

Rozdział 30

(U.9) Reprezentacje położeniowa i pędowa

30.1 Operator pędu w reprezentacji położeniowej.

Twierdzenie pomocnicze

Analizując w głównej części wykładu operator pędu pokazaliśmy, że w reprezentacji położeniowej jego działanie na funkcje falowe sprowadza się do różniczkowania, to jest

$$\langle \vec{r} | P_k | \psi \rangle = P_k^{(r)} \psi(\vec{r}) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k} \psi(\vec{r}), \quad k = 1, 2, 3. \quad (30.1)$$

W trakcie wyprowadzenia tej formuły korzystaliśmy z twierdzenia matematycznego (z teorii dystrybucji), którego dowód naszkicujemy poniżej.

Twierdzenie 30.1 *Delta funkcja Diraca ma następującą własność*

$$\delta_{jk} \delta(\vec{r}) = -x_j \frac{\partial}{\partial x_k} \delta(\vec{r}). \quad (30.2)$$

Dowód. Ścisły dowód wymaga odwołań do teorii dystrybucji, dlatego przeprowadzimy tutaj tylko intuicyjne uzasadnienie tezy. Niech $f(\vec{r})$ będzie funkcją o zwartym nośniku. Wówczas możemy napisać całkę po wielkiej objętości

$$\begin{aligned} I(V) &= \int_V d^3r f(\vec{r}) x_j \frac{\partial}{\partial x_k} \delta(\vec{r}) \\ &= \int_{\partial V} dS_k f(\vec{r}) x_j \delta(\vec{r}) - \int_V d^3r \frac{\partial}{\partial x_k} (x_j f(\vec{r})) \delta(\vec{r}), \end{aligned} \quad (30.3)$$

przy czym druga równość wynika z całkowania przez części. Ponieważ możemy tak dobrać objętość całkowania, aby nośnik funkcji $f(\vec{r})$ leżał całkowicie w jej wnętrzu, więc możemy uznać, że człon brzegowy w powyższej całce znika. Tym samym mamy

$$\begin{aligned} I(V) &= - \int_V d^3r \left[\frac{\partial x_j}{\partial x_k} f(\vec{r}) + x_j \frac{\partial f(\vec{r})}{\partial x_k} \right] \delta(\vec{r}), \\ &= -\delta_{jk} \int_V d^3r f(\vec{r}) \delta(\vec{r}) - \int_V d^3r x_j \frac{\partial f(\vec{r})}{\partial x_k} \delta(\vec{r}) \end{aligned} \quad (30.4)$$

Ponieważ druga całka znika (x_j w zerze daje zero), więc uzyskujemy

$$I(V) = -\delta_{jk} \int_V d^3r f(\vec{r}) \delta(\vec{r}). \quad (30.5)$$

Porównując prawe strony pierwszej równości (30.3) i ostatniej, otrzymujemy

$$\int_V d^3r f(\vec{r}) \left[x_j \frac{\partial}{\partial x_k} \delta(\vec{r}) \right] = \int_V d^3r f(\vec{r}) (-\delta_{jk} \delta(\vec{r})). \quad (30.6)$$

Stąd, wobec dowolności funkcji $f(\vec{r})$ wynika teza. ■

30.2 Funkcje falowe oscylatora harmonicznego w reprezentacji pędowej

W głównej części wykładu rozwiązaliśmy zagadnienie własne dla hamiltonianu jednowymiarowego oscylatora harmonicznego. Wyprowadziliśmy tam funkcje falowe

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) H_n\left(x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right). \quad (30.7)$$

Posługując się formalną terminologią rozpoznajemy w nich funkcje własne energii w (jednowymiarowej) reprezentacji położeniowej. Wobec tego możemy formalnie napisać

$$\psi_n(x) = \langle x | n \rangle, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots, \quad (30.8)$$

gdzie stany $|n\rangle$ nazwiemy teraz stanami własnymi energii (hamiltonianu) oscylatora.

W tym momencie przejście do reprezentacji pędowej nie nastręcza trudności. Zrobimy to w standardowy sposób. Oczywiście odpowiednia reprezentacja pędowa też będzie jednowymiarowa i funkcja falowa w reprezentacji pędowej to

$$\tilde{\psi}_n(p) = \langle p | n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle p | x \rangle \langle x | n \rangle, \quad (30.9)$$

gdzie korzystamy z zupełności reprezentacji położeniowej. Funkcja $\langle p | x \rangle = \langle x | p \rangle^*$ jest (sprzężoną) jednowymiarową funkcją własną pędu w reprezentacji położeniowej, o postaci

$$\langle x | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p x\right). \quad (30.10)$$

wynikającej w oczywisty sposób z jej trójwymiarowego odpowiednika danego w (9.55). Wobec tego obliczenie funkcji falowej oscylatora w reprezentacji pędowej sprowadza się do obliczenia całki

$$\tilde{\psi}_n(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(-\frac{i}{\hbar} p x\right) \psi_n(x), \quad (30.11)$$

a więc do obliczenia transformaty Fouriera funkcji falowej $\psi_n(x)$ danej w reprezentacji położeniowej. Podstawiamy więc $\psi_n(x)$ i jednocześnie dokonujemy zamiany zmiennej całkowania $y = x\sqrt{m\omega/\hbar}$. Po uporządkowaniu współczynników liczbowych przed całką, otrzymujemy

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}_n(x) &= \left(\frac{1}{4\pi^3 m\omega\hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \int_{-\infty}^{\infty} dy \exp\left(-\frac{i p y}{\sqrt{m\omega\hbar}}\right) \exp\left(-\frac{1}{2} y^2\right) H_n(y) \\ &= \left(\frac{1}{4\pi^3 m\omega\hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} J_n\left(\frac{p}{\sqrt{m\omega\hbar}}\right), \end{aligned} \quad (30.12)$$

gdzie $J_n(q)$, przy oznaczeniu $q = p/\sqrt{m\omega\hbar}$ jest całką

$$J_n(q) = \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-iqy} e^{-y^2/2} H_n(y). \quad (30.13)$$

Musimy obliczyć całkę $J_n(q)$. W tym celu skorzystamy z funkcji tworzącej wielomianów Hermite'a, dla której zbudujemy całkę pomocniczą

$$J = \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-iqy} e^{-y^2/2} \exp(-s^2 + 2sy) \quad (30.14a)$$

$$\begin{aligned} &= \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-iqy} e^{-y^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} H_n(y) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-iqy} e^{-y^2/2} H_n(y) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} J_n(q). \end{aligned} \quad (30.14b)$$

Obliczywszy całkę J rozwinie ją w szereg względem parametru s i odczytamy wartości całek $J_n(q)$. Rezultaty wykorzystamy w (30.12), tym samym otrzymując funkcje falowe $\tilde{\psi}_n(p)$ w reprezentacji pędowej.

Oznaczamy $\gamma = (2s - iq)$ i przystępujemy więc do obliczeń całki pomocniczej J :

$$J = e^{-s^2} \int_{-\infty}^{\infty} dy \exp\left[-\frac{1}{2}y^2 + \gamma y\right]. \quad (30.15)$$

Trójkąt kwadratowy w wykładniku pod całką sprowadzamy do postaci kanonicznej

$$J = \exp\left(-s^2 + \frac{1}{2}\gamma^2\right) \int_{-\infty}^{\infty} dy \exp\left[-\frac{1}{2}(y - \gamma)^2\right]. \quad (30.16)$$

Pozostała całka jest już prosta

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy \exp\left[-\frac{1}{2}(y - \gamma)^2\right] = \int_{-\infty}^{\infty} dz \exp\left[-\frac{1}{2}z^2\right] = \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{\frac{1}{2}}} = \sqrt{2\pi}. \quad (30.17)$$

Ostatnią całkę wzięliśmy z tablic całek oznaczonych. A zatem pomocnicza całka J wynosi

$$J = \sqrt{2\pi} \exp\left(-s^2 + \frac{1}{2}\gamma^2\right). \quad (30.18)$$

Całkę tę trzeba rozwinąć względem parametru s . Podstawiając oznaczenie γ dostajemy

$$\begin{aligned} J &= \sqrt{2\pi} \exp\left[-s^2 + \frac{1}{2}(2s - iq)^2\right] \\ &= \sqrt{2\pi} \exp\left(-\frac{1}{2}q^2\right) \exp\left(s^2 - 2iqs\right) \\ &= \sqrt{2\pi} \exp\left(-\frac{1}{2}q^2\right) \exp\left[-(-is)^2 + 2q(-is)\right] \\ &= \sqrt{2\pi} \exp\left(-\frac{1}{2}q^2\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-is)^n}{n!} H_n(q), \end{aligned} \quad (30.19)$$

gdzie ponownie wykorzystaliśmy funkcję tworzącą wielomianów Hermite'a, choć w tym wypadku dla czysto urojonego parametru. Zestawiając rozwinięcia (30.14b) i (30.19) odczytujemy całki $J_n(q)$

$$J_n(q) = \sqrt{2\pi} \exp\left(-\frac{1}{2}q^2\right) (-i)^n H_n(q). \quad (30.20)$$

Całkę $J_n(q)$ niezbędną do obliczenia funkcji falowej w reprezentacji pędowej (30.12) już więc mamy. Podstawiamy ją, wracamy do oznaczenia $q = p/\sqrt{m\omega\hbar}$ i otrzymujemy

$$\tilde{\psi}_n(x) = \left(\frac{1}{4\pi^3 m\omega\hbar}\right)^{1/4} \frac{\sqrt{2\pi}}{\sqrt{2^n n!}} \exp\left(-\frac{p^2}{2m\omega\hbar}\right) (-i)^n H_n\left(\frac{p}{\sqrt{m\omega\hbar}}\right). \quad (30.21)$$

Porządkując, stwierdzamy, że funkcje własne hamiltonianu (energii) oscylatora harmonicznego, wyrażone w reprezentacji pędowej są postaci

$$\tilde{\psi}_n(x) = \left(\frac{1}{i}\right)^n \left(\frac{1}{\pi m \omega \hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \exp\left(-\frac{p^2}{2m\omega\hbar}\right) H_n\left(\frac{p}{\sqrt{m\omega\hbar}}\right), \quad (30.22)$$

Funkcja falowa $\tilde{\psi}_n(p)$ jest transformatą Fouriera funkcji $\psi_n(x)$. Oczywiście zachodzi także relacja odwrotna. Przejście od $\tilde{\psi}_n(p)$ do $\psi_n(x)$ można oczywiście wykonać posługując się taką samą techniką obliczeniową.

* * * * *