II. МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

1.Пространство состояний, волновые функции.

Терминология. Волновая функция – всякая комплекснозначная функция $\psi(\bar{r})$, определенная во всем пространстве $\mathbb{R}^3$ или в какой-то её области $D \subset \mathbb{R}^3$ и удовлетворяющая стандартным требованиям:

ОДНОЗНАЧНОСТЬ, НЕПРЕРЫВНОСТЬ, ОГРАНИЧЕННОСТЬ.

Часто будем рассматривать волновые функции $\psi(x)$ одной переменной x, заданные на одной прямой $\mathbb{R}$ или на каком-то интервале $(a, b) \subset \mathbb{R}$.

Вопрос 1. Какие из перечисленных функций являются волновыми функциями?

А). e^{φ} , Б). $e^{i\pi\varphi}$ В). $e^{2i\varphi}$;

Г). 1 на (–2, +2) , Д). $\varepsilon(x) = \begin{cases} -1, & x \le 0 \\ +1, & x > 0 \end{cases}$ на (–1, +1);

Е). x^n на R, на (–1, +1), Ж). e^{-x} на R , на (0, + ∞), на (– ∞ , 0).

З). e^{ix} на R , на (– π , π).

Ответ: В, Г, Е2, Ж2, з1, з2.

Терминология:

а. $\int \varphi^*(\bar{r})\psi(\bar{r})d\tau \equiv (\varphi, \psi)$ – скалярное произведение;

б. $\sqrt{(\psi,\psi)} \equiv \|\psi\|$ – норма функции ψ;

в. $(\varphi,\psi) = 0$ – функции φ и ψ ортогональны.

Вопрос 2. Образует ли множество волновых функций линейное пространство? Да.

Вопрос 3. Какова размерность этого пространства?

Р е ш е н и е

Докажем, что она равна бесконечности. Рассмотрим систему мономов $1,\ x,\ x^2, \ldots, x^N$ на интервале (–1, +1) и покажем, что они линейно независимы при **любом N.** Пусть

$$a_0 \cdot 1 + a_1 \cdot x + a_2 \cdot x^2 + \ldots + a_N x^N = 0$$

Полагая $x = 0$, получим $a_0 = 0$. Дифференцируя и полагая $x = 0$, получим $a_1 = 0$, и так далее.

Вопрос 4. Какими свойствами обладает операция (φ,ψ) ?

Ответ. Из определения (φ, ψ) и из свойств интеграла следует:

1). $(\varphi\ ,\ \alpha\psi\ ) = \alpha\ (\varphi , \psi)$: линейность по второму аргументу;
2). $(\varphi\ ,\ \psi_1 + \psi_2) = (\varphi , \psi_1) + (\varphi , \psi_2)$;
3). $(\varphi\ ,\ \psi) = (\psi\ ,\ \varphi)^*$: эрмитовость;
4). $(\psi,\ \psi) \geq\ 0$: $(\psi , \psi) = 0 \Leftrightarrow \psi(x) = 0$ – положительная определенность.

Вопрос 5. Как называется операция (φ,ψ) со свойствами 1) – 4) ?
Скалярное произведение.
Конечномерное линейное пространство со скалярным произведением?
Евклидовым, эрмитовым или унитарным.
Бесконечномерное?
Гильбертовым.

Вопрос 6. Чему равно $(\alpha\,\varphi, \psi)$? Получить ответ двумя способами – из определения

(φ,ψ) и из его свойств.

Ответ: $(\alpha\,\varphi, \psi) = \alpha^*(\varphi,\psi)$.

Вопрос 7 . Чему равны нормы волновых функций из вопроса 1.

Ответ: В). $\sqrt{2\pi}$, Г2). 2, е2). $\sqrt{\dfrac{2}{2n+1}}$, Ж2) $\dfrac{1}{\sqrt{2}}$,
З1). ∞ ,з2). $\sqrt{2\pi}$.

Вопрос 8. Чему равна норма функции $\varphi(x)\big/\|\varphi\|$?

Ответ: 1.

Вопрос 9. Чему равна норма функции $e^{i\alpha}\varphi(x)$ ($\alpha \in \mathbb{R}$) ?
Ответ: $\|\varphi\|$.

Вопрос 10. Являются ли взаимноортогональными при разных n функции:

А). x^n на $(-1, +1)$;
Б). $e^{i\pi n\frac{x}{l}}$ на $(-l , +l)$?

Ответ: А) нет, Б) да.

Вопрос 11. Ортогональны ли функции e^{ikx} при разных $k \in \mathbb{R}$?

Ответ: ДА: $\left(\varphi_k , \varphi_{k'}\right) = \int\limits_{\mathbb{R}} e^{i(k'-k)x}dx = 2\pi\delta(k'-k) = 0$

<u>Терминология:</u> Если $\|\psi\| < \infty$, то волновая функция называется квадратично интегрируемой, или нормируемой (именно такие функции образуют гильбертово пространство). Последнее название связано с тем, что путем умножения на константу (какую?!) её норму можно сделать равной 1. Тогда она будет именоваться нормированной. Если $\|\psi\| = \infty$, то волновая функция называется ненормируемой (она не принадлежит гильбертовому пространству).

<u>Вопрос 12.</u> Какие из волновых функций вопроса 1 являются нормируемыми?
Ответ: все волновые функции, кроме з1.

<u>Вопрос 13.</u> Как из них сделать нормированные функции и чему они равны?
Ответ даёт совместное применение результатов вопросов 7 и 8.

<u>Вопрос 14.</u> Нормировать функции

А). $e^{i\pi n\frac{x}{l}}$ на $(-l, +l)$;

Б). $\mathrm{Sin}\dfrac{\pi nx}{a}$ на $(0, a)$.

Ответ: А). $\dfrac{1}{\sqrt{2l}}e^{i\pi n\frac{x}{l}}$ Б) $\sqrt{\dfrac{2}{a}}\,\mathrm{Sin}\dfrac{\pi nx}{a}$

<u>Вопрос 15.</u> Что такое базис?

Ответ: набор функций $\{\psi_n\}$, по которому можно разложить любую функцию ψ :

$$\psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x) \; .$$

<u>Вопрос 16.</u> Что такое ортонормированный базис?
Ответ: базис, подчиненный условиям $(\psi_n, \psi_m) = \delta_{nm}$.

<u>Вопрос 17.</u> Образует ли базис система $\{x^n\}$ на $(-1, +1)$? Является ли он ортонормированным?

Ответ: согласно аппроксимационной теореме Веерштрасса, образует. Ортонормированным не является.

<u>Вопрос 18.</u> Можно ли из произвольного базиса построить ортонормированный?
Ответ. Да , процедурой Шмидта: пусть есть функции $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \ldots$

$(\psi_n, \psi_m) \neq \delta_{nm}$ Введем норму $\psi_1 \Rightarrow \varphi_1 = \dfrac{\psi_1}{\|\psi_1\|}$

и построим $\psi_2 = C \cdot \varphi_1 + \psi_2$,

где $C = -(\varphi_1, \psi_2)$ из условия $(\varphi_1, \varphi_2) = 0$. Тогда , из $(\psi_1, \psi_2) \neq 0$ мы построили $(\varphi_1, \varphi_2) = 0$. Дальше аналогично, $\varphi_2 \Rightarrow \Phi_2 = \dfrac{\varphi_2}{\|\varphi_2\|}$

и т.д.

<u>Вопрос 19.</u> Как называются ортонормированные функции, построенные процедурой Шмидта из $\{x^n\}$ на $(-1, +1)$? Указать первые три из них.

Ответ: полиномами Лежандра $P_n(x)$:

$$P_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad P_1 = \sqrt{\frac{3}{2}}x, \quad P_2 = \sqrt{\frac{5}{8}}\left(1-3x^2\right) .$$

<u>Вопрос 20.</u> Образует ли базис система функций $\frac{1}{\sqrt{2l}}e^{i\pi n\frac{x}{l}}$ на $(-l, +l)$?

Ответ: образует и это доказывается в теории рядов Фурье. Данный базис - ортонормированный.

<u>Вопрос 21.</u> Образует ли базис континуальное множество функций e^{ikx} с $k \in \mathbb{R}$?

Ответ: образует и это доказывается в теории интеграла Фурье.

<u>Вопрос 22.</u> Является ли этот базис ортогональным? Нормированным?

Ответ: ортогональным является (вопрос 11); нормированным - не является, ибо $\left\|e^{ikx}\right\| = \infty$;

В таких случаях используется обобщенное условие ортонормированности, т.е. нормировка на δ - функцию, которая в нашем случае приводит к системе функций $(\psi_k, \psi_{k'}) = \delta\left(k-k'\right)$,

$$\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx} .$$

<u>Вопрос 23.</u> Чему равны коэффициенты c_n разложения функции ψ по базису ψ_n ?

Ответ:

$$c_n = (\psi_n, \psi_n) = \int \psi_n^*(x)\psi(x)dx$$

<u>Вопрос 24.</u> Чему равны коэффициенты Фурье функции $\psi(x)$?

Ответ: $c_n = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int e^{-i\pi n\frac{x}{l}}\psi(x)dx$.

<u>Вопрос 25.</u> Чему равен фурье- образ функции $\psi(x)$?

Ответ: $\tilde{\psi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int e^{-ikx}\psi(x)dx$.

<u>Задача 1.</u> Разложить в ряд Фурье функцию x на $(-1, +1)$.

<u>Задача 2.</u> Разложить в интеграл Фурье прямоугольный импульс

$$\psi(x) = \begin{cases} 0, & x < -1 \\ 1, & -1 \le x \le +1 \\ 0, & x > +1 \end{cases} .$$

Физическая интерпретация.

Волновая функция $\psi(x)$ описывает состояние частицы с одной степенью свободы x. Если она нормируема, то состояние называется обычным, если ненормируема, то обобщённым. Первая фраза означает, что из волновой функции частицы можно извлечь всю информацию (возможную в квантовой механике) о её характеристиках. Как именно это делается учит квантовая механика.

В частности, квадрат модуля $|\psi(x)|^2$ задаёт плотность вероятности получить для положения частицы в пространстве значение x. Это означает следующее.

А). Если $\psi(x)$ - нормируема, то

$$W_\psi(a,b) = \frac{\int_a^b |\psi(x)|^2\,dx}{\int |\psi(x)|^2\,dx}$$

есть вероятность обнаружить частицу на интервале (a,b) прямой $\mathbb{R}$.

Б). Если $\psi(x)$ нормирована, то формула упрощается:

$$W_\psi(a,b) = \int_a^b |\psi(x)|^2\,dx$$

В) Если $\psi(x)$ не нормируема, то

$$W_\psi\left(\frac{a,b}{c,d}\right) = \frac{\int_a^b |\psi(x)|^2\,dx}{\int_c^d |\psi(x)|^2\,dx}$$

есть отношение вероятностей обнаружить частицу на интервалах (a,b) и (c,d) вещественной прямой.

В квантовой механике используются , по возможности, нормированные волновые функции и ортонормированные базисы $\{\psi_n\}$, причем

$$\psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x)\text{, где}$$

коэффициент разложения c_n имеет следующий смысл: квадрат его модуля есть вероятность (или плотность вероятности) того, что частица, находящаяся в состоянии ψ при соответствующем измерении будет обнаружена в состоянии ψ_n. В частности, проводя измерение в одном из состояний ψ_n, мы все время будем обнаруживать частицу только в этом состоянии, в чем и состоит смысл использования ортонормированного базиса. Подробнее утверждения последнего абзаца будут обсуждены позже, при анализе вероятностной интерпретации в квантовой механике.

<u>Задача 3.</u> Волновая функция частицы, которая может двигаться только на интервале (0, a) равна

$$\psi(x) = \sin\frac{\pi x}{a}\ .$$

Найти вероятность обнаружения ее в интервале (0, a/4).

Ответ: Прежде всего волновую функцию нужно нормировать:

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\cdot\sin\frac{\pi x}{a}\ .$$

Теперь имеем: $W\left(0,\frac{a}{4}\right) = \int_0^{\frac{a}{4}} |\psi(x)|^2\,dx = \frac{2}{a}\int_0^{\frac{a}{4}} \sin^2\frac{\pi x}{a}\,dx =$

$$=\frac{1}{a}\int_0^{\frac{a}{4}}\left(1-\cos\frac{2\pi x}{a}\right)dx=\frac{1}{a}\left(x-\frac{a}{2\pi}\sin\frac{2\pi x}{a}\right)\Bigg|_0^{\frac{a}{4}}=\frac{1}{a}\left(\frac{a}{4}-\frac{a}{2\pi}\sin\frac{\pi}{2}\right)=$$

$$=\frac{1}{a}\left(\frac{a}{4}-\frac{a}{2\pi}\right): \qquad \boxed{W\left(0,\frac{a}{4}\right)=\frac{1}{4}-\frac{1}{2\pi}\cong 0,09}$$

<u>Задача 4.</u> Волновая функция частицы, которая может двигаться по всей прямой, равна

$$\psi(x)=\begin{cases}e^{x}, & x<0\\ e^{-x}, & x\geq 0\end{cases}.$$

Найти вероятность обнаружения ее в интервале (–1, 1).

Решение: Нормируем волновую функцию, для чего поделим ее на $\|\psi\|$.

$$\|\psi\|^2\equiv(\psi,\psi)\equiv\int_{-\infty}^{0}e^{2x}dx+\int_0^{\infty}e^{-2x}dx=2\int_0^{\infty}e^{-2x}dx=1\Rightarrow\|\psi\|=1 \ ,$$

так что приведенная волновая функция – нормированная. Теперь имеем:

$$W(-1,1)=\int_{-1}^{1}|\psi(x)|^2\,dx=\int_{-1}^{0}e^{2x}dx+\int_0^{1}e^{-2x}dx=2\int_0^{1}e^{-2x}dx=-e^{-2x}\Big|_0^1=1-e^{-2};$$

$$W(-1,1)=1-\frac{1}{e^2}\cong 0,87$$

т.е. частица локализована в основном в окрестности начала координат.

<u>Задача 5.</u> Волновая функция частицы, которая может двигаться по всей прямой, равна

$$\psi(x)=\sin kx\cdot e^{ikx}$$

Найти отношение вероятностей обнаружить ее в интервалах $\left(0,{}^{\pi}\!/_{2k}\right)$ и $\left(0,{}^{\pi}\!/_{k}\right)$.

Решение:

$$W\left(0,\frac{\pi}{2k}\Bigg|0,\frac{\pi}{k}\right)=$$

$$=\int_0^{\pi/2k}|\psi(x)|^2\,dx\Bigg/\int_0^{\pi/k}|\psi(x)|^2\,dx=\int_0^{\pi/2k}\sin^2 kxdx\Bigg/\int_0^{\pi/k}\sin^2 kxdx=$$

$$=\frac{1}{2}\left(x-\frac{\sin kx}{k}\right)\Bigg|_0^{\pi/2k}\Bigg/\frac{1}{2}\left(x-\frac{\sin kx}{k}\right)\Bigg|_0^{\pi/k}=$$

$$=\left(\frac{\pi}{2k}-\frac{1}{k}\right)\Bigg/\frac{\pi}{k}=\left(\frac{\pi}{2}-1\right)\Bigg/\pi \quad\Rightarrow$$

$$\Rightarrow\qquad\boxed{W\left(0,\frac{\pi}{2k}\right)\Bigg/W\left(0,\frac{\pi}{k}\right)=\frac{1}{2}-\frac{1}{\pi}\cong 0,18}$$