Данная серия методичек посвящается лучшему семинаристу по квантовой теории
Толоконникову Андрею Владимировичу

Толоконников: Вот я написал код: два месяца компьютер считает. А у профессора Силаева за два часа. Потому что я лабух, а профессор Силаев – это профессор Силаев.

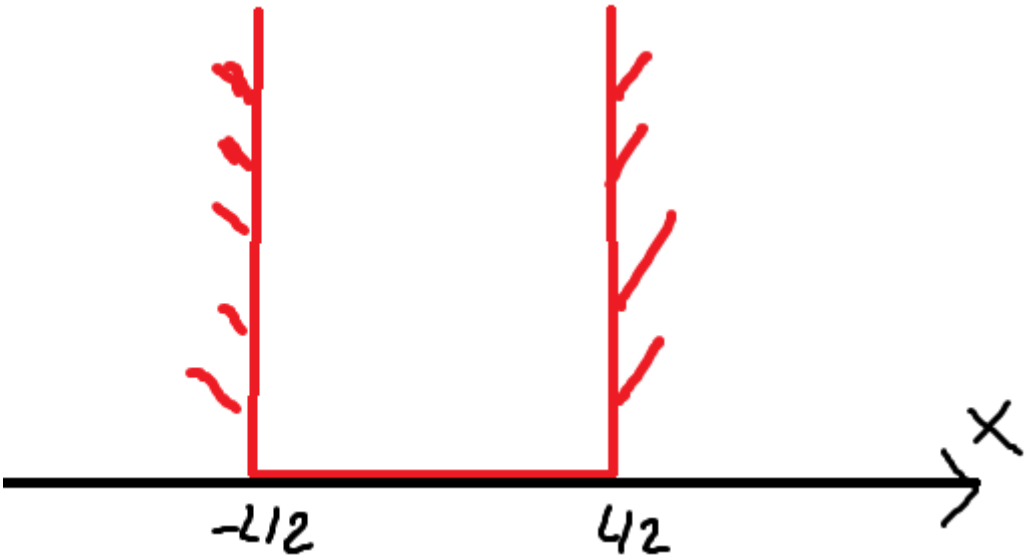
Научимся считать для смешанных состояний не только среднее значение энергии, но и других физических величин.

Задача. Дана бесконечно глубокая прямоугольная яма длиной L. Частица находится в смешанном состоянии

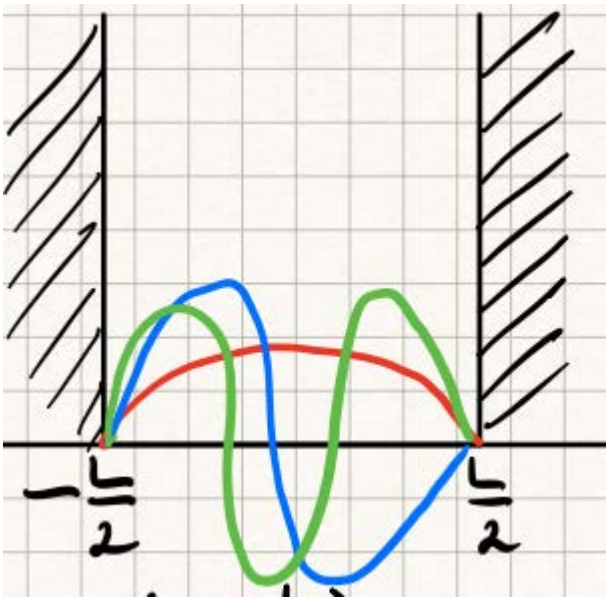
$$\hat{\rho} = \frac{1}{3}\left|1 >< 1\right| + \frac{1}{2}\left|4 >< 4\right| + \frac{1}{6}\left|6 >< 6\right|$$

Найти среднее значение энергии и координаты.

Решение.
Вспомним, как выглядит потенциал:



Напомним решение в этом случае: волновая функция является синусом или косинусом:



Обозначим

$$k_n = \frac{n}{L}$$

Если n чётно, то СФ, ему соответствующая

$$\sqrt{\frac{2}{L}} sin(k_n x)$$

Если n нечётно, то СФ, ему соответствующая

$$\sqrt{\frac{2}{L}} cos(k_n x)$$

Коэф-т $\sqrt{\frac{2}{L}}$ появляется из условия нормировки

$$\int_{-L/2}^{L/2} \Psi^*(x)\Psi(x)dx = 1$$

СЗ (энергия) будет $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\frac{d^2\Psi}{dx^2}}{\Psi} = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 n^2}{2mL}$ - чем больше k_n, тем больше энергия.

Приступаем к поиску всего и вся.

Среднего значения энергии:

с вероятностью $\frac{1}{3}$ у нас энергия, соответствующая первому состоянию: $\frac{\hbar^2}{2mL^2}$

с вероятностью $\frac{1}{2}$ у нас энергия, соответствующая четвёртому состоянию: $\frac{\hbar^2 4^2}{2mL^2}$

с вероятностью $\frac{1}{6}$ у нас энергия, соответствующая шестому состоянию: $\frac{\hbar^2 6^2}{2mL^2}$
По формуле матожидания

$$< E > = \frac{1}{3}\frac{\hbar^2}{2mL^2} + \frac{1}{2}\frac{\hbar^2 4^2}{2mL^2} + \frac{1}{6}\frac{\hbar^2 6^2}{2mL^2}$$

Теперь про координаты:
с вероятностью $\frac{1}{3}$ у нас

$$< x >_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1{}^*(x) x \Psi_1(x) dx = \frac{2}{L}\int_{-L/2}^{+L/2} x \cos^2(\frac{x}{L}) dx$$

с вероятностью $\frac{1}{2}$ у нас

$$< x >_4 = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_4{}^*(x) x \Psi_4(x) dx = \frac{2}{L}\int_{-L/2}^{+L/2} x \ \sin^2(\frac{4x}{L}) dx$$

с вероятностью $\frac{1}{6}$ у нас

$$< x >_6 = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_6{}^*(x) x \Psi_6(x) dx = \frac{2}{L}\int_{-L/2}^{+L/2} x \sin^2(\frac{6x}{L}) dx$$

По формуле матожидания:

$$< x > = \frac{2}{L}\left(\frac{1}{3}\int_{-L/2}^{+L/2} x \cos^2(\frac{x}{L}) dx + \frac{1}{2}\frac{2}{L}\int_{-L/2}^{+L/2} x \ \sin^2(\frac{4x}{L}) dx + \frac{1}{6}\frac{2}{L}\int_{-L/2}^{+L/2} x \sin^2(\frac{6x}{L}) dx\right)$$

А если бы от нас попросили бы дисперсию координаты, мы бы подсчитали:
с вероятностью $\frac{1}{3}$ у нас

$$< x^2 >_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1{}^*(x) x^2 \Psi_1(x) dx = \frac{2}{L}\int_{-L/2}^{+L/2} x^2 \cos^2(\frac{x}{L}) dx$$

с вероятностью $\frac{1}{2}$ у нас

$$< x^2 >_4 = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_4{}^*(x) x^2 \Psi_4(x) dx = \frac{2}{L}\int_{-L/2}^{+L/2} x^2 \ \sin^2(\frac{4x}{L}) dx$$

с вероятностью $\frac{1}{6}$ у нас

$$< x^2 >_6 = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_6{}^*(x) x^2 \Psi_6(x) dx = \frac{2}{L}\int_{-L/2}^{+L/2} x^2 \sin^2(\frac{6x}{L}) dx$$

По формуле матожидания:

$$< x^2 > = \frac{2}{L}\left(\frac{1}{3}\int_{-L/2}^{+L/2} x^2 \cos^2(\frac{x}{L})\,dx + \frac{1}{2}\frac{2}{L}\int_{-L/2}^{+L/2} x^2\ \sin^2(\frac{4x}{L})\,dx\right.$$
$$\left. + \frac{1}{6}\frac{2}{L}\int_{-L/2}^{+L/2} x^2\ \sin^2(\frac{6x}{L})\,dx\right)$$
$$Disp\ x = < x^2 > \ - < x >^2$$

Сформулируем общее правило.

Пусть смешанное состояние записано как

$$\hat{\rho} = \sum_{j=0}^{\infty} p_j\,|\Psi_j > < \Psi_j\,|$$

А от нас хотят среднее значение оператора $\hat{A}$: <A>.

Тогда находим $< A >_j$ в каждом чистом состоянии $|\Psi_j >$:

$$< A >_j = < \Psi_j \left|\hat{A}\right| \Psi_j >$$

а затем считаем матожидание:

$$< A > = \sum_{j=0}^{\infty} p_j\ < A >_j$$