Фізичні величини та оператори (продовження**)**

Власні функції (ВФ) та власні значення (ВЗ) операторів $\hat{\vec{r}}, \hat{\vec{p}}$ у координатному та в імпульсному зображенні

Відшукаємо ВФ і ВЗ оператора координати (у координатному зображенні).

Скористаємося визначенням дельта-функції Дірака

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x')\delta(x - x')dx'.$$

Цей вираз можемо розглядати, як розкладання довільної функції по ВФ оператора координати, тобто ВФ оператора координати – це дельта-функція $C\delta(x - x_0)$. Нормувальна константа

$$|C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0)\delta(x - x_0')dx = \delta(x_0 - x_0'); \quad |C|^2 \, \delta(x_0 - x_0') = \delta(x_0 - x_0');$$

$$|C|^2 = 1.$$

Власні значення та власні функції оператора координати

$$\lambda_x = x_0; \quad -\infty < x_0 < \infty; \quad \psi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0).$$

Спектр оператора координати – безперервний.

Відшукаємо ВФ та ВЗ оператора проекції імпульсу $\hat{p}_x$ в координатному зображенні

$$\hat{p}_x \psi(x) = \lambda_p \psi(x);$$

$$-i\hbar \frac{d\psi}{dx} = p\psi(x); \quad \frac{d\psi}{\psi} = \frac{ip}{\hbar}dx; \quad \psi_p(x) = Ce^{\frac{i}{\hbar}px};$$

$$|C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(p'-p)x} \, dx = \delta(p - p'); \quad |C|^2 \, 2\pi\hbar\delta(p - p') = \delta(p - p');$$

Скористаємося формулою

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{ikx} \, dx = 2\pi\delta(k).$$

Отримаємо нормувальну сталу $|C|=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$.

Таким чином, ВФ та ВЗ оператора імпульсу в координатному зображенні

$$\lambda_p = p_0; \quad -\infty < p_0 < \infty;$$

$$\psi_{p_0}(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}p_0 x}.$$

Перехід в імпульсне зображення також виконаємо для проекцій операторів $\hat{x},\ \hat{p}_x$

$$x(p,p') = (\psi_p, x\psi_{p'}) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}px} x e^{\frac{i}{\hbar}p'x} dx;$$

$$\hat{x}C(p) = \int_{-\infty}^{\infty} x(p,p')C(p')dp'.$$

Змінюємо двічі порядок інтегрування та знаходимо спочатку ядро оператора координати, а потім і сам оператор координати

$$x(p,p') = (\psi_p, x\psi_{p'}) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}px} x e^{\frac{i}{\hbar}p'x} dx;$$

$$\hat{x}C(p) = \frac{1}{2\pi\hbar}\frac{\hbar}{i}\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{i}{\hbar}px}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d}{dp'}\left(e^{\frac{i}{\hbar}p'x}\right)C(p')dp' =$$

$$= -\frac{1}{2\pi\hbar}\frac{\hbar}{i}\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{i}{\hbar}px}\int_{-\infty}^{\infty}\left(e^{\frac{i}{\hbar}p'x}\right)\frac{dC}{dp'}dp' = i\hbar\int_{-\infty}^{\infty} dp'\frac{dC}{dp'}\int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(p'-p)x}dx =$$

$$= i\hbar\int_{-\infty}^{\infty} dp'\frac{dC}{dp'}\delta(p'-p) = i\hbar\frac{dC}{dp}.$$

$$\hat{x} = i\hbar\frac{d}{dp}.$$

Оператор проекції імпульсу на будь-яку вісь декартової системи координат, як і будь-який оператор у своєму власному безперервному зображенні, – це просто оператор множення на p, а його ядро $p(p,p') = p'\delta(p-p')$.

Узагальнимо отримані результати у вигляді таблиці

Зображення:	Оператор радіус-вектора	Оператор імпульсу
Координатне (position representation)	$\hat{\vec{r}} = \vec{r}; \quad \vec{r} = (x, y, z);$ $\hat{x}_j = x_j; \quad j = 1,2,3;$	$\hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{r}};$ $\hat{p}_j = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_j}; \quad j = 1,2,3;$
Імпульсне (momentum representation)	$\hat{\vec{r}} = i\hbar\nabla_{\vec{p}} = i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{p}};$ $\hat{r}_j = i\hbar\frac{\partial}{\partial p_j}; \quad j = 1,2,3;$	$\hat{\vec{p}} = \vec{p}; \quad \vec{p} = (p_x, p_y, p_z);$ $\hat{p}_j = p_j; \quad j = 1,2,3;$

Оператор Гамільтона, стаціонарні стани

(Ці викладки вже були частково наведені у лекції № 3)

«Виведемо» ще раз РШ. Залежне від часу (нестаціонарне) РШ можна розглядати як наслідок принципу причинності у квантовій механіці: завдання ХФ у початковий момент часу $t = t_0$ й усіх взаємодій квантової системи дозволяє описати еволюцію квантової системи, тобто знайти ХФ при $t > t_0$. «Еволюція» означає зміну згодом, тобто похідну за часом від ХФ:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(q,t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(q,t),$$

яка визначається самою ХВ. Оператор $\hat{H}$ перетворив ХФ так, що $\hat{H}\Psi(q,t)$ дорівнює похідній від ХФ. Стала Планка забезпечує потрібну розмірність, а уявна одиниця – ермітовість оператора диференціювання.

Стаціонарні стани. Стаціонарне РШ

Нехай гамільтоніан явно не залежить від часу $\frac{\partial\hat{H}}{\partial t} = 0$. Розділимо змінні в нестаціонарному РШ:

$$\Psi(q,t)=\psi(q)\chi(t); \quad i\hbar\psi(q)\frac{d\chi(t)}{dt}=\chi(t)\hat{H}\psi(q);$$

$$\frac{\frac{d\chi(t)}{dt}}{\chi(t)}=\frac{\hat{H}\psi(q)}{\psi(q)}=E; \quad \chi(t)=Ce^{-\frac{iEt}{\hbar}};$$

Для координатної частини ХФ одержуємо рівняння на ХФ та ВЗ гамільтоніана

$$\hat{H}\psi(q)=E\psi(q).$$

ХФ стаціонарних станів

$$\Psi(q,t)=e^{-\frac{iEt}{\hbar}}\psi(q).$$

У стаціонарному стані імовірність не залежить від часу!

$$|\Psi(q,t)|^2=|\psi(q)|^2 .$$

Будь-яку ХФ можна розкласти в ряд Фур'є по ХФ стаціонарних станів

$$\Psi(q,t)=\sum_n C_n(t)e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}\psi_n(q).$$

Рівняння Шредінгера в імпульсному зображенні

Перехід в імпульсне зображення – це унітарне перетворення ХФ та операторів. Безвідносно до зображення РШ записують за допомогою запропонованих Діраком векторів стану «бра» $\langle\psi|$ і «кет» $|\psi\rangle$

$$\hat{H}|\psi\rangle=E|\psi\rangle$$

Гамільтоніан частинки в зовнішньому полі в координатному зображенні

$$\hat{H}=\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}+U(\hat{\vec{r}})=\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}+U(\vec{r});$$

Ядро оператора кінетичної енергії

$$T(p,p')=(\psi_p,T\psi_{p'})=\frac{1}{2m}\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{i\vec{p}\vec{r}}{\hbar}}(-i\hbar)^2\left(\frac{\partial}{\partial\vec{r}}\right)^2e^{\frac{i\vec{p}'\vec{r}}{\hbar}}d\vec{r}=$$

$$=\frac{\vec{p}'^2}{2m}\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}e^{\frac{i(\vec{p}'-\vec{p})\vec{r}}{\hbar}}d\vec{r}=\frac{p'^2}{2m}\delta(\vec{p}-\vec{p}'), \quad (d\vec{r}\equiv dV).$$

Оператор кінетичної енергії в імпульсному зображенні – це оператор множення

$$\hat{T}\psi(\vec{p}) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} T(\vec{p},\vec{p}')\psi(\vec{p}')d\vec{p}' = \frac{p^2}{2m}\psi(\vec{p}).$$

Ядро оператора потенціальної енергії

$$U(\vec{p},\vec{p}') = \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i(\vec{p}'-\vec{p})\vec{r}}{\hbar}} U(\vec{r})d\vec{r}$$

Стаціонарне РШ в імпульсному зображенні

$$\frac{p^2}{2m}\psi(\vec{p}) + \int\limits_{-\infty}^{\infty} U(\vec{p},\vec{p}')\psi(\vec{p}')d\vec{p}' = E\psi(\vec{p}).$$

Формально можемо записати

$$\frac{p^2}{2m}\psi(\vec{p}) + U\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{p}}\right)\psi(\vec{p}) = E\psi(\vec{p}).$$

Зазвичай залежність $U(\vec{r})$ досить складна, тому простіше вирішувати РШ у координатному зображенні.

Два приклади запису гамільтоніана в координатному та імпульсному зображенні.

Гамільтоніан гармонічного осцилятора має вигляд симетричний по координаті й імпульсу

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2x^2}{2};$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2x^2}{2}; \text{(position representation)}$$

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} - \frac{m\omega^2\hbar^2}{2}\frac{d^2}{dp^2}. \text{(momentum representation)}$$

Гамільтоніан частинки в однорідному полі

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + mgx;$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + mgx; \text{(position representation)}$$

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + imgh\frac{d}{dp}. \text{(momentum representation)}$$