

### 3.2. Самосопряженные или эрмитовы операторы.

#### 3.2.1. Самосопряженные операторы.

Непосредственно измеряемые (“наблюдаемые”) физические величины вещественны. Отсюда следует, что все собственные значения оператора  $\hat{G}$ , соответствующего данной физической величине, –  $g_n$  должны быть вещественны.

Что мы получаем в результате измерения физической величины, описываемой оператором  $\hat{G}$ ?

А). Если физическая система (частица) находится в состоянии, описываемом собственной функцией  $\Psi_n$ , то при измерении получим собственное значение  $g_n$ , которое получаем из уравнения

$$\hat{G}\Psi_n = g_n \Psi_n.$$

Б). Если система (частица) описывается произвольной функцией  $\Psi$ , то при измерении наблюдаемой величины, т.е. при действии оператора  $\hat{G}$ , получим линейную комбинацию из собственных значений  $g_n$  – некое среднее значение, которое тоже вещественно. Например:  $\Psi = C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2 + \dots$  и, если  $\Psi_n$  являются собственными функциями оператора, тогда имеем:  $\hat{G}\Psi = C_1g_1\Psi_1 + C_2g_2\Psi_2 + \dots$

Вводится понятие *сопряженного* оператора  $\hat{F}^+$  следующим равенством:

$$\int \Psi_1^* \hat{F} \Psi_2 dV = \int \Psi_2 (\hat{F}^+ \Psi_1)^* dV \quad (3.2.1)$$

То есть оператор  $\hat{F}^+$  является сопряженным к оператору  $\hat{F}$ , когда в интеграле (3.2.1) действие  $\hat{F}$  на правую функцию  $\Psi_2$  дает тот же результат, как и действие комплексно сопряженного оператора  $(\hat{F}^+)^*$  на левую функцию  $\Psi_1^*$ .

*Самосопряженные операторы* определяются следующим равенством:

$$\int \Psi_1^* \hat{F} \Psi_2 dV = \int \Psi_2 (\hat{F}^+ \Psi_1)^* dV = \int \Psi_2 (\hat{F} \Psi_1)^* dV \quad (3.2.2)$$

где  $\hat{F}^+$  – *сопряженный* оператор к оператору  $\hat{F}$ . Итак, если выполняется равенство

$$\hat{F}^+ = \hat{F} \quad (3.2.3)$$

то этот оператор называется *эрмитовым* или *самосопряженным* оператором. Продолжая равенство (3.2.2), можно сказать, что действие самосопряженного оператора  $\hat{F}$  на правую от него функцию совпадает с действием комплексно сопряженного оператора на левую функцию:

$$\int \Psi_1^* \hat{F} \Psi_2 dV = \int \Psi_2 (\hat{F} \Psi_1)^* dV = \int \Psi_2 \hat{F}^* \Psi_1^* dV \quad (3.2.4)$$

Часто вводится понятие *транспонированного* оператора  $\hat{F}^{mp}$ , которое определяется из соотношения

$$\int \Psi_1^* \hat{F} \Psi_2 dV = \int (\hat{F}^{mp} \Psi_1^*) \Psi_2 dV, \quad (3.2.5)$$

то есть вводится оператор  $\hat{F}^{mp}$ , который дает тот же результат, действуя на левую функцию, как и оператор  $\hat{F}$ , действующий на правую. Таким образом, сопряженный оператор – это комплексно сопряженный оператор от транспонированного оператора:

$$\hat{F}^+ = (\hat{F}^{mp})^* \quad (3.2.6)$$

Рассмотрим примеры операторов.

- 1) Легко убедиться из (3.2.4), что оператор координаты  $\hat{x} = x$  эрмитов (самосопряженный) оператор.
- 2) Рассмотрим оператор дифференцирования  $\hat{F} = \frac{d}{dx}$ , при этом будем считать, что волновые функции равны 0 на бесконечности, т.е.  $\Psi_1, \Psi_2 \rightarrow 0$  при  $x \rightarrow \pm\infty$ . Вычислим оператор, сопряженный оператору  $\hat{F}$ , с помощью интегрирования по частям:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^* \frac{d}{dx} \Psi_2 dx = \Psi_1^* \Psi_2 \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_2 \frac{d}{dx} \Psi_1^* dx = 0 + \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_2 \left( -\frac{d}{dx} \right) \Psi_1^* dx$$

Таким образом, оператор, сопряженный оператору  $\hat{F} = \frac{d}{dx}$ , равен:

$$\hat{F}^+ = -\frac{d}{dx} \quad (3.2.7)$$

и, следовательно, оператор  $\hat{F} = \frac{d}{dx}$  не является эрмитовым.

3) Оператор проекции импульса  $\hat{F} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} = \hat{p}_x$  – самосопряженный оператор. Проверим это:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi_2 dx &= \psi_1^* (-i\hbar) \psi_2 \Big|_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2 \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi_1^* \right) dx = \\ &= 0 + \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2 \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi_1^* dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2 \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi_1 \right)^* dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2 (\hat{p}_x \psi_1)^* dx \end{aligned}$$

Таким образом, оператор проекции импульса

$$\hat{p}_x = \hat{p}_x^+ = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (3.2.8)$$

эрмитов (самосопряженный) оператор.

### 3.2.2. Собственные функции и собственные значения самосопряженных операторов.

Рассмотрим основные свойства эрмитовых операторов.

1). Собственные значения эрмитовых операторов – вещественны. Запишем уравнение на собственные значения и комплексно сопряженное ему уравнение:

$$\hat{F}\psi_n = \lambda_n \psi_n \quad \text{и} \quad \hat{F}^* \psi_n^* = \lambda_n^* \psi_n^* \quad (3.2.9)$$

Умножим слева первое уравнение на  $\psi_n^*$  (либо второе на  $\psi_n$ ), проинтегрируем по всему пространству и воспользуемся свойством «эрмитовости»:

$$\int \psi_n^* \hat{F} \psi_n dV = \lambda_n \int |\psi_n|^2 dV = \lambda_n = \int \psi_n (\hat{F} \psi_n)^* dV = \lambda_n^*$$

Отсюда имеем

$$\lambda_n = \lambda_n^* \quad (3.2.10)$$

и получаем, что *собственные значения эрмитовых операторов вещественны*.

2). Произведение двух эрмитовых коммутирующих операторов есть эрмитов оператор

$$\hat{F}\hat{G} = \hat{F}^+ \hat{G}^+ = (\hat{G}\hat{F})^+ = (\hat{F}\hat{G})^+ \quad (3.2.11)$$

3). Важное свойство эрмитовых операторов. Пусть имеем дискретный набор собственных значений и собственных функций оператора  $\hat{F}$  (причем считаем, что нет вырождения, т.е. все волновые функции  $\psi_n$  разные для разных собственных значений  $\lambda_n$ ):

$$\begin{aligned} \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \dots \\ \psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots \end{aligned} \quad (3.2.12)$$

Такой набор волновых функций образует, так называемую, *полную систему ортонормированных* волновых функций:

$$\int \psi_m^* \psi_n dV = \begin{cases} 0, & m \neq n \\ 1, & m = n \end{cases} = \delta_{mn} \quad (3.2.13)$$

где  $\delta_{mn}$  – символ Кронекера. В самом деле, для доказательства ортогональности рассмотрим два равенства

$$\begin{cases} \hat{F}\psi_n = \lambda_n \psi_n \\ \hat{F}^* \psi_m^* = \lambda_m^* \psi_m^* \end{cases} \quad (3.2.14)$$

Умножим слева первое уравнение на  $\Psi_m^*$ , а второе – на  $\Psi_n^*$ , и проинтегрируем по всему пространству. Вычитая второе уравнение (3.2.14) из первого уравнения и учитывая, что  $\hat{F}$  эрмитов оператор и, следовательно,  $\hat{\lambda}_m^* = \lambda_m$ , получаем:

$$\begin{aligned} 0 &= \int (\lambda_n - \lambda_m) \Psi_m^* \Psi_n dV \\ (\lambda_n - \lambda_m) \int \Psi_m^* \Psi_n dV &= 0 \end{aligned} \quad (3.2.15)$$

Из (3.2.15) имеем, что если  $\lambda_n \neq \lambda_m$ , получаем ортогональность функций  $\int \Psi_m^* \Psi_n dV = 0$ . Полнота набора означает, что любую функцию можно разложить в ряд по функциям  $\Psi_n$ .

В случае, когда имеем вырождение состояния, тогда введем новые волновые функции состояния и возьмем их в виде линейной комбинации:

$$\Psi_n = \alpha_{n_1} \Psi_{n_1} + \alpha_{n_2} \Psi_{n_2} + \alpha_{n_3} \Psi_{n_3} + \dots, \quad (3.2.16)$$

где все волновые функции имеют одно и то же собственное значение  $\hat{F}\Psi_{n_i} = \lambda_n \Psi_{n_i}$ . При этом линейные комбинации можно сделать такими, что новые волновые функции  $\Psi_n$  были бы ортонормированными.

**Вывод:** *условие ортонормированности собственных функций самосопряженных линейных операторов выполняется всегда.* В случае вырождения можно заменить собственные функции их ортонормированными линейными комбинациями.

4). Разложение в ряд по системе собственных функций самосопряженных линейных операторов. Любую функцию можно представить в виде:

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_n C_n \Psi_n(\vec{r}) \quad (3.2.17)$$

Коэффициенты разложения можно получить, умножив (3.2.17) на  $\Psi_k^*$  и интегрируя по объему:

$$\int \Psi(\vec{r}) \Psi_k^*(\vec{r}) dV = \int \sum_n C_n \Psi_n(\vec{r}) \Psi_k^*(\vec{r}) dV = \sum_n C_n \int \Psi_k^*(\vec{r}) \Psi_n(\vec{r}) dV = \sum_n C_n \delta_{kn} = C_k$$

Таким образом, имеем:

$$C_k = \int \Psi(\vec{r}) \Psi_k^*(\vec{r}) dV \quad (3.2.18)$$

Каков смысл этих коэффициентов? *Квадрат коэффициента  $C_k^2$  дает вероятность того, что в состоянии, описываемом волновой функцией  $\Psi(\vec{r})$ , присутствует примесь состояния  $\Psi_k$ .*

Если имеем непрерывный спектр значений, тогда волновую функцию раскладываем в интеграл:

$$\Psi(\vec{r}) = \int C(\lambda) \Psi_\lambda(\vec{r}) d\lambda, \quad (3.2.19)$$

где коэффициенты определяются

$$C(\lambda_1) = \int \Psi_{\lambda_1}^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) dV \quad (3.2.20)$$

Волновые функции непрерывного спектра нормируются на  $\delta$ - функцию (вместо (3.2.13)):

$$\int \Psi_{\lambda'}^*(\vec{r}) \Psi_\lambda(\vec{r}) dV = \delta(\lambda' - \lambda) \quad (3.2.21)$$

Рассмотрим некоторые свойства  $\delta$ - функции. Функция  $\delta(x - a)$  везде равна нулю за исключением точки  $x = a$ , где она обращается в бесконечность:

$$\begin{aligned} \delta(x - a) &= \begin{cases} 0, & x \neq a \\ \infty, & x = a \end{cases} \\ &\text{или} \\ \delta(x) &= \begin{cases} 0, & x \neq 0 \\ \infty, & x = 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (3.2.22)$$

Однако интеграл от  $\delta$ - функции равен единице (т.е. имеем бесконечность с мощностью равной 1):

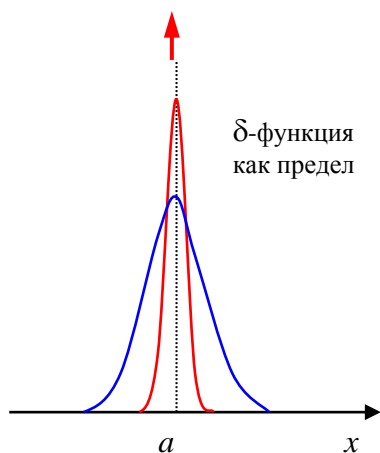


Рис. 2.1.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-a) dx = 1$$

или

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1 \quad (3.2.23)$$

Вообще геометрически  $\delta$ -функцию можно рассматривать как предел максимума, стремящегося к бесконечности в точке  $a$  и сохраняющего равную единице площадь под кривой (см рис. 2.1). Важное свойство  $\delta$ -функции состоит в том, что она “вырезает” в подынтегральной функции значение этой функции в точке  $a$ :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x) \delta(x-a) dx = \Psi(a) \quad (3.2.24)$$

Последнее условие и нормировка позволяет получать коэффициенты  $C(\lambda)$  из разложения (3.2.19).

5). Вычисление средних значений. Поскольку вероятность найти частицу в элементе объема  $dV$  равна

$$dW = \psi^*(\vec{r})\psi(\vec{r})dV,$$

то можно определить средние значения различных физических величин. Напомним, что среднее значение, например, координаты, определяется:

$$\langle x \rangle = \int x dW = \int \rho(x) x dx$$

где вероятность значения  $dW$  определяется через плотность вероятности  $dW = \rho(x) dx$ . Аналогично получаем для средних значений координаты в состоянии, определяемой волновой функцией  $\Psi(x)$ :

$$\langle x \rangle = \frac{\int \Psi^*(x) x \Psi(x) dx}{\int \Psi^*(x) \Psi(x) dx} \quad (3.2.25)$$

Если волновая функция  $\Psi(x)$  уже нормирована, то среднее значение координаты равно:

$$\langle x \rangle = \int \psi^*(x) x \psi(x) dx \quad (3.2.26)$$

Теперь можно записать выражение для среднего значения любого оператора  $\hat{F}$ :

$$\langle \hat{F} \rangle = \int \Psi^*(\vec{r}) \hat{F} \Psi(\vec{r}) dV \quad (3.2.27)$$

Волновую функцию  $\Psi(x)$  можно разложить по собственным функциям оператора  $\hat{F}$ :  $\hat{F}\psi_n = \lambda_n \psi_n$ . Тогда получаем из (3.2.27):

$$\begin{aligned} \langle \hat{F} \rangle &= \int \sum_n C_n^* \psi_n^* \cdot \hat{F} \cdot \sum_m C_m \psi_m dV = \sum_{n,m} C_n^* C_m \int \psi_n^* \hat{F} \psi_m dV = \\ &= \sum_{n,m} C_n^* C_m \lambda_m \int \psi_n^* \psi_m dV = \sum_{n,m} \lambda_m C_n^* C_m \delta_{nm} = \sum_n \lambda_n |C_n|^2 \end{aligned} \quad (3.2.28)$$

Таким образом, среднее значение оператора  $\hat{F}$  определяется суммой собственных значений этого оператора, взятых с весовыми множителями  $|C_n|^2$ , определяющими долю (вероятность) примеси данного собственного состояния  $n$  в полной волновой функции  $\Psi(x)$ .