Середні значення координат та імпульсу. Невизначеність Гайзенберга

З попередніх занять ми дізналися, що...

- Стан у квантовій механіці задається хвильовою функцією $\psi(x, t)$
- *Величина $|\psi(x, t)|^2 dx$ дорівнює ймовірності знаходження частинки в околі точки x у момент часу t*
- $\int |\psi(x,t)|^2 dx = 1$
- $\psi(x,t) = C\, e^{-i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}$

- Принцип суперпозиції

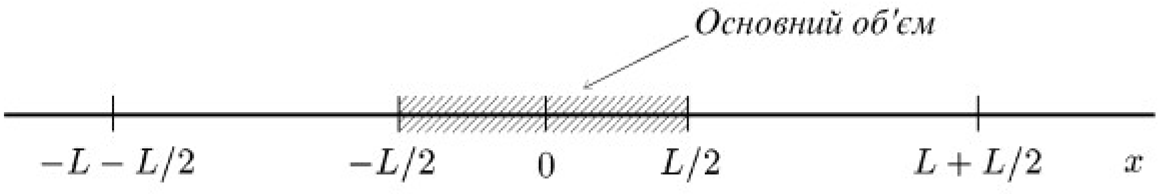
$$\psi = \sum_n C_n \psi_n \quad \text{або} \quad \psi = \int C_f \psi_f \, df$$

$$\sum_{n \ge 1} |C_n|^2 = 1$$

$C_{i=1,2,3,\ldots}$ — вагові множники

$|C_i|^2$ — ймовірність перебувати у стані ψ_i

Граничні умови періодичності



$$\psi(x,t)=\psi(x+L,t) \longrightarrow e^{ikx}=e^{ik(x+L)} \longrightarrow e^{ikL}=1$$

$$kL=2\pi n \Rightarrow k=\frac{2\pi}{L}n, n=0,\pm1\pm2,\pm3$$

Імпульс та енергія квантуються

$$p=\hbar k=\frac{2\pi\hbar}{L}n \qquad E=\frac{2\pi^2\hbar^2}{mL^2}n^2$$

Ортогональність хвильових функцій

Розглянемо інтеграл

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{k'}^{*}(x)\,\psi_k(x)\,dx$$

Де $\psi_{k'}(x)$ і $\psi_k(x)$ — хвильові функції з різними хвильовими векторами, * - оператор комплексного спряження

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{k'}^{*}(x)\,\psi_k(x)\,dx = \lim_{L\to\infty}\int_{-L/2}^{+L/2} \psi_{k'}^{*}(x)\,\psi_k(x)\,dx = \lim_{L\to\infty} A'A\int_{-L/2}^{+L/2} e^{-ik'x}e^{ikx}\,dx = \lim_{L\to\infty} A'A\int_{-L/2}^{+L/2} e^{i(k-k')x}\,dx =$$

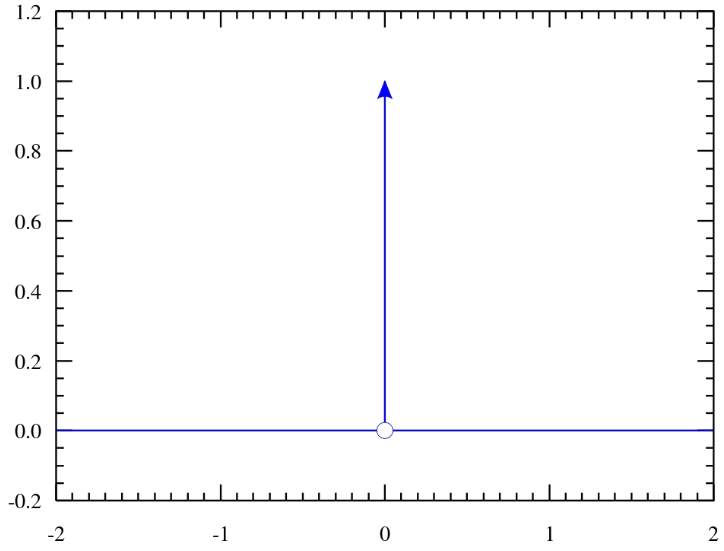
$$= \lim_{L\to\infty} A'A\left.\frac{e^{i(k-k')x}}{i(k-k')}\right|_{-L/2}^{+L/2} = \lim_{L\to\infty} A'A\,\frac{e^{i(k-k')L/2}-e^{-i(k-k')L/2}}{i(k-k')} = \lim_{L\to\infty} A'A\,\frac{2}{k-k'}\sin\left((k-k')L/2\right) = 2\pi A'A\,\delta(k-k')$$

Де A і A' — коефіцієнти хвильових функцій $\psi_{k'}(x)$ і $\psi_k(x)$ відповідно, $\delta(x)$ — дельта функція Дірака

Дельта функція Дірака

Означення:

$$\int_a^b f(x)\,\delta(x-x_0)\,dx=\begin{cases} f(x_0),\, x_0\in[a,b] \\ 0,\, x_0\notin[a,b] \end{cases}$$



Властивості

$$\delta(x)=0,\forall\, x\neq 0$$

$$\delta(-x)=\delta(x)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x)\,dx=1$$

$$\delta'(x)=-\delta(x)\frac{d}{dx}$$

Самостійне завдання

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{k'}^{*}(x)\,\psi_k(x)\,dx = \delta(k-k')$$

$$\psi = \int C_k\,\psi_k\,dk$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{k'}^{*}(x)\,\psi(x)\,dx = ?$$

Відповідь

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{k'}^{*}(x)\,\psi(x)\,dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{k'}^{*}(x) \int_{k} C(k)\,\psi_k(x)\,dk\,dx =$$

$$= \int_{k} C(k) \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{k'}^{*}(x)\,\psi_k(x)\,dx\,dk = \int_{k} C(k)\,\delta(k-k')\,dk = C(k')$$

Або просто

$$C(k') = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{k'}^{*}(x)\,\psi(x)\,dx$$

Середнє значення розподілу ймовірності

Для дискретного розподілу ймовірності:

$$\langle x \rangle = \sum x\, P(x)$$

Де <*x*> - середнє значення, *x* — можливе значення випадкової величини, *P(x)* — функція маси ймовірності.

Для неперервного розподілу ймовірності:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x f(x)\, dx$$

Де *f(x)* — функція густини ймовірності.

Це середнє арифметичне

$$\langle x \rangle = \frac{1}{n} \sum_{i}^{n} x_i$$

Середнє значення

Середнє значення координати частинки *x*:

$$\langle x \rangle = \int x\,|\psi(x)|^2\,dx = \int \psi^*(x)\,x\,\psi(x)\,dx$$

Для довільної функції U(x):

$$\langle U(x) \rangle = \int \psi^*(x)\,U(x)\,\psi(x)\,dx$$

Де *ψ*(x)* — комплексно-спряжена функція до *ψ(x)*

Середнє значення імпульсу частинки

Представимо *ψ(x)* у вигляді

$$\psi(x)=\int\limits_p C(p)\,\psi_p(x)\,dp$$

$$C(p)=\int \psi_p^*(x)\,\psi(x)\,dx$$

$$\psi_p(x)=const\cdot e^{ipx/\hbar}$$

Величина $|C(p)|^2$ дорівнює ймовірності того, що частинка має імпульс *p*.
За означенням середнього значення:

$$\langle p\rangle=\int\limits_p p|C(p)|^2\,dp=\int\limits_p C^*(p)\,p\,C(p)\,dp$$

Середнє значення імпульсу частинки

$$\langle p \rangle = \int_p p |C(p)|^2 dp = \int_p C^*(p)\, p\, C(p)\, dp \qquad C(p) = \int \psi_p^*(x)\, \psi(x)\, dx$$

$$\langle p \rangle = \int_p \int \psi_p(x')\, \psi^*(x')\, dx' \int p\, \psi_p^*(x)\, \psi(x)\, dx\, dp$$

Розглянемо другий інтеграл детальніше

Середнє значення імпульсу частинки

$$\int p\,\psi_p^*(x)\,\psi(x)\,dx$$

$$\psi_p(x) = const\cdot e^{ipx/\hbar} \longrightarrow \int p\,A\,e^{-ipx/\hbar}\,\psi(x)\,dx$$

$$\frac{d}{dx}e^{-ipx/\hbar} = \left(\frac{-ip}{\hbar}\right)e^{-ipx/\hbar} \longrightarrow p\,e^{-ipx/\hbar} = -\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}e^{-ipx/\hbar} \longrightarrow \int_{-L/2}^{+L/2}\psi(x)\left(\frac{-\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)A\,e^{-ipx/\hbar}\,dx$$

$$\int uv' = uv - \int u'v \longrightarrow -\frac{\hbar}{i}\psi(x)\,A\,e^{-ipx/\hbar}\Big|_{-L/2}^{+L/2} + \frac{\hbar}{i}\int_{-L/2}^{+L/2} A\,e^{-ipx/\hbar}\,\frac{d\,\psi(x)}{dx}\,dx$$

Середнє значення імпульсу частинки

З граничних умов періодичності

$$-\frac{\hbar}{i}\,\psi(x)\,A\,e^{-ipx/\hbar}\Big|_{-L/2}^{+L/2}=0$$

Тому

$$\int p\,\psi_p^*(x)\,\psi(x)\,dx=\int \psi_p^*(x)(-i\hbar)\frac{d\,\psi(x)}{dx}\,dx$$

Середнє значення імпульсу частинки

$$\langle p \rangle = \int_p \int \psi_p(x') \psi^*(x') dx' \int p \psi_p^*(x) \psi(x) dx\, dp =$$

$$= \int_p \int \psi_p(x') \psi^*(x') dx' \int \psi_p^*(x) \left(-i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx} \right) dx\, dp =$$

$$= \int \int \psi^*(x') \left(-i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx} \right) \int_p \psi_p^*(x) \psi_p^*(x') dp\, dx'\, dx =$$

$$= \int \int \psi^*(x') \left(-i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx} \right) \delta(x - x') dx'\, dx =$$

$$= -i\hbar \int \psi^*(x) \frac{d\psi(x)}{dx} dx$$

Середнє значення імпульсу частинки

$$\langle p \rangle = \int \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \psi(x) dx$$

Введемо означення оператора імпульсу

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$$

Таким чином

$$\langle p \rangle = \int \psi^*(x)\, \hat{p}\, \psi(x) dx$$

Самостійне завдання

Знайти вигляд оператора

$$\hat{p}^2 = ?$$

$$\langle p^2 \rangle = \int \psi^*(x)\, \hat{p}^2\, \psi(x)\, dx$$

Відповідь

$$\hat{p}^2 = \hat{p}\,\hat{p} = -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2}$$

Середнє значення кінетичної енергії

$$\langle \frac{p^2}{2m} \rangle = \int \psi^*(x) \frac{\hat{p}^2}{2m} \psi(x)\, dx = \int \psi^*(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) \psi(x)\, dx$$

Оператор кінетичної енергії

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$$

Співвідношення невизначеності Гайзенберга

Оператор відхилення від середнього значення координати

$$\Delta\hat{x} = \hat{x} - \langle x \rangle$$

Оператор відхилення від середнього значення імпульсу

$$\Delta\hat{p} = \hat{p} - \langle p \rangle$$

Співвідношення невизначеності Гайзенберга

Розглянемо середнє *ΔxΔp*

$$\langle \Delta x \Delta p \rangle = \int \psi^*(x) \Delta \hat{x} \Delta \hat{p} \psi(x) dx = \int \left(\Delta \hat{x} \psi(x) \right)^* \Delta \hat{p} \psi(x) dx$$

Застосуємо нерівність Коші-Буняковського-Шварца

$$\left| \int f_1^*(x) f_2(x) dx \right|^2 = \int |f_1(x)|^2 dx \int |f_2(x)|^2 dx$$

Вибравши $f_1(x)$ та $f_2(x)$ наступним чином

$$f_1(x) = \Delta \hat{x} \psi(x) \qquad f_2(x) = \Delta \hat{p} \psi(x)$$

Співвідношення невизначеності Гайзенберга

$$\int |f_1(x)|^2 dx = \int \psi^*(x)(\Delta\hat{x})^2 \psi(x)\, dx = \langle (\Delta\hat{x})^2 \rangle$$

$$\int |f_2(x)|^2 dx = \int (\Delta\hat{p}\,\psi(x))^* \Delta\hat{p}\,\psi(x)\, dx = \int \psi^*(x)(\Delta\hat{p})^2 \psi(x)\, dx = \langle (\Delta\hat{p})^2 \rangle$$

Потребує доведення

Таким чином, отримуємо нерівність

$$\langle (\Delta\hat{x})^2 \rangle \langle (\Delta\hat{p})^2 \rangle \geq |\langle \Delta\hat{x}\,\Delta\hat{p} \rangle|^2$$

Співвідношення невизначеності Гайзенберга

$$\langle \Delta\hat{x}\,\Delta\hat{p}\rangle = \langle \frac{\Delta\hat{x}\,\Delta\hat{p}+\Delta\hat{p}\,\Delta\hat{x}}{2} + \frac{\Delta\hat{x}\,\Delta\hat{p}-\Delta\hat{p}\,\Delta\hat{x}}{2}\rangle$$

Використаємо правило комутації

$$(\hat{p}\,x - x\,\hat{p})\,\psi = -i\hbar\frac{d}{dx}(x\,\psi) + i\hbar\,x\frac{d\psi}{dx} = -i\hbar\,\psi$$

Тоді

$$\langle \Delta\hat{x}\,\Delta\hat{p} - \Delta\hat{p}\,\Delta\hat{x}\rangle = \int \psi^*(x)\left\{\Delta\hat{x}\,\Delta\hat{p} - \left(-ih\frac{d}{dx} - \langle p\rangle\right)(x - \langle x\rangle)\right\}\psi(x)\,dx =$$

$$= \int \psi^*(x)\left\{\Delta\hat{x}\,\Delta\hat{p} + i\hbar - (x - \langle x\rangle)\left(-ih\frac{d}{dx} - \langle p\rangle\right)\right\}\psi(x)\,dx =$$

$$= \int \psi^*(x)\left(\Delta\hat{x}\,\Delta\hat{p} - \Delta\hat{x}\,\Delta\hat{p}\right)\psi(x)\,dx + i\hbar\int \psi^*(x)\,\psi(x)\,dx = i\hbar$$

Співвідношення невизначеності Гайзенберга

Позначимо

$$I = \langle \Delta\hat{x}\,\Delta\hat{p} + \Delta\hat{p}\,\Delta\hat{x} \rangle$$

Доведемо, що *I* — дійсна величина

$$I^* = \int \psi(x)\,\Delta\hat{x}\left(ih\frac{d}{dx} - \langle p \rangle\right)\psi^*(x)\,dx + \int \psi(x)\left(ih\frac{d}{dx} - \langle p \rangle\right)\Delta\hat{x}\,\psi^*(x)\,dx =$$

$$= \int \psi^*(x)\left(-ih\frac{d}{dx} - \langle p \rangle\right)\Delta\hat{x}\,\psi(x)\,dx + \int \psi^*(x)\,\Delta\hat{x}\left(-ih\frac{d}{dx} - \langle p \rangle\right)\psi(x)\,dx = \langle \Delta\hat{p}\,\Delta\hat{x} \rangle + \langle \Delta\hat{x}\,\Delta\hat{p} \rangle$$

Тобто *I* = *I** - дійсна величина

Співвідношення невизначеності Гайзенберга

$$\left\langle \left(\Delta \hat{x}\right)^2 \right\rangle \left\langle \left(\Delta \hat{p}\right)^2 \right\rangle \geq \left| \frac{I + i\hbar}{2} \right|^2 = \frac{I^2 + \hbar^2}{4} \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

Остаточно

$$\left\langle \left(\Delta \hat{x}\right)^2 \right\rangle \left\langle \left(\Delta \hat{p}\right)^2 \right\rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

Висновки

- Будь-який вимір в квантовій механіці - це взаємодія квантового об’єкта з об’єктом класичної механіки
- В квантовій механіці немає поняття траєкторії.

Задача

Використовуючи співвідношення Гайзенберга оцінити мінімальне значення енергії гармонічного осцилятора. Середня енергія гармонічного осцилятора:

$$E = \frac{\langle \hat{p}^2 \rangle}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \langle \hat{x}^2 \rangle$$

З міркувань симетрії

$$\langle \hat{p} \rangle = 0 \,, \langle \hat{x} \rangle = 0$$

Тому

$$\langle (\Delta \hat{p})^2 \rangle = \langle \hat{p}^2 \rangle - \langle \hat{p} \rangle^2 = \langle \hat{p}^2 \rangle \qquad \langle (\Delta \hat{x})^2 \rangle = \langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2 = \langle \hat{x}^2 \rangle$$

Джерела

- Спряжені числа
- Дельта функція Дірака
- Середні значення

- Квантова механіка : підручник / І. О. Вакарчук. — 4-те вид., доп. — Львів : ЛНУ імені Івана Франка, 2012, ст. 71-100,ISBN 978-966-613-921-7.
- Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Курс теоретической физики: Учеб. пособ.: Для вузов. В 10 т. Т. III. Квантовая механика (нерелятивистская теория). —6-е изд., испр. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. - с. 13-17, 65-73 - ISBN 5-9221-0530-2.