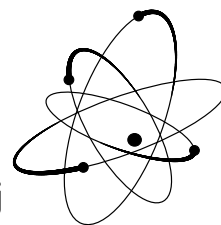




Akademia Górniczo-Hutnicza
im. Stanisława Staszica w Krakowie

Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej



Paweł Szczeszek

O FIZYCZNYCH MECHANIZMACH
TWORZENIA STANÓW GAMOWA
W MECHANICE KWANTOWEJ

Praca doktorska wykonana pod kierunkiem
prof. dr. hab. Edwarda Kapuścika

Kraków, 2006

*Pragnę podziękować mojemu promotorowi
prof. dr. hab. Edwardowi Kapuścikowi
za pomoc, oraz cierpliwość i wyrozumiałość
na każdym etapie mojej pracy.*

Spis treści

Wstęp	3
1 Różne ujęcia mechaniki kwantowej	7
1.1 Sformułowanie Diraca i von Neumanna	9
1.2 Konstrukcja wzbogaczonej przestrzeni Hilberta.	12
1.2.1 Przestrzeń topologiczna	12
1.2.2 Przestrzeń dualna $\Phi^\times$	15
1.2.3 Operatory liniowe we wzbogaczonej przestrzeni Hilberta	17
1.3 Podsumowanie	20
2 Wektory Gamowa	21
2.1 Rezonanse jako bieguny macierzy S	21
2.2 Wzbogacona przestrzeń Hilberta	23
2.3 Wektory Gamowa we wzbogaczonej przestrzeni Hilberta	25
2.4 Zależność czasowa wektorów Gamowa	27
2.5 Wektory Gamowa z rzeczywistymi wartościami własnymi.	28
2.5.1 Przykład stałego potencjału	30
2.5.2 Normalizacja stanu Gamowa	31
2.6 Wektory Gamowa w prostych przykładach	34
2.6.1 Prostokątna studnia potencjału	34
2.6.2 Bariera potencjału jako delta Diraca	38
2.7 Podsumowanie	40
3 Wektory Gamowa zależne od czasu	42
3.1 Standardowe równanie Schrödingera	44
3.2 Równanie Schrödingera dla stanów Gamowa	46
3.3 Zalety takiego podejścia	47
3.3.1 Przykład stałego potencjału	48

3.4	Podsumowanie	53
4	Niestandardowe warunki brzegowe w teorii stanów Gamowa	54
4.1	Przypadek ogólny	55
4.2	Ciągłość prądu prawdopodobieństwa oraz gęstości	58
4.3	Prostokątna bariera potencjału	61
4.3.1	Standardowe warunki brzegowe	61
4.3.2	Warunki brzegowe wynikające z ciągłości prądu prawdopodobieństwa	62
4.3.3	Warunki brzegowe wynikające ze skoku składowej normalnej gęstości prądu	64
4.4	Podsumowanie	66
	Zakończenie	67
	Bibliografia	69

Wstęp

Mechanika kwantowa, podobnie jak i inne teorie fizyczne, stara się w sposób jasny i w miarę możliwości prosty opisać zachowanie obiektów, które wchodzą w zakres jej stosowności. Każda teoria fizyczna próbuje połączyć w sobie jak najbardziej ścisły model matematyczny z możliwie prostą interpretacją fizyczną. Mechanika kwantowa jest teorią, która w sposób bardzo dokładny opisuje zachowanie obiektów mikroświata, także przewidywania tej teorii niezwykle dokładnie zgadzają się z wynikami pomiarów doświadczalnych. Formalizm matematyczny jest jednak dość zawiły i mało intuicyjny. W najprostszym ujęciu dla stanów tzw. czystych układ kwantowy reprezentowany jest w danej chwili t przez unormowany wektor stanu czyli element przestrzeni Hilberta $\mathcal{H}$. Mówiąc ściślej, stanem czystym układu jest zbiór $\hat{\psi} = \{\alpha\psi; \alpha \in \mathbb{C}, |\alpha| = 1\}$ zwany promieniem w $\mathcal{H}$ [1, 2]. Wielkości fizyczne w mechanice kwantowej są reprezentowane poprzez liniowe samosprężone operatory A działające na elementy przestrzeni $\mathcal{H}$.

W tak sformułowanej teorii opis rozpadów stanów rezonansowych jest dość trudny do sformułowania w ścisły matematycznie sposób. G. Gamow [3] badając rozpad cząstek α zauważył, że można stany rezonansowe opisywać za pomocą wektora stanu spełniającego równanie Schrödingera. Dużą trudność interpretacyjną sprawiał jednak fakt, że wartość własna odpowiadająca funkcji własnej opisującej stan rezonansowy jest zespolona, co prowadzi do równania

$$H\psi = \left(E_R - i\frac{\Gamma}{2}\right)\psi. \quad (1)$$

Ponieważ Hamiltonian H ma być operatorem energii, więc będąc operatorem liniowym samosprężonym nie może mieć zespolonych wartości własnych w formalizmie standardowej mechaniki kwantowej. Stany rezonansowe pojawiają się często jako rozkłady w kształcie "piku" przekroju czynnego w eksperymentach zderzeniowych i są znane jako rozkłady Breita-Wignera [4, 5]. Miejsce, w którym ten rozkład osiąga wartość maksymalną jest jednym z dwóch charakterystycznych parametrów. Wartość energii w tym punkcie E_R odpowiada energii stanu rezonansowego, natomiast drugi parametr Γ jest związany z tzw. szerokością połówkową maksimum, która powiązana jest z czasem

połowicznego rozpadu stanu rezonansowego.

Podczas badania analityczności macierzy rozproszenia, w reprezentacji energii $S(E)$ przy przedłużaniu na zespolone wartości energii $z = (\hbar k)^2 / (2m)$, gdzie $z \in \mathbb{C}$ jest zespoloną energią oraz $k \in \mathbb{C}$. znajdujemy wiele punktów osobliwych. Bieguny pierwszego rzędu na niefizycznym płacie ($\text{Im } k^2 < 0$) powierzchni Riemanna leżące w pobliżu płata fizycznego $k^2 = k_R^2 - i\frac{g}{2}$ mają interpretację fizyczną jako stany rezonansowe $z_R = E_R - i\Gamma/2$ gdzie $\Gamma = g\hbar^2/m$. Jak widzimy problem zespolonych energii przejawia się w wielu aspektach mechaniki kwantowej, jednak w jej formalizmie trudno tego dokonać. Mimo, że stany rezonansowe mają skończony czas życia, często wygodnie jest traktować je jako stany kwazistacjonarne. Wiele cech przypisywanych cząstkom stabilnym takich jak masa, ładunek, spin można równie dobrze przypisać rezonansom. Jednak stany stabilne i niestabilne są zwykle traktowane różnie ze względu na brak możliwości wplecenia ich w matematyczne ramy standardowej mechaniki kwantowej.

Problem jest nie tylko z zaakceptowaniem istnienia zespolonych wartości własnych dla operatorów reprezentujących wielkości mierzalne w mechanice kwantowej, ale także trudności związane z normalizacją takich stanów. Na tym nie kończą się jednak trudności na jakie napotkamy. Wiele zjawisk kwantowych wymaga wprowadzenia nieograniczonych operatorów liniowych. Wiadomo, że już wprowadzenie zasady nieoznaczoności między operatorem pędu i położenia $\Delta_\psi P \Delta_\psi Q \geq \hbar/2$, która wynika z $[P, Q] = PQ - QP = -i\hbar I$, wymusza na nas zastosowanie nieograniczonych operatorów położenia Q i pędu P , co prowadzi do zawężania ich dziedziny do pewnej podprzestrzeni $\mathcal{H}$. Wprowadza to dodatkowe komplikacje przy relacjach algebraicznych między operatorami, których dziedzina jest podprzestrzenią przestrzeni Hilberta. Formalizm wprowadzony przez Diraca w [6] także wprowadza między innymi wygodne narzędzie do działań algebraicznych na operatorach posiadających ciągłe widmo wartości własnych

$$A|a\rangle = a|a\rangle, \quad (2)$$

co także wykracza poza ramy standardowej mechaniki kwantowej.

Wygodnym narzędziem, które radzi sobie z powyższymi problemami, a co za tym idzie pozwala zaistnieć stanom własnym odpowiadającym energii zespolonej jest rozszerzenie mechaniki kwantowej z przestrzeni Hilberta na nieco bardziej złożoną konstrukcję tzw. wzbogaconą przestrzeń Hilberta, zwaną czasami trójką Gelfanda.

Idea użycia wzbogaconej przestrzeni Hilberta przy formułowaniu mechaniki kwantowej pojawiła się już w 1966 roku w [7] i rozwijana była następnie w [8, 9]. Podręcznik [10] w całości przedstawia mechanikę kwantową w tym ujęciu. Szczegółowy opis wzbogaconej przestrzeni Hilberta wraz z pełną literaturą można znaleźć w rozprawie doktorskiej Rafaela Madrido [11].

Formalizm ten odtwarza standardowe rezultaty mechaniki kwantowej, a także wprowadza matematyczną ścisłość do formalizmu Diraca [6]. Także w pracach [12], [13] oraz [14] można znaleźć duży wkład w dyskusję nad rozszerzeniem teorii kwantowej wykorzystując rozwijany przez matematyków formalizm funkcji uogólnionych [15], [16]. Zastosowanie wzbogaconej przestrzeni Hilberta przy formułowaniu kwantowej teorii pola można odnaleźć w [19]. Niespodziewanie w [10] i [20] zauważono, że formalizm wzbogaconej przestrzeni Hilberta pozwala w wygodny sposób opisać rezonanse i stany rozpadu. Teoria ta pozwala opisać je jako wektory stanu – wektory Gamowa podobnie jak „zwykłe” stany w mechanice kwantowej. Ewolucja czasowa wektorów Gamowa jest opisana zamiast zwykłej jednoparametrowej grupy unitarnej poprzez semigrupę [20], [9]. Pozwala to powiązać wektory Gamowa z nieodwracalnością względem czasu wbudowaną bezpośrednio w teorię.

Niniejszej pracy przyświecają następujące cele:

1. Sformułowanie teorii opisującej stany Gamowa bez stosowania zespolonych wartości własnych energii. Prowadzi to jednak do zwiększenia ilości składowych funkcji falowych.
2. Wyprowadzenia swoistego warunku normalizującego dla stanów Gamowa. Warunek ten pozwala inaczej spojrzeć na fizyczną strukturę stanów Gamowa w duchu współczesnej teorii układów otwartych.
3. Wyprowadzenie równań falowych zależnych od czasu posiadających rozwiązania w postaci wektorów Gamowa.

Układ pracy jest następujący.

W rozdziale pierwszym w zarysie przedstawione są różne ujęcia mechaniki kwantowej. Rozpoczynamy od tradycyjnego ujęcia falowego i równoważnego mu macierzowego poprzez zastosowanie abstrakcyjnej przestrzeni Hilberta. Uwypuklając trudności takiego ujęcia konstruujemy obszerniejszą strukturę: wzbogaconą przestrzeń Hilberta, która omija wiele trudności sformułowania mechaniki kwantowej w przestrzeni Hilberta.

W rozdziale drugim wprowadzone są wektory Gamowa jako stany opisujące procesy rozpadu traktując je jako elementy wzbogaconej przestrzeni Hilberta. Omawiamy także możliwy opis wektorów Gamowa z rzeczywistymi wartościami własnymi oraz warunek normalizujący, wraz z prostym przykładem ilustrującym teorię.

W rozdziale trzecim rozpatrujemy wektory Gamowa wynikające z równań zależnych od czasu. Prowadzi to do zwiększenia ilości składowych funkcji falowych oraz wprowadza

pewne mechanizmy związane z oddziaływaniem składowych, które mogą być źródłem powstawania stanów rozpadu.

W ostatnim rozdziale skupiamy się na mechanizmie powstawania wektorów Gamowa w oparciu o niestandardowe warunki brzegowe. Porównujemy możliwe rozwiązania wynikające z użycia standardowych warunków brzegowych oraz klasę rozwiązań będących wynikiem zastosowania bardziej ogólnych warunków zszywania funkcji falowych

W zakończeniu zamieszczono streszczenie najważniejszych wyników otrzymanych przeze mnie w trakcie przygotowywania niniejszej rozprawy. Natomiast na końcu zamieszczona została literatura wykorzystana podczas pisania niniejszej pracy.

Rozdział 1

Różne ujęcia mechaniki kwantowej

W latach 1925-1930 pojawiły się dwa niezależne podejścia do mechaniki kwantowej oparte na dwóch niezależnych teoriach matematycznych: mechanice falowej Schrödingera oraz mechanice macierzowej sformułowanej przez Heisenberga. Mechanika falowa w najprostszych jednowymiarowym przypadku oparta jest na przestrzeni funkcji całkowalnych z kwadratem (funkcji falowych),

$$L^2(\mathbb{R}, dx) = \{f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C} \mid \int_{\mathbb{R}} dx |f(x)|^2 < \infty\}, \quad (1.1)$$

z iloczynem skalarnym¹

$$(f, g)_{L^2} = \int_{\mathbb{R}} dx \overline{f(x)} g(x) \quad \text{dla} \quad f, g \in L^2(\mathbb{R}, dx). \quad (1.2)$$

W mechanice macierzowej mamy do czynienia z przestrzenią nieskończonych ciągów sumowalnych z kwadratem

$$l_2 = \{x = \{x_i\}_{i=1}^{\infty} \mid x_i \in \mathbb{C} \text{ oraz } \sum_{i=1}^{\infty} |x_i|^2 < \infty\}, \quad (1.3)$$

z iloczynem skalarnym

$$(x, y)_{l_2} = \sum_{i=1}^{\infty} \overline{x_i} y_i. \quad (1.4)$$

Skoro jak pokazał E. Schrödinger [22] i C. Eckart [23] obydwie teorie są równoważne, rozpoczęły się poszukiwania bardziej ogólnej abstrakcyjnej teorii zawierającej w sobie zarówno mechanikę falową jak i macierzową. D. Hilbert i J. von Neumann rozpoczęli

¹ $\overline{z}$ lub z^* oznacza sprzężenie zespolone $z \in \mathbb{C}$

systematyczne badanie podstaw tej teorii, czego owocem była ich wspólna praca [24]. Równocześnie powstała teoria transformacji P.A.M Diraca i P. Jordana w wielu niezależnych pracach (1926-27). Podstawą wielu dzisiejszych podręczników mechaniki kwantowej jest praca Diraca [6] gdzie wprowadzone są abstrakcyjne wektory stanu, ale bez ścisłego sprecyzowania przestrzeni wektorowej, w której działają oraz bez rozróżnienia między operatorami ograniczonymi i nieograniczonymi.

Dopiero praca von Neumanna [25] daje sformułowanie mechaniki kwantowej ze znacznie większą dbałością o ścisłość matematyczną. Podstawą teorii jest abstrakcyjna ośrodkowa² przestrzeń Hilberta z określonym w niej iloczynem skalarnym, w której działają samosprężone operatory liniowe. Mechanika Schrödingera i Heisenberga są szczególnymi reprezentacjami tej abstrakcyjnej przestrzeni Hilberta. Przejścia między nimi można dokonać za pomocą operatora unitarnego³.

Dwie przestrzenie Hilberta związane ze sobą za pomocą operatora unitarnego są izomorficzne $\mathcal{H}_1 \simeq \mathcal{H}_2$. Każda nieskończenie wymiarowa ośrodkowa przestrzeń Hilberta jest izomorficzna z przestrzenią l_2 –nieskończonych ciągów zespolonych sumowalnych z kwadratem.

$$\mathcal{H} \simeq l_2 \simeq L^2(\mathbb{R}, dx). \quad (1.5)$$

Wybierając ortonormalną bazę: $\{|n\rangle\}_{n \in \mathbb{N}}$ lub uogólnioną bazę $\{|x\rangle\}_{x \in \mathbb{R}}$ można z każdym wektorem $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ skojarzyć zbiór składowych względem danej bazy:

$$\psi_n := \langle n | \Psi \rangle \quad \text{dla} \quad n \in \mathbb{N} \quad \psi \equiv (\psi_0, \psi_1, \dots) \in l_2, \quad (1.6)$$

$$\psi(x) := \langle x | \Psi \rangle \quad \text{dla} \quad x \in \mathbb{R} \quad \psi \in L^2(\mathbb{R}, dx). \quad (1.7)$$

Przejście między $L^2(\mathbb{R}, dx)$ i l_2 może być zrealizowane w analogiczny sposób: funkcję $\psi \in L^2(\mathbb{R}, dx)$ możemy związać z ciągiem $(\psi_0, \psi_1, \dots) \in l_2$ zawierającym składowe $\psi_n := (\varphi_n, \psi)_{L^2}$ względem ortonormalnej bazy $\{\varphi_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ w $L^2(\mathbb{R}, dx)$.

²W przestrzeni ośrodkowej można wybrać przeliczalny zbiór wektorów bazowych

³Niech $\mathcal{H}_i$ $i = 1, 2$ będą ośrodkowymi przestrzeniami Hilberta z określonymi w nich iloczynami skalarnymi $(\cdot, \cdot)_{\mathcal{H}_i}$. Liniowy operator $U : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$ nazywamy unitarnym jeśli:

- $D(U) = \mathcal{H}_1$,
- $U(\mathcal{H}_1) = \mathcal{H}_2$,
- $(Uf, Ug)_{\mathcal{H}_2} = (f, g)_{\mathcal{H}_1}$ dla wszystkich $f, g \in \mathcal{H}_1$.

1.1 Sformułowanie Diraca i von Neumanna

Pierwsze próby matematycznego uściślenia mechaniki kwantowej były przeprowadzone przez Weyl'a [21] i von Neumanna [25] przy użyciu dostępnej w tym czasie matematycznej wiedzy o przestrzeni Hilberta. Przestrzeń Hilberta jest zupełną przestrzenią liniową z iloczynem skalarnym względem topologii danej przez normę $\|\phi\| = \sqrt{(\phi, \phi)}$. Wybór normy, a co za tym idzie i topologii w danej przestrzeni liniowej jest dowolny i nie może być wywnioskowany z obserwacji stanów kwantowych lub obserwabli reprezentowanych przez operatory.

Własności przestrzeni Hilberta:

1. Podstawowymi obiektami są funkcje falowe $\psi(x) \equiv \langle x|\psi\rangle$ oraz $\phi(E) \equiv \langle E|\phi\rangle$ reprezentujące odpowiednio prawdopodobieństwo $|\langle x|\psi\rangle|^2 \Delta x$ znalezienia cząstki w stanie ψ w przedziale Δx , lub prawdopodobieństwo $|\langle E|\phi\rangle|^2 \Delta E$, że energia cząstki mieści się w przedziale ΔE . Funkcje falowe należą do zbioru funkcji całkowalnych w sensie Lebesgue'a różniących się na zbiorze miary zero;

$$\psi \in \mathcal{H} \Leftrightarrow \{\psi(x)\} \in L^2(\mathbb{R}), \quad (1.8)$$

$$\phi \in \mathcal{H} \Leftrightarrow \{\phi(E)\} \in L^2(\mathbb{R}). \quad (1.9)$$

W eksperymentach rozproszeniowych $|\psi(x)|^2$ reprezentuje położenie i rozmiary detektora, $|\phi(E)|^2$ reprezentuje rozkład energii akceleratora. Tak więc w eksperymencie dostajemy pojedyncze funkcje gładkie ($\psi(x) \in \mathcal{S}$ –przestrzeń Schwartz'a), a nie funkcje z szerokiej klasy $\psi(x) \in L^2(\mathbb{R})$. Pomimo, że w eksperymencie dostajemy skończony zbiór danych, to poprzez interpolację między punktami doświadczalnymi funkcja zostaje wygładzona.

W praktyce zawsze do obliczeń używana jest całka Riemanna zamiast bardziej ogólnej całki Lebesgue'a. W teorii musimy wybrać wszystkie funkcje $\{\psi(x)\} \in L^2(\mathbb{R})$ ponieważ przestrzeń Hilberta musi być zupełną przestrzenią liniową. Przy iloczynie skalarnym zdefiniowanym standardowo w przestrzeni Hilberta, przestrzeń Schwartz'a nie jest przestrzenią zupełną względem topologii opartej na normie indukowanej przez ten iloczyn skalarny.

2. Podstawowa relacja komutacji $[P, Q] = -i\hbar\mathbb{I}$ dla operatora położenia i pędu cząstki

powoduje, że obserwable nie mogą być ciągłe⁴ (a stąd ograniczone⁵) jako operatory w całej $\mathcal{H}$. Dlatego P, Q muszą być zawężone tylko do obszaru $D(A) \subset \mathcal{H}$. Powoduje to trudności w określeniu dziedziny podstawowych operacji algebraicznych na operatorach. W formalizmie Diraca dokonujemy wielu działań na operatorach bez zwracania uwagi na dziedzinę, w której operatory są określone.

Można wybrać taką podprzestrzeń Φ przestrzeni Hilberta, w której operatory są dobrze określone. Wtedy możemy zdefiniować topologię tak aby operatory w tej podprzestrzeni były ciągłe (ograniczone), a zarazem podprzestrzeń była zupełna;

$$\phi \in \Phi \Leftrightarrow \phi \in \mathcal{S}. \quad (1.10)$$

3. Wektory własne $|E\rangle$ oraz $|x\rangle$ wynikające z zagadnienia własnego operatorów H i Q .

$$Q|x\rangle = x|x\rangle, \quad (1.11)$$

$$H|E\rangle = E|E\rangle, \quad (1.12)$$

nie należą do przestrzeni Hilberta. Pomimo to często wykorzystywane są na przykład przy opisywaniu stanów rozproszonych. Za pomocą tych wektorów możemy opisać pojedynczy mikrostan. Nie można również znaleźć stanów $|E_R - i\Gamma/2\rangle$ w przestrzeni Hilberta, które mogłyby opisywać stany rezonansowe, oraz rozpady, a które zostały przewidziane przez Gamow [3]. Nie rozpatrujemy pojedynczego stanu cząstki, ale zawsze wielką liczbę – zespół. W standardowym sformułowaniu mechaniki kwantowej w przestrzeni Hilberta nie istnieją pojedyncze mikrostan cząstki, ϕ opisuje cały zespół, oraz $\phi(E) \in \{\phi(E)\} \in L^2(\mathbb{R}_+)$ reprezentuje rozkład energii zespołu, w którym fizycy wybierają funkcje gładkie $\phi^{\text{gładkie}}(E) \in \mathcal{S}$. Mimo, że fizycy nie pracują z funkcjami całkowalnymi z kwadratem w sensie Lebesgue’a $\{\phi_1(E), \phi_2(E), \dots, \phi^{\text{gładkie}}(E)\}$, które zawierają funkcje gładkie, jednak nie można wyselekcjonować doświadczalnie klasy funkcji nie będących funkcjami gładkimi,

⁴Operator A nazywamy ciągłym w punkcie φ_0 należącym do dziedziny operatora jeśli dla każdego $\varepsilon > 0$ istnieje $\delta(\varepsilon) > 0$ takie, że:

$$\|\varphi_0 - \varphi\| < \delta \Rightarrow \|A\varphi_0 - A\varphi\| < \varepsilon.$$

⁵Operator A jest ograniczony gdy istnieje skończona stała $C \geq 0$ taka, że dla każdego $\varphi \in D(A)$ zachodzi nierówność:

$$\|A\varphi\| \leq C \|\varphi\|.$$

to znaczy elementów L^2 , które nie są elementami $\mathcal{S}$. Klasa funkcji $\phi(E) \in L^2(\mathbb{R}_+)$, które nie zawierają $\phi^{\text{gładkie}}(E)$ nie ma znaczenia fizycznego.

Amplituda prawdopodobieństwa $\langle \psi | \phi \rangle$ jest dana poprzez:

$$\begin{aligned} \langle \psi | \phi \rangle &= \sum_{i=1}^{\infty} \langle \psi | i \rangle \langle i | \phi \rangle = \int_{Riem} dE \langle \psi | E \rangle \langle E | \phi \rangle = \int_{Riem} dx \langle \psi | x \rangle \langle x | \phi \rangle = \\ &= \iint_{Riem} dx dE \langle \psi | x \rangle \langle x | E \rangle \langle E | \phi \rangle, \end{aligned} \quad (1.13)$$

gdzie $|i\rangle$, $i = 1, 2, \dots$ jest dyskretnym układem bazowym, a funkcje falowe $\psi(x) \equiv \langle x | \psi \rangle$ oraz $\phi(E) \equiv \langle E | \phi \rangle$ są funkcjami gładkimi i całkujemy w sensie Riemann'a. W przestrzeni Hilberta amplitudę prawdopodobieństwa obliczamy jako:

$$\langle \psi | \phi \rangle = \int_{Leb} dx \psi^*(x) \phi(x) = \int_{Leb} dE \psi^*(E) \phi(E). \quad (1.14)$$

W tym przypadku całkujemy w sensie Lebesgue'a i funkcje falowe należą do klasy $\{\psi_1(x), \psi_2(x), \dots\} \in \mathcal{L}^2$ zawierającej również funkcje $\psi(x) \notin \mathcal{S}$. Ponieważ fizycy mają do czynienia tylko z gładkim rozkładem energii $|\phi(E)|^2$ oraz gładkim rozkładem prawdopodobieństwa znalezienia cząstki $|\psi(x)|^2$ dlatego wybór całkowania w sensie Lebesgue'a dla funkcji $\phi(E)$ i $\psi(x)$ jako narzędzie, wydaje się mało korzystny. Jednak to właśnie wybór (1.14), a nie (1.13) pozwala nam pracować w przestrzeni Hilberta jako zupełnej przestrzeni topologicznej.

Tylko dla $\langle E | \phi \rangle = \phi^{\text{gładkie}}(E) \in \mathcal{S}$ i jeśli ograniczymy się do całek typu (1.13), możemy nadać dla symbolu $\langle E |$ w $\langle E | \phi \rangle$ sens matematyczny jako wartość antyliniowego funkcjonału $\langle E |$ na elemencie $\phi \in \Phi$. Możemy wtedy definiować $\langle E |$ jako elementy $\Phi^\times$ przestrzeni ciągłych antyliniowych funkcjonałów na Φ . Jest to możliwe tylko dla funkcji gładkich $\phi(E)$, to znaczy dla $\phi \in \Phi$, a nie dla wszystkich elementów przestrzeni Hilberta dlatego $\mathcal{H}^\times \subset \Phi^\times$. Korzystając z twierdzenia Frecheta–Riesza [17] otrzymamy trójkę przestrzeni (trójka Gelfanda) lub wzbogaconą przestrzeń Hilberta:

$$\Phi \subset \mathcal{H} = \mathcal{H}^\times \subset \Phi^\times. \quad (1.15)$$

Podsumowując, przestrzeń Hilberta zawiera zbyt szeroką klasę obiektów. Jeśli rozpatrujemy tylko wielkości skojarzone z makroskopowymi własnościami aparatury pomiarowej, otrzymujemy tylko gładkie rozkłady energii $\phi(E) \in \mathcal{S}$, a więc nie każdy element $L^2(\mathbb{R})$ opisuje stany możliwe fizycznie. Z drugiej strony chcielibyśmy opisywać także pojedyncze mikrostan, ale wektory opisujące je nie należą do przestrzeni Hilberta. Stany

rozproszeniowe Diraca $|\mathbf{p}\rangle$ nie mogą być reprezentowane w przestrzeni Hilberta. Ponadto wektory Gamowa $|E_R - i\Gamma/2\rangle$ stanów rozpadu reprezentujące mikroukład fizyczny z dobrze zdefiniowaną energią rezonansową E_R oraz czasem życia $\hbar/\Gamma$ też nie mogą być reprezentowane jako stany w przestrzeni Hilberta $\mathcal{H}$. Trudności powyższe zmuszają nas do skonstruowania nieco ogólniejszej struktury, w której można je ominąć

1.2 Konstrukcja wzbogaconej przestrzeni Hilberta.

1.2.1 Przestrzeń topologiczna

Wprowadźmy przestrzeń liniową⁶ Ψ . Przestrzeń Ψ nazwiemy unitarną gdy zdefiniujemy w niej iloczyn skalarny⁷. Za pomocą iloczynu skalarnego można w tej przestrzeni zdefiniować normę $\|\phi\| = \sqrt{(\phi, \phi)}$ i przestrzeń Ψ staje się przestrzenią unormowaną.

Przestrzeń Ψ będzie liniową przestrzenią topologiczną⁸ (w której spełniony jest aksjomat przeliczalności) jeśli:

1. Ψ jest przestrzenią liniową,
2. Dla ciągu elementów Φ pojęcie granicy jest zdefiniowane (granica jest określona jednoznacznie i podciągi ciągu zbieżnego są zbieżne do tej samej granicy),

⁶Przestrzenią liniową $\Psi \ni \psi$ nad zbiorem liczb zespolonych $\mathbb{C} \ni \alpha$ jest zbiór, w którym suma $\Phi \times \Phi \rightarrow \Phi : \phi + \psi = \psi + \phi$ oraz iloczyn przez liczbę $\Psi \times \mathbb{C} \rightarrow \Psi : \alpha\psi = \phi$ są zdefiniowane, że: $\alpha_1(\alpha_2\psi) = (\alpha_1\alpha_2)\psi$, $\alpha(\psi + \phi) = \alpha\psi + \alpha\phi$, $1 \cdot \psi = \psi$ oraz $(\alpha_1 + \alpha_2)\psi = \alpha_1\psi + \alpha_2\psi$

⁷Iloczyn skalarny to funkcja $\Psi \times \Psi \rightarrow \mathbb{C}$ posiadający następujące własności:

- $(\phi, \phi) \geq 0$, $(\phi, \phi) = 0 \Leftrightarrow \phi = 0$,
- $(\phi, \psi + \eta) = (\phi, \psi) + (\phi, \eta)$,
- $(\alpha\phi, \psi) = \overline{\alpha}(\phi, \psi)$,
- $(\phi, \psi) = \overline{(\psi, \phi)}$,

dla każdego $\phi, \psi, \eta \in \Psi$ oraz $\alpha \in \mathbb{C}$.

⁸Topologia – Niech X będzie dowolnym zbiorem oraz $\mathcal{T}$ pewną rodziną podzbiorów zbioru X . Parę $(X, \mathcal{T})$ nazywamy **przestrzenią topologiczną** jeżeli spełnione są warunki:

1. $\emptyset, X \in \mathcal{T}$,
2. jeżeli dla dowolnego $t \in T$ zbiór $U_t \in \mathcal{T}$ to $(\bigcup_{t \in T} U_t) \in \mathcal{T}$,
3. jeżeli $U_1, U_2 \in \mathcal{T}$, to $(U_1 \cap U_2) \in \mathcal{T}$.

Przestrzeń topologiczną X nazywamy T_2 -przestrzenią lub **przestrzenią Hausdorffa**, jeżeli $\forall x, x' \in X$, $x \neq x' \exists U, U' -$ zbiory otwarte w $X : (x \in U, x' \in U') \wedge U \cap U' = \emptyset$.

3. Algebraiczne operacje liniowej przestrzeni są ciągłe, to znaczy:

- (a) i. Jeśli $\Phi \ni \phi_n \rightarrow \phi \in \Phi$ wtedy także $\alpha\phi_n \rightarrow \alpha\phi$ dla $\alpha \in \mathbb{C}$.
ii. Jeśli $\mathbb{C} \ni \alpha_n \rightarrow \alpha \in \mathbb{C}$ wtedy także $\alpha_n\phi \rightarrow \alpha\phi$ dla każdego $\phi \in \Phi$.
- (b) Jeśli $\phi_n \rightarrow \phi$ oraz $\psi_n \rightarrow \psi$ wtedy $\phi_n + \psi_n \rightarrow \phi + \psi$ dla $\phi_n, \psi_n, \phi, \psi \in \Phi$; $n = 1, 2, \dots$

W tak otrzymanej przestrzeni liniowej zbieżność może być zdefiniowana na różne sposoby. Wszystkie pojęcia topologiczne takie jak ciągłość, ograniczoność, zupełność zależą od definicji zbieżności.

Funkcję $\|\phi\|$ nazywamy normą gdy:

$$\forall \lambda \quad \|\lambda\phi\| = |\lambda| \|\phi\|, \quad (1.16a)$$

$$\|\phi + \psi\| \leq \|\phi\| + \|\psi\| \quad \text{nierówność trójkąta}, \quad (1.16b)$$

$$\|\phi\| = 0 \Rightarrow \phi = 0. \quad (1.16c)$$

Gdy warunek (1.16c) nie jest spełniony wówczas mamy do czynienia z półnormą. Mając w ten sposób zdefiniowane pojęcie normy, możemy w prosty sposób zdefiniować zbieżność.

Ciąg $\{\phi_1, \phi_2, \dots\}$ jest zbieżny do ϕ jeśli:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|\phi_n - \phi\| = 0. \quad (1.17)$$

Zbieżność zdefiniowaną w (1.17) nazywamy zbieżnością w sensie normy lub silną zbieżnością. Przestrzeń, w której zdefiniujemy normę nazywamy przestrzenią unormowaną. Wprowadzając w różny sposób normę możemy otrzymać różne liniowe przestrzenie topologiczne.

Wprowadźmy normę za pomocą iloczynu skalarnego:

$$\|\phi\| = \sqrt{(\phi, \phi)}. \quad (1.18)$$

Otrzymujemy dzięki temu topologię $\tau_{\mathcal{H}}$, za pomocą której możemy wprowadzić pojęcie zbieżności, ciągłości itp. Jeżeli przy tak określonej zbieżności za pomocą topologii $\tau_{\mathcal{H}}$ w przestrzeni unitarnej Φ istnieją granice ciągów Cauchy'ego⁹ to otrzymujemy unormowaną liniową przestrzeń zupełną. Każdą przestrzeń unormowaną można uzupełnić do

⁹Ciąg $\{x_n\}$ elementów w przestrzeni z normą jest nazywany ciągiem Cauchy'ego względem $\tau_{\mathcal{H}}$ jeśli:

$$\forall \varepsilon > 0 \exists N : \|x_n - x_m\| < \varepsilon \text{ dla każdego } n, m > N. \quad (1.19)$$

przestrzeni zupełnej. Uzupełniając przestrzeń unitarną Φ względem topologii $\tau_{\mathcal{H}}$ określonej przez normę (1.18) otrzymamy przestrzeń Hilberta $\mathcal{H}$. Tak więc $\mathcal{H}$ jest uzupełnieniem przestrzeni unitarnej Φ względem topologii $\tau_{\mathcal{H}}$. Φ jest $\tau_{\mathcal{H}}$ -gęstą¹⁰ podprzestrzenią $\mathcal{H}$.

Definiując ciąg norm $\|\phi\|_p$ i za pomocą tego ciągu norm wprowadzając „nową” topologię τ_{Φ} w której zbieżność jest określona

$$\phi_n \xrightarrow{\tau_{\Phi}} \phi \Leftrightarrow \|\phi_n - \phi\|_p \rightarrow 0 \quad \forall p, \quad (1.20)$$

otrzymamy przeliczalną przestrzeń unormowaną.

Na przykład [19] definiując topologię w przestrzeni $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ funkcji nieskończenie gładkich za pomocą ciągu norm:

$$\|\phi\|_{\sigma} = \max_{\substack{|\alpha| \leq \sigma \\ |\beta| \leq \sigma}} \sup_{x \in \mathbb{R}^n} |x^{\alpha} D^{\beta} \phi(x)| \quad \sigma = 0, 1, 2, \dots, \quad (1.21)$$

gdzie $|\alpha| = \alpha_1 + \dots + \alpha_n$, $x^{\alpha} = x_1^{\alpha_1} x_2^{\alpha_2} \dots x_n^{\alpha_n}$ oraz $D^{\alpha} = \frac{\partial^{\beta_1 + \dots + \beta_n}}{\partial x_1^{\beta_1} \dots \partial x_n^{\beta_n}}$, otrzymamy zupełną przestrzeń liniową funkcji nieskończenie gładkich – przestrzeń Schwartz’a.

Przestrzeń ciągłych funkcjonałów liniowych – dystrybucji temperowanych określonych na przestrzeni z tak określoną topologią nazywamy przestrzenią sprzężoną $\mathcal{S}^{\times}$. Tak określone funkcjonały liniowe w nieskończoności rosną nie szybciej niż dowolny wielomian.

Innym przykładem dla jednowymiarowego oscylatora harmonicznego może być [8, 9] zdefiniowanie iloczynu skalarnego oraz normy przy pomocy wzorów:

$$(\phi, \psi)_p = (\phi, (N+1)^p \psi) \quad p = 0, 1, 2, \dots \quad (1.22a)$$

$$\|\phi\|_p = \sqrt{(\phi, \phi)_p}, \quad (1.22b)$$

gdzie:

$$N = a^+ a = \frac{1}{\omega \hbar} H - \frac{1}{2} \mathbb{I}, \quad (1.23)$$

N jest operatorem liczby obsadzeń, oraz

¹⁰Podprzestrzeń S zupełnej przestrzeni topologicznej X jest nazywana gęstą jeśli:

$$S \bigcup \{\text{wszystkie punkty graniczne } S\} = X.$$

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} Q + \frac{i}{\sqrt{m\omega\hbar}} P, \quad (1.24a)$$

$$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} Q - \frac{i}{\sqrt{m\omega\hbar}} P, \quad (1.24b)$$

są operatorami kreacji i anihilacji. Operator N jest operatorem istotnie samosprężonym. Wybór normy w postaci (1.22b) zapewnia nam, że w przestrzeni Φ uzupełnionej względem topologii indukowanej przez normę (1.22b) operatory reprezentujące obserwabie będą ciągłe i ograniczone.

Ze zbieżności względem topologii τ_Φ wynika zbieżność względem topologii $\tau_\mathcal{H}$ gdyż

$$\text{z } \phi_n \xrightarrow{\tau_\Phi} \phi \text{ wynika, że } \phi_n \xrightarrow{\tau_\mathcal{H}} \phi \text{ ale nie odwrotnie.} \quad (1.25)$$

Tak więc można do danego zagadnienia dopasować przestrzeń stanów Φ wraz z określoną w niej topologią tak aby otrzymać zupełną przeliczalną, unormowaną przestrzeń topologiczną, która jest podprzestrzenią przestrzeni Hilberta $\mathcal{H}$

$$\Phi \subset \mathcal{H}. \quad (1.26)$$

1.2.2 Przestrzeń dualna $\Phi^\times$

W tak „zawężonej” przestrzeni $\Phi \subset \mathcal{H}$ zdefiniujemy antyliniowe funkcjonały, to znaczy funkcje $F(\phi) \equiv \langle \phi | F \rangle$ określone na przestrzeni Φ mające wartości w ciele liczb zespolonych $\mathbb{C}$ spełniające warunek:

$$F(\alpha\phi + \beta\psi) = \bar{\alpha}F(\phi) + \bar{\beta}F(\psi) \quad (1.27a)$$

lub w innej notacji

$$\langle \alpha\phi + \beta\psi | F \rangle = \bar{\alpha}\langle \phi | F \rangle + \bar{\beta}\langle \psi | F \rangle. \quad (1.27b)$$

Funkcjonał antyliniowy jest funkcjonałem ciągłym jeśli:

$$\phi_n \rightarrow \phi \text{ implikuje, że } F(\phi_n) \xrightarrow{\mathbb{C}} F(\phi) \text{ dla } n \rightarrow \infty, \quad (1.28)$$

gdzie $\xrightarrow{\mathbb{C}}$ oznacza zbieżność w sensie liczb zespolonych¹¹.

Tak zdefiniowana ciągłość zależy od definicji zbieżności w danej przestrzeni topologicznej czyli od topologii tej przestrzeni. Jedną z możliwych definicji zbieżności w przestrzeni $\Phi^\times$ jest zbieżność słaba.

¹¹Ciąg $\{\alpha_n\} \in \mathbb{C}$ jest zbieżny do $\alpha \in \mathbb{C}$ jeśli $|\alpha_n - \alpha| \rightarrow 0$ dla $n \rightarrow \infty$.

Ciąg funkcyjonałów $\{F_m\} \in \phi^x$ jest zbieżny słabo lub τ_x -zbieżny do $F \in \Phi^\times$ jeśli:

$$\langle \phi | F_m \rangle \xrightarrow{\mathbb{C}} \langle \phi | F \rangle \quad \text{gdzie } m \rightarrow \infty, \quad (1.29)$$

dla każdego $\phi \in \Phi$, oraz $m \in \mathbb{N}$.

Zbiór wszystkich antyliniowych funkcyjonałów nad przestrzenią Φ tworzy przestrzeń liniową $\Phi^\times$, która jest przestrzenią sprzężoną (dualną) do przestrzeni Φ . Przestrzeń $\Phi^\times$ jest przestrzenią zupełną względem topologii określonej za pomocą (1.29) słabej zbieżności τ_x . Podobnie możemy zdefiniować przestrzeń sprzężoną do przestrzeni Hilberta $\mathcal{H}$ jako przestrzeń antyliniowych funkcyjonałów określonych na elementach przestrzeni Hilberta.

Oznaczmy:

1. $\Phi^\times$ jako zbiór wszystkich $F^\Phi \equiv |F^\Phi\rangle$ o własności:

$$F^\Phi(\phi_n) \xrightarrow{\mathbb{C}} F^\Phi(\phi) \quad \text{dla wszystkich } \phi_n \xrightarrow{\tau_\Phi} \phi. \quad (1.30)$$

2. $\mathcal{H}^\times$ jako zbiór wszystkich $F^\mathcal{H} \equiv |F^\mathcal{H}\rangle$ o własności:

$$F^\mathcal{H}(\phi_n) \xrightarrow{\mathbb{C}} F^\mathcal{H}(\phi) \quad \text{dla wszystkich } \phi_n \xrightarrow{\tau_\mathcal{H}} \phi. \quad (1.31)$$

Z (1.25) wynika, że warunek (1.31) jest mocniejszy niż warunek (1.30) ponieważ jest więcej ciągów dla których $\phi_n \xrightarrow{\tau_\mathcal{H}} \phi$ niż ciągów dla których $\phi_n \xrightarrow{\tau_\Phi} \phi$, dlatego

$$\mathcal{H}^\times \subset \Phi^\times. \quad (1.32)$$

Zgodnie z twierdzeniem Frecheta-Riesza (zob. między innymi [9]) przestrzeń Hilberta jest przestrzenią samosprzężoną to znaczy $\mathcal{H}^\times = \mathcal{H}$. Innymi słowy dowolny ciągły antyliniowy funkcyjonał określony na przestrzeni Hilberta może być zapisany jako iloczyn skalarny $\langle \phi | F \rangle = F(\phi) \equiv (\phi, f)$, gdzie wektor $f \in \mathcal{H}$ jednoznacznie definiuje funkcyjonał¹² F .

Podsumowując: zależności między przestrzenią Φ zupełną względem topologii τ_Φ (1.20) indukowanej przez ciąg norm, przestrzenią Hilberta jako przestrzenią zupełną względem topologii indukowanej przez „zwykły” iloczyn skalarny oraz przestrzeniami do nich algebraicznie sprzężonymi $\mathcal{H}^\times$ i $\Phi^\times$ można zapisać jako:

$$\Phi \subset \mathcal{H} = \mathcal{H}^\times \subset \Phi^\times, \quad (1.33)$$

co tworzy strukturę zwaną wzbogaconą przestrzenią Hilberta lub trójką Gelfanda. [15, 16]

¹²Wprowadzając przestrzeń funkcyjonałów na funkcyjonałach $F^\mathcal{H}$, którą oznaczmy $\mathcal{H}^{\times \times}$ możemy zauważyć, że istnieje wzajemnie jednoznaczne utożsamienie między elementami $\mathcal{H}$ i $\mathcal{H}^{\times \times}$. Przestrzeń posiadająca taką własność $\mathcal{H} = \mathcal{H}^{\times \times}$ nazywamy refleksywnymi.

1.2.3 Operatory liniowe we wzbogaczonej przestrzeni Hilberta

Obecnie zajmujemy się operatorami działającymi w tak skonstruowanej przestrzeni.

Operator $B^\times$ nazywamy ciągłym w $\Phi^\times$ jeśli jest odwzorowaniem $\Phi^\times \rightarrow \Phi^\times$ spełniającym następujące warunki:

$$B^\times(\alpha F_1 + \beta F_2) = \alpha B^\times(F_1) + \beta B^\times(F_2), \quad (1.34)$$

gdzie $F_1, F_2 \in \Phi^\times$; $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$, oraz dla każdego $\phi \in \Phi$ istnieje stała $K > 0$ oraz elementy $\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n \in \Phi$ takie, że:

$$|\langle \phi | B^\times F \rangle| \leq K (|\langle \phi_1 | B^\times F \rangle| + \dots + |\langle \phi_n | B^\times F \rangle|). \quad (1.35)$$

Warunek (1.34) gwarantuje liniowość operatora $B^\times$, natomiast (1.35) dotyczy jego ciągłości. Konsekwencją ciągłości operatora $B^\times$ jest:

$$F_m \xrightarrow{\tau_\times} F \Rightarrow B^\times F_m \xrightarrow{\tau_\times} B^\times F \quad \text{dla } m \rightarrow \infty. \quad (1.36)$$

Niech A będzie τ_Φ -ciągłym istotnie samosprzężonym¹³ operatorem liniowym w Φ . Zdefiniujemy rozszerzenie tego operatora do $\Phi^\times$ następująco:

$$\langle \phi | A^\times F \rangle = F(A\phi) = \langle A\phi | F \rangle, \quad \forall \phi \in \Phi, F \in \Phi^\times. \quad (1.37)$$

Jest to uogólnienie zwykłego sprzężenia operatora A^* w przestrzeni Hilberta. Operator $A^\times$ jest operatorem ciągłym w $\Phi^\times$. Korzystając z relacji między przestrzeniami liniowymi (1.33) możemy wprowadzić analogiczną zależność między operatorami w tych przestrzeniach:

$$A \subset \bar{A} \subset A^\times, \quad (1.38)$$

gdzie $\bar{A}$ jest domknięciem operatora A w $\mathcal{H}$.

Jeśli operator A nie jest operatorem istotnie samosprzężonym w Φ , ale jego dziedzina jest gęsta w $\mathcal{H}$ to jego sprzężenie w przestrzeni Hilberta $A^\dagger$ jest dobrze zdefiniowane. Ponadto jeśli $\forall \phi \in \Phi \ A^\dagger \phi \in \Phi$ (to znaczy $A^\dagger \Phi \subset \Phi$), a także $A^\dagger$ jest operatorem $\tau_\times$ -ciągłym (w sensie słabej zbieżności) to możemy zdefiniować rozszerzenie $A^\times$ do $\Phi^\times$ poprzez:

$$\langle \phi | A^\times F \rangle = \langle A^\dagger \phi | F \rangle \quad \forall \phi \in \Phi \ F \in \Phi^\times, \quad (1.39)$$

gdzie $A^\times$ będzie operatorem $\tau_\times$ -ciągłym.

¹³Operator A jest samosprzężony jeśli $\mathcal{D}(A)$ jest gęsta w $\mathcal{H}$ oraz $A^\dagger = A$ to znaczy A jest symetryczny i $D(A^\dagger) = D(A)$.

Operator A jest istotnie samosprzężony jeśli jego domknięcie $\bar{A}$ jest samosprzężone.

Gdy operator A jest istotnie samosprężony (lub symetryczny¹⁴) to $A\phi = A^\times\phi \in \Phi$. Dlatego (1.37) możemy traktować jako szczególny przypadek (1.39).

Zajmijmy się teraz zagadnieniem własnym operatora. Zanim przejdziemy do omówienia uogólnionych wektorów własnych operatora w przestrzeni Φ , przypomnijmy jak wygląda to w przestrzeni Hilberta $\mathcal{H}$.

Wektor $\xi \neq 0$ oraz $\xi \in \mathcal{H}$ nazywamy wektorem własnym operatora A jeśli:

$$A\xi = \alpha\xi \quad \text{gdzie} \quad \alpha \in \mathbb{C}. \quad (1.40)$$

W przypadku ogólnym nie każdy operator ma wektory własne $\xi \in \mathcal{H}$. Wiadomo, że operatory położenia Q i pędu P nie mają wektorów własnych będących elementami przestrzeni Hilberta, chociaż powszechnie stosuje się notację Diraca $P|p\rangle = p|p\rangle$ oraz $Q|q\rangle = q|q\rangle$.

Założmy, że A jest operatorem w Φ , który możemy rozszerzyć do Φ^x . Uogólniony wektor własny tak rozszerzonego operatora związany z uogólnioną wartością własną λ jest funkcjonałem antyliniowym $F \in \Phi^x$ takim, że:

$$F(A^\dagger\phi) = \langle A^\dagger\phi|F\rangle = \langle\phi|A^\times F\rangle = \lambda\langle\phi|F\rangle \quad \forall \phi \in \Phi. \quad (1.41a)$$

co możemy zapisać w krótszej formie:

$$A^\times F = \lambda F, \quad (1.41b)$$

lub w notacji Diraca:

$$A^\times|F\rangle = \lambda|F\rangle. \quad (1.41c)$$

Jeżeli wektor uogólniony jest elementem przestrzeni Hilberta $F \in \mathcal{H}^\times = \mathcal{H}$ to możemy napisać:

$$\langle A^\dagger\phi|F\rangle = (A^\dagger\phi, f) = (\phi, Af) = \lambda(\phi, f), \quad (1.42)$$

gdzie $(\ , \)$ jest zwykłym iloczynem w przestrzeni Hilberta. Jak widać, gdy uogólnione wektory należą do przestrzeni Hilberta, to (1.42) staje się zwykłym zagadnieniem własnym¹⁵.

¹⁴Operator A działający w $\mathcal{H}$ jest operatorem symetrycznym jeśli $\mathcal{D}(A)$ jest gęsty w $\mathcal{H}$ oraz $(A\phi, \psi) = (\phi, A\psi)$ dla każdego $\phi, \psi \in \mathcal{D}(A)$, innymi słowy $A \subset A^\dagger$.

¹⁵W przestrzeni Hilberta skończenie wymiarowej operator A ma zupełny układ wektorów własnych $\xi_i = |\xi_i\rangle \in \mathcal{H}$ taki, że:

Założymy, że przestrzeń Φ jest przestrzenią jądrową¹⁶, oraz operator A jest operatorem samosprzężonym. Jądrowe twierdzenie spektralne [15, 16, 17] zapewnia, że operator A posiada zupełny ortonormalny zbiór uogólnionych wektorów własnych $F_\lambda \in \Phi^x$, $\lambda \in \mathbb{C}$, co oznacza, że dla każdego $\phi, \psi \in \Phi$ mamy:

$$\langle \phi | \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}} F_\lambda(\phi) \overline{F_\lambda(\psi)} d\mu(\lambda) = \int_{\mathbb{R}} \langle \phi | F_\lambda \rangle \langle F_\lambda | \psi \rangle d\mu(\lambda), \quad (1.44)$$

gdzie $\overline{F_\lambda(\psi)} = \langle \psi | F_\lambda \rangle = \langle F_\lambda | \psi \rangle$, dla miary μ na zbiorze $\mathbb{R}$. Miarę tą możemy rozbić na dwie części (z punktu widzenia zastosowań fizycznych):

- dyskretne spektrum operatora, $d\mu(\lambda) = \sum_i \delta(\lambda - \lambda_i) d\lambda$,
- absolutnie ciągłe spektrum operatora $d\mu(\lambda) = \rho(\lambda) d\lambda$.

Przy tak zdefiniowanym zagadnieniu własnym stanów kwantowych możemy bez utraty ścisłości matematycznej rozpatrywać zarówno stany związane jak i stany rozproszeniowe, a także stany rozpadów.

Z powyższych rozważań jednoznacznie wynika, że przejście od formalizmu zwykłej przestrzeni Hilberta do formalizmu wzbogaconej przestrzeni Hilberta znacznie komplikuje matematyczny aparat mechaniki kwantowej. Jest to cena jaką fizycy muszą zapłacić za możliwość ścisłego sformułowania teorii stanów Gamowa.

$$A\xi_i = \lambda_i \xi_i \quad (\xi_i, \xi_j) = (\lambda_i, \lambda_j) = \delta_{ij}.$$

Tak więc dla każdego $\xi \in \mathcal{H}$ możemy napisać:

$$\xi = \sum_{i=1}^n |\lambda_i\rangle (\lambda_i | \xi) \quad n = \dim \mathcal{H}. \quad (1.43)$$

Zbiór $\Lambda = \{\lambda_1, \dots, \lambda_n\}$ wartości własnych operatora A nazywamy spektrum A .

W przestrzeni Hilberta nieskończenie wymiarowej powyższe stwierdzenie nie jest prawdziwe. Spektrum operatora A nazywamy zbiór Λ liczb zespolonych, dla których rezolwenta jest osobliwa.

¹⁶Przeliczalna przestrzeń Hilberta z ciągiem norm (1.20) nazywamy jądrową jeśli dla każdego m istnieje n takie, że odwzorowanie T_m^n przestrzeni Φ_n w przestrzeń Φ_m jest jądrowe, to znaczy ma postać:

$$T_m^n \varphi = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k (e_k, \varphi)_n h_k,$$

gdzie $\varphi \in \Phi_n$, $\{e_k\}$ i $\{h_k\}$ to ortonormalne bazy w Φ_n i Φ_m odpowiednio, $\lambda_k > 0$ oraz $\sum_{k=0}^{\infty} \lambda_k < \infty$. Przestrzenie Φ_m oraz Φ_n są uzupełnieniami przestrzeni Φ względem ciągu norm (1.20).

1.3 Podsumowanie

W tym rozdziale w dużym zarysie została omówiona historyczna droga rozwoju matematycznej struktury opisującej zjawiska kwantowe w jej ujęciu nierelatywistycznym. Pokazaliśmy jak stopniowo wprowadzano nowe teorie w celu uściślenia znaczenia matematycznego stosowanych pojęć, oraz staraliśmy się ukazać jakie trudności nasuwają się przy opisie niektórych stanów kwantowych. Następnie w zarysie zreferowaliśmy sposób „wzbogacenia” teorii kwantowej w ujęciu w przestrzeni Hilberta aby zwiększyć zakres możliwych do opisanie zjawisk kwantowych bez utraty matematycznej ścisłości. Wprowadzenie bogatszej struktury opartej na trzech przestrzeniach liniowych pozwala nam sprecyzować matematyczne pojęcie stanów kwantowych tak, aby zawierały w sobie te przypadki, które trudno wprowadzić w ujęciu mechaniki kwantowej w przestrzeni Hilberta. Jest to oczywiście tylko jedna z wielu możliwych dróg uściślenia teorii kwantowej, ciekawa o tyle, że pozwala nie tylko opisywać stany dotychczas nie mieszczące się w ramach przestrzeni Hilberta ale także możliwe jest wprowadzenie „strzałki czasu” w oparciu o ewolucję czasową wektorów Gamowa. Zagadnienie to jest szeroko omawiane w literaturze (np. [18]).

Rozdział 2

Wektory Gamowa

2.1 Rezonanse jako bieguny macierzy S

Eksperymenty rozproszeniowe są jednym z podstawowych źródeł wiedzy na temat budowy materii. Teoria rozproszenia jest od wielu lat rozwijana i stosowana w wielu dziedzinach badań. Ogólnie można powiedzieć, że zjawisko zderzenia cząstek polega na tym, że dwie cząstki początkowo oddalone od siebie na tyle, że praktycznie nie oddziałują ze sobą poruszają się swobodnie aż do momentu gdy wejdą w obszar oddziaływania wzajemnego. Skutkiem tych oddziaływań jest wiązka cząstek rozbiegających się w różnych kierunkach na tyle daleko od siebie, że po pewnym czasie znowu poruszają się praktycznie swobodnie. Oczywiście nie zawsze oddziaływanie między obiektami może być krótkozasięgowe, ale w większości zastosowań fizycznych mamy do czynienia z takim typem oddziaływań. Oddziaływania między cząstkami mogą mieć różny charakter. Na przykład przy niewielkich energiach oddziaływania mają zwykle charakter sprężysty, natomiast przy większych energiach zderzenia są niesprężyste i prowadzą do powstania lub rozpadu cząstek.

Niech cząstka porusza się w polu o potencjale V . Zgodnie z ewolucją czasową generowaną przez Hamiltonian $H = H_0 + V$ stan cząstki w chwili t jest określony w następujący sposób $\psi(t) = U(t)\psi$, gdzie $U(t) = e^{-itH}$ jest operatorem unitarnym ewolucji układu w czasie, natomiast ψ jest stanem cząstki w chwili $t = 0$. W dużej odległości od obszaru oddziaływania cząstka porusza się praktycznie swobodnie i opisywana jest operatorem ewolucji dla stanu swobodnego $U_0(t) = e^{-itH_0}$. Zakładamy, że w dalekiej przeszłości oraz w przyszłości dla czasu $t \rightarrow -\infty$

$$U(t)\psi \rightarrow U_0(t)\phi^{in}, \quad (2.1)$$

oraz dla $t \rightarrow +\infty$

$$U(t)\psi \rightarrow U_0(t)\phi^{out}, \quad (2.2)$$

a mówiąc dokładniej

$$\lim_{t \rightarrow \mp\infty} \|e^{-itH}\psi - e^{-itH_0}\phi^{in(out)}\| = 0. \quad (2.3)$$

Korzystając z unitarności operatorów ewolucji dostaniemy

$$\lim_{t \rightarrow \mp\infty} \|\psi - e^{itH}e^{-itH_0}\phi^{in(out)}\| = 0. \quad (2.4)$$

Możemy więc wprowadzić operatory zwane operatorami falowymi lub Möllera [27, 28]. (a także np. [2])

$$\Omega_{\pm} = \lim_{t \rightarrow \mp\infty} e^{itH}e^{-itH_0}. \quad (2.5)$$

Działając na stan $\phi^{in}, \phi^{out} \in \mathcal{H}$ otrzymamy stan $\psi = \Omega_{\pm}\phi^{in(out)}$ w chwili $t = 0$ taki, że $U(t)\psi \xrightarrow{t \rightarrow \mp\infty} U_0(t)\phi^{in(out)}$.

W eksperymentach rozproszeniowych pomiaru dokonujemy przygotowując stan początkowy cząstki ϕ^{in} na długo przed zderzeniem $t \rightarrow -\infty$ oraz na długo po rozproszeniu $t \rightarrow +\infty$ dokonujemy pomiaru stanu końcowego ϕ^{out} . Proces rozproszenia możemy opisywać jako przejście cząstki ze stanu początkowego do stanu końcowego wprowadzając operator przejścia

$$S : \phi^{in} \rightarrow \phi^{out} = S\phi^{in}. \quad (2.6)$$

Ponieważ operator S powinien transformować stany unormowane w stany unormowane dlatego powinien to być operator unitarny. Pamiętając, że $\Omega_+\phi_{in} = \phi$, oraz $\Omega_-\phi_{out} = \phi$ możemy napisać

$$\phi^{out} = \Omega_-^*\phi = \Omega_-^*\Omega_+\phi^{in}, \quad (2.7)$$

czyli

$$S = \Omega_-^*\Omega_+. \quad (2.8)$$

Przedstawiając funkcje stanu w reprezentacji energii $\phi(E) = \langle E|\phi \rangle$ operator rozproszenia także przyjmie postać w reprezentacji energii $S(E)$. Dokonując przedłużenia analitycznego z rzeczywistych wartości energii na zespolone $z = E + i\text{Im } z \in \mathbb{C}$ gdzie $E \equiv \text{Re } z, \text{Im } z \in \mathbb{R}$ odpowiednio część rzeczywista i urojona energii napotkamy szereg ciekawych własności takiego operatora. Biorąc pod uwagę, że E jest proporcjonalne do p^2 dostaniemy dwa płaty płaszczyzny Riemanna, z cięciem wzdłuż dodatniej rzeczywistej osi $E = \text{Re } z \geq 0$ pierwszy płat tzw. fizyczny zawiera stany związane będące biegunami operatora $S(z)$ na ujemnej osi rzeczywistej $E = \text{Re } z < 0$. Natomiast na płacie niefizycznym w pobliżu osi rzeczywistej dodatniej mamy bieguny rozłożone symetrycznie względem tej osi $z = E_R - i\frac{\Gamma}{2}$ oraz $z^* = E_R + i\frac{\Gamma}{2}$, które są związane ze

stanami rezonansowymi, a także bieguny na ujemnej osi rzeczywistej opisujące tzw. stany wirtualne.

2.2 Wzbogacona przestrzeń Hilberta

Wygodnie jest rozpatrywać rozproszenie wykorzystując aparat wzbogaconej przestrzeni Hilberta. Ze szczegółowym omówieniem tego tematu można się zapoznać w między innymi w pracach [9]. Niech stan początkowy $\phi^{in} \in \Phi$ gdzie $\Phi \subset \mathcal{H}$ jest podprzestrzenią przestrzeni Hilberta zawierającą wszystkie fizyczne stany początkowe tak określoną, aby bra i kety Dirac'a działały jako ciągle antyliniowe funkcjonały. Dzięki tak zawężonej przestrzeni wszelkie operacje algebraiczne na operatorach są dobrze określone. Analogicznie dobrze określone są stany mierzone po rozproszeniu $\phi^{out} \in \Phi$. Związek między stanami ϕ^{in} oraz ϕ^{out} jest następujący

$$(\psi^{out}, \phi^{out}) = (\psi^{out}, S\phi^{in}). \quad (2.9)$$

Wprowadźmy stany ϕ^+ oraz ψ^- w postaci

$$\Omega_+ \phi^{in} = \lim_{t \rightarrow +\infty} e^{itH} e^{-itH_0} \phi^{in} = \phi^+, \quad (2.10a)$$

$$\Omega_- \psi^{out} = \lim_{t \rightarrow -\infty} e^{itH} e^{-itH_0} \psi^{out} = \psi^-. \quad (2.10b)$$

Stany ϕ^{in} oraz ϕ^{out} ewoluują w czasie w oparciu o Hamiltonian swobodny H_0 natomiast stany ϕ^+ oraz ψ^- w oparciu o Hamiltonian oddziaływań $H = H_0 + V$. Z (2.10) widać, że stany ϕ^+ oraz ψ^- zmierzają do stanów ϕ^{in} oraz ϕ^{out} dla $t \rightarrow \mp\infty$ w odległej przeszłości i dalekiej przyszłości.

Podsumowując; $\phi^\mp \in \Phi_\pm$ jako elementy podprzestrzeni Hilberta $\Phi_\pm \subset \mathcal{H}$ mogą być reprezentowane przez funkcje

$$\phi^\pm(E) = \langle {}^\pm E | \phi^\pm \rangle = \langle E | \phi \rangle, \quad (2.11)$$

gdzie ϕ jest funkcją należącą do poddziedziny $\mathcal{D}(H_0)$ operatora Hamiltona cząstki swobodnej H_0 . Tworzymy wzbogacone przestrzenie Hilberta w postaci

$$\Phi_\pm \subset \mathcal{H} \subset \Phi_\pm^\times \quad (2.12)$$

z wektorami $\phi^+ \in \Phi_-$ oraz $\psi^- \in \Phi_+$. Matematyczną realizacją tak sformułowanych przestrzeni mogą być przestrzenie Schwarza tworzące trójkę Gelfanda $\mathcal{S} \subset L^2(\mathbb{R}) \subset \mathcal{S}^\times$. Dokładniej, $\Phi_\pm$ są zdefiniowane jako przestrzenie, które reprezentowane są przez funkcję

klasy Hardy'ego [29]. w górnej półpłaszczyźnie $S \cap H_+^2|_{\mathbb{R}^+}$ oraz w dolnej półpłaszczyźnie $S \cap H_-^2|_{\mathbb{R}^+}$ czyli:

$$\phi^+ \in \Phi_- \Leftrightarrow \langle^+ E | \phi^+ \rangle \in S \cap H_-^2|_{\mathbb{R}^+}, \quad (2.13a)$$

$$\psi^- \in \Phi_+ \Leftrightarrow \langle^- E | \psi^- \rangle \in S \cap H_+^2|_{\mathbb{R}^+}, \quad (2.13b)$$

gdzie oznaczenie $|_{\mathbb{R}^+}$ oznacza ograniczenie do dodatniej osi rzeczywistej. Jeżeli w (2.12) przestrzeń Hilberta $\mathcal{H}$ będzie zrealizowana jako przestrzeń funkcji całkowalnych z kwadratem w sensie Lebesgue'a $L^2(\mathbb{R}^+)$ to

$$S \cap H_{\pm}^2|_{\mathbb{R}^+} \subset L^2(\mathbb{R}^+) \subset (S \cap H_{\pm}^2|_{\mathbb{R}^+})^{\times} \quad (2.14)$$

tworzą dwie wzbogacone przestrzenie Hilberta [30].¹ Można także zdefiniować kolejne dwie wzbogacone przestrzenie Hilberta jako

$$\Psi_{\pm} \subset H_{\pm}^2 \subset \Psi_{\pm}^{\times}, \quad (2.15)$$

gdzie $\Psi_{\pm} = S \cap H_{\pm}^2$.

Korzystając z $\phi^{\pm} = \Omega_{\pm} \phi$ oraz z tego, że $|E\rangle$ tworzy zupełny zbiór wektorów własnych (funkcjonałów antyliniowych) dla H_0 możemy zapisać

$$|E^{\pm}\rangle = \Omega_{\pm} |E\rangle, \quad (2.16)$$

gdzie $E \in \mathbb{R}^+$, a $|E^{\pm}\rangle$ tworzy zupełny zbiór wektorów własnych dla operatora H .

Związek między stanami $|E^{\pm}\rangle$ a stanami cząstek swobodnych $|E\rangle$ możemy przedstawić za pomocą równania Lippmanna-Schwingera

$$|E^{\pm}\rangle = |E\rangle + \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} V |E^{\pm}\rangle, \quad (2.17)$$

gdzie $|E^{\pm}\rangle$ to wektory uogólnione operatora Hamiltona rozszerzonego na przestrzeń funkcyjonałów antyliniowych $\Phi_{\pm}^{\times}$

$$H^{\times} |E^{\pm}\rangle = E |E^{\pm}\rangle, \quad (2.18)$$

oraz $|E\rangle$ to wektory własne operatora Hamiltona dla cząstki swobodnej rozszerzonego do przestrzeni $\Phi_{\pm}^{\times}$

$$H_0^{\times} |E\rangle = E |E\rangle, \quad (2.19)$$

¹Funkcja analityczna $f(z)$ w górnej półpłaszczyźnie zespolonej $\mathbb{C}^+$ jest funkcją klasy Hardy'ego wtedy i tylko wtedy gdy

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |f(x + iy)| < \infty$$

dla dowolnego $y > 0$ oraz $\lim_{y \rightarrow 0} f(x + iy) = f(x)$.

2.3 Wektory Gamowa we wzbogaczonej przestrzeni Hilberta

Wektory Gamowa można zdefiniować jako bieguny operatora $S(E)$ przedłużonego analitycznie na zespoloną energię leżące na drugim płacie Riemanna w pobliżu osi rzeczywistej dodatniej.

Założmy, że cząstka rozpraszana jest w przez potencjał V . Hamiltonian będzie miał postać $H = H_0 + V$, gdzie H_0 jest Hamiltonianem cząstki nieoddziaływującej. Hamiltonian H posiada zarówno dyskretne widmo wartości własnych opisujące stany związane jak i absolutnie ciągle widmo dla stanów rozproszonych. Przestrzeń Hilberta $\mathcal{H}$ w której działa H można rozłożyć na podprzestrzeń $\mathcal{H}_p$ rozpiętą przez stany własne związane z widmem dyskretnym [9, 30] oraz podprzestrzeń $\mathcal{H}_{ac}$ prostopadłą do $\mathcal{H}_p$

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_p \oplus \mathcal{H}_{ac}. \quad (2.20)$$

Przestrzeń $\mathcal{H}_{ac}$ jest niezmiennicza względem działania operatora H to znaczy jeśli $\phi \in \mathcal{H}_{ac}$ oraz $\phi \in \mathcal{D}(H)$ wtedy $H\phi \in \mathcal{H}_{ac}$. Operator rozproszenia jest związany z operatorami falowymi Möllera (2.8) dlatego możemy napisać

$$\begin{aligned} (\psi^{out}(t), S\phi^{in}(t)) &= (\Omega_- \psi^{out}(t), \Omega_+ \phi^{in}(t)) = (\psi^-(t), \phi^+(t)) = \\ &= (\psi^-(0), \phi^+(0)) = \int_{\mathbb{R}^+} \psi^{-*}(E) S(E + i0) \phi^+(E) dE, \end{aligned} \quad (2.21)$$

gdzie $\psi^-(E) \in \Phi_+$ oraz $\phi^+(E) \in \Phi_-$ są stanami w reprezentacji energii, natomiast $\psi^-(0) = \Omega_- \psi^{out}$ i $\phi^+(0) = \Omega_+ \phi^{in}$ są tymi samymi stanami w reprezentacji Schrödingera. Korzystając z (2.11) całkę w równaniu (2.21) możemy napisać w postaci

$$\int_{\mathbb{R}^+} \langle^- \psi | E^- \rangle S(E + i0) \langle^+ E | \phi^+ \rangle dE, \quad (2.22)$$

gdzie $|E^\pm\rangle$ to uogólnione stany własne związane z Hamiltonianem $H = H_0 + V$ powiązane z $|E\rangle$ uogólnionymi stanami własnymi Hamiltonianu H_0 poprzez związki (2.16). Założmy, że operator $S(z)$ nie posiada żadnych osobliwości poza skończoną liczbą par biegunów na drugim płacie Riemanna oraz przy $z \rightarrow \infty$ operator $S(z)$ jest ograniczony lub zmierza do nieskończoności wolniej niż dowolny wielomian względem zmiennej z . Rozpatrzmy całkę

$$\int_0^\infty \langle^- \psi | E - i\varepsilon \rangle S_{II}(E - i\varepsilon) \langle^+ E - i\varepsilon | \phi^+ \rangle dE, \quad (2.23)$$

która jest zbieżna do (2.22) gdy $\varepsilon \rightarrow 0$. Upraszczając problem założmy, że mamy izolowany punkt osobliwy w dolnej półpłaszczyźnie drugiego płata. w punkcie $z_R = E_R - i\Gamma/2$. Deformując odpowiednio drogę całkowania [31, 30] tak aby obejmowała osobliwość w z_R możemy napisać

$$\begin{aligned} (\psi^-(t), \phi^+(t)) - \delta(\varepsilon) &= \int_{C_-} \langle^- \psi | z^- \rangle S_{II}(z) \langle^+ z | \phi^+ \rangle dz + \\ &+ \int_{\Delta} \langle^- \psi | z^- \rangle \frac{S_{-1}}{z - z_R} \langle^+ z | \phi^+ \rangle dz, \end{aligned} \quad (2.24)$$

gdzie droga całkowania C_- przebiega poniżej bieguna z_R oraz wzdłuż osi $E = \text{Re } z > 0$ natomiast droga całkowania Δ to kontur wokół bieguna. Ponadto S_{-1} to residuum $S(z)$ w punkcie $z = z_R$, a $\delta(\varepsilon)$ dowolna funkcja zespolona spełniająca warunek $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \delta(\varepsilon) = 0$. Pierwsza całka w (2.24) znika gdy promień konturu całkowania $r \rightarrow \infty$ [30] natomiast druga spełnia równość

$$\int_{\Delta} \langle^- \psi | z^- \rangle \frac{S_{-1}}{z - z_R} \langle^+ z | \phi^+ \rangle dz = 2\pi i \langle^- \psi | z_R^- \rangle S_{-1} \langle^+ z_R | \phi^+ \rangle. \quad (2.25)$$

Równanie (2.24) przyjmie postać

$$(\psi^-(t), \phi^+(t)) = C - 2\pi i S_{-1} \langle^- \psi | z_R^- \rangle \langle^+ z_R | \phi^+ \rangle, \quad (2.26)$$

gdzie

$$C = \int_{0 \text{ II}}^{-\infty} \langle^- \psi | E^- \rangle S_{II}(E) \langle^+ E | \phi^+ \rangle dE. \quad (2.27)$$

Analogicznie można pokazać, że dla $(\phi^+(t), \psi^-(t)) = (\psi^-(t), \phi^+(t))^*$ zachodzi

$$(\phi^+(t), \psi^-(t)) = C^* + 2\pi i S_{-1} \langle^+ \phi | z_R^{*+} \rangle \langle^- z_R^* | \psi^- \rangle, \quad (2.28)$$

gdzie

$$C^* = \int_{0 \text{ II}}^{-\infty} \langle^+ \phi | E^+ \rangle S_{II}(E) \langle^- E | \psi^- \rangle dE. \quad (2.29)$$

Zakładając, że (2.26) jest spełnione dla dowolnego stanu ψ^- otrzymamy

$$\phi^+ = \int_{0 \text{ II}}^{-\infty} |E^- \rangle S_{II}(E) \langle^+ E | \phi^+ \rangle dE - 2\pi i S_{-1} |z_R^- \rangle \langle^+ z_R | \phi^+ \rangle. \quad (2.30)$$

Podobnie z równania (2.28) dostaniemy

$$\psi^- = \int_{0 \text{ II}}^{-\infty} |E^+ \rangle S_{II}(E) \langle^- E | \psi^- \rangle dE + 2\pi i S_{-1} |z_R^{*+} \rangle \langle^- z_R^* | \psi^- \rangle. \quad (2.31)$$

Powyższe wyrażenia (2.30) oraz (2.31) to ciągłe antyliniowe funkcjonały działające w $\Psi_{\pm}$ i będące elementami przestrzeni $\Psi_{\pm}^{\times}$. Wektor ϕ^+ będziemy nazywać stanem rozpadu, który dla $t \rightarrow -\infty$ był przygotowany jako ϕ^{in} oraz ψ^- zwany stanem grow, który będzie rejestrowany dla $t \rightarrow \infty$ jako stan ψ^{out} . Można pokazać [30], że $|z_R^- \rangle$ oraz $|z_R^{*+} \rangle$ to także ciągłe antyliniowe funkcjonały działające w $\Psi_{\pm}$ i należące do przestrzeni $\Psi_{\pm}^{\times}$. Funkcjonały $|z_R^- \rangle \in \Psi_-^{\times}$ oraz $|z_R^{*+} \rangle \in \Psi_+^{\times}$ są uogólnionymi stanami własnymi Hamiltonianu $H = H_0 + V$ rozszerzonego do przestrzeni $\Psi_{\pm}^{\times}$.

Równanie

$$\begin{aligned} \langle {}^-\psi | H^{\times} z_R^- \rangle &= \langle {}^-\psi | z_R^- \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\langle {}^-\psi | E^- \rangle}{E - z_R} dE = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{E \langle {}^-\psi | E^- \rangle}{E - z_R} dE = z_R \langle {}^-\psi | z_R^- \rangle \end{aligned} \quad (2.32)$$

spełnione jest dla każdego ψ^- , więc można zapisać je w postaci

$$H^{\times} |z_R^- \rangle = z_R |z_R^- \rangle, \quad (2.33)$$

oraz analogicznie

$$H^{\times} |z_R^{*+} \rangle = z_R^* |z_R^{*+} \rangle. \quad (2.34)$$

Równania własne (2.33) oraz (2.34) zachodzą zarówno dla $\Psi_{\pm}$ jak i dla $\Phi_{\pm}$.

2.4 Zależność czasowa wektorów Gamowa

Operator ewolucji czasowej $U(t) = e^{-itH}$ w bazie wektorów własnych operatora Hamiltona przyjmuje postać e^{-itE} . Można rozszerzyć działanie tego operatora na przestrzeń Ψ , prowadzi to jednak do problemów związanych z urojoną częścią energii. Musimy rozpatrywać osobno ewolucję w czasie dla $t > 0$ oraz dla $t < 0$. Wprowadźmy dwie podgrupy operatorów ewolucji

$$\Psi_+^{\times} \supset U_+^{\times}(t) = (e^{-itH^{\times}})_+ \quad \text{dla } 0 \leq t < \infty, \quad (2.35a)$$

$$\Psi_-^{\times} \supset U_-^{\times}(t) = (e^{-itH^{\times}})_- \quad \text{dla } -\infty \leq t < 0. \quad (2.35b)$$

Przy tak zdefiniowanych operatorach ewolucji możemy uniknąć nieograniczoności członów $e^{\pm t \text{Im} z}$ zawierających urojoną część energii. Prowadzi to do następującej zależności od czasu dla stanów Gamowa $|z_R^- \rangle$ oraz $|z_R^{*+} \rangle$

$$U_-^{\times}(t) |z_R^- \rangle = e^{-itz_R} |z_R^- \rangle = e^{-itE_R} e^{-t\Gamma/2} |z_R^- \rangle \quad \text{dla } t \geq 0, \quad (2.36a)$$

$$U_+^{\times}(t) |z_R^{*+} \rangle = e^{-itz_R^*} |z_R^{*+} \rangle = e^{-itE_R} e^{t\Gamma/2} |z_R^{*+} \rangle \quad \text{dla } t < 0. \quad (2.36b)$$

2.5 Wektory Gamowa z rzeczywistymi wartościami własnymi.

Operator samosprężony we wzbożonej przestrzeni Hilberta może mieć zespolone wartości własne w przeciwieństwie do operatorów działających w przestrzeni Hilberta. Jeśli rozpatrzmy cząstkę poruszającą się w polu o potencjale $V(x)$ to dobierając warunki brzegowe tak aby mieć stany czysto wychodzące z obszaru oddziaływania dostaniemy wektory Gamowa, którym odpowiadają zespolone wartości własne energii w równaniu Schrödingera

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{x}) + V(\vec{x})\psi(\vec{x}) = \left(E_R - i\frac{\Gamma}{2}\right)\psi(\vec{x}), \quad (2.37)$$

gdzie E_R jest związana z energią stanu rezonansowego, natomiast Γ z jego szerokością. Zespolone wartości własne wprowadzają pewną komplikację nie tylko zmuszając do rozbudowania aparatu matematycznego do wzbożonej przestrzeni Hilberta, ale także natury interpretacyjnej związanej z pomiarem wielkości zespolonej, oraz normalizacją tak wprowadzonych wektorów stanu [32].

Pokażemy, że pozostając w ramach formalizmu przestrzeni Hilberta można wprowadzić formalizm wektorów Gamowa unikając stosowania zespolonych wartości własnych odpowiadającym takim stanom [33]. W tym celu rozpatrzmy przestrzeń Hilberta składającą się z funkcji falowych w postaci

$$\Psi(\vec{x}) = \begin{pmatrix} \psi_1(\vec{x}) \\ \psi_2(\vec{x}) \end{pmatrix}. \quad (2.38)$$

Dla tak wybranej reprezentacji stanów iloczyn skalarny przyjmie postać

$$\langle \Psi(\vec{x}), \Phi(\vec{x}) \rangle = \sum_{i=1}^2 \int \psi_i^*(\vec{x}) \varphi_i(\vec{x}) d^3x, \quad (2.39)$$

która spełnia wszystkie własności iloczynu skalarnego. Rozpatrzmy zagadnienie własne niezależne od czasu dla stanów opisywanych przez funkcję $\Psi(\vec{x})$. Równanie Schrödingera będzie następujące

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\vec{x}) + V(\vec{x})\Psi(\vec{x}) = E\Psi(\vec{x}), \quad (2.40)$$

gdzie $V(\vec{x})$ jest dwuwymiarową macierzą potencjału, a E to rzeczywista energia. Transformując wektor stanu $\Psi(\vec{x})$ przy użyciu macierzy obrotu $\Psi(\vec{x}) \rightarrow \Psi'(\vec{x}) = \hat{O}\Psi(\vec{x})$ w tak wybranej dwuwymiarowej przestrzeni Hilberta

$$\psi_1(\vec{x}) \rightarrow \psi'_1(\vec{x}) = \psi_1(\vec{x}) \cos \alpha + \psi_2(\vec{x}) \sin \alpha \quad (2.41a)$$

$$\psi_2(\vec{x}) \rightarrow \psi'_2(\vec{x}) = -\psi_1(\vec{x}) \sin \alpha + \psi_2(\vec{x}) \cos \alpha \quad (2.41b)$$

żądamy niezmienniczości macierzowego równania Schrödingera (2.40) względem transformacji (2.41), gdyż iloczyn skalarny (2.39) jest niezmienniczy względem takich obrotów. Ogranicza to macierz opisującą potencjał do postaci

$$\mathbf{V} = V(\vec{x}) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{\Gamma(\vec{x})}{2} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.42)$$

gdzie funkcje $V(\vec{x})$ oraz $\Gamma(\vec{x})$ są dowolnie wybranymi funkcjami współrzędnych przestrzennych. Równanie Schrödingera (2.40) przy uwzględnieniu macierzy potencjału w postaci (2.42) możemy przedstawić w postaci dwu równań

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_1(\vec{x}) + V(\vec{x})\psi_1(\vec{x}) = E\psi_1(\vec{x}) + \frac{\Gamma(\vec{x})}{2}\psi_2(\vec{x}), \quad (2.43a)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_2(\vec{x}) + V(\vec{x})\psi_2(\vec{x}) = E\psi_2(\vec{x}) - \frac{\Gamma(\vec{x})}{2}\psi_1(\vec{x}). \quad (2.43b)$$

Równania (2.43) możemy traktować jako równania różniczkowe na funkcje $\psi_1(\vec{x})$ oraz $\psi_2(\vec{x})$, które są wzajemnie zależne od siebie, a funkcja $\Gamma(\vec{x})$ opisuje związek między nimi. Spróbujmy teraz zbudować za pomocą tak skonstruowanej przestrzeni stanów wektory opisujące stany rezonansowe $\Psi_G(\vec{x})$. Wprowadźmy operator

$$\Pi = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.44)$$

który jest operatorem rzutowym w przestrzeni Hilberta dwuskładowych funkcji stanu $\Psi(\vec{x})$. Istotnie $\Pi^\dagger = (\Pi^*)^T = \Pi$ jest operatorem hermitowskim, oraz

$$\Pi^2 = \left(\frac{1}{2}\right)^2 \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix}^2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix} = \Pi. \quad (2.45)$$

Działając operatorem Π na funkcję stanu $\Psi(\vec{x})$ będącą rozwiązaniem równania Schrödingera (2.40) otrzymamy stan

$$\Psi_G(\vec{x}) = \Pi\Psi(\vec{x}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \psi_1(\vec{x}) + i\psi_2(\vec{x}) \\ -i\psi_1(\vec{x}) + \psi_2(\vec{x}) \end{pmatrix}. \quad (2.46)$$

Zobaczmy jaką postać przyjmie równanie Schrödingera (2.40), gdy na obie strony równania zadziałamy operatorem rzutowym Π .

$$\Pi \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\vec{x}) + \mathbf{V}(\vec{x})\Psi(\vec{x}) \right) = \Pi(E\Psi(\vec{x})), \quad (2.47)$$

czyli

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta(\Pi\Psi(\vec{x})) + V(\vec{x})\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\Pi\Psi(\vec{x}) + \frac{\Gamma(\vec{x})}{2}\Pi\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\Psi(\vec{x}) = E\Pi\Psi(\vec{x}). \quad (2.48)$$

Ponieważ

$$\Pi\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = i\Pi, \quad (2.49)$$

więc

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta(\Pi\Psi(\vec{x})) + \left(V(\vec{x}) + i\frac{\Gamma(\vec{x})}{2}\right)\Pi\Psi(\vec{x}) = E\Pi\Psi(\vec{x}). \quad (2.50)$$

Pamiętając, że $\Psi_G(\vec{x}) = \Pi\Psi(\vec{x})$ równanie (2.40) przyjmie postać

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi_G(\vec{x}) + V(\vec{x})\Psi_G(\vec{x}) = \left(E - i\frac{\Gamma(\vec{x})}{2}\right)\Psi_G(\vec{x}). \quad (2.51)$$

Równanie (2.51) jest równoważne równaniu (2.37) w przypadku gdy funkcja $\Gamma(\vec{x})$ będzie funkcją stałą.

Podajmy wektor $\Psi_G(\vec{x})$ transformacji (2.41)

$$\begin{aligned} \Psi_G(\vec{x}) &\rightarrow \Psi'_G(\vec{x}) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha \\ -\sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \psi_1(\vec{x}) + i\psi_2(\vec{x}) \\ -i\psi_1(\vec{x}) + \psi_2(\vec{x}) \end{pmatrix} = \\ &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \psi_1(\vec{x})(\cos\alpha - i\sin\alpha) + i\psi_2(\vec{x})(\cos\alpha - i\sin\alpha) \\ -i\psi_1(\vec{x})(\cos\alpha - i\sin\alpha) + \psi_2(\vec{x})(\cos\alpha - i\sin\alpha) \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (2.52)$$

tak więc

$$\Psi_G(\vec{x}) \rightarrow \Psi'_G(\vec{x}) = \Psi_G(\vec{x})e^{-ia} \quad (2.53)$$

transformacja obrotów dla stanu Gamowa $\Psi_G(\vec{x}) = \Pi\Psi(\vec{x})$ sprowadza się do zmiany fazy α .

2.5.1 Przykład stałego potencjału

W dalszych rozważaniach skoncentrujemy się na prostym przykładzie. Rozpatrzmy przypadek, gdy potencjał $V(\vec{x}) = V$ jest potencjałem stałym oraz funkcja $\Gamma(\vec{x}) = \Gamma$ też jest funkcją stałą. Przy takich założeniach układ równań różniczkowych (2.43) będzie miał rozwiązanie w postaci dwóch funkcji

$$\psi(\vec{x}) = C_1 \cos(\vec{k} \cdot \vec{x}) e^{\vec{\gamma} \cdot \vec{x}}, \quad (2.54a)$$

$$\varphi(\vec{x}) = C_2 \sin(\vec{k} \cdot \vec{x}) e^{\vec{\gamma} \cdot \vec{x}}, \quad (2.54b)$$

gdzie

$$|\vec{k}| = \frac{1}{\hbar} \sqrt{m \left(\sqrt{(E_R - V)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} + E_R - V \right)}, \quad (2.55)$$

oraz

$$|\vec{\gamma}| = \frac{1}{\hbar} \sqrt{m \left(\sqrt{(E_R - V)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} - E_R + V \right)}. \quad (2.56)$$

Z postaci stałych $\vec{k}$ oraz $\vec{\gamma}$ można zauważyć po krótkich obliczeniach, że

$$\frac{\hbar^2}{2m} (k - i\gamma)^2 = \left(E_R - i\frac{\Gamma}{2} - V \right). \quad (2.57)$$

Podstawiając rozwiązania (2.54) do równań (2.43) dostaniemy

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{x}) + \left(V(\vec{x}) - \frac{\Gamma}{2} \operatorname{tg}(\vec{k} \cdot \vec{x}) \right) \psi(\vec{x}) = E_R \psi(\vec{x}), \quad (2.58a)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi(\vec{x}) + \left(V(\vec{x}) + \frac{\Gamma}{2} \operatorname{tg}(\vec{k} \cdot \vec{x}) \right) \varphi(\vec{x}) = E_R \varphi(\vec{x}), \quad (2.58b)$$

gdzie w sposób jawny występuje dodatkowy potencjał związany z interakcją między $\psi(\vec{x})$ a $\varphi(\vec{x})$.

2.5.2 Normalizacja stanu Gamowa

Pokażemy jeszcze jak w przypadku potencjału o symetrii sferycznej możemy znormalizować stany Gamowa. Założmy, że potencjał $V(\vec{x})$ jest potencjałem sferycznie symetrycznym $V(r)$. Dla uproszczenia rozważań zajmijmy się tylko pierwszą funkcją falową opisującą stany o zerowym momencie pędu $\psi_{l=0}(r) \equiv \psi(r)$. W takim przypadku otrzymamy dwa rozwiązania w postaci $\chi(r) = r\psi(r)$ oraz $\kappa(r) = r\varphi(r)$ spełniające równania

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} \chi(r) + V(r) \chi(r) = E_R \chi(r) + \frac{\Gamma}{2} \kappa(r), \quad (2.59a)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} \kappa(r) + V(r) \kappa(r) = E_R \kappa(r) - \frac{\Gamma}{2} \chi(r). \quad (2.59b)$$

Mnożąc równanie (2.59a) przez $\kappa(r)$, a równanie (2.59b) przez $\chi(r)$, następnie odejmując wyniki otrzymamy

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dr} \left(\kappa(r) \frac{d\chi(r)}{dr} - \chi(r) \frac{d\kappa(r)}{dr} \right) = \frac{\Gamma}{2} (\chi^2(r) + \kappa^2(r)). \quad (2.60)$$

Scałkujemy równanie (2.60) od $r = 0$ do $r = R$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\kappa(r) \frac{d\chi(r)}{dr} - \chi(r) \frac{d\kappa(r)}{dr} \right)_0^R = \frac{\Gamma}{2} \int_0^R (\chi^2(r) + \kappa^2(r)) dr. \quad (2.61)$$

Całka występująca z prawej strony równania przyjmie postać

$$\int_0^R (\chi^2(r) + \kappa^2(r)) dr = \int_0^R (\psi^2(r) + \varphi^2(r)) r^2 dr = \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega} |\Psi(\vec{x})|^2 d^3x. \quad (2.62)$$

Przyjmując warunki brzegowe $\chi(0) = 0$ oraz $\kappa(0) = 0$ zakładamy, że wychodząca poza obszar Ω funkcja falowa będzie miała postać

$$C \frac{1}{r} e^{i(k-i\gamma)(r-R)}. \quad (2.63)$$

Zakładając przez chwilę $C = 1$ otrzymamy następujące warunki brzegowe

$$\chi(R) = 1, \quad \kappa(R) = 0, \quad \chi'(R) = \gamma, \quad \kappa'(R) = k. \quad (2.64)$$

Korzystając z warunków brzegowych możemy zapisać

$$\frac{\Gamma}{8\pi} \int_{\Omega} |\Psi(\vec{x})|^2 d^3x = \frac{\hbar^2 k}{2m} \quad (2.65)$$

i korzystając z relacji

$$\frac{\hbar^2}{2m} (k - i\gamma)^2 = \left(E_R - i\frac{\Gamma}{2} \right) \quad (2.66)$$

prawa strona równania (2.65) przyjmie postać

$$\int_{\Omega} |\Psi(\vec{x})|^2 d^3x = \frac{2\pi}{\gamma} \quad (2.67)$$

dla dowolnej stałej C dostaniemy następujący warunek normalizacyjny:

$$\int_{\Omega} |\Psi(\vec{x})|^2 d^3x = \frac{2\pi |C|^2}{\gamma}. \quad (2.68)$$

Warunek normalizacyjny (2.68) pozwala spojrzeć na strukturę wektorów Gamowa w inny sposób. W standardowym podejściu przestrzeń Hilberta dla wektorów Gamowa konstruuje się z funkcji falowych określonych w całej przestrzeni. Okazuje się jednak,

że takie funkcje nie mogą być unormowane. Powyższy warunek (2.68) sugeruje, że możemy stany Gamowa potraktować w duchu współczesnej teorii układów otwartych [34]. W teorii tej mamy do czynienia z trzema przestrzeniami liniowymi: przestrzenią $\mathcal{E}_-$ zbudowaną z elementów opisujących informację otrzymaną przez układ, przestrzenią $\mathcal{E}_+$ zbudowaną z elementów opisujących informację wychodzącą z układu oraz z przestrzenią $\mathcal{H}$ opisującą wewnętrzne stany układu. W praktyce przestrzenie $\mathcal{E}_-$ i $\mathcal{E}_+$ traktowane są jako skończone wymiarowe przestrzenie, których elementy reprezentują fale niosące informację wchodzące i wychodzące. Przestrzenie te nazywane są odpowiednio kanałami wchodzącymi i wychodzącymi układu. Dla układów kwantowych takimi falami są fale Broglie'a opisujące odpowiednio cząstki wchodzące do układu i wychodzące z niego. Przestrzeń $\mathcal{H}$ jest przestrzenią Hilberta zbudowaną z rozwiązań równania Schrödingera opisującego strukturę układu. Elementy $\mathcal{E}_-$ i $\mathcal{E}_+$ nie muszą być zadawane normowanymi funkcjami falowymi, gdyż nie są one traktowane jako elementy przestrzeni Hilberta. Unormowane muszą być tylko elementy przestrzeni Hilberta $\mathcal{H}$.

W naszym przypadku stany Gamowa mogą być traktowane jako takie stany kwantowomechaniczne, które nie mają kanałów wejściowych, natomiast posiadają kanał wyjściowy w postaci tej części funkcji falowej, która jest poza obszarem potencjału opisującego wewnętrzną strukturę wektorów Gamowa. W naszym przypadku fale wyjściowe dane są poprzez (2.63), natomiast warunek normalizujący (2.68) określa normę wewnętrznych stanów układu.

W standardowej teorii otwartych układów kwantowych oprócz zadania elementów przestrzeni $\mathcal{E}_-$ bada się dwa odwzorowania:

$$R : \mathcal{E}_- \longmapsto \mathcal{H}, \quad (2.69)$$

oraz

$$S : \mathcal{E}_- \longmapsto \mathcal{E}_+. \quad (2.70)$$

W naszym przypadku nie mamy do czynienia z przestrzenią $\mathcal{E}_-$ (jest ona przestrzenią pustą), a więc nie możemy zastosować teorii układów otwartych w jej ujęciu standardowej postaci. Powyższe podejście do wektorów Gamowa oznacza zatem nowe wyzwanie dla teorii układów otwartych, aby została opracowana również jej wersja z pustą przestrzenią $\mathcal{E}_-$. Problem ten wykracza poza zasięg niniejszej pracy.

2.6 Wektory Gamowa w prostych przykładach

2.6.1 Prostokątna studnia potencjału

Powyższe rozważania teoretyczne można zilustrować za pomocą prostego modelu szczegółowo opisanego w [35]. Rozważmy niezależne od czasu zagadnienie cząstki poruszającej się w sferycznie symetrycznym potencjale $V(\vec{r}) \equiv V(r)$ gdzie $|\vec{r}| = r$ o postaci

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{dla } 0 < r < a, \\ V & \text{dla } a < r < b, \\ 0 & \text{dla } b < r < \infty. \end{cases} \quad (2.71)$$

Zachowanie się cząstki przy tak dobranym niezależnym od czasu potencjale opisuje równanie

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(r, \theta, \phi) + V(r) \Psi(r, \theta, \phi) = E \Psi(r, \theta, \phi). \quad (2.72)$$

Ponieważ potencjał $V(r)$ zależy tylko od r możemy rozbić funkcję falową na iloczyn funkcji $\Psi(r, \theta, \phi) = \frac{1}{r} \psi_l(r) Y_{l,m}(\theta, \phi)$. Dla uproszczenia zapisu zajmijmy się tylko zależnością radialną funkcji falowej, a dokładniej tylko stanem $l = 0$ to znaczy $\psi_{l=0}(r) \equiv \psi(r)$. Szczegółowe rozważania dla dowolnej wartości l można znaleźć w [35]. Równanie (2.72) przyjmie postać

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} \psi(r) + V(r) \psi(r) = E \psi(r). \quad (2.73)$$

Rozwiązania (2.72) przy uwzględnieniu postaci potencjału (2.71) będą następujące:

$$\begin{aligned} \psi_1(r) &= A_1 e^{ikr} + B_1 e^{-ikr} & \text{dla } 0 < r < a, \\ \psi_2(r) &= A_2 e^{iQr} + B_2 e^{-iQr} & \text{dla } a < r < b, \\ \psi_3(r) &= F_1 e^{ikr} + F_2 e^{-ikr} & \text{dla } b < r < \infty, \end{aligned} \quad (2.74)$$

gdzie

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad (2.75a)$$

$$Q = \sqrt{k^2 - \frac{2mV_0}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)}. \quad (2.75b)$$

Dokładne rozwiązania (2.74) zależą od warunków brzegowych. Ponieważ operator Hamiltona musi być istotnie samosprężony dlatego funkcja falowa w $r = 0$ musi zniknąć. Z fizycznego punktu widzenia cząstka nie może wnikać do obszaru $r < 0$. Dlatego

$$\psi_1(0) = A_1 + B_1 = 0. \quad (2.76)$$

Funkcja falowa w pierwszym obszarze $0 < r < a$ będzie miała zatem postać

$$\psi_1(r) = A \sin kr, \quad (2.77)$$

gdzie $A = 2i A_1$.

Korzystając ze standardowych warunków zszywania funkcji falowych oraz ich pochodnych na brzegach obszarów w postaci

$$\psi_1(a) = \psi_2(a), \quad (2.78a)$$

$$\psi'_1(a) = \psi'_2(a), \quad (2.78b)$$

$$\psi_2(b) = \psi_3(b), \quad (2.78c)$$

$$\psi'_2(b) = \psi'_3(b), \quad (2.78d)$$

otrzymamy układ czterech równań, z których możemy wyznaczyć stałe A_2, B_2, F_1, F_2 . W punkcie $r = a$ ciągłość funkcji oraz jej pochodnej prowadzi do równań

$$A \sin ka = A_2 e^{iQa} + B_2 e^{-iQa}, \quad (2.79a)$$

$$Ak \cos ka = iQ (A_2 e^{iQa} - B_2 e^{-iQa}), \quad (2.79b)$$

natomiast w punkcie $r = b$ analogicznie

$$A_2 e^{iQb} + B_2 e^{-iQb} = F_1 e^{ikb} + F_2 e^{-ikb}, \quad (2.80a)$$

$$iQ (A_2 e^{iQb} - B_2 e^{-iQb}) = ik (F_1 e^{ikb} - F_2 e^{-ikb}). \quad (2.80b)$$

Wyznaczając z tych równań stałe otrzymamy

$$A_2 = \frac{A}{2Q} e^{-iQa} (Q \sin ka - ik \cos ka), \quad (2.81)$$

$$B_2 = \frac{A}{2Q} e^{iQa} (Q \sin ka + ik \cos ka), \quad (2.82)$$

oraz

$$F_1 = \frac{A}{4kQ} e^{-ikb} \{ e^{iQ(b-a)} (k+Q) (Q \sin ka - ik \cos ka) + \\ + e^{-iQ(b-a)} (k-Q) (Q \sin ka + ik \cos ka) \}, \quad (2.83)$$

$$F_2 = \frac{A}{4kQ} e^{ikb} \{ e^{iQ(b-a)} (k-Q) (Q \sin ka - ik \cos ka) + \\ + e^{-iQ(b-a)} (k+Q) (Q \sin ka + ik \cos ka) \}. \quad (2.84)$$

Macierz rozproszenia, będąca reprezentacją operatora rozproszenia, wiąże ze sobą stany wchodzące i wychodzące. W naszym przykładzie fala wchodząca to fala płaska o amplitudzie F_2 , natomiast fala wychodząca to fala płaska o amplitudzie F_1 . Macierz rozproszenia w reprezentacji energii można wyrazić za pomocą zależności

$$S(E) = -\frac{F_1}{F_2}. \quad (2.85)$$

Korzystając z (2.83) oraz (2.84) łatwo można sprawdzić, że w przypadku braku oddziaływania $V = 0$ czyli $k = Q$ macierz rozproszenia $\lim_{V \rightarrow 0} S(E) = 1$. Stany rezonansowe związane są z biegunami macierzy $S(E)$. Bieguny te pokrywają się z miejscami zerowymi $F_2(k)$, czyli

$$\begin{aligned} & \{e^{iQ(b-a)}(k-Q)(Q \sin ka - ik \cos ka) + \\ & + e^{-iQ(b-a)}(k+Q)(Q \sin ka + ik \cos ka)\} = 0. \end{aligned} \quad (2.86)$$

Okazuje się, że równanie to może być spełnione tylko dla zespolonych wartości k . Zatem jedyne bieguny jakie posiada macierz rozproszenia występują dla zespolonych wartości $k \in \mathbb{C}$. Rozwiązania równania (2.86) mają postać $k = \pm \operatorname{Re}(k) - i \operatorname{Im}(k)$ tworząc pary w pobliżu dodatniej części urojonej osi k . Ponieważ $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ tak więc odpowiadają im zespolone wartości energii $E = E_R \pm i\Gamma/2$.

Stany Gamowa można także otrzymać dobierając odpowiednio warunki brzegowe dla rozwiązań równania Schrödingera (2.73). Rozważmy warunki brzegowe związane z występowaniem stanów czysto wychodzących to znaczy

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \frac{d\psi(r)}{dr} - ik\psi(r) = 0. \quad (2.87)$$

Prowadzi to do następujących warunków brzegowych

$$\psi_1(0) = 0, \quad (2.88a)$$

$$\psi_1(a) = \psi_2(a), \quad (2.88b)$$

$$\psi'_1(a) = \psi'_2(a), \quad (2.88c)$$

$$\psi_2(b) = \psi_3(b), \quad (2.88d)$$

$$\psi'_2(b) = \psi'_3(b), \quad (2.88e)$$

$$\psi_2(r) \sim e^{ikr}, \quad \text{dla } r \rightarrow \infty. \quad (2.88f)$$

Postać funkcji falowych w kolejnych obszarach będzie następująca

$$\begin{aligned} \psi_1(r) &= A \sin kr & \text{dla } 0 < r < a, \\ \psi_2(r) &= A_2 e^{iQr} + B_2 e^{-iQr} & \text{dla } a < r < b, \\ \psi_3(r) &= F_1 e^{ikr} & \text{dla } b < r < \infty, \end{aligned} \quad (2.89)$$

Warunki brzegowe (2.88) oraz (2.89) implikują następujący układ równań na stałe A_1, A_2, B_2, F_1 .

$$A \sin ka - A_2 e^{iQa} - B_2 e^{-iQa} = 0, \quad (2.90a)$$

$$Ak \cos ka - iQ A_2 e^{iQa} + iQ B_2 e^{-iQa} = 0, \quad (2.90b)$$

$$A_2 e^{iQb} + B_2 e^{-iQb} - F_1 e^{ikb} = 0, \quad (2.90c)$$

$$iQ A_2 e^{iQb} - iQ B_2 e^{-iQb} - ik F_1 e^{ikb} = 0. \quad (2.90d)$$

Aby powyższy układ czterech równań (2.90) miał rozwiązanie wyznacznik główny musi być równy zero

$$\det \begin{pmatrix} \sin ka & -e^{iQa} & -e^{-iQa} & 0 \\ k \cos ka & -iQ e^{iQa} & iQ e^{-iQa} & 0 \\ 0 & e^{iQb} & e^{-iQb} & -e^{ikb} \\ 0 & iQ e^{iQb} & -iQ e^{-iQb} & -ike^{ikb} \end{pmatrix} = 0. \quad (2.91)$$

Po obliczeniu wyznacznika dostaniemy warunek na k

$$\{e^{iQ(b-a)} (k - Q) (Q \sin ka - ik \cos ka) + e^{-iQ(b-a)} (k + Q) (Q \sin ka + ik \cos ka)\} = 0, \quad (2.92)$$

który jest identyczny z warunkiem (2.86) na bieguny macierzy $S(E)$. Biorąc pod uwagę zależność $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ wartości własne operatora Hamiltona odpowiadające wektorom własnym są zespolone, czyli rozwiązania przy tak dobranych warunkach brzegowych nie należą do przestrzeni Hilberta i nie da się ich opisać w ramach standardowej mechaniki kwantowej.

Podsumowując, otrzymujemy dwa typy wektorów stanu:

Dla wartości własnej $E = E_R - i\Gamma/2$ otrzymujemy tak zwane stany rozpadu ψ^{dec}

$$\psi^{\text{dec}}(r) = \begin{cases} \sin k_d r & \text{dla } 0 < r < a, \\ A_2 e^{iQ_d r} + B_2 e^{-iQ_d r} & \text{dla } a < r < b, \\ F_1 e^{ik_d r} & \text{dla } b < r < \infty, \end{cases} \quad (2.93)$$

gdzie $k_d = \sqrt{2m(E_R - i\Gamma/2)/\hbar^2}$ natomiast $Q_d = \sqrt{2m/\hbar^2((E_R - i\Gamma/2) - V_0)}$. Normalizacja została dobrana tak aby stała $A = 1$.

Dla wartości własnej $E = E_R + i\Gamma/2$ otrzymujemy tak zwane stany "growing" ψ^{grow}

$$\psi^{\text{grow}}(r) = \begin{cases} \sin k_g r & \text{dla } 0 < r < a, \\ A_2 e^{iQ_g r} + B_2 e^{-iQ_g r} & \text{dla } a < r < b, \\ F_1 e^{ik_g r} & \text{dla } b < r < \infty, \end{cases} \quad (2.94)$$

gdzie $k_g = \sqrt{2m(E_R + i\Gamma/2)/\hbar^2}$ oraz $Q_g = \sqrt{2m/\hbar^2((E_R + i\Gamma/2) - V_0)}$.

Szczegółowe rozważania oraz obliczenia dla stanów o dowolnym momencie pędu można znaleźć w [35].

2.6.2 Bariera potencjału jako delta Diraca

Rozważmy jednowymiarowy model w którym cząstka porusza się w polu o potencjale w postaci delty Diraca [36]

$$V(r) = (b/a) \delta(r - a). \quad (2.95)$$

Równanie Schrödingera będzie miało postać

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(r) + (b/a) \delta(r - a) \psi(r) = E \psi(r), \quad (2.96)$$

czyli

$$\psi''(r) + \left(\frac{2Em}{\hbar^2} - \frac{2bm}{a\hbar^2} \delta(r - a) \right) \psi(r) = 0. \quad (2.97)$$

Całkując równanie (2.97) w pobliżu punktu $r = a$ otrzymamy

$$\int_{a-\Delta}^{a+\Delta} \psi''(r) dr + \int_{a-\Delta}^{a+\Delta} \frac{2Em}{\hbar^2} \psi(r) dr = \frac{2bm}{a\hbar^2} \int_{a-\Delta}^{a+\Delta} \delta(r - a) \psi(r) dr, \quad (2.98)$$

gdzie $\Delta \rightarrow 0$. Ponieważ zakładamy, że funkcja falowa jest ciągła w punkcie $r = a$ dlatego otrzymamy

$$\psi'(a + \Delta) - \psi'(a - \Delta) = \frac{2bm}{a\hbar^2} \psi(a), \quad (2.99)$$

czyli pochodna funkcji falowej ma skok w punkcie $r = a$.

Wszędzie poza punktem $r = a$ potencjał znika, więc funkcja falowa dla $r \neq a$ ma postać fali płaskiej.

$$\psi_1(r) = Ae^{ikr} + Be^{-ikr} \quad \text{dla } 0 < r < a, \quad (2.100a)$$

$$\psi_2(r) = F_1 e^{ikr} + F_2 e^{-ikr} \quad \text{dla } a < r < \infty. \quad (2.100b)$$

Przyjmijmy, że funkcja falowa podobnie jak wcześniej znika w początku układu to znaczy $\psi(0) = 0$ dlatego w obszarze pierwszym $0 < r < a$ postać funkcji falowej będzie następująca

$$\psi_1(r) = A \sin kr. \quad (2.101)$$

Korzystając z warunków brzegowych na funkcje falową oraz jej pochodną w punkcie $r = a$

$$\psi_1(a) = \psi_2(a), \quad (2.102)$$

$$\psi_2'(a) - \psi_1'(a) = \frac{2bm}{a\hbar^2} \psi_1(a), \quad (2.103)$$

otrzymamy następujące równania na stałe

$$A \sin ka = F_1 e^{ika} + F_2 e^{-ika}, \quad (2.104)$$

$$iF_1 k e^{ika} - iF_2 k e^{-ika} - Ak \cos ka = \frac{2bm}{a\hbar^2} (A \sin ka). \quad (2.105)$$

Równania te dają rozwiązania

$$F_1 = \frac{A}{2k\hbar^2 e^{iak}} \left(k\hbar^2 \sin ka - ik\hbar^2 \cos ka - \frac{2ibm}{a} \sin ka \right), \quad (2.106)$$

$$F_2 = \frac{A}{2k\hbar^2 e^{-iak}} \left(\frac{2ibm}{a} \sin ka + ik\hbar^2 \cos ka + k\hbar^2 \sin ka \right). \quad (2.107)$$

Analogicznie jak poprzednio rozważmy macierz rozproszenia w postaci

$$S(E) = -\frac{F_1}{F_2}, \quad (2.108)$$

której bieguny są związane ze stanami rezonansowymi. Warunek $F_2 = 0$ prowadzi do równania

$$\frac{2ibm}{ak\hbar^2} + i \frac{\cos ka}{\sin ka} + 1 = 0, \quad (2.109)$$

czyli

$$\operatorname{ctg} ka = i - \frac{\lambda}{ka}, \quad (2.110)$$

gdzie $\lambda = \frac{2bm}{\hbar^2}$. Równanie to ma rozwiązania dla $k \in \mathbb{C}$. Rozważmy bieguny leżące w pobliżu dodatniej urojonej osi k inaczej mówiąc załóżmy, że b jest bardzo duże. Przy takich założeniach k będzie miało następującą postać [36]

$$k_n a \approx \pm \frac{n\pi\lambda}{1+\lambda} - i \left(\frac{n\pi}{\lambda} \right)^2, \quad (2.111)$$

gdzie $n = 1, 2, \dots$, oraz $n\pi \ll \lambda$.

Rozpatrzmy przypadek stanów czysto wychodzących

$$\psi_1(r) = A \sin kr \quad \text{dla } 0 < r < a, \quad (2.112a)$$

$$\psi_2(x) = F_1 e^{ikr} \quad \text{dla } a < r < \infty. \quad (2.112b)$$

Biorąc pod uwagę (2.102) oraz (2.103) otrzymamy układ równań

$$A \sin ka - F_1 e^{ika} = 0, \quad (2.113)$$

$$\frac{A}{a\hbar^2} (-2bm \sin ka - ak\hbar^2 \cos ka) + iF_1 k e^{ika} = 0. \quad (2.114)$$

Wyznacznik główny tego równania musi być równy zero aby istniały rozwiązania czyli

$$\begin{aligned} & \det \begin{pmatrix} \sin ka & -e^{ika} \\ -k \cos ka - \frac{2}{a} b \frac{m}{\hbar^2} \sin ka & i k e^{ika} \end{pmatrix} = \\ & = ik (\sin ka) e^{iak} - k (\cos ka) e^{iak} - 2 \frac{bm}{a\hbar^2} (\sin ka) e^{iak} = 0, \end{aligned} \quad (2.115)$$

co prowadzi do identycznego warunku na k jak przy rozważaniu macierzy rozproszenia

$$i - 2 \frac{bm}{ak\hbar^2} = \text{ctg } ka. \quad (2.116)$$

Powyższe przykłady zostały dobrane tak aby w prosty sposób zilustrować jak wybór odpowiednich warunków brzegowych ma wpływ na tworzenie się stanów Gamowa. Trudno podać inne proste przykłady, w których w sposób jawny można by wyliczyć postać wektorów falowych i odpowiadających im wartości energii opisujących stany rozpadu. W najprostszym przypadku można założyć, że funkcja falowa będąca rozwiązaniem równania Schrödingera dla danego potencjału jest szeregiem potęgowym. Następnie biorąc tylko kilka pierwszych wyrazów szeregu można jawnie wyznaczyć rozwiązania na wektor falowy posiadający tylko wartości zespolone przy danych warunkach brzegowych. Jest to stosunkowo nieskomplikowane w przypadku potencjału stałego i liniowego. Dostajemy wtedy warunek na wektor falowy w postaci równania trzeciego stopnia, dla którego można podać jawne rozwiązania.

2.7 Podsumowanie

W tym rozdziale wprowadziliśmy nierelatywistyczne wektory Gamowa jako stany opisujące rozpady cząstek. Pokazaliśmy, że stany Gamowa związane są z biegunami operatora rozproszenia S leżącymi na drugim płacie w pobliżu osi rzeczywistej. Następnie

w zarysie przedstawiliśmy ich opis we wzboganej przestrzeni Hilberta. Wówczas stany Gamowa możemy traktować jako normalne stany kwantowe, ale odpowiadające zagadnienie własne prowadzi do wprowadzenia zespolonych wartości własnych energii. Zmusza nas to także do rozpatrywania ewolucji czasowej tych stanów w oparciu o dwie grupy operatorów ewolucji $U(t)$, osobno dla $t > 0$, a osobno dla $t < 0$.

Wprowadziliśmy również nieco inny sposób opisu wektorów Gamowa, który pozwala nam ominąć trudności związane z występowaniem zespolonych wartości energii. Niestety okupione to jest nieco bardziej skomplikowaną postacią stanu kwantowego jako para dwóch funkcji falowych spełniających macierzowe równanie Schrödingera. Przy takim podejściu możemy odtworzyć takie same rozwiązania jak w przypadku stosowania zespolonych wartości energii. Wyprowadziliśmy również swoisty warunek normalizacyjny, który pozwala spojrzeć na strukturę stanów Gamowa w nieco odmienny sposób, poprzez pryzmat teorii układów otwartych. Nie można jednak jednoznacznie traktować stanów Gamowa w tej teorii ponieważ w przypadku stanów Gamowa brak jest kanału wejściowego. Pod koniec rozdziału przedstawiliśmy możliwie proste przykłady ilustrujące teorię stanów Gamowa.

Rozdział 3

Wektory Gamowa zależne od czasu

Dotychczas w naszych rozważaniach rozpatrywaliśmy zagadnienie wektorów Gamowa w oparciu o równanie Schrödingera niezależne od czasu

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\vec{x}) + V(\vec{x})\Psi(\vec{x}) = \left(E_R - i\frac{\Gamma}{2}\right)\Psi(\vec{x}). \quad (3.1)$$

W tym rozdziale uogólnimy nasze rozważania na przypadek zależny od czasu. Rozpatrzmy równanie Schrödingera zależne od czasu w następujących dwóch postaciach

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\vec{x},t) + V(\vec{x},t)\Psi(\vec{x},t) = +i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{x},t), \quad (3.2a)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\vec{x},t) + V(\vec{x},t)\Psi(\vec{x},t) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{x},t), \quad (3.2b)$$

gdzie znak prawej strony równań (3.2) jest kwestią wyboru odpowiedniej konwencji i konsekwentnego jej stosowania. Przyjmijmy konwencję, że równanie (3.2a) nazywać będziemy równaniem Schrödingera i jego rozwiązania będziemy oznaczać przez $\Psi_S(\vec{x},t)$, natomiast równanie (3.2b) nazywać będziemy antyschrödingerowskim i jego rozwiązania oznaczać będziemy przez $\Psi_A(\vec{x},t)$. Oczywiście, moglibyśmy przyjąć również konwencję przeciwną i wówczas role Ψ_S i Ψ_A wzajemnie się zmienią.

Dla określonego rozwiązania (3.2a) $\Psi_S(\vec{x},t)$ oraz (3.2b) $\Psi_A(\vec{x},t)$ możemy utworzyć dwie kombinacje liniowe w postaci:

$$\varphi(\vec{x},t) = \Psi_S(\vec{x},t) + \Psi_A(\vec{x},t), \quad (3.3)$$

oraz

$$\chi(\vec{x},t) = i(\Psi_S(\vec{x},t) - \Psi_A(\vec{x},t)). \quad (3.4)$$

W szczególnym przypadku może się zdarzyć, że $\Psi_A(\vec{x}, t) = \Psi_S^\dagger(\vec{x}, t)$ i funkcje falowe $\varphi(\vec{x}, t)$ (3.3) oraz $\chi(\vec{x}, t)$ (3.4) będą funkcjami rzeczywistymi. W ogólnym przypadku $\Psi_S(\vec{x}, t)$ oraz $\Psi_A(\vec{x}, t)$ mogą być dowolne, dlatego (3.3) oraz (3.4) w ogólności przyjmują wartości zespolone. Funkcje $\varphi(\vec{x}, t)$ oraz $\chi(\vec{x}, t)$ będziemy traktować jako podstawowe pola kwantowe, natomiast nazwę funkcja falowa pozostawimy dla funkcji falowej Schrödingera

Dodając stronami równania (3.2) otrzymamy

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\left(\Psi_S(\vec{x}, t) + \Psi_A(\vec{x}, t)\right) + V(\vec{x}, t)\left(\Psi_S(\vec{x}, t) + \Psi_A(\vec{x}, t)\right) = \\ = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(\Psi_S(\vec{x}, t) - \Psi_A(\vec{x}, t)\right). \end{aligned} \quad (3.5)$$

Korzystając z (3.3) oraz (3.4) dostaniemy równanie:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi(\vec{x}, t) + V(\vec{x}, t)\varphi(\vec{x}, t) = \hbar\frac{\partial}{\partial t}\chi(\vec{x}, t). \quad (3.6a)$$

Analogicznie odejmując stronami równania (3.2) otrzymamy:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\chi(\vec{x}, t) + V(\vec{x}, t)\chi(\vec{x}, t) = -\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi(\vec{x}, t). \quad (3.6b)$$

Równania (3.6a) i (3.6b) po raz pierwszy zostały wyprowadzone w pracy [38]. Ich ważność polega na tym, że stanowią one pełny opis zachowania się stanów Gamowa włącznie z ewolucją czasową tych stanów. Wyjaśniają one również fizyczną różnicę między standardowymi stanami i stanami Gamowa. Poniżej zobaczymy, że za tworzenie się stanów Gamowa odpowiedzialne są zarówno oddziaływanie między polami $\varphi(\vec{x}, t)$ i $\chi(\vec{x}, t)$ jak i mechanizm „tarcia” tłumiącego ewolucję czasową tych stanów

Układ równań (3.6) pozwala nam obliczyć $\varphi(\vec{x}, t)$ oraz $\chi(\vec{x}, t)$. Mając rozwiązania układu równań (3.6) w postaci pary $\varphi(\vec{x}, t)$ oraz $\chi(\vec{x}, t)$ możemy utworzyć rozwiązania równania (3.1) definiując kombinacje liniowe

$$\Psi_S(\vec{x}, t) = \frac{1}{2}\left(\varphi(\vec{x}, t) - i\chi(\vec{x}, t)\right), \quad (3.7)$$

oraz

$$\Psi_A(\vec{x}, t) = \frac{1}{2}\left(\varphi(\vec{x}, t) + i\chi(\vec{x}, t)\right). \quad (3.8)$$

W szczególnym przypadku rozwiązania równań (3.6a) oraz (3.6b) mogą spełniać warunek

$$\varphi(\vec{x}, t) = -i\chi(\vec{x}, t) \equiv \Psi_S(\vec{x}, t) \quad \text{i wówczas} \quad \Psi_A(\vec{x}, t) = 0 \quad (3.9)$$

lub

$$\varphi(\vec{x}, t) = i\chi(\vec{x}, t) \equiv \Psi_A(\vec{x}, t) \quad \text{i wówczas} \quad \Psi_S(\vec{x}, t) = 0. \quad (3.10)$$

Z pól kwantowych $\varphi(\vec{x}, t)$ oraz $\chi(\vec{x}, t)$ możemy skonstruować dwuskładnikowe elementy przestrzeni Hilberta w postaci

$$\Xi(\vec{x}, t) = \begin{pmatrix} \varphi(\vec{x}, t) \\ \chi(\vec{x}, t) \end{pmatrix}, \quad (3.11)$$

z iloczynem skalarnym

$$\langle \Xi_1, \Xi_2 \rangle = \frac{1}{2} \int \left[\varphi_1^*(\vec{x}, t) \varphi_2(\vec{x}, t) + \chi_1^*(\vec{x}, t) \chi_2(\vec{x}, t) \right] d^3x, \quad (3.12)$$

dzięki czemu możemy wprowadzić interpretację probabilistyczną dla rozpatrywanych pól. Współczynnik w iloczynie skalarnym (3.12) zapewnia nam, normalizację $\Xi(\vec{x}, t)$ przez unormowane funkcje $\Psi_S(\vec{x}, t)$ oraz $\Psi_A(\vec{x}, t)$ spełniające warunki (3.9) oraz (3.10). W tak wprowadzonej przestrzeni Hilberta z elementami $\Xi(\vec{x}, t)$, oraz iloczynem skalarnym (3.12) funkcje falowe schrödingerskie oraz funkcje falowe antyschrödingerskie możemy otrzymać wprowadzając dwa operatory rzutowe w postaci

$$\Pi_S = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix}, \quad \Pi_A = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.13)$$

Jak łatwo sprawdzić operatory rzutowe (3.13) spełniają następujące relacje

$$\Pi_{S,A} = \Pi_{S,A}^\dagger, \quad \Pi_{S,A}^2 = \Pi_{S,A}, \quad \Pi_S + \Pi_A = \mathbb{I}, \quad \Pi_S \Pi_A = 0. \quad (3.14)$$

Operatory (3.13) pozwalają rozłożyć przestrzeń Hilberta na dwie podprzestrzenie: podprzestrzeń schrödingerską dla której $\mathcal{H}_S = \Pi_S \mathcal{H}$ oraz podprzestrzeń antyschrödingerską dla której $\mathcal{H}_A = \Pi_A \mathcal{H}$. Dla każdego elementu przestrzeni $\Xi \in \mathcal{H}$ iloczyn skalarny $\langle \Xi, \Pi_S \Xi \rangle$ będzie prawdopodobieństwem, że stan Ξ jest stanem schrödingerskim. Obecna konstrukcja przestrzeni Hilberta z dwuskładnikowych funkcji falowych różni się od podobnej konstrukcji w rozdziale 2.5 tym, że poprzednio uwzględniona była tylko „połowa” przestrzeni Hilberta $\mathcal{H}_S$. Obecność drugiej „połowy” $\mathcal{H}_A$ wprowadza dodatkowy czynnik $\frac{1}{2}$ do iloczynu skalarnego (3.12) w porównaniu z iloczynem skalarnym (2.39).

3.1 Standardowe równanie Schrödingera

Założmy, że podstawowe pola kwantowe spełniają następującą zależność czasową

$$\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = -E\chi, \quad \text{oraz} \quad \hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = E\varphi. \quad (3.15)$$

Ogólne rozwiązanie tych równań czasowych (3.15) będą miały postać

$$\varphi(\vec{x}, t) = \left(\psi_1(\vec{x}) \cos \frac{E}{\hbar} t + \psi_2(\vec{x}) \sin \frac{E}{\hbar} t \right), \quad (3.16a)$$

$$\chi(\vec{x}, t) = \left(\psi_1(\vec{x}) \sin \frac{E}{\hbar} t - \psi_2(\vec{x}) \cos \frac{E}{\hbar} t \right), \quad (3.16b)$$

gdzie $\psi_j(\vec{x})$, ($j = 1, 2$) są rozwiązaniami standardowego równania Schrödingera niezależnego od czasu z potencjałem $V(\vec{x})$ oraz energią własną E . Za pomocą rozwiązań (3.16) możemy skonstruować schrödingerowską funkcję falową korzystając z (3.7)

$$\begin{aligned} \Psi_S(\vec{x}, t) &= \frac{1}{2}(\varphi(\vec{x}, t) - i\chi(\vec{x}, t)) = \\ &= \frac{1}{2}(\psi_1(\vec{x}) + i\psi_2(\vec{x})) \cos \frac{E}{\hbar} t - i(\psi_1(\vec{x}) + i\psi_2(\vec{x})) \sin \frac{E}{\hbar} t = \\ &= \frac{1}{2}(\psi_1(\vec{x}) + i\psi_2(\vec{x})) \exp\left(-i\frac{E}{\hbar} t\right) \equiv \Psi_S(\vec{x}) \exp\left(-i\frac{E}{\hbar} t\right). \end{aligned} \quad (3.17)$$

Funkcja falowa $\Psi_S(\vec{x}) = 1/2(\psi_1(\vec{x}) + i\psi_2(\vec{x}))$ jest rozwiązaniem równania Schrödingera niezależnego od czasu z potencjałem $V(\vec{x})$ do wartości własnej energii E . Analogicznie antyschrödingerowską funkcję otrzymamy, korzystając z (3.8) oraz (3.16)

$$\begin{aligned} \Psi_A(\vec{x}, t) &= \frac{1}{2}(\varphi(\vec{x}, t) + i\chi(\vec{x}, t)) = \\ &= \frac{1}{2}(\psi_1(\vec{x}) - i\psi_2(\vec{x})) \cos \frac{E}{\hbar} t + i(\psi_1(\vec{x}) - i\psi_2(\vec{x})) \sin \frac{E}{\hbar} t = \\ &= \frac{1}{2}(\psi_1(\vec{x}) - i\psi_2(\vec{x})) \exp\left(i\frac{E}{\hbar} t\right) \equiv \Psi_A(\vec{x}) \exp\left(i\frac{E}{\hbar} t\right). \end{aligned} \quad (3.18)$$

Funkcja falowa $\Psi_A(\vec{x}) = 1/2(\psi_1(\vec{x}) - i\psi_2(\vec{x}))$ jest niezależną od czasu antyschrödingerowską funkcją falową. Dwuskładnikowe niezależne od czasu funkcje falowe dają znacznie bogatsze możliwości wybrania warunków brzegowych ponieważ możemy je stosować nie tylko dla kombinacji składowych pól $\psi_1(\vec{x}) + i\psi_2(\vec{x})$ ale także dla każdego pola $\psi_j(\vec{x})$ z osobna. Przyjmując zależność czasową składowych pól kwantowych w postaci (3.15) pokazaliśmy, że możemy otrzymać standardowe niezależne od czasu równanie Schrödingera. Spróbujemy teraz zmienić zależność od czasu składowych pól tak aby dało się odtworzyć równanie Schrödingera niezależne od czasu typu (3.1), którego rozwiązaniami są stany Gamowa.

3.2 Równanie Schrödingera dla stanów Gamowa

Wprowadźmy następującą zależność czasową dla składowych pól kwantowych

$$\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\frac{\Gamma}{2} \varphi - E \chi, \quad (3.19a)$$

$$\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = -\frac{\Gamma}{2} \chi + E \varphi, \quad (3.19b)$$

gdzie Γ jest parametrem o wymiarze energii. Rozwiązania ogólne równań czasowych (3.19) będą miały postać

$$\varphi(\vec{x}, t) = \left(\psi_1(\vec{x}) \cos \frac{E}{\hbar} t + \psi_2(\vec{x}) \sin \frac{E}{\hbar} t \right) \exp \left(-\frac{\Gamma}{2\hbar} t \right), \quad (3.20a)$$

$$\chi(\vec{x}, t) = \left(\psi_1(\vec{x}) \sin \frac{E}{\hbar} t - \psi_2(\vec{x}) \cos \frac{E}{\hbar} t \right) \exp \left(-\frac{\Gamma}{2\hbar} t \right), \quad (3.20b)$$

gdzie $\psi_1(\vec{x})$ oraz $\psi_2(\vec{x})$ są funkcjami spełniającymi układ równań niezależnych od czasu

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi_1(\vec{x}) + V(\vec{x}) \psi_1(\vec{x}) - \frac{\Gamma}{2} \psi_2(\vec{x}) = E \psi_1(\vec{x}), \quad (3.21a)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi_2(\vec{x}) + V(\vec{x}) \psi_2(\vec{x}) + \frac{\Gamma}{2} \psi_1(\vec{x}) = E \psi_2(\vec{x}). \quad (3.21b)$$

Mnożąc przez i równanie (3.21b), a następnie dodając do (3.21a) otrzymamy

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta (\psi_1(\vec{x}) + i\psi_2(\vec{x})) + V(\vec{x}) (\psi_1(\vec{x}) + i\psi_2(\vec{x})) = \left(E - i\frac{\Gamma}{2} \right) (\psi_1(\vec{x}) + i\psi_2(\vec{x})). \quad (3.22)$$

Tak więc wektor Gamowa ma postać

$$\Psi_G(\vec{x}) = \psi_1(\vec{x}) + i\psi_2(\vec{x}), \quad (3.23)$$

a równanie własne niezależne od czasu dla stanu Gamowa przyjmie zwartą postać:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi_G(\vec{x}) + V(\vec{x}) \Psi_G(\vec{x}) = \left(E - i\frac{\Gamma}{2} \right) \Psi_G(\vec{x}). \quad (3.24)$$

Za pomocą rozwiązań (3.20) możemy analogicznie jak w przypadku standardowym skonstruować schrödingerowską funkcję falową korzystając z (3.7)

$$\Psi_S(\vec{x}, t) = \frac{1}{2} (\varphi(\vec{x}, t) - i\chi(\vec{x}, t)) = \frac{1}{2} (\psi_1(\vec{x}) + i\psi_2(\vec{x})) \exp \left(-i\frac{E - i\frac{\Gamma}{2}}{\hbar} t \right). \quad (3.25)$$

Korzystając z (3.23) otrzymamy

$$\Psi_S(\vec{x}, t) = \frac{1}{2} \exp\left(-i \frac{E - i\frac{\Gamma}{2}}{\hbar} t\right) \Psi_G(\vec{x}). \quad (3.26)$$

Podobnie, dla funkcji falowej antyschrödingerskiej mamy

$$\Psi_A(\vec{x}, t) = \frac{1}{2}(\varphi(\vec{x}, t) + i\chi(\vec{x}, t)) = \frac{1}{2}(\psi_1(\vec{x}) - i\psi_2(\vec{x})) \exp\left(i \frac{E + i\frac{\Gamma}{2}}{\hbar} t\right), \quad (3.27)$$

czyli

$$\Psi_A(\vec{x}, t) = \frac{1}{2} \exp\left(i \frac{E + i\frac{\Gamma}{2}}{\hbar} t\right) \Psi_G^*(\vec{x}), \quad (3.28)$$

gdzie $\Psi_G^*(\vec{x}) = \psi_1(\vec{x}) - i\psi_2(\vec{x})$ spełnia niezależne od czasu równanie Schrödingera

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi_G^*(\vec{x}) + V(\vec{x}) \Psi_G^*(\vec{x}) = \left(E + i\frac{\Gamma}{2}\right) \Psi_G^*(\vec{x}). \quad (3.29)$$

3.3 Zalety takiego podejścia

Przy takim podejściu do opisu stanów Gamowa udaje się ominąć kilka niedogodności występujących przy standardowo stosowanym podejściu do stanów rezonansowych. Po pierwsze unikamy stosowania niefizycznych urojonych wartości energii. Po drugie stany rezonansowe, które opisywane są za pomocą wektorów Gamowa formowane są jako para pól $\psi_j(\vec{x})$ ze stałą Γ będącą stałą sprzężenia między tymi polami.

Obliczając φ z (3.19b)

$$\varphi = \frac{\hbar}{E} \frac{\partial \chi}{\partial t} + \frac{\Gamma}{2E} \chi, \quad (3.30)$$

a następnie obliczając pochodną czasową

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{\hbar}{E} \frac{\partial^2 \chi}{\partial t^2} + \frac{\Gamma}{2E} \frac{\partial \chi}{\partial t}, \quad (3.31)$$

możemy podstawić (3.30) oraz (3.31) do (3.19a) i otrzymać

$$\hbar \left(\frac{\hbar}{E} \frac{\partial^2 \chi}{\partial t^2} + \frac{\Gamma}{2E} \frac{\partial \chi}{\partial t} \right) = -\frac{\Gamma}{2} \left(\frac{\hbar}{E} \frac{\partial \chi}{\partial t} + \frac{\Gamma}{2E} \chi \right) - E\chi, \quad (3.32)$$

i po uporządkowaniu otrzymujemy

$$\frac{\partial^2 \chi}{\partial t^2} + \frac{\Gamma}{\hbar} \frac{\partial \chi}{\partial t} + \frac{E^2 + \frac{\Gamma^2}{4}}{\hbar^2} \chi = 0. \quad (3.33)$$

Analogicznie obliczając funkcję χ z (3.19a) otrzymamy

$$\chi = -\frac{\Gamma}{2E}\varphi - \frac{\hbar}{E}\frac{\partial\varphi}{\partial t}, \quad (3.34)$$

i jej pochodną czasową

$$\frac{\partial\chi}{\partial t} = -\frac{\Gamma}{2E}\frac{\partial\varphi}{\partial t} - \frac{\hbar}{E}\frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2}, \quad (3.35)$$

podstawiamy do (3.19b) i otrzymujemy

$$\hbar\left(-\frac{\Gamma}{E2}\frac{\partial\varphi}{\partial t} - \frac{\hbar}{E}\frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2}\right) = -\frac{\Gamma}{2}\left(-\frac{\Gamma}{E2}\varphi - \frac{\hbar}{E}\frac{\partial\varphi}{\partial t}\right) + E\varphi.$$

Po uporządkowaniu dostaniemy

$$\frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2} + \frac{\Gamma}{\hbar}\frac{\partial\varphi}{\partial t} + \frac{E^2 + \frac{\Gamma^2}{4}}{\hbar^2}\varphi = 0. \quad (3.36)$$

Otrzymaliśmy zatem dwa równania (3.31) oraz (3.36) dla składowych pól $\chi(\vec{x}, t)$ oraz $\varphi(\vec{x}, t)$, będące równaniami oscylatorów tłumionych ze współczynnikiem tłumienia Γ opisującym szerokość stanu rezonansowego. Drgania tłumione, które normalnie nie występują dla stanów Schrödingera stanowią prawdziwy mechanizm rozpadów stanów rezonansowych. Równocześnie, z równań (3.21a) oraz (3.21b) widać, że stała tłumienia Γ jest również stałą sprzężenia dla oddziaływania pola $\psi_1(\vec{x})$ i $\psi_2(\vec{x})$ opisujących przestrzenną zależność funkcji falowych.

3.3.1 Przykład stałego potencjału

Jeżeli przyjmiemy, że potencjał $V(\vec{x}) = V$ jest potencjałem stałym w najprostszej jedno wymiarowej przestrzeni rozwiązania układu równań (3.21) są w postaci

$$\psi_1(x) = A \cos(\kappa x + \alpha) e^{\eta x} + B \cos(\kappa x + \beta) e^{-\eta x}, \quad (3.37a)$$

$$\psi_2(x) = A \sin(\kappa x + \alpha) e^{\eta x} - B \sin(\kappa x + \beta) e^{-\eta x}, \quad (3.37b)$$

gdzie

$$\kappa = \kappa(E, V, \Gamma) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{m \left(\sqrt{(E - V)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} + E - V \right)}, \quad (3.38)$$

oraz

$$\eta = \eta(E, V, \Gamma) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{m \left(\sqrt{(E - V)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} - E + V \right)}. \quad (3.39)$$

Stałe A , B , α oraz β są zdeterminowane przez warunki brzegowe. Dzięki niezmienniczości względem obrotów równań (3.21)

$$\psi_1 \rightarrow \psi'_1 = \psi_1 \cos \theta + \psi_2 \sin \theta, \quad (3.40a)$$

$$\psi_2 \rightarrow \psi'_2 = -\psi_2 \sin \theta + \psi_1 \cos \theta, \quad (3.40b)$$

możemy założyć, że $\alpha = \beta$ ponieważ podczas obrotu (3.40) $\alpha \rightarrow \alpha - \theta$, $\beta \rightarrow \beta + \theta$ i wybierając $\theta = (\alpha + \beta)/2$ możemy otrzymać równość $\alpha = \beta$ w (3.37). A zatem nie tracąc ogólności rozwiązania układu równań (3.21) możemy zapisać rozwiązania w postaci

$$\psi_1(x) = (Ae^{\eta x} + Be^{-\eta x}) \cos(\kappa x + \alpha), \quad (3.41a)$$

$$\psi_2(x) = (Ae^{\eta x} - Be^{-\eta x}) \sin(\kappa x + \alpha). \quad (3.41b)$$

Funkcja falowa schrödingerska utworzona z rozwiązań (3.37) ma postać

$$\begin{aligned} \Psi_S(x) &= \psi_1(x) + i\psi_2(x) = \\ &= Ae^{\eta x} \cos(\kappa x + \alpha) + iAe^{\eta x} \sin(\kappa x + \alpha) + \\ &\quad + Be^{-\eta x} \cos(\kappa x + \alpha) - iBe^{-\eta x} \sin(\kappa x + \alpha), \end{aligned} \quad (3.42)$$

czyli po uporządkowaniu

$$\Psi_S(x) = Ae^{i(\kappa x + \alpha) + \eta x} + Be^{i(\kappa x + \alpha) - \eta x}. \quad (3.43)$$

W zwartej formie możemy powyższą postać zapisać również jako

$$\Psi_S(x) = Ae^{i(qx + \alpha)} + Be^{-i(qx + \alpha)}, \quad (3.44)$$

gdzie

$$q = \kappa - i\eta = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m \left(E - i\frac{\Gamma}{2} - V \right)}. \quad (3.45)$$

A więc otrzymaliśmy taki sam wektor Gamowa jak w zwyczajnym podejściu. Zespółne wartości energii pojawiają się w naszym podejściu jako konsekwencja zastosowania zwartej notacji we wzorach. Stałe A oraz B można zawsze tak dobrać aby zawierały w sobie także stałą α , to znaczy $A_1 = Ae^{i\alpha}$ oraz $B_1 = Be^{-i\alpha}$. Tak więc rozwiązania przyjmują standardową postać dla potencjału stałego

$$\Psi_S(x) = A_1 e^{iqx} + B_1 e^{-iqx}. \quad (3.46)$$

Rozpatrując potencjał w kształcie prostokątnej bariery:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{gdy } 0 < x < a, \\ V & \text{gdy } a < x < b, \\ 0 & \text{gdy } b < x < \infty, \end{cases} \quad (3.47)$$

w każdym obszarze dostajemy rozwiązania w postaci (3.46) różniące się tylko stałymi A_i oraz B_i , gdzie $i = 1, 2, 3$ oraz w obszarze pierwszym i trzecim $V(x) = 0$ więc

$$q(V = 0) \equiv k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m \left(E - i \frac{\Gamma}{2} \right)}.$$

Natomiast w obszarze drugim $a < x < b$ gdzie potencjał jest stały i różny od zera q ma postać (3.45). Stosując procedurę zszywania dla funkcji schrödingerskiej $\Psi_S(x)$ w postaci (3.46) jako kombinacji pól składowych podobnie jak w przykładzie 2.6.1, oraz rozpatrując stany czysto wychodzące (w obszarze $b < x < \infty$ znika amplituda fal „wchodzących”) możemy otrzymać spektrum stanów rezonansowych identyczne jak w [35]. Możemy równie dobrze zastosować warunki zszywania nie dla $\Psi_S(x)$ ale oddzielnie dla pól składowych. Powoduje to zwiększenie możliwych do otrzymania rozwiązań na spektrum rezonansów.

Zszywanie składowych pól kwantowych

W pierwszym obszarze składowe pól mają postać (3.41). Przyjmując dla uproszczenia $\alpha = 0$ otrzymamy

$$\psi_{1,1}(x) = \cos(\kappa_1 x) (A_1 e^{\eta_1 x} + B_1 e^{-\eta_1 x}), \quad (3.48a)$$

$$\psi_{2,1}(x) = \sin(\kappa_1 x) (A_1 e^{\eta_1 x} - B_1 e^{-\eta_1 x}), \quad (3.48b)$$

gdzie

$$\kappa_1 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{m \left(\sqrt{E^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} + E \right)}, \quad (3.49)$$

oraz

$$\eta = \frac{1}{\hbar} \sqrt{m \left(\sqrt{E^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} - E \right)}. \quad (3.50)$$

Przyjmując, że w punkcie $x = 0$ obie funkcje znikają otrzymamy związek między $B_1 = -A_1$. Tak więc w obszarze $0 < x < a$ dostaniemy:

$$\psi_{1,1}(x) = 2A_1 \sinh \eta_1 x \cos \kappa_1 x, \quad (3.51a)$$

$$\psi_{2,1}(x) = 2A_1 \cosh \eta_1 x \cos \kappa_1 x. \quad (3.51b)$$

W drugim obszarze $a < x < b$ funkcje falowe będą miały postać

$$\psi_{1,2}(x) = (A_2 e^{\eta_2 x} + B_2 e^{-\eta_2 x}) \cos \kappa_2 x, \quad (3.52a)$$

$$\psi_{2,2}(x) = (A_2 e^{\eta_2 x} - B_2 e^{-\eta_2 x}) \sin \kappa_2 x, \quad (3.52b)$$

gdzie

$$\kappa_2 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{m \left(\sqrt{(E - V)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} + E - V \right)}, \quad (3.53)$$

oraz

$$\eta_2 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{m \left(\sqrt{(E - V)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} - E + V \right)}. \quad (3.54)$$

Natomiast w obszarze trzecim $b < x < \infty$ funkcja będzie miała postać:

$$\psi_{1,3}(x) = \cos(\kappa_1 x) (A_3 e^{\eta_1 x} + B_3 e^{-\eta_1 x}), \quad (3.55a)$$

$$\psi_{2,3}(x) = \sin(\kappa_1 x) (A_3 e^{\eta_1 x} - B_3 e^{-\eta_1 x}). \quad (3.55b)$$

Stałe A_i oraz B_i dla rozwiązań w poszczególnych obszarach można wyznaczyć z warunków brzegowych. Ponieważ rozpatrujemy obecnie zszywanie osobno dla składowych pól ψ_1 oraz ψ_2 , dlatego mamy większą swobodę w doborze warunków zszywania. W każdym punkcie nieciągłości potencjału możemy niezależnie od siebie zszywać zarówno składowe pól jak i ich pochodne. Daje nam to cztery równania na dwie stałe odpowiednio w punkcie $x = a$ oraz $x = b$. W każdym z punktów mamy dowolność wyboru dowolnych dwóch warunków zszywania z czterech dostępnych. Dla przykładu możemy zszywać tylko składowe pól w obu punktach, lub w jednym punkcie możemy zszywać pola a w drugim pochodne pól.

Rozpatrzmy dla przykładu zszywanie tylko składowych pól w każdym punkcie. W punkcie $x = a$ warunki brzegowe w postaci:

$$\psi_{1,1}(a) = \psi_{1,2}(a), \quad \psi_{2,1}(a) = \psi_{2,2}(a) \quad (3.56)$$

prowadzą do następujących rozwiązań dla stałych:

$$A_2 = \frac{1}{2} A_1 e^{-\eta_2 a} \left(\cosh \eta_1 a \frac{\sin \kappa_1 a}{\sin \kappa_2 a} + \sinh \eta_1 a \frac{\cos \kappa_1 a}{\cos \kappa_2 a} \right), \quad (3.57)$$

oraz

$$B_2 = -\frac{1}{2} A_1 e^{\eta_2 a} \left(\cosh \eta_1 a \frac{\sin \kappa_1 a}{\sin \kappa_2 a} - \sinh \eta_1 a \frac{\cos \kappa_1 a}{\cos \kappa_2 a} \right). \quad (3.58)$$

Natomiast ze zszywania składowych pól w punkcie $x = b$

$$\psi_{1,2}(a) = \psi_{1,3}(a), \quad \psi_{2,2}(a) = \psi_{2,3}(a), \quad (3.59)$$

dostaniemy

$$A_3 = e^{-b\eta_1} \frac{B_2 e^{-b\eta_2} \sin((\kappa_1 - \kappa_2)b) + A_2 e^{b\eta_2} \sin((\kappa_1 + \kappa_2)b)}{\sin(2b\kappa_1)}, \quad (3.60)$$

oraz

$$B_3 = e^{b\eta_1} \frac{B_2 e^{-b\eta_2} \sin((\kappa_1 + \kappa_2)b) + A_2 e^{b\eta_2} \sin((\kappa_1 - \kappa_2)b)}{\sin(2b\kappa_1)}. \quad (3.61)$$

Podstawiając rozwiązania (3.57) oraz (3.58) do (3.60) i (3.61) ostatecznie otrzymamy:

$$\begin{aligned} A_3 = & A_1 \frac{e^{-\eta_1 b}}{2 \sin(2b\kappa_1)} \times \\ & \times \left[e^{\eta_2(b-a)} \sin(b(\kappa_1 + \kappa_2)) \left(\cosh \eta_1 a \frac{\sin \kappa_1 a}{\sin \kappa_2 a} + \sinh \eta_1 a \frac{\cos \kappa_1 a}{\cos \kappa_2 a} \right) - \right. \\ & \left. - e^{-\eta_2(b-a)} \sin(b(\kappa_1 - \kappa_2)) \left(\cosh \eta_1 a \frac{\sin \kappa_1 a}{\sin \kappa_2 a} - \sinh \eta_1 a \frac{\cos \kappa_1 a}{\cos \kappa_2 a} \right) \right], \quad (3.62) \end{aligned}$$

oraz

$$\begin{aligned} B_3 = & A_1 \frac{e^{\eta_1 b}}{2 \sin(2b\kappa_1)} \times \\ & \times \left[e^{\eta_2(b-a)} \sin(b(\kappa_1 - \kappa_2)) \left(\cosh \eta_1 a \frac{\sin \kappa_1 a}{\sin \kappa_2 a} + \sinh \eta_1 a \frac{\cos \kappa_1 a}{\cos \kappa_2 a} \right) - \right. \\ & \left. - e^{\eta_2(b-a)} \sin(b(\kappa_1 + \kappa_2)) \left(\cosh \eta_1 a \frac{\sin \kappa_1 a}{\sin \kappa_2 a} - \sinh \eta_1 a \frac{\cos \kappa_1 a}{\cos \kappa_2 a} \right) \right]. \quad (3.63) \end{aligned}$$

Stany czysto wychodzące dające rozwiązanie w postaci wektorów Gamowa wystąpią dla warunku $B_3 = 0$. Nieco bardziej skomplikowaną postać miałyby stałe gdyby na przykład w punkcie $x = b$ zamiast zszywać składowe pól zastosować warunek na zszywanie dla pochodnych pól składowych

$$\psi'_{1,2}(a) = \psi'_{1,3}(a) \quad \psi'_{2,2}(a) = \psi'_{2,3}(a).$$

Nie przytaczamy jednak tutaj otrzymanych wyników, gdyż nie wnoszą one nic istotnego do omawianego tematu.

3.4 Podsumowanie

W tym rozdziale pokazaliśmy jak można wprowadzić równanie falowe zależne od czasu dla wektorów Gamowa jako rozwinięcie teorii niezależnej od czasu opisanej w rozdziale poprzednim. Wprowadzając funkcje falowe schrödingerskie oraz antyschrödingerskie jako rozwiązania odpowiednich równań, mogliśmy zbudować stan kwantowy jako kombinację dwóch pól kwantowych, spełniających określone równania zależne od czasu. Pozwoliło nam to nie tylko wprowadzić stany Gamowa zależne od czasu dla rzeczywistych wartości własnych, ale także wskazać pewien mechanizm powstawania stanów rezonansowych jako wynik oddziaływania składowych pól kwantowych. Następnie pokazaliśmy, że taka teoria odtwarza te same rozwiązania co „standardowa” teoria stanów Gamowa. Klasa możliwych rozwiązań jest jednak bogatsza, ponieważ warunki brzegowe możemy stosować nie tylko dla „pełnego” stanu Gamowa, ale równie dobrze oddzielnie dla składowych pól, które tworzą te stany.

Rozdział 4

Niestandardowe warunki brzegowe w teorii stanów Gamowa

Obecnie skupimy się na związku między formułowaniem warunków brzegowych a istnieniem stanów Gamowa. Zwykle przyjmuje się, że podczas zszywania rozwiązań funkcja falowa oraz jej pochodna powinny być ciągłe na brzegach obszarów ciągłości potencjału, ale nie zawsze musimy wybierać takie warunki brzegowe [37].

Związki matematyczne między wielkościami fizycznymi opisującymi zjawiska mają bardzo często postać równań różniczkowych. Korzystając z praw fizycznych rozwiązujemy równania różniczkowe znajdując rozwiązania w postaci ogólnych zależności między wielkościami. Bardzo ważną rolę w procesie znajdowania rozwiązań pełnią warunki brzegowe jakie powinny spełniać te rozwiązania. W klasycznej fizyce wielkości fizyczne będące rozwiązaniami równań mają jednoznaczną interpretację w oparciu o wielkości fizyczne mierzone. Warunki brzegowe ściśle determinują te wielkości. Na przykład rozwiązując równanie ruchu otrzymujemy zależność czasową wektora położenia, która jednoznacznie określa ruch ciała, a warunki brzegowe definiują na przykład początkowe zachowanie ciała.

W mechanice kwantowej podstawowym równaniem różniczkowym, które pozwala wyznaczyć funkcję falową opisującą zachowanie układu jest równanie Schrödingera. Funkcja falowa nie jest wielkością bezpośrednio mierzoną. Zwykle przyjmuje się warunki brzegowe w postaci ciągłości funkcji falowej oraz jej pochodnej na brzegach obszarów ciągłości potencjału. Problem warunków brzegowych w mechanice kwantowej jest bardziej subtelny niż w fizyce klasycznej, ponieważ nie ma bezpośredniego związku między rozwiązaniami równania Schrödingera w postaci funkcji falowych a wielkościami mierzonymi. Wielkości mierzone są powiązane z kombinacjami form biliniowych funkcji falowych. Dlatego fizyczne znaczenie ciągłości na brzegach obszarów mają nie same funkcje falowe ale ich

kombinacje biliniowe .

W najprostszym modelu mechaniki kwantowej obserwablami są gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w danym obszarze $\rho(\vec{x}, t)$ oraz prąd prawdopodobieństwa $\vec{j}(\vec{x}, t)$. Związek między funkcją falową, a gęstością prawdopodobieństwa w najprostszym przypadku jest następujący

$$\rho(\vec{x}, t) = |\psi(\vec{x}, t)|^2, \quad (4.1)$$

a gęstość prądu prawdopodobieństwa ma postać

$$\vec{j}(\vec{x}, t) = \frac{\hbar}{2mi} [\psi^*(\vec{x}, t) \vec{\nabla} \psi(\vec{x}, t) - \psi(\vec{x}, t) \vec{\nabla} \psi^*(\vec{x}, t)]. \quad (4.2)$$

Obie wielkości są powiązane za pomocą równania ciągłości

$$\frac{\partial \rho(\vec{x}, t)}{\partial t} + \text{div } \vec{j}(\vec{x}, t) = 0. \quad (4.3)$$

W przypadku rozważania problemu stacjonarnego zarówno gęstość prawdopodobieństwa jak i gęstość prądu prawdopodobieństwa nie zależą od czasu i wtedy z równania (4.3) otrzymamy

$$\text{div } \vec{j}(\vec{x}, t) = 0. \quad (4.4)$$

Warunki brzegowe muszą zachowywać ciągłość składowej prostopadłej gęstości prądu prawdopodobieństwa jak wynika z warunku (4.4). Podsumowując, w mechanice kwantowej układów stacjonarnych fizyczne znaczenie ma tylko ciągłość składowej prostopadłej gęstości prądu na brzegach obszarów ciągłości potencjału.

Rozważając niezależną od czasu gęstość prawdopodobieństwa $\rho(\vec{x})$ możemy rozpatrzeć dwa przypadki. Z jednej strony gęstość prawdopodobieństwa może być ciągła na brzegach obszarów, z drugiej może mieć nieciągłość. Narzucając standardowe warunki brzegowe w mechanice kwantowej otrzymujemy przypadek pierwszy. Drugi przypadek czyli warunki brzegowe prowadzące do nieciągłości gęstości prawdopodobieństwa mógłby wydawać się warunkiem niefizycznym. Jednak podobnie jak w elektrostatyce możemy rozpatrywać powierzchnie z gwałtownym skokiem gęstości prawdopodobieństwa. Prowadzi to do nieciągłości gęstości na granicy takiej powierzchni podobnie jak powierzchnia przewodnika w elektrostatyce. Ponadto możemy rozpatrywać procesy produkcji, które również prowadzą do nieciągłości gęstości prawdopodobieństwa.

4.1 Przypadek ogólny

Zajmiemy się teraz ogólną klasą warunków brzegowych gwarantujących ciągłość składowej normalnej wektora gęstości prądu prawdopodobieństwa. W ogólności nie bę-

dziemy zakładać ciągłości gęstości prawdopodobieństwa, natomiast ciągłość gęstości prawdopodobieństwa będzie szczególnym przypadkiem ogólnych rozważań.

Z postaci wektora gęstości prawdopodobieństwa (4.2) widać, że gęstość prądu jest różna od zera tylko gdy funkcja falowa jest zespolona.

$$\psi(\vec{x}) = \varphi(\vec{x}) + i\chi(\vec{x}), \quad (4.5)$$

gdzie $\varphi(\vec{x})$ jest częścią rzeczywistą funkcji falowej oraz $\chi(\vec{x})$ jest częścią urojoną funkcji falowej. Podstawiając (4.5) do (4.2) otrzymamy

$$\vec{j}(\vec{x}) = \frac{\hbar}{m} [\varphi(\vec{x}) \vec{\nabla} \chi(\vec{x}) - \chi(\vec{x}) \vec{\nabla} \varphi(\vec{x})]. \quad (4.6)$$

Rozpatrzmy warunki brzegowe na granicy dwóch obszarów ciągłości potencjału. Zaznaczmy odpowiednio funkcje falowe w obszarze pierwszym jako $\psi_1 = \varphi_1 + i\chi_1$ oraz w obszarze drugim $\psi_2 = \varphi_2 + i\chi_2$. Zakładając ciągłość gęstości prądu prawdopodobieństwa jako warunek brzegowy otrzymamy

$$\frac{1}{m_1} (\varphi_1 \chi'_1 - \chi_1 \varphi'_1) = \frac{1}{m_2} (\varphi_2 \chi'_2 - \chi_2 \varphi'_2), \quad (4.7)$$

gdzie φ' oraz χ' oznaczają składowe normalne pochodnych funkcji falowych. Warunek (4.7) uwzględnia również fakt, że masy cząstek w obu obszarach nie muszą być identyczne.

Naszym celem będzie znalezienie ogólnej transformacji liniowej w czterowymiarowej przestrzeni rozpiętej przez elementy $(\varphi, \chi, \varphi', \chi')$ prowadzącej do niezmienniczości równania (4.7). Ogólna postać takiej liniowej transformacji ma postać

$$\varphi_2 = A\varphi_1 + B\chi_1 + C\varphi'_1 + D\chi'_1, \quad (4.8a)$$

$$\chi_2 = E\varphi_1 + F\chi_1 + G\varphi'_1 + H\chi'_1, \quad (4.8b)$$

$$\varphi'_2 = I\varphi_1 + J\chi_1 + K\varphi'_1 + L\chi'_1, \quad (4.8c)$$

$$\chi'_2 = M\varphi_1 + N\chi_1 + P\varphi'_1 + R\chi'_1. \quad (4.8d)$$

Transformacja (4.8) posiada szesnaście parametrów. Zakładamy, że

$$A \neq 0, \quad F \neq 0, \quad K \neq 0, \quad R \neq 0, \quad (4.9)$$

gdyż dla

$$A = F = K = R = 1, \quad (4.10)$$

oraz przy znikaniu pozostałych parametrów otrzymujemy standardowe warunki brzegowe. Podstawiając (4.8) do (4.7), a następnie grupując odpowiednie wyrazy zawierające

takie same kombinacje iloczynów φ_1 oraz χ_i oraz ich pochodnych i porównując stronami współczynniki tych kombinacji otrzymamy następujące równania

$$BN - FJ = 0, \quad (4.11a)$$

$$AM - EI = 0, \quad (4.11b)$$

$$DR - HL = 0, \quad (4.11c)$$

$$CP - GK = 0, \quad (4.11d)$$

$$BM + AN - FI - EJ = 0, \quad (4.11e)$$

$$DN + BR - HJ - FL = 0, \quad (4.11f)$$

$$CM + AP - GI - EK = 0, \quad (4.11g)$$

$$DP + CR - HK - GL = 0. \quad (4.11h)$$

Daje nam to osiem równań na szesnaście parametrów. Spośród wszystkich możliwych rozwiązań układu równań (4.11) wybieramy te, które w sposób ciągły mogą prowadzić w standardowe warunki brzegowe. Mają one postać:

$$\begin{aligned} C &= \frac{HK}{R}, & D &= \frac{BH}{F}, & E &= \frac{AP}{K}, & G &= \frac{HP}{R}, \\ L &= \frac{BR}{F}, & J &= \frac{BI}{A}, & N &= \frac{FI}{A}, & M &= \frac{IP}{K}. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Pozostaje osiem współczynników A, B, F, H, I, K, P, R . Kolejny współczynnik możemy wyznaczyć zauważając, że współczynniki przy iloczynie $\varphi'_1 \chi_1$ oraz $\chi_1 \varphi'_1$ powinny różnić się jedynie znakiem. To znaczy:

$$CN + BP - FK - GJ = -(DM + AR - HI - EL). \quad (4.13)$$

Podstawiając do (4.13) rozwiązanie (4.11) otrzymamy:

$$BP - FK + \frac{FHIK}{AR} - \frac{BHIP}{AR} = - \left(AR - HI + \frac{BHIP}{FK} - \frac{ABPR}{FK} \right). \quad (4.14)$$

Po pewnych przekształceniach równość tą możemy przepisać w postaci:

$$\frac{(FK - BP)(AR - HI)(AR - FK)}{AFKR} = 0. \quad (4.15)$$

Spośród wszystkich możliwych rozwiązań tej równości wybieramy tylko to, które w sposób ciągły przechodzi w standardowy warunek brzegowy. Jest to możliwe tylko wówczas, gdy:

$$R = \frac{FK}{A}. \quad (4.16)$$

Pozostaje zatem ciągle siedem dowolnych współczynników: A, B, F, H, I, K, P .

Po przemianowaniu współczynników

$$A \rightarrow A, B \rightarrow B, F \rightarrow C, H \rightarrow D, I \rightarrow E, K \rightarrow F, P \rightarrow K, \quad (4.17)$$

tak aby stosować pierwsze litery alfabetu otrzymamy

$$\varphi_2 = A\varphi_1 + B\chi_1 + \frac{AD}{C}\varphi'_1 + \frac{BD}{C}\chi'_1, \quad (4.18)$$

$$\chi_2 = \frac{AK}{F}\varphi_1 + C\chi_1 + \frac{ADK}{CF}\varphi'_1 + D\chi'_1, \quad (4.19)$$

$$\varphi'_2 = E\varphi_1 + \frac{BE}{A}\chi_1 + F\varphi'_1 + \frac{BF}{A}\chi'_1, \quad (4.20)$$

$$\chi'_2 = \frac{EK}{F}\varphi_1 + \frac{CE}{A}\varphi_1 + K\varphi'_1 + \frac{CF}{A}\chi'_1. \quad (4.21)$$

Pozostałe współczynniki możemy wyznaczyć dla każdego konkretnego problemu z osobna znając postać rozwiązań funkcji falowych w poszczególnych obszarach. Powyższa analiza pokazuje więc jaka jest swoboda doboru warunków brzegowych.

4.2 Ciągłość prądu prawdopodobieństwa oraz gęstości

Aby ograniczyć dowolność wyboru warunków brzegowych zawężymy teraz nasze rozważania do przypadku gdy gęstość prawdopodobieństwa jest ciągła na brzegach, to znaczy, gdy

$$|\psi_1|^2 = |\psi_2|^2, \quad (4.22)$$

czyli

$$\varphi_1^2 + \chi_1^2 = \varphi_2^2 + \chi_2^2. \quad (4.23)$$

Prowadzi to do następujących warunków brzegowych

$$\varphi_2 = \varphi_1 \cos \alpha + \chi_1 \sin \alpha, \quad (4.24)$$

$$\chi_2 = -\varphi_1 \sin \alpha + \chi_1 \cos \alpha, \quad (4.25)$$

gdzie α jest dowolną fazą.

Pochodne części rzeczywistej i urojonej funkcji falowej mogą w dalszym ciągu być kombinacjami liniowymi funkcji falowej oraz jej pochodnej w obszarze pierwszym

$$\varphi'_2 = A\varphi_1 + B\chi_1 + C\varphi'_1 + D\chi'_1, \quad (4.26)$$

$$\chi'_2 = E\varphi_1 + F\chi_1 + G\varphi'_1 + H\chi'_1. \quad (4.27)$$

Otrzymujemy osiem dowolnych parametrów. Zakładamy, że elementy diagonalne są różne od zera

$$C \neq 0, \quad H \neq 0, \quad (4.28)$$

gdyż tak jest dla standardowych warunków brzegowych.

Podstawiając kombinacje liniowe (4.24-4.27) do równania (4.7), a następnie porównując odpowiednie współczynniki przy składowych funkcji falowych otrzymamy układ równań

$$B \cos \alpha = F \sin \alpha, \quad (4.29a)$$

$$(A - F) \cos \alpha = (B + E) \sin \alpha, \quad (4.29b)$$

$$E \cos \alpha = -A \sin \alpha, \quad (4.29c)$$

$$D \cos \alpha = H \sin \alpha, \quad (4.29d)$$

$$G \cos \alpha = -C \sin \alpha. \quad (4.29e)$$

Rozwiązanie układu (4.29) ma postać

$$\begin{aligned} B &= F \operatorname{tg} \alpha, & E &= -A \operatorname{tg} \alpha, & D &= H \operatorname{tg} \alpha, \\ F &= A, & G &= -C \operatorname{tg} \alpha, \end{aligned} \quad (4.30)$$

gdzie $\alpha \neq \pi/2$.

Dodatkowe równanie otrzymamy zauważając, że współczynnik przy wyrażeniach $\psi\phi'$ oraz $\psi'\phi$ muszą mieć przeciwny znak to znaczy

$$C \cos \alpha + C \operatorname{tg} \alpha \sin \alpha = H \cos \alpha + H \operatorname{tg} \alpha \sin \alpha. \quad (4.31)$$

Stąd otrzymamy dodatkowo, że $H = C$.

Porównując gęstość prądu prawdopodobieństwa w obu obszarach otrzymamy

$$\frac{\hbar}{m_1} (\varphi_1 \chi'_1 - \varphi'_1 \chi_1) = \frac{\hbar C}{m_2 \cos \alpha} (\varphi_1 \chi'_1 - \varphi'_1 \chi_1). \quad (4.32)$$

Czyli stała C musi spełniać warunek

$$C = \frac{m_2}{m_1} \cos \alpha. \quad (4.33)$$

Ostatecznie rozwiązania na stałe mają postać

$$\begin{aligned} B &= F \operatorname{tg} \alpha, & E &= -A \operatorname{tg} \alpha, & D &= H \operatorname{tg} \alpha, \\ F &= A, & G &= -C \operatorname{tg} \alpha, & H &= C \quad \text{oraz} \quad C = \frac{m_2}{m_1} \cos \alpha. \end{aligned} \quad (4.34)$$

Aby wyeliminować osobliwość w rozwiązaniach dla $\alpha = \pi/2$ przemianujemy stałą $A \rightarrow A \cos \alpha$

Postać równań (4.24-4.27) będzie zatem następująca

$$\varphi_2 = \varphi_1 \cos \alpha + \chi_1 \sin \alpha, \quad (4.35)$$

$$\varphi_2 = -\varphi_1 \sin \alpha + \chi_1 \cos \alpha, \quad (4.36)$$

$$\varphi'_2 = \varphi_1 A \cos \alpha + \chi_1 A \sin \alpha + \frac{m_2}{m_1} \varphi'_1 \cos \alpha + \frac{m_2}{m_1} \chi'_1 \sin \alpha, \quad (4.37)$$

$$\chi'_2 = -\varphi_1 A \sin \alpha + \chi_1 A \cos \alpha - \frac{m_2}{m_1} \varphi'_1 \sin \alpha + \frac{m_2}{m_1} \chi'_1 \cos \alpha. \quad (4.38)$$

Dla $\alpha = 0$, $A = 0$ otrzymamy tradycyjne warunki brzegowe.

Z postaci funkcji falowej $\psi_2 = \varphi_2 + i\chi_2$ otrzymamy

$$\psi_2 = \varphi_1 \cos \alpha + \chi_1 \sin \alpha + i(-\varphi_1 \sin \alpha + \chi_1 \cos \alpha) = e^{-i\alpha} \psi_1, \quad (4.39)$$

gdzie $\psi_1 = \varphi_1 + i\chi_1$.

Natomiast

$$\begin{aligned} \psi'_2 &= \varphi'_1 + i\chi'_1 = \varphi_1 A \cos \alpha + \chi_1 A \sin \alpha + \frac{m_2}{m_1} \varphi'_1 \cos \alpha + \frac{m_2}{m_1} \chi'_1 \sin \alpha + \\ &+ i \left(-\varphi_1 A \sin \alpha + \chi_1 A \cos \alpha - \frac{m_2}{m_1} \varphi'_1 \sin \alpha + \frac{m_2}{m_1} \chi'_1 \cos \alpha \right) = \\ &= e^{-i\alpha} \left(A\psi_1 + \frac{m_2}{m_1} \psi'_1 \right) \end{aligned} \quad (4.40)$$

Przyjmując dla uproszczenia, że masy cząstek po obu stronach granicy obszarów są identyczne $m_1 = m_2$ oraz przemianowując stałą $A \equiv g$ otrzymamy następujące warunki na funkcję falową w na granicy obszarów

$$\psi_2 = e^{-i\alpha} \psi_1, \quad (4.41)$$

$$\psi'_2 = e^{-i\alpha} (g\psi_1 + \psi'_1), \quad (4.42)$$

gdzie współczynniki α oraz g są dowolnymi stałymi. Kąt α określa zmianę fazy funkcji falowej na granicy obszaru, a stała g odzwierciedla aktywną rolę tej granicy. Jako przykład zastosowania rozpatrzmy prosty model prostokątnej bariery potencjału.

4.3 Prostokątna bariera potencjału

Rozpatrzmy potencjał sferycznie symetryczny w postaci

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{gdy } 0 < r < a, \\ V_0 & \text{gdy } a < r < b, \\ 0 & \text{gdy } b < r < \infty. \end{cases} \quad (4.43)$$

Rozpatrując część radialną funkcji falowej $\psi_{l=0}(r) \equiv \psi(r)$ otrzymamy następujące rozwiązania równania Schrödingera

$$\begin{aligned} \psi_1(r) &= A \sin kx & \text{dla } 0 < r < a, \\ \psi_2(r) &= A_2 e^{iQr} + B_2 e^{-iQr} & \text{dla } a < r < b, \\ \psi_3(r) &= F_1 e^{ikr} + F_2 e^{-ikr} & \text{dla } b < r < \infty, \end{aligned} \quad (4.44)$$

gdzie

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad (4.45a)$$

$$Q = \sqrt{k^2 - \frac{2mV_0}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)}, \quad (4.45b)$$

oraz uwzględniliśmy, że funkcja falowa znika w początku układu $\psi_1(0) = 0$.

4.3.1 Standardowe warunki brzegowe

Na początek przypomnijmy rozwiązania przy użyciu standardowej procedury zszywania funkcji falowej oraz jej pochodnej na granicach obszarów ciągłości potencjału, czyli w punkcie $r = a$

$$\psi_1(a) = \psi_2(a) \quad \text{oraz} \quad \psi'_1(a) = \psi'_2(a), \quad (4.46)$$

a także dla $r = b$

$$\psi_2(b) = \psi_3(b) \quad \text{oraz} \quad \psi'_2(b) = \psi'_3(b), \quad (4.47)$$

otrzymamy układ czterech równań, z których możemy wyznaczyć stałe A_2, B_2, F_1, F_2 .

$$A_2 = \frac{A}{2Q} e^{-iQa} (Q \sin ka - ik \cos ka), \quad (4.48)$$

$$B_2 = \frac{A}{2Q} e^{iQa} (Q \sin ka + ik \cos ka), \quad (4.49)$$

$$F_1 = \frac{A}{4kQ} e^{-ikb} \{ e^{iQ(b-a)} (k+Q) (Q \sin ka - ik \cos ka) + e^{-iQ(b-a)} (k-Q) (Q \sin ka + ik \cos ka) \}, \quad (4.50)$$

$$F_2 = \frac{A}{4kQ} e^{ikb} \{ e^{iQ(b-a)} (k-Q) (Q \sin ka - ik \cos ka) + e^{-iQ(b-a)} (k+Q) (Q \sin ka + ik \cos ka) \}. \quad (4.51)$$

4.3.2 Warunki brzegowe wynikające z ciągłości prądu prawdopodobieństwa

Zobaczmy jaką postać będą miały rozwiązania, gdy zastosujemy inne warunki brzegowe. Załóżmy, że gęstość prądu prawdopodobieństwa jest ciągła zarówno w punkcie $r = a$ jak i w punkcie $r = b$. Korzystając z warunków brzegowych (4.41) oraz (4.42) w obu punktach nieciągłości potencjału mamy

$$\psi_2(a) = e^{-i\alpha_1} \psi_1(a), \quad (4.52)$$

$$\psi'_2(a) = e^{-i\alpha_1} (g_1 \psi_1(a) + \psi'_1(a)), \quad (4.53)$$

$$\psi_3(b) = e^{-i\alpha_2} \psi_2(b), \quad (4.54)$$

$$\psi'_3(b) = e^{-i\alpha_2} (g_2 \psi_2(b) + \psi'_2(b)), \quad (4.55)$$

gdzie $\alpha_1, \alpha_2, g_1, g_2$ są dowolnymi stałymi. Podstawiając do równań (4.52-4.55) funkcje falowe w postaci (4.44) otrzymamy układ czterech równań, z których możemy wyznaczyć stałe A_2, B_2, F_1, F_2 .

$$A_2 = \frac{A}{2Q} e^{-iQa} e^{-i\alpha_1} [(Q - ig_1) \sin ka - ik \cos ka], \quad (4.56)$$

$$B_2 = \frac{A}{2Q} e^{iQa} e^{-i\alpha_1} [(Q + ig_1) \sin ka + ik \cos ka], \quad (4.57)$$

$$F_1 = \frac{A}{4kQ} e^{-ikb} e^{-i(\alpha_1+\alpha_2)} \times \\ \times \left[e^{iQ(b-a)} (k+Q-ig_2) [(Q-ig_1) \sin ka - ik \cos ka] + e^{-iQ(b-a)} (k-Q-ig_2) [(Q+ig_1) \sin ka + ik \cos ka] \right] \quad (4.58)$$

$$\begin{aligned}
F_2 = & \frac{A}{4kQ} e^{ikb} e^{-i(\alpha_1 + \alpha_2)} \times \\
& \times \left[e^{iQ(b-a)} (k - Q + ig_2) \left[(Q - ig_1) \sin ka - ik \cos ka \right] + \right. \\
& \left. + e^{-iQ(b-a)} (k + Q + ig_2) \left[(Q + ig_1) \sin ka + ik \cos ka \right] \right]. \quad (4.59)
\end{aligned}$$

Jak wiemy stany Gamowa odpowiadają stanom czysto wychodzącym dlatego musimy przyrównać do zera stałą F_2 (amplitudę fali "wchodzącej" w obszarze $b < r < \infty$.) Sprawdźmy jakie warunki muszą spełniać stałe g_1, g_2 aby $F_2 = 0$ dla dowolnych $k, Q \neq 0$.

$$\begin{aligned}
F_2 = 0 = & \frac{A}{4kQ} e^{ikb} e^{-i(\alpha_1 + \alpha_2)} \times \\
& \times \left[e^{iQ(b-a)} (k - Q + ig_2) \left[(Q - ig_1) \sin ka - ik \cos ka \right] + \right. \\
& \left. + e^{-iQ(b-a)} (k + Q + ig_2) \left[(Q + ig_1) \sin ka + ik \cos ka \right] \right]. \quad (4.60)
\end{aligned}$$

Aby równanie (4.60) było spełnione stała g_2 musi spełniać warunek:

$$g_2 = i \frac{e^{iQ(b-a)} (k - Q) (k \cos ka + (g_1 + iQ) \sin ka) - e^{-iQ(b-a)} (k + Q) (k \cos ka + (g_1 - iQ) \sin ka)}{(e^{iQ(b-a)} - e^{-iQ(b-a)}) k \cos ka + (e^{iQ(b-a)} (g_1 + iQ) - e^{-iQ(b-a)} (g_1 - iQ)) \sin ka}. \quad (4.61)$$

Postać F_1 przy tak dobranej g_2 będzie następująca

$$\begin{aligned}
F_1 = & \frac{A}{Q} e^{-ikb} e^{-i(\alpha_1 + \alpha_2)} \times \\
& \times \left[Q \cos (Q(a - b)) \sin ka - (k \cos ka + g_1 \sin ka) \sin (Q(a - b)) \right]. \quad (4.62)
\end{aligned}$$

Stany Gamowa przy warunkach brzegowych i (4.52-4.55) będą miały postać (4.44) gdzie stałe A_2, B_2, F_1 wynoszą odpowiednio (4.56), (4.57) oraz (4.62) natomiast stała $F_2 = 0$.

Jeżeli przyjmiemy, że stałe $g_1 = g_2 \equiv g$ to warunek na stany czysto wychodzące $F_2 = 0$ będzie miał postać:

$$\begin{aligned}
F_2 = 0 = & \frac{A}{4kQ} e^{ikb} e^{-i(\alpha_1 + \alpha_2)} \times \\
& \times \left[e^{iQ(b-a)} (k - Q + ig) \left[(Q - ig) \sin ka - ik \cos ka \right] + \right. \\
& \left. + e^{-iQ(b-a)} (k + Q + ig) \left[(Q + ig) \sin ka + ik \cos ka \right] \right]. \quad (4.63)
\end{aligned}$$

Jest to równanie kwadratowe ze względu na g , które ma dwa rozwiązania:

$$g_I = \frac{1}{2(e^{2iQ(b-a)} - 1)} \left[\frac{\sqrt{2}}{\sin ka} e^{iQ(b-a)} \times \right. \\ \times \left(\cos 2ka \left[4Q^2 - k^2 (1 - \cos (2Q(a-b))) \right] - 2ik^2 \sin 2ka \sin^2 (Q(a-b)) - 4Q^2 \right)^{1/2} - \\ \left. - \left(e^{2iQ(b-a)} - 1 \right) k (\operatorname{ctg} ka - i) - 2i \left(1 + e^{2iQ(b-a)} \right) \right], \quad (4.64)$$

oraz

$$g_{II} = -\frac{1}{2(e^{2iQ(b-a)} - 1)} \left[\frac{\sqrt{2}}{\sin ka} e^{iQ(b-a)} \times \right. \\ \times \left(\cos 2ka \left[4Q^2 - k^2 (1 - \cos (2Q(a-b))) \right] - 2ik^2 \sin 2ka \sin^2 (Q(a-b)) - 4Q^2 \right)^{1/2} + \\ \left. + \left(e^{2iQ(b-a)} - 1 \right) k (\operatorname{ctg} ka - i) + 2i \left(1 + e^{2iQ(b-a)} \right) \right]. \quad (4.65)$$

Tak więc istnieją takie wartości g dla których mamy do czynienia ze stanami wychodzącymi dla dowolnych k oraz Q .

4.3.3 Warunki brzegowe wynikające ze skoku składowej normalnej gęstości prądu

Rozpatrzmy obecnie przypadek gdy na brzegach obszaru nieciągłości potencjału składowa normalna wektora gęstości prądu nie jest ciągła. Mówiąc inaczej następuje skok gęstości prądu a dokładniej jej składowej normalnej przy przejściu z jednego obszaru do drugiego. Nasze rozważania w dalszym ciągu opieramy na prostym jednowymiarowym modelu prostokątnej bariery potencjału (4.43).

Założmy na początek, że w punkcie $r = a$ mamy do czynienia z klasycznymi warunkami brzegowymi to znaczy zszywamy funkcję falową oraz jej pochodną w tym punkcie

$$\psi_1(a) = \psi_2(a), \quad (4.66a)$$

$$\psi_1'(a) = \psi_2'(a). \quad (4.66b)$$

Korzystając z rozwiązań równania Schrödingera w poszczególnych obszarach (4.43) wiemy, że rozwiązania na stałe A_2, B_2 będą miały postać odpowiednio (4.48) oraz (4.49). Gęstość prądu prawdopodobieństwa w obszarze $0 < r < a$ jest równa

$$j_1(r) = \frac{\hbar}{2mi} \left(\overline{\psi_1}(r) \psi_1'(r) - \overline{\psi_1}'(r) \psi_1(r) \right) \quad (4.67)$$

i dla $k \in \mathbb{R}$ przyjmie wartość zero. Podobnie w obszarze drugim gęstość prądu ma postać analogiczną i także dla $k \in \mathbb{R}$ oraz $Q \in \mathbb{R}$ będzie równa zero ponieważ z równań (4.48) oraz (4.49) wynika, że $A_2 = \overline{B_2}$ oraz $B_2 = \overline{A_2}$.

Niech w punkcie $r = b$ następuje skok prądu prawdopodobieństwa oraz skok gęstości prawdopodobieństwa:

$$j_3(b) - j_2(b) = \Delta_{1b}, \quad (4.68a)$$

$$\overline{\psi_3}(b) \psi_3(b) - \overline{\psi_2}(b) \psi_2(b) = \Delta_{2b}. \quad (4.68b)$$

Przyjmijmy, że w obszarze $b < r < \infty$ mamy do czynienia tylko z falą płaską wychodzącą ($F_2 = 0$) to znaczy stany czysto wychodzące $\psi_3(r) = F_1 e^{i k r}$. Prąd w tym obszarze będzie miał postać:

$$j_3(r) = \frac{\hbar}{2 m i} \left(\overline{\psi_3}(r) \psi_3'(r) - \overline{\psi_3}'(r) \psi_3(r) \right) = \frac{\hbar k}{m} |F_1|^2. \quad (4.69)$$

Gęstość prawdopodobieństwa w obszarze trzecim $b < r < \infty$ będzie następująca:

$$\rho_3(r) = \overline{\psi_3}(r) \psi_3(r) = |F_1|^2. \quad (4.70)$$

Korzystając z tego, że $j_2(r) = 0$ oraz z (4.68a, 4.68b) otrzymamy:

$$\frac{\hbar k}{m} |F_1|^2 = \Delta_{1b}, \quad (4.71a)$$

$$|F_1|^2 - \left(A_2 e^{i Q b} + B_2 e^{-i Q b} \right)^2 = \Delta_{2b}, \quad (4.71b)$$

co daje nam następujący związek między skokami gęstości prądu i gęstości prawdopodobieństwa:

$$\frac{\Delta_{1b} m}{\hbar k} - \Delta_{2b} = \left(A_2 e^{i Q b} + B_2 e^{-i Q b} \right)^2, \quad (4.72)$$

gdzie stałe A_2 oraz B_2 mają postać odpowiednio (4.48) oraz (4.49). Tak więc wykorzystując uogólnione warunki w postaci skoku gęstości prądu i skoku gęstości prawdopodobieństwa możemy otrzymać przypadek fal czysto wychodzących nawet przy rzeczywistych wartościach wektora falowego, co nie byłoby możliwe przy standardowych warunkach zszywania, gdyż zerowanie się gęstości prądu w pierwszym obszarze pociągałoby za sobą zerowanie prądu w każdym obszarze. Zważywszy na postać prądu w obszarze $b < r < \infty$ stała F_1 musiałaby także zniknąć.

Przyjmując, że w $r = b$ następuje tylko skok gęstości prądu, a gęstość prawdopodobieństwa jest ciągła ($\Delta_{2b} = 0$) to wtedy warunek (4.71b) stałby się standardowym warunkiem zszywania funkcji falowych $\psi_3(b) = \psi_2(b)$.

Możemy również uogólnić warunki brzegowe zakładając, że składowa normalna gęstości prądu prawdopodobieństwa ma skok $j_2(a) - j_1(a) = \Delta_a$ zarówno w punkcie $r = a$ jak również skok $j_3(a) - j_2(a) = \Delta_b$ następuje w punkcie $r = b$. Dostaniemy w ogólności dodatkowe parametry „zszywania” od których będą zależały stałe A_2, B_2, F_1, F_2 czyli możemy otrzymać jeszcze bogatszą klasę rozwiązań danego problemu.

4.4 Podsumowanie

W tym rozdziale skupiliśmy się na zachowaniu wektorów Gamowa przy wyborze odpowiednich warunków brzegowych. Wprowadziliśmy nieco inne podejście do zagadnienia zszywania rozwiązań równania Schrödingera w punktach nieciągłości potencjału. Wyprowadziliśmy ogólne warunki zszywania wychodząc z założenia, że na brzegach obszaru funkcje falowe i ich pochodne nie muszą być ciągłe, ale gęstość prądu prawdopodobieństwa (która w przeciwieństwie do funkcji falowych ma jasną interpretację fizyczną) powinna być ciągła. Następnie badaliśmy zachowanie się wektorów Gamowa w przypadku zastosowania niestandardowych warunków brzegowych. Pokazaliśmy, że wprowadzenie ogólniejszych warunków zszywania zwiększa liczbę parametrów swobodnych. Narzucając dodatkowe warunki na te swobodne parametry zszywania możemy otrzymać rozwiązania w postaci stanów czysto wychodzących, które nie ogranicza w żaden sposób wyboru wektorów falowych k . Tak więc możliwe są stany czysto wychodzące, dla których wektor falowy przyjmuje wartości rzeczywiste.

Zakończenie

Celem niniejszej pracy było przedstawienie współczesnej teorii kwantowomechanicznych stanów Gamowa, uzupełniając ją o wyniki własnych badań. Podejście takie uzasadnione było zamiarem właściwego naświetlenia znaczenia otrzymanych wyników. W szczególności pozwoliło to pokazać o ile nasze wyniki upraszczają coraz bardziej komplikujący się aparat matematyczny stosowany do opisów stanów Gamowa.

Do najważniejszych wyników niniejszej rozprawy należą:

1. Wskazanie względnie prostego sposobu uniknięcia wprowadzania do formalizmu mechaniki kwantowej zespolonych wartości energii. Z naszych badań wynika, że konieczność wprowadzania zespolonych energii wynika z pewnej swoistej „szczupłości” przestrzeni Hilberta stosowanej w standardowym opisie stanów Gamowa. Nasze „rozszerzenie” przestrzeni Hilberta przez wprowadzenie dwuskładnikowych funkcji falowych jest zabiegiem znacznie prostszym niż zastosowanie skomplikowanego formalizmu wzbogaconej przestrzeni Hilberta.
2. Po raz pierwszy w literaturze poświęconej opisowi stanów Gamowa wyprowadziliśmy warunek normujący funkcję falową tych stanów w obszarze działania potencjału określającego wewnętrzną strukturę stanów Gamowa. Otrzymany warunek normujący jest uniwersalny i nie zależy od kształtu używanego potencjału. Pozwoliło to na sformułowanie sugestii aby spojrzeć na teorię wektorów Gamowa z punktu widzenia współczesnych teorii układów otwartych. Specyfika układów Gamowa polega jednak na tym, że nie posiadają one kanałów wejściowych, natomiast ich jednym kanałem wyjściowym jest zanikająca w czasie i w przestrzeni fala wychodząca.
3. Po raz pierwszy udało nam się również sformułować równanie falowe zależne od czasu opisujące nie tylko standardowe schrödingerskie układy kwantowe, ale również wektory Gamowa. Otrzymane przez nas równanie falowe w jawny sposób

pokazuje, że prawdziwym fizycznym mechanizmem zaniku w czasie stanów Gamowa jest zjawisko tłumienia, którego stała sprzężenia określona jest przez szerokość rezonansów. Reprezentacja stanów Gamowa jaką udało nam się otrzymać zawiera również więcej funkcji falowych niż teoria standardowa. To pojawienie się podwójnej ilości funkcji falowych związane jest z niejednoznacznością wyboru znaku przy pochodnej czasowej występującej w standardowym równaniu Schrödingera.

Bibliografia

- [1] S. Weinberg, *Teoria pól kwantowych, tom 1 Podstawy*, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 1999.
- [2] M. Grabowski, R.S. Ingarden *Mechanika kwantowa - ujęcie w przestrzeni Hilberta*, PWN, Warszawa 1989
- [3] G. Gamow, *Z. Phys.* **51** (1928) 204.
- [4] G. Breit, E. Wigner, *Capture of Slow Neutrons*, *Phys. Rev.* **49** (1936) 519
- [5] G. Breit, *Theory of Resonance Reactions*, in: *Handbuch der Physik* XLI/1 Springer, Berlin, Heidelberg, 1959
- [6] P.A.M. Dirac *The principles of quantum mechanics*, Clarendon Press, Oxford 1930.
- [7] J. E. Roberts, *J. Math. Phys.* **7** (1966); Böhm A.: *Boulder Lectures in Theoretical Physics*, 1966, Vol. **9A**, Gordon and Breach, editors, New York, 1967; J. P. Melsheimer, *J. Math. Phys.* **15** (1971), 902.
- [8] A. Böhm, *The Rigged Hilbert Space and Quantum Mechanics*, *Lecture Notes in Physics* Vol. **78**, 1978.
- [9] A. Böhm and M. Gadella. *Dirac Kets, Gamow Vectors and Gel'fand Triplets*, *Lecture Notes in Physics*, Vol. **348**, (Springer-Verlag, Berlin, 1989).
- [10] A. Böhm, *Quantum Mechanics*, Springer, 1979; ; 3rd Ed. 1993.
- [11] R. de la Madrid Modino *Quantum Mechanics in Rigged Hilbert Space Language* <http://www.ehu.es/~wtbdemor/webdis.ps>
- [12] J.P. Antoine, *Dirac formalism and symmetry problems in quantum mechanics I: General Dirac formalism*, *J.Math.Phys* **10** (1969), 53-69.

- [13] O. Melsheimer, *Rigged hilbert space formalism as extended mathematical formalism for quantum systems. I: General theory*, J.Math.Phys **15** (1974), 902-916.
- [14] O. Melsheimer, *Rigged hilbert space formalism as extended mathematical formalism for quantum systems. II: Transformation theory in nonrelativistic quantum mechanics*, J.Math.Phys **15** (1974), 917-925.
- [15] I.M. Gelfand, G.E. Shilov, *Generalized Functions*, Academic Press, New York 1967.
- [16] K. Maurin, *General Eigenfunction Expansions and Unitary Representations of Topological Groups*, Warszawa 1968.
- [17] K. Maurin. *Analiza*, PWN, Warszawa 1971.
- [18] A. Böhm, H. D. Doebner, P. Kilanowski (Eds.), *Irreversibility and Causality: Semigroups and Rigged Hilbert Space*, Lecture Notes in Physics; **504** (Springer-Verlag, Berlin 1998)
- [19] N.N. Gogolubov, A.A. Logunov, I.T. Todorov, *Introduction to Axiomatic Quantum Field Theory*, Mathematical Physic Monograph Series Vol.**18** (Benjamin/Cummins Publ. Co., Reading 1975).
- [20] A., Böhm, *J. Math. Phys.* **221** (1981) 2813; *Lectures of Math. Phys.* **3**, 445 (1979).
- [21] H. Weyl, *Gruppentheorie und Quantenmechanik*, (S. Hirzel, Leipzig, 1928).
- [22] E. Schrödinger, *Ann. Physic* **79**, 734 (1926)
- [23] C. Eckart, *Phys. Rev.* **28**, 711 (1926)
- [24] D. Hilbert, J. von Neumann, L. Nordheim, *Über die Grundlagen der Quantenmechanik*, Math. Ann **98**, 1-30, (1927).
- [25] J. von Neumann, *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*, (Princeton University Press 1955).
- [26] F. Gieres, *Dirac formalism and mathematical surprises in quantum mechanics*, preprint LYCEN **9960a**.
- [27] C. Möller, Ann. de l'Institut Henri Poincare, **11**, 251, (1949)
- [28] C. Möller, Kgl, Danske, Viedensk. Selsk. Mat.-Fys. Medd. **23**, No.1. (1946)

- [29] P.L. Duren, *$\mathcal{H}^p$ Spaces*, (Academic Press, New York, 1970); K. Hoffman, *Banach Space of Analytic Functions*, (Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, N.J., 1962; Dover Publications, NY, 1988).
- [30] M. Gadella, *Rigged Hilbert space of Hardy-class functions: Applications to resonances* J.Math. Phys. **24**, June 1983.
- [31] A. Böhm *Resonance poles and quasistationary state vectors in the rigged Hilbert space formulation of quantum mechanics*, J. Math. Phys **22**, 2813 (1981)
- [32] O. Civitarese, M. Gadella, R. Id. Betan *On the mean value of the energy for resonant states* Nuclear Physics A **660** (1999) 255-266, math-ph/0006027 (<http://arxiv.org/abs/math-ph/0006027>)
- [33] E. Kapuścik, P. Szczeszek *Model-Independent Normalization Condition for Gamow Vectors*, Czechoslovak Journal of Physics Volume **53**, Number **11**
- [34] M. S. Lifszyc, *Operatory, drgania, fale (otwarte układy)*, Nauka, Moskwa 1966 (w jęz. rosyjskim)
- [35] R. de la Madrid, M. Gadella *A pedestrian introduction to Gamow vectors*, Am. J. Phys. **70** (6), 626-638 (2002)
- [36] R. M. Cavalcanti, C. A. A. de Carvalho, *On the effectiveness of Gamow's method for calculating decay rates* quant-ph/**9711037**
- [37] E. Kapuścik, J. Podlaska, P. Szczeszek *Nonstandard Boundary Conditions in Quantum Mechanics* Czechoslovak Journal of Physics Volume **54**, Number **11**
- [38] E. Kapuścik, P. Szczeszek, *The Physical Mechanism of Formation of Quantum Mechanical Gamow States*, Foundations of Physics Letters, Volume **18**, Issue **6**, Nov 2005 (573 - 580).