Шевчук Інна,

студентка VII курсу, спеціальність «Фізика»

Науковий керівник - Грищук В.В.

кандидат. фіз. мат. наук, доцент

Застосування теорії представлень до розв'язування задач квантової механіки

Завдання квантової механіки, як і класичної, полягає в тому, щоб за результатами одних вимірювань передбачити результати інших вимірювань. Однак у квантовій механіці процес вимірювання відіграє особливу роль. Самі операції вимірювання, як відомо, потребують докладного аналізу, що пов'язано з обмеженням на сумісне визначення, наприклад, координати та імпульсу частинки. Отже, побудова квантової теорії вимагає фундаментальних змін основних класичних уявлень та законів. Так само, як квантовомеханічні явища відрізняються від класичних, так само й математичний апарат квантової механіки відмінний від апарату класичної механіки. Математичний апарат квантової механіки є теорією лінійних операторів у функціональних гільбертових просторах [1]. Це означає, що самі вимірювання можна розглядати як операції, які здійснюються над фізичними системами.

Функція u може бути розкладена по повній системі власних функцій деякого оператора A:

$$u = u_1 a_1 + u_2 a_2 + \cdots + u_n a_n + \cdots \tag{1}$$

Сукупність коефіцієнтів розкладу a_n повністю задає функцію u. Тому замість u можна користуватись сукупністю коефіцієнтів a_n, яка описує функцію u, але в іншому представленні, тобто в A-представленні.

У різних представленнях ми можемо задавати і оператори. Нехай ми маємо деякий оператор B:

$$u = Bv \tag{2}$$

Функції u та v в A-представленні, тобто у вигляді коефіцієнтів розкладу по повній системі власних функцій u_n оператора A матимуть вигляд:

$$u = \quad a_n u_n, \tag{3}$$

$$v = \quad b_n u_n. \tag{4}$$

Підставивши (3) і (4) в (2) матимемо:

$$a_k = \quad B_{kn} b_n, \tag{5}$$

де
$$B_{kn} = \quad u_k^* B u_n dV. \tag{6}$$

З (6) очевидно, що сукупність чисел B_{kn}, яку можна записати у вигляді матриці, зв’язує хвильові функції u та v в A-представленні [3].

В квантовій механіці найчастіше зустрічаються x-представлення (координатне представлення), p-представлення (імпульсне представлення) та E-представлення (енергетичне представлення). В даній статті ми розглянемо лише координатне та імпульсне представлення.

Використання теорії представлень дає змогу значно спростити розв’язання багатьох задач квантової механіки.

Наприклад, знайти спектр l і власні функції $\psi_l(x)$ ермітового оператора L, який в x представленні задається у вигляді:

$$L\ \ x\ \ = x + \frac{d^2}{dx^2}, \tag{7}$$

(x – звичайна координата) [2].

Рівнянням на власні значення цього оператора буде диференціальне рівняння

$$\frac{d^2\psi_l(x)}{dx^2} + \ \ x - l\ \ \psi_l\ \ x\ \ = 0, \tag{8}$$

рівняння другого порядку з змінними коефіцієнтами. Розв’язок цього рівняння добре відомий, він виражається через інтегральну функцію Ейрі.

Розв’яжемо цю задачу більш простим, з точки зору диференціальних рівнянь, шляхом. Розглянемо ермітовий оператор

$$p\ \ x\ \ = -i\frac{d}{dx}, \tag{9}$$

що має неперервний спектр $-\infty < p < \infty$ і власні функції

$$\psi_p\ \ x\ \ = \frac{1}{2\pi} e^{ipx}, \tag{10}$$

які утворюють базис.

Вихідний оператор L виражається через p [1]:

$$L\ \ x\ \ = -p^2\ \ x\ \ + x, \tag{11}$$

і знаходження його спектра в x-представленні зводиться до розв'язання рівняння (8).

Розглянемо оператор (11) в p-представленні. Оператор p тоді буде оператором множення

$$p^2(p) \equiv p^2, \tag{12}$$

а вигляд оператора $x(p)$ знайдемо, використавши формули зв'язку.

Ядро

$$x\ \ p, p'\ \ =\ \ {}_{-\infty}^{\infty} dx \psi_p^*\ \ x\ \ x\ \ x\ \ \psi_{p'}\ \ x\ \ =$$

$$x e^{-i\ \ p-p'\ \ x} dx = i \frac{d}{dp}\ \ \frac{1}{2\pi}\ \ {}_{-\infty}^{\infty} e^{-i\ \ p-p'\ \ x} dx\ \ = i \frac{d}{dp} \delta(p-p') \tag{13}$$

Тоді

$$x\ \ p\ \ = i \frac{d}{dp} \tag{14}$$

з власними функціями

$$\psi_x\ \ p\ \ \equiv \psi_p^*\ \ x\ \ = \frac{1}{2\pi} e^{-ipx}. \tag{15}$$

Отже, оператор L в p-представленні буде дорівнювати:

$$L\ \ p\ \ = i \frac{d}{dp} - p^2, \tag{16}$$

а рівняння на власні значення

$$i \frac{d\psi_l(p)}{dp} -\ \ p^2 + l\ \ \psi_l\ \ p\ \ = 0 \tag{17}$$

На відміну від (8), (17) вже рівняння першого порядку, яке завжди інтегрується:

$$\psi_l\ \ p\ \ = C e^{-i(\frac{p^2}{3}+l)p}, \tag{18}$$

де константу інтегрування C знайдемо з умови нормування [4]:

$$l\ \ l'\ \ = \delta\ \ l - l'\ \ . \tag{19}$$

Очевидно, що вона рівна $\frac{1}{2\pi}$.

Таким чином, оператор L має неперервні власні значення l і власні функції (15), записані в p- представленні.

Якщо необхідні власні функції цього оператора в x-представленні, скористаємось формулами зв'язку представлень:

$$\psi_l(x) \equiv \langle x|l\rangle = \int dp \langle x|p\rangle\langle p|l\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_x^*(p)\,\psi_l(p)\,dp. \qquad (20)$$

Підставляючи в (20) (15) та (18), отримаємо

$$\psi_l(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\left(\frac{p^2}{3}+l-x\right)p}\,dp = \frac{1}{\pi}\int_0^{\infty}\cos\left(\left(\frac{p^2}{3}+l-x\right)p\right)dp =$$

$$\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\Phi(l-x),$$

де

$$\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_0^{\infty}\cos\left(zx+\frac{z^2}{3}\right)dz$$

функція Ейрі, значення якої можна знайти в таблицях спеціальних функцій.

Література

1. Матвеев А.Н. Атомная физика: Учеб. пособие для студентов вузов. – М.: Высш. шк., 1989. –ст. 148.
2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика (нерелятивистская теория). - 6-е изд, - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. ("Теоретическая физика", том III).
3. Вакарчук І. О. Квантова механіка. – 3-тє вид., доп. – Львів: ЛНУ імені Івана Франка, 2007.
4. Елютин П.В., Кривченков В.Д. Квантовая механика – Главная редакция физико-математической литературы издательства «Наука», 1976.