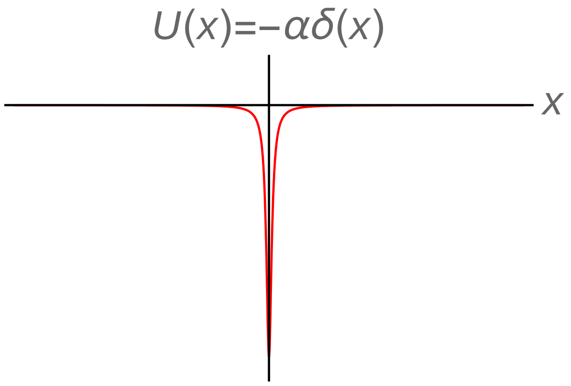
Рішення цієї задачі пропонується розібрати самостійно

В якості прикладу розв’язку РШ в імпульсному зображенні знайдемо **рівні енергії (E < 0) частинки в дельта-ямі** $U(x) = -\alpha\delta(x)$.



Одновимірне РШ в імпульсному зображенні

$$\frac{p^2}{2m}\psi(p) + \int_{-\infty}^{\infty} U(p,p')\psi(p')dp' = -|E|\psi(p);$$

$$U(p,p') = (\psi_p, U\psi_{p'}) = -\frac{\alpha}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i(p'-p)x}{\hbar}}\delta(x)dx = -\frac{\alpha}{2\pi\hbar}.$$

$$\frac{p^2}{2m}\psi(p) - \frac{\alpha}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(p')dp' = -|E|\psi(p);$$

$$\left(\frac{p^2}{2m} + |E|\right)\psi(p) = \frac{\alpha}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(p')dp'.$$

В імпульсному зображенні РШ стало інтегральним рівнянням

$$\psi(p) = \frac{1}{p^2 + 2m|E|}\frac{\alpha m}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(p')dp'.$$

Умова «самоузгодження» – аналог граничних умов у координатному зображенні дозволяє знайти рівні енергії

$$\cancel{\int_{-\infty}^{\infty}\psi(p)dp} = \frac{\alpha m}{2\pi\hbar}\left(\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{p^2 + 2m|E|}\right)\cancel{\left(\int_{-\infty}^{\infty}\psi(p')dp'\right)};$$

$$\left(\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{p^2 + 2m|E|}\right) = \frac{2\pi\hbar}{\alpha m}; \quad \oint\frac{dz}{(z+ip_0)(z-ip_0)} = \frac{2\pi\hbar}{\alpha m}; \quad p_0 = \sqrt{2m|E|}.$$

Обчислюємо інтеграл за допомогою теорії лишків (***Ли́шок*** (від фр. Résidu – ***лишок***, англ. residue, рос. вычет)). Згідно з формулою Коші інтеграл по замкненому контуру дорівнює $2\pi i\times\sum\mathrm{Res}$. Замикаємо контур у верхній напівпрощині. Тут є один простий полюс у точці $z=p_0$

$$\frac{2\pi i}{2ip_0}=\frac{2\pi\hbar}{\alpha m};\quad p_0=\frac{\alpha m}{\hbar};\quad E=-\frac{p_0^2}{2m}=-\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}.$$

ХФ в імпульсному зображенні (без нормування) вже знайдена:

$$\psi(p)=\frac{C}{p^2+2m|E|}=\frac{C}{p^2+p_0^2}=\frac{C}{p^2+\left(\frac{\alpha m}{\hbar}\right)^2}.$$

Зручніше знайти спочатку ХФ у координатному зображенні й нормувати її.

$$\psi(x)=\int_{-\infty}^{\infty}\psi(p)\psi_p(x)dp=\frac{C}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{\frac{ipx}{\hbar}}dp}{p^2+p_0^2}=\frac{C}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{\frac{ip|x|}{\hbar}}dp}{p^2+p_0^2}$$

$$\psi(x)=\frac{C}{\sqrt{2\pi\hbar}}\oint\frac{e^{\frac{iz|x|}{\hbar}}dz}{z^2+p_0^2}=\frac{C}{\sqrt{2\pi\hbar}}\oint\frac{e^{\frac{iz|x|}{\hbar}}dz}{(z+ip_0)(z-ip_0)}=$$

$$=\frac{C}{\sqrt{2\pi\hbar}}2\pi i\frac{e^{-\frac{p_0|x|}{\hbar}}}{ip_0}=C\left(\frac{\pi}{2\hbar}\right)^{1/2}\frac{1}{p_0}e^{-\frac{p_0|x|}{\hbar}}=Ae^{-\frac{p_0|x|}{\hbar}};\quad \kappa=\frac{p_0}{\hbar};\quad C\left(\frac{\pi}{2\hbar}\right)^{1/2}\frac{1}{p_0}=A;$$

$$\psi(x)=Ae^{-\kappa|x|}.$$

Перша похідна від ХФ має кінцевий скачок при x=0. Нормування

$$|A|^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{-2\kappa|x|}dx=1;\quad 2|A|^2\int_0^{\infty}e^{-2\kappa x}dx=1;\quad 2|A|^2\frac{1}{2\kappa}=1;$$

$$|A|=\sqrt{\kappa}.$$

$$C=A\left(\frac{2\hbar}{\pi}\right)^{1/2}\hbar\kappa=\left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2}(\hbar\kappa)^{3/2}.$$

Комутація операторів та результати вимірювання

Нагадаємо визначення комутатора: $[\hat{A},\hat{B}]=\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}$. Доведемо дві важливі теореми.

1. Якщо два оператори мають спільну систему ХФ, то вони між собою комутирують. Нехай $\hat{A}\psi_n=A_n\psi_n$, $\hat{B}\psi_n=B_n\psi_n$. Для ХФ виконується умова

$$\hat{A}\hat{B}\psi_n = B_n\hat{A}\psi_n = B_n A_n\psi_n; \quad \hat{B}\hat{A}\psi_n = A_n\hat{B}\psi_n = A_n B_n\psi_n;$$

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\psi_n = 0;$$

Це ж справедливо й для довільної функції, розкладеної в ряд Фур'є по спільним ХФ операторів $\hat{A}, \hat{B}$:

$$\psi = \sum_n C_n\psi_n; \quad [\hat{A}, \hat{B}]\psi = \sum_n C_n[\hat{A}, \hat{B}]\psi_n = 0.$$

2. Якщо два оператори між собою комутирують, то вони мають спільну систему ХФ. Нехай $\hat{A}\psi_n = A_n\psi_n$. Тоді

$$\hat{B}\hat{A}\psi_n = \hat{B}A_n\psi_n = A_n\hat{B}\psi_n; \quad \hat{B}\hat{A} = \hat{A}\hat{B};$$

$$\hat{A}\hat{B}\psi_n = A_n\hat{B}\psi_n, \Rightarrow, \hat{B}\psi_n = B_n\psi_n,$$

т. к. $\hat{B}\psi_n$ – це теж ХФ оператора $\hat{A}$, як і ψ_n з одним і тим же ВЗ A_n. Ці дві функції можуть відрізнятися тільки чисельним множником, отже $\hat{B}\psi_n = B_n\psi_n$, тобто ψ_n – ХФ оператора $\hat{B}$.

Таким чином, фізичні величини, що відповідають двом комутуючим операторам, вимірювані одночасно – одночасно мають певні значення. Наприклад, комутатор

$$[x_j, p_k] = i\hbar\delta_{jk}.$$

Різнойменні компоненти координат і імпульсів одночасно вимірні, а однойменні – ні. Це вже знаємо зі співвідношення невизначеності Гейзенберга.

Комутатор – це квантовий аналог дужок Пуассона в класичній механіці, а комутаційні співвідношення для координат і імпульсів аналогічні співвідношенням для дужок Пуассона канонічно сполучених величин.

Перехід до класичних дужок Пуассона

$$\{f, g\} = -\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial g}{\partial x_i} - \frac{\partial f}{\partial x_i}\frac{\partial g}{\partial p_i}\right); \quad [\hat{f}, \hat{g}] = \frac{\hbar}{i}\{f, g\}.$$

Нерівності Гейзеберга

Якщо два оператори не комутирують, то відповідні їм фізичні величини не можуть мати одночасно певні значення. Знайдемо нерівності, які зв'язують неточності (невизначеності) виміру таких двох величин.

Нагадаємо визначення середнього значення фізичної величини

$$\overline{A} = (\psi, \hat{A}\psi)$$

Середнє квадратичне

$$\overline{A^2} = (\psi, \hat{A}^2\psi)$$

Відхилення від середнього значення в теорії ймовірностей визначається за допомогою поняття дисперсії:

$$\overline{\Delta A^2} = \overline{\left(\hat{A} - \overline{A}\right)^2} = (\psi, \hat{A}^2\psi) - 2\overline{A}(\psi, \hat{A}\psi) + (\overline{A})^2 = \overline{A^2} - (\overline{A})^2.$$

Нехай комутатор операторів фізичних величин $\hat{A}, \hat{B}$ дорівнює $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$. Уявна одиниця забезпечує антиермітовість комутатора двох некомутуючих ермітових операторів. Вводимо неермітов допоміжний оператор

$$L = (\hat{A} - \overline{A}) + i\gamma(\hat{B} - \overline{B}).$$

Ермітово спряжений дорівнює

$$L^\dagger = (\hat{A} - \overline{A}) - i\gamma(\hat{B} - \overline{B}).$$

Побудуємо ермітов оператор $\hat{L}^\dagger \hat{L}$ і знайдемо його середнє значення

$$\overline{\hat{L}^\dagger \hat{L}} = (\psi, \hat{L}^\dagger \hat{L}\psi) = (\hat{L}\psi, \hat{L}\psi) = |\hat{L}\psi|^2 \geq 0.$$

Докладно

$$\overline{\hat{L}^\dagger \hat{L}} = \overline{\left((\hat{A} - \overline{A}) - i\gamma(\hat{B} - \overline{B})\right)\left((\hat{A} - \overline{A}) + i\gamma(\hat{B} - \overline{B})\right)} =$$

$$= \overline{\Delta A^2} + i\gamma\overline{[\hat{A}, \hat{B}]} + \gamma^2\overline{\Delta B^2} \geq 0.$$

$$\gamma^2\overline{\Delta B^2} - \gamma\overline{C} + \overline{\Delta A^2} \geq 0.$$

Квадратне рівняння не має дійсного коріня, якщо його дискримінант менше нуля:

$$\overline{C}^2 - 4\overline{\Delta A^2}\,\overline{\Delta B^2} \leq 0; \quad \overline{\Delta A^2}\,\overline{\Delta B^2} \geq \frac{\overline{C}^2}{4}.$$

$$\delta A \delta B \geq \frac{|\overline{C}|}{2}; \quad \delta A = \sqrt{\overline{\Delta A^2}}; \quad \delta B = \sqrt{\overline{\Delta B^2}}.$$

Для однойменних координати й проекції імпульсу $[\hat{x}_j, \hat{p}_j] = i\hbar.$ Отже, співвідношення невизначеності Гейзенберга для середньоквадратичних відхилень приймає вигляд

$$\delta x_j \delta p_j \geq \frac{\hbar}{2}, \quad j = 1, 2, 3\,(x, y, z)$$

ПОВНИЙ НАБІР ФІЗИЧНИХ ВЕЛИЧИН

Стан заданий, якщо задана його ХФ. ХФ виміряти не можна. Фізичний зміст має тільки квадрат модуля ХФ. Ми говоримо, що стан заданий, якщо задана певна сукупність квантовомеханічних (фізичних) величин.

Сукупність квантовомеханічних величин, завдання яких повністю визначає стан квантової системи, називається **повним набором** квантовомеханічних величин.

У класичній механіці для системи з N ступенями волі потрібно задати $2N$ величин (координат і імпульсів). У квантовій механіці для системи з N ступенями волі потрібно задати N величин (наприклад, N координат або N імпульсів) або будь-які N одночасно вимірних величин. ХФ системи, що описує дане стан буде ВФ операторів величин, що входять у повний набір, що відповідають даним ВЗ.

«Чистий» стан задається ХФ, яка є ВФ для повного набору.

«Змішаний» стан – стан без певної ХФ. У ньому задані лише ймовірності реалізації того або іншого «чистого» стану. Це неповний опис.