Представления в квантовой механике

О терминологии

Исторически в квантовой механике сложилась определенная терминология. Она не оптимальна, но используется во всех учебниках. Поэтому студент должен ее знать и понимать. В частности, термин "представление" применяется в квантовой механике для обозначения двух абсолютно различных понятий.

Во–первых, говорят о "представление Гейзенберга" , "представление Шредингера" или "представление взаимодействия". В данном контексте термин "представление" означает, что существует несколько подходов к описанию временно́й эволюции средних значений наблюдаемых величин квантовой механики $\langle\, f(t)\,\rangle_\psi$. В представлении Гейзенберга от времени зависят только операторы физическихй величин, но не вектора состояний, то есть $\langle\, f(t)\,\rangle_\psi = \left\langle\, \psi^{(H)}(0) \,\middle|\, \hat{f}^{(H)}(t) \,\middle|\, \psi^{(H)}(0)\,\right\rangle$. Эволюция операторов $\hat{f}^{(H)}(t)$ описывается уравнением Гейзенберга. В представлении Шредингера от времени зависят волновые функции системы, но не операторы. Тогда среднее можно записать в виде $\langle\, f(t)\,\rangle_\psi = \left\langle\, \psi^{(S)}(t) \,\middle|\, \hat{f}^{(S)}(0) \,\middle|\, \psi^{(S)}(t)\,\right\rangle$. Зависимость $\left|\, \psi(t)^{(S)}\,\right\rangle$ от времени задается нестационарным уравнением Шредингера. В представлении взаимодействия от времени зависят как волновые функции, так и операторы: $\langle\, f(t)\,\rangle_\psi = \left\langle\, \psi^{(I)}(t) \,\middle|\, \hat{f}^{(I)}(t) \,\middle|\, \psi^{(I)}(t)\,\right\rangle$. Кажущееся в этом случае усложнение решения компенсируется тем, что временна́я эволюция операторов $\hat{f}^{(I)}(t)$ описывается уравнением Гейзенберга для операторов свободных полей, а временна́я эволюция $\left|\, \psi^{(I)}(t)\,\right\rangle$ подчиняется уравнению Шредингера, где в качестве гамильтониана фигурирует не полный гамильтониан системы, а только его часть, отвечающая за взаимодействие. В ряде случаев это упрощает решение задачи. Например, для построения релятивистски инвариантной теории возмущений в квантовой теории поля с известным гамильтонианом взаимодействия, используется именно представление взаимодействия. Переход от одного передставления к другому осуществляется зависящим от времени унитарным преобразованием.

Во–вторых, помимо указанных выше представлений, в квантовой механике существуют "координатное педставление", "импульсное представление", "энергетическое представление" и целый ряд других. Эти представления не имеют ничего общего с представлениями, описывающих временну́ю зависимость средних значений. В рамках рассматриваемых представлений выбирается набор базисных векторов, по которому раскладывается вектор состояния любой физической системы. Как правило, в качестве базиса выберается набор собственных векторов какого–либо эрмитовского оператора, отвечающего наблюдаемой физической величине [1]. В каждом конкретном базисе или представлении (это, в данном случае слова – синонимы) находится явный вид операторов наблюдаемых физических величин и производятся вычисления. Если в качестве базиса выбран, например, набор векторов опрератора импульса, то говорят, что вычисления проводятся в импульсном представлении и операторы записываются также в импульсном представлении или, иначе, в p-представлении. Координатные представления операторов импульса и координаты получены при "выводе" стационарного и нестационарного уравнений Шредингера. Зная вид различных операторов и волновых функций в одном из таких представлений, легко получить вид этих операторов и волновых функций в любом другом представлении, что эквивалентно переходу от одного базиса к другому. **В данном разделе будет развита теория представлений именно в том смысле, в каком она описана в настоящем абзаце**.

Все представления квантовой механики рассматриваются с единой точки зрения в рамках дираковской формулировки квантовой теории. Обычно импульсное, координатное и другие представления применяются в рамках временно́го представления Шредингера.

Понятие единичного оператора

Переход от одного представления к другому облегчается, если использовать единичный оператор. Введем этот оператор. Для простоты сначала рассмотрим a-представление. Тогда

$$|\,\psi\,\rangle \,=\, \sum_i \psi(a_i)\,|\,a_i\,\rangle\,,$$

где $\langle\, a_j \,|\, a_i \,\rangle \,=\, \delta_{ji}$ и $|\,a_i\,\rangle$ - полный набор собственных векторов эрмитовского оператора $\hat{A}$, который, для простоты, обладает только дискретным спектром. Домножим разложение $|\,\psi\,\rangle$ на $\langle\, a_j\,|$. Получаем:

$$\langle\, a_j \,|\, \psi\,\rangle \,=\, \sum_i \psi(a_i)\,\langle\, a_j \,|\, a_i\,\rangle \,=\, \sum_i \psi(a_i)\,\delta_{ij} \,=\, \psi(a_j).$$

[1]Напомним, что собственные вектора любого эрмитовского оператора образуют базис в линейном гильбертовом пространстве.

Совокупность величин $\psi(a_j) = \langle\, a_j \mid \psi\,\rangle$ называется волновой функцией системы в "a–представлении". Таким образом

$$|\,\psi\,\rangle = \sum_i \psi(a_i)\,|\,a_i\,\rangle = \sum_i \langle\, a_i \mid \psi\,\rangle\,|\,a_i\,\rangle = \sum_i |\,a_i\,\rangle\langle\, a_i \mid \psi\,\rangle =$$

$$\left(\sum_i |\,a_i\,\rangle\langle\, a_i\,|\right)|\,\psi\,\rangle = \hat{1}_a\,|\,\psi\,\rangle\,.$$

Таким образом, единичный оператор $\hat{1}_a$ в a–представлении можно записать в виде

$$\hat{1}_a = \sum_i |\,a_i\,\rangle\langle\, a_i\,|\,. \tag{1}$$

пусть система имеет только непрерывный спектр. Тогда

$$|\,\psi\,\rangle = \int da\,\psi(a)\,|\,a\,\rangle\,,$$

где вектора непрерывного спектра нормированны на δ-функцию, то есть $\langle\,\tilde{a} \mid a\,\rangle = \delta(a-\tilde{a})$.

Задача. Показать, что для системы с непрерывным спектром единичный оператор можно представить в виде

$$\hat{1}_a = \int da\,|\,a\,\rangle\langle\, a\,|\,. \tag{2}$$

Задача. Пусть система обладает одновременно как дискретным, так и непрерывным сперктром. Показать, что в этом случае единичный оператор представим в виде

$$\hat{1}_a = \sum_i |\,a_i\,\rangle\langle\, a_i\,| + \int da\,|\,a\,\rangle\langle\, a\,|\,.$$

Собственные функции оператора $\hat{p}$ в x-представлении и собственные функции оператора $\hat{x}$ в p-представлении

Найдем явный вид собственных функций оператора импульса $\hat{p}$ в координатном представлении (x–представлении). Для простоты рассмотрим одномерный случай. Дальнейшие выкладки подробно демонстрируют, как от абстрактного представления Дирака в терминах векторов состояний в линейном гильбертовом пространстве переходить к практическим вычислениям волновых функций конкретных квантовых систем в заданном представлении.

Оператор импульса $\hat{p}$ имеет непрерывный спектр $|\,p\,\rangle$, базисные вектора которого нормированы условием $\langle\,\tilde{p} \mid p\,\rangle = \delta\,(p-\tilde{p})$. Аналогично для оператора координаты $\hat{x}$. Используя (2) можем написать, что

$$\hat{p}\,|\,p\,\rangle = p\,|\,p\,\rangle \Rightarrow \hat{p}\,\hat{1}_x\,|\,p\,\rangle = p\,\hat{1}_x\,|\,p\,\rangle \Rightarrow \int d\tilde{x}\,\hat{p}\,|\,\tilde{x}\,\rangle\langle\,\tilde{x} \mid p\,\rangle = p\int d\tilde{x}\,|\,\tilde{x}\,\rangle\langle\,\tilde{x} \mid p\,\rangle\,.$$

Величина $\langle\, x \,|\; p \,\rangle \;=\; \Psi_p(x)$ является собственной функцией оператора $\hat{p}$ в x-представлении. Таким образом

$$\int d\tilde{x}\, \hat{p}\; |\, \tilde{x} \,\rangle\; \Psi_p(\tilde{x}) \;=\; p \int d\tilde{x}\; |\, \tilde{x} \,\rangle\; \Psi_p(\tilde{x}).$$

Домножая это выражение на $\langle\, x \,|$ получаем:

$$\int d\tilde{x}\; \langle\, x \,|\, \hat{p} \,|\, \tilde{x} \,\rangle\; \Psi_p(\tilde{x}) \;=\; p \int d\tilde{x}\; \langle\, x \,|\; \tilde{x} \,\rangle\; \Psi_p(\tilde{x}). \tag{3}$$

Запись $\langle\, x \,|\, \hat{p} \,|\, \tilde{x} \,\rangle$ является ядром линейного оператора $\hat{p}$ в x-представлении. В одной из предыдущих лекций при "выводе" уравнения Шредингера было найдено, что в координатном представлении оператору импульса отвечает величина $-\, i\, \hbar\, \partial/\partial x$. Отсюда следует. что ядро оператора импульса в координатном представлении имеет вид

$$\langle\, x \,|\, \hat{p} \,|\, \tilde{x} \,\rangle \;=\; -\, i\hbar\, \frac{\partial}{\partial x}\, \delta\; (x - \tilde{x})\,. \tag{4}$$

Заметим, что для ядра линейного оператора $\hat{L}$ в книгах по математике обычно используют запись $L\,(x,\, \tilde{x})$ и действие действие $\hat{L}$ на произвольную функцию $\Psi(x)$ представляют в виде

$$\hat{L}\, \Psi(x) \;=\; \int d\tilde{x}\, L(x,\, \tilde{x})\, \Psi(\tilde{x}).$$

В обозначениях Дирака $\langle\, x \,|\, \hat{L} \,|\, \tilde{x} \,\rangle \;\equiv\; L(x,\, \tilde{x})$.

Пусть $\hat{C} \;=\; \hat{A}\, \hat{B}$ и все три оператора имеют лишь непрерывный спектр. Тогда очевидно, что ядро оператора $\hat{C}$ связано с ядрами операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ формулой

$$\langle\, x \,|\, \hat{C} \,|\, \tilde{x} \,\rangle \;=\; \int dy\; \langle\, x \,|\, \hat{A} \,|\, \tilde{y} \,\rangle\; \langle\, y \,|\, \hat{B} \,|\, \tilde{x} \,\rangle\,.$$

Эта формула назвается "правилом двух амплитуд" и играет ключевую роль в построении фейнмановской формулировки квантовой механики.

Задача. Показать, что ядро оператора $\hat{x}$ в x-представлении можно записать в виде

$$\langle\, x \,|\, \hat{x} \,|\, \tilde{x} \,\rangle \;=\; x\, \delta\, (x - \tilde{x})\,.$$

Задача. Используя "правило двух амплитуд" и результат предыдущей задачи, найти в x-представлении ядро оператора $\hat{x}^n$.

Из выражения (3) с учетом явного вида оператора $\hat{p}$ в x-представлении (4) следует, что

$$-i\hbar \int d\tilde{x}\, \frac{\partial}{\partial x}\, \delta\; (x - \tilde{x})\; \Psi_p(\tilde{x}) \;=\; p \int d\tilde{x}\, \delta\; (x - \tilde{x})\; \Psi_p(\tilde{x}).$$

После тривиального интегрирования по $d\tilde{x}$ получаем следующее дифференциальное уравнение на $\Psi_p(x)$:

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\,\Psi_p(x) \;=\; p\,\Psi_p(x). \tag{5}$$

Решением уравнения (5) служит экспонента вида

$$\langle\, x\,|\;p\,\rangle \;=\; \Psi_p(x) \;=\; N\,\mathrm{e}^{\mathrm{ipx}/\hbar},$$

где N-нормировочный множитель. Найдем N. Из нормировочного условия $\langle\, p\,|\;\tilde{p}\,\rangle \;=\; \delta\,(p-\tilde{p})$ оператора $\hat{p}$ получаем, что

$$\delta\,(p-\tilde{p}) \;=\; \langle\, p\,|\;\tilde{p}\,\rangle \;=\; \langle\, p\,|\;\hat{1}_x\,\hat{1}_{\tilde{x}}\;|\tilde{p}\,\rangle \;=\; \int dx\,d\tilde{x}\;\langle\, p\,|\;x\,\rangle\;\langle\, x\,|\;\tilde{x}\,\rangle\;\langle\,\tilde{x}\,|\;\tilde{p}\,\rangle \;=$$
$$\int dx\,d\tilde{x}\,\Psi^*_p(x)\,\delta\,(x-\tilde{x})\;\Psi_{\tilde{p}}(\tilde{x}) \;=\; \int dx\,\Psi^*_p(x)\,\Psi_{\tilde{p}}(x) \;=$$
$$|N|^2\int dx\mathrm{e}^{-\mathrm{ix(p-\tilde{p})}/\hbar} \;=\; 2\pi\hbar\;|\mathrm{N}|^2\int\frac{\mathrm{dy}}{2\pi}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{iy(p-\tilde{p})}} \;=\; 2\pi\hbar\;|\mathrm{N}|^2\,\delta\,(\mathrm{p}-\tilde{\mathrm{p}})\,.$$

При вычислениях было использовано следующее интегральное представление δ-функции

$$\delta(\zeta) \;=\; \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\eta}{2\pi}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\eta\zeta} \;=\; \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}\eta}{2\pi}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\eta\zeta}.$$

Таким образом, нормировочный коэффициент представим в виде

$$N \;=\; \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi},$$

где ϕ-произвольная ненаблюдаемая фаза, которую можно положить равной нулю. Таким образом, собственные функции оператора $\hat{p}$ в x-представлении есть

$$\langle\, x\,|\;p\,\rangle \;=\; \Psi_p(x) \;=\; \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{ipx}/\hbar}, \tag{6}$$

Собственные функции оператора $\hat{x}$ в p-представлении имеют вид

$$\Phi_x(p) \;=\; \langle\, p\,|\;x\,\rangle \;=\; (\langle\, x\,|\;p\,\rangle)^* \;=\; \Psi^*_p(x) \;=\; \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{ipx}/\hbar}. \tag{7}$$

Из (7) следует, что функция $\Phi_x(p)$ удовлетворяет уравнению

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\,\Phi_x(p) \;=\; x\,\Phi_x(p),$$

то есть в импульсном представлении оператор $\hat{x}$ действует по правилу

$$\hat{x}\,\Phi_x(p) \;=\; i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\,\Phi_x(p).$$

Задача. Показать, что в импульсном представлении ядра операторов $\hat{x}$ и $\hat{p}$ имеют вид

$$\langle\, p\,|\,\hat{x}\,|\,\tilde{p}\,\rangle \;=\; i\hbar\,\frac{\partial}{\partial p}\,\delta\,(p-\tilde{p})\,,$$
$$\langle\, p\,|\,\hat{p}\,|\,\tilde{p}\,\rangle \;=\; p\,\delta\,(p-\tilde{p})\,.$$

Задача. Найти ядро оператора $\hat{x}^n$ в p-представлении.

Общие формулы перехода между a– и b–представлениями

Рассмотрим a– и b–представления, которые обладают только непрерывным спектром. Тогда произвольный вектор состояния квантовой системы $|\,\psi\,\rangle$ можно разложить по базису следующим образом

$$|\,\psi\,\rangle \;=\; \int da\,\psi(a)\;|\,a\,\rangle \;=\; \int db\,\psi(b)\;|\,b\,\rangle\,,$$

где $\langle\, a\,|\;\tilde{a}\,\rangle \;=\; \delta(a-\tilde{a})$, $\left\langle\, b\,|\;\tilde{b}\,\right\rangle \;=\; \delta(b-\tilde{b})$ - нормированные собственные вектора некоторых эрмитовских операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$, то есть $\hat{A}\,|\,a\,\rangle \;=\; a\,|\,a\,\rangle$, $\hat{B}\,|\,b\,\rangle \;=\; b\,|\,b\,\rangle$. Коэффициенты $\psi(a) \;=\; \langle\, a\,|\;\psi\,\rangle$ и $\psi(b) \;=\; \langle\, b\,|\;\psi\,\rangle$ являются волновыми функциями квантовой системы в a– и b–представлениях соответственно.

Как перейти от a-представления к b-представлению и наоборот? Для этого надо уметь выражать $\psi(a)$ через $\psi(b)$ и по явному виду операторов в a-представлении уметь находить явный вид операторов в b-представлении.

Связь между волновыми функциями в различных представлениях

Сначала рассмотрим связь между волновыми функциями. Домножим выражение $|\,\psi\,\rangle \;=\; \int\, da\,\psi(a)\;|\,a\,\rangle$ на $\langle\, b\,|$. Тогда

$$\psi(b) \;=\; \langle\, b\,|\;\psi\,\rangle \;=\; \int da\,\psi(a)\;\langle\, b\,|\;a\,\rangle \;\equiv\; \int da\,\psi(a)\,\Psi_a(b), \tag{8}$$

где $\langle\, b\,|\;a\,\rangle \;\equiv\; \Psi_a(b)$ - собственные функции оператора $\hat{A}$ в b-представлении, явный вид которых получается из уравнения

$$\int d\tilde{b}\;\left\langle\, b\,\middle|\,\hat{A}\,\middle|\;\tilde{b}\,\right\rangle\;\Psi_a(\tilde{b}) \;=\; a\,\Psi_a(b). \tag{9}$$

и условия нормировки

$$\int db\,\Psi^*_{\tilde{a}}(b)\,\Psi_a(b) \;=\; \delta\,(a\;-\;\tilde{a})\,.$$

Уравнение (9) легко выводится из цепочки преобразований

$$\hat{A}\,|\,a\,\rangle \,=\, a\,|\,a\,\rangle \,\Rightarrow\, \hat{A}\,\hat{1}_{\tilde{b}}\,|\,a\,\rangle \,=\, a\,\hat{1}_{\tilde{b}}\,|\,a\,\rangle \,\Rightarrow\, \int d\tilde{b}\,\hat{A}\left|\,\tilde{b}\,\right\rangle\,\Psi_a(\tilde{b}) \,=\, a\,\Psi_a(b)\left|\,\tilde{b}\,\right\rangle.$$

Домножим последнее равенство на $\langle\,b\,|$ и с учетом условия $\left\langle\,b\,|\,\tilde{b}\,\right\rangle \,=\, \delta(b-\tilde{b})$ получим формулу (9).

Задача. Получить условие нормировки для функций $\Psi_a(b)$.

Задача. Как будет выглядеть уравнение (9) и условие нормировки, если операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ имеют только дискретный спектр?

Задача. Как будет выглядеть уравнение (9), если ядро оператора $\hat{A}$ в b-представлении имеет вид $\langle\,b\,|\,\hat{A}\,\left|\,\tilde{b}\,\right\rangle \,=\, A\,(b,\,\partial/\partial b)\;\delta\left(b\,-\,\tilde{b}\right)$?

По аналогии с формулой (8), можно найти, что

$$\psi(a) \,\equiv\, \langle\,a\,|\,\psi\,\rangle \,=\, \int db\,\psi(b)\,\Phi_b(a), \tag{10}$$

где $\Phi_b(a) \,\equiv\, \langle\,a\,|\,b\,\rangle \,=\, (\langle\,b\,|\,a\,\rangle)^* \,=\, \Psi_a^*(b)$ – собственные функции оператора $\hat{B}$ в a–представлении.

Задача. Написать, какому уравнению и какому условию нормировки удовлетворяют функции $\Phi_b(a) \,\equiv\, \langle\,a\,|\,b\,\rangle$.

Задача. Показать, что в согласии с определением нормы волновой функции

$$\int da\,\psi^*(a)\,\psi(a) \,=\, 1, \qquad \int db\,\psi^*(b)\,\psi(b) \,=\, 1.$$

Общие формулы (8)–(10) можно проиллюстрировать на конкретном примере перехода между координатным и импульсным представлениями. Для этого случая положим $\hat{A} \,\equiv\, \hat{x}$, $\hat{B} \,\equiv\, \hat{p}$. Тогда из формул (6) и (7) вытекает, что $\Psi_a(b) \,\equiv\, \Psi_p(x) \,=\, \mathrm{e}^{ipx/\hbar}/\sqrt{2\pi\hbar}$ и $\Phi_b(a) \,\equiv\, \Phi_x(p) \,=\, \mathrm{e}^{-ipx/\hbar}/\sqrt{2\pi\hbar}$. Разложение произвольного вектора состояния примет вид

$$|\,\psi\,\rangle \,=\, \int dp\,\psi(p)\,|\,p\,\rangle \,=\, \int dx\,\psi(x)\,|\,x\,\rangle\,,$$

а формулы (8):

$$\psi(x) \,=\, \int dp\,\psi(p)\,\Psi_p(x) \,=\, \int \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,\mathrm{e}^{ipx/\hbar}\,\psi(p)$$

и (10):

$$\psi(p) \,=\, \int dx\,\psi(x)\,\Phi_x(p) \,=\, \int \frac{dx}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,\mathrm{e}^{-ipx/\hbar}\,\psi(x)$$

представляют собой обычные прямое и обратное преобразования Фурье. Формула (9) совпадает с формулой (5).

Связь между операторами в различных представлениях

Пусть теперь $\left\langle\, b \,\middle|\, \hat{L} \,\middle|\, \tilde{b} \,\right\rangle$ – ядро линейного оператора $\hat{L}$ в b–представлении. Как будет выглядить ядро этого же оператора $\langle\, a \,|\, \hat{L} \,|\, \tilde{a} \,\rangle$ в a–представлении? С помощью единичных операторов запишем

$$\langle\, a \,|\, \hat{L} \,|\, \tilde{a} \,\rangle \;=\; \langle\, a \,|\, \hat{1}_b \,\hat{L}\, \hat{1}_{\tilde{b}} \,|\, \tilde{a} \,\rangle \;=\; \int db\, d\tilde{b}\; \langle\, a \,|\;\, b \,\rangle \left\langle\, b \,\middle|\, \hat{L} \,\middle|\, \tilde{b} \,\right\rangle \left\langle\, \tilde{b} \,\middle|\;\, \tilde{a} \,\right\rangle.$$

Тогда общая формула перехода от ядра оператора в b-представлении к ядру оператора в a-представлении имеет вид

$$\langle\, a \,|\, \hat{L} \,|\, \tilde{a} \,\rangle \;=\; \int db\, d\tilde{b}\, \Psi^*_a(b) \left\langle\, b \,\middle|\, \hat{L} \,\middle|\, \tilde{b} \,\right\rangle \Psi_{\tilde{a}}(\tilde{b}). \tag{11}$$

Проиллюстрируем формулу (11) на примере нахождения явного вида ядра оператора $\hat{x}$ в p-представлении по известному виду ядра этого же оператора в x-представлении. В x-представлении $\langle\, x \,|\, \hat{x} \,|\, \tilde{x} \,\rangle \;=\; x\, \delta\,(x - \tilde{x})$. Из (11) получаем

$$\begin{aligned}
&\langle\, p \,|\, \hat{x} \,|\, \tilde{p} \,\rangle \;=\; \int dx\, d\tilde{x}\, \Psi^*_p(x)\; \langle\, x \,|\;\, \hat{x} \;\,|\, \tilde{x} \,\rangle\, \Psi_{\tilde{p}}(\tilde{x}) \;= \\
&\frac{1}{2\pi\hbar} \int dx\, d\tilde{x}\, \mathrm{e}^{-ipx/\hbar}\, \mathrm{e}^{i\tilde{p}\tilde{x}/\hbar}\, x\, \delta(x - \tilde{x}) \;=\; \frac{1}{2\pi\hbar} \int x\, dx\, \mathrm{e}^{-ix(p-\tilde{p})/\hbar} \;= \\
&i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \int \frac{dy}{2\pi}\, \mathrm{e}^{-iy(p-\tilde{p})} \;=\; i\hbar \frac{\partial}{\partial p}\, \delta\,(p - \tilde{p})\,,
\end{aligned}$$

что совпадает с результатом формулы (8).

Задача. Зная выражение ядра оператора $\hat{p}$ в x-представлении, найти вид ядра этого оператора в p-представлении при помощи общего выражения (11).

Линейные эрмитовские операторы

Рассмотрим линейный эрмитовский оператор $\hat{f}$. Для простоты предположим, что данный оператор имеет только непрерывный спектр. Тогда $\hat{f}$ можно представить в виде

$$\hat{f} \;=\; \int df\; |\, f \,\rangle\; f\; \langle\, f \,|, \tag{12}$$

где $\hat{f}\,|\, f \,\rangle \;=\; f\,|\, f \,\rangle$ и $\left\langle\, f \,\middle|\;\, \tilde{f} \,\right\rangle \;=\; \delta\left(f \;-\; \tilde{f}\right)$. Действительно, поскольку собственные значения эрмитовского оператора являются действительными числами (если не помните, то докажите это самостоятельно!), то конструкция вида (12) автоматически обеспечивает выполнение условия $\hat{f}^\dagger \;=\; \hat{f}$.

Задача. Как изменится формула (12), если оператор $\hat{f}$ обладает как непрерывным, так и дискретным спектром?

Прямым следствием формулы (12), является формула для любой степени эрмитовского оператора $\hat{f}$:

$$\hat{f}^n = \int df \, |\, f \,\rangle \; f^n \; \langle\, f \,| \,, \tag{13}$$

Проиллюстрируем вывод (13) на примере $\hat{f}^2$. Имеем

$$\begin{aligned}\hat{f}^2 &= \hat{f} \int d\tilde{f} \, \Big|\, \tilde{f} \,\Big\rangle \; \tilde{f} \; \Big\langle\, \tilde{f} \,\Big| = \int df \, d\tilde{f} \, |\, f \,\rangle \, f \, \Big\langle\, f \,|\, \tilde{f} \,\Big\rangle \, \tilde{f} \, \Big\langle\, \tilde{f} \,\Big| \\ &= \int df \, d\tilde{f} \, \delta \Big(f - \tilde{f} \Big) \, |\, f \,\rangle \, f \, \tilde{f} \, \Big\langle\, \tilde{f} \,\Big| = \int df \, |\, f \,\rangle \; f^2 \; \langle\, f \,| \,,\end{aligned}$$

что и требовалось доказать.

Поскольку любую гладкую функцию можно разложить в ряд Тейлора, то пользуясь формулой (13) можно определить функцию F от эрмитовского оператора $\hat{f}$ по формуле

$$\int df \, |\, f \,\rangle \; F(f) \; \langle\, f \,| \equiv F(\hat{f}). \tag{14}$$

Задача. Может ли использоваться формула (14) для определения функции F от произвольного линейного оператора $\hat{L}$?

Задача. Каков результат действия оператора $\sin(\hat{f})$ на состояние квантовой системы $|\, \psi \,\rangle$, которое раскладывается по базису $|\, f \,\rangle$ следующим образом: $|\, \psi \,\rangle = \int df \; \cos(f) \; |\, f \,\rangle$?

Выражения для вероятностей

Пусть оператор $\hat{A}$ обладает только дискретным спектром. Тогда любое состояние квантовой системы может быть разложено по базису

$$|\, \psi \,\rangle = \sum_i \psi(a_i) \; |\, a_i \,\rangle$$

и вероятность обнаружить систему в состоянии $|\, a_i \,\rangle$ после измерения есть

$$w_{a_i} = |\psi(a_i)|^2 \,. \tag{15}$$

Если оператор $\hat{A}$ обладает непрерывным спектром и имеет место разложение

$$|\, \psi \,\rangle = \int da \, \psi(a) \; |\, a \,\rangle \,,$$

то величина $|\psi(a)|^2$ не имеет физического смысла. В самом деле, если измеряется, например, импульс частицы, то в эксперименте он всегда получается с некоторой ошибкой Δp, то есть измеряется совокупная вероятность, что частица имеет значение импульса в интервале от p до $p + \Delta p$. [2]

Таким образом, в случае непрерывного спектра, имеет физический смысл рассматривать вероятность частице попасть в промежуток спектра между a и $a + da$, что записывается как

$$dw_{a,\,a+da} \;=\; |\psi(a)|^2 \; da. \tag{16}$$

Задача. Как выглядит нормировка вероятности, если оператор $\hat{A}$ обладает только дискретным, только непрерывным или смешанным дискретным и непрерывным спектрами?

Задача. Приведите примеры квантовых систем, которые обладают смешанным спектром.

Задача. Вычислить $dw_{x,\,x+dx}$ и $dw_{p,\,p+dp}$ для свободной частицы и одномерного гармонического осциллятора. Каков физический смысл полученных результатов?

Задача*. Ядро атома трития испытало β–распад ${}^3H \;\to\; {}^3He \,+\, e^- \,+\, \bar{\nu}_e$, в результате которого атом трития превратился в ион гелия. Какова вероятность, что в результате этого процесса электрона атомной оболочки перейдет в возбужденное состояние, если до β–распада трития электрон находился в невозбужденном состоянии?

Стационарное уравнение Шредингера в различных представлениях

В формулировке Дирака стационарное уравнение Шредингера записывается в виде

$$\hat{H}\,|\,\psi\,\rangle \;=\; E\,|\,\psi\,\rangle\,.$$

Само посебе данное уравнение лишь указывает на то, что вектор $|\,\psi\,\rangle$ является собственным вектором гамильтониана системы. Никакой возможности вычислить энергетический спектр системы и ее волновые функции не имеется. Такая возможность появляется только в определенном представлении, когда указан явный вид гамильтониан системы.

[2]Для дискретного спектра это, очевидно, не имеет места, поскольку если эксперимент может различить, например, два соседних уровня энергии атома, то ошибка в измерении энергии по определению много меньше расстояния между уровнями. В противном случае, экспериментатор наблюдает не дискретный, а непрерывный спектр.

Из формулы (9) следует, что в a-представлении системы с непрерывным спектром стационарное уравнение Шредингера имеет вид

$$\int d\tilde{a}\ \langle\, a \,|\, \hat{H} \,|\, \tilde{a} \,\rangle\ \psi(\tilde{a}) \,=\, E\,\psi(a).$$

Задача. Что изменится, если система обладает смешанным спектром?

В качестве примера рассмотрим одномерную задачу для частицы во внешнем потенциальном поле. Гамильтониан имеет вид $\hat{H} \,=\, \hat{p}^2/2m \,+\, V(\hat{x})$. В координатном представлении

$$\begin{aligned}
&\langle\, x \,|\, V(\hat{x}) \,|\, \tilde{x} \,\rangle \,=\, V(x)\,\delta\,(x \,-\, \tilde{x})\,,\\
&\left\langle\, x \,\middle|\, \frac{\hat{p}^2}{2m} \,\middle|\, \tilde{x} \,\right\rangle \,=\, \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 \delta\,(x \,-\, \tilde{x}) \,=\, -\,\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\partial^2}{\partial x^2}\,\delta\,(x \,-\, \tilde{x})\,.
\end{aligned}$$

Тогда в координатном представлении уравнение Шредингера превратится в дифференциальное уравнение

$$\left(-\,\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\partial^2}{\partial x^2} \,+\, V(x)\right)\psi(x) \,=\, \psi(x),$$

которое при заданной функции $V(x)$ можно решить аналитически или численно.

Задача. В координатном представлении дан гамильтониан $\hat{H} \,=\, \hat{p}^2/2m + V(x)$. Показать, что стационарное уравнение Шредингера в импульсном представлении в этом случае будет иметь вид

$$\frac{p^2}{2m}\,\psi(p) \,+\, \int \frac{d\tilde{p}}{2\pi\hbar}\,V(p-\tilde{p})\,\psi(\tilde{p}) \,=\, E\,\psi(p),$$

где

$$V(p-\tilde{p}) \,=\, \int dx\,\mathrm{e}^{-ix(p-\tilde{p})}\,V(x).$$