# 5 Reprezentacje połozeniowa i pedowa

## 5.1 Reprezentacja położeniowa

W poprzednim rozdziale znaleźliśmy jawną postać operatora $\hat{H}$ w przedstawieniu położeniowym. Co to znaczy? W przedstawieniu położeniwym

$$\hat{x}\left|x\right\rangle = x. \tag{5.1}$$

Stany własne $|x\rangle$ tworzą układ zupełny

$$\hat{I} = \int dx \left|x\right\rangle \left\langle x\right|, \; \left\langle x'\right|x\rangle = \delta(x - x'). \tag{5.2}$$

Rozkład dowolnego stanu

$$\left|\psi\right\rangle = \int dx \left|x\right\rangle \left\langle x \left|\psi\right.\right\rangle = \int dx \left|x\right\rangle \psi(x). \tag{5.3}$$

Iloczyn skalarny

$$\left\langle \varphi \left|\psi\right.\right\rangle = \int dx dx' \left\langle \varphi \left|x'\right.\right\rangle \left\langle x' \left|x\right.\right\rangle \left\langle x \left|\psi\right.\right\rangle = \int dx \varphi^*(x)\psi(x). \tag{5.4}$$

Wzięliśmy równanie

$$\hat{H}\left|\psi\right\rangle$$

i pomnożyliśmy go przez $\langle x|$ wstawiając równocześnie operator jednostkowy $\int dx' \left|x'\right\rangle \left\langle x'\right|$

$$\left\langle x\right| \hat{H} \left|\psi\right\rangle = \int dx' \left\langle x\right| \hat{H} \left|x'\right\rangle \left\langle x'\right|\psi\rangle = \hat{H}_x \psi(x), \tag{5.5}$$

co oznacza, że

$$\left\langle x\right| \hat{H} \left|x'\right\rangle = \delta(x - x')\hat{H}_x. \tag{5.6}$$

Tutaj $\hat{H}_x$ jest operatorem Hamiltona w przedstawieniu położeniowym (na ogół nie piszemy indeksu $x$), w którym to przedstawieniu $\hat{H}$ jest diagonalny. Operator pędu

$$\left\langle x\right| \hat{p} \left|\psi\right\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\psi(x). \tag{5.7}$$

Wstawmy jedynkę

$$\left\langle x\right| \hat{p} \left|\psi\right\rangle = \int dx' \left\langle x\right| \hat{p} \left|x'\right\rangle \left\langle x' \left|\psi\right.\right\rangle = \int dx' \left\langle x\right| \hat{p} \left|x'\right\rangle \psi(x'). \tag{5.8}$$

Porównując z poprzednim równaniem

$$\left\langle x\right| \hat{p} \left|x'\right\rangle = -i\hbar\delta(x - x')\frac{\partial}{\partial x'} \tag{5.9}$$

## 5.2 Przedstawienie pędowe

W przedstawieniu położeniowym funkcja własna operatora pedu

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}u_p(x) = pu_p(x) \;\Rightarrow\; u_p(x) = Ae^{ipx/\hbar}. \tag{5.10}$$

W notacji Diraca

$$u_p(x) = \langle x\,|p\rangle \tag{5.11}$$

Norma

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx\, u_{p'}^*(x)u_p(x) = |A|^2 \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx\, e^{i(p-p')x/\hbar} = 2\pi\hbar\,|A|^2\,\delta(p-p') \tag{5.12}$$

Stąd (wybieramy rzeczywisą fazę)

$$A = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}. \tag{5.13}$$

Podobnie

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} dp\, u_p^*(x')u_p(x) = \delta(x-x'). \tag{5.14}$$

Zmiana bazy

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \int dx\,|x\rangle\,\psi(x) = \int dx \int dp'\,|p'\rangle\,\langle p'\,|x\rangle\,\psi(x) \\ &= \int dp'\,|p'\rangle \int dx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ip'x/\hbar}\psi(x). \end{aligned} \tag{5.15}$$

Pomnóżmy przez $\langle p|$:

$$\langle p'\,|\psi\rangle = \psi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dx e^{-ip'x/\hbar}\psi(x). \tag{5.16}$$

Przejście od przedstawienia położeniowego do przedstawienia pędowego: transformata Fouriera. I na odwrót:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dp e^{ipx/\hbar}\psi(p). \tag{5.17}$$

Jak wygląda operator położenia w reperezentacji pędowej:

$$
\begin{aligned}
\langle p|\,\hat{x}\,|\psi\rangle &= \int dx' dx\, dp'\ \langle p|\ x'\rangle \underbrace{\langle x'|\,\hat{x}\,|x\rangle}_{=x\delta(x-x')} \langle x|\ p'\rangle \langle p'\ |\psi\rangle \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar}\int dx\, dp' e^{-ipx/\hbar} x e^{ip'x/\hbar} \langle p'\ |\psi\rangle \\
&= \int dp' \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial p'}\delta(p'-p)\right] \psi(p') \\
&= i\hbar \int dp' \delta(p'-p) \frac{\partial}{\partial p'}\psi(p') \\
&= i\hbar \frac{\partial}{\partial p}\psi(p).
\end{aligned}
\tag{5.18}
$$

# 6 Zasada nieoznaczoności

## 6.1 Gaussowski pakiet falowy

Rozważmy pewną szczególną funkcję falową

$$
\psi(x) = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}}\, \tilde{\psi}(k)\, e^{i\,kx},
$$

gdzie $\tilde{\psi}(k)$ wybierzemy jako funkcje Gaussa:

$$
\tilde{\psi}(k) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi\alpha}} \exp\left(-\frac{(k-k_0)^2}{2\alpha}\right). \tag{6.19}
$$

Funkcja ta jest unormowana (w kwadracie):

$$
\int\limits_{-\infty}^{+\infty} dk\, |\tilde{\psi}(k)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi\alpha}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dk\, \exp\left(-\frac{(k-k_0)^2}{\alpha}\right) = 1. \tag{6.20}
$$

Dla tak dobranej $\tilde{\psi}(k)$ łatwo wyliczyć $\psi(x)$:

$$
\psi(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi\alpha}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(k-k_0)^2}{2\alpha} + i\,kx\right).
$$

Prześledźmy krok po kroku wyliczenie tej całki. Po pierwsze zmieńmy zmienne $\kappa = k - k_0$ i dopełnijmy do kwadratu

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \frac{e^{i\,k_0 x}}{\sqrt[4]{\pi\alpha}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\kappa}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{\kappa^2}{2\alpha} + i\,\kappa x + \frac{\alpha}{2}\,x^2\right) \exp\left(-\frac{\alpha}{2}\,x^2\right) \\ &= \exp\left(i\,k_0 x - \frac{\alpha}{2}\,x^2\right) \frac{1}{\sqrt[4]{\pi\alpha}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\kappa}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2\alpha}\left(\kappa^2 - 2\,i\,\kappa\,\alpha x - \alpha^2\,x^2\right)\right).\end{aligned}$$

Wprowadzając nową zmienną $\kappa_0 = i\alpha x$, argument exponenty pod całką przyjmuje postać $(\kappa - \kappa_0)^2$ i całka po $d\kappa$ na mocy wzoru (6.20) równa jest $\sqrt{2\pi\alpha}$. A zatem

$$\psi(x) = \sqrt[4]{\frac{\alpha}{\pi}} e^{-\frac{\alpha x^2}{2}}\, e^{i\,k_0 x}. \tag{6.21}$$

A zatem pakiet falowy $\psi(x)$ ma postać zbliżoną do fali płaskiej o liczbie falowej $k_0$, ale o zależnej od położenia amplitudzie o kształcie gaussowskim. Funkcja (6.21) jest unormowana:

$$\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi^*(x)\, \psi(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx\; e^{-\alpha x^2} = 1.$$

Średni ped dla takiego pakietu falowego wynosi

$$\langle p \rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{\pi\alpha}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dk\; k \exp\left(-\frac{(k-k_0)^2}{\alpha}\right) = \hbar k_0,$$

a średnie odchylenie kwadratowe pedu:

$$\sigma^2(p) = \frac{\hbar^2}{\sqrt{\pi\alpha}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dk\; (k-k_0)^2 \exp\left(-\frac{(k-k_0)^2}{\alpha}\right) = \hbar^2 \frac{\alpha}{2}.$$

Z kolei średnie położenie dane jest jako

$$\langle x \rangle = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx\, x\, e^{-\alpha x^2} = 0,$$

a średnie odchylenie kwadratowe położenia

$$\sigma^2(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx\, x^2\, e^{-\alpha x^2} = \frac{1}{2\alpha}.$$

Zauważmy teraz, że

$$\sigma^2(p)\sigma^2(x) = \frac{\hbar^2}{4}. \tag{6.22}$$

Definiując *nieoznaczoność* pedu i *nieoznaczoność* położenia jako

$$\Delta p = \sqrt{\sigma^2(p)}, \quad \Delta x = \sqrt{\sigma^2(x)}$$

możemy (6.22) przepisać jako

$$\Delta p \Delta x = \frac{\hbar}{2}. \tag{6.23}$$

Związki (6.22) i (6.23) noszą nazwe *zasady nieoznaczoności Heisenberga.* Ze związków tych wynika, że w określonym stanie $\psi$, który tu wybraliśmy jako gaussian, pęd i położenie znane są z dokładnością, których iloczyn jest stały, rzędu $\hbar$. W miarę jak będziemy zmniejszać $\Delta p$ wzrastać bedzie $\Delta x$. I odwrotnie, w stanie o małym $\Delta x$ pęd będzie praktycznie nieokreślony. Powstaje pytanie, na ile ogólna jest to zasada i na ile zależy ona od wyboru stanu $\psi$.

## 6.2 Wielkości sprzeżone

Rozważmy dwa operatory hermitowskie $\hat{A}$ i $\hat{B}$, takie że

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = i\hat{C},$$

gdzie $\hat{C}$ jest też operatorem hermitowskim. Niech

$$a =< \hat{A} >_\psi = \left(\psi, \hat{A}\psi\right),$$
$$b =< \hat{B} >_\psi = \left(\psi, \hat{B}\psi\right),$$

gdzie $\psi(\vec{r})$ jest unormowaną funkcją falową. Zdefiniujmy opertory

$$\hat{\delta}_A = \hat{A} - a, \quad \hat{\delta}_B = \hat{B} - b.$$

Łatwo wykazać, że

$$\left[\hat{\delta}_A, \hat{\delta}_B\right] = i\hat{C}.$$

Rozważmy teraz pomocniczą całke zależną od rzeczywistego parametru $\alpha$:

$$I(\alpha) = \int d^3\vec{r} \left|\left(\alpha\hat{\delta}_A - i\hat{\delta}_B\right)\psi(\vec{r})\right|^2 \geqslant 0.$$

Całka ta jest zawsze dodatnia. Ponieważ operatory $\hat{\delta}_A, \hat{\delta}_B$ są hermitowskie

$$\begin{aligned}
I(\alpha) &= \int d^3\vec{r}\, \left(\left(\alpha\hat{\delta}_A - i\hat{\delta}_B\right)\psi\right)^* \left(\alpha\hat{\delta}_A - i\hat{\delta}_B\right)\psi \\
&= \int d^3\vec{r}\ \psi^* \left\{\left(\alpha\hat{\delta}_A + i\hat{\delta}_B\right)\left(\alpha\hat{\delta}_A - i\hat{\delta}_B\right)\right\}\psi \\
&= \int d^3\vec{r}\ \psi^* \left\{\alpha^2\hat{\delta}_A^2 + \hat{\delta}_B^2 - i\alpha\left[\hat{\delta}_A, \hat{\delta}_B\right]\right\}\psi \\
&= \int d^3\vec{r}\ \psi^* \left\{\alpha^2\hat{\delta}_A^2 + \hat{\delta}_B^2 + \alpha\hat{C}\right\}\psi \\
&= \alpha^2\sigma_\psi^2(\hat{A}) + \sigma_\psi^2(\hat{B}) + \alpha < \hat{C} >_\psi \geqslant 0.
\end{aligned}$$

Ostatnia nierówność musi być spełniona dla każdego $\alpha$, a zatem wyznacznik równania kwadratowego na $\alpha$ musi być ujemny lub równy zero:

$$< \hat{C} >_\psi^2 - 4\sigma_\psi^2(\hat{A})\sigma_\psi^2(\hat{B}) \leqslant 0.$$

Stąd natychmiast otrzymujemy, że

$$\sigma_\psi^2(\hat{A})\sigma_\psi^2(\hat{B}) \geqslant \frac{< \hat{C} >_\psi^2}{4}. \tag{6.24}$$

A zatem zasada nieoznaczoności wynika z nieprzemienności operatorów $\hat{A}$ i $\hat{B}$. To czy we wzorze (6.24) bedziemy mieli znak równości, czy silnej nierówności zależy od stanu $\psi$, po którym średniujemy. W szczególności, dla operatorów pedu i położenia otrzymujemy

$$\Delta p \Delta x \geqslant \frac{\hbar}{2}.$$

Warto w tym miejscu wspomnieć o innej zasadzie nieoznaczoności wiążącej czas z energią. Ponieważ w mechanice kwantowej czas jest parametrem i nie odpowiada mu żaden operator, zasada ta nie daje się wyprowadzić w pokazany wyżej sposób. Wrócimy do tego problemu w jednym z następnych rozdziałów.