Математические основы квантовой механики (осень 2020)

Лекция № 7

Итак, обобщенные собственные вектора оператора координаты $\hat{q}$ это антилинейные непрерывные функционалы из пространства $\mathcal{Y}^{\times}$, которые $\forall\, |\varphi\rangle \in \mathcal{Y}$ ставят в соответствие значение функции в точке x:

$$\hat{q}\,|x\rangle = x\,|x\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle\varphi|x\rangle = \bar{\varphi}(x)$$

Функционал $|x\rangle$ называется δ-функцией, сосредоточенной в т. $x \in \mathbb{R}$. Удобно сопоставлять функционалу $|x\rangle$ формальное ядро $\delta(x-y)$ и записывать его действие на функции $|\varphi\rangle$ из $\mathcal{Y}$ в виде интеграла

$$\langle\varphi|x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\varphi}(y)\,\delta(x-y)\,dy = \bar{\varphi}(x).$$

"Разложение единицы" по набору обобщенных собственных векторов $\hat{q}$ имеет вид:

$$|\varphi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle\langle x|\varphi\rangle\,dx, \quad \forall\, |\varphi\rangle \in \mathcal{Y}.$$

Другие формы:

$$\hat{\mathbb{1}} = \int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle\langle x|\,dx$$

$$\hat{q} = \int_{-\infty}^{+\infty} x\,|x\rangle\langle x|\,dx.$$

Обратимся теперь к оператору импульса $\hat{p}$. Его действие на $|\varphi\rangle \in \mathcal{Y}$ выражается в виде взятия производной:

$$\hat{p}|\varphi\rangle \to \frac{\hbar}{i}\frac{d\varphi(x)}{dx}.$$

Найдём обобщённый собственный вектор $|p\rangle \in \mathcal{Y}^\times$. Пусть этот функционал задаётся некоторым <u>ядром</u> $\Pi_p(x)$:

$$\forall\, |\varphi\rangle \in \mathcal{Y}: \quad \langle\varphi|p\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\varphi}(x)\,\Pi_p(x)\,dx$$

По определению действия $\hat{p}$ на $|p\rangle$:

$$\langle\varphi|\hat{p}|p\rangle = \langle\hat{p}\varphi|p\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d\varphi}{dx}\right)}\,\Pi_p(x)\,dx \quad (*)$$

С другой стороны: $\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle \Rightarrow$

$$\Rightarrow \langle\varphi|\hat{p}|p\rangle = p\langle\varphi|p\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\varphi}(x)\,p\,\Pi_p(x)\,dx$$

Интегрируя $(*)$ по частям и считая ядро $\Pi_p(x)$ функцией <u>медленного роста</u> (т.е. $\overline{\varphi}(x)\Pi_p(x) \xrightarrow[|x|\to\infty]{} 0 \;\; \forall\, \varphi(x) \in \mathcal{Y}$), получаем равенство:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\varphi}(x)\, \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} \Pi_p(x)\, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\varphi}(x)\, p\, \Pi_p(x)\, dx = 3 =$$

$$\forall\, \varphi(x) \in \mathcal{S} \Rightarrow \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\Pi_p(x) = p\,\Pi_p(x) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \boxed{\Pi_p(x) = A\, e^{\frac{ipx}{\hbar}},\quad A = \mathrm{const}}$$

Таким образом, функционал $|p\rangle$ сопоставляет $\forall\, |\varphi\rangle \in \mathcal{S}$ число, пропорциональное значению <u>фурье-образа</u> функции $\varphi(x)$ в точке p (точнее, комплексно-сопряжённое значение этого фурье-образа):

Выберем <u>нормировку</u> $A = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$:

$$\langle \varphi | p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\varphi}(x)\, e^{\frac{ipx}{\hbar}} \frac{dx}{\sqrt{2\pi\hbar}} = \overline{\tilde{\varphi}(p)}.$$

Нормировка $A = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ обеспечивает сохранение нормы:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{\varphi}(p)|^2\, dp = \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(x)|^2\, dx$$

Мы пользуемся тем, что на пространстве Шварца преобразование Фурье — взаимно-однозначное и непрерывное преобразование:

$$\tilde{\varphi}(p) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{ipx}{\hbar}} \varphi(x) \frac{dx}{\sqrt{2\pi\hbar}} \iff$$

$$\varphi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{ipx}{\hbar}} \tilde{\varphi}(p) \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

При этом, в силу равномерной по p сходимости интеграла легко показать, ~~что~~ что $\tilde{\varphi}(p) \in \mathcal{S}$ и

$$\left(i\hbar \frac{d}{dp}\right)^n \tilde{\varphi}(p) \leftrightarrow x^n \varphi(x)$$

$$p^n \tilde{\varphi}(p) \leftrightarrow \left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)^n \varphi(x)$$

Разложение единицы по обобщённым ~~век~~ собственным векторам $\hat{p}$:

$$|\varphi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |p\rangle\langle p|\varphi\rangle \, dp$$

позволит придать смысл и скалярному произведению $\langle x|p\rangle$:

$$\langle x|\varphi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x|p\rangle\langle p|\varphi\rangle \, dp$$

и

$$\varphi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x|p\rangle \tilde{\varphi}(p) \, dp \Rightarrow$$ из формулы для обратного преобразования Фурье:

$$\boxed{\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ipx}{\hbar}} = \boxed{\Pi_p(x)}}$$

Кроме того, вычисляя действие на $|\varphi\rangle$ функционала $|p'\rangle$, получаем и $\langle p'|p'\rangle$:

$$\langle p'|\varphi\rangle = \tilde{\varphi}(p') = \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \langle p'|p\rangle \tilde{\varphi}(p)\,dp}$$

$$\Downarrow$$

$$\boxed{\langle p'|p\rangle = \delta(p-p')}$$

Итог:

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x-x')$$

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(i\frac{px}{\hbar}\right) = \overline{\langle p|x\rangle}$$

$$\langle p|p'\rangle = \delta(p-p').$$

Эти соотношения позволяют легко получать различные выражения для скалярных произведений, операторов и т.п.

Проверим, например, согласованность очевидного равенства $\hat{\mathbb{1}}^2 = \hat{\mathbb{1}}$ и разложение по векторам $|x\rangle$:

$$\hat{\mathbb{1}} = \int |x\rangle\langle x|\,dx$$

$$\hat{\mathbb{1}}\cdot\hat{\mathbb{1}} = \left(\int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle\langle x|\,dx\right)\left(\int_{-\infty}^{+\infty} |y\rangle\langle y|\,dy\right) =$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty}\!\!\int |x\rangle \underbrace{\langle x|y\rangle}_{\delta(x-y)} \langle y|\,dx\,dy = \int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle\langle x|\,dx = \hat{\mathbb{1}}.$$

Разложение $\forall\,|\varphi\rangle \in \mathcal{Y}$ по обобщённым собственным векторам оператора $\hat{p}$ приводит к такой __статистической__ ~~ст~~ __интерпретации__ фурье-образа $\tilde{\varphi}$:

$$|\varphi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |p\rangle\, \tilde{\varphi}(p)\, dp \Rightarrow$$

$\tilde{\varphi}(p)$ – __плотность__ амплитуды вероятности распределения импульса в состоянии $\varphi(x)$, т.е. $|\tilde{\varphi}(p)|^2 dp$ – вероятность найти импульс в малом интервале dp вокруг значения p в состоянии, задаваемом функцией $\varphi(x)$ с единичной нормой: $\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(x)|^2 dx = 1$.

Напомним, что $|\varphi(x)|^2 dx$ – вероятность измерить значение __координаты__ в малом интервале dx вокруг x.

Зам. Приведённые выше свойства символов $|x\rangle$ и $|p\rangle$ позволяют __легко получать__ различные представления для векторов, операторов, скалярных произведений и т.п. путём формальных манипуляций с интегралами и обобщёнными функциями. Строгое обоснование этих манипуляций легко получить на основании свойств пространства Шварца и преобразования Фурье. Получим, например, "смешанное разложение единицы":

$$\hat{\mathbb{1}} = \underbrace{\hat{\mathbb{1}}}_{\text{разл. по } |x\rangle} \cdot \underbrace{\hat{\mathbb{1}}}_{\substack{\text{разложим} \\ \text{по } |p\rangle}} = \left(\int |x\rangle\langle x| dx\right)\left(\int |p\rangle\langle p| dp\right) =$$

$$= \iint_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle\langle x|p\rangle\langle p| dx\, dp = \iint_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle \frac{e^{\frac{ipx}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \langle p| dx\, dp$$

$$\Rightarrow \langle\psi|\varphi\rangle = \iint_{-\infty}^{+\infty} \langle\psi|x\rangle \frac{e^{\frac{ipx}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \langle p|\varphi\rangle dx\, dp =$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\psi}(x)\, \tilde{\varphi}(p) \frac{e^{\frac{ipx}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} dx\, dp \quad \text{и т.п.}$$

Рассмотрим теперь некоторые модели и свойства <u>одномерной квантовой механики</u>.

1° <u>Свободная частица в одном измерении</u>.

Классический гамильтониан $H = \frac{p^2}{2m}$ после квантования заменяется на самосопряжённый оператор $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$.

Как мы уже знаем, нормированных собственных векторов у этого $\hat{H}$ <u>нет</u>.

Рассмотрим координатное представление $\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$ и запишем уравнение Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(t,x),$$

где $\psi'' = \frac{d^2\psi}{dx^2}$.

Сделаем подстановку $\psi(t,x) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}}\varphi(x)$ и сведём задачу к стационарному уравнению Шредингера: $\boxed{E\varphi = \hat{H}\varphi} \Rightarrow$

$$\Rightarrow E\varphi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\varphi''(x)$$

$$\varphi''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\varphi(x) = 0$$

Видим, что для $E<0$ не существует решений в виде функций медленного роста (которые задавали бы функционал из S'), т.к. при $E<0$ $\varphi(x) \sim e^{\pm\sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar}}x}$ — быстро и неограниченно растёт либо при $x \to +\infty$, либо при $x \to -\infty$.

Для $E \geq 0$ введём обозначение:

$$\frac{2mE}{\cancel{\hbar}} = p^2 > 0 \Rightarrow \text{есть 2 решения}$$

$$\varphi_{\pm}(x) = A_{\pm}e^{\pm\frac{ipx}{\hbar}}, \quad A_{\pm} \text{ — константы.}$$

Уравнение Шредингера имеет 2 линейно-независимых решения в виде бегущих плоских волн:

$$\Psi_+(t,x) = A_+ \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(Et - px)\right)$$

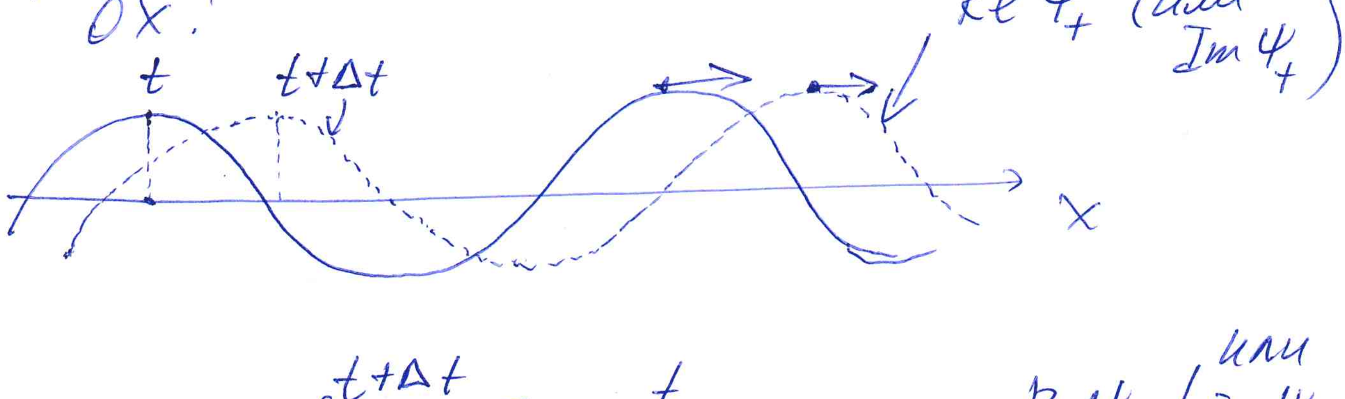
$$\Psi_-(t,x) = A_- \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(Et + px)\right),$$

где $\boxed{E = \frac{p^2}{2m}}$ — дисперсионное соотношение.

Заметим, что $\Psi_\pm(t,x)$ — собственные функции и для оператора $\hat{p}$:

$$\hat{p}\,\Psi_\pm(t,x) = \pm p\,\Psi_\pm(t,x).$$

Волны Ψ_+ и Ψ_- с течением времени распространяются в $+$ и $-$ направлениях оси OX:



$\boxed{10}$ Фазовая скорость волны — скорость смещения точек с <u>данной фазой</u>

определяется условием:

$$\boxed{\begin{aligned} &Et - px = \text{const} \quad \text{для } \Psi_+ \\ \text{и } &Et + px = \text{Const} \quad \text{для } \Psi_- \end{aligned}}.$$

$\Rightarrow\ v_{ph}^{\pm} = \pm \dfrac{E}{p} = \dfrac{p}{2m}$ — не отвечает физической связи импульса и скорости $v = \dfrac{p}{m}$ (v_{ph} в 2 раза меньше).

Это ещё одно отражение нефизичности обобщённых собственных векторов.

Воспользуемся линейностью уравнения Шредингера и сформируем из плоских волн так называемый "волновой пакет": нормируемое решение уравнения Шредингера, которое, в силу нормируемости, представляет физически реализуемое состояние. Итак, справедливо следующее утверждение:

$\boxed{Y}$ Функция

$$\Psi(t,x) = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\varphi}_0(p)\, e^{-\frac{i}{\hbar}(E_p t - px)} \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} \Bigg|_{E_p \equiv \frac{p^2}{2m}}, \qquad \boxed{A}$$

где $\tilde{\varphi}_0(p) \in \mathcal{S}$, представляет собой нормируемое решение уравнения Шредингера для свободной частицы. Функция $\tilde{\varphi}_0(p)$ есть фурье-образ начальных данных (начального состояния частицы):

$$\psi(0,x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\varphi}_0(p) e^{i\frac{px}{\hbar}} \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} = \varphi_0(x) \in \mathcal{S}.$$

Доказательство:

В силу быстрого убывания функции $\tilde{\varphi}_0(p) \in \mathcal{S}$ и равномерной сходимости всех интегралов, функцию $\boxed{A}$ можно дифференцировать по t и x и вносить соответствующие производные под знак интеграла. Тогда выполнение уравнения Шредингера на $\boxed{A}$ обеспечивается структурой экспоненциального множителя (дисперсионным соотношением $E = \frac{p^2}{2m}$):

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\psi(t,x) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}(E_p t - px)} \left(E_p - \frac{p^2}{2m}\right)\tilde{\varphi}_0(p) \cdot \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} = 0,$$

Рассмотрим вопрос об эволюции волнового пакета во времени. Для этого выберем в качестве начального состояния $|\varphi_0\rangle$ функцию из пространства Шварца $\mathcal{S}$ следующего вида:

$$|\varphi_0\rangle \to \varphi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{\sigma\sqrt{\pi}}}\exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2} + i\frac{p_0 x}{\hbar}\right).$$

$\sigma > 0$

Пользуясь формулой для Гауссова интеграла:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\exp(-ax^2+bx)\,dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}\,e^{b^2/4a} \qquad \operatorname{Re} a > 0, \quad b \in \mathbb{C}$$

легко выяснить смысл параметров x_0, p_0 и σ:

$$\langle q\rangle_{\varphi_0} = \langle\varphi_0|\hat{q}|\varphi_0\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\overline{\varphi_0(x)}\,x\,\varphi_0(x)\,dx = x_0$$ — среднее значение координаты в начальный момент.

$$\langle p\rangle_{\varphi_0} = \int_{-\infty}^{+\infty}\overline{\varphi_0(x)}\,\frac{\hbar}{i}\frac{d\varphi_0(x)}{dx}\,dx = p_0$$ — среднее значение импульса частицы

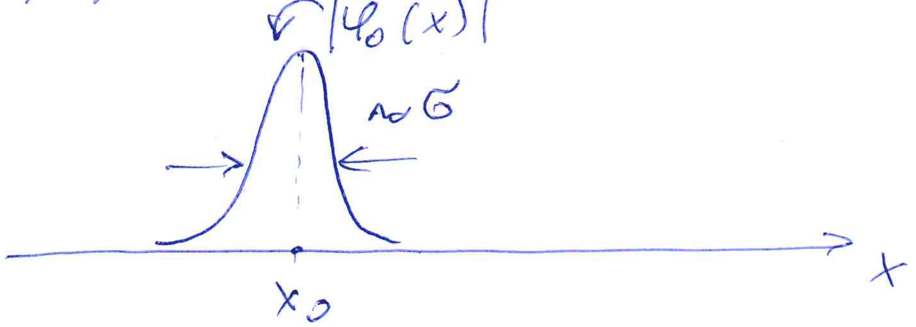
$$(\Delta_{\varphi_0} q)^2 = \langle q^2\rangle_{\varphi_0} - \langle q\rangle_{\varphi_0}^2 = \frac{\sigma^2}{2}$$ — дисперсия координаты в $t=0$.

$$(\Delta_{\varphi_0} p)^2 = \langle p^2\rangle_{\varphi_0} - \langle p\rangle_{\varphi_0}^2 = \frac{\hbar^2}{2\sigma^2}$$

Итак, $\varphi_0(x)$ это пример <u>когерентного</u> <u>состояния</u>:

$$\Delta_{\varphi_0}(q)\,\Delta_{\varphi_0}(p)=\frac{\hbar}{2},\ \text{где}$$

σ ~ "точность" локализации частицы вокруг среднего значения x_0, p_0 — среднее значение импульса:



Как меняются со временем x_0, p_0 и σ? Это можно получить прямым вычислением из [A] вычисляя Гауссовы интегралы, но вычисление достаточно громоздки. Однако, если мы не интересуемся точным видом $\Psi(t,x)$, а хотим найти зависимость от времени $\langle\hat{q}\rangle(t)$, $\langle\hat{p}\rangle(t)$ и $\Delta q(t)$, то ответ можно получить <u>проще</u>.

Воспользуемся эволюцией в картине Гейзенберга. В этой картине <u>состояние</u> системы от времени не

и остается равным $\varphi_0(x)$,
а операторы $\hat{q}$ и $\hat{p}$ эволюционируют
в соответствии с уравнениями Гейзенберга:

$$i\hbar \frac{d\hat{q}(t)}{dt} = [\hat{q}, \hat{H}]$$

$$i\hbar \frac{d\hat{p}(t)}{dt} = [\hat{p}, \hat{H}].$$

Подставляя $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ и учитывая $[\hat{q},\hat{p}] = i\hbar \mathbb{I}$,

получаем: $\begin{cases} \frac{d\hat{q}}{dt} = \frac{\hat{p}}{m} \\ \frac{d\hat{p}}{dt} = 0 \end{cases}$

Вычислим среднее от этих операторных равенств по постоянному состоянию φ_0:

$$\left\langle \frac{d\hat{q}}{dt} \right\rangle_{\varphi_0} = \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\varphi_0(x)} \frac{d\hat{q}}{dt} \varphi_0(x)\,dx = \frac{d}{dt} \langle \hat{q}(t) \rangle_{\varphi_0}$$

и

$$\left\langle \frac{\hat{p}}{m} \right\rangle_{\varphi_0} = \frac{p_0}{m} \; ; \quad \frac{d}{dt} \langle \hat{p}(t) \rangle_{\varphi_0} = 0$$

Учитывая, что $\langle \hat{q}(0) \rangle_{\varphi_0} = x_0$, получаем:

$$\begin{cases} \langle \hat{q} \rangle_{\varphi_0}(t) = \frac{p_0}{m} t + x_0 \\ \langle \hat{p} \rangle_{\varphi_0}(t) = p_0 \end{cases}$$

Итак, среднее значение координаты равномерно смещается со скоростью $\frac{p_0}{m} = v_0$. Это значение называется групповой скоростью пакета и совпадает с классическим значением скорости частицы массы m и импульса p_0. Напомним, что фазовые скорости плоских волн, из которых сложен наш пакет, имеют нефизическую связь с импульсом (они в 2 раза меньше: $v_{ph} = p/2m$).

Для определения эволюции "ширины" пакета (дисперсии координаты σ^2) поступим следующим образом.

Найдём вторую производную по времени от $\hat{q}^2(t)$.

Поскольку для любой квантовой ~~наблюда~~ ~~емой~~ (не зависящей явно от времени):

$$i\hbar \frac{d\hat{f}}{dt} = [\hat{f}, \hat{H}],$$

мы имеем:

$$i\hbar \frac{d\hat{q}^2}{dt} = [\hat{q}^2, \hat{H}] = \frac{i\hbar}{m}(\hat{p}\hat{q} + \hat{q}\hat{p}),$$

т.е. $$\frac{d\hat{q}^2}{dt} = \frac{1}{m}(\hat{p}\hat{q} + \hat{q}\hat{p}).$$

По-другому этот же результат получается с помощью правила Лейбница и уравнений движения для $\hat{q}$ и $\hat{p}$:

$$\frac{d}{dt}\hat{q}^2 = \left(\frac{d\hat{q}}{dt}\right)\hat{q} + \hat{q}\frac{d\hat{q}}{dt} = \frac{\hat{p}}{m}\hat{q} + \hat{q}\frac{\hat{p}}{m}.$$

порядок сомножителей менять нельзя!

Для второй производной получаем:

$$\frac{d^2\hat{q}^2}{dt^2} = 2\frac{\hat{p}^2}{m}$$

Усредним по постоянному состоянию $|\varphi_0\rangle$:

$$\langle\varphi_0|\frac{d^2\hat{q}^2(t)}{dt^2}|\varphi_0\rangle = \frac{d^2}{dt^2}\langle\hat{q}^2(t)\rangle_{\varphi_0} = \frac{2}{m}\langle\hat{p}^2\rangle_{\varphi_0}$$

В силу того, что $\hat{p}$ – интеграл движения, то все статистические характеристики $\hat{p}^2$ не зависят от времени $\Rightarrow$

$$\Rightarrow \langle\hat{p}^2\rangle_{\varphi_0} = \Delta^2_{\varphi_0}(p) + \langle\hat{p}\rangle^2_{\varphi_0} = \frac{\hbar^2}{2\sigma^2} + p_0^2$$

Таким образом:

$$\frac{d^2}{dt^2}\langle\hat{q}^2(t)\rangle_{\varphi_0} = \frac{\hbar^2}{m\sigma^2} + p_0^2\frac{2}{m}$$

$$\frac{d^2}{dt^2}\Delta^2_{\varphi_0}q(t) = \cancel{\frac{d^2}{dt^2}\left(\langle\hat{q}^2\rangle_{\varphi_0} - \langle\hat{q}\rangle^2_{\varphi_0}\right)}$$

$$= \frac{d^2}{dt^2}\left(\langle\hat{q}^2(t)\rangle_{\varphi_0} - \langle\hat{q}\rangle^2_{\varphi_0}\right)$$

$$\frac{d^2}{dt^2}\Delta^2_{\varphi_0} q(t) = \frac{\hbar^2}{m\sigma^2} + \frac{2p_0^2}{m} - \frac{d^2}{dt^2}\left(\frac{p_0}{m}t + x_0\right)^2 = \frac{\hbar^2}{m\sigma^2} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \boxed{\Delta^2_{\varphi_0} q(t) = \frac{\hbar^2}{2m\sigma^2}t^2 + \frac{\sigma^2}{2}}$$

Здесь мы воспользовались тем, что

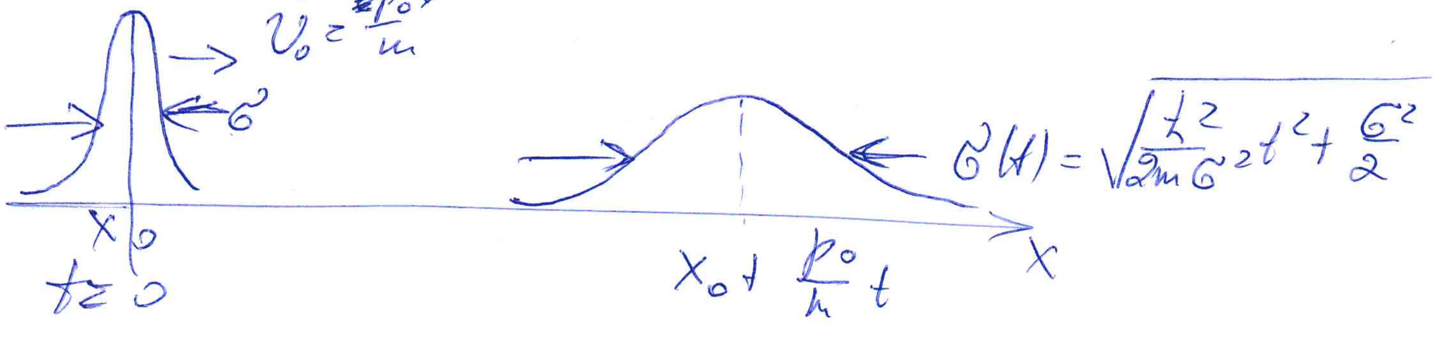
$$\frac{d}{dt}\Delta^2_{\varphi_0} q(t)\Big|_{t=0} = 0, \text{ т.к.}$$

$$\langle\varphi_0|\frac{d\hat{q}^2}{dt}|\varphi_0\rangle\Big|_{t=0} = \frac{1}{m}\langle\varphi_0|\hat{p}\hat{q} + \hat{q}\hat{p}|\varphi_0\rangle\Big|_{t=0} = \frac{2x_0p_0}{m}$$

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{q}\rangle^2_{\varphi_0} = \frac{d}{dt}\left(\frac{p_0 t}{m} + x_0\right)^2\Big|_{t=0} = \frac{2x_0p_0}{m} \Rightarrow$$

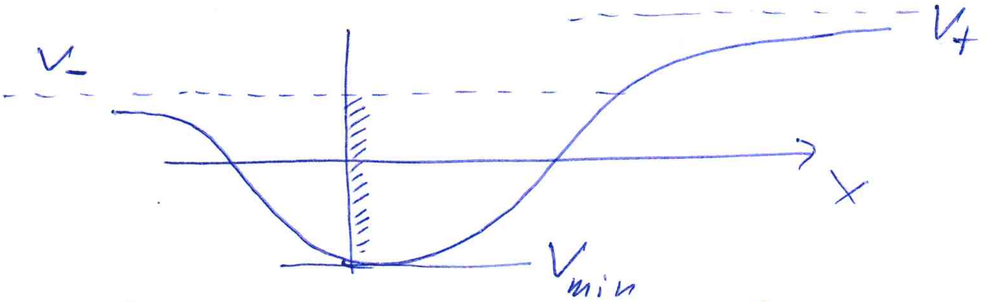
$$\Rightarrow \frac{d}{dt}\left(\langle\hat{q}^2\rangle_{\varphi_0} - \langle\hat{q}\rangle^2_{\varphi_0}\right)\Big|_{t=0} = 0.$$

Итак, дисперсия координаты свободной частицы квадратично возрастает ($\propto t^2$) течением времени и это "расплывание" пакета тем ~~[illegible]~~ быстрее, чем точнее в исходном состоянии измерена координата частицы:



2° Движение в потенциальном поле.

Классическая картина: $H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$



Частица может двигаться с энергией $E > V_{min}$. При определённых E (в нашем примере при $E < V_-$) движение финитно (происходит в ограниченной области R), при $E > V_-$ — частица может уходить на ∞.

После канонического квантования этой системе отвечает Гамильтониан:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{q}).$$

Уравнение Шредингера в координатном представлении:

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi}$$

Мы будем допускать $V(x)$ не только гладко зависящие от x, но и имеющие конечное число разрывов 1го рода (конечные скачки). В природе таких потенциалов не бывает, но с модельной точки зрения они удобны. Поэтому решения уравнения Шредингера $\psi(t,x)$ мы будем искать в классе ограниченных, непрерывно дифференцируемых функций, вторая производная по x существует и непрерывна почти всюду за исключением конечного числа точек, где ψ'' имеет разрыв 1го рода.

В предыдущих лекциях мы отмечали, что если $\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$, то оператор эволюции квантовой системы унитарен (сохраняет норму состояния):

$$i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = \hat{H}|\psi\rangle \Rightarrow |\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}|\psi(0)\rangle.$$

Детализируем это утверждение и получим уравнение непрерывности для плотности вероятности значений координаты.

$$\left.\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + V(x)\psi \\ &\Downarrow \text{компл. сопряжем} \\ -i\hbar \frac{\partial \bar\psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\bar\psi'' + V(x)\bar\psi \end{aligned}\right\} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow i\hbar\bar\psi\frac{\partial\psi}{\partial t} + i\hbar\psi\frac{\partial\bar\psi}{\partial t} \equiv i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2$$

$$\overset{\shortparallel}{-\frac{\hbar^2}{2m}}\left(\bar\psi\psi'' - \psi\bar\psi''\right) \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d}{dx}\left(\bar\psi\psi' - \psi\bar\psi'\right)$$

Обозначим $\rho(t,x) = |\psi(t,x)|^2$ – плотность вероятности распределение измерений координаты:

Тогда получаем:

$$\frac{\partial\rho(t,x)}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m}\frac{d}{dx}\left(\bar\psi\psi' - \psi\bar\psi'\right) =$$

$$= -\frac{d}{dx}\left(\frac{1}{2m}\left(\bar\psi\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\psi + \psi\overline{\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d\psi}{dx}\right)}\right)\right)$$

$$\boxed{\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{d}{dx}j_x(t,x) = 0} \qquad j_x \equiv \frac{1}{2m}\left(\bar\psi\frac{\hbar}{i}\psi' + \psi\overline{\left(\frac{\hbar}{i}\psi'\right)}\right)$$

Это называатся уравнением непрерывности.

Рассмотрим отрезок $[a,b]\subset\mathbb{R}$.
Интегрируя уравнение непрерывности по $[a,b]$, получим:

$$\underbrace{\frac{d}{dt}\int_a^b \rho(t,x)\,dx}_{} = j_x(t,b) - j_x(t,a)$$

вероятность обнаружить частицу на отрезке $[a,b]$ в момент t.

Эта формула легко обобщается на трёхмерный случай:

$$\boxed{\frac{\partial\rho}{\partial t} + \operatorname{div}\vec{j} = 0,}$$

$$\vec{j} = \frac{1}{2m}\left(\psi\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\bar{\psi} - \bar{\psi}\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\psi\right)$$

$\Downarrow$

$$\frac{d}{dt}\int\limits_{V\subset\mathbb{R}^3}\rho(t,\vec{r})\,d^3x = -\oint\limits_{\partial V}\vec{j}\,\vec{n}\,dS$$

– вероятность найти частицу в области V меняется вследствие потока вектора $\vec{j}$ через границу области V.

Исследуем теперь стационарное уравнение Шредингера: $\psi(t,x) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}}\varphi(x)$

$\Downarrow$

$$\hat{H}\varphi = -\frac{\hbar^2}{2m}\varphi''(x) + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x)$$

Обозначив $\mathcal{E} = \frac{2mE}{\hbar^2}$ $\quad U(x) = \frac{2m}{\hbar^2}V(x)$

получим дифф. уравнение второго порядка:

$$\boxed{\varphi''(x) + (\mathcal{E} - U(x))\varphi(x) = 0}$$

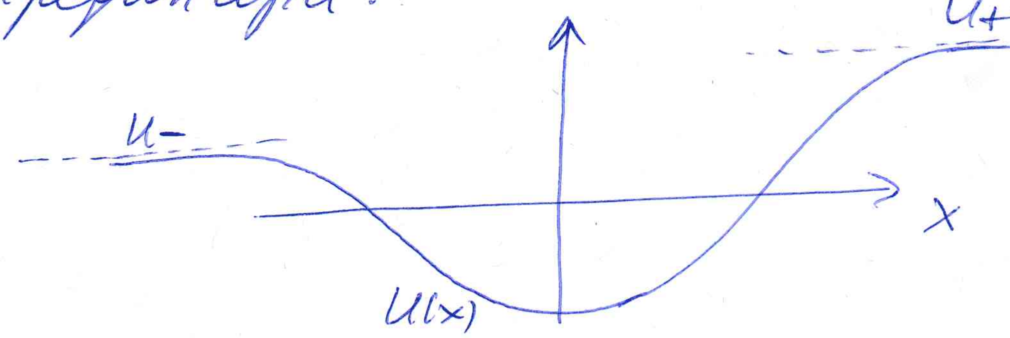
Это линейное дифф. уравнение второго порядка. Любое его решение – линейная комбинация 2х базисных линейно независимых решений $\varphi_1(x)$ и $\varphi_2(x)$

Мы будем считать, что потенциал $U(x)$ стремится к конечным постоянным значениям при $|x| \to \infty$:

$$U_+ = \lim_{x \to +\infty} U(x) \geq U_- = \lim_{x \to -\infty} U(x).$$

Из общей теории линейных дифференциальных уравнений относительно легко получить следующее утверждение о спектре и асимптотиках решений стационарного уравнения Шредингера.

$\boxed{У}$



(i) Если $\mathcal{E} > U_+$ то оба ∄ линейно независимых решения стац. уравнения Шредингера ограничены при $|x| \to \infty$ и осциллируют между двумя противоположными значениями:

$$-A \leq \varphi_{1,2}(x) \leq A \quad .$$
$$|x| \to \infty$$

Если $U(x)$ стремится к предельным значениям $U_\pm$ быстрее $1/x$ (т.е. $\exists$ несобственные интегралы
$$\int_{R_+}^{+\infty} (U(x) - U_+)\,dx \quad \text{и} \quad \int_{-\infty}^{-R_-} (U(x) - U_-)\,dx$$
для некоторых R_+ и R_-), то
$$\varphi(x) \underset{x \to \pm\infty}{\sim} A_\pm \sin\left(\sqrt{\mathcal{E} - U_\pm}\, x + \varphi_\pm\right)$$
Нормируемых решений нет, спектр непрерывный и двукратно вырожденный. Движение инфинитно: волновые пакеты уходят на ∞.

(ii) $U_- < \mathcal{E} < U_+$

$\exists$ одно решение, убывающее при $x \to +\infty$ не медленнее $\exp(-\sqrt{U_+ - \mathcal{E}}\, x)$ и осциллирующее при $x \to -\infty$.

Все остальные решения при $x \to +\infty$ растут не медленнее $\exp(\sqrt{U_+ - \mathcal{E}}\, x)$.

$\Rightarrow$ Ограниченное (но всё еще не нормируемое) решение одно. Спектр непрерывный и невырожденный.

Движение инфинитно в отрицательной

области x.

(iii) $\mathcal{E} < U_-$, то есть

$\mathcal{E} - U(x) < 0$ при $x \to \pm\infty$.

Решения могут существовать при отдельных, дискретных значениях $\mathcal{E}$. Если такое (ограниченное) решение $\exists$, то оно экспоненциально спадает и при $x \to +\infty$ и при $x \to -\infty$. Решение нормируемо, спектр дискретный и невырожденный. Такие решения называются связанными состояниями.

Рассмотрим теперь связанные состояния (дискретный спектр) и докажем теорему о нулях волновых функций дискретного спектра.

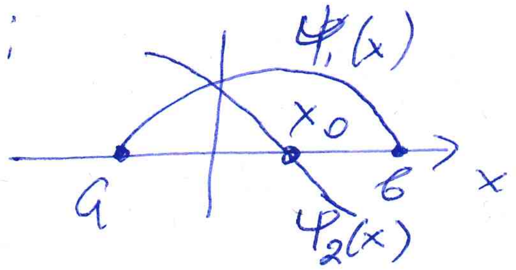
$\boxed{\text{T}}$ Пусть $\mathcal{E}_2 > \mathcal{E}_1$ — 2 значения дискретного спектра, $\psi_2(x)$ и $\psi_1(x)$ — соответствующие собственные состояния:

$$\psi''_{1,2}(x) + (\mathcal{E}_{1,2} - U(x))\,\psi_{1,2} = 0$$

Пусть ~~...~~ a и $b \in \mathbb{R}$ — 2 последовательных нуля функции $\psi_1(x)$ (отвечающей меньшей

Энергии): $\psi_1(a)=\psi_1(b)=0$,

$\psi_1(x)\neq 0\ \forall x\in(a,b)$;



Тогда $\exists\, x_0\in(a,b):\ \psi_2(x_0)=0$

Поскольку дискретный спектр невырожден, можно считать $\psi_{1,2}(x)$ — вещественными функциями.

Действительно, если они комплексны $\psi(x)=\alpha(x)+i\beta(x)$, то $\alpha(x)$ и $\beta(x)$ — решения с той же энергией, что и ψ $\Rightarrow$ (в силу невырожденности) $\alpha(x)=Const\,\beta(x)\Rightarrow\psi(x)=(Const+i)\,\beta(x)$, комплексную константу можно считать $=1$ (в силу линейности уравнения).

Пусть, например, $\psi_1(x)>0$ на интервале (a,b) (как на рисунке выше).

Тогда $\psi_1'(a)\geq 0$, $\psi_1'(b)\leq 0$.

Составим вронскиан $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$:

$$W(\psi_1,\psi_2)=\det\begin{pmatrix}\psi_1 & \psi_2\\ \psi_1' & \psi_2'\end{pmatrix}=\psi_1\psi_2'-\psi_2\psi_1'$$

$$\frac{dW(\psi_1,\psi_2)}{dx} = \psi_1\psi_2'' - \psi_2\psi_1'' = \{\text{подставим } \psi'' \text{ из ур. Шр.}\}$$

$$= \psi_1 \underbrace{(U(x)-\varepsilon_2)\psi_2}_{\text{"}\psi_2''\text{"}} - \psi_2 (U(x)-\varepsilon_1)\psi_1 =$$

$$= -(\varepsilon_2-\varepsilon_1)\psi_1(x)\psi_2(x).$$

Проинтегрируем это равенство по x от a до b:

$$W[\psi_1,\psi_2]\big|_{x=b} - W[\psi_1,\psi_2]\big|_{x=a} = -(\varepsilon_2-\varepsilon_1)\int_a^b \psi_1(x)\psi_2(x)\,dx$$

$$\underbrace{(\psi_1\psi_2' - \psi_2\psi_1')\big|_a^b}_{} = -\psi_2\psi_1'\big|_a^b = \psi_2(a)\psi_1'(a) - \psi_2(b)\psi_1'(b)$$

$\psi_1\psi_2' = 0$, т.к. $\psi_1(a)=\psi_1(b)=0$

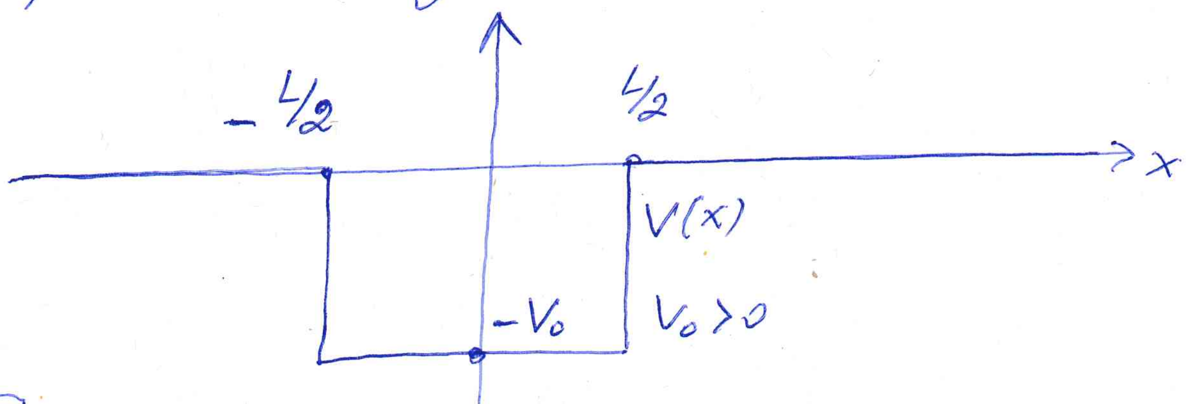
$$\psi_2(b)\psi_1'(b) - \psi_2(a)\psi_1'(a) = (\varepsilon_2-\varepsilon_1)\int_a^b \psi_1(x)\psi_2(x)\,dx.$$

Пусть $\psi_2(x)$ не имеет нулей на (a,b) и $\Rightarrow$ постоянна по знаку на (a,b). Но тогда в силу $\psi_1'(a)\geq 0$ $\psi_1'(b)\leq 0$ левая и правая части имеют разный знак (или слева 0, справа $\neq 0$ в вырожденных случаях).

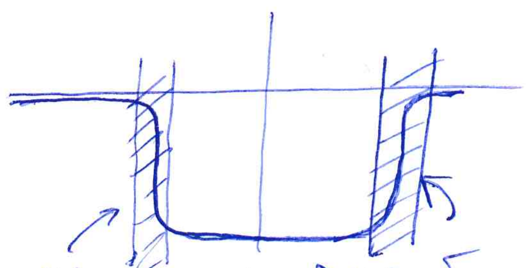
Итак, между последовательными нулями собственной функции дискретного спектра обязательно лежит хотя бы один нуль ближайшего решения с бо́льшей энергией. Иллюстрацию этого мы видели на примере гармонического осциллятора.

3°) Связанные состояния в прямоугольной потенциальной яме.

Рассмотрим модельный потенциал следующего вида:



$\boxed{\text{Зам}}$ Этот потенциал моделирует, например, взаимодействие электрона проводимости (т.е. перемещающегося внутри металла) с атомами металла: в глубине металлического слоя электрон практически свободен, а в узкой области вблизи границы действуют значительные силы, препятствующие выходу электрона из металла (работа выхода):



приграничный слой

В нашем примере потенциал симметричен: $V(x) = V(-x)$, $V_+ = V_- = 0$.

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < -\frac{L}{2} \text{ — область I} \\ -V_0 < 0, & -\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2} \text{ — область II} \\ 0, & x > \frac{L}{2} \text{ — область III} \end{cases}$$

Рассмотрим вопрос о связанных состояниях дискретного спектра: когда они есть, сколько их может быть, каким энергиям они отвечают.

Итак, считаем $E < 0$.

Заметим, что в силу симметрии потенциала, гамильтониан $\hat{H}$ коммутирует с оператором чётности $\hat{P}$:

оператор чётности

$\boxed{\text{О}}$ $\hat{P}\psi(x) = \psi(-x)$. Это самосопряжённый оператор в $L_2[\mathbb{R}]$.

Очевидно, что $\hat{P}^2 = \hat{\mathbb{1}}$ $\Rightarrow$ собственные значения $\hat{P}$ равны $+1$ или -1, отвечающие им собственные функции называются, соответственно, чётными и нечётными:

$$\hat{P}\psi_+ = \psi_+ \Rightarrow \psi_+(-x) = \psi_+(x) \text{ — }$$

— чётная ф-ция

$$P\psi_- = -\psi_- \Rightarrow \psi_-(-x) = -\psi_-(x) \text{ — }$$

— нечётная ф-ция.

$$\hat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \underline{\hat{P}\hat{H}}\psi = \underline{\hat{H}\hat{P}}\psi \quad \forall\psi, \text{ т.к. } V(x) = V(-x).$$

По этой причине собственные вектора $\hat{H}$ удобно искать среди функций <u>определённой чётности</u>, так как условие $[\hat{P}, \hat{H}] = 0$ означает, что $\hat{H}$ и $\hat{P}$ имеют общий набор собственных функций.

Ⓐ <u>Чётные собственные функции</u> =30=

Уравнение Шредингера надо решать в 3х областях $\mathbb{R}$ в соответствии с поведением $V(x)$ и обеспечить непрерывность решения и его первой производной на границах $x = -l/2$ и $x = l/2$. Для функций определенной чётности это достаточно сделать на одной из границ, тогда на другой границе всё "сошьётся" автоматически.

Итак, для $\underline{\varphi(x) = +\varphi(-x)}$:

$$\varphi'' + \frac{2m}{\hbar^2} E\varphi = 0$$ в области I: $x < -l/2$
и в области III: $x > l/2$.

$$\varphi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0)\varphi = 0$$ при $-l/2 < x < l/2$ – область II.
$V_0 > 0$.

Напомним, что $E < 0$. Введём константы $\varkappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2}|E| > 0$

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - |E|) > 0$$

Тогда в I и III: $\varphi'' - \varkappa^2\varphi = 0$

в II: $\varphi'' + k^2\varphi = 0$

Чётное ограниченное решение имеет вид:

$$\varphi(x) = \begin{cases} A\exp(\varkappa x) & x < -L/2 \\ B\cos(kx) & -L/2 < x < L/2 \\ A\exp(-\varkappa x) & x > L/2 \end{cases}$$

Константы A и B фиксируем условием непрерывности $\varphi(x)$ и $\varphi'(x)$ в точке $x = -L/2$:

$$\lim_{x\to -L/2-0}\varphi(x) = \lim_{x\to -L/2+0}\varphi(x) \Rightarrow A\exp(-\varkappa L/2) = B\cos\left(\frac{kL}{2}\right)$$

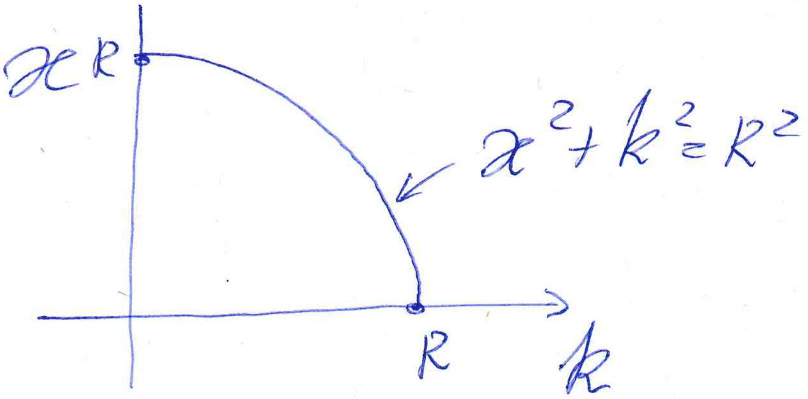
$$\lim_{x\to -\frac{L}{2}-0}\varphi'(x) = \lim_{x\to -L/2+0}\varphi'(x) \Rightarrow \varkappa A e^{-\frac{\varkappa L}{2}} = kB\sin\left(\frac{kL}{2}\right).$$

$$\Rightarrow \begin{cases} A = Be^{\frac{\varkappa L}{2}}\cos\frac{kL}{2} \\ B\left(\varkappa\cos\frac{kL}{2} - k\sin\frac{kL}{2}\right) = 0 \end{cases}$$

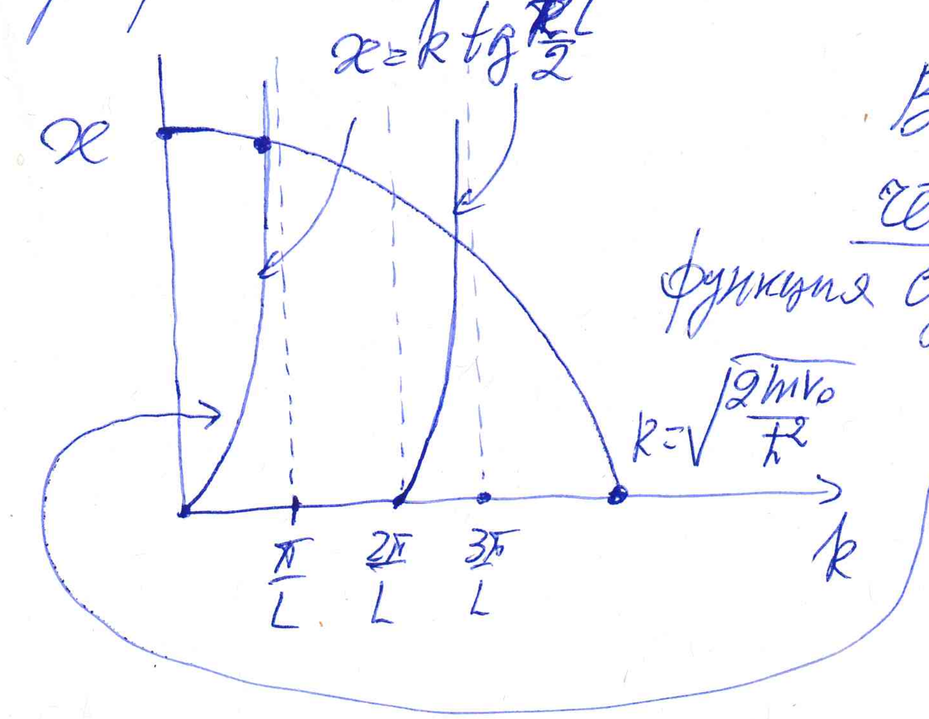
Ненулевое решение ($B \neq 0$) существует если $\boxed{\varkappa\cos\frac{kL}{2} = k\sin\frac{kL}{2}}$ — это условие на значение энергии $|E|$. Поскольку $\cos\frac{kL}{2} \neq 0$ (~~и~~ иначе не выполнено условие) то условие квантования энергии можно записать в виде

$$\boxed{\varkappa = k\,\mathrm{tg}\,\frac{kL}{2}} \qquad (\star)$$

Из определения $\varkappa$ и k следует равенство: $\varkappa^2+k^2=\frac{2mV_0}{\hbar^2}=K^2>0$ — это уравнение окружности. Нас интересует четверть $\varkappa>0$ $k>0$.

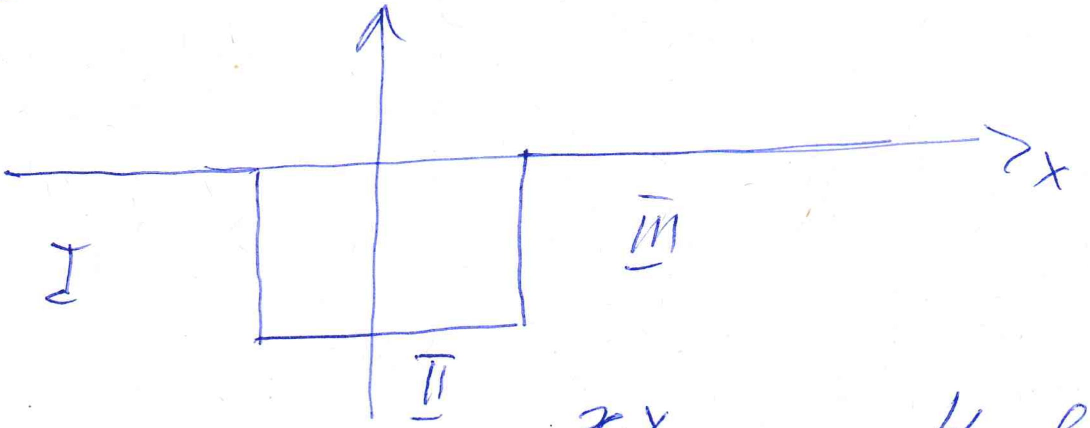


Теперь условие $(\star)$ может быть решено графически:



Видим, что <u>четная</u> собственная функция существует всегда (хотя бы одна) при <u>любых</u> V_0 и L.

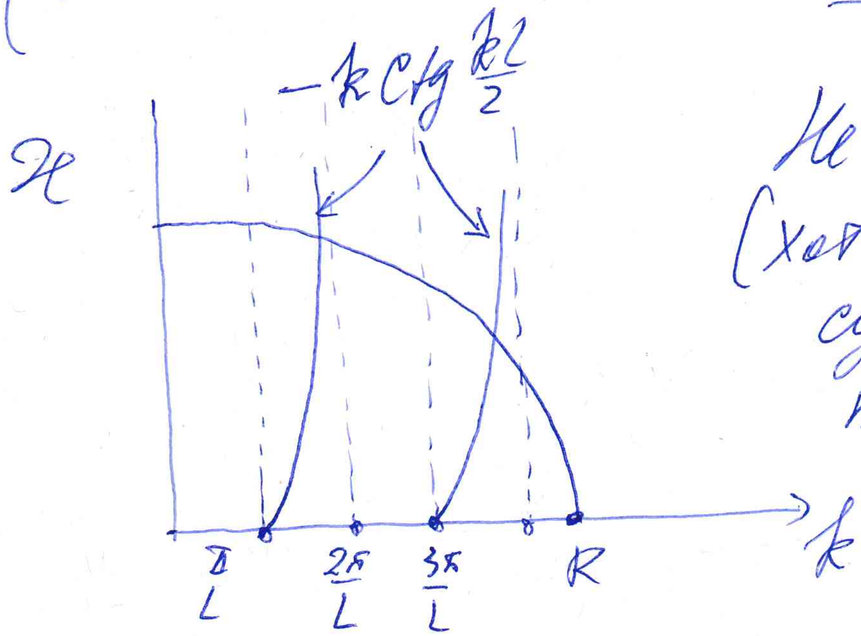
Б) Нечётные собственные функции.



$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\varkappa x}, & x<-L/2, \text{ в обл. I} \\ B\sin kx, & -L/2<x<L/2, \text{ в обл. II} \\ -Ae^{-\varkappa x}, & x>L/2, \text{ в обл. III} \end{cases}$$

Условие непрерывности в $x=-L/2$:

$$\begin{cases} Ae^{-\frac{\varkappa L}{2}} = -B\sin\frac{kL}{2} \\ \varkappa A e^{-\frac{\varkappa L}{2}} = kB\cos\frac{kL}{2} \end{cases} \Rightarrow \quad A = -Be^{\frac{\varkappa L}{2}}\sin\frac{kL}{2}, \quad \boxed{\varkappa = -k\,\mathrm{ctg}\frac{kL}{2}} \ \text{A}$$

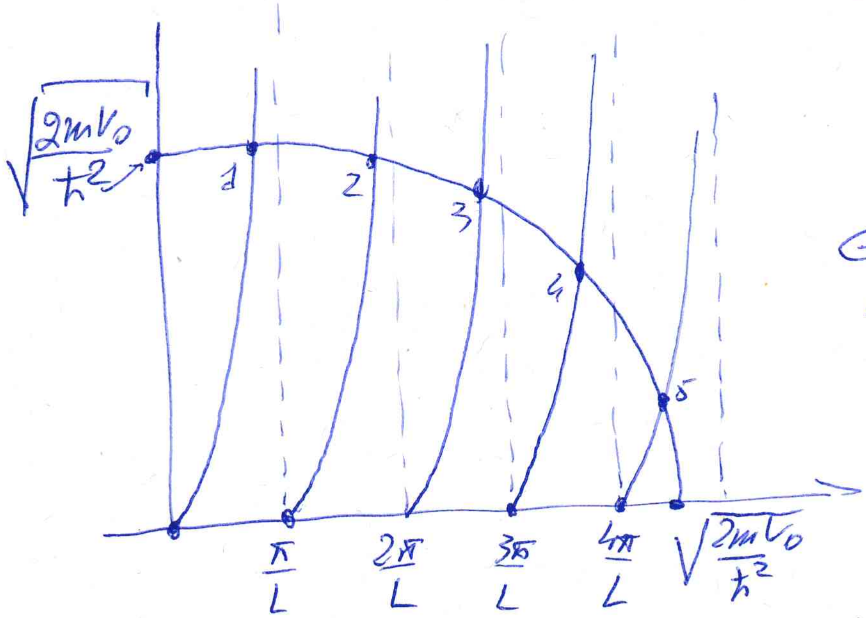


Нечётные уровни (хотя бы один) существуют только при $R=\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}>\frac{\pi}{L}$

Итак, значения энергии, при которых есть собственные функции $\hat{H}$ в чётной яме $V(x) = V(-x)$, определяются точками пересечения кривых $k\,\mathrm{tg}\frac{kL}{2}$ и $-k\,\mathrm{ctg}\frac{kL}{2}$ с окружностью

$$\varkappa^2 + k^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}; \qquad \varkappa^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - |E|).$$



На рисунке изображен случай, когда в яме 5 связанных состояний.

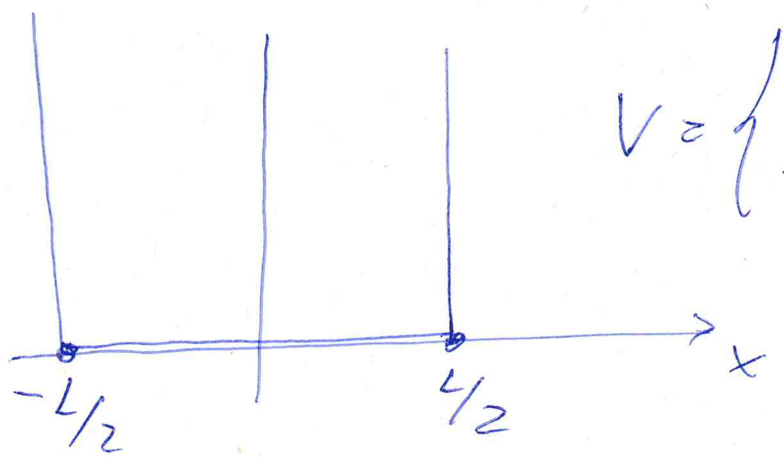
Энергиям E_1, E_3 и E_5 отвечают чётные собственные функции, E_2 и E_4 – нечётные собственные функции.

В общем случае число связанных состояний в яме определяется неравенствами:

$$(N-1) \le \frac{L}{\pi}\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} < N.$$

число связ. состояний.

(B) Бесконечно глубокая яма:



$$V = \begin{cases} 0 & -L/2 \le x \le L/2 \\ +\infty & x > L/2 \text{ или } x < -L/2 \end{cases}$$

Здесь условие на границах $-L/2$ и $L/2$:

$$\psi(L/2) = \psi(-L/2) = 0.$$

Чётные решения $\varphi_+ = A\cos k_+ x$

$$k_+^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E^{(+)}$$

$$\varphi(-L/2) = \varphi(L/2) = 0 \Rightarrow \cos\frac{k L}{2} = 0 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow k_n^{(+)} = \frac{2}{L}\left(\frac{\pi}{2} + n\pi\right) = \frac{\pi}{L}(2n+1)$$

$n = 0, 1, \ldots$

$$\Rightarrow E_n^{(+)} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{L^2}(2n+1)^2 \quad n = 0, 1, 2 \ldots$$

Нечётные решения: $\varphi_- = A\sin k^{(-)} x$

$$\sin k^{(-)}\frac{L}{2} = 0 \quad \Rightarrow k^{(-)} = \frac{\pi}{L}2n \quad n = 1, 2 \ldots$$

$$\Rightarrow E_n^{(-)} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{L^2}(2n)^2 \quad n = 1, 2, \ldots$$

Чётные и нечётные уровни чередуются. Кроме того, получаем ещё одну иллюстрацию теоремы о нулях связанных состояний: