8.3. Преобразование Фурье [32]

Для вывода уравнения Шредингера необходима дополнительная математическая оснащенность, приведенная в данном пункте. Напомним сначала интеграл Дирихле, фигурирующий в теории интегралов Фурье и теории обобщенных функций:

$$\lim_{m\to\infty}\frac{1}{\pi}\int_a^b \varphi(z)\frac{\sin mz}{z}dz\,, \tag{8.50}$$

где $\varphi(z)$ – произвольная функции. Этот интеграл обладает следующими свойствами: 1) если $a, b> 0$ или $a, b < 0$, то этот интеграл равен 0; 2) если $a < 0$, $b > 0$, то он равен φ (0) (для непрерывных функций).

Тождество

$$\delta(z)=\lim_{m\to\infty}\frac{1}{\pi}\frac{\sin mz}{z} \tag{8.51}$$

является одной из разновидностей дельта-функции, обладающей свойствами

$$\int_a^b \varphi(z)\delta(z)dz=\begin{cases}0,\ если\ a,b>0\quad или\quad a,b<0,\\ \varphi(0),\ если\ a<0,\quad b>0.\end{cases} \tag{8.52}$$

Дельта-функция (8.51) является одной из класса обобщенных функций, приводящих к результату (8.52). К этому же классу принадлежит дельта-функция (8.24).

Рассмотрим ради сокращения выкладок случай одного измерения и докажем справедливость равенства

$$\overline{p_x^n}=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(p_x)p_z^n\psi(p_x)dp_x=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x)\left(-ih\frac{\partial}{\partial x}\right)^n\psi(x)dx\,, \tag{8.53}$$

где n – целая положительная степень.

$\overline{p_x^n}$ – означает усреднение величины $p_x{}^n$ по времени или по реализациям, что, согласно эргодической теореме для стационарного, случайного процесса, приводит к одним тем же результатам;

$\psi(x)$ *и* $\psi(p_x=m\frac{\partial x}{\partial t})$ – ПАВ, которые вводятся соответственно как (8.14) и (8.30) и связаны между собой (при условии марковости случайных процессов) согласно (8.37) и (8.38) прямым и обратным преобразованиями Фурье:

$$\psi(p_x)=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x)\frac{e^{-i\frac{p_x x}{h}}}{(2\pi h)^{1/2}}dx, \tag{8.54}$$

$$\psi(x)=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(p_x)\frac{e^{-i\frac{p_x x}{h}}}{(2\pi h)^{1/2}}dp_x\,. \tag{8.55}$$

Для доказательства подставим в (8.51) вместо $\psi(p_x)$ и $\psi^*(p_x)$ их выражения в развернутом виде (8.54). Тогда имеем:

$$\overline{p_x^n}=\int_{-\infty}^{+\infty}dp_x\int_{-\infty}^{+\infty}\psi*(x')\frac{e^{i\frac{p_x x'}{h}}}{(2\pi h)^{1/2}}dx'\cdot p_x^n\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x)\frac{e^{-i\frac{p_x x}{h}}}{(2\pi h)^{1/2}}dx\,.$$

Вместо произведения $p_x^n e^{-i\frac{p_x x}{h}}$ можно написать $\left(ih\frac{\partial}{\partial x}\right)^n e^{-i\frac{p_x x}{h}}$. Тогда получаем:

$$\overline{p_x^n} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp_x}{2\pi h} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi *(x') e^{i\frac{p_x x'}{h}} dx' \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) \left(ih \frac{\partial}{\partial x} \right)^n e^{-i\frac{p_x x}{h}} dx \,. \tag{8.55}$$

Проинтегрируем в последнем интеграле n раз по частям, причем будем предполагать, что $\psi(x)$ и ее производные обращаются в нуль на границах интегрирования $x = \pm\infty$. Выполняя интегрирование, найдем

$$\overline{p_x^n} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp_x}{2\pi h} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi *(x') e^{i\frac{p_x x'}{h}} dx' \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\frac{p_x x}{h}} \left(-ih \frac{\partial}{\partial x} \right)^n \psi(x) dx, \tag{8.56}$$

переменим теперь порядок интегрирования и будем интегрировать сначала по p_x:

$$\overline{p_x^n} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi *(x') dx' \int_{-\infty}^{+\infty} \left(-ih \frac{\partial}{\partial x} \right)^n \psi(x) dx \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\frac{p_x(x'-x)}{h}} \frac{dp_x}{2\pi\, h}. \tag{8.57}$$

Введем теперь переменные $\xi = p_x / h$, $z = x' - x$. Выполняя в последнем интеграле в (8.57) интегрирование по ξ в конечных пределах от $-m$ до $+m$, а затем, переходя к пределу $m \to \infty$, мы можем написать (8.57) в виде

$$\begin{aligned} \overline{p_x^n} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\left(-ih \frac{\partial}{\partial x} \right)^n \psi(x) \right] dx \cdot \lim_{m\to\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x+z) dz \frac{\sin mz}{\pi\, z} = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\left(-ih \frac{\partial}{\partial x} \right)^n \psi(x) \right] dx \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x+z) \delta(z) dz. \end{aligned} \tag{8.58}$$

На основании (8.52) ($a = -\infty$; $b = +\infty$), $\psi(z) = \psi^*(x+z)$ имеем

$$\overline{p_x^n} = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\left(-ih \frac{\partial}{\partial x} \right)^n \psi(x) \right] \psi^*(x) dx = \int \psi^*(x) \left(-ih \frac{\partial}{\partial x} \right)^n \psi(x) dx \,. \tag{8.59}$$

Тем самым доказано (8.53).

Если рациональная функция от p_x имеет вид

$$F(p_x) = \sum_n a_n \cdot p_x^n \,,$$

то среднее от такой функции может быть определено выражением

$$\overline{F(p_x)} = \sum_n a_n \cdot \overline{p_x^n} = \sum_n a_n \int \psi^*(x) \left(-ih \frac{\partial}{\partial x} \right)^n \psi(x) dx = \int \psi^*(x) F\left(-ih \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x) dx \,. \tag{8.60}$$

Таким образом, эквивалентность для случая одного измерения доказана. Обобщение на три измерения сводится просто к увеличению числа интегрирований и поэтому совершенно тривиально (достаточно доказать эквивалентность для среднего от $P_x^n \cdot P_y^m \cdot P_z^l$, где m, n, l – целые и положительные степени).

Справедливость равенства

$$\overline{x^n} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi *(x) x^n \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi *(p_x) \left(ih \frac{\partial}{\partial p_x} \right)^n \psi(p_x) dp_x \tag{8.61}$$

следует из справедливости (8.53), если затем использовать обратное преобразование Фурье. Аналогично

$$\overline{F(x)} = \sum_n \overline{a_n x^n} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi *(p_x) F\left(ih \frac{\partial}{\partial p_x} \right) \psi(p_x) dp_x \,. \tag{8.62}$$

Это частный случай для одного измерения. Обобщение на три измерения опять-таки тривиально.