

2.8.5. Преобразование Фурье [38]

Помимо процедуры перехода от «координатного» представления квантовой системы к ее «импульсному» представлению, рассмотренной в предыдущем пункте, для вывода уравнения Шредингера необходима дополнительная математическая оснащенность, приведенная в данном пункте.

Введем еще один вид δ -функции

$$\delta(z) = \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{1}{\pi} \frac{\sin mz}{z}, \quad (2.8.53)$$

обладающей следующими свойствами

$$\int_a^b \varphi(z) \delta(z) dz = \begin{cases} 0, & \text{если } a, b > 0 \text{ или } a, b < 0, \\ \varphi(0), & \text{если } a < 0, b > 0. \end{cases} \quad (2.8.54)$$

Для сокращения выкладок рассмотрим случай одного измерения и докажем справедливость равенства [38]

$$\overline{p_x^n} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(p_x) p_x^n \psi(p_x) dp_x = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^n \psi(x) dx, \quad (2.8.55)$$

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 (2.8.16)

и (2.8.35) и связаны между собой (при условии марковости случайных процессов) согласно (2.8.33) и (2.8.34) прямым и обратным преобразованиями Фурье:

$$\psi(p_x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) \frac{e^{-i \frac{p_x x}{\hbar}}}{(2\pi\hbar)^{1/2}} dx, \quad (2.8.56)$$

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(p_x) \frac{e^{-i\frac{p_x x}{\hbar}}}{(2\pi\hbar)^{1/2}} dp_x. \quad (2.8.57)$$

Для доказательства подставим в (2.8.55) вместо $\psi(p_x)$ и $\psi^*(p_x)$ их выражения в развернутом виде (2.8.56). При этом имеем [38]:

$$\overline{p_x^n} = \int_{-\infty}^{+\infty} dp_x \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x') \frac{e^{i\frac{p_x x'}{\hbar}}}{(2\pi\hbar)^{1/2}} dx' \cdot p_x^n \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) \frac{e^{-i\frac{p_x x}{\hbar}}}{(2\pi\hbar)^{1/2}} dx. \quad (2.8.58)$$

Вместо произведения $p_x^n e^{-i\frac{p_x x}{\hbar}}$ можно написать $\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^n e^{-i\frac{p_x x}{\hbar}}$, в чем легко убедиться путем выполнения процедуры дифференцирования данной функции. Тогда получаем [38]:

$$\overline{p_x^n} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp_x}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x') e^{i\frac{p_x x'}{\hbar}} dx' \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^n e^{-i\frac{p_x x}{\hbar}} dx. \quad (2.8.59)$$

Проинтегрируем в последнем интеграле n раз по частям, причем будем предполагать, что $\psi(x)$ и ее производные обращаются в нуль на границах интегрирования $x = \pm \infty$. В результате найдем [38]

$$\overline{p_x^n} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp_x}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x') e^{i\frac{p_x x'}{\hbar}} dx' \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\frac{p_x x}{\hbar}} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^n \psi(x) dx, \quad (2.8.60)$$

изменим порядок интегрирования и будем интегрировать сначала по p_x :

$$\overline{p_x^n} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x') dx' \int_{-\infty}^{+\infty} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^n \psi(x) dx \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\frac{p_x(x'-x)}{\hbar}} \frac{dp_x}{2\pi\hbar}. \quad (2.8.61)$$

Введем переменные $\zeta = p_x/\hbar$, $z = x' - x$. Выполняя в (2.8.61) интегрирование по ζ в конечных пределах от $-m$ до $+m$, а затем, переходя к пределу $m \rightarrow \infty$, мы можем написать (2.8.61) в виде [38]

$$\begin{aligned} \overline{p_x^n} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\left(-ih \frac{\partial}{\partial x} \right)^n \psi(x) \right] dx \cdot \lim_{m \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x+z) dz \frac{\sin mz}{\pi z} = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\left(-ih \frac{\partial}{\partial x} \right)^n \psi(x) \right] dx \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x+z) \delta(z) dz. \end{aligned} \quad (2.8.62)$$

На основании (2.8.52) ($a = -\infty$; $b = +\infty$), $\psi(z) = \psi^*(x+z)$ имеем

$$\overline{p_x^n} = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\left(-ih \frac{\partial}{\partial x} \right)^n \psi(x) \right] \psi^*(x) dx = \int \psi^*(x) \left(-ih \frac{\partial}{\partial x} \right)^n \psi(x) dx. \quad (2.8.63)$$

Тем самым доказано тождество (2.8.55) [38].
Если рациональная функция от p_x имеет вид

$$F(p_x) = \sum_n a_n \cdot p_x^n, \quad (2.8.64)$$

то среднее от такой функции может быть определено выражением [38]

$$\overline{F(p_x)} = \sum_n a_n \cdot \overline{p_x^n} = \sum_n a_n \int \psi^*(x) \left(-ih \frac{\partial}{\partial x} \right)^n \psi(x) dx = \int \psi^*(x) F \left(-ih \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x) dx. \quad (2.8.65)$$

Таким образом, эквивалентность для случая одного измерения доказана. Обобщение на три измерения сводится просто к увеличению числа интегрирований, 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

$$\overline{x^n} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) x^n \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(p_x) \left(ih \frac{\partial}{\partial p_x} \right)^n \psi(p_x) dp_x \quad (2.8.66)$$

следует из справедливости (2.8.55), если затем использовать обратное преобразование Фурье. Аналогично

$$\overline{F(x)} = \sum_n a_n \overline{x^n} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(p_x) F \left(ih \frac{\partial}{\partial p_x} \right) \psi(p_x) dp_x. \quad (2.8.68)$$

Это частный случай для одного измерения. Обобщение на три измерения тривиально [38].