_{ki} = 0 \right\|.$$

Выписав этот детерминант,

$$\begin{vmatrix} K_{11}-\lambda & K_{12} & \dots & K_{1n} \\ K_{21} & K_{22}-\lambda & \dots & K_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ K_{n1} & \dots\dots & & K_{nn}-\lambda \end{vmatrix}$$

получим полином n-ой степени относительно λ. Чтобы решение было нетривиально, полином должен обращаться в ноль

$$P_n(\lambda) = 0.$$

Согласно основной теореме алгебры, этот полином имеет ровно n корней

$$\lambda_1, \lambda_2, \dots \lambda_n.$$

По свойству 9 эти корни должны быть действительны, поскольку λ — собственное значение эрмитова оператора.

Подставив первый корень в систему уравнений (4.19), можно $(n-1)$ коэффициент c выразить через коэффициент c, если детерминант отличен от нуля.

Таким образом, подставляя λ_1 в систему (4.19) сможем коэффициенты $c_2, \dots, c_n$ выразить через c_1. Следовательно, собственный вектор примет вид:

$$\begin{pmatrix} c_1^{(1)} \\ c_2^{(1)} \\ \vdots \\ c_n^{(1)} \end{pmatrix}$$

Нормировав этот вектор на единицу, можно найти значение $c_1^{(1)}$ (поскольку все оставшиеся коэффициенты пропорциональны c_1). Аналогично для λ_2 из собственного вектора

$$\begin{pmatrix} c_1^{(2)} \\ c_2^{(2)} \\ \vdots \\ c_n^{(2)} \end{pmatrix}$$

можно найти c_2.

Таким образом, получим n собственных векторов. Если все собственные значения различны, то все собственные вектора эрмитового оператора $\hat{K}$ ортогональны друг другу и в n-мерном пространстве составляют полный базис.

Если же некоторые из собственных значений одинаковы, то, как было показано ранее, в получающемся подпространстве можно провести процедуру ортогонализации. Таким образом, собственные вектора эрмитового оператора в n-мерном дискретном пространстве образуют полный базис, по которому можно разложить любой вектор в этом пространстве, что и требовалось доказать. ■

Легко обобщить это свойство на случай, когда

$$n \to \infty.$$

Труднее обобщить это свойство на случай не дискретных, а непрерывных величин.

Обратим внимание на сходство собственных векторов эрмитового оператора и векторов собственных состояний физической величины: состояния физической величины также являются векторами и составляют полный базис.

Среднее значения и собственные значения в обоих случаях также действительны. Это позволяет сформулировать

Определение 8: Второй постулат квантовой механики — *каждой физической величине соответствует линейный эрмитов оператор. Собственные значения и собственные вектора этого эрмитового оператора являются собственными значениями и собственными состояниями физической величины.* ♣

Определение 9: Третий постулат квантовой механики — *в разложении произвольного вектора состояния по собственным векторам эрмитового оператора, соответствующего физической величине*

$$|X\rangle = \sum_i c_i \, |f_i\rangle$$

квадраты модулей коэффициентов c_i

$$|c_i|^2 = w_i$$

есть вероятности обнаружить при измерении величины $|f\rangle$ в состоянии $|X\rangle$ собственное значение f_i. ♣

Остается использовать только второе требование полного описания, заключающееся в том, что зная вектор состояния в один момент времени t_0 можно указать его в любой другой момент времени t:

$$|\Psi\rangle_{t_0} \to |\Psi\rangle_t .$$

Это означает, что $|\Psi\rangle_t$ — некоторый оператор, зависящий от t, t_0, действующий на $|\Psi\rangle_{t_0}$:

$$|\Psi\rangle_t = \widehat{U}(t, t_0)\, |\Psi\rangle_{t_0} . \tag{4.20}$$

Норма $|\Psi\rangle_t$, записанная в таком виде, равна

$$\langle \Psi_t | \, \Psi_t \rangle = \left\langle \widehat{U}\Psi_0 \middle| \, \widehat{U}\Psi_0 \right\rangle = \left\langle \widehat{U}^\dagger \widehat{U}\Psi_0 \middle| \, \Psi_0 \right\rangle.$$

Квадрат нормы $|Psi\rangle_t$ — полная вероятность того, что произойдет некоторое событие, то есть эта вероятность равна единице. Норма должна сохраняться, поэтому

$$\langle \Psi_t | \, \Psi_t \rangle = \langle \Psi_0 | \, \Psi_0 \rangle \quad \Rightarrow \quad \widehat{U}^\dagger \widehat{U} = I, \tag{4.21}$$

где I — **единичный оператор** (его матрица — единичная матрица).

Оператор $\widehat{U}$, обладающий свойством (4.21) называется **унитарным** оператором. Таким образом, преобразование (4.20) должно осуществляться с помощью унитарного оператора.

Рассмотрим аналогию с c-числами. Произведение

$$e^{i\alpha} \cdot e^{-i\alpha} = 1.$$

По этой же аналогии, если α мало по сравнению с единицей, то e^α можно представить следующим образом:

$$e^{i\alpha} = 1 + i\alpha + O(\alpha^2).$$

Пусть унитарный оператор $\widehat{U}$ зависит от некоторой величины α, и при этом

$$\widehat{U} = \widehat{U}(\alpha), \qquad \widehat{U}(0) = I.$$

Разложив этот оператор по малому параметру α, получим:

$$\widehat{U}(\alpha) = I + \alpha \widehat{A} + O(\alpha^2).$$

Эрмитово сопряженный оператор имеет вид:

$$\widehat{U}^\dagger(\alpha) = I + \alpha \widehat{A}^\dagger + O(\alpha^2).$$

Произведение этих двух операторов должно быть равно единичному оператору, поэтому

$$I = \widehat{U}^\dagger \widehat{U} = I + \alpha(\widehat{A}^\dagger + \widehat{A}) + O(\alpha^2).$$

Следовательно,

$$\widehat{A}^\dagger + \widehat{A} = 0,$$

то есть $\hat{A}$ — **антиэрмитов оператор**:

$$\hat{A} = i\hat{K}, \qquad \hat{K}^\dagger = \hat{K}.$$

Пусть

$$t = t_0 + \delta t,$$

где δt мало, тогда

$$\hat{U}(t) = I + i\,\delta t\hat{K} + O(\delta t^2), \qquad \hat{K}^\dagger = \hat{K}.$$

Продолжив эти рассуждения на следующей лекции, получим уравнение Шредингера.