ОБОЗНАЧЕНИЯ ДИРАКА

Краткий математический обзор формального аппарата квантовой механики см.
Елютин, Кривченков, Квантовая механика

Ключевое понятие квантовой механики – понятие состояния системы.

Примеры.

1. Квантовый осциллятор находится в n-ом состоянии, т.е. квантовая частица находится в гармоническом потенциале, обладает энергией $E_n = \hbar\omega\left(n + 1/2\right)$. Известны собственные волновые функции в координатном, импульсном и энергетическом представлениях.

2. Атом водорода в s-состоянии, т.е. электрон находится в поле протона, обладает энергией $E_{n=1 l=0 m=0} = m_e e^4/(2\hbar^2)$, квадрат момента и проекция момента импульса равны нулю.
Известны собственные волновые функции в координатном, импульсном и энергетическом представлениях.

Для краткого обозначения состояния системы Дирак предложил использовать значок (кет-вектор)

$$\left|\alpha\right\rangle$$

С математической точки зрения кет-вектор является вектором в абстрактном векторном пространстве. Как и со всяким обычным вектором, его можно складывать с другим кет-вектором, а также умножать на комплексные числа. Можно также определить правило соответствия между двумя множествами кет-векторов, т.е. задать оператор, действующий на кет-векторы.

$C\left|\alpha\right\rangle (C = C_1 + iC_2) -$ кет-вектор, описывающий то же состояние системы, что и кет-вектор $\left|\alpha\right\rangle$

$\left|\gamma\right\rangle = C_\alpha\left|\alpha\right\rangle + C_\beta\left|\beta\right\rangle -$ кет-вектор, описывающий состояние системы, получающееся с помощью суперпозиции состояний $\left|\alpha\right\rangle$ и $\left|\beta\right\rangle$

Пример.

Квантовый осциллятор находится в $n=0$-ом состоянии, т.е.

квантовая частица находится в гармоническом потенциале, обладает энергией $E_n = \hbar\omega/2$,

Известны собственные волновые функции в координатном, импульсном и энергетическом представлениях.

$$\left|n=0\right\rangle$$

$$\psi_{n=0}(x) = \frac{1}{\left(2\pi a^2\right)^{1/4}} \cdot \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right)$$

в.ф. в координатном представлении

$$\psi_{n=0}(p) = \left(\frac{a^2}{2\pi\hbar^2}\right)^{1/4} \cdot \exp\left(-\frac{p^2 a^2}{2\hbar^2}\right)$$

в.ф. в импульсном представлении

$$\psi_{n=0}(E) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

в.ф. в энергетическом представлении

Как и для обычного вектора, для кет-векторов можно определить скалярное произведение. Для этого Дирак ввёл так называемый бра-вектор

$$\langle\alpha| = \left(|\alpha\rangle\right)^{\dagger}$$

Обозначение скалярного произведения

$$\langle\beta|\alpha\rangle$$

Расшифровка скалярного произведения на примере осциллятора в координатном представлении

$$\langle m|n\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\,\psi_m^*(x)\psi_n(x) = \delta_{mn}$$

Расшифровка скалярного произведения на примере осциллятора в энергетическом представлении

$$\langle m=0|n=1\rangle = \left(1\;0\;0\ldots\;\right)\begin{pmatrix}0\\1\\0\\\vdots\end{pmatrix} = 0$$

Физическая интерпретация скалярного произведения

В случае «школьных» векторов скалярное произведение

$$\vec{a}\cdot\vec{b}=\left(a\cdot\cos\alpha\right)\cdot b$$

при *b=1* равно проекции вектора $\vec{a}$ на направление вектора $\vec{b}$

Какая ситуация в случае Дираковских кет- и бра-векторов?

$\left|x\right\rangle$ — кет-вектор состояния осциллятора, в котором он обладает определённой координатой

$\left|n\right\rangle$ — кет-вектор состояния осциллятора, в котором он обладает определённой энергией

Проекция кет-вектора $\left|n\right\rangle$ на кет-вектор $\left|x\right\rangle$ - скалярное произведение

$$\left\langle x\middle|n\right\rangle$$

имеет смысл амплитуды вероятности того, что осциллятор с энергией E_n будет обнаружен в окрестности точки x

$$\left\langle x\middle|n\right\rangle=\psi_n(x)$$

Принцип суперпозиции в обозначениях Дирака

Рассмотрим произвольное состояние квантового осциллятора

$$|\psi\rangle$$

Разложим кет-вектор этого состояния по собственным состояниям квантового осциллятора

$$|\psi\rangle = \sum_n a_n |n\rangle$$

Домножим на бра-вектор $\langle m|$

$$\langle m|\psi\rangle = \sum_n a_n \langle m|n\rangle = \sum_n a_n \cdot \delta_{mn} = a_m$$

Ещё одна форма записи принципа суперпозиции

$$|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle = \left(\sum_n |n\rangle\langle n|\right)|\psi\rangle$$

Единичный оператор

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = \hat{1}$$

Операторы в обозначениях Дирака

Оператор - правило соответствия между двумя множествами кет-векторов

$$|\beta\rangle = \hat{f}|\alpha\rangle, \quad |\alpha\rangle = \sum_k |k\rangle\langle k|\alpha\rangle, \quad |\beta\rangle = \sum_l |l\rangle\langle l|\beta\rangle$$

В явном виде это равенство формально совпадает с действием матрицы на столбец. Покажем это на примере квантового осциллятора.

$$\sum_l |l\rangle\langle l|\beta\rangle = \sum_k \hat{f}|k\rangle\langle k|\alpha\rangle \Rightarrow$$

$$\sum_l \langle n|l\rangle\langle l|\beta\rangle = \sum_k \langle n|\hat{f}|k\rangle\langle k|\alpha\rangle, \quad \langle n|l\rangle = \delta_{nl} \Rightarrow$$

$$\langle n|\beta\rangle = \sum_k \langle n|\hat{f}|k\rangle\langle k|\alpha\rangle$$

$\langle n|\beta\rangle, \langle k|\alpha\rangle -$ волновые функции состояний $|\beta\rangle$ и $|\alpha\rangle$ осциллятора в энергетическом представлении

$$\langle n|\beta\rangle = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \end{pmatrix}, \ \langle k|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \vdots \end{pmatrix}, \ \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_{11} & f_{12} & f_{13} & \ldots \\ f_{21} & f_{22} & f_{23} & \ldots \\ & & \vdots & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Матричные элементы оператора в координатном представлениях

$$\langle n|\hat{f}|k\rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\,\psi_n^*(x)\,\hat{f}\,\psi_k(x)$$

Матричные элементы оператора в энергетическом представлениях

$$\langle n|\hat{f}|k\rangle = \begin{pmatrix} 0 \ldots & a_n = 1\, 0 \ldots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_{11} & f_{12} & f_{13} & \ldots \\ f_{21} & f_{22} & f_{23} & \ldots \\ & & \vdots & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ a_k = 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} = f_{kn}$$

Матричный элемент произведения операторов

$$\langle n|\hat{f}\,\hat{g}|k\rangle = \langle n|\hat{f}\left(\sum_i |i\rangle\langle i|\right)\hat{g}|k\rangle = \sum_i \langle n|\hat{f}|i\rangle\langle i|\hat{g}|k\rangle$$

Матрица произведения операторов в энергетическом представлениях

$$\langle n|\hat{f}\,\hat{g}|k\rangle \Rightarrow \begin{pmatrix} f_{11} & f_{12} & f_{13} & \cdots \\ f_{21} & f_{22} & f_{23} & \cdots \\ & & \vdots & \end{pmatrix}\begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} & g_{13} & \cdots \\ g_{21} & g_{22} & g_{23} & \cdots \\ & & \vdots & \end{pmatrix}$$

Операторы в обозначениях Дирака.
Непрерывный спектр (координатное представление)

Единичный оператор

$$\int dx \left|x\right\rangle\left\langle x\right| = 1$$

Действие оператора

$$\left\langle x\middle|\beta\right\rangle = \int dx' \left\langle x\middle|\hat{f}\middle|x'\right\rangle\left\langle x'\middle|\alpha\right\rangle$$

$\left\langle x\middle|\beta\right\rangle, \left\langle x'\middle|\alpha\right\rangle -$ волновые функции состояний $\left|\beta\right\rangle$ и $\left|\alpha\right\rangle$ осциллятора в координатном представлении

$F(x, x') \equiv \left\langle x\middle|\hat{f}\middle|x'\right\rangle -$ ядро оператора $\hat{f}$ в координатном представлении

$$\left\langle x\middle|\beta\right\rangle = \int dx' \left\langle x\middle|\hat{f}\middle|x'\right\rangle\left\langle x'\middle|\alpha\right\rangle \Leftrightarrow \psi_\beta(x) = \int dx' F(x, x')\psi_\alpha(x')$$

Матричный элемент произведения операторов. Непрерывный спектр

$$\langle n|\hat{f}\,\hat{g}|k\rangle = \langle n|\hat{f}\left(\int dx\,|x\rangle\langle x|\right)\hat{g}|k\rangle = \int dx\langle n|\hat{f}|x\rangle\langle x|\hat{g}|k\rangle$$

Ядро произведения операторов в координатном представлении

$$\langle x|\hat{f}\,\hat{g}|x'\rangle \quad \Rightarrow \quad \int dx''\langle x|\hat{f}|x''\rangle\langle x''|\hat{g}|x'\rangle \equiv \int dx'' F\left(x,x''\right)G\left(x'',x'\right)$$