

5 Reprezentacje położeniowa i pędowa

Jak dyskutowaliśmy to poprzednio, operatory można zdefiniować abstrakcyjnie, a w praktyce używać ich w jawnej postaci w jakiejś konkretnej bazie. W mechanice kwantowej dwie bazy są wyróżnione: baza własna operatorów położenia i baza własna operatorów pędu. Jawną postać dowolnego operatora \hat{Q} w tych bazach określa się jako operator \hat{Q} w reprezentacji położeniowej lub w reprezentacji pędowej.

5.1 Reprezentacja położeniowa

Stany własne operatora położenia

$$\hat{x} |x\rangle = x |x\rangle. \quad (5.1)$$

tworzą bazę numerowaną „ciągłym indeksem” x . Stany własne $|x\rangle$ tworzą układ zupełny

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

i są znormalizowane do delty Diraka. Rozkład dowolnego stanu w tej bazie przyjmuje postać

$$|\psi\rangle = \int dx |x\rangle \langle x | \psi \rangle = \int dx |x\rangle \psi(x), \quad (5.3)$$

gdzie współczynniki rozkładu

$$\langle x | \psi \rangle = \psi(x) \quad (5.4)$$

noszą nazwę *funkcji falowej* i określają amplitudę prawdopodobieństwa na otrzymanie wartości położenia równej x w wyniku pomiaru na stanie $|\psi\rangle$. Iloczyn skalarny przyjmuje postać

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \int dx dx' \langle \varphi | x' \rangle \langle x' | x \rangle \langle x | \psi \rangle = \int dx \varphi^*(x) \psi(x). \quad (5.5)$$

5.2 Przedstawienie pędowe

W przedstawieniu położeniowym operator pędu przyjmuje postać $\hat{p} = -i\hbar\partial/\partial x$, a funkcja własna operatora pędu

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} u_p(x) = p u_p(x) \Rightarrow u_p(x) = A e^{ipx/\hbar}. \quad (5.6)$$

Norma

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx u_{p'}^*(x) u_p(x) = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{i(p-p')x/\hbar} = 2\pi\hbar |A|^2 \delta(p - p') \quad (5.7)$$

Stąd (wybieramy rzeczywistą fazę)

$$A = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}. \quad (5.8)$$

Aby mówić o *przedstawieniu pędowym* musimy zdefiniować stany własne operatora pędu. W notacji Diraka

$$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle$$

i podobnie jak stany $|x\rangle$ stany własne operatora pędu tworzą układ zupełny, unormowany do delty Diraka

$$\hat{I} = \int dp |p\rangle \langle p|, \quad \langle p'|p\rangle = \delta(p' - p). \quad (5.9)$$

Stany własne pędu możemy, tak jak każdy stan, rozłożyć na składowe w reprezentacji położeniowej

$$|p\rangle = \int dx |x\rangle \langle x|p\rangle = \int dx |x\rangle u_p(x), \quad (5.10)$$

gdzie współczynnikami rozkładu są funkcje własne operatora \hat{p} w reprezentacji położeniowej

$$u_p(x) = \langle x|p\rangle. \quad (5.11)$$

Podobnie jak w przypadku operatora położenia, dowolny stan $|\psi\rangle$ możemy rozłożyć na składowe w bazie $|p\rangle$

$$|\psi\rangle = \int dp |p\rangle \langle p|\psi\rangle = \int dp |p\rangle \tilde{\psi}(p), \quad (5.12)$$

gdzie funkcja

$$\tilde{\psi}(p) = \langle p|\psi\rangle \quad (5.13)$$

jest amplitudą prawdopodobieństwa na otrzymanie wartości pędu p w wyniku pomiaru pędu na stanie $|\psi\rangle$. Oznaczyliśmy ją „falką” podobnie jak oznacza się transformatę Fouriera, gdyż – jak się okaże – to faktycznie jest transformata Fouriera. Rzeczywiście

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \int dx' |x'\rangle \psi(x') = \int dx' \int dp |p\rangle \langle p|x'\rangle \psi(x') \\ &= \int dp |p\rangle \int dx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx/\hbar} \psi(x) \end{aligned} \quad (5.14)$$

gdzie użyliśmy własności

$$\langle p|x\rangle = \langle x|p\rangle^* = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx/\hbar} \psi(x). \quad (5.15)$$

Pomnóżmy (5.14) przez $\langle p|$:

$$\langle p|\psi\rangle = \tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx e^{-ipx/\hbar} \psi(x). \quad (5.16)$$

Przejdźcie od przedstawienia położeniowego funkcji falowej do przedstawienia pędowego jest transformatą Fouriera. I na odwrót:

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

5.3 Zmiana bazy

W poprzednim rozdziale dyskutowaliśmy zmianę bazy dla dwóch niekomutujących operatorów \hat{A} i \hat{B}

$$|b_i\rangle = \sum_j |a_j\rangle U_{ji}$$

z czego wynika, że dla dowolnego operatora zachodzi

$$Q_{ik}^{(b)} = \sum_{j,l} U_{ij}^\dagger Q_{jl}^{(a)} U_{lk},$$

gdzie $Q_{ik}^{(a,b)}$ są odpowiednio przedstawieniami macierzowymi operatora \hat{Q} w bazie $|b_i\rangle$ i $|a_j\rangle$. U jest macierzą unitarną. Analogicznie możemy napisać zmianę bazy dla przypadku gdy stany są numerowane indeksem ciągłym:

$$|p\rangle = \int dx' |x'\rangle U_{x'p}. \quad (5.18)$$

Mnożąc to równanie z lewej strony przez $\langle x|$ i korzystając z (5.11) otrzymujemy

$$U_{xp} = u_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}. \quad (5.19)$$

Korzystając z transformacji (5.18) możemy przeliczać operatory z jednej bazy do drugiej. Najpierw jednak upewnijmy się, że nie popełniliśmy żadnego błędu. W reprezentacji położeniowej

$$\langle x|\hat{p}|\psi\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x). \quad (5.20)$$

Wstawmy jedynekę

$$\langle x|\hat{p}|\psi\rangle = \int dx' \langle x|\hat{p}|x'\rangle \langle x'|\psi\rangle = \int dx' \langle x|\hat{p}|x'\rangle \psi(x'). \quad (5.21)$$

Porównując z poprzednim równaniem

$$\langle x|\hat{p}|x'\rangle = -i\hbar \delta(x-x') \frac{\partial}{\partial x'} \quad (5.22)$$

Ten wzór można wyprowadzić korzystając z (5.18):

$$\begin{aligned} \langle x|\hat{p}|x'\rangle &= \int dp \langle x|\hat{p}|p\rangle \langle p|x'\rangle \\ &= \int dp p \langle x|p\rangle \langle p|x'\rangle \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp p e^{-ip(x'-x)/\hbar} \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} e^{-ip(x'-x)/\hbar}. \end{aligned}$$

W domyśle ten obiekt działa na jakąś funkcję $\psi(x')$, więc wycałkujemy przez części

$$\begin{aligned}\langle x | \hat{p} | x' \rangle &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp e^{-ip(x'-x)/\hbar} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \right) \\ &= -i\hbar \delta(x-x') \frac{\partial}{\partial x'}.\end{aligned}$$

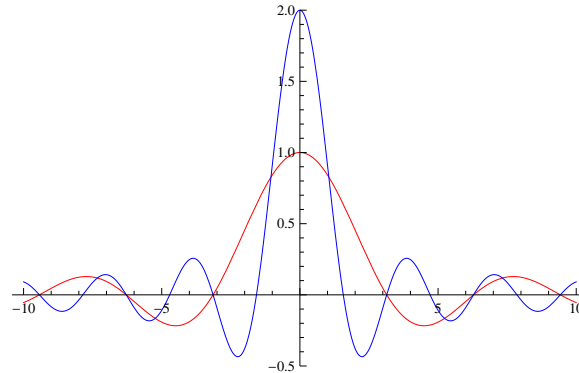
Jak wygląda operator położenia w reprezentacji pędowej?

$$\begin{aligned}\langle p | \hat{x} | \psi \rangle &= \int dx' dx dp' \langle p | x' \rangle \underbrace{\langle x' | \hat{x} | x \rangle}_{=x\delta(x-x')} \langle x | p' \rangle \langle p' | \psi \rangle \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dx dp' e^{-ipx/\hbar} x e^{ip'x/\hbar} \langle p' | \psi \rangle \\ &= \int dp' e^{-ipx/\hbar} \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} e^{ip'x/\hbar} \right] \psi(p') \\ &= i\hbar \int dp' \delta(p' - p) \frac{\partial}{\partial p'} \psi(p') \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \psi(p).\end{aligned}\tag{5.23}$$

Dodatek: funkcja δ Diraka

Dystrybucję $\delta(x)$ można rozumieć jako granicę pewnych ciągów funkcyjnych. Dobrym przykładem jest ciąg

$$\delta(\kappa) = \frac{1}{\pi} \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{\sin R\kappa}{\kappa}.\tag{5.24}$$



Rysunek 1: Wykres funkcji $\sin kR/k$ dla małego R (linia czerwona) i dla dużego R (linia niebieska).

Warto narysować wykres funkcji $\delta_R(\kappa) = 2 \sin R\kappa / \kappa$ dla różnych R . Widzimy, że w miarę jak R dąży do nieskończoności wartość funkcji $\delta_R(\kappa)$ w zerze dąży do ∞ , a podstawa

$\Delta\kappa = 2\pi/R$ dąży do zera. Łatwo się przekonać, że całka z $\delta_R(\kappa)$ pozostaje jednak stała

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\kappa \delta_R(\kappa) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\kappa R \frac{\sin R\kappa}{R\kappa}.$$

Wprowadzając nową zmienną $\xi = R\kappa$ otrzymujemy, że

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\kappa \delta_R(\kappa) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \frac{\sin \xi}{\xi} = 1.$$

Całka ta nie zależy od R . Aby wykazać, że jest równa 1 rozważmy całkę z funkcji analitycznej $f(z)$ podzielonej przez z po konturze C , która składa się z dużego łuku o promieniu R , odcinka $(-R, -r)$, małego łuku o promieniu r i odcinka (r, R) w granicy $r \rightarrow 0$ i $R \rightarrow \infty$. Wewnątrz konturu C nie ma osobliwości więc

$$\int_{C_R} dz \frac{f(z)}{z} + \int_{-R}^{-r} dz \frac{f(z)}{z} - \int_{C_r} dz \frac{f(z)}{z} + \int_r^R dz \frac{f(z)}{z} = 0.$$

Znak przy C_r jest ujemny ze względu na kierunek obiegu. Założymy, że $f(z)$ znika w nieskończoności, wtedy całka po C_R znika. Z kolei całka po C_r wynosi:

$$\lim_{r \rightarrow 0} \int_0^\pi d\theta i r e^{i\theta} \frac{f(r e^{i\theta})}{r e^{i\theta}} = i \pi f(0).$$

Definiując całkę od $-\infty$ do $+\infty$ w sensie wartości głównej mamy:

$$P \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{f(x)}{x} = i \pi f(0). \quad (5.25)$$

Podstawiając za $f(z) = e^{iz}$ i porównując części urojone (5.25) otrzymujemy

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{\sin x}{x} = \pi \cos 0 = \pi,$$

gdzie opuściliśmy symbol P , ponieważ $\sin x/x$ nie ma osobliwości. Stąd całka z δ Diraka

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta(x) = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta_R(x) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \frac{\sin \xi}{\xi} = 1. \quad (5.26)$$

Jest to podstawowa cecha funkcji δ Diraka: całka po osi rzeczywistej wynosi 1. Funkcja $\delta(x)$ Diraka scałkowana z dowolną (ale *porządną*) funkcją próbną $g(x)$ daje wartość $g(0)$. Rzeczywiście, dla reprezentacji (5.24)

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta(x) g(x) &= \frac{1}{\pi} \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{\sin Rx}{x} g(x) \\ &= \frac{1}{\pi} \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \frac{\sin \xi}{\xi} g\left(\frac{\xi}{R}\right) \\ &= g(0) \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \frac{\sin \xi}{\xi} \\ &= g(0). \end{aligned} \tag{5.27}$$

Powyższy dowód nie jest w pełni ścisły, ponieważ dość beztrzesko zamieniliśmy kolejność przejścia granicznego z $R \rightarrow \infty$ i całkę po dx . Wynik ten jednak można do łatwo zrozumieć intuicyjnie. W miarę jak R rośnie, wkład do całki pochodzi tylko z wąskiego obszaru wokół $x = 0$, gdzie funkcja $g(x)$ w porównaniu z $\delta_R(x)$ jest prawie stała: $g(x) \approx g(0)$ i można ją wyciągnąć przed całkę, która na mocy (5.26) równa jest 1.

Zauważmy, że

$$\frac{1}{\pi} \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{\sin R\kappa}{\kappa} = \frac{1}{2\pi} \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{-R}^{+R} dx e^{i\kappa x}. \tag{5.28}$$

Czyli, przy okazji udowodniliśmy, że

$$\delta(\kappa) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{i\kappa x}. \tag{5.29}$$

6 Zasada nieoznaczoności

6.1 Gaussowski pakiet falowy

Rozważmy pewną szczególną funkcję falową

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} \tilde{\psi}(k) e^{ikx},$$

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

$$\tilde{\psi}(k) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi\alpha}} \exp\left(-\frac{(k - k_0)^2}{2\alpha}\right). \tag{6.1}$$

Funkcja ta jest unormowana (w kwadracie):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dk |\tilde{\psi}(k)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi\alpha}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \exp\left(-\frac{(k-k_0)^2}{\alpha}\right) = 1. \quad (6.2)$$

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

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

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

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \frac{e^{ik_0x}}{\sqrt[4]{\pi\alpha}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\kappa}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{\kappa^2}{2\alpha} + i\kappa x + \frac{\alpha}{2} x^2\right) \exp\left(-\frac{\alpha}{2} x^2\right) \\ &= \exp\left(ik_0x - \frac{\alpha}{2} x^2\right) \frac{1}{\sqrt[4]{\pi\alpha}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\kappa}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2\alpha} (\kappa^2 - 2i\kappa\alpha x - \alpha^2 x^2)\right). \end{aligned}$$

Wprowadzając nową zmienną $\kappa_0 = i\alpha x$, argument eksponenty na mocy wzoru (6.2) równa jest $\sqrt{2\pi\alpha}$. A zatem

$$\psi(x) = \sqrt[4]{\frac{\alpha}{\pi}} e^{-\frac{\alpha x^2}{2}} e^{ik_0x}. \quad (6.3)$$

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 (6.3) jest unormowana:

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

Średni pęd dla takiego pakietu falowego wynosi

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

a średnie odchylenie kwadratowe pędu:

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

Z kolei średnie położenie dane jest jako

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

a średnie odchylenie kwadratowe położenia

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

Zauważmy teraz, że

$$\sigma^2(p)\sigma^2(x) = \frac{\hbar^2}{4}. \quad (6.4)$$

Definiując *nieoznaczoność pędu* i *nieoznaczoność położenia* jako

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

możemy (6.4) przepisać jako

$$\Delta p \Delta x = \frac{\hbar}{2}. \quad (6.5)$$

Związki (6.4) i (6.5) noszą nazwę *zasady nieoznaczoności Heisenberga*. Ze związków tych wynika, że w określonym stanie ψ , który tu wybraliśmy jako gaussian, pęd i położenie znane są z dokładnością, których iloczyn jest stały, rzędu \hbar . W miarę jak będziemy zmniejszać Δp wzrastać będzie Δx . I odwrotnie, w stanie o małym Δx pęd będzie praktycznie nieokreślony. Powstaje pytanie, na ile ogólna jest to zasada i na ile zależy ona od wyboru stanu ψ .

6.2 Wielkości sprzężone

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

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

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

$$\begin{aligned} a &= \langle \hat{A} \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle, \\ b &= \langle \hat{B} \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{B} | \psi \rangle, \end{aligned}$$

gdzie stan $|\psi\rangle$ jest unormowany. Zdefiniujmy operatory

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

Łatwo wykazać, że

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

Rozważmy teraz pomocniczą całkę zależną od rzeczywistego parametru α :

$$I(\alpha) = \int d^3\mathbf{r} \left| (\alpha\hat{\delta}_A - i\hat{\delta}_B) \psi(\mathbf{r}) \right|^2 \geq 0, \quad (6.6)$$

gdzie $\psi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \psi \rangle$. Całka ta jest zawsze dodatnia. Ponieważ operatory $\hat{\delta}_A, \hat{\delta}_B$ są hermitowskie

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

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

$$\langle \hat{C} \rangle_\psi^2 - 4\sigma_\psi^2(\hat{A})\sigma_\psi^2(\hat{B}) \leq 0.$$

Stąd natychmiast otrzymujemy, że

$$\sigma_\psi^2(\hat{A})\sigma_\psi^2(\hat{B}) \geq \frac{\langle \hat{C} \rangle_\psi^2}{4}. \quad (6.7)$$

A zatem zasada nieoznaczoności wynika z nieprzemienności operatorów \hat{A} i \hat{B} . To czy we wzorze (6.7) będziemy mieli znak równości, czy silnej nierówności zależy od stanu ψ , po którym średniujemy. W szczególności, dla operatorów pedu i położenia otrzymujemy

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

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.