

Физический факультет  
кафедра теоретической физики

**А.А. Кожевников**

**Конспект лекций "Физика  
конденсированного состояния вещества" для  
студентов отделения информатики.**

Часть I. Основы нерелятивистской квантовой механики.

(учебное пособие)

НОВОСИБИРСК

# Оглавление

<b>Предисловие</b>	<b>7</b>
<b>1 Волновая функция квантовой системы</b>	<b>9</b>
1.1 Дуализм волна-частица . . . . .	9
1.2 Основные постулаты о волновой функции. . . . .	11
1.3 Волновой пакет. . . . .	12
1.4 Импульсное распределение . . . . .	15
1.5 Задачи . . . . .	17
<b>2 Уравнение Шредингера</b>	<b>20</b>
2.1 Уравнение Шредингера, зависящее от времени. . . . .	20
2.2 Одномерное уравнение Шредингера . . . . .	22
2.3 Дискретный спектр . . . . .	24
2.4 Непрерывный спектр . . . . .	29
2.5 Задачи . . . . .	31
<b>3 Операторы физических величин</b>	<b>34</b>
3.1 Элементы аналитической механики . . . . .	35
3.2 Операторы координаты и импульса . . . . .	38
3.3 Операторы квантовой механики . . . . .	41
3.4 Дираковские обозначения . . . . .	45
3.5 Представления операторов в различных базисах . . . . .	48
3.6 Условия совместной измеримости . . . . .	50
3.7 Измерения в квантовой механике . . . . .	52
3.8 Задачи . . . . .	54
<b>4 Зависимость операторов от времени</b>	<b>56</b>
4.1 Зависимость от времени волновой функции . . . . .	56

4.2	Сохраняющиеся величины . . . . .	58
4.3	Представление Гейзенберга . . . . .	59
4.4	Стандартный квантовый предел . . . . .	61
4.5	Задачи . . . . .	63
<b>5</b>	<b>Гармонический осциллятор</b>	<b>64</b>
5.1	Уровни энергии осциллятора . . . . .	64
5.2	Волновые функции осциллятора . . . . .	67
5.3	Когерентные состояния осциллятора . . . . .	69
5.4	Задачи . . . . .	72
<b>6</b>	<b>Периодическое поле</b>	<b>74</b>
6.1	Симметрии в квантовой механике . . . . .	74
6.2	Периодический потенциал и теорема Блоха . . . . .	79
6.3	Спектр энергий в одномерном периодическом поле . . . . .	81
6.4	Задачи . . . . .	84
<b>7</b>	<b>Квазиклассическое приближение</b>	<b>86</b>
7.1	Теорема Эренфеста . . . . .	86
7.2	Метод Вентцеля – Крамерса – Бриллюэна . . . . .	88
7.3	Правило квантования Бора – Зоммерфельда . . . . .	94
7.4	Подбарьерное прохождение в квазиклассике . . . . .	97
7.5	Квазистационарные состояния . . . . .	98
7.6	Физические проявления туннелирования . . . . .	104
7.7	Задачи . . . . .	107
<b>8</b>	<b>Момент импульса</b>	<b>109</b>
8.1	Алгебра оператора момента . . . . .	109
8.2	Угловые волновые функции . . . . .	113
8.3	Задачи . . . . .	117
<b>9</b>	<b>Центральное поле</b>	<b>119</b>
9.1	Задача двух взаимодействующих частиц . . . . .	119
9.2	Уравнение Шредингера в центральном поле . . . . .	120
9.3	Спектр атома водорода . . . . .	122
9.4	Задачи . . . . .	127

<b>10 Частица в магнитном поле</b>	<b>129</b>
10.1 Калибровочная инвариантность . . . . .	129
10.2 Эффект Ааронова – Бома . . . . .	131
10.3 Уровни Ландау . . . . .	134
10.4 Задачи . . . . .	137
<b>11 Вариационный метод и теория возмущений</b>	<b>138</b>
11.1 Вариационный метод . . . . .	138
11.2 Стационарные возмущения в отсутствие вырождения . . .	142
11.3 Возмущения в случае двух близких уровней . . . . .	145
11.4 Взаимодействие нейтральных атомов . . . . .	146
11.5 Задачи . . . . .	148
<b>12 Спин</b>	<b>150</b>
12.1 Операторы спина и спиноры . . . . .	150
12.2 Уравнение Паули. Магнитный момент . . . . .	153
12.3 Прецессия спина в магнитном поле . . . . .	156
12.4 Опыт Штерна – Герлаха . . . . .	159
12.5 Сложение моментов . . . . .	161
12.6 Правила отбора и теорема Вигнера – Эккарта . . . . .	165
12.7 Задачи . . . . .	168
<b>13 Квантовые вычисления</b>	<b>171</b>
13.1 Кубиты и основные квантовые вентили . . . . .	173
13.2 Квантовый параллелизм и задача Дойча . . . . .	179
13.3 Квантовое преобразование Фурье . . . . .	180
13.4 Поиск и исправление ошибок в квантовых вычислениях . .	181
13.5 Задачи . . . . .	185
<b>14 Квантовые алгоритмы</b>	<b>187</b>
14.1 Квантовый алгоритм факторизации . . . . .	187
14.2 Алгоритм Гровера поиска в базе данных . . . . .	193
14.3 Телепортация неизвестного квантового состояния . . . . .	198
14.4 Задачи . . . . .	202
<b>15 Атомы тяжелее водорода</b>	<b>203</b>
15.1 Тождественность частиц в квантовой механике . . . . .	203
15.2 Атом гелия и обменное взаимодействие . . . . .	207

15.3	Таблица Менделеева . . . . .	212
15.4	Правила Хунда . . . . .	216
15.5	Спин-орбитальное взаимодействие . . . . .	218
15.6	Эффект Зеемана . . . . .	221
15.7	Двухтомная молекула . . . . .	223
15.8	Задачи . . . . .	228
<b>16</b>	<b>Возмущения, зависящие от времени</b>	<b>230</b>
16.1	Теория возмущений, зависящих от времени . . . . .	230
16.2	Адиабатические возмущения . . . . .	232
16.3	Внезапные возмущения . . . . .	233
16.4	Периодические возмущения . . . . .	234
16.5	Соотношение неопределенностей энергия-время . . . . .	238
16.6	Задачи . . . . .	239
<b>17</b>	<b>Излучение света</b>	<b>240</b>
17.1	Свободное электромагнитное поле . . . . .	240
17.2	Квантование электромагнитного поля . . . . .	244
17.3	Испускание и поглощение фотонов . . . . .	247
17.4	Лазерный эффект и формула Планка . . . . .	250
17.5	Электрическое дипольное излучение . . . . .	251
17.6	Правила отбора и угловое распределение . . . . .	254
17.7	Задача Элитцура – Вайдмана . . . . .	257
17.8	Задачи . . . . .	261
<b>18</b>	<b>Рассеяние</b>	<b>263</b>
18.1	Постановка задачи рассеяния . . . . .	263
18.2	Задача рассеяния в классической механике . . . . .	265
18.3	Борновское приближение . . . . .	266
18.4	Оптическая теорема . . . . .	271
18.5	Рассеяние в кулоновском поле . . . . .	273
18.6	Неупругое рассеяние в борновском приближении . . . . .	276
18.7	Задачи . . . . .	278
	<b>Литература</b>	<b>279</b>

# Предисловие

Целью настоящего курса является овладение основами нерелятивистской квантовой механики и статистической физики в объеме, необходимом для понимания основных свойств конденсированных сред, включая кристаллические твердые тела. Эти физические системы представляют собой конгломерат огромного,  $N \sim 10^{24}$ , числа атомов или молекул. Классическая механика не в состоянии правильно описать свойства отдельных микрочастиц. Поэтому нашей основной задачей в первой части курса будет изучение квантовой механики как теории, которая в совершенстве объясняет парадоксальные с классической точки зрения свойства атомов. Во второй части курса, посвященной статистической физике, будут развиты методы, необходимые для описания макроскопически большого числа атомов и молекул. В тексте в основном используется система единиц СГСЭ, в которой длина измеряется в сантиметрах, масса в граммах, энергия в эргах. Приведем для справок приближенные численные значения фундаментальных физических постоянных, которые будут использоваться в тексте. Эти же величины необходимо использовать при решении задач из домашних заданий и на семинарских занятиях.

1. Элементарный заряд  $|e| = 4.8 \times 10^{-10}$  единиц СГСЭ.
2. Масса электрона  $m_e = 9.1 \times 10^{-28}$  г.
3. Масса протона  $m_p = 1.7 \times 10^{-24}$  г. С принятой здесь точностью масса нейтрона равна массе протона.
4. Скорость света  $c = 3 \times 10^{10}$  см/с.
5. Постоянная Планка  $\hbar = 1.054 \times 10^{-27}$  эрг·с.
6. Электрон-вольт (эВ):  $1 \text{ эВ} = 1.6 \times 10^{-12}$  эрг.

7. Постоянная Больцмана  $k_B = 1.4 \times 10^{-16}$  эрг/град.

8. Единица измерения сечения реакции 1 барн= $10^{-24}$  см<sup>2</sup>.

Значения фундаментальных физических постоянных с наибольшей достигнутой точностью приводятся раз в два года в обзоре физики элементарных частиц (Review of Particle Physics).

# Глава 1

## Волновая функция квантовой системы

### 1.1 Дуализм волна-частица.

В конце XIX и самом начале XX века было выполнено огромное число экспериментов, указавших на недостаточность классической механики и электродинамики для объяснения основных свойств окружающего мира. В результате теоретического анализа опытов по исследованию распределения по частотам электромагнитного излучения в полости М.Планком было установлено, что обмен энергией между излучением с частотой  $\nu = \omega/2\pi$  и атомами происходит в виде дискретных порций

$$E = h\nu = \hbar\omega, \quad (1.1)$$

где

$$\hbar = h/2\pi = 1.054 \times 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{с} \quad (1.2)$$

есть так называемая *постоянная Планка*. Развитие этой идеи привело А.Эйнштейна к утверждению, что электромагнитное излучение представляет собой совокупность фотонов, наряду с энергией (1.1) имеющих импульс

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}, \quad (1.3)$$

связанный с волновым вектором  $\mathbf{k}$ . Тем самым к процессам взаимодействия квантов электромагнитного излучения (фотонов) с заряженными



частицами оказалось возможным применять законы сохранения энергии и импульса.

С другой стороны, Л. де Бройль высказал гипотезу, что каждой частице с энергией  $E$  и импульсом  $\mathbf{p}$  следует сопоставить волну с круговой частотой  $\omega$  и волновым вектором  $\mathbf{k}$ , которые можно получить из (1.1) и (1.3). Некоторое время спустя эта гипотеза была подтверждена экспериментально в опытах по дифракции электронов на кристаллических структурах. Соответствующая длина волны

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{|\mathbf{p}|} \quad (1.4)$$

с тех пор называется длиной волны де Бройля. Математическое выражение для этой волны называется *волновой функцией* и записывается по аналогии с выражением для плоской волны в электродинамике:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = Ce^{-i\omega t + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = Ce^{i(-Et + \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})/\hbar}. \quad (1.5)$$

Здесь и далее подразумевается определенная зависимость энергии от импульса  $E \equiv E(\mathbf{p})$ , называемая *законом дисперсии*. Например, для безмассовых частиц, таких как фотоны,

$$E = c|\mathbf{p}|,$$

для нерелятивистских частиц с массой  $m$

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}.$$

Как мы увидим далее в этом курсе, в физике твердого тела могут встречаться возбуждения с самым причудливым законом дисперсии.

Следует четко уяснить принципиальное отличие волны де Бройля от классического волнового процесса, в котором при уменьшении интенсивности источника волновой характер (в виде интерференции или дифракции) не исчезает. Напротив, в опытах по дифракции элементарных частиц (фотонов, электронов, нейтронов и т.п.) при уменьшении интенсивности источника до значений, когда можно говорить о прохождении отдельных частиц, каждая из них попадает на экран совершенно непредсказуемым образом. Лишь после регистрации достаточно большого числа частиц на экране проявляется характерная дифракционная картина. Подробности см. в [9].

## 1.2 Основные постулаты о волновой функции.

Теоретический аппарат, необходимый для правильного описания элементарных частиц, атомов и молекул, называется *квантовой механикой*. Он основывается на ряде постулатов, угаданных путем кропотливого анализа многочисленных экспериментальных данных. Будем формулировать постулаты по мере необходимости.

*Постулат 1* относится к волновой функции и ее интерпретации. Он гласит, что вся информация о квантовом состоянии частицы содержится в комплексной волновой функции координат и времени  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ . Обычно требуют, чтобы она была непрерывной, конечной и однозначной. Смысл волновой функции состоит в том, что вероятность  $dW$  того, что частица может быть зарегистрирована в объеме  $d^3r \equiv dxdydz$  вокруг точки  $\mathbf{r}$ , равна

$$dW = \rho(\mathbf{r}, t)d^3r = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r. \quad (1.6)$$

Величина

$$\rho(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$$

называется *плотностью вероятности*. Поскольку вероятности найти частицу где-то в пространстве есть достоверное событие, вероятность которого равна единице, то

$$\int |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r = 1 \quad (1.7)$$

Это выражение называется *условием нормировки*. В таком виде оно допустимо в случае сходимости нормировочного интеграла в левой части (1.7). Если нормировочный интеграл расходится, то можно ввести отношение вероятностей нахождения частицы в окрестностях разных точек. При условии (1.7) с помощью (1.6) можно вычислять средние значения как любой из компонент радиус-вектора  $\mathbf{r} = (x, y, z)$ ,

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \int \mathbf{r} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r \quad (1.8)$$

так и любой их функции  $f(\mathbf{r})$ :

$$\langle f(\mathbf{r}) \rangle = \int f(\mathbf{r}) |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r. \quad (1.9)$$

В случае  $N$  частиц вводится волновая функция в *конфигурационном пространстве*  $\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t)$ . При этом величина

$$dW = \rho(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) \prod_{a=1}^N d^3r_a = |\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t)|^2 \prod_{a=1}^N d^3r_a \quad (1.10)$$

дает совместную вероятность того, что частица 1 может быть зарегистрирована в окрестности  $d^3r_1$  около точки  $\mathbf{r}_1$ , частица 2 — в окрестности  $d^3r_2$  около точки  $\mathbf{r}_2$  и т.д. Далее совокупность любого числа частиц для краткости будем называть системой.

*Постулат 2.* Если система может находиться в состояниях с волновыми функциями  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$ , то она может находиться и в состоянии с волновой функцией

$$\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2.$$

Здесь  $c_1$  и  $c_2$  суть произвольные комплексные числа. Этот постулат называется *принципом суперпозиции*. В соответствии с вероятностной интерпретацией, все физические следствия квантовой механики зависят лишь от квадрата модуля волновой функции. Поэтому волновая функция может умножаться на произвольное ненулевое комплексное число. В случае нормированной волновой функции это число по модулю равно единице. Оно должно быть одним и тем же для всех членов суперпозиции.

### 1.3 Волновой пакет.

Как известно из электродинамики, решение уравнений Максвелла в пустом пространстве в виде плоской волны описывает электромагнитную волну с определенным волновым вектором. По аналогии с этим будем считать, что волновая функция (1.5) описывает частицы с определенным импульсом. Согласно статистической интерпретации, плотность вероятности в этом случае оказывается постоянной, что находится в противоречии с интуитивным представлением о частице как объекте, локализованном в пространстве. Пользуясь принципом суперпозиции, можно построить волновую функцию, которая приводит к плотности вероятности, локализованной в пространстве с некоторым конечным разбросом. Для этого возьмем сумму плоских волн со слегка различающимися импульсами  $\mathbf{p}_0 - \Delta\mathbf{p}/2 < \mathbf{p} < \mathbf{p}_0 + \Delta\mathbf{p}/2$ . Временно ограничимся одним

пространственным измерением, обобщив рассмотрение на трехмерный случай в самом конце. Представив сумму монохроматических волн в виде интеграла, в котором константа  $C$  заменена на гладкую функцию импульса  $C(p_x)$ , получим волновую функцию, описывающую пакет:

$$\begin{aligned}
\Psi(x, t) &= \int_{p_{0x}-\Delta p_x/2}^{p_{0x}+\Delta p_x/2} dp_x C(p_x) \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} (Et - p_x x) \right] \approx C(p_{0x}) \times \\
&\times \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} (E(p_{0x})t - p_{0x}x) \right] \times \\
&\times \int_{-\Delta p_x/2}^{\Delta p_x/2} d\kappa_x \exp \left[ i \frac{\kappa_x}{\hbar} \left( x - t \frac{\partial E}{\partial p_x} \right) \right] = \\
&= 2\hbar C(p_{0x}) \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} (E(p_{0x})t - p_{0x}x) \right] \times \\
&\times \frac{\sin \frac{\Delta p_x}{2\hbar} \left( x - t \frac{\partial E}{\partial p_x} \right)}{\left( x - t \frac{\partial E}{\partial p_x} \right)}. \tag{1.11}
\end{aligned}$$

Плотность вероятности

$$|\Psi(x, t)|^2 \propto \frac{\sin^2 \frac{\Delta p_x}{2\hbar} \left( x - t \frac{\partial E}{\partial p_x} \right)}{\left( x - t \frac{\partial E}{\partial p_x} \right)^2}$$

пропорциональна функции, которая имеет острый максимум, положение которого отвечает прямолинейному и равномерному движению со скоростью

$$v_x = \partial E / \partial p_x.$$

Эта скорость называется *групповой скоростью*. Ширина максимума по порядку величины равна  $\Delta x \sim \hbar / \Delta p_x$ . Отсюда получаем фундаментальное соотношение неопределенностей для координаты и импульса:

$$\Delta x \Delta p_x \sim \hbar. \tag{1.12}$$

В случае трех пространственных измерений получается вектор групповой скорости

$$\mathbf{v}_g = \frac{\partial E}{\partial \mathbf{p}},$$

а к соотношению неопределенностей (1.12) для  $x$ -компонент следует добавить два аналогичных соотношения для  $y$ - и  $z$ -компонент.

Соотношение неопределенностей позволяет качественно понять многие квантовые явления. Рассмотрим проблему устойчивости атома водорода. Согласно классической электродинамике, электрон, совершающий ускоренное движение по орбите вокруг протона, должен излучать. Это приводит к потере его энергии и падению на протон за время порядка  $10^{-15}$  с. Такое предсказание классической физики резко противоречит наблюдаемой стабильности материи. Вместе с тем учет квантовых свойств показывает, что падение электрона отвечало бы отсутствию пространственной неопределенности и по соотношению (1.12) приводило бы к бесконечно большой неопределенности импульса и, следовательно, энергии. Баланс между отрицательной потенциальной энергией притяжения  $\propto -1/r$  и обусловленной соотношением неопределенностей (1.12) положительной кинетической энергией  $\propto 1/r^2$  приводит к конечной минимальной энергии электрона и к конечному пространственному расстоянию, на котором он локализован. Соответствующие оценки проводятся следующим образом. Записываем классическое выражение для энергии системы электрон+протон:

$$E = \frac{p^2}{2m_e} - \frac{e^2}{r}.$$

Предполагаем, что соотношение (1.12) выполняется для текущих значений радиальной координаты и импульса:  $pr \sim \hbar$ . Подставив  $p \sim \hbar/r$  в выражение для энергии и находя минимум, получим:

$$r_{\min} \sim a_B = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}, \quad E_{\min} \sim E_0 = -\frac{e^2}{2a_B} = -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2}. \quad (1.13)$$

Величина  $a_B$  называется *боровским радиусом*. Численно,  $a_B = 0.5 \times 10^{-8}$  см. Боровский радиус задает масштаб расстояний в атомах, молекулах и твердых телах. Численное значение минимальной энергии электрона в атоме водорода, называемой энергией основного состояния, составляет  $E_0 = -13.6$  эВ. Эта величина задает масштаб энергии связи в атомах, молекулах и твердом теле и называется *ридбергом* (Ry).

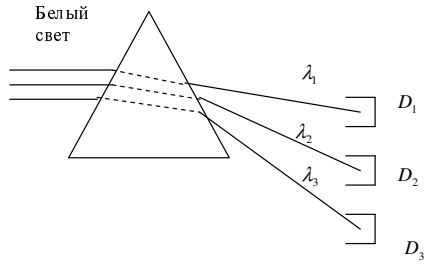


Рис. 1.1: Призма, разлагающая белый свет на монохроматические компоненты

## 1.4 Импульсное распределение

Введенная выше волновая функция трех пространственных координат  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  задает распределение квантовых частиц по координатам и является волновой функцией в координатном пространстве. Введем волновую функцию в *импульсном пространстве*  $\Phi(\mathbf{p}, t)$  так, чтобы

$$dW_{\mathbf{p}} = |\Phi(\mathbf{p}, t)|^2 d^3p$$

была плотностью вероятности того, что импульс частицы находится в элементе объема  $d^3p$ , содержащего точку  $\mathbf{p}$ . Для этого снова воспользуемся оптической аналогией. В оптике есть устройства, которые разлагают белый свет на монохроматические компоненты. Одним из них является призма рис. 1.1, принцип действия которой основан на том, что коэффициент преломления стекла растет с уменьшением длины волны света. Поэтому фиолетовые лучи отклоняются призмой сильнее чем красные. Другим примером спектрального прибора является дифракционная решетка. Существенно, что после прохождения этих устройств монохроматические компоненты с длинами волн  $\lambda_1, \lambda_2$  и т.д., из которых составлен белый свет, попадают в разные области координатного пространства  $D_1, D_2$  и т.д. Для квантовых частиц можно реализовать аналогичное устройство, взяв однородное магнитное поле, в котором заряженные частицы с разными импульсами  $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots$ , пролетая по дуге окружности, попадают в разные области регистрирующего экрана  $D_1, D_2, \dots$ . Представив для простоты, что исходный пакет составлен из дискретного набора импульсов

$\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots$ , запишем его волновую функцию до попадания в такой прибор:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = C_{\mathbf{p}_1} e^{i(\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{r} - E_1 t)/\hbar} + C_{\mathbf{p}_2} e^{i(\mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{r} - E_2 t)/\hbar} + \dots,$$

где  $E_1 \equiv E(\mathbf{p}_1)$  и т.д. Возьмем момент времени  $t = 0$ , обозначим  $\Psi(\mathbf{r}, 0) = \psi(\mathbf{r}) = C_{\mathbf{p}_1} e^{i\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{r}/\hbar} + C_{\mathbf{p}_2} e^{i\mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{r}/\hbar} + \dots$ <sup>1</sup>. Плотность вероятности  $\rho(\mathbf{p}_2)$  того, что частица, находящаяся в состоянии с волновой функцией  $\psi(\mathbf{r})$ , имеет импульс, скажем,  $\mathbf{p}_2$ , равна плотности вероятности того, что частица окажется в координатном пространстве в области детектора  $D_2$ . Согласно постулату 1, это равно  $|C_{\mathbf{p}_2} e^{i\mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{r}/\hbar}|^2 = |C_{\mathbf{p}_2}|^2$ . Снова возвращаясь от дискретной суммы к интегралу по импульсу мы видим, что распределение по импульсам (т.е. плотность вероятности иметь какой-то импульс), равна квадрату модуля амплитуды Фурье-компоненты  $C_{\mathbf{p}}$  разложения координатной волновой функции в интеграл Фурье по импульсам. Обозначим волновую функцию в импульсном пространстве  $\phi(\mathbf{p})$ . Очевидно,  $\phi(\mathbf{p}) = AC_{\mathbf{p}}$ . Константа  $A = 1/(2\pi\hbar)^{-3/2}$  определяется из условия

$$1 = \int |\psi(\mathbf{r})|^2 d^3r = \int |\phi(\mathbf{p})|^2 d^3p$$

с учетом интегрального представления  $\delta$ -функции Дирака

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx}. \quad (1.14)$$

Тем самым формула для нахождения волновой функции в импульсном пространстве  $\phi(\mathbf{p})$  по волновой функции в координатном пространстве  $\psi(\mathbf{r}) = \Psi(\mathbf{r}, 0)$  принимает вид:

$$\phi(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3r \psi(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar}. \quad (1.15)$$

Формула для обратного преобразования:

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p \phi(\mathbf{p}) e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar}. \quad (1.16)$$

С помощью (1.15) можно вычислить среднее значение любой функции импульса по формуле

$$\langle g(\mathbf{p}) \rangle = \int d^3p |\phi(\mathbf{p})|^2 g(\mathbf{p}). \quad (1.17)$$

---

<sup>1</sup>Условимся, если не оговорено противное, использовать заглавные греческие буквы  $\Psi$  и  $\Phi$  для обозначения волновых функций с учетом зависимости от времени.

С помощью волновых функций  $\Psi(\mathbf{r}, 0) = \psi(\mathbf{r})$ ,  $\Phi(\mathbf{p}, 0) = \phi(\mathbf{p})$  и формул для определения средних значений (1.9) и (1.17) можно ввести выражения для неопределенностей декартовых компонент координат и импульсов в начальный момент времени  $t = 0$ :

$$\begin{aligned}\langle \Delta x^2 \rangle &= \int d^3r (x - \langle x \rangle)^2 |\psi(\mathbf{r})|^2, \\ \langle \Delta p_x^2 \rangle &= \int d^3p (p_x - \langle p_x \rangle)^2 |\phi(\mathbf{p})|^2,\end{aligned}\tag{1.18}$$

аналогично для других декартовых компонент.

Для нахождения неопределенностей координат и импульсов в произвольный момент времени  $t$  нужно знать закон эволюции волновой функции во времени. Динамическое уравнение для нахождения  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  называется *уравнением Шредингера*. Для случае взаимодействующих частиц оно будет введено в следующей главе. На данном этапе, фактически пользуясь аналогией с оптикой, мы можем вычислять лишь эволюцию волновой функции свободной нерелятивистской частицы. Тогда закон дисперсии имеет вид  $E = \mathbf{p}^2/2m$ . Зная волновую функцию в начальный момент времени  $\Psi(\mathbf{r}, 0) = \psi(\mathbf{r})$ , можно найти ее в произвольный момент  $t$ :

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p \phi(\mathbf{p}) e^{i(\mathbf{p}\mathbf{r} - Et)/\hbar},$$

где  $\phi(\mathbf{p})$  вычисляется с помощью (1.15). В этом случае непосредственное дифференцирование выражения для плоской волны (1.5) показывает, что она удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t),\tag{1.19}$$

которое называется *уравнением Шредингера для свободной частицы*.

## 1.5 Задачи

1. Радиопередатчик мощностью 1 кВт работает на длине волны 10 см. Сколько фотонов в единицу времени при этом излучается?



2. Лазерные фотоны с длиной волны в видимом диапазоне испытывают лобовое столкновение с электронами высокой энергии  $E_e = 20$  ГэВ. Вычислить энергию рассеянных фотонов. (*Указание.* Применить релятивистскую кинематику к процессу  $e^- + \gamma \rightarrow e^- + \gamma$ .)
3. Одним из методов определения энергии электронов или позитронов в  $e^+e^-$ -коллайдерах является рассеяние лазерных фотонов назад (на угол  $180^\circ$ ). Используя законы сохранения энергии и импульса, получить выражение, связывающее максимальную частоту зарегистрированного фотона с энергией электрона (или позитрона).
4. Вселенная заполнена космическим фоновым излучением, средняя энергия квантов которого эквивалентна температуре 2.7 К. Оценить энергию космических лучей, состоящих в основном из протонов, начиная с которой Вселенная станет для них непрозрачной за счет фоторождения  $\pi^0$ -мезонов на фотонах космического фона в реакции  $\gamma + p \rightarrow \pi^0 + p$  (*эффект Грайзена – Зацепина – Кузмина (GZK)*). Энергия покоя  $\pi^0$ -мезона равна  $m_\pi c^2 = 135$  МэВ.
5. Оценить энергию соответственно фотонов, электронов, нейтронов, необходимую при использовании пучков этих частиц для исследования структуры кристаллических твердых тел.
6. Атомы неона, охлажденные в лазерной ловушке до температуры  $T \sim 10^{-3}$  К, освобождаются из нее и падают в поле тяжести с нулевой начальной скоростью на плоскость с двумя параллельными щелями. Ширина щелей 2 микрона, расстояние между ними 6 микрон. Плоскость находится на расстоянии  $l = 3.5$  см от центра ловушки. Под плоскостью на расстоянии  $L = 85$  см находится регистрирующий экран, на котором наблюдается интерференционная картина. Найти расстояние между ее максимумами.
7. Оценить с помощью соотношения неопределенностей энергию основного состояния и характерный масштаб расстояний для гармонического осциллятора с частотой  $\omega$ . То же для нейтрона в однородном поле тяжести Земли, предполагая, что его движение ограничено снизу непроницаемой поверхностью. (В случае нейтрона ответ довести до числа.)

8. Пучок атомов серебра получается испарением из печи с температурой  $T = 1500$  К и пропусканием их через коллиматор, размер которого можно менять. Пользуясь соотношением неопределенностей, оценить минимальный размер пятна на экране, установленном за коллиматором на расстоянии 1 м.
9. В опытах с конденсатами Бозе – Эйнштейна частицы первоначально находились в основном состоянии в ловушке, поле которой имеет вид поля анизотропного осциллятора  $U(x, y, z) = m(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2)/2$ . В некоторый момент времени поле выключили. Найти импульсное распределение частиц. Вычислить с его помощью отношения  $\langle p_x^2 \rangle / \langle p_z^2 \rangle$ ,  $\langle p_y^2 \rangle / \langle p_z^2 \rangle$ . Взаимодействием частиц друг с другом пренебречь.
10. Координатная волновая функция основного состояния атома водорода имеет вид  $\psi(\mathbf{r}) = (\pi a_B^3)^{-1/2} e^{-|\mathbf{r}|/a_B}$ , где  $a_B$  есть боровский радиус. Вычислить в этом состоянии  $\langle \mathbf{r} \rangle$ ,  $\langle \Delta x^2 \rangle$ ,  $\langle \Delta y^2 \rangle$ ,  $\langle \Delta z^2 \rangle$ ,  $\langle |\mathbf{r}| \rangle$ ,  $\langle \Delta r^2 \rangle$ ,  $\langle \mathbf{p} \rangle$ ,  $\langle \Delta p_x^2 \rangle$ ,  $\langle \Delta p_y^2 \rangle$ ,  $\langle \Delta p_z^2 \rangle$ ,  $\langle |\mathbf{p}| \rangle$ ,  $\langle \Delta p^2 \rangle$ . *Указание.* При вычислениях может оказаться полезной формула

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{(1+x^2)^n} = \frac{\pi(2n-3)!!}{2(2n-2)!!}.$$

11. Пучок микрочастиц с импульсом  $\mathbf{p}_0$  подлетает перпендикулярно к бесконечному в двух направлениях плоскому непроницаемому экрану, в котором имеется щель бесконечной длины и с шириной  $d$ . Найти распределение частиц по импульсу после прохождения экрана.
12. В момент времени  $t = 0$  волновая функция свободной нерелятивистской частицы представляет собой волновой пакет  $\psi(x, 0) = (\pi a^2)^{-1/4} e^{-x^2/2a^2 + ik_0 x}$ . Вычислив распределения по координатам и импульсам в произвольный момент времени  $t$ , найти дисперсии  $\langle \Delta x^2(t) \rangle$ ,  $\langle \Delta p_x^2(t) \rangle$  и функцию распределения по энергии (т.е. плотность вероятности того, что энергия имеет заданное значение).

## Глава 2

# Уравнение Шредингера

### 2.1 Уравнение Шредингера, зависящее от времени.

Уравнение для свободной частицы (1.19) не учитывает взаимодействия с внешним полем. Более полное описание квантовой частицы с массой  $m$ , находящейся в поле с потенциальной энергией  $U(\mathbf{r}, t)$ , достигается с помощью основного уравнения квантовой механики, которому подчиняется ее волновая функция. Уравнение было предложено Э.Шредингером и носит его имя:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + U(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (2.1)$$

Уравнение Шредингера обобщается на случай любого числа  $N$  частиц, взаимодействующих как друг с другом, так и с внешним полем:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t) &= \sum_{a=1}^N \left[ -\frac{\hbar^2}{2m_a} \nabla_a^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + U_{\text{ext}}(\mathbf{r}_a, t) \right] \times \\ &\times \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t) + \\ &+ U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t). \end{aligned} \quad (2.2)$$

Взаимодействие друг с другом учитывается введением энергии взаимодействия  $U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ , взаимодействие с внешним потенциальным полем учитывается с помощью энергии взаимодействия  $\sum_{a=1}^N U_{\text{ext}}(\mathbf{r}_a, t)$ .

Учет взаимодействия с внешним магнитным полем будет рассмотрен позже.

Если уравнение (2.1) умножить слева на  $\Psi^*$ , а уравнение, комплексно сопряженное (2.1) умножить справа на  $\Psi$  и вычесть одно из другого, то при условии вещественности потенциальной энергии  $U$  получим уравнение непрерывности в виде

$$\frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} + \nabla \frac{\hbar}{2mi} [\Psi^* \nabla \Psi - (\nabla \Psi^*) \Psi] = 0, \quad (2.3)$$

из которого ясно, что

$$\rho(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (2.4)$$

и

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} [\Psi^* \nabla \Psi - (\nabla \Psi^*) \Psi] \quad (2.5)$$

суть величины, называемые соответственно плотностью вероятности и плотностью потока вероятности. Если проинтегрировать уравнение непрерывности по бесконечно большому объему, на границах которого волновая функция обращается в нуль, и применить теорему Гаусса, то получим условие

$$\frac{d}{dt} \int d^3x |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = 0,$$

которое выражает сохранение нормировки волновой функции.

Если гамильтониан  $\hat{H}$  в уравнении Шредингера не зависит явно от времени,  $U \equiv U(\mathbf{r})$ , то решение можно искать с помощью разделения переменных:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{-iEt/\hbar} \psi(\mathbf{r}),$$

где координатная волновая функция  $\psi(\mathbf{r})$  подчиняется уравнению

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}). \quad (2.6)$$

Оно называется *стационарным уравнением Шредингера*. Плотность вероятности состояния, обладающего определенной энергией, не зависит от времени. Состояние с определенной энергией стационарно.

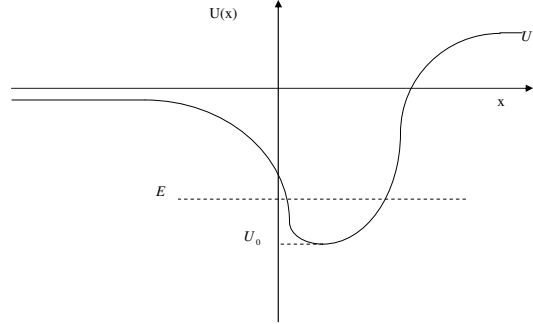


Рис. 2.1: Примерный вид потенциальной энергии

## 2.2 Одномерное уравнение Шредингера

В случае одного пространственного измерения стационарное уравнение Шредингера для координатной волновой функции  $\psi \equiv \psi(x)$  принимает вид

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - U(x)]\psi = 0. \quad (2.7)$$

Требуем, чтобы волновая функция была однозначной и непрерывной на всей оси. Характер решений уравнения (2.7) определяется видом потенциальной энергии. При  $\text{Im}U = 0$  волновая  $\psi$  может быть выбрана вещественной. Действительно, применив операцию комплексного сопряжения к уравнению (2.7) убеждаемся, что  $\psi^*$  удовлетворяет тому же самому уравнению. Следовательно, вещественные линейные комбинации  $\psi + \psi^*$  и  $(\psi - \psi^*)/i$  также удовлетворяют этому уравнению. Непрерывность  $\psi$  сохраняется и при наличии конечных разрывов потенциала. Для таких разрывов производная  $\psi'$  также непрерывна. Для доказательства следует проинтегрировать уравнение (2.7) в  $\varepsilon$ -окрестности точки разрыва и учесть непрерывность  $\psi$  и конечность скачка потенциала. Пусть  $U(x)$  представляет собой асимметричную яму Рис. 2.1. Поскольку среднее значение оператора кинетической энергии  $\hat{K}$  положительно,  $\langle K \rangle = \langle H \rangle - \langle U \rangle > 0$ , то  $\langle H \rangle > U_0$ . Поскольку это неравенство справедливо для любого состояния, то  $E > U_0$ .

Если рассмотреть состояния с  $E < 0$ , то из уравнения (2.7) видно, что волновая функция должна стремиться к нулю при уходе  $x$  в класси-

чески запрещенные области, где  $U(x) > E$ . Допустим, что мы стартуем с  $x \rightarrow -\infty$ , где волновая функция стремится к нулю. При переходе в классически разрешенную область с  $E > U(x)$  решение имеет осцилляционный характер. Поэтому при произвольной энергии  $E$  в правой точке поворота могли бы оказаться такие значения  $\psi$  и  $\psi'$ , что при  $x \rightarrow \infty$  получилось бы, что  $\psi \rightarrow \pm\infty$  даже при небольшой вариации энергии  $E$ . Это означает, что решение, которое стремится к нулю при  $x \rightarrow \pm\infty$ , возможно лишь при определенных дискретных значениях энергии  $E_n$ , при которых обращается в нуль коэффициент при растущем на бесконечности решении. Эти значения энергии нумеруются целым числом  $n$ . Спектр гамильтониана имеет *дискретную* ветвь. Соответствующие волновые функции дискретного спектра могут быть нормированы условием

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n|^2 dx = 1.$$

Стремление волновой функции к нулю при  $x \rightarrow \pm\infty$  означает, что плотность вероятности того, что частица находится на больших расстояниях от ямы, исчезающе мала, т.е. частица связана в яме. По этой причине состояния с дискретными энергиями называются *связанными состояниями*. Аналогом этих состояний в классической механике являются состояния *финитного движения*.

Состояния дискретного спектра в одномерном случае не вырождены. Действительно, допустим, что одной энергии  $E$  отвечают две волновых функции  $\psi_1$  и  $\psi_2$ . Тогда из (2.7) получим, что

$$\psi_1''/\psi_1 = 2m(E - U)/\hbar^2 = \psi_2''/\psi_2,$$

откуда следует, что  $\psi_1''/\psi_1 = \psi_2''/\psi_2$ . Интегрирование этого уравнения дает  $\psi_1'\psi_2 - \psi_2'\psi_1 = \text{const}$ . Поскольку  $\psi_{1,2} \rightarrow 0$  при  $x \rightarrow \pm\infty$ , то  $\psi_2 \propto \psi_1$ , то есть  $\psi_1$  и  $\psi_2$  совпадают. Для волновых функций дискретного спектра справедлива *осцилляционная теорема*: волновая функция  $\psi_n(x)$  состояния имеет  $n$  нулей при конечных  $x$ . В частности, волновая функция состояния с минимальной энергией, называемого *основным состоянием*, не имеет нулей. Поскольку стационарное уравнение Шредингера и граничные условия при поиске связанных состояний не содержат комплексных коэффициентов, волновые функции связанных состояний могут быть выбраны вещественными.

## 2.3 Дискретный спектр

На примере некоторых потенциалов рассмотрим, как решается стационарное одномерное уравнение Шредингера (2.7). Первый пример это потенциал, представляющий собой прямоугольную яму с бесконечными стенками:

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x \leq 0 \\ 0, & 0 < x < a \\ \infty, & x \geq a \end{cases} . \quad (2.8)$$

Очевидно, что для того чтобы удовлетворить уравнению (2.7) в указанном потенциале, волновая функция должна равняться нулю при  $x \leq 0$  и при  $x \geq a$ . В интервале  $0 < x < a$  потенциальная энергия равна нулю, поэтому решение уравнения (2.7) записывается в виде

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx,$$

где  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ . Для того чтобы удовлетворить граничному условию при  $x = 0$  необходимо потребовать  $B = 0$ , тогда  $\psi(x) = A \sin kx$ . Так как  $\psi(a) = 0$ , то  $k = k_n = \pi n/a$ , где  $n = 1, 2, \dots$ . Нормированные волновые функции дискретных уровней имеют вид:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n x}{a},$$

энергии этих уровней равны

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}.$$

Непрерывный спектр в указанном потенциале невозможен.

Рассмотрим более сложный случай и найдем уровни энергии связанных состояний в симметричной прямоугольной яме конечной глубины:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & |x| \geq a/2 \\ -U_0, & |x| < a/2 \end{cases} . \quad (2.9)$$

Этот потенциал обладает свойством симметрии:  $U(-x) = U(x)$ . В случае симметричного потенциала волновые функции могут быть выбраны либо *симметричными*  $\psi_s(-x) = \psi_s(x)$ , либо *антисимметричными*

$\psi_a(-x) = -\psi_a(x)$ . Действительно, если волновая функция  $\psi(x)$  является решением уравнения (2.7) с симметричным потенциалом  $U(x) = U(-x)$ , то и  $\psi(-x)$  также будет решением этого уравнения с той же энергией. Тогда линейная комбинация  $\psi(x) + \psi(-x)$  является симметричной функцией, тогда как  $\psi(x) - \psi(-x)$  – антисимметричной. В случае потенциала (2.9) удобство классификации решений по симметрии состоит в том, что сшивку волновых функций нужно проводить лишь в точках разрыва потенциала на правой полуоси.

Ищем симметричные решения. Для связанных состояний в поле (2.9) энергия отрицательна:  $E = -|E|$ . Симметричное решение имеет вид

$$\psi_s(x) = \begin{cases} A_s \cos k_1 x, & 0 \leq x \leq a/2 \\ B_s e^{-\varkappa x}, & x > a/2 \end{cases}, \quad (2.10)$$

где  $k_1 = \sqrt{2m(U_0 - |E|)/\hbar^2}$ ,  $\varkappa = \sqrt{2m|E|/\hbar^2}$ . Условие непрерывности волновой функции и ее производной при  $x = a/2$  приводит к уравнению на определение  $k$ :

$$\operatorname{tg} \frac{k_1 a}{2} = \frac{\varkappa}{k_1}. \quad (2.11)$$

Уравнение трансцендентно, решение в замкнутом виде возможно лишь в некоторых предельных случаях, которые будут рассмотрены ниже. Однако можно провести общий анализ, основываясь на графическом подходе. Введем новую переменную

$$\xi = k_1 a/2$$

и константу

$$\xi_0 = \sqrt{\frac{ma^2 U_0}{2\hbar^2}}.$$

Из этого выражения очевидно, что «мощь» ямы характеризуется произведением параметров ямы  $U_0 a^2$ . В новых переменных уравнение (2.11) перепишется в виде

$$\operatorname{tg} \xi = \sqrt{\frac{\xi_0^2}{\xi^2} - 1}. \quad (2.12)$$

Уровни энергии даются точками пересечения графиков двух функций, стоящих в правой и левой частях уравнения (2.12). Пунктирные кривые пересекают ось абсцисс в точках  $\xi = \xi_0$ . Из графика ясно, что решение существует при любом сколь угодно малом  $\xi_0$ . С ростом  $\xi_0$  график



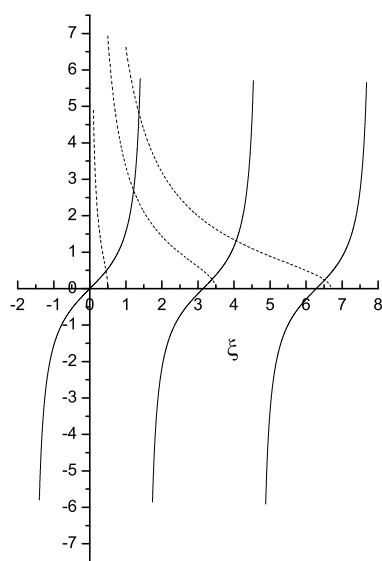


Рис. 2.2: Графический метод решения уравнения (2.12). Сплошные линии – графики функции в левой части уравнения, штриховые – в правой части

функции в правой части уравнения (2.12) пересекает все большее число ветвей тангенса. При  $0 < \xi_0 < \pi$  имеется один симметричный уровень, при  $\pi < \xi_0 < 2\pi$  есть 2 симметричных уровня и т.д. Чем больше  $\xi_0$ , тем больше уровней содержится в яме. Именно в этом смысле параметр  $\xi_0$  характеризует «мощь» прямоугольной ямы.

В предельном случае *мелкой ямы*  $\xi_0 \ll 1$  имеется только один уровень, и его можно найти явно. Из определений  $\xi$  и  $\xi_0$  следует, что

$$\xi_0^2 - \xi^2 = \frac{ma^2|E|}{2\hbar^2}.$$

Из графика на рис. 2.2 очевидно, что при  $\xi_0 \ll 1$  значение  $\xi \approx \xi_0$  в точке пересечения двух графиков также мало. Тогда из уравнения (2.12) получим:

$$\xi \operatorname{tg} \xi = \sqrt{\xi_0^2 - \xi^2} = \sqrt{\frac{ma^2|E|}{2\hbar^2}}.$$

Но, поскольку  $\xi \operatorname{tg} \xi \approx \xi^2 \approx \xi_0^2$ , то значение энергии мелкого симметричного уровня в прямоугольной яме имеет вид:

$$E = -\frac{2\hbar^2\xi_0^4}{ma^2} = -\frac{ma^2U_0}{2\hbar^2}U_0 \equiv -\xi_0^2U_0.$$

Из этого выражения усматривается неравенство  $|E| \ll U_0$ , эквивалентное неравенству  $\xi_0^2 - \xi^2 \ll \xi_0^2$ .

Вне ямы волновая функция спадает на расстояниях

$$l \sim \frac{1}{\varkappa} = \frac{\hbar}{\xi_0\sqrt{2mU_0}}.$$

Поэтому отношение размера ямы  $a$  к расстоянию  $l$ , на котором затухает волновая функция, составляет величину

$$\frac{a}{l} = \frac{a\xi_0}{\hbar}\sqrt{2mU_0} = 2\xi_0^2 \ll 1.$$

Последнее неравенство означает, что в связанном состоянии с малой энергией связи частица с подавляющей вероятностью находится не внутри, а вне ямы.

Разобранный выше пример показывает, что для связанных состояний с малой энергией связи конкретная математическая форма потенциала может быть несущественна, поскольку с подавляющей вероятностью квантовая частица пребывает вне действия потенциала. По

этой причине потенциал может быть смоделирован простым выражением  $U(x) = -G\delta(x)$ , где  $G = U_0a$ . Действительно, если взять предел выражения для потенциальной энергии (2.9) такой, что  $U_0 \rightarrow \infty$ ,  $a \rightarrow 0$ , но  $U_0a = G$ , то предельное выражение будет давать одно из возможных представлений  $\delta$ -функции Дирака. Энергия единственного уровня в этом пределе станет равной

$$E = -\frac{mG^2}{2\hbar^2},$$

а соответствующая нормированная волновая функция будет равна

$$\psi(x) = \sqrt{\kappa}e^{-\kappa|x|}.$$

Здесь  $\kappa = mG/\hbar^2$ . Получим теперь эти же результаты, решая уравнение Шредингера с потенциалом  $U(x) = -G\delta(x)$ :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E + G\delta(x)]\psi(x) = 0. \quad (2.13)$$

Как обычно, уравнения с  $\delta$ -функцией следует решать в тех областях, где потенциал регулярен, в данном случае, при  $x \neq 0$ , а в точке  $x = 0$ , где есть особенность, необходимо сшить решения, найденные в регулярных областях  $x < 0$  и  $x > 0$ . Для сшивания решений по-прежнему требуется непрерывность волновой функции в особенной точке, однако непрерывность производной от волновой функции в особенной теперь не имеет места. Для получения нового условия на производную проинтегрируем уравнение (2.13) по  $\varepsilon$ -окрестности точки  $x = 0$ . Если обозначить через

$$[\psi']|_{x=0} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} [\psi'(\varepsilon) - \psi'(-\varepsilon)]$$

скачок производной в нуле, то с учетом непрерывности волновой функции и свойства  $\delta$ -функции, состоящего в том, что

$$\int_a^b f(x)\delta(x-c)dx = \begin{cases} f(c), & \text{если } c \in (a, b) \\ 0, & \text{если } c \notin (a, b) \end{cases}$$

для функции  $f(x)$ , регулярной при  $x = c$ , получим выражение для скачка производной:

$$[\psi']|_{x=0} = -\frac{2mG}{\hbar^2}\psi(0). \quad (2.14)$$

В случае  $\delta$ -барьера следует изменить знак  $G$ . Связанные состояния в  $\delta$ -яме возможны при  $E = -|E| < 0$ . Волновая функция в регулярных областях, непрерывная при  $x = 0$ , равна

$$\psi(x) = A \begin{cases} e^{-\kappa x} & \text{при } x > 0, \\ e^{\kappa x} & \text{при } x < 0. \end{cases}$$

Из условия (2.14) находим, что  $\kappa = mG/\hbar^2$ . Отсюда следует, что и энергия, и нормированная волновая функция в связанном состоянии в  $\delta$ -яме, совпадают с выражениями, полученными при переходе к пределу мелкой ямы в потенциале (2.9). Отметим, что метод рассмотрения состояний с малой энергией связи с помощью введения  $\delta$ -потенциала работает и в трехмерном случае.

## 2.4 Непрерывный спектр

При  $E > 0$  асимптотика решений уравнения Шредингера в поле, зависимость которого показана на рис. 2.1, при  $x \rightarrow -\infty$  имеет вид плоской волны. Условие равенства нулю волновой функции при  $x \rightarrow -\infty$  не возникает, поэтому спектр энергии непрерывен. Постановка задачи в этом случае такова. Ищется решение стационарного одномерного уравнения Шредингера, имеющего при  $x \rightarrow -\infty$  асимптотику вида

$$\psi \sim e^{ikx} + Ae^{-ikx},$$

которая отвечает суперпозиции падающей волны с единичной амплитудой и отраженной волны. Здесь  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ . При  $x \rightarrow +\infty$  асимптотика имеет вид прошедшей волны

$$\psi \sim Be^{ik_1x},$$

где  $k_1 = \sqrt{2m(E - U_2)}/\hbar$ ,  $U_2$  суть значение потенциальной энергии при  $x \rightarrow +\infty$ . В такой постановке, иногда называемой *одномерной задачей рассеяния*, требуется найти *коэффициенты отражения и прохождения*. Эти величины определяются в терминах потоков вероятности. Поток вероятности в состоянии с волновой функцией  $\psi$  в одномерном случае записывается как

$$j_x = \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi^* \frac{d\psi}{dx} - \frac{d\psi^*}{dx} \psi \right). \quad (2.15)$$

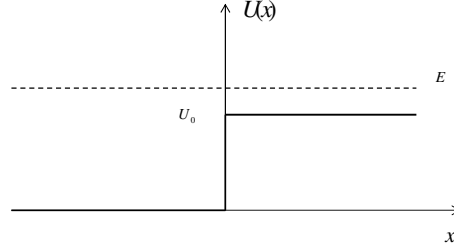


Рис. 2.3: Прохождение потенциального барьера в виде ступеньки

Коэффициент отражения  $R$  определяется как отношение потока в отраженной волне к потоку в падающей волне:

$$R = \frac{k|A|^2}{k} = |A|^2, \quad (2.16)$$

тогда как коэффициент прохождения  $T$  определяется как отношение потока в прошедшей волне к потоку в падающей волне:

$$T = \frac{k_1|B|^2}{k}. \quad (2.17)$$

В силу сохранения вероятности эти величины связаны соотношением

$$R + T = 1.$$

Действительно, если частицы не рождаются, то поток падающих частиц  $k$  должен быть равен сумме потока отраженных частиц  $k|A|^2$  и потока прошедших частиц  $k_1|B|^2$ . Отсюда получим равенство  $k = k|A|^2 + k_1|B|^2$ . В случае, когда энергия частицы на рис. (2.1) удовлетворяет неравенству  $0 < E < U_2$ , в классически запрещенной области волновая функция вещественна, поэтому поток в прошедшей волне равен нулю. Поэтому  $T = 0$ , а коэффициент отражения  $R = 1$ . Это явление есть аналог полного внутреннего отражения в оптике.

Для потенциала в виде ступеньки рис. 2.3 при  $E \geq U_0$  волновая функция имеет вид

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Ae^{-ikx}, & \text{при } x < 0, \\ Be^{ik_1x}, & \text{при } x > 0, \end{cases} \quad (2.18)$$

где  $k_1 = \sqrt{2m(E - U_0)/\hbar^2}$ . Из условий непрерывности волновой функции и её производной при  $x = 0$  получим систему двух уравнений для

определения постоянных  $A$  и  $B$ , которые в данном случае вещественны:

$$\begin{aligned} 1 + A &= B \\ 1 - A &= \frac{k_1}{k} B, \end{aligned} \quad (2.19)$$

откуда получим коэффициенты отражения и прохождения:

$$\begin{aligned} R &= \left( \frac{k - k_1}{k + k_1} \right)^2, \\ T &= \frac{4kk_1}{(k + k_1)^2}. \end{aligned} \quad (2.20)$$

При  $E < U_0$  величина  $k_1 = i\sqrt{2m(U_0 - E)/\hbar^2}$  чисто мнимая, поэтому  $T = 0$ ,  $R = 1$ .

## 2.5 Задачи

1. Получить уравнение непрерывности в случае, когда  $\text{Im}U \neq 0$ . На основе полученного выражения дать интерпретацию мнимой добавки к потенциалу.
2. Получить выражения для плотности вероятности и плотности потока вероятности в случае заряженной частицы, находящейся во внешнем электромагнитном поле.
3. Получить импульсное распределение для частиц в одномерной прямоугольной яме с бесконечными стенками (2.8). Выяснить, как происходит переход к классической механике в пределе больших квантовых чисел.
4. Возьмем потенциал одномерной прямоугольной ямы с бесконечными стенками в симметричном виде

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x \leq -a/2 \\ 0, & |x| < a/2 \\ \infty, & x \geq a/2 \end{cases}.$$

Найти нормированные волновые функции и энергии симметричных и антисимметричных состояний. Сопоставить их с решением этой задачи в несимметричном потенциале вида (2.8).

5. Провести анализ антисимметричных решений уравнения Шредингера в одномерной симметричной прямоугольной яме конечной глубины (2.9). Всегда ли есть антисимметричные уровни в такой яме? Найти явное выражение для энергии мелкого антисимметричного уровня. Объединив наборы симметричных и антисимметричных решений, перейти к пределу  $U_0 \rightarrow \infty$ . Сравнить полученный результат с решением предыдущей задачи.
6. Оценить минимальную энергию частиц в поле

$$U(x) = -\frac{U_0 a^2}{x^2 + a^2}$$

при условии  $U_0 m a^2 / \hbar^2 \ll 1$  (мелкая яма).

7. Проверить, что предел выражения для потенциальной энергии (2.9) такой, что  $U_0 \rightarrow \infty$ ,  $a \rightarrow 0$ , но  $U_0 a = G$ , действительно является одним из возможных представлений  $\delta$ -функции Дирака.
8. Определить импульсное распределение для частиц в связанном состоянии  $\delta$ -ямы. Найти произведение дисперсий  $\Delta x^2 \Delta p_x^2$ .
9. Найти энергии и нормированные волновые функции частицы в поле  $U(x) = -G[\delta(x-a) + \delta(x+a)]$ . Построить графики зависимости энергии частицы от расстояния между ямами.
10. Найти энергии и нормированные волновые функции частицы в поле  $U(x) = -G[\delta(x-a) + \delta(x+a) + \delta(x)]$ . Построить графики зависимости энергии частицы от расстояния между ямами.
11. Определить уровни энергии и нормированные волновые функции частицы в трехмерном непроницаемом ящике  $0 \leq x \leq L_x$ ,  $0 \leq y \leq L_y$ ,  $0 \leq z \leq L_z$ .
12. Найти коэффициенты отражения и прохождения для потенциалов
  - показанного на рис. 2.3

- $U(x) = \pm G\delta(x)$
- прямоугольного потенциального барьера высотой  $U_0$  и шириной  $a$
- прямоугольной потенциальной ямы глубиной  $U_0$  и шириной  $a$

Во всех случаях построить графически зависимость найденных коэффициентов от энергии.



## Глава 3

# Операторы физических величин

С чисто утилитарной точки зрения уравнение Шредингера с заданным выражением для потенциальной энергии является достаточным для многих практических задач, связанных с нахождением уровней энергии и волновых функций квантовых систем. Тем не менее, при проведении конкретных вычислений необходимо существенным образом развить математический аппарат квантовой механики, который высветит парадоксальные и противоречащие обыденной интуиции особенности поведения квантовых систем. Этот аппарат основан на использовании *операторов*, сопоставляемых физическим величинам. Строгие определения операторов, функциональных пространств и т.д. даются в курсах функционального анализа. Здесь мы будем вводить и использовать необходимые математические понятия, как говорят, на физическом уровне строгости, по возможности избегая математических тонкостей.

По ходу изложения нам понадобятся некоторые понятия классической физики, которые не вводились в курсе механики и теории относительности. К ним относятся обобщенные координаты и импульсы, функции Лагранжа (лагранжиан) и Гамильтона (гамильтониан) и т.д. Все это составляет предмет *аналитической механики*, методы которой оказываются мощным подспорьем как при решении задач классической физики, так и при формулировке аппарата квантовой механики. Приведем ниже необходимые сведения, которые нам понадобятся в связи с задачами квантовой механики.

### 3.1 Элементы аналитической механики

Обычная формулировка механики классической материальной точки опирается на уравнение движения Ньютона

$$m\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{F}, \quad (3.1)$$

где  $\mathbf{F}$  суть сила, действующая на частицу. В случае движения в поле с потенциальной энергией  $U(\mathbf{r}, t)$  сила равна  $\mathbf{F} = -\nabla U(\mathbf{r}, t)$ . При движении во внешнем магнитном поле сила равна силе Лоренца

$$\mathbf{F}_L = e \left( \mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{B}] \right).$$

Ньютоновский подход неудобен в криволинейных координатах, например, в сферических или цилиндрических. Формулировка механики, не опирающаяся на конкретный выбор координат, предложена Лагранжем. Предполагается, что положение частицы в пространстве может быть задано заданием набора трех чисел, называемых *обобщенными координатами*  $q_i$ . Индекс  $i$  нумерует независимые степени свободы:  $i = 1, 2, 3$ . Вводится функция Лагранжа  $L(q_i, \dot{q}_i, t)$ , зависящая от обобщенных координат  $q_i$  и обобщенных скоростей  $\dot{q}_i$ . В частности, в декартовых координатах  $q_i = (x, y, z)$ , в цилиндрических  $q_i = (\rho, \varphi, z)$ , в сферических  $q_i = (r, \theta, \varphi)$ . Далее  $q$  (без индекса) для краткости будет обозначать совокупность обобщенных координат, описывающих частицу. Для нерелятивистской частицы в потенциальном поле  $U(q)$  функция Лагранжа (называемая для краткости лагранжианом) имеет вид

$$L = K - U, \quad (3.2)$$

где кинетическая энергия

$$K = \frac{1}{2} m \frac{dl^2}{dt^2}$$

выражается через квадрат элемента длины  $dl^2$ :

$$dl^2 = \begin{cases} dx^2 + dy^2 + dz^2 & (\text{декартовы координаты}), \\ d\rho^2 + \rho^2 d\varphi^2 + dz^2 & (\text{цилиндрические координаты}), \\ dr^2 + r^2(d\theta^2 + \sin^2 \theta d\varphi^2) & (\text{сферические координаты}). \end{cases}$$

По функции Лагранжа строится величина, называемая *действием*  $S$ :

$$S = \int_{t_i}^{t_f} L dt. \quad (3.3)$$

Уравнения движения получаются из принципа экстремума действия

$$\delta S = \delta \int_{t_i}^{t_f} L dt = 0$$

в предположении, что вариации обобщенных координат в начальный  $t_i$  и конечный  $t_f$  моменты времени равны нулю:  $\delta q_i(t_i) = 0$ ,  $\delta q_i(t_f) = 0$ . Находим вариацию<sup>1</sup> действия и приравниваем ее нулю:

$$\begin{aligned} \delta S &= \int_{t_i}^{t_f} [L(q_i + \delta q_i, \dot{q}_i + \delta \dot{q}_i, t) - L(q_i, \dot{q}_i, t)] dt = \\ &= \int_{t_i}^{t_f} \sum_i \left( \frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \delta q_i dt + \sum_i \delta q_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \Big|_{t_i}^{t_f}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Учитывая, что вариации  $\delta q_i$  произвольны, а  $\delta q_i(t_{i,f}) = 0$ , получим из условия  $\delta S = 0$  уравнения движения, называемые уравнениями Лагранжа:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0. \quad (3.5)$$

Величины

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$$

называются *обобщенными импульсами*. Непосредственная проверка показывает, что в декартовых координатах лагранжиан вида

$$L = \frac{m\dot{\mathbf{r}}^2}{2} - U(\mathbf{r}) \quad (3.6)$$

приводит к уравнениям Лагранжа, совпадающим с уравнениями Ньютона (3.1). Следовательно, обе формулировки механики эквивалентны.

---

<sup>1</sup>Если имеется функционал  $I[f] = \int F[f]dx$ , где  $f \equiv f(x)$ , то его вариация при бесконечно малом изменении вида функции  $\delta f$  определяется как  $\delta I = I[f + \delta f] - I[f] = \int F[f + \delta f]dx - \int F[f]dx \equiv \int \frac{\delta F}{\delta f} \delta f dx$ . Величина  $\frac{\delta F}{\delta f}$  под знаком интеграла называется *вариационной производной*.

Для энергии в лагранжевом подходе вычислим  $dL/dt$  с учетом (3.5) и определения обобщенных импульсов:

$$\frac{dL}{dt} = \frac{\partial L}{\partial t} + \sum_i \left( \frac{\partial L}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \frac{d\dot{q}_i}{dt} \right) = \frac{\partial L}{\partial t} + \frac{d}{dt} \sum_i p_i \dot{q}_i.$$

Отсюда получаем соотношение

$$\frac{dE}{dt} = -\frac{\partial L}{\partial t},$$

где

$$E = \sum_i p_i \dot{q}_i - L \quad (3.7)$$

есть энергия системы. Если лагранжиан явно не зависит от времени,  $\frac{\partial L}{\partial t} = 0$ , то энергия сохраняется.

Энергия, выраженная через обобщенные координаты и обобщенные импульсы, называется *гамильтонианом*  $H \equiv H(p_i, q_i)$ . Гамильтониан лежит в основе еще одной формулировки механики, называемой гамильтоновой формулировкой. Для того чтобы получить уравнения движения в рамках гамильтоновой формулировки, найдем дифференциал  $dH(p_i, q_i)$ :

$$\begin{aligned} dH(p_i, q_i) &= d\left(\sum_i p_i \dot{q}_i - L\right) = \sum_i \left( dp_i \dot{q}_i + p_i d\dot{q}_i - \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i \right) = \\ &= \sum_i (dp_i \dot{q}_i - \dot{p}_i dq_i). \end{aligned}$$

Здесь снова были использованы уравнения Лагранжа и определение обобщенных импульсов. Из предыдущего соотношения следуют *уравнения движения Гамильтона*:

$$\begin{aligned} \dot{q}_i &= \frac{\partial H}{\partial p_i}, \\ \dot{p}_i &= -\frac{\partial H}{\partial q_i}. \end{aligned} \quad (3.8)$$

В декартовых координатах из функции Лагранжа (3.6) найденный по указанным правилам гамильтониан имеет вид:

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(\mathbf{r}). \quad (3.9)$$

Первое из уравнений Гамильтона дает выражение для скорости  $\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{p}/m$ , тогда как второе уравнение в (3.8) совпадает с уравнением Ньютона (3.1). Лагранжиан нерелятивистской заряженной частицы во внешнем электромагнитном поле, которое задано электростатическим потенциалом  $\varphi$  и векторным потенциалом  $\mathbf{A}$ , записывается в виде

$$L = \frac{m\mathbf{v}^2}{2} - e\varphi + \frac{e}{c}\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}. \quad (3.10)$$

Соответствующий обобщенный импульс равен

$$\mathbf{p} = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} = m\mathbf{v} + \frac{e}{c}\mathbf{A},$$

а гамильтониан имеет вид

$$H = \frac{1}{2m} \left( \mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right)^2 + e\varphi. \quad (3.11)$$

Это выражение понадобится в квантовом рассмотрении частицы во внешнем электромагнитном поле.

## 3.2 Операторы координаты и импульса

*Постулат 3.* Каждой физической величине (координате, импульсу, моменту количества движения и т.д.) сопоставляется оператор. Оператором  $\hat{A}$  называется правило, по которому какой-либо функции из определенного класса ставится в соответствие другая функция из этого же класса:  $\psi' = \hat{A}\psi$ . В случае квантовой механики это комплексные функции с конечным нормировочным интегралом (1.7).

Волновые функции состояний инфинитного движения, строго говоря, указанному классу не принадлежат. В этом случае можно действовать тремя способами. (1) Их можно рассматривать как предельные значения волновых функций пакетов с большой неопределенностью координаты. (2) Можно поместить всю квантовую систему в конечный объем, следя при этом, чтобы такая процедура не привела к изменению физических свойств системы. (3) С помощью обобщенных функций типа  $\delta$ -функции Дирака использовать другое условие нормировки. Далее этот вопрос будет разобран более подробно.

Прежде чем обсуждать общие свойства операторов квантовой механики рассмотрим конкретный пример операторов координаты и импульса как одних из самых важных. Введем эти понятия вначале в случае одного пространственного измерения. Выражение для среднего значения координаты в состоянии с волновой функцией  $\psi(x)$  при  $t = 0$  (1.8) перепишем как

$$\langle x \rangle = \int dx \psi^*(x) x \psi(x) \equiv \int dx \psi^*(x) \hat{x} \psi(x), \quad (3.12)$$

определив тем самым оператор координаты  $\hat{x}$  в *координатном представлении* как умножение координатной волновой функции на ее аргумент:

$$\hat{x} \psi(x) \equiv x \psi(x).$$

Про выражение (3.12) говорят, что оно дает среднее значение оператора  $\hat{x}$  в состоянии с волновой функцией  $\psi(x)$ .

Оператор импульса  $\hat{p}_x$  в *импульсном представлении* определим аналогично оператору координаты с помощью вероятностной интерпретации волновой функции в импульсном пространстве  $\phi(p_x)$ :

$$\langle p_x \rangle = \int dp_x \phi^*(p_x) p_x \phi(p_x) \equiv \int dp_x \phi^*(p_x) \hat{p}_x \phi(p_x), \quad (3.13)$$

$\hat{p}_x \phi(p_x) \equiv p_x \phi(p_x)$ . Выражение для оператора импульса в координатном представлении можно найти с помощью определения (3.13) и соотношений (1.14) и (1.15):

$$\begin{aligned} \langle p_x \rangle &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dx dx' dp_x \psi^*(x) p_x e^{ip_x(x-x')/\hbar} \psi(x') = \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dx dx' dp_x \psi^*(x) \left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} e^{ip_x(x-x')/\hbar} \right] \psi(x') = \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dx dx' dp_x e^{ip_x(x-x')/\hbar} \psi^*(x) \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \right) \times \\ &\quad \psi(x') = \int dx \psi^*(x) \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x) \equiv \\ &\equiv \int dx \psi^*(x) \hat{p}_x \psi(x). \end{aligned} \quad (3.14)$$

Интегрирование по частям в третьей строке (3.14) допустимо для нормируемых функций. Сравнение с определением (3.19) показывает, что  $\hat{p}_x = -i\hbar\partial/\partial x$ . Обобщение на трехмерный случай:

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla. \quad (3.15)$$

Взяв для определенности координатное представление, можно проверить, что последовательное применение операторов координаты и импульса к волновой функции зависит от их порядка:

$$(\hat{p}_x\hat{x} - \hat{x}\hat{p}_x)\psi(x) = -i\hbar\psi(x).$$

Поскольку  $\psi(x)$  может быть любой, отсюда следует операторное соотношение:

$$[\hat{p}_x, \hat{x}] \equiv \hat{p}_x\hat{x} - \hat{x}\hat{p}_x = -i\hbar \neq 0. \quad (3.16)$$

Оператор  $[\hat{p}_x, \hat{x}]$  называется *коммутатором* операторов координаты и импульса, а само соотношение (3.16) носит название *канонического коммутационного соотношения*.

Выведем точное соотношение неопределенностей координата – импульс. Предположим для простоты, что квантовое состояние таково, что  $\langle x \rangle = 0$ ,  $\langle p_x \rangle = 0$ . Тогда  $\langle \Delta x^2 \rangle = \langle x^2 \rangle$ ,  $\langle \Delta p_x^2 \rangle = \langle p_x^2 \rangle$ . Исходим из очевидного неравенства

$$I(\beta) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \left| \hbar \frac{d\psi}{dx} + \beta x \psi \right|^2 dx \geq 0,$$

предполагая  $\beta$  вещественным. Возводя по модулю в квадрат и проводя интегрирование по частям, получим:

$$\begin{aligned} I(\beta) &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \psi^* \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \psi + \beta^2 x^2 |\psi|^2 + \hbar\beta x \frac{d|\psi|^2}{dx} \right] dx = \\ &\langle p_x^2 \rangle + \beta^2 \langle x^2 \rangle - \hbar\beta \geq 0. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Условие неотрицательности квадратичной формы  $I(\beta)$  имеет вид

$$\langle p_x^2 \rangle \langle x^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}.$$

С учетом нашего выбора состояния получаем искомое соотношение

$$\langle \Delta p_x^2 \rangle \langle \Delta x^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}. \quad (3.18)$$

Ниже будет показано, что соотношение неопределенностей (3.18) является следствием канонического коммутационного соотношения (3.16). Случай ненулевых средних значений координаты и импульса предлагается разобрать в виде задачи.

### 3.3 Операторы квантовой механики

Обозначим для краткости через  $q$ ,  $dq$  соответственно набор координат, дифференциал элемента конфигурационного пространства:  $x$  и  $dq = dx$  в одномерном случае,  $\mathbf{r} = (x, y, z)$ ,  $dq = d^3r = dx dy dz$  в трехмерном и т.д. Обобщив предыдущее рассмотрение, можно сделать общее утверждение: среднее значение оператора  $\hat{A}$  (а следовательно, и физической величины, которой этот оператор сопоставляется) в состоянии с волновой функцией  $\psi(q)$  вычисляется по правилу

$$\langle \hat{A} \rangle = \int dq \psi^*(q) \hat{A} \psi(q). \quad (3.19)$$

Однако среднее значение оператора не в полной мере характеризует физические свойства квантовой системы. В атоме возможны переходы между различными состояниями. Для их описания привлекается более общая конструкция, называемая *матричным элементом оператора*:

$$A_{21} = \int \psi_2^* \hat{A} \psi_1 dq.$$

Такая запись подразумевает, что оператор  $\hat{A}$  действует на волновую функцию справа от него.

Операторы квантовой механики должны подчиняться определенным ограничениям. Для того чтобы не нарушить принцип суперпозиции, оператор должен быть *линейным*:

$$\hat{A}(c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2) = c_1 \hat{A} \psi_1 + c_2 \hat{A} \psi_2.$$

Действие линейного оператора можно записать в виде

$$\psi'(q) \equiv (\hat{A} \psi)(q) = \int K_A(q, q') \psi(q') dq', \quad (3.20)$$



где функция  $K_A(q, q')$  называется *ядром оператора*  $\hat{A}$ . Например, поскольку  $\hat{x}\psi(x) = x\psi(x)$ , то отсюда ясно, что ядро оператора координаты в координатном представлении есть

$$K_x(x, x') = x\delta(x - x').$$

*Коммутатором* двух операторов  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  называется оператор

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}.$$

Оператор  $\hat{B}$  называется *сопряженным* оператору  $\hat{A}$  и обозначается как  $\hat{A}^\dagger$ , если справедливо равенство

$$\int \psi_2^* \hat{A} \psi_1 dq = \int (\hat{B} \psi_2)^* \psi_1 dq.$$

*Транспонированный оператор*  $\hat{A}^T$  определяется соотношением

$$\int \chi \hat{A} \psi dq = \int \psi \hat{A}^T \chi dq.$$

Из этих двух определений следует, что  $\hat{A}^\dagger = (\hat{A}^*)^T$ . Можно показать, что  $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger$ . Действительно, по определению сопряженного оператора имеет место цепочка равенств

$$\int \psi_2^* \hat{A} \hat{B} \psi_1 dq = \int (\hat{A}^\dagger \psi_2)^* \hat{B} \psi_1 dq = \int (\hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger \psi_2)^* \psi_1 dq,$$

из которой и следует сделанное утверждение.

Естественное требование состоит в том, чтобы средние значения операторов физических величин были действительны  $\langle A \rangle^* = \langle A \rangle$ . Поскольку

$$\langle A \rangle^* = \int \psi \hat{A}^* \psi^* dq = \int \psi^* (\hat{A}^*)^T \psi dq = \int \psi^* \hat{A}^\dagger \psi dq,$$

то из (3.19) получаем  $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ , т.е. оператор должен быть *самосопряженным* или *эрмитовым*<sup>2</sup>.

Если действие оператора на волновую функцию сводится к умножению на число,

$$\hat{A}\psi_a = a\psi_a,$$

---

<sup>2</sup>Строго говоря, самосопряженность и эрмитовость это не одно и то же. Но в данном курсе не будет примеров, когда эти понятия различаются.

то волновая функция  $\psi_a$  называется *собственной функцией* оператора  $\hat{A}$ , а число  $a$  – *собственным значением* этого оператора. Задача о нахождении собственных функций и собственных значений оператора называется для краткости задачей о собственных значениях. Совокупность собственных значений оператора называется *спектром*. Спектр может быть *непрерывным*, *дискретным*, а также сочетать оба этих свойства.

*Физический смысл собственных значений оператора* состоит в том, что они дают возможные результаты измерения физической величины, сопоставленной оператору, безотносительно к способу экспериментальной реализации. Собственные значения эрмитовых операторов действительны. Доказательство этого аналогично доказательству вещественности среднего значения эрмитового оператора. Может случиться так, что одному собственному значению соответствуют разные собственные функции. Тогда имеет место *вырождение*. Число линейно-независимых собственных функций, отвечающих одному и тому же собственному значению, называется *кратностью вырождения*. Если нет вырождения, то собственные функции эрмитового оператора, отвечающие разным собственным значениям, ортогональны. Действительно, обозначим для краткости  $\psi_1 \equiv \psi_{a_1}$  и т.д. Из соотношения  $\hat{A}\psi_1 = a_1\psi_1$  следует равенство

$$\int \psi_2^* \hat{A} \psi_1 dq = a_1 \int \psi_2^* \psi_1 dq.$$

Применим операцию комплексного сопряжения к соотношению  $\hat{A}\psi_2 = a_2\psi_2$ :  $\hat{A}^*\psi_2^* = a_2\psi_2^*$ . Отсюда получим, что  $\int (\hat{A}^*\psi_2^*)\psi_1 dq = \int \psi_2^* \hat{A} \psi_1 dq = a_2 \int \psi_2^* \psi_1 dq$ . Поэтому при  $a_1 \neq a_2$  должно выполняться соотношение  $\int \psi_2^* \psi_1 dq = 0$ . Следовательно, для нормированных волновых функций при отсутствии вырождения выполняется соотношение *ортонормированности*:

$$\int \psi_m^* \psi_n dq = \delta_{mn}. \quad (3.21)$$

В случае вырождения волновые функции могут быть сделаны ортонормированными с помощью процедуры ортогонализации Грама-Шмидта.

Собственная функция оператора импульса, отвечающая собственному значению  $\mathbf{p}_0$ , в координатном представлении дается решением уравнения

$$-i\hbar \nabla \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \mathbf{p}_0 \psi_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{r}).$$

Решением этого уравнения является плоская волна:

$$\psi_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{r}) = A \exp(i\mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{r}/\hbar).$$

Такая волновая функция не нормируется с помощью соотношения (3.21). Вместо этого используется соотношение

$$\int \psi_{\mathbf{p}'}^*(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) d^3r = \delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{p}'). \quad (3.22)$$

При нормировке с помощью (3.22) необходимо учесть одно из определений  $\delta$ -функции Дирака

$$\delta(k_x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik_x x} dx.$$

Тогда нормированная таким способом собственная функция оператора импульса принимает вид

$$\psi_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{r}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}. \quad (3.23)$$

С помощью (1.15) в импульсном представлении вычисляется собственная функция оператора импульса, отвечающая собственному значению  $\mathbf{p}_0$ :  $\phi_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{p}) = \delta^{(3)}(\mathbf{p} - \mathbf{p}_0)$ .

Пусть решена задача о собственных значениях для эрмитового оператора  $\hat{A}$ , чей спектр для определенности считаем дискретным:

$$\hat{A}\psi_n(q) = a_n\psi_n(q),$$

где для краткости использовано обозначение соответствующей собственной функции  $\psi_n(q) \equiv \psi_{a_n}(q)$ , а  $q$  обозначает набор координат, задающих положение частицы в пространстве. Например,  $q = x$  в одномерном случае,  $q = \mathbf{r} = (x, y, z)$  в трехмерном и т.д. Собственные функции оператора  $\hat{A}$  образуют *базис* в том смысле, что любая волновая функция  $\psi$  может быть представлена в виде разложения по собственным функциям оператора  $\hat{A}$ :

$$\psi(q) = \sum_n c_n \psi_n(q). \quad (3.24)$$

Коэффициенты разложения  $c_n$  вычисляются с помощью условия (3.21):

$$c_n = \int \psi_n^*(q') \psi(q') dq'.$$

Подставив это выражение в исходное разложение волновой функции, получим, что

$$\psi(q) = \sum_n \psi_n(q) \int \psi_n^*(q') \psi(q') dq'.$$

Переставляя суммирование и интегрирование, приходим к выражению

$$\int \left( \sum_n \psi_n(q) \psi_n^*(q') \right) \psi(q') dq' = \psi(q),$$

откуда, ввиду произвольности  $\psi$ , находим очень важное условие *полноты базиса*:

$$\sum_n \psi_n(q) \psi_n^*(q') = \delta(q - q'). \quad (3.25)$$

Если спектр оператора непрерывный с собственными значениями  $\nu$ , то вместо суммы  $\sum_n$  в (3.25) надо взять интеграл  $\int d\nu \dots$ . В общем случае спектра, в котором есть дискретная и непрерывная части следует суммировать по дискретным собственным значениям и интегрировать по непрерывным.

### 3.4 Дираковские обозначения

Один из создателей квантовой механики П. А. М. Дирак придумал очень удобный формализм, аналогичный векторному формализму в геометрии. Например, радиус-вектор  $\mathbf{r} = (x, y, z) = x\mathbf{e}_x + y\mathbf{e}_y + z\mathbf{e}_z$  можно задать в виде проекций на единичные орты:  $x_i = (\mathbf{r} \cdot \mathbf{e}_i)$ ,  $(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j) = \delta_{ij}$ . Тогда можно написать  $\mathbf{r} = (x, y, z) = (\mathbf{r} \cdot \mathbf{e}_x)\mathbf{e}_x + (\mathbf{r} \cdot \mathbf{e}_y)\mathbf{e}_y + (\mathbf{r} \cdot \mathbf{e}_z)\mathbf{e}_z$ . Дирак ввел понятие *вектора состояния*  $|\psi\rangle$  и назвал его *кет*. Кет является элементом комплексного гильбертова пространства, определенным с точностью до умножения на ненулевое комплексное число. Существует и дуальное пространство *бра*-векторов  $\langle\chi|$ , определенное так, что скалярное произведение  $\langle\chi|\psi\rangle$  *бракет* (от английского bracket – скобка) есть комплексное число. При этом  $\langle\chi|\psi\rangle = \langle\psi|\chi\rangle^*$ . Отсюда видно, что  $\langle\psi|\psi\rangle$  есть вещественное число. Его называют *нормой* вектора состояния  $|\psi\rangle$ . По определению, норма вектора состояния неотрицательна:

$$\langle\psi|\psi\rangle \geq 0. \quad (3.26)$$

Важен порядок скобок в выражениях, содержащих бра и кет. Если  $\langle\chi|\psi\rangle$  определено как комплексное число, то  $|\psi\rangle\langle\chi|$  есть оператор. В самом деле, при умножении этого объекта слева на какой-либо вектор состояния  $|\phi\rangle$  получим  $|\psi\rangle\langle\chi|\phi\rangle$ , т.е. вектор состояния  $|\psi\rangle$ , умноженный на число  $\langle\chi|\phi\rangle$ . А это по определению эквивалентно действию оператора, преобразующего один вектор состояния в другой. Если имеет место соотношение

$$|\phi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$$

между кет-векторами, то операция эрмитового сопряжения приводит к соотношению между бра-векторами

$$\langle\phi| = \langle\psi|\hat{A}^\dagger.$$

Любой вектор состояния может быть разложен по базису из собственных векторов любого эрмитова оператора  $\hat{A}$ :  $\hat{A}|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle$ ,

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |a_n\rangle. \quad (3.27)$$

Обычно из контекста ясно, собственные вектора какого оператора имеются в виду. В этом случае применяется более короткое обозначение  $|n\rangle \equiv |a_n\rangle$ . Базисные векторы ортонормированы:

$$\langle m|n\rangle = \delta_{mn}.$$

Тогда коэффициенты разложения равны проекции вектора состояния на базисные векторы:  $c_n = \langle n|\psi\rangle$ . Отсюда можно получить соотношение полноты в обозначениях Дирака. Действительно, напомним разложение произвольного вектора состояния по базису какого-либо оператора:  $|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$  и подставим в это разложение найденные коэффициенты  $c_n = \langle n|\psi\rangle$ . Получим выражение

$$|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle.$$

Поскольку вектор состояния  $|\psi\rangle$  произволен, то можно записать, что

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = \hat{1}, \quad (3.28)$$

где через  $\hat{1}$  обозначен единичный оператор. Это выражение иногда называют «разложением единицы» и очень часто используют в квантово-механических расчетах. При выводе подразумевалось, что спектр дискретный. В общем случае к левой части следует добавить интеграл по непрерывному спектру

$$\sum_n |n\rangle\langle n| + \int |\nu\rangle\langle \nu| d\nu = \hat{1}.$$

Здесь через  $\nu$  обозначен набор чисел, характеризующих непрерывный спектр. Ими могут быть, в частности, декартовы компоненты импульса частицы.

Связь с координатным или импульсным представлением устанавливается на основе обобщения введенных понятий на случай непрерывного спектра. Вектор состояния, в котором определенное значение имеет координата  $q$ ,  $|q\rangle$ , нормирован так, что

$$\langle q'|q\rangle = \delta(q - q').$$

Тогда волновая функция в координатном представлении может быть записана в виде проекции вектора состояния  $|\psi\rangle$  на вектор состояния  $|q\rangle$ , в котором определенное значение имеет координата  $q$ :  $\psi(q) = \langle q|\psi\rangle$ ,  $\psi_n(q) = \langle q|a_n\rangle$ . Аналогично волновая функция в импульсном представлении есть  $\phi(p) = \langle p|\psi\rangle$ . Отсюда и из выражения для собственной функции оператора импульса в координатном представлении (3.23) следует, что

$$\langle \mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle = \frac{e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}. \quad (3.29)$$

Матричный элемент оператора в обозначениях Дирака имеет вид

$$\langle m|\hat{A}|n\rangle \equiv \int \psi_m^*(q) \hat{A} \psi_n(q) dq. \quad (3.30)$$

В этом выражении действие  $\hat{A}$  представляется в виде действия некоторого дифференциального оператора:  $\hat{A} = F_A\left(q, -i\hbar\frac{\partial}{\partial q}\right)$ . Наличие  $-i\hbar\partial/\partial q$  соответствует замене классического импульса его квантово-механическим оператором. Выражение (3.30) подразумевает некоторый определенный

вид ядра оператора  $K_A(q, q')$  в координатном представлении. Действительно, в общем случае по определению ядра можно записать

$$\hat{A}\psi_n(q) = \int K_A(q, q')\psi_n(q')dq',$$

тогда

$$\int \psi_m^*(q)\hat{A}\psi_n(q)dq = \int \psi_m^*(q)K_A(q, q')\psi_n(q')dqdq'.$$

Выражение (3.30) получается, если ядро оператора  $\hat{A}$  имеет вид

$$K_A(q, q') = \delta(q - q')F_A\left(q, -i\hbar\frac{\partial}{\partial q}\right).$$

Наличие дельта-функции Дирака указывает, что в координатном представлении операторы нерелятивистской квантовой механики являются локальными. В импульсном представлении это, вообще говоря, не так. См. задачу 4 к этой главе.

### 3.5 Представления операторов в различных базисах

Выберем базис из собственных векторов оператора  $\hat{A}$ :

$$\hat{A}|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle$$

и разложим произвольный вектор состояния по этому базису:

$$|\psi\rangle = \sum_n |a_n\rangle\langle a_n|\psi\rangle.$$

Результат действия другого оператора

$$\hat{B}|\psi\rangle = \sum_n \hat{B}|a_n\rangle\langle a_n|\psi\rangle$$

будет известен, если известен результат его действия на базисные векторы

$$\hat{B}|a_n\rangle = \sum_m |a_m\rangle\langle a_m|\hat{B}|a_n\rangle.$$

Комплексные числа  $B_{mn} = \langle a_m | \hat{B} | a_n \rangle$  есть матричные элементы оператора  $\hat{B}$  в  $A$ -представлении. Получаем, что

$$\hat{B}|\psi\rangle = \sum_{nm} |a_m\rangle \langle a_m | \hat{B} | a_n \rangle \langle a_n | \psi \rangle.$$

Ввиду того что вектор состояния  $|\psi\rangle$  произволен, предыдущее выражение можно записать в виде операторного равенства

$$\hat{B} = \sum_{nm} |a_m\rangle \langle a_m | \hat{B} | a_n \rangle \langle a_n|. \quad (3.31)$$

Заметим, что матрица оператора в «своем» представлении диагональна:  $\langle b_n | \hat{B} | b_m \rangle = b_n \delta_{mn}$ .

С помощью дираковских обозначений можно легко получить формулу для преобразования матричных элементов оператора из одного представления в другое. Обозначим через  $B_{n_2 n_1}^{(A)} = \langle a_{n_2} | \hat{B} | a_{n_1} \rangle$ , где  $\hat{A} | a_n \rangle = a_n | a_n \rangle$ , матричные элементы оператора  $\hat{B}$  в  $A$ -представлении. Тогда  $B_{m_2 m_1}^{(C)} = \langle c_{m_2} | \hat{B} | c_{m_1} \rangle$ , где  $\hat{C} | c_m \rangle = c_m | c_m \rangle$ , есть матричные элементы этого же оператора в  $C$ -представлении. Применив соотношение полноты  $\sum_n |a_n\rangle \langle a_n| = 1$ , получим выражение

$$\begin{aligned} B_{m_2 m_1}^{(C)} &= \langle c_{m_2} | \hat{B} | c_{m_1} \rangle = \sum_{n_1, n_2} \langle c_{m_2} | a_{n_2} \rangle \langle a_{n_2} | \hat{B} | a_{n_1} \rangle \langle a_{n_1} | c_{m_1} \rangle = \\ &= \sum_{n_1, n_2} \langle c_{m_2} | a_{n_2} \rangle \langle a_{n_2} | \hat{B} | a_{n_1} \rangle \langle c_{m_1} | a_{n_1} \rangle^*. \end{aligned} \quad (3.32)$$

Если ввести матричные элементы матрицы перехода из  $A$ -представления в  $C$ -представления как<sup>3</sup>

$$(S^{C \leftarrow A})_{m_2 n_2} = \langle c_{m_2} | a_{n_2} \rangle,$$

то (3.32) можно переписать в виде выражения

$$B_{m_2 m_1}^{(C)} = \sum_{n_1, n_2} (S_{C \leftarrow A})_{m_2 n_2} B_{n_2 n_1}^{(A)} (S_{C \leftarrow A}^\dagger)_{n_1 m_1}, \quad (3.33)$$

---

<sup>3</sup>Базисные бра-векторы в  $C$ -представлении выражается через векторы в  $A$ -представлении как  $\langle c_m | = \sum_n \langle c_m | a_n \rangle \langle a_n |$ . Если умножить это соотношение на  $|\psi\rangle$ , получится выражение  $\psi_m^{(C)} = \sum_n S_{mn}^{C \leftarrow A} \psi_n^{(A)}$ , задающее формулу преобразования волновой функции  $\psi^{(A)} = \langle a_n | \psi \rangle$  в  $A$ -представлении в волновую функцию  $\psi^{(C)} = \langle c_m | \psi \rangle$  в  $C$ -представлении. Обратное расположение стрелки и последовательность матричных индексов приняты в согласии квантовомеханическим правилом записи обозначений справа налево в правой части равенства.



которое и задает искомую формулу преобразования из одного представления в другое. С помощью (3.33) и выражения для матрицы перехода между координатным и импульсным представлениями (3.29) можно найти вид операторов координаты и импульса в «чужом» представлении, см. задачу 1 к этой главе.

## 3.6 Условия совместной измеримости

Как уже указывалось, собственные значения оператора, отвечающего какой-либо физической величине, дают возможные результаты измерения этой величины:  $\hat{A}|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle$ . По аналогии с дисперсией координаты или импульса можно ввести общее определение дисперсии произвольной физической величины в состоянии  $|\psi\rangle$ . Если физической величине сопоставлен оператор  $\hat{A}$ , то дисперсия определена так:

$$\Delta A^2 = \langle\psi|\hat{A}^2|\psi\rangle - \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle^2. \quad (3.34)$$

Из этого выражения следует, что если  $|\psi\rangle = |a_n\rangle$ , т.е. состояние является собственным состоянием оператора физической величины, то дисперсия этой величины равна нулю. Говорят, что физическая величина имеет определенное значение в этом состоянии. Если состояние  $|\psi\rangle$  не является собственным состоянием оператора  $\hat{A}$ , то его можно разложить по базису из собственных векторов  $|a_n\rangle$  (3.27). Тогда среднее значение оператора вычисляется как

$$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \sum_{n,n'} c_{n'}^* c_n \langle a_{n'}|\hat{A}|a_n\rangle = \sum_n |c_n|^2 a_n. \quad (3.35)$$

Это выражение показывает, что среднее физической величины, которой сопоставлен оператор  $\hat{A}$ , в состоянии  $|\psi\rangle$ , равно сумме ее возможных значений  $a_n$ , взвешенных с коэффициентами  $|c_n|^2$ . Поэтому величину

$$w_n = |c_n|^2 \quad (3.36)$$

можно интерпретировать как вероятность того, что при измерении физической величины  $\hat{A}$  в состоянии  $|\psi\rangle$  получим значение  $a_n$ .

Пусть две физические величины, представляемые операторами  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$ , имеют определенные значения  $a_n$  и  $b_n$  в состоянии  $|\psi\rangle$ . Тогда  $|\psi\rangle = |\psi_n\rangle$ , где  $\hat{A}|\psi_n\rangle = a_n|\psi_n\rangle$ ,  $\hat{B}|\psi_n\rangle = b_n|\psi_n\rangle$ . Из этих соотношений вытекает, что

$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})|\psi_n\rangle = (a_nb_n - b_na_n)|\psi_n\rangle = 0$ . В силу полноты системы собственных векторов состояния эрмитового оператора отсюда следует, что  $(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})|\psi\rangle = 0$  для произвольного вектора состояния  $|\psi\rangle$ . Следовательно, если две физические величины имеют определенные значения, их операторы коммутируют:  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ .

Обратно, допустим, что  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$  и пусть  $\hat{A}|\psi_n\rangle = a_n|\psi_n\rangle$ , т.е. величина  $\hat{A}$  имеет определенное значение (измерима) в состоянии  $|\psi_n\rangle$ . Тогда  $\hat{A}\hat{B}|\psi_n\rangle = \hat{B}\hat{A}|\psi_n\rangle = a_n\hat{B}|\psi_n\rangle$ , откуда следует, что вектор состояния  $\hat{B}|\psi_n\rangle$  является собственным вектором оператора  $\hat{A}$ , т.е. он пропорционален  $|\psi_n\rangle$ . Поэтому можно записать, что  $\hat{B}|\psi_n\rangle = b_n|\psi_n\rangle$ . Следовательно, если операторы коммутируют, то соответствующие физические величины имеют определенные значения в состоянии  $|\psi_n\rangle$ . В силу полноты системы собственных векторов состояния эрмитового оператора вывод справедлив для произвольного вектора состояния. Итак, две физические величины имеют определенные значения в состоянии  $|\psi\rangle$ , т.е. одновременно измеримы, тогда и только тогда, когда их операторы коммутируют. В приведенных рассуждениях предполагалось, что вырождения нет. Можно показать, что и при наличии вырождения критерий измеримости двух величин не меняется.

Выше уже было получено соотношение неопределенностей для пары некоммутирующих операторов координаты и импульса. Выведем это соотношение для произвольной пары некоммутирующих эрмитовых операторов  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$ . Допустим, что средние значения этих операторов равны нулю,  $\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = 0$ ,  $\langle\psi|\hat{B}|\psi\rangle = 0$ , тогда неопределенности (дисперсии) соответствующих величин записываются в виде  $\Delta A^2 = \langle\psi|\hat{A}^2|\psi\rangle$ ,  $\Delta B^2 = \langle\psi|\hat{B}^2|\psi\rangle$ . Коммутатор имеет вид

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}, \quad (3.37)$$

где мнимая единица обеспечивает эрмитовость оператора  $\hat{C}$ . Введем новый вектор состояния

$$|\phi\rangle = (\hat{A} + i\beta\hat{B})|\psi\rangle,$$

где  $\beta$  есть произвольное вещественное число. Поскольку норма вектора состояния неотрицательна, имеет место неравенство

$$\begin{aligned} \langle\phi|\phi\rangle &= \langle\psi|(\hat{A} - i\beta\hat{B})(\hat{A} + i\beta\hat{B})|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}^2 + \beta^2\hat{B}^2 - \beta\hat{C}|\psi\rangle = \\ &= \Delta A^2 + \beta^2\Delta B^2 - \beta\langle C\rangle \geq 0, \end{aligned}$$

где  $\langle C \rangle = \langle \psi | \hat{C} | \psi \rangle$  есть среднее значение оператора  $\hat{C}$  в состоянии  $|\psi\rangle$ . Для того чтобы это неравенство было справедливо при любом  $\beta$ , дискриминант квадратичной по  $\beta$  формы должен быть меньше или равен нулю:

$$\langle C \rangle^2 - 4\Delta A^2 \Delta B^2 \leq 0.$$

Это неравенство имеет вид соотношения неопределенностей

$$\Delta A^2 \Delta B^2 \geq \frac{1}{4} |\langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle|^2 = \frac{1}{4} \langle C \rangle^2 \quad (3.38)$$

для произвольной пары эрмитовых операторов с коммутатором (3.37). Если средние значения операторов  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  не равны нулю, то приведенный выше вывод следует повторить для операторов  $\hat{A}' = \hat{A} - \langle A \rangle$  и  $\hat{B}' = \hat{B} - \langle B \rangle$ , чьи средние значения равны нулю, а коммутатор равен  $i\hat{C}$ .

## 3.7 Измерения в квантовой механике

Процесс измерения в аппарате квантовой механики был подробно рассмотрен Дж. фон Нейманом на рубеже 20-х и 30-х годов XX-го века [7]. Измерение представляется действием некоторого оператора на вектор состояния, в котором находилась квантовая система [5, 7]. Обозначим этот вектор состояния через  $|\phi\rangle$ . Действие любого оператора  $\hat{A}$  можно представить в виде линейного выражения

$$\hat{A} = \sum_{i,j} C_{ji} |\psi_j\rangle \langle \psi_i|.$$

Векторы состояния  $|\psi_i\rangle$  образуют ортонормированный базис:  $\langle \psi_j | \psi_i \rangle = \delta_{ij}$ . Тогда коэффициенты разложения  $C_{ji}$  вычисляются по формуле  $C_{ji} = \langle \psi_j | \hat{A} | \psi_i \rangle$ . С учетом этого выражения действие оператора запишется в виде

$$\hat{A}|\phi\rangle = \sum_{i,j} C_{ji} |\psi_j\rangle \langle \psi_i | \phi \rangle.$$

Если  $|\psi_i\rangle$  являются собственными векторами оператора  $\hat{A}$  с собственными значениями  $a_i$ , т.е.  $\hat{A}|\psi_i\rangle = a_i|\psi_i\rangle$ , то  $C_{ji} = a_i\delta_{ji}$  (нет суммирования по  $i$ ), поэтому оператор  $\hat{A}$  можно представить в виде

$$\hat{A} = \sum_i a_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|.$$

Среднее значение оператора  $\hat{A}$  в состоянии  $|\phi\rangle$  есть

$$\langle\phi|\hat{A}|\phi\rangle = \sum_i a_i |\langle\psi_i|\phi\rangle|^2, \quad (3.39)$$

поэтому  $|\langle\psi_i|\phi\rangle|^2$  равно вероятности того, что при измерении физической величины, представленной оператором  $\hat{A}$ , в квантовом состоянии с вектором  $|\phi\rangle$  будет получено значение  $a_i$ . Частный случай этого утверждения уже обсуждался выше. См. (3.35). Если измерение показало, что значение физической величины равно  $a_i$ , то квантовая система оказалась после измерения в состоянии  $|\psi_i\rangle$ . Поэтому говорят, что измерение, в результате которого получается значение физической величины  $a_i$ , проектирует вектор состояния  $|\phi\rangle = \sum_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|\phi\rangle$  на один из базисных векторов  $|\psi_i\rangle$ . Оператор проектирования записывается как

$$\hat{P}_i = |\psi_i\rangle\langle\psi_i|.$$

Действительно,

$$\hat{P}_i^2 = |\psi_i\rangle\langle\psi_i|\psi_i\rangle\langle\psi_i| = |\psi_i\rangle\langle\psi_i| = \hat{P}_i.$$

Поскольку  $\hat{P}_i|\phi\rangle = |\psi_i\rangle\langle\psi_i|\phi\rangle$ , то условие нормировки вектора состояния, получившегося после измерения, требует записать результат проектирования как

$$\hat{P}_i|\phi\rangle = \frac{|\psi_i\rangle}{\sqrt{\langle\phi|\hat{P}_i|\phi\rangle}}.$$

Очерченный выше формальный подход был подробнейшим образом проанализирован при обсуждении многочисленных мысленных экспериментов Нильсом Бором и физиками, которые относили себя к его школе [4]. В результате была выяснена решающая роль классического прибора в интерпретации экспериментов с микрочастицами. Появившаяся в результате концепция измерения в квантовой механике получила название «копенгагенской интерпретации» [5]. Не все исследователи с ней согласны, однако с точки зрения практических приложений эта интерпретация непротиворечива.

## 3.8 Задачи

1. Найти в цилиндрических и сферических координатах обобщенные импульсы и гамильтониан для нерелятивистской частицы, находящейся в поле с потенциальной энергией  $U$ .
2. Лагранжиан свободной релятивистской частицы имеет вид  $L = -mc^2\sqrt{1 - \mathbf{v}^2/c^2}$ . Найти гамильтониан.
3. Получить выражение для гамильтониана заряженной частицы, находящейся во внешнем электромагнитном поле (3.11).
4. Показать, что уравнения Лагранжа и уравнения Гамильтона для нерелятивистской заряженной частицы во внешнем электромагнитном поле эквивалентны уравнениям Ньютона  $m\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{F}_L$  с силой Лоренца  $\mathbf{F}_L = e\mathbf{E} + \frac{e}{c}[\mathbf{v} \times \mathbf{B}]$  в правой части.
5. Пусть  $\mathbf{v}'$  есть скорость частицы в системе отсчета, вращающейся с угловой скоростью  $\boldsymbol{\omega}$ , так что скорость в лабораторной системе запишется как  $\mathbf{v} = \mathbf{v}' + [\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}]$ . Найти энергию частицы во вращающейся системе отсчета.
6. Найти выражение для оператора координаты в импульсном представлении.
7. Найти коммутатор  $[\hat{p}_x, f(\hat{x})]$ .
8. Найти сопряженные операторы для операторов  $d/dx$ ,  $id/dx$ ,  $x/x_0 + x_0d/dx$ .
9. Показать, что матричный элемент оператора импульса в координатном представлении имеет вид

$$\langle x|\hat{p}_x|x'\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\delta(x - x'). \quad (3.40)$$

10. Показать, что среднее значение квадрата эрмитового оператора неотрицательно.

11. Радиальная компонента импульса в сферических координатах определяется как  $p_r = (\mathbf{p}, \mathbf{n}_r)$ ,  $\mathbf{n}_r = \mathbf{r}/r$ . Найти оператор радиального импульса в квантовой механике и доказать его эрмитовость. *Указание.* Использовать рецепт симметризации классического выражения при замене классических величин операторами.
12. Пусть ядро оператора  $\hat{A}$  есть  $K_A(q, q')$ . Выразить через  $K_A(q, q')$  ядра транспонированного  $\hat{A}^T$ , комплексно-сопряженного  $\hat{A}^*$ , обратного  $\hat{A}^{-1}$  и эрмитово-сопряженного  $\hat{A}^\dagger$  операторов. Найти ядра операторов  $\hat{x}$ ,  $\hat{p}_x$  и  $\frac{1}{|\mathbf{r}|}$  в координатном и импульсном представлениях.
13. Показать, что справедливо равенство  $[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]$ .
14. Пусть одному собственному значению оператора  $\hat{A}$  отвечают две волновые функции  $\psi_1$  и  $\psi_2$ . Показать, что можно выбрать коэффициенты линейных комбинаций этих функций так, что новые функции окажутся ортонормированными.
15. Найти в координатном и импульсном представлениях собственную функцию оператора координаты  $\hat{\mathbf{r}}$ , отвечающую собственному значению  $\mathbf{r}_0$ .
16. Вывести соотношение неопределенностей координата-импульс для случая, когда  $\langle x \rangle \neq 0$ ,  $\langle p_x \rangle \neq 0$ .
17. Частица находится в одномерной потенциальной яме с непроницаемыми стенками в состоянии с волновой функцией

$$\psi(x) = A \sin^3 \frac{\pi x}{a}.$$

Какие значения энергии и с какими вероятностями будут получены при измерении? Вычислить среднюю энергию частицы и дисперсию энергии в указанном состоянии.

## Глава 4

# Зависимость операторов от времени

### 4.1 Зависимость от времени волновой функции

С точки зрения операторного подхода правую часть уравнения Шредингера (2.1) можно записать в виде действия оператора Гамильтона в координатном представлении  $\hat{H} = -\hbar^2 \nabla^2 / 2m + U$  на волновую функцию  $\Psi$ :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (4.1)$$

Обычно квантовый гамильтониан получается из классического с помощью замены классических импульсов и координат на соответствующие операторы. Возможная неоднозначность в упорядочении некоммутирующих операторов, как было указано ранее, устраняется процедурой симметризации. Собственные значения оператора Гамильтона являются возможными значениями энергии квантовой системы.

Допустим, что решена задача на поиск собственных функций и собственных значений гамильтониана:

$$\hat{H} \psi_n(\mathbf{r}) = E_n \psi_n(\mathbf{r}).$$

Тогда общее решение уравнения Шредингера в случае гамильтониана,

не зависящего от времени, имеет вид

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(\mathbf{r}). \quad (4.2)$$

Постоянные  $c_n$  определяются из начальных данных. Действительно, если выражение

$$\Psi(\mathbf{r}, t = 0) = \psi(\mathbf{r}) = \sum_n c_n \psi_n(\mathbf{r}) \quad (4.3)$$

умножить слева на  $\psi^*(\mathbf{r})$  и проинтегрировать по объему, то можно получить

$$c_n = \int d^3r \psi_n^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}).$$

Для вывода этого выражения необходимо использовать соотношение (3.21).

Выражение (4.2) можно представить в виде действия на  $\psi(\mathbf{r}) \equiv \Psi(\mathbf{r}, 0)$  некоторого оператора:

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}, t) &= \hat{U}(t) \Psi(\mathbf{r}, 0), \\ \hat{U}(t) &= \exp\left(-i \frac{\hat{H} t}{\hbar}\right). \end{aligned} \quad (4.4)$$

Действительно, если воспользоваться разложением операторной экспоненты в ряд, то получим

$$\begin{aligned} \exp\left(-i \frac{\hat{H} t}{\hbar}\right) \psi_n(\mathbf{r}) &= \sum_{l=0}^{\infty} \left(-i \frac{t}{\hbar}\right)^l \frac{\hat{H}^l}{l!} \psi_n(\mathbf{r}) = \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \left(-i \frac{t}{\hbar}\right)^l \frac{E_n^l}{l!} \psi_n(\mathbf{r}) = \\ &= e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (4.5)$$

Утверждение (4.4) вытекает из этого соотношения и выражений (4.2), (4.3). Оператор  $\hat{U}(t)$  называется *оператором эволюции*.



## 4.2 Сохраняющиеся величины

Среднее значение физической величины, представленной оператором  $\hat{A}$ , в произвольный момент времени  $t$  дается выражением

$$\langle A \rangle = \int \Psi^*(\mathbf{r}, t) \hat{A} \Psi(\mathbf{r}, t) d^3r. \quad (4.6)$$

Вычислим производную этой величины по времени, используя уравнение Шредингера в виде (4.1) и уравнение, полученное из (4.1) комплексным сопряжением:

$$\begin{aligned} \frac{d\langle A \rangle}{dt} &= \int \left( \frac{\partial \Psi^*(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \hat{A} \Psi(\mathbf{r}, t) + \Psi^*(\mathbf{r}, t) \hat{A} \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \right. \\ &\quad \left. + \Psi^*(\mathbf{r}, t) \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) \right) = \int \Psi^*(\mathbf{r}, t) \left( \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}] + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right) \Psi(\mathbf{r}, t) d^3r. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Слагаемое  $\partial \hat{A} / \partial t$  возникает за счет возможной явной зависимости оператора  $\hat{A}$  от времени. Если  $\partial \hat{A} / \partial t = 0$  и оператор коммутирует с гамильтонианом ( $[\hat{A}, \hat{H}] = 0$ ), то среднее значение физической величины не зависит от времени. В этом случае она сохраняется и называется *интегралом движения*. Собственные значения оператора  $\hat{A}$  также не зависят от времени и могут служить метками вектора состояния. У квантовой системы может быть несколько интегралов движения:  $\hat{B}$ ,  $\hat{C}$ , ... Если все интегралы движения попарно коммутируют друг с другом,  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ ,  $[\hat{A}, \hat{C}] = 0$ ,  $[\hat{C}, \hat{B}] = 0$ , ..., то в соответствии с соотношением неопределенностей (3.38) измерение одной из величин не повлияет на значение другой величины. Набор попарно коммутирующих операторов  $\hat{H}$ ,  $\hat{A}$ ,  $\hat{B}$ ,  $\hat{C}$ , ... называется *полным набором*. Собственные значения операторов из полного набора характеризуют квантовые состояния системы и называются *квантовыми числами*.

### 4.3 Представление Гейзенберга

Если учесть представление (4.4) волновой функции в произвольный момент времени через волновую функцию в некоторый фиксированный момент времени  $t = 0$ , то формулу (4.6) для вычисления среднего значения оператора можно переписать в эквивалентном виде

$$\langle A \rangle = \int \Psi^*(\mathbf{r}, 0) e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{A} e^{-i\hat{H}t/\hbar} \Psi(\mathbf{r}, 0) d^3r. \quad (4.8)$$

Эта запись позволяет ввести понятие оператора, зависящего от времени. До этого момента фигурировали операторы физических величин, которые строились по их классическим аналогам с помощью замены координат  $\mathbf{r}$  и импульсов  $\mathbf{p}$  их операторами  $\hat{\mathbf{r}}$ ,  $\hat{\mathbf{p}}$  и поэтому не содержали явной зависимости от времени. Динамика возникала в силу зависимости от времени волновой функции  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ . Такой подход носит название *представления Шредингера, или картины Шредингера*. Но выражение (4.8) показывает, что динамическую эволюцию можно перенести с волновой функции на оператор путем введения нового оператора

$$\hat{A}_H(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{A} e^{-i\hat{H}t/\hbar} \quad (4.9)$$

и вычислять среднее физической величины в произвольный момент времени с помощью волновой функции в момент времени  $t = 0$ :

$$\langle A \rangle = \int \Psi^*(\mathbf{r}, 0) \hat{A}_H(t) \Psi(\mathbf{r}, 0) d^3r. \quad (4.10)$$

Такой подход называется *представлением Гейзенберга или картиной Гейзенберга*. Операторы в представлении Гейзенберга снабжены индексом  $H$  и явно зависят от времени. Из выражения (4.9) видно, что, во-первых,  $\hat{A}_H(0) = \hat{A}$ , т.е. оператор в представлении Гейзенберга в начальный момент времени совпадает с оператором в представлении Шредингера. Во-вторых,  $\hat{H}_H(t) = \hat{H}$ , т.е. гамильтониан в представлении Гейзенберга в любой момент времени совпадает с выражением в представлении Шредингера. В-третьих, каноническое коммутационное соотношение при равных временах имеет такой же вид как в представлении Шредингера:  $[\hat{x}_H(t), \hat{p}_H(t)] = i\hbar$  (проверить это утверждение!). Далее не будем явно указывать на зависимость от времени у операторов в представлении Гейзенберга.

Можно получить уравнение движения для квантовомеханического оператора  $\hat{A}_H(t)$ . Для этого продифференцируем (4.9) по времени:

$$\begin{aligned}\frac{d\hat{A}_H}{dt} &= e^{i\hat{H}t/\hbar} \left[ \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H}) + \frac{\partial\hat{A}}{\partial t} \right] e^{-i\hat{H}t/\hbar} = \\ &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}_H] + \frac{\partial\hat{A}_H}{\partial t},\end{aligned}$$

где через  $\partial\hat{A}_H/\partial t$  обозначен оператор  $e^{i\hat{H}t/\hbar} \frac{\partial\hat{A}}{\partial t} e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ . Это слагаемое появляется только в случае операторов, явно зависящих от времени. Уравнение движения для оператора в виде

$$\frac{d\hat{A}_H}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}_H] + \frac{\partial\hat{A}_H}{\partial t} \quad (4.11)$$

называется *уравнением Гейзенберга*.

Если задано выражение для гамильтониана, то уравнение (4.11) позволяет найти вид оператора  $\hat{A}_H(t)$ , формально решая полученное явное операторное дифференциальное уравнение как обыкновенное уравнение для неизвестной функции. При этом в качестве начального условия берется  $\hat{A}_H(0) = \hat{A}$ , где  $\hat{A}$  есть оператор в представлении Шредингера. Рассмотрим в качестве примера свободную частицу в одном пространственном измерении. Гамильтониан имеет вид  $\hat{H} = \hat{p}_x^2/2m$ . Уравнения Гейзенберга для операторов координаты и импульса принимают соответственно вид

$$\frac{d\hat{x}_H}{dt} = \frac{i}{2m\hbar} [\hat{p}_H^2, \hat{x}_H] = -\frac{i}{2m\hbar} ([\hat{x}_H, \hat{p}_H]\hat{p}_H + \hat{p}_H[\hat{x}_H, \hat{p}_H]) = \frac{\hat{p}_H}{m} \quad (4.12)$$

и

$$\frac{d\hat{p}_H}{dt} = 0. \quad (4.13)$$

Формальным решением уравнения (4.13) с начальным условием  $\hat{p}_H(0) = \hat{p}_x$  является операторное равенство  $\hat{p}_H(t) = \hat{p}_x$ , показывающее, что оператор импульса в представлении Гейзенберга не зависит от времени. Тогда решение уравнения (4.12) с начальным условием  $\hat{x}_H(0) = \hat{x}$  запишется в виде

$$\hat{x}_H(t) = \hat{x} + \frac{\hat{p}_x}{m}t. \quad (4.14)$$

Из этого выражения следует, что коммутатор операторов координаты свободной частицы в разные моменты времени не равен нулю:

$$[\hat{x}_H(t_1), \hat{x}_H(t_2)] = \frac{i\hbar}{m}(t_2 - t_1). \quad (4.15)$$

Коммутатор же операторов импульса свободной частицы в представлении Гейзенберга в разные моменты времени равен нулю просто потому, что  $\hat{p}_H(t) = \hat{p}_x$  не зависит от времени.

## 4.4 Стандартный квантовый предел

Коммутатор операторов координаты в разные моменты времени (4.15) дает возможность получить важную характеристику квантовой точности измерения координаты и импульса, которая называется *стандартным квантовым пределом*. В соответствии с общим случаем соотношения неопределенностей для пары некоммутирующих операторов (3.38) из (4.15) следует, что

$$\Delta x_1^2 \Delta x_2^2 \geq \frac{\hbar^2}{4m^2}(t_2 - t_1)^2, \quad (4.16)$$

где  $\Delta x_{1,2}^2 \equiv \Delta x^2(t_{1,2})$ . Соотношение неопределенностей (4.16) означает, что при попытке более точно измерить координату в момент времени  $t_1$  точность измерения координаты в момент времени  $t_2 > t_1$  будет ухудшаться<sup>1</sup>.

Применим соотношение (4.16) к анализу точности измерения импульса методом времени пролета в случае одного пространственного измерения. Имеется свободная частица массы  $m$ , и требуется измерить ее импульс. Для этого нужно измерить координату  $x_1$  в момент времени  $t_1$  и

---

<sup>1</sup>Поскольку соотношение (4.16) формально справедливо и при  $t_2 < t_1$ , возникает естественный вопрос о том, какой из двух моментов времени более ранний. Вопрос этот законный, и связан он с очень важным понятием *квантовомеханической стрелы времени*, возникающей за счет необратимости процесса измерения в квантовой механике. Хотя уравнение Шредингера, как можно показать, не меняется по отношению к обращению времени, процесс измерения, сопровождаемый коллапсом волновой функции, этим свойством не обладает.

координату  $x_2$  в момент времени  $t_2 > t_1$ . Тогда величина импульса будет равна

$$p = m \frac{x_2 - x_1}{t_{21}},$$

где  $t_{21} = t_2 - t_1$ . Предполагается, что время можно измерить точно. Дисперсия импульса возникает из дисперсии координат  $x_1$  и  $x_2$ , связанных соотношением неопределенностей (4.16). Поэтому справедливо неравенство

$$\Delta p^2 = \frac{m^2}{t_{21}^2} (\Delta x_1^2 + \Delta x_2^2) \geq \frac{m^2}{t_{21}^2} \left( \Delta x_1^2 + \frac{\hbar^2 t_{21}^2}{4m^2 \Delta x_1^2} \right).$$

Для нахождения минимума правой части продифференцируем ее по  $\Delta x_1$  и приравняем результат нулю. Квадратный корень из полученного в результате минимального значения дисперсии измеренного импульса

$$\Delta p_{\text{SQL}} \equiv \sqrt{\Delta p_{\text{min}}^2} = \left( \frac{\hbar m}{t_{21}} \right)^{1/2} \quad (4.17)$$

называется *стандартным квантовым пределом* измерения импульса (от английского Standard Quantum Limit). С этой характеристикой связан стандартный квантовый предел измерения координаты свободной частицы

$$\Delta x_{\text{SQL}} \equiv \frac{\hbar}{2\Delta p_{\text{SQL}}} = \frac{1}{2} \left( \frac{\hbar t_{21}}{m} \right)^{1/2}. \quad (4.18)$$

Видно, что импульс свободной частицы можно измерить сколь угодно точно при  $t_{21} \rightarrow \infty$ . При этом, согласно соотношению неопределенностей, будет совершенно потеряна информация о координате частицы.

Разобранный пример дает представление о проблеме так называемых *квантово-невозмущающих измерений*, возникшей при проектировании и создании детекторов *гравитационных волн*. Такие волны, предсказанные А. Эйнштейном в 1916 г. в рамках его *общей теории относительности*, представляют собой очень слабые возмущения метрики пространства-времени, распространяющиеся со скоростью света. Косвенно их существование было обнаружено по уменьшению периода орбитального движения пульсара, входящего в двойную звездную систему. Прямое же детектирование все еще не проведено. В одном из вариантов лабораторных детекторов требовалось измерение смещений настолько малых, что они были сравнимы по величине с квантовым пределом

(4.18). Возникла необходимость в теоретическом анализе возможных измерений, в которых можно было бы обойти ограничения, накладываемые соотношением неопределенностей. Такие измерения и получили название квантово-невозмущающих измерений, от английского термина *quantum non-demolition measurements*. Как показывает ответ к одной из задач к этой главе, операторы координаты гармонического осциллятора в определенные моменты времени коммутируют между собой, поэтому измерение одной из них в более ранний момент времени не исказит результат измерения в более поздний момент времени, и стандартный квантовый предел измерений координаты может быть преодолен.

## 4.5 Задачи

1. Пусть при  $t = 0$  частица находится в одномерной потенциальной яме с непроницаемыми стенками в состоянии с волновой функцией

$$\Psi(x, 0) = A \sin^3 \frac{\pi x}{a}.$$

Найти  $\Psi(x, t)$  в произвольный момент времени  $t$ .

2. Вычислить для свободной частицы  $\hat{x}_H(t)$  явно из соотношения (4.9).
3. Для одномерного гармонического осциллятора с гамильтонианом  $\hat{H} = \hat{p}_x^2/2m + m\omega^2\hat{x}^2/2$  найти операторы координаты и импульса в представлении Гейзенберга двумя способами, явно из (4.9) и как формальные решения уравнений Гейзенберга. Вычислить в этом случае коммутаторы

$$[\hat{x}_H(t_1), \hat{x}_H(t_2)], [\hat{p}_H(t_1), \hat{p}_H(t_2)], [\hat{x}_H(t_1), \hat{p}_H(t_2)].$$

4. Получить соотношение неопределенностей для операторов координаты в разные моменты времени в случае одномерного гармонического осциллятора. То же для импульсов в разные моменты времени.

## Глава 5

# Гармонический осциллятор

Здесь гармонический осциллятор будет рассмотрен с помощью операторного метода, основанного на введении *операторов рождения и уничтожения*. Этот метод составляет основу математического аппарата при квантовании полей в физике элементарных частиц и физике конденсированного состояния. Знакомство с операторами рождения и уничтожения необходимо, поскольку в данном курсе будет обсуждаться квантование свободного электромагнитного поля и колебаний атомов в кристаллической решетке.

### 5.1 Уровни энергии осциллятора

Гамильтониан одномерного классического осциллятора можно переписать в форме, которая переносится на квантовый случай:

$$\begin{aligned} H &= \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} = \hbar\omega \left( x\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} + \frac{ip}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \right) \times \\ &\times \left( x\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} - \frac{ip}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \right). \end{aligned} \quad (5.1)$$

На основе этого выражения в квантовом случае введем два оператора:

$$\begin{aligned}\hat{a} &= \hat{x}\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} + \frac{i\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}, \\ \hat{a}^\dagger &= \hat{x}\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} - \frac{i\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}.\end{aligned}\tag{5.2}$$

Вследствие канонических коммутационных соотношений  $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$  операторы  $\hat{a}$  и  $\hat{a}^\dagger$  удовлетворяют коммутационным соотношениям

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1.\tag{5.3}$$

Соотношения, обратные (5.2), имеют вид

$$\begin{aligned}\hat{x} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \\ \hat{p} &= -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger).\end{aligned}\tag{5.4}$$

Подстановка операторов (5.4) в квантовый гамильтониан осциллятора

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2}\tag{5.5}$$

с учетом коммутатора (5.3) приводит к выражению

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right).\tag{5.6}$$

Из этого выражению видно, что нахождение уровней энергии осциллятора сводится к нахождению собственных значений оператора

$$\hat{n} = \hat{a}^\dagger\hat{a}.\tag{5.7}$$

Поскольку гамильтониан осциллятора (5.5) равен сумме квадратов эрмитовых операторов, его собственные значения неотрицательны. Следовательно, неотрицательны и собственные значения оператора  $\hat{n}$ . Временно обозначим собственные значения оператора  $\hat{n}$  через  $\nu$ , а соответствующие им собственные векторы через  $|\nu\rangle$ :

$$\hat{n}|\nu\rangle = \nu|\nu\rangle.$$



Эти векторы ортонормированы:  $\langle \nu' | \nu \rangle = \delta_{\nu\nu'}$ .

Выясним, какому собственному значению отвечает вектор состояния  $\hat{a}|\nu\rangle$ . Для этого подействуем на него оператором  $\hat{n}$ . С учетом коммутатора (5.3) получим:

$$\hat{n}\hat{a}|\nu\rangle = \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}|\nu\rangle = (\hat{a}\hat{a}^\dagger - 1)\hat{a}|\nu\rangle = \hat{a}\hat{n}|\nu\rangle - \hat{a}|\nu\rangle = (\nu - 1)\hat{a}|\nu\rangle,$$

откуда немедленно следует, что вектор состояния  $\hat{a}|\nu\rangle$  отвечает собственному значению  $\nu - 1$ . Поэтому можно написать, что  $\hat{a}|\nu\rangle = C_\nu|\nu - 1\rangle$ . Видно, что действие оператора  $\hat{a}$  уменьшает собственное значение  $\nu$  на единицу, поэтому этот оператор называется *оператором уничтожения*. Собственные значения энергии осциллятора выражаются через  $\nu$  как  $E = \hbar\omega(\nu + \frac{1}{2})$ . Отсюда ясно, что если подействовать оператором уничтожения на вектор состояния  $|\nu\rangle$  достаточно много раз, можно уменьшить энергию осциллятора и в конце концов достигнуть отрицательных значений в противоречии с тем, что энергия осциллятора должна быть положительной. Для того чтобы оборвать процесс неограниченного уменьшения энергии, необходимо потребовать выполнения двух условий. Во-первых, собственные значения оператора  $\hat{n} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$  должны быть целыми,  $\nu = n$ . Отсюда сразу следует, что собственные значения энергии осциллятора равны

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right). \quad (5.8)$$

Во-вторых, должно существовать состояние с наименьшей энергией  $|0\rangle$  (вакуумное состояние, эквивалентно, основное состояние), которое удовлетворяет свойству

$$\hat{a}|0\rangle = 0. \quad (5.9)$$

Энергия этого состояния  $E_0 = \hbar\omega/2$  не равна нулю в силу соотношения неопределенностей. Состояния осциллятора с  $n \geq 1$  называются *возбужденными состояниями*.

Для нахождения нормировочного множителя надо применить операцию эрмитового сопряжения к соотношению  $\hat{a}|n\rangle = C_n|n - 1\rangle$ . Получим  $\langle n|\hat{a}^\dagger = C_n^*\langle n - 1|$ . Умножая этот бра-вектор на предыдущий кет-вектор и учитывая, что векторы состояния нормированы на единицу, получим

$$\langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = \langle n|\hat{n}|n\rangle = n = |C_n|^2.$$

Отсюда находим модуль нормировочного множителя  $|C_n|$ . Фазу обычно выбирают равной нулю, поэтому  $C_n = \sqrt{n}$ :

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle. \quad (5.10)$$

Аналогично, покажем, что  $\hat{a}^\dagger|n\rangle = B_n|n+1\rangle$ . Учитывая (5.3), находим

$$\hat{n}\hat{a}^\dagger|n\rangle = \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger|n\rangle = \hat{a}^\dagger(\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1)|n\rangle = (n+1)\hat{a}^\dagger|n\rangle.$$

Поскольку действие оператора  $\hat{a}^\dagger$  приводит к увеличению квантового числа  $n$  на единицу, этот оператор называется *оператором рождения*. Нормировочный множитель  $B_n$  находим, умножая на кет-вектор  $\hat{a}^\dagger|n\rangle = B_n|n+1\rangle$  полученный из него эрмитовым сопряжением бра-вектор  $\langle n|\hat{a} = B_n^*\langle n+1|$ :

$$\langle n|\hat{a}\hat{a}^\dagger|n\rangle = \langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1|n\rangle = (n+1) = |B_n|^2.$$

Выбрав фазу числа  $B_n$  равной нулю, окончательно находим, что

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle. \quad (5.11)$$

## 5.2 Волновые функции осциллятора

Из чисто алгебраических выражений (5.9) и (5.11) можно найти явный вид волновых функций состояний осциллятора с определенной энергией. Если выражение (5.11) переписать в виде

$$|n+1\rangle = \frac{\hat{a}^\dagger}{\sqrt{n+1}}|n\rangle,$$

то сразу можно получить вектор произвольного состояния  $|n\rangle$  из вектора основного состояния  $|0\rangle$ :

$$|n\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle. \quad (5.12)$$

Найдем волновые функции в координатном представлении. Они получаются из векторов состояния:

$$\psi_n(x) = \langle x|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\langle x|(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle. \quad (5.13)$$

Найдем вначале волновую функцию основного состояния  $\psi_0(x) = \langle x|0\rangle$  из условия (5.9). Для этого нужно взять оператор уничтожения в координатном представлении

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\frac{d}{dx}$$

и использовать соотношение полноты для векторов состояния с определенной координатой  $|x\rangle$ :

$$\int_{-\infty}^{\infty} |x\rangle\langle x|dx = 1.$$

Условие (5.9) в координатном представлении можно представить в виде следующей последовательности равенств, приводящих к дифференциальному уравнению первого порядка для  $\psi_0(x)$ :

$$\begin{aligned} 0 &= \langle x|\hat{a}|0\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle x|\hat{a}|x'\rangle\langle x'|0\rangle dx' = \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x\delta(x-x') + \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{\partial}{\partial x}\delta(x-x') \right] \psi_0(x')dx' = \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{d\psi_0(x)}{dx} + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}x\psi_0(x) = 0. \end{aligned}$$

При вычислении было использовано выражение (3.40). Нормированное решение полученного дифференциального уравнения имеет вид:

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-m\omega x^2/2\hbar}. \quad (5.14)$$

Из выражения (5.13) получим явный вид волновых функций возбужденных состояний осциллятора. Предварительно выведем рекуррентное

соотношение между  $\psi_n$  и  $\psi_{n-1}$ :

$$\begin{aligned}
\psi_n(x) &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle x | \hat{a}^\dagger (\hat{a}^\dagger)^{n-1} | 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \int_{-\infty}^{\infty} \langle x | \hat{a}^\dagger | x' \rangle \psi_{n-1}(x') dx' + \\
&= \frac{1}{\sqrt{n}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x \delta(x - x') - \right. \\
&\quad \left. - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{\partial}{\partial x} \delta(x - x') \right] \psi_{n-1}(x') dx' = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2n}} \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \psi_{n-1} - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d\psi_{n-1}}{dx} \right) = \\
&= \frac{(-1)}{\sqrt{2n}} \left( \frac{\hbar}{m\omega} \right)^{1/2} e^{m\omega x^2/2\hbar} \frac{d}{dx} \left( e^{-m\omega x^2/2\hbar} \psi_{n-1} \right).
\end{aligned}$$

Разрешение этого рекуррентного соотношения дает явный вид волновой функции:

$$\psi_n(x) = \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-m\omega x^2/2\hbar} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n \left( x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \right), \quad (5.15)$$

где через  $H_n$  обозначены *полиномы Эрмита*, определенные соотношением

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}. \quad (5.16)$$

Из этого определение видно, что четность  $n$ -го состояния осциллятора равна  $(-1)^n$ . Явный вид трех низших полиномов Эрмита есть  $H_0 = 1$ ,  $H_1 = 2\xi$ ,  $H_2 = 4\xi^2 - 2$ . Графики  $\psi_{0,1,2}(x)$  показаны на рис. 5.1.

### 5.3 Когерентные состояния осциллятора

Согласно выражениям (5.4), (5.10) и (5.11), средние значения операторов координаты и импульса осциллятора равны нулю. Это неудобно при возможном переходе к классическому пределу. В классическом случае текущие значения координаты и импульса осциллятора отличны от нуля. Эта ситуация не означает невозможность перехода к классическому случаю, а лишь является иллюстрацией того, что не всякое стационарное

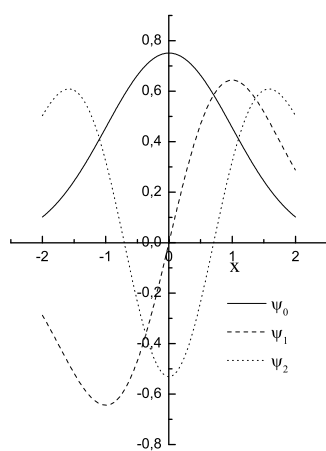


Рис. 5.1: Вид волновых функций гармонического осциллятора при  $n = 0, 1, 2$

нарное состояние квантовомеханического гамильтониана имеет классический предел. Покажем, что, подбирая линейную комбинацию стационарных состояний осциллятора можно построить состояние, в котором среднее значение координаты (и импульса) будет отлично от нуля. Вектор этого состояния  $|\alpha\rangle$  является собственным вектором оператора уничтожения и характеризуется произвольным комплексным числом  $\alpha$ :

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle. \quad (5.17)$$

Из выражения (5.4) ясно, что матричные элементы оператора координаты осциллятора  $\langle n'|\hat{x}|n\rangle$  отличны от нуля лишь между состояниями с  $n - n' = \pm 1$ . Поэтому попытаемся искать вектор состояния  $|\alpha\rangle$  в виде  $|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle$ . Коэффициенты разложения найдем, подставив это выражение в уравнение (5.17):

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \hat{a}|n\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{n} |n-1\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_{n+1} \sqrt{n+1} |n\rangle = \alpha \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle.$$

Отсюда получим рекуррентное соотношение

$$c_{n+1} = \frac{\alpha c_n}{\sqrt{n+1}},$$

откуда

$$c_n = \frac{\alpha^n c_0}{\sqrt{n!}}.$$

Модуль коэффициента  $|c_0| = e^{-|\alpha|^2/2}$  можно найти из условия нормировки  $\langle \alpha|\alpha\rangle = 1$ . Выбирая фазу равной нулю, получим окончательно вид вектора когерентного состояния:

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (5.18)$$

Вычислим среднее значение оператора координаты в когерентном состоянии:

$$\langle \alpha|\hat{x}|\alpha\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle \alpha|(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)|\alpha\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\alpha + \alpha^*) \neq 0.$$

При вычислении учтено соотношение  $\langle \alpha|\hat{a}^\dagger = \alpha^* \langle \alpha|$ , которое получается из (5.17) с помощью операции эрмитового сопряжения.

Когерентные состояния осциллятора были впервые введены одним из создателей квантовой механики Э. Шредингером еще в 1926 г. и вплоть до середины 60-х гг. XX-го века не имели каких-либо практических приложений. Интерес к этим состояниям вновь возник после создания в 1960 г. источников когерентного оптического излучения – *лазеров*. Состояния поля излучения в лазерах являются состояниями свободного электромагнитного поля, которые можно представить в виде набора гармонических осцилляторов. Оператор напряженности электрического поля в таком подходе аналогичен оператору координаты осциллятора. Отсюда стало ясно, что состояния поля излучения в лазере не могут являться состояниями с определенным числом фотонов, поскольку в таких состояниях среднее значение электрического поля равно нулю, в противоречии с тем, что наблюдается непосредственно глазами. В когерентном состоянии электромагнитного поля среднее значение напряженности электрического поля волны не равно нулю. Но тогда это состояние не является состоянием с определенным числом фотонов.

## 5.4 Задачи

1. Проверить, что вектор состояния (5.12) нормирован на единицу.
2. Найти явный вид матриц операторов координаты  $\langle n' | \hat{x} | n \rangle$ , импульса  $\langle n' | \hat{p} | n \rangle$  и гамильтониана  $\langle n' | \hat{H} | n \rangle$  осциллятора в энергетическом представлении.
3. Получить и решить уравнения Гейзенберга для операторов рождения и уничтожения гармонического осциллятора.
4. Найти волновые функции стационарных состояний осциллятора в импульсном представлении.
5. Вычислить  $\Delta x^2 \Delta p^2$  в  $n$ -м состоянии гармонического осциллятора.
6. Показать, что из условия нормировки  $\langle \alpha | \alpha \rangle = 1$  следует выражение  $|c_0| = e^{-|\alpha|^2/2}$ . Вычислить также скалярное произведение векторов когерентных состояний  $\langle \beta | \alpha \rangle$  для произвольных комплексных  $\alpha$  и  $\beta$ .

7. Найти вероятность  $w_n$  того, что в когерентном состоянии  $|\alpha\rangle$  имеется  $n$  квантов энергии.
8. Найти волновую функцию когерентного состояния  $\psi_\alpha(x) = \langle x|\alpha\rangle$  в координатном представлении.
9. Пусть при  $t = 0$  осциллятор находился в когерентном состоянии  $|\alpha\rangle$ . Найти в координатном представлении волновую функцию осциллятора в произвольный момент времени  $t > 0$ .
10. Вычислить среднее значение операторов координаты и импульса в когерентном состоянии осциллятора в произвольный момент времени  $t$ .
11. Вычислить  $\Delta x^2 \Delta p^2$  в когерентном состоянии гармонического осциллятора.
12. Показать, что невозможно ввести собственный вектор оператора уничтожения в соответствии с определением  $\hat{a}^\dagger|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$ . *Указание.* Попробуйте решить выписанное уравнение в координатном представлении.
13. Определить уровни энергии частицы в поле одномерного гармонического осциллятора  $U(x) = m\omega^2 x^2/2$ , решая соответствующее уравнение Шредингера. Найти также нормированные волновые функции трех низших по энергии состояний и убедиться, что они совпадают с волновыми функциями, полученными операторным методом.
14. Найти уровни энергии частицы в поле вида

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x \leq 0 \\ m\omega^2 x^2/2, & x > 0 \end{cases} .$$



## Глава 6

# Периодическое поле

Классификация кристаллических твердых тел по типам проводимости (металлы, полупроводники или изоляторы) основывается на особенностях энергетического спектра электронов в периодическом поле. Здесь будет рассмотрена самая простая одномерная модель такого поля в виде бесконечной последовательности дельта-функций. Периодическое поле характеризуется тем, что его потенциальная энергия обладает определенной симметрией, именно, не меняется при сдвиге на конечное расстояние  $a$ . Но предварительно было бы полезно рассмотреть, как понятие симметрии включается в аппарат квантовой механики.

### 6.1 Симметрии в квантовой механике

Говорят, что система обладает определенной симметрией, если ее гамильтониан не меняется при преобразованиях координат или времени.<sup>1</sup>

---

<sup>1</sup>Преобразования пространственно-временных координат ни в коей мере не являются единственно возможными преобразованиями симметрии. Кроме них есть преобразования *внутренней симметрии*, которые не затрагивают пространственно-временных координат. Например, операция замены частицы на античастицу, называемая зарядовым сопряжением, и ряд других дискретных и непрерывных симметрий. Если параметры преобразований внутренней симметрии не зависят от пространственно-временных координат, внутренняя симметрия называется *глобальной*. Если параметры преобразований внутренней симметрии зависят от пространственно-временных координат, внутренняя симметрия называется *локаль-*

Преобразования координат можно представить в виде  $\mathbf{r}' = S\mathbf{r}$ , где  $S$  обозначает матрицу преобразования. Преобразования подразделяются на *дискретные* и *непрерывные*. Примером дискретного преобразования является операция инверсии пространственных координат  $\mathbf{r}' = -\mathbf{r}$ . Примером непрерывного преобразования является *трансляция*, т.е. сдвиг на произвольный вектор  $\boldsymbol{\epsilon}$ :  $\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \boldsymbol{\epsilon}$ . После преобразования симметрии волновая функция от «старых» координат  $\psi(\mathbf{r})$  переходит в преобразованную волновую функцию от «новых» координат  $\psi'(\mathbf{r}')$ . Тогда на языке волновых функций симметрия гамильтониана означает, что должно выполняться равенство  $\psi'(\mathbf{r}') = \psi(\mathbf{r})$ . Часто говорят, что система *инвариантна* относительно преобразования  $S$ . Но в квантовой механике любая операция над волновой функцией представляется действием некоторого оператора. Для операции симметрии  $S$  обозначим такой оператор через  $\hat{U}_S$ . Тогда условие того, что квантовая система обладает симметрией  $S$ , можно записать как  $\psi'(\mathbf{r}') = \hat{U}_S\psi(\mathbf{r}') = \psi(\mathbf{r})$ . Если учесть, что  $\mathbf{r} = S^{-1}\mathbf{r}'$ , то выписанное условие перейдет в  $\hat{U}_S\psi(\mathbf{r}') = \psi(S^{-1}\mathbf{r}')$ . После этого можно отбросить штрих и записать условие инвариантности квантовой системы в виде

$$\hat{U}_S\psi(\mathbf{r}) = \psi(S^{-1}\mathbf{r}). \quad (6.1)$$

Е. Вигнер доказал теорему, которая утверждает, что почти во всех случаях оператор  $\hat{U}_S$  является линейным унитарным оператором со свойствами  $\langle \hat{U}_S\chi | \hat{U}_S\psi \rangle = \langle \chi | \psi \rangle$ ,  $\hat{U}_S(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\hat{U}_S|\psi_1\rangle + c_2\hat{U}_S|\psi_2\rangle$ . Исключением является операция обращения времени,  $t' = -t$ , для которой соответствующий оператор  $\hat{U}_{t \rightarrow -t}$  *антиунитарен и антилинеен*:

$$\langle \hat{U}_{t \rightarrow -t}\chi | \hat{U}_{t \rightarrow -t}\psi \rangle = \langle \chi | \psi \rangle^*,$$

$\hat{U}_{t \rightarrow -t}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1^*\hat{U}_{t \rightarrow -t}|\psi_1\rangle + c_2^*\hat{U}_{t \rightarrow -t}|\psi_2\rangle$ . Здесь введено обозначение  $|\hat{U}\psi\rangle = \hat{U}|\psi\rangle$ .

Особую роль играют *сохраняющиеся симметрии*. Сформулируем это понятие на языке операторов. Соотношение (6.1) говорит, что симметрия  $S$  генерирует преобразование волновой функции действием оператора  $\hat{U}_S$ . Произведем вначале преобразование симметрии, а затем позволим системе совершить эволюцию во времени в течение промежутка  $\Delta t$ . В

---

*ной*. Глобальные и локальные внутренние симметрии играют решающую роль при конструировании моделей взаимодействия в физике элементарных частиц и в физике конденсированного состояния.

результате получим волновую функцию

$$\psi_1 = e^{-i\hat{H}\Delta t/\hbar}\hat{U}_S\psi.$$

Можно действовать и по другому и вначале дать системе проэволюционировать, а затем произвести преобразование симметрии. В результате такой последовательности действий получим систему в состоянии с волновой функцией

$$\psi_2 = \hat{U}_S e^{-i\hat{H}\Delta t/\hbar}\psi.$$

Симметрия является сохраняющейся, если в результате двух указанных действий квантовая система окажется в одном и том же состоянии, т.е. будет выполняться равенство  $\psi_1 = \psi_2$ . Выбирая  $\Delta t$  достаточно малым, получим условие того, что симметрия является сохраняющейся:

$$[\hat{U}_S, \hat{H}] = 0. \quad (6.2)$$

Если симметрия является непрерывной, отвечающий ей оператор непрерывно зависит от некоторого параметра  $\xi$ :  $\hat{U}_S \equiv \hat{U}_S(\xi)$ . Очевидно, что  $\hat{U}_S(0) = 1$ . Тогда унитарный оператор, действующий на волновую функцию при преобразовании симметрии, представляется в виде

$$\hat{U}_S(\xi) = e^{i\xi\hat{G}_S}, \quad (6.3)$$

где эрмитов оператор  $\hat{G}_S = \hat{G}_S^\dagger$  называется *генератором преобразования*. Условие того, что непрерывная симметрия является сохраняющейся, может быть получено из (6.2) и (6.3):

$$[\hat{G}_S, \hat{H}] = 0. \quad (6.4)$$

Генератор сохраняющейся непрерывной симметрии должен коммутировать с гамильтонианом системы. Это означает, что собственные значения генератора не зависят от времени и могут, наряду с собственными значениями энергии, служить в качестве характеристик (меток) квантового состояния.

Покажем на нескольких примерах, как некоторые симметрии пространства и времени связаны с законами сохранения.

- Пусть есть инвариантность (неизменность) системы относительно сдвигов во времени. Физически это означает, что результаты опыта, законченного к моменту времени  $t$ , совпадают с результатами

такого же опыта, законченного к моменту времени  $t + \tau$ . Преобразование имеет вид  $t' = t + \tau$ . Условие (6.1) запишется как

$$\hat{U}_\tau \psi(t, \mathbf{r}) = \psi(t - \tau, \mathbf{r}). \quad (6.5)$$

Найдем генератор сдвигов во времени. Для этого запишем  $\hat{U}_\tau = e^{i\tau \hat{G}_\tau}$  и, считая параметр временных трансляций малым, разложим (6.5) в ряд по  $\tau$  и используем уравнение Шредингера (4.1):

$$(1 + i\tau \hat{G}_\tau) \psi(t, \mathbf{r}) = \psi(t, \mathbf{r}) - \tau \frac{\partial \psi}{\partial t} = \psi(t, \mathbf{r}) + \frac{i\tau}{\hbar} \hat{H} \psi.$$

Отсюда получим, что  $\hat{G}_\tau = \hat{H}/\hbar$ . Генератор трансляций во времени пропорционален гамильтониану. Инвариантность относительно сдвигов во времени означает, что гамильтониан не зависит явно от времени. Т.к. гамильтониан коммутирует сам с собой, то энергия системы сохраняется. Следовательно, *инвариантность относительно сдвигов во времени приводит к сохранению энергии*.

- *Инвариантность относительно пространственных сдвигов*

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \mathbf{a}$$

означает, что идентичные по условиям постановки эксперименты, проведенные в двух лабораториях, разделенных вектором  $\mathbf{a}$ , дадут одинаковые результаты. Условие (6.1) принимает в данном случае вид

$$\hat{U}_\mathbf{a} \psi(t, \mathbf{r}) = \psi(t, \mathbf{r} - \mathbf{a}). \quad (6.6)$$

Преобразование сдвига характеризуется векторным параметром  $\mathbf{a}$ , поэтому генератор преобразования  $\hat{\mathbf{G}}_\mathbf{a}$  является векторным оператором:  $\hat{U}_\mathbf{a} = e^{i\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{G}}_\mathbf{a}}$ . Подставив это выражение в (6.6) и разложив в ряд по  $\mathbf{a}$ , получим

$$(1 + i\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{G}}_\mathbf{a}) \psi = \psi - (\mathbf{a} \cdot \nabla) \psi,$$

откуда находим генератор трансляций

$$\hat{\mathbf{G}}_\mathbf{a} = i\nabla = -\frac{\hat{\mathbf{p}}}{\hbar}. \quad (6.7)$$

Генератор преобразования сдвига пропорционален оператору импульса:

$$\hat{U}_{\mathbf{a}} = e^{-i\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{p}}/\hbar}. \quad (6.8)$$

Если система инвариантна относительно любых сколь угодно малых сдвигов, то из (6.4) следует, что  $[\hat{\mathbf{p}}, \hat{H}] = 0$ , и все три декартовых компоненты импульса сохраняются. Из *инвариантности относительно произвольных сдвигов* следует *закон сохранения импульса*.

- *Инвариантность относительно пространственных поворотов*

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} - [\mathbf{r} \times \delta\boldsymbol{\theta}].$$

Бесконечно малый поворот задается вектором  $\delta\boldsymbol{\theta}$ , с длиной, равной равна углу поворота и с направлением вдоль оси поворота. Генератор поворота  $\hat{\mathbf{G}}_{\delta\boldsymbol{\theta}}$  есть векторный оператор. Условие инвариантности (6.1) принимает вид

$$(1 + i\delta\boldsymbol{\theta} \cdot \hat{\mathbf{G}}_{\delta\boldsymbol{\theta}})\psi = \psi + ([\mathbf{r} \times \delta\boldsymbol{\theta}] \cdot \nabla)\psi = \psi - (\delta\boldsymbol{\theta} \cdot [\mathbf{r} \times \nabla])\psi, \quad (6.9)$$

откуда получаем, что

$$\hat{\mathbf{G}}_{\delta\boldsymbol{\theta}} = i[\mathbf{r} \times \nabla] = -\frac{1}{\hbar}\hat{\mathbf{L}}, \quad (6.10)$$

где оператор

$$\hat{\mathbf{L}} = [\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}] \quad (6.11)$$

называется оператором *орбитального момента* или *углового момента*. Если система инвариантна относительно любых пространственных поворотов, то оператор орбитального момента коммутирует с гамильтонианом. Но отсюда еще не следует, что сохраняются все три компоненты этого оператора. Ниже мы убедимся, что различные декартовы компоненты оператора орбитального момента не коммутируют друг с другом. Поэтому может сохраняться квадрат этого оператора и одна из декартовых компонент, обычно это  $\hat{L}_z$ . Оператор конечного поворота на угол  $\theta$  вокруг оси, заданной единичным вектором  $\mathbf{n}$ , записывается в виде

$$U_{\mathbf{n}}(\theta) = e^{-i\theta\hat{\mathbf{L}}/\hbar}. \quad (6.12)$$

Забегаая вперед заметим, что выражения (6.9) и (6.12) потребуют уточнения в случае, когда для описания квантового состояния частицы потребуется не одна волновая функция  $\psi$ , а несколько. Эта необходимость возникает для электрона, протона, нейтрона и вообще для всех частиц, обладающих *спином*.

Как преобразовываются операторы при действии преобразований симметрии? Для ответа на этот вопрос обозначим через  $|\psi_S\rangle$  вектор состояния системы после проведения операции симметрии  $S$ , реализуемой действием оператора  $\hat{U}_S$ :

$$|\psi_S\rangle = \hat{U}_S|\psi\rangle. \quad (6.13)$$

Далее, пусть имеется оператор  $\hat{A}$  такой, что

$$|\psi'\rangle = \hat{A}|\psi\rangle. \quad (6.14)$$

Найдем оператор  $\hat{A}_S$  такой, что  $|\psi'_S\rangle = \hat{A}_S|\psi_S\rangle$ . Это равенство переписывается как  $\hat{U}_S|\psi'\rangle = \hat{A}_S\hat{U}_S|\psi\rangle$ , откуда следует равенство  $|\psi'\rangle = \hat{U}_S^{-1}\hat{A}_S\hat{U}_S|\psi\rangle$ . Сравнив с (6.14), получим  $\hat{A} = \hat{U}_S^{-1}\hat{A}_S\hat{U}_S$ , что эквивалентно выражению

$$\hat{A}_S = \hat{U}_S\hat{A}\hat{U}_S^{-1} = \hat{U}_S\hat{A}\hat{U}_S^\dagger. \quad (6.15)$$

Последнее равенство в (6.15) справедливо для унитарных операторов преобразования.

## 6.2 Периодический потенциал и теорема Блоха

Пусть одномерный потенциал в гамильтониане частицы

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + U(x)$$

обладает свойством периодичности  $U(x+a) = U(x)$ , где постоянная  $a$  называется *постоянной решетки*. Это понятие является модельной реализацией более общего понятия *вектора трансляций* трехмерной кристаллической решетки. О нем более подробно будет идти речь во второй

части курса. Поскольку  $U(x) \neq 0$  и инвариантность относительно произвольных трансляций отсутствует, то  $[\hat{p}_x, \hat{H}] \neq 0$ , и импульс не сохраняется. Однако система обладает инвариантностью относительно конечных трансляций, осуществляемых оператором  $\hat{T}_a = e^{ia\hat{p}_x/\hbar}$ . Чтобы не путать его с оператором произвольных трансляций (6.8), было введено обозначение  $\hat{T}_a$ , причем

$$\hat{T}_a\psi(x) = \psi(x + a). \quad (6.16)$$

Сравнение с (6.6) показывает, что  $\hat{T}_a$  сдвигает аргумент волновой функции в сторону увеличения. Инвариантность означает, что  $[\hat{T}_a, \hat{H}] = 0$ , поэтому состояния частицы в периодическом поле могут характеризоваться, наряду с энергией, собственными значениями оператора  $\hat{T}_a$ :

$$\hat{T}_a\psi(x) = \lambda(a)\psi(x),$$

причем вследствие унитарности  $\hat{T}_a\hat{T}_a^\dagger = 1$  эти собственные значения по модулю равны единице:  $\lambda(a) = e^{i\beta(a)}$ . Две последовательные трансляции на постоянную решетки  $a$  тождественны одной трансляции на постоянную решетки  $2a$ . Отсюда следует, что  $\lambda(a)^2 = \lambda(2a)$ , эквивалентно,  $2\beta(a) = \beta(2a)$ . Решением этого функционального уравнения является линейная функция  $\beta(a) = qa$ . Таким образом,

$$\hat{T}_a\psi(x) = \psi(x + a) = e^{iqa}\psi(x). \quad (6.17)$$

Величина  $q$  называется *квазиимпульсом*. Точнее говоря, квазиимпульсом следует называть величину  $\hbar q$ , а  $q$  следовало бы называть квазиволновым числом, но обычно такого различия не делают. «Квази» означает, что в периодическом поле  $q$  сохраняется с точностью до целого кратного  $2\pi/a$ . Величина  $b = 2\pi/a$  в данном случае есть одномерный аналог трехмерного *вектора обратной решетки*, о котором более подробно будет идти речь во второй части курса.

Выражение (6.17) позволяет установить общий вид волновой функции частицы  $\psi(x)$  в периодическом потенциале. Для этого введем вспомогательную функцию  $u_q(x) = e^{-iqx}\psi(x)$ . Из этого представления сразу получим, что  $u_q(x + a) = e^{-iq(x+a)}\psi(x + a) = e^{-iqx}\psi(x) = u_q(x)$ . Т.е.  $u_q(x)$  периодична с периодом  $a$ . Отсюда следует, что волновая функция частицы в одномерном периодическом поле представляется в виде

$$\psi(x) \equiv \psi_q(x) = e^{iqx}u_q(x), \quad (6.18)$$

где  $u_q(x + a) = u_q(x)$ , а  $q$  есть квазиимпульс. Это утверждение носит название *теоремы Блоха*, а волновые функции вида (6.18) называются *блоховскими волновыми функциями*. Теорема Блоха имеет место и в случае трехмерной периодической структуры.

### 6.3 Спектр энергий в одномерном периодическом поле

Спектр энергий в периодическом поле находится из решения стационарного уравнения Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_q}{dx^2} + U(x) \psi_q = E(q) \psi_q(x),$$

где  $U(x + a) = U(x)$ ,  $\psi_q$  есть блоховская функция (6.18). Поскольку значения квазиимпульса  $q$  и  $q + b$ , где  $b = 2\pi/a$ , отвечают одному и тому же решению, то, как следует из этого уравнения, должно выполняться условие

$$E(q + b) = E(q). \quad (6.19)$$

Энергия является периодической функцией квазиимпульса с периодом, равным «вектору» обратной решетки  $b$ .

Особенности энергетического спектра в периодическом поле можно понять, рассмотрев модельный потенциал в виде бесконечного ряда из  $\delta$ -функций. Выберем для определенности потенциал с  $\delta$ -ямами,

$$U(x) = -G \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na), \quad (6.20)$$

и рассмотрим случай  $E < 0$ . Для отрицательных энергий в  $\delta$ -яме есть единственный уровень с энергией  $E_0 = -mG^2/2\hbar^2$ . При поиске решения уравнения Шредингера с потенциальной энергией (6.20) вначале найдем решение в интервале  $0 < x < a$ , а решение в соседней области  $a < x < 2a$  свяжем с ним в согласии с (6.17):

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x}, & 0 < x < a \\ e^{iqa} [Ae^{\kappa(x-a)} + Be^{-\kappa(x-a)}], & a < x < 2a \end{cases} \quad (6.21)$$



Здесь, как обычно,  $\varkappa = \sqrt{2m|E|}/\hbar$ . Условие сшивания решений при  $x = a$  дает однородную систему двух алгебраических уравнений

$$\begin{aligned} \left(1 + \frac{mG}{\hbar^2 \varkappa} - e^{a(\varkappa - iqa)}\right) A + \frac{mG}{\hbar^2 \varkappa} B &= 0, \\ -\frac{mG}{\hbar^2 \varkappa} A + \left(1 - \frac{mG}{\hbar^2 \varkappa} - e^{-a(\varkappa + iqa)}\right) B &= 0. \end{aligned}$$

Условием ее разрешимости является равенство нулю определителя, которое дает связь квазиимпульса  $q$  с  $\varkappa$ , т.е. фактически с энергией:

$$\cos qa = \operatorname{ch} \varkappa a - \frac{mG}{\hbar^2 \varkappa} \operatorname{sh} \varkappa a. \quad (6.22)$$

Зависимость энергии от квазиимпульса  $q$  периодична с периодом  $2\pi/a$ , поэтому весь интервал  $-\infty < q < \infty$  можно свести к конечному интервалу  $0 \leq q \leq 2\pi/a$ . Значения  $q$  вне этого интервала дадут значения энергии, совпадающие со значениями энергии при  $q$  из этого интервала. Более удобное и общепринятое соглашение состоит в том, что нетривиальные значения квазиимпульса выбираются из симметричного интервала

$$-\frac{\pi}{a} \leq q \leq \frac{\pi}{a}. \quad (6.23)$$

Это соглашение отвечает выбору *первой зоны Бриллюэна*.

Трансцендентное уравнение (6.22) можно решить явно в пределе

$$mGa/\hbar^2 \gg 1.$$

Это неравенство означает, что либо расстояние между ямами  $a$  велико при фиксированной «силе» ямы  $G$ , либо каждая из  $\delta$ -ям достаточно «сильна» при заданном расстоянии между ними, либо выполняются оба этих условия. Во всех этих случаях можно считать, что  $\varkappa a \gg 1$ . В этом пределе в левой части (6.22) стоит ограниченная функция, а в правой части – экспоненциально большая функция:

$$\cos qa \approx \frac{1}{2} e^{\varkappa a} \left(1 - \frac{mG}{\hbar^2 \varkappa}\right). \quad (6.24)$$

Экспоненциально большой вклад будет скомпенсирован при выполнении условия, что в нулевом приближении  $\varkappa_0 a \rightarrow \infty$  решение должно иметь

вид такой же, как в одиночной  $\delta$ -яме:  $\kappa \approx \kappa_0 = mG/\hbar^2$ ,  $E \approx E_0 = -mG^2/2\hbar^2$ . В первом приближении пишем  $\kappa = \kappa_0 + \kappa_1$ ,  $\kappa_1/\kappa_0 \ll 1$ . Из уравнения (6.24) находим, что

$$\kappa_1 = \frac{2mG}{\hbar^2} e^{-mGa/\hbar^2} \cos qa,$$

а явное выражение для зависимости энергии от квазиимпульса в пределе  $mGa/\hbar^2 \gg 1$  имеет вид

$$E(q) \approx -\frac{mG^2}{2\hbar^2} \left( 1 + 4e^{-mGa/\hbar^2} \cos qa \right). \quad (6.25)$$

Из этого выражения видно, что зависимость энергии от квазиимпульса осциллирует около энергии частицы в одиночной яме. Это означает, что дискретный уровень в одиночной яме размывается в зону энергий с шириной

$$\Delta = \frac{4mG^2}{\hbar^2} e^{-mGa/\hbar^2} \quad (6.26)$$

при выстраивании этих ям в бесконечную периодическую одномерную структуру. График зависимости энергии от квазиимпульса внутри первой зоны Бриллюэна показан на рис. 6.1.

Энергия имеет минимум при  $q = 0$ . Если функцию  $E(q)$  разложить в ряд по  $q$  с точностью до членов второго порядка, то получится выражение вида

$$E(q) = E_0 + \frac{\hbar^2 q^2}{2m^*}, \quad (6.27)$$

имеющее такой же вид как зависимость энергии от импульса нерелятивистской частицы с некоторой *эффективной массой*

$$m^* = \frac{m}{2} \left( \frac{\hbar^2}{mGa} \right)^2 e^{mGa/\hbar^2}. \quad (6.28)$$

Эффективная масса в рассматриваемой модели экспоненциально велика по сравнению с исходной массой частицы и возникает за счет взаимодействия частицы с периодическим потенциалом одномерной решетки. Физическая причина этого состоит в том, что в одиночной яме частица находится в связанном состоянии и не может распространяться. Но если же ямы уложены в периодическую структуру, то волновая функция частицы, локализованной в какой-то яме, имеет хотя и экспоненциально

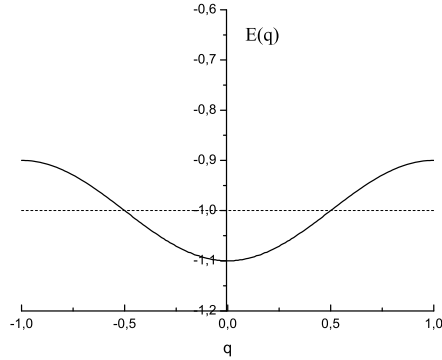


Рис. 6.1: Зависимость энергии от квазиимпульса в одномерном периодическом поле (6.20) при  $E < 0$  (сплошная линия) внутри первой зоны Бриллюэна в условных единицах. Пунктиром показан уровень энергии в одиночной  $\delta$ -яме

малое, но все же ненулевое значение в соседних ямах. В согласии с теоремой Блоха волновая функция в периодическом поле распространяется на сколь угодно большие расстояния. Указанное экспоненциальное поведение волновой функции в одиночной яме отражается в экспоненциально большой эффективной массе частицы в периодическом поле.

## 6.4 Задачи

1. Имеется инвариантность относительно поворотов вокруг оси  $z$  в цилиндрических координатах  $(\rho, \phi, z)$ . В этих же координатах найти сохраняющийся генератор таких поворотов.
2. Потенциальная энергия в цилиндрических координатах  $(\rho, \phi, z)$  обладает симметрией винтовой линии, т.е. она не меняется при повороте вокруг оси  $z$  на величину  $\delta\phi$  и одновременном переносе на  $\delta z = l\delta\phi/2\pi$  вдоль оси  $z$ , где  $l$  — шаг винта. Найти вид оператора, сохраняющегося в таком поле.

3. Найти явный вид волновой функции частицы в периодическом поле (6.20) при  $E < 0$ .
4. Провести анализ энергетического спектра частицы в периодическом поле отталкивания

$$U(x) = G \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na).$$

Показать, что спектр состоит из чередующихся зон разрешенных и запрещенных энергий. Найти уравнение для определения ширины запрещенной зоны (щели).

5. Найти примесные дискретные уровни энергии в поле

$$U(x) = -G \sum_{n \neq 0} \delta(x - na) - G_1 \delta(x).$$

Рассмотреть случаи с  $G_1 > G$  и  $G_1 < G$ . *Указание.* Принять во внимание, что волновая функция примесного уровня экспоненциально спадает в обе стороны при удалении от примесного «атома» вглубь регулярной структуры.

## Глава 7

# Квазиклассическое приближение

Квантовая механика, на данный момент, является теорией, описывающей все наблюдаемые в микромире явления. Как и любая полная теория, она должна включать в себя классическую механику как предельный случай. В этой главе рассматривается предельный переход к классическому случаю. Попутно обсуждается приближенный квазиклассический метод регулярного нахождения уровней энергии и волновых функций в одномерном случае.

### 7.1 Теорема Эренфеста

Если начать с гамильтониана частицы в поле с потенциальной энергией,

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\hat{x}), \quad (7.1)$$

то с помощью уравнений Гейзенберга (4.11) можно найти уравнения движения для операторов импульса  $\hat{p}$  и координаты  $\hat{x}$ :

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{p}}{dt} &= -\hat{U}'(\hat{x}) \equiv F(\hat{x}), \\ \frac{d\hat{x}}{dt} &= \frac{\hat{p}}{m}, \end{aligned} \quad (7.2)$$

где оператор  $\hat{U}'(\hat{x})$  (см. задачу 1 к этой главе) представляется в виде ряда

$$\hat{U}'(\hat{x}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{U^{(n+1)}(0)}{n!} \hat{x}^n.$$

Операторные уравнения движения (7.2) формально имеют такой же вид как уравнения движения для траектории  $\bar{x} \equiv x(t)$  в классической механике:

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{p}}{dt} &= -U'(\bar{x}), \\ \frac{d\bar{x}}{dt} &= \frac{\bar{p}}{m}. \end{aligned}$$

Для изучения возможности перехода от (7.2) к выписанным уравнениям классической механики необходимо допустить, что оператор координаты  $\hat{x}$  можно представить в виде  $\hat{x} = \bar{x} + \hat{\xi}$ , где  $\bar{x}$  есть классическая траектория, а оператор  $\hat{\xi}$  включает квантовые эффекты.

Найдем квантовомеханическое среднее от обеих частей операторного уравнения (7.2) по некоторой волновой функции  $\psi$ . Усреднение правой части сводится к вычислению интегралов вида

$$\langle \hat{\xi}^n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) (x - \bar{x})^n \psi(x) dx.$$

Очевидно, что  $\langle \hat{\xi} \rangle = 0$ . В результате усреднения получим уравнение

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{d\hat{p}}{dt} \right\rangle &= \frac{d\langle \hat{p} \rangle}{dt} = - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{U^{(n+1)}(0)}{n!} \left[ \bar{x}^n + \frac{n(n-1)}{2} \bar{x}^{n-2} \langle \hat{\xi}^2 \rangle + \dots \right] = \\ &= - \frac{dU(\bar{x})}{d\bar{x}} - \frac{\langle \hat{\xi}^2 \rangle}{2} \frac{d^3 U(\bar{x})}{d\bar{x}^3} + \dots, \end{aligned}$$

где многоточие означает вклады от усреднения степеней оператора  $\hat{\xi}$  более высоких чем вторая. Этот результат показывает, что классическое уравнение движения для средних значений получится из усреднения операторного уравнения движения Гейзенберга тогда, когда можно пренебречь слагаемыми, содержащими средние  $\langle \hat{\xi}^2 \rangle$  и средние от более высоких степеней оператора  $\hat{\xi}$ . Этот вывод составляет содержание *теоремы Эренфеста*. Условием применимости этой теоремы является неравенство

$$\langle \hat{\xi}^2 \rangle \left| \frac{d^3 U(\bar{x})}{d\bar{x}^3} \right| \ll \left| \frac{dU(\bar{x})}{d\bar{x}} \right|.$$

Если воспользоваться соотношением неопределенностей, последнее неравенство можно переписать как

$$\langle \hat{\xi}^2 \rangle \sim \frac{\hbar^2}{\Delta p_x^2} \sim \frac{\hbar^2}{p_x^2} \ll \frac{|U'|}{|U''|}.$$

Для оценки производных можно взять выражение  $U^{(n)} \sim U/L^n$ , где  $L$  есть характерный масштаб, на котором меняется потенциальная энергия  $U$ . Тогда условие, при котором справедлива теорема Эренфеста, сводится к неравенству

$$\frac{\hbar^2}{p_x^2} \sim \lambda^2 \ll L^2, \quad (7.3)$$

которое говорит, что длина волны де Бройля  $\lambda$  должна быть много меньше характерного масштаба расстояний  $L$ , на которых меняется потенциальная энергия. Это возможно либо при достаточно гладком потенциале, либо при большой энергии частицы.

## 7.2 Метод Венцеля – Крамерса – Бриллюэна

Условие (7.3), которое выполняется в ситуациях, близких к классическим, позволяет развить регулярный приближенный метод нахождения энергетического спектра и волновых функций. Метод справедлив либо в случае медленно меняющихся потенциалов, либо при больших импульсах квантовой частицы. Он носит название *квазиклассического метода* или метода Венцеля – Крамерса – Бриллюэна (ВКБ). Решение уравнения Шредингера

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)] \psi = 0,$$

где штрих обозначает дифференцирование по  $x$ , будем искать в виде  $\psi = f e^{iS/\hbar}$ . Функции  $f \equiv f(x)$  и  $S \equiv S(x)$  предполагаются вещественными. Приравниваю нулю отдельно вещественную и мнимую левую часть уравнения Шредингера, получим систему двух уравнений

$$f'' - f \left( \frac{S'}{\hbar} \right)^2 + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) f = 0 \quad (7.4)$$

и

$$\frac{2f'}{f} + \frac{S''}{S'} = 0. \quad (7.5)$$

Уравнение (7.5) имеет точное решение  $f = A/\sqrt{S'}$ , с произвольной пока постоянной  $A$ . Для нахождения  $S$  пренебрежем в уравнении (7.4) членом  $f''$ . Приближенное решение имеет вид

$$S = \pm \hbar \int k(x) dx, \quad (7.6)$$

где

$$k(x) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{E - U(x)}. \quad (7.7)$$

Приближение справедливо при выполнении неравенства

$$f'' \ll f \left( \frac{S'}{\hbar} \right)^2 = f k^2(x).$$

Поскольку  $f \sim k^{-1/2}$ , неравенство сводится к неравенству  $k'^2 \ll k^4$ , или, если выразить  $k$  через длину волны де Бройля, неравенству

$$\left( \frac{d\lambda}{dx} \right)^2 \ll 1. \quad (7.8)$$

Если ввести характерное расстояние  $L$ , на котором существенно меняется потенциальная энергия, то критерий применимости квазиклассического приближения принимает вид

$$\frac{1}{k^2 L^2} \ll 1, \quad (7.9)$$

совпадающий с (7.3). Найденное частное решение с вещественным  $k(x)$  справедливо в классически разрешенной области, где  $E > U(x)$ . Общее решение уравнения Шредингера в квазиклассическом приближении в этой области можно, в частности, представить в виде

$$\psi(x) = \frac{A_1}{\sqrt{k(x)}} e^{i \int k dx} + \frac{A_2}{\sqrt{k(x)}} e^{-i \int k dx}, \quad (7.10)$$

где  $A_1$  и  $A_2$  суть комплексные, вообще говоря, константы. В классически запрещенной области квазиклассическое решение можно записать в виде линейной комбинации растущей и падающей экспонент:

$$\psi(x) = \frac{B_1}{\sqrt{\kappa(x)}} e^{\int \kappa dx} + \frac{B_2}{\sqrt{\kappa(x)}} e^{-\int \kappa dx}, \quad (7.11)$$



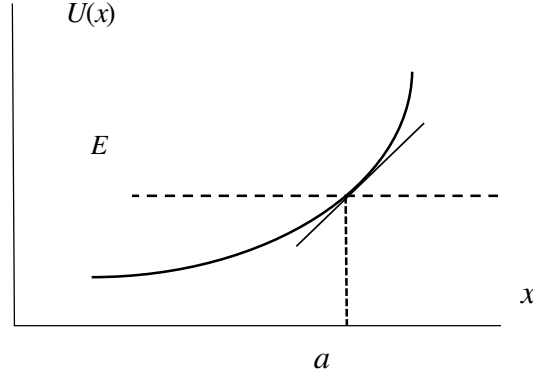


Рис. 7.1: К выводу квазиклассических правил сшивки

с вещественными произвольными постоянными  $B_1$  и  $B_2$ . В данном случае

$$\kappa(x) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{U(x) - E}. \quad (7.12)$$

Связь между константами  $A_1$ ,  $A_2$  и  $B_1$ ,  $B_2$  должна быть найдена из условия сшивки квазиклассических волновых функций. Из (7.10) и (7.11) очевидно, что нельзя сшивать волновые функции в классических точках поворота  $a$ , удовлетворяющих условию  $U(a) = E$ . В этих точках  $k(a) = \kappa(a) = 0$ , и волновые функции (7.10) и (7.11) не определены, поэтому требуется найти специальные *квазиклассические правила сшивки*.

Известно несколько методов получения таких правил. Здесь будет использован метод, основанный на использовании точного решения уравнения Шредингера вблизи точки поворота, вблизи которой потенциальная энергия аппроксимируется линейным потенциалом:

$$U(x) = E + F(x - a),$$

где  $F = U'(a)$ . См. рис. 7.1. Если ввести новую безразмерную координату  $\xi = (x - a)/b$ ,  $b = (2mF/\hbar^2)^{-1/3}$ , то уравнение Шредингера вблизи точки поворота  $a$  запишется в виде

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} - \xi\psi = 0. \quad (7.13)$$

Решением такого уравнения при  $\xi < 0$  будет линейная комбинация функ-

ций Бесселя

$$\psi(\xi) = \sqrt{|\xi|} \left[ A J_{1/3} \left( \frac{2}{3} |\xi|^{3/2} \right) + B J_{-1/3} \left( \frac{2}{3} |\xi|^{3/2} \right) \right],$$

тогда как при  $\xi > 0$  решение представится в виде линейной комбинации функций Бесселя мнимого аргумента:

$$\psi(\xi) = \sqrt{\xi} \left[ C I_{1/3} \left( \frac{2}{3} \xi^{3/2} \right) + D I_{-1/3} \left( \frac{2}{3} \xi^{3/2} \right) \right].$$

В новых переменных точкой поворота является  $\xi = 0$ . Точное решение уравнения Шредингера в приближенном линейном потенциале должно удовлетворять обычным правилам сшивки, т.е. волновая функция и ее производная должны быть непрерывны при  $\xi = 0$ . Функции  $J_\nu(z)$  и  $I_\nu(z)$  имеют одинаковые асимптотики при  $z \rightarrow 0$ :

$$J_\nu(z), I_\nu(z) \sim \frac{1}{\Gamma(\nu + 1)} \left( \frac{z}{2} \right)^\nu,$$

$\Gamma$  обозначает гамма-функцию. Из этих асимптотик получаем, что при малых отрицательных  $\xi$  волновая функция имеет вид

$$\psi(\xi) \sim \frac{A|\xi|}{3^{1/3}\Gamma(4/3)} + \frac{B}{3^{-1/3}\Gamma(2/3)},$$

тогда как волновая функция при малых положительных  $\xi$  равна

$$\psi(\xi) \sim \frac{C\xi}{3^{1/3}\Gamma(4/3)} + \frac{D}{3^{-1/3}\Gamma(2/3)}.$$

Из условия непрерывности  $\psi$  получим  $B = D$ , а из условия непрерывности  $\psi'$  получим  $C = -A$ . Таким образом, точное решение уравнения (7.13) запишется в виде

$$\psi(\xi) = \begin{cases} \sqrt{|\xi|} \left[ A J_{1/3} \left( \frac{2}{3} |\xi|^{3/2} \right) + B J_{-1/3} \left( \frac{2}{3} |\xi|^{3/2} \right) \right], & \xi < 0 \\ \sqrt{\xi} \left[ -A I_{1/3} \left( \frac{2}{3} \xi^{3/2} \right) + B I_{-1/3} \left( \frac{2}{3} \xi^{3/2} \right) \right], & \xi > 0. \end{cases} \quad (7.14)$$

Для нахождения связи между решениями при  $\xi \rightarrow -\infty$  и  $\xi \rightarrow \infty$  используем асимптотику функции Бесселя действительного аргумента при  $z \rightarrow \infty$ :

$$J_{\pm\nu}(z) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \cos \left( z \mp \frac{\pi\nu}{2} - \frac{\pi}{4} \right). \quad (7.15)$$

Аналогичная асимптотика для функции  $I_\nu(z)$  нетривиальна, поэтому для обхода этой трудности используем формулу

$$K_\nu(z) = \frac{\pi[I_{-\nu}(z) - I_\nu(z)]}{2 \sin \pi \nu},$$

где функция Макдональда  $K_\nu$  имеет простую асимптотику при  $z \rightarrow \infty$ :

$$K_\nu(z) \sim \sqrt{\frac{\pi}{2z}} e^{-z}. \quad (7.16)$$

С помощью (7.15) находим асимптотику волновой функции в классически разрешенной области  $\xi \rightarrow -\infty$ :

$$\begin{aligned} \psi(\xi) \sim & |\xi|^{1/2} \left( \frac{3}{\pi |\xi|^{3/2}} \right)^{1/2} \left[ A \cos \left( \frac{2}{3} |\xi|^{3/2} - \frac{\pi}{4} - \frac{\pi}{6} \right) + \right. \\ & \left. + B \sin \left( \frac{2}{3} |\xi|^{3/2} - \frac{\pi}{4} + \frac{\pi}{6} \right) \right] = \left( \frac{3}{\pi} \right)^{1/2} |\xi|^{-1/4} \times \\ & \times \left[ (A + B) \cos \frac{\pi}{6} \cos \left( \frac{2}{3} |\xi|^{3/2} - \frac{\pi}{4} \right) + \right. \\ & \left. + (A - B) \sin \frac{\pi}{6} \sin \left( \frac{2}{3} |\xi|^{3/2} - \frac{\pi}{4} \right) \right]. \end{aligned} \quad (7.17)$$

При получении правил сшивки необходимо иметь ввиду, что вблизи  $x = a$ , где справедливо линейное приближение для  $U(x)$ , имеют место равенства

$$\begin{aligned} \frac{2}{3} |\xi|^{3/2} &= \int_x^a k(x) dx, \\ \frac{2}{3} \xi^{3/2} &= \int_a^x \kappa(x) dx. \end{aligned}$$

Из (7.17) следует, что при выборе  $A = B$  синус из выражения выпадает, должно получиться правило сопоставления косинусу в разрешенной области определенного выражения в классически запрещенной области. Действительно, при  $\xi \rightarrow \infty$  получим асимптотику волновой функции:

$$\begin{aligned} \psi(\xi) &= A \xi^{1/2} \left[ -I_{1/3} \left( \frac{2}{3} \xi^{3/2} \right) + I_{-1/3} \left( \frac{2}{3} \xi^{3/2} \right) \right] = \frac{2A \xi^{1/2}}{\pi} \sin \frac{\pi}{3} \times \\ &\times K_{1/3} \left( \frac{2}{3} \xi^{3/2} \right) \sim \frac{3A}{2 \xi^{1/2} \sqrt{\pi}} e^{-2 \xi^{3/2}/3}. \end{aligned} \quad (7.18)$$

Сопоставляя (7.17) и (7.18), приходим к сопоставлению

$$|\xi|^{-1/4} \cos \left( \frac{2}{3} |\xi|^{3/2} - \frac{\pi}{4} \right) \rightarrow \frac{1}{2} \xi^{-1/4} e^{-2\xi^{3/2}/3},$$

откуда следует правило перехода

$$\frac{1}{\sqrt{k(x)}} \cos \left( \int_x^a k(x) dx - \frac{\pi}{4} \right) \rightarrow \frac{1}{2\sqrt{\kappa(x)}} \exp \left( - \int_a^x \kappa(x) dx \right). \quad (7.19)$$

Для того чтобы найти, какая функция в классически запрещенной области сопоставляется синусу как второму линейно независимому решению в классически разрешенной области, воспользуемся тем, что для двух линейно независимых решений  $\psi_1$  и  $\psi_2$  одномерного стационарного уравнения Шредингера справедливо соотношение<sup>1</sup>

$$W(\psi_1, \psi_2) \equiv \psi_1' \psi_2 - \psi_1 \psi_2' = \text{const.}$$

Величина  $W$  называется *определителем Вронского*. Благодаря условию (7.8) в квазиклассическом приближении следует дифференцировать только аргументы тригонометрических или показательных функций. Взяв

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \cos \left( \int_x^a k(x) dx - \frac{\pi}{4} \right), \\ \psi_2(x) &= \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \sin \left( \int_x^a k(x) dx - \frac{\pi}{4} \right), \end{aligned}$$

в классически разрешенной области  $x < a$  получим  $W(\psi_1, \psi_2) = -1$ . В классически запрещенной области  $x > a$  берем

$$\psi_1(x) = \frac{1}{2\sqrt{\kappa(x)}} \exp \left( - \int_a^x \kappa(x) dx \right),$$

а второе линейно независимое решение ищем в виде

$$\psi_2(x) = \frac{b}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp \left( \int_a^x \kappa(x) dx \right).$$

---

<sup>1</sup>Стационарное одномерное уравнение Шредингера имеет вид  $\psi'' + a(x)\psi = 0$ . Оно имеет два линейно-независимых решения  $\psi_1$  и  $\psi_2$ . Умножив уравнение для  $\psi_1$  на  $\psi_2$ , а уравнение для  $\psi_2$  на  $\psi_1$  и вычитая одно из другого, получим  $(\psi_2\psi_1' - \psi_1\psi_2')' = 0$ , откуда и вытекает сделанное в тексте утверждение.

Для этой пары решений определитель Вронского равен  $b$ . Из условия  $W = \text{const}$  следует, что  $b = -1$ , и справедливо правило перехода

$$\frac{1}{\sqrt{k(x)}} \sin \left( \int_x^a k(x) dx - \frac{\pi}{4} \right) \rightarrow -\frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp \left( \int_a^x \kappa(x) dx \right). \quad (7.20)$$

Квазиклассические правила перехода (7.19) и (7.20) выписаны для случая, когда классически разрешенная область находится слева от точки поворота, см. рис. 7.1. Если разрешенная область находится справа от точки поворота, то при нахождении правил сшивки надо просто иметь в виду, что косинус переходит в затухающую экспоненту с коэффициентом  $1/2$ , а синус – в минус растущую экспоненту.

### 7.3 Правило квантования Бора – Зоммерфельда

Применим правила сшивки (7.19) и (7.20) для вывода метода нахождения уровней энергии в квазиклассическом приближении в потенциале на рис. 7.2. Решение в классически разрешенной области  $a < x < b$ , которое даст затухающую волновую функцию при  $x < a$ , имеет вид

$$\psi(x) = \frac{A}{\sqrt{k(x)}} \cos \left( \int_a^x k(x) dx - \frac{\pi}{4} \right),$$

где постоянная нормировки  $A$  будет найдена ниже. Для того, чтобы продолжить это решение в классически запрещенную область  $x > b$ , представим интеграл в аргументе косинуса в виде  $\int_a^x = \int_a^b - \int_x^b$ . Тогда для волновой функции в классически разрешенной области получим выражение

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \frac{A}{\sqrt{k(x)}} \cos \left[ \left( \int_a^b k(x) dx - \frac{\pi}{2} \right) - \left( \int_x^b k(x) dx - \frac{\pi}{4} \right) \right] = \\ &= \frac{A}{\sqrt{k(x)}} \left[ \cos \left( \int_a^b k(x) dx - \frac{\pi}{2} \right) \cos \left( \int_x^b k(x) dx - \frac{\pi}{4} \right) - \right. \\ &\quad \left. - \sin \left( \int_a^b k(x) dx - \frac{\pi}{2} \right) \sin \left( \int_x^b k(x) dx - \frac{\pi}{4} \right) \right]. \end{aligned} \quad (7.21)$$

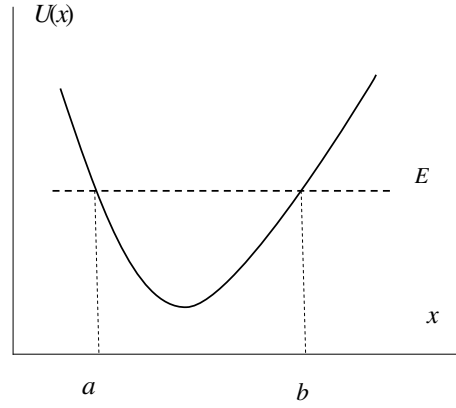


Рис. 7.2: К выводу правила квантования Бора – Зоммерфельда

Волновая функция должна стремиться к нулю при  $x > b$ , поэтому второе слагаемое в квадратных скобках должно равняться нулю. Отсюда находим условие

$$\int_a^b k(x)dx - \frac{\pi}{2} = \pi n. \quad (7.22)$$

Если ввести импульс вместо волнового числа, то получим

$$\int_a^b p(x)dx = \int_a^b \sqrt{2m[E - U(x)]}dx = \pi\hbar \left( n + \frac{1}{2} \right). \quad (7.23)$$

Это выражение называется *правилом квантования Бора – Зоммерфельда*. Оно было найдено примерно за 10 лет до создания квантовой механики и применено Н. Бором для нахождения уровней энергии электрона в атоме водорода.

Выражению (7.23) можно придать другую форму, если обратиться к понятию фазовой плоскости для системы с одной степенью свободы с координатами  $(p, x)$ . В классической механике частица, начав движение из точки  $a$  на рис. 7.2, достигает точки  $b$ , отражается и возвращается в точку  $a$ . Такому финитному движению на фазовой плоскости отвечает замкнутая кривая. Площадь, ограниченная этой кривой при заданной полной энергии частицы, равна  $\oint p dx = 2 \int_a^b p(x) dx$ . Отсюда можно угадать общий вид правила квазиклассического квантования для любой

пары обобщенных импульсов и координат  $(p, q)$ :

$$\oint pdq = 2\pi\hbar \left( n + \frac{1}{2} \right). \quad (7.24)$$

Эта формула показывает, что площадь фазового пространства для финитного классического движения квантуется. *Квант фазовой площади системы с одной степенью свободы равен  $2\pi\hbar$ .*

При нахождении нормировочного множителя у волновой функции дискретного спектра в квазиклассическом приближении следует учесть, что классически запрещенные области  $x < a$  и  $x > b$  на рис. 7.2 вносят экспоненциально малый вклад в нормировочный интеграл

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1.$$

Главный вклад набирается при интегрировании по интервалу  $a < x < b$ . Грубая оценка аргумента косинуса в (7.19) дает по порядку величины  $k(b-a) \sim kL$ , поскольку характерное расстояние  $L$ , на котором меняется потенциальная энергия, порядка  $b-a$ . В то же время из оценки интеграла (7.22) и из условия применимости квазиклассического приближения (7.9) следует соотношение  $kL \sim n \gg 1$ . Это неравенство показывает, что аргумент косинуса в (7.19) велик, поэтому при вычислении нормировочного множителя квадрат косинуса можно положить равным  $1/2$ . Отсюда получим:

$$1 \approx A^2 \int_a^b \frac{dx}{2k(x)} = \frac{A^2\hbar}{2} \int_a^b \frac{dx}{p(x)} = \frac{A^2\hbar}{2m} \int_a^b \frac{dx}{v(x)} = \frac{A^2\hbar T_0}{4m},$$

где  $T_0$  есть период классического финитного движения в потенциале рис. 7.2 с энергией  $E_n$ , найденной из (7.22). Если вместо  $T_0$  ввести частоту  $\omega_0 = 2\pi/T_0$  финитного движения, то для нормированной квазиклассической волновой функции при  $a < x < b$  получим выражение

$$\psi(x) = \left( \frac{2m\omega_0}{\pi\hbar k(x)} \right)^{1/2} \cos \left( \int_a^x k(x) dx - \frac{\pi}{4} \right). \quad (7.25)$$

Выражения в классически запрещенных областях получатся из (7.25) с помощью полученного выше правила перехода (7.19).

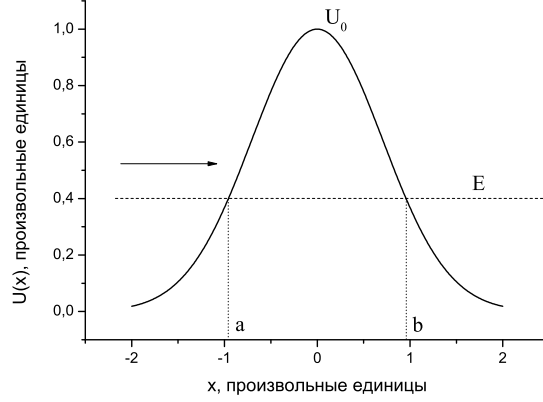


Рис. 7.3: Подбарьерное прохождение

## 7.4 Подбарьерное прохождение в квазиклассике

Рассмотрим квантовый эффект подбарьерного прохождения в квазиклассическом приближении, взяв потенциал вида рис. 7.3. Считаем, что  $E \ll U_0$ . Тогда вероятность подбарьерного прохождения будет мала. Пусть частицы падают слева, как это показано стрелкой на рис. 7.3. При вычислении коэффициента прохождения удобно начать с волновой функции прошедшей волны при  $x > b$ :

$$\psi(x) = \frac{B}{\sqrt{k}} \exp \left[ i \left( \int_b^x k dx - \frac{\pi}{4} \right) \right].$$

Здесь и далее аргумент у  $k$  и  $\kappa$  явно не выписывается. Поскольку  $e^{i\phi} = \cos \phi + i \sin \phi$ , то при продолжении в область барьера  $a < x < b$  косинус перейдет в падающую экспоненту, а синус – в растущую:

$$\begin{aligned} \psi(x) \rightarrow \frac{B}{\sqrt{\kappa}} \left[ \frac{1}{2} e^{-\int_x^b \kappa dx} - i e^{\int_x^b \kappa dx} \right] = \\ \frac{B}{\sqrt{\kappa}} \left[ \frac{1}{2} e^{-\int_a^b \kappa dx} e^{\int_a^x \kappa dx} - i e^{\int_a^b \kappa dx} e^{-\int_a^x \kappa dx} \right]. \end{aligned}$$



Но в рамках квазиклассического приближения экспоненциально малые слагаемые  $\sim e^{-\int_a^b \kappa dx}$  следует отбросить, и в области  $a < x < b$  с требуемой точностью будем иметь

$$\psi(x) = -\frac{iB}{\kappa^{1/2}} e^{\int_a^b \kappa dx} e^{-\int_a^x \kappa dx}.$$

Продолжение этой функции в область  $x < a$  приводит к волновой функции

$$\begin{aligned} \psi(x) = & -\frac{2iB}{k^{1/2}} e^{\int_a^b \kappa dx} \cos\left(\int_x^a k dx - \frac{\pi}{4}\right) = -iB e^{\int_a^b \kappa dx} \times \\ & \times \left[ \frac{1}{k^{1/2}} e^{i(\int_x^a k dx - \frac{\pi}{4})} + \frac{1}{k^{1/2}} e^{-i(\int_x^a k dx - \frac{\pi}{4})} \right] \end{aligned}$$

Выражение в квадратных скобках представляет собой линейную комбинацию падающей и отраженной волн в квазиклассическом приближении *с одинаковыми коэффициентами*. Следовательно, в принятом приближении коэффициент отражения равен единице,  $R \approx 1$ . С другой стороны, при постановке задачи о прохождении барьера требуется, чтобы нормировочный множитель при падающей волне был равен единице. Отсюда вытекает соотношение  $B = i e^{-\int_a^b \kappa dx}$  и, при выбранной нормировке падающей волны, выражение для коэффициента подбарьерного прохождения

$$T = |B|^2 = \exp\left(-2 \int_a^b \kappa(x) dx\right). \quad (7.26)$$

Противоречия с сохранением вероятности  $R+T = 1$  нет, поскольку в этом соотношении мы не имеем права удерживать экспоненциально малый вклад по сравнению с единицей. Вместе с тем при  $x > b$  экспоненциально малый вклад удерживать законно, поскольку там его нужно сравнивать с нулем.

## 7.5 Квазистационарные состояния

Рассмотренные до сих пор граничные условия при решении уравнения Шредингера включали, во-первых, стремление волновой функции к нулю на пространственной бесконечности и приводили к дискретному

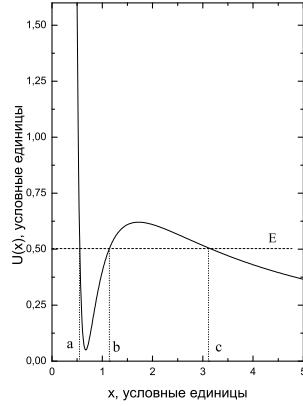


Рис. 7.4: Модельный потенциал, допускающий квазистационарные состояния

спектру энергий. Во-вторых, искомые решения в непрерывном спектре энергии в виде комбинации падающей и отраженной волной до барьера и с единственной прошедшей волной после барьера. Такая постановка позволяла найти коэффициенты прохождения и отражения. Совершенно другой класс задач возникает в случае потенциальной энергии, показанной на рис. 7.4. Граничным условием для такого потенциала является выходящая волна на пространственной бесконечности при условии, что проницаемость барьера мала.

Будем решать эту задачу в квазиклассическом приближении. Решение в области  $a < x < b$ , переходящее в затухающую экспоненту при  $x < a$ , имеет вид

$$\psi(x) = \frac{A}{\sqrt{k(x)}} \cos \left( \int_a^x k(x) dx - \frac{\pi}{4} \right). \quad (7.27)$$

Решение при  $x > c$ , в соответствие с поставленной задачей, имеет вид уходящей волны

$$\psi(x) = \frac{B}{\sqrt{k}} \exp \left[ i \left( \int_c^x k dx - \frac{\pi}{4} \right) \right]. \quad (7.28)$$

Решение в области барьера  $b < x < c$  можно получить как с помощью продолжения (7.27), так и (7.28). Если продолжить решение (7.27), то, с учетом (7.21) и правил перехода (7.19) и (7.20), получим при  $b < x < c$  выражение

$$\psi(x) = \frac{A}{\sqrt{\varkappa}} \left[ \frac{1}{2} e^{-\int_b^x \varkappa dx} \cos \left( \int_a^b k dx - \frac{\pi}{2} \right) - e^{\int_b^x \varkappa dx} \sin \left( \int_a^b k dx - \frac{\pi}{2} \right) \right].$$

С другой стороны, если продолжить в область барьера решение (7.28), получим

$$\psi(x) = \frac{B}{\sqrt{\varkappa}} \left[ \frac{1}{2} e^{-\int_b^c \varkappa dx + \int_b^x \varkappa dx} - i e^{\int_b^c \varkappa dx - \int_b^x \varkappa dx} \right].$$

Условием того, что в области барьера оба способа продолжения должны давать одинаковые выражения, является выражение

$$\operatorname{tg} \left( \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \int_a^b \sqrt{E - U(x)} dx - \frac{\pi}{2} \right) = -\frac{i}{4} e^{-2 \int_b^c \varkappa dx} \equiv -\frac{iT}{4}, \quad (7.29)$$

где  $\varkappa \equiv \varkappa(x) = \sqrt{2m[U(x) - E]}/\hbar$ , а  $T$  есть коэффициент прохождения потенциального барьера на рис. 7.4 в квазиклассическом приближении. Трансцендентное уравнение (7.29) решается методом последовательных приближений по величине проницаемости барьера. В нулевом приближении  $T = 0$ , и решение дается нулями тангенса в левой части:

$$\int_a^b \sqrt{2m [E_n^{(0)} - U(x)]} dx = \pi \hbar \left( n + \frac{\pi}{2} \right).$$

Как и следовало ожидать, уровни энергии в нулевом приближении такие же, как дискретные уровни в яме. В следующем приближении ищем решение в виде  $E = E_n^{(0)} + E^{(1)}$ , где  $|E^{(1)}| \ll E_n^{(0)}$ . С учетом этого получаем:

$$\begin{aligned} \int_a^b \sqrt{E - U} dx &= \int_a^b \sqrt{E_n^{(0)} - U + E^{(1)}} dx \approx \int_a^b \sqrt{E_n^{(0)} - U} dx + \\ &+ \frac{E^{(1)}}{2} \int_a^b \frac{dx}{\sqrt{E_n^{(0)} - U}} = \int_a^b \sqrt{E_n^{(0)} - U} dx + \\ &+ \frac{E^{(1)} T_0}{2\sqrt{2m}}, \end{aligned} \quad (7.30)$$

где  $U \equiv U(x)$ , а

$$T_0 = 2 \int_a^b \frac{dx}{v(x)} = \sqrt{2m} \int_a^b \frac{dx}{\sqrt{E_n^{(0)} - U}}$$

есть период классического движения внутри ямы на рис. 7.4. В правой части (7.29) в малую величину  $T$  следует подставить  $E = E_n^{(0)}$  в нулевом приближении. Подставив разложение (7.30) в левую часть (7.29) и разложив аргумент арктангенса по малой поправке  $E^{(1)}$ , получим для этой величины выражение

$$E^{(1)} = -i \frac{\hbar \omega_0 T}{4\pi} = -i \frac{\hbar}{2} \left( \frac{T}{T_0} \right), \quad (7.31)$$

в котором  $\omega_0 = 2\pi/T_0$  есть частота классического финитного движения в яме, выраженная через период  $T_0$  этого движения, а  $T$  обозначает коэффициент прохождения барьера на рис. 7.4. Таким образом, граничные условия к уравнению Шредингера в потенциале вида рис. 7.4 привели к *комплексным* значениям энергии

$$E = E_n^{(0)} - i \frac{\Gamma}{2},$$

где

$$\Gamma = \frac{\hbar T}{T_0} \equiv \frac{\hbar}{\tau} \quad (7.32)$$

есть *ширина*, выраженная через *время жизни*  $\tau$ . Выясним смысл таких названий. Поскольку энергия уровней приобрела мнимую часть, ее называют *квазиэнергией*, а уровни соответственно *квазиуровнями*. Если формально подставить квазиэнергию в выражение для волновой функции стационарного состояния  $\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$ , то получим

$$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-iE^{(0)}t/\hbar}e^{-\Gamma t/2\hbar}. \quad (7.33)$$

Для этой волновой функции плотность вероятности

$$\rho(x, t) = |\psi(x)|^2 e^{-\Gamma t/\hbar} = |\psi(x)|^2 e^{-t/\tau} \quad (7.34)$$

затухает с характерным временем

$$\tau = \frac{\hbar}{\Gamma},$$

которое и называется временем жизни состояния. Состояние с конечным временем жизни называется *квазистационарным состоянием*. Из (7.32) вытекает удобная интерпретация формулы для времени жизни состояния: время жизни равно периоду классического движения в локальном минимуме потенциала, деленному на вероятность подбарьерного туннелирования:  $\tau = T_0/T$ .

Предположим, что при  $t = 0$  создано квантовое состояние с волновой функцией  $\psi(x)$ , локализованной внутри локального минимума потенциала на рис. 7.4. Дальнейшая эволюция этого состояния будет происходить в соответствии с выражением (7.33). Вычислим распределение по энергии для квазистационарного состояния (7.33). Для этого нужно найти преобразование Фурье от волновой функции (7.33):

$$\Psi(x, E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty \Psi(x, t) e^{iEt/\hbar} dt = -i \sqrt{\frac{\hbar}{2\pi}} \frac{\psi(x)}{E - E_n^{(0)} + i\frac{\Gamma}{2}}. \quad (7.35)$$

Сразу же отметим, что вопрос о нормировке координатной волновой функции квазистационарного состояния  $\psi(x)$  далеко не прост, поскольку при  $x \rightarrow \infty$  эта волновая функция представляет собой уходящую волну и, строго говоря, ненормируема. Более того, координатная волновая функция квазистационарного состояния при  $x \rightarrow \infty$ ,  $\psi \sim e^{ikx}$ , растет экспоненциально из-за отрицательной мнимой добавки к волновому числу  $k = \sqrt{2m(E_n^{(0)} - i\Gamma/2)/\hbar}$ . Такой рост и означает уход на бесконечность частиц, первоначально локализованных в области минимума потенциала. Однако имеет смысл говорить о распределении по энергии  $\rho(E)$  при заданной плотности в координатном пространстве. Это распределение, нормированное условием

$$\int_{-\infty}^\infty dE \rho(E) = 1,$$

получается как квадрат модуля не содержащего  $\psi(x)$  множителя в (7.35):

$$\rho(E) = \frac{\Gamma/2\pi}{\left(E - E_n^{(0)}\right)^2 + \Gamma^2/4}.$$

График зависимости этой функции от  $E$  показан на рис. 7.5. Из этого графика очевиден смысл понятия *ширины уровня*  $\Gamma$ . При переходе к

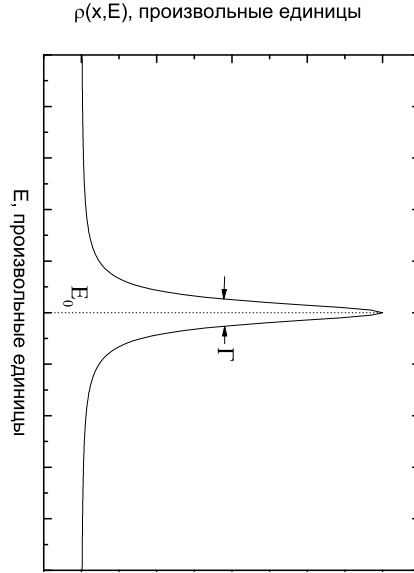


Рис. 7.5: Распределение по энергии для квазистационарного состояния (7.33)

пределу стационарного состояния  $\Gamma \rightarrow 0$ , как и следует, получим распределение вида  $\rho(E) = \delta(E - E_n^{(0)})$ .

Понятие ширины состояния имеет большое значение в физике. Например, в экспериментальной физике высоких энергий обнаружены короткоживущие частицы-резонансы со столь малым временем жизни  $\tau$ , что произведение скорости света на  $\tau$  по порядку величины равно размеру ядра  $R \sim 10^{-13}$  см. Это число означает, что такая частица не сможет оставить трек в любом из детекторов, основанном на наблюдении траекторий, например, в пузырьковой или искровой камерах. Новые частицы-резонансы рождаются при столкновении известных элементарных частиц. Можно менять энергию столкновений и изучать вероятность соответствующей реакции в зависимости от энергии сталкивающихся частиц. Если в такой зависимости обнаруживается пик вроде того, что показан на рис. 7.5, то это будет указывать на рождение короткоживущего резонансного состояния.

В физике атомов электроны на более высоких уровнях могут переходить на низколежащие уровни путем испускания фотонов. Тогда возбужденные уровни будут иметь конечную ширину, которая называется *естественной шириной* уровня. В реальных ситуациях эксперименталь-

ное измерение естественной ширины представляет очень трудную задачу из-за того, эта в измерениях проявляется ширина, связанная с наличием других физических процессов, вызванных столкновениями излучаемых атомов. Создание экспериментальных методов, с помощью которых можно было избавиться от нежелательных эффектов столкновений и попытаться достичь естественной ширины уровней, принесло заинтересованным исследователям несколько Нобелевских премий.

## 7.6 Физические проявления туннелирования

Исторически первым применением теории квазистационарных состояний было объяснение в 1928 г. Г. Гамовым энергетической зависимости времени жизни ядер относительно  $\alpha$ -распада, в котором тяжелое нестабильное ядро с зарядом  $Z$  и атомным весом  $A$  испускает  $\alpha$ -частицу (ядро атома гелия с атомным весом 4) с зарядом 2 и атомным весом 4. Из экспериментальных данных известно, что время жизни<sup>2</sup> относительно  $\alpha$ -распада для различных ядер меняется от долей секунды до нескольких миллиардов лет, т.е. более чем на семнадцать порядков величины.

Гамов предположил, что  $\alpha$ -частица с энергией  $E$  первоначально заперта внутри тяжелого ядра на расстояниях  $r \sim R = R_0 A^{1/3}$  за счет действия ядерных сил притяжения. Здесь  $R_0 \approx 1.3 \times 10^{-13}$  см,  $A \sim 200$  для тяжелых ядер. На расстояниях  $r > R$   $\alpha$ -частица испытывает действие кулоновского потенциала отталкивания  $U(r) = 2(Z - 2)e^2/r$ , где  $e = 4.8 \times 10^{-10}$  ед. СГСЭ есть величина элементарного заряда. На всем интервале изменения расстояний потенциальная энергия качественно имеет вид, показанный на рис. 7.4. Поэтому процесс  $\alpha$ -распада можно представить как процесс туннелирования  $\alpha$ -частицы через такой барьер. Рассчитать зависимость времени жизни от энергии  $\alpha$ -частицы предлагается в задаче 4 к этой главе.

Примечательно, что чисто квантовый эффект туннелирования в значительной степени отвечает за такое сугубо макроскопическое явление как астрофизический процесс производства энергии в звездах. В частности, это относится и к Солнцу, которое относится к классу звезд *главной*

---

<sup>2</sup>Формула распада  $N(t) = N_0 \exp(-t/\tau)$  связывает первоначальное число ядер вещества  $N_0$  с числом  $N(t)$  в произвольный момент времени  $t > 0$ . Временем жизни называется время  $\tau$ , за которое первоначальное количество радиоактивного вещества в  $e = 2.7128\ldots$  раз.

*последовательности.* В таких звездах сила гравитационного притяжения уравновешивается давлением  $P(r)$  газа электронов и протонов. В модели идеального газа можно получить оценку температуры внутри Солнца. Для оценки аппроксимируем точное уравнение гидростатического равновесия в сферически-симметричном случае,

$$\frac{dP}{dr} = -\frac{G_N M(r) \rho(r)}{r^2},$$

заменяв производную  $dP/dr$  на отношение  $P/R$  давления к радиусу звезды  $R$ , а зависящую от радиальной координаты  $r$  плотность – на отношение массы звезды  $M$  к кубу ее радиуса,  $\rho \sim M/R^3$ . Здесь и далее  $G_N$  обозначает постоянную тяготения. Получим условие равновесия в виде

$$P \sim \frac{G_N M^2}{R^4}.$$

Если, как отмечалось, равновесие поддерживается давлением идеального газа с уравнением состояния  $P = k_B n T \sim k_B T M / (m_p R^3)$ , то из выписанного условия равновесия получим оценку температуры:

$$T \sim \frac{G_N M m_p}{k_B R}.$$

Результат легко запомнить: температура внутри звезды главной последовательности по порядку величины равна потенциальной энергии протона с массой  $m_p$  на поверхности звезды, деленной на постоянную Больцмана  $k_B$ . Для Солнца  $R \sim 7 \times 10^{10}$  см,  $M \sim 2 \times 10^{33}$  г, откуда  $T \sim 2 \times 10^7$  К, или, в единицах энергии,  $2 \times 10^{-3}$  МэВ. Энергия в звездах главной последовательности выделяется в реакциях термоядерного синтеза легких элементов. Если взять два сталкивающихся протона с указанной энергией, то даже при лобовом столкновении они сойдутся самое малое на расстояние  $R_{\min} \sim e^2 / (k_B T) \sim 10^{-10}$  см, которое на три порядка превышает расстояние  $\sim 10^{-13}$  см, на котором становится возможной реакция термоядерного синтеза дейтерия из двух протонов  $p + p \rightarrow d + e^+ + \nu_e$ . Значит, в рамках классической физики невозможно понять, почему Солнце светит. За свечение Солнца отвечает квантовый эффект подбарьерного прохождения. Числовая оценка, предлагаемая в задаче 8 к этой главе, указывает на гораздо бóльшую вероятность квантового туннелирования по сравнению с вероятностью теплового возбуждения до необходимой энергии.



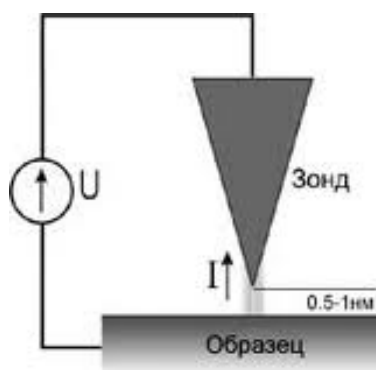


Рис. 7.6: Схема сканирующего туннельного микроскопа

Эффект квантового туннелирования находит применение в таком замечательном приборе как *сканирующий туннельный микроскоп*. Он представляет собой очень тонкую иглу, на которую подается напряжение. См. рис. 7.6. Электроны из проводящего образца могут туннелировать и создавать туннельный ток. Игла движется над поверхностью образца так, что специальная система обратной связи поддерживает при заданном напряжении постоянное значения тока за счет вертикального перемещения иглы. Тем самым прописывается профиль исследуемой поверхности. На рис. 7.7 показан рельеф поверхности плоского аллотропа углерода – *графена*, полученный с помощью сканирующего туннельного микроскопа. Чрезвычайная точность метода определяется экспоненциальной зависимостью тока от расстояния между острием и исследуемой поверхностью. В другом режиме можно поддерживать постоянное расстояние между острием и поверхностью и измерять зависимость туннельного тока от напряжения  $dI/dV$ . Эта дифференциальная характеристика прямо пропорциональна плотности энергетических уровней электронов в исследуемом образце.

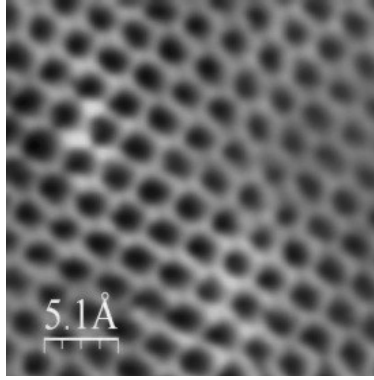


Рис. 7.7: Результат исследования поверхности графена методом сканирующей туннельной микроскопии

## 7.7 Задачи

1. Показать, что

$$[\hat{p}, U(\hat{x})] = -i\hbar \sum_{n=0}^{\infty} \frac{U^{(n+1)}(0)}{n!} \hat{x}^n.$$

2. Условие квазиклассического приближения (7.8) справедливо достаточно далеко от точки поворота, тогда как линейное приближение для потенциала – вблизи этой точки. Вместе с тем для вывода квазиклассических правил шивки требуется, чтобы области справедливости указанных условий пересекались. Показать, что действительно можно выбрать такие отклонения от точки поворота, при которых будут справедливы оба условия.
3. Найти уровни энергии и нормированные волновые функции гармонического осциллятора в квазиклассическом приближении. Получить отсюда асимптотику полиномов Эрмита  $H_n(x)$  при  $n \gg 1$ .
4. В квазиклассическом приближении найти уровни энергии и нормированные волновые функции частицы в однородном поле тяжести

$$U(z) = \begin{cases} \infty, & z \leq 0 \\ mgz, & z > 0. \end{cases}$$

В случае, когда частица является нейтроном с квантовым числом  $n = 10$ , численно найти глубину проникновения нейтрона в классически запрещенную область.

5. Пусть имеется постоянное однородное электрическое поле, приложенное вдоль оси  $x$  перпендикулярно плоской поверхности металлического образца. Найти зависимость плотности тока электронов  $j_x$  от напряженности поля. Работа выхода электронов из металла равна  $A$ .
6. Найти ширину уровней энергии частицы в поле вида

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x \leq 0 \\ G\delta(x - a), & x > 0 \end{cases},$$

предполагая, что  $mGa/\hbar^2 \gg 1$ .

7. Определить в квазиклассическом приближении уровни энергии частицы в яме вида  $U(x) = U_0(x^2/a^2 - 1)^2$  при условии малой проницаемости барьера  $E \ll U_0$ .
8. Вычислить время жизни ядра с  $Z = 92$  относительно  $\alpha$ -распада в зависимость от энергии вылетевшей  $\alpha$ -частицы. Во сколько раз изменится время жизни при изменении энергии от 2 до 1 МэВ?
9. Одной из термоядерных реакций в звездах является реакция  $p + p \rightarrow d + e^+ + \nu_e$ . Она возможна, если протонам удастся преодолеть кулоновский барьер и проникнуть в область действия ядерных сил притяжения на расстояния  $r < 10^{-13}$  см. Вычислить в квазиклассическом приближении вероятность подбарьерного проникновения в область указанных расстояний при центральном столкновении двух протонов с энергией, эквивалентной температуре  $10^7\text{K}$ ,  $10^8\text{K}$ . Сравнить эту вероятность с оценкой вероятности того, что нужная энергия будет достигнута на «хвосте» максвелловского распределения.
10. Используя правила квантования Бора – Зоммерфельда, определить число уровней в поле  $U(x) = -U_0 \text{ch}^{-4}(x/a)$ .

## Глава 8

# Момент импульса

Переход к реальным задачам в трех измерениях требует разработки аппарата момента импульса. Этому и посвящена настоящая глава.

### 8.1 Алгебра оператора момента

В классической механике орбитальный момент (момента импульса) определяется как *псевдовектор*  $\mathbf{L} = [\mathbf{r} \times \mathbf{p}]$ . В отличие от истинного вектора, меняющего знак при инверсии координат  $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ , псевдовектор не меняет знака. В квантовой механике появляется оператор орбитального момента  $\hat{\mathbf{L}} = [\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}]$  (6.11). Как было показано в главе 6, оператор  $\hat{\mathbf{L}}$  является генератором поворотов системы координат, т.е. задает правило преобразования волновой функции. Из канонических коммутационных соотношений  $[\hat{r}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$ , где  $\delta_{ij}$  есть символ Кронекера, вычисляются три коммутационных соотношения между декартовыми компонентами оператора орбитального момента. Их удобно представить в виде одного тензорного выражения для безразмерных операторов  $\hat{l}_i = \hat{L}_i/\hbar$ ,

$$[\hat{l}_i, \hat{l}_j] = i\epsilon_{ijk}\hat{l}_k, \quad (8.1)$$

если ввести антисимметричный по любой паре индексов символ Леви-Чивита  $\epsilon_{ijk}$ . При этом  $\epsilon_{xyz} = 1$ , и по повторяющимся индексам следует суммировать.

После получения коммутационных соотношений (8.1), следующих из явного вида операторов орбитального момента (6.11), можно поставить задачу о спектре псевдовекторного оператора  $\hat{\mathbf{j}}$ , который называется оператором *полного момента*, или просто момента, чьи компоненты удовлетворяют тем же коммутационным соотношениям (8.1) что и компоненты орбитального момента:

$$[\hat{j}_i, \hat{j}_l] = i\epsilon_{ilk}\hat{j}_k. \quad (8.2)$$

Далее станет ясно, что это не просто смена обозначений, а основа математического аппарата для описания такой важной сугубо квантовой физической величины как *спин*. Если орбитальный момент имеет классический предел, равный векторному произведению классических векторов координаты и импульса, то спин, как было показано в свое время автором этой концепции В. Паули, такого предела не имеет. Более подробно понятие спина будет рассматриваться ниже в главе 12.

Компоненты оператора момента не коммутируют друг с другом, но при этом справедливо равенство

$$[\hat{j}_i, \hat{j}^2] = 0. \quad (8.3)$$

Поэтому в качестве квантовых чисел, характеризующих вектор состояния, можно взять собственные значения оператора квадрата момента  $\hat{j}^2$  и собственные значения какой-то одной из его проекций. Обычно это оператор  $\hat{j}_z$ :

$$\begin{aligned} \hat{j}^2|\lambda, \mu\rangle &= \lambda|\lambda, \mu\rangle, \\ \hat{j}_z|\lambda, \mu\rangle &= \mu|\lambda, \mu\rangle. \end{aligned} \quad (8.4)$$

Задача состоит в том, чтобы найти спектр возможных значений  $\lambda$  и  $\mu$ . Вектор состояния, как обычно, предполагается ортонормированным:  $\langle\lambda', \mu'|\lambda, \mu\rangle = \delta_{\lambda\lambda'}\delta_{\mu\mu'}$ .

Введем два новых оператора  $\hat{j}_{\pm} = \hat{j}_x \pm i\hat{j}_y$ . Они удовлетворяют коммутационным соотношениям  $[\hat{j}_z, \hat{j}_{\pm}] = \pm\hat{j}_{\pm}$  и  $[\hat{j}_+, \hat{j}_-] = 2\hat{j}_z$ . Для выяснения смысла операторов  $\hat{j}_{\pm}$  найдем собственное значение оператора  $\hat{j}_z$  у состояния  $\hat{j}_{\pm}|\lambda, \mu\rangle$ :

$$\hat{j}_z\hat{j}_{\pm}|\lambda, \mu\rangle = (\hat{j}_{\pm}\hat{j}_z \pm \hat{j}_{\pm})|\lambda, \mu\rangle = (\mu \pm 1)\hat{j}_{\pm}|\lambda, \mu\rangle. \quad (8.5)$$

Это соотношение показывает, что действие  $\hat{j}_+$  ( $\hat{j}_-$ ) повышает (понижает) собственное значение  $\mu$  оператора  $\hat{j}_z$  на единицу. По этой причине указанные операторы называются *повышающим* (*понижающим*). Из (8.5)

следует, что  $\hat{j}_{\pm}|\lambda, \mu\rangle = C_{\pm}|\lambda, \mu \pm 1\rangle$ . Операция эрмитового сопряжения этого выражение дает  $\langle\lambda, \mu|\hat{j}_{\mp}$ . Квадрат модуля  $|C_{\pm}|^2$  находится из условия нормировки:

$$\begin{aligned}\langle\lambda, \mu|\hat{j}_{\mp}\hat{j}_{\pm}|\lambda, \mu\rangle &= \langle\lambda, \mu|\hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 \mp \hat{j}_z|\lambda, \mu\rangle = \langle\lambda, \mu|\hat{\mathbf{j}}^2 - (\hat{j}_z^2 \pm \hat{j}_z)|\lambda, \mu\rangle = \\ &= [\lambda - \mu(\mu \pm 1)]\langle\lambda, \mu|\lambda, \mu\rangle = |C_{\pm}|^2\langle\lambda, \mu \pm 1|\lambda, \mu \pm 1\rangle.\end{aligned}$$

Выбираю фазу равной нулю, отсюда находим  $C_{\pm} = \sqrt{\lambda - \mu(\mu \pm 1)}$ . Таким образом, получено, что

$$\hat{j}_{\pm}|\lambda, \mu\rangle = \sqrt{\lambda - \mu(\mu \pm 1)}|\lambda, \mu \pm 1\rangle. \quad (8.6)$$

С другой стороны, из условия положительной определенности оператора  $\hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2$  вытекает неравенство

$$0 \leq \langle\lambda, \mu|\hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2|\lambda, \mu\rangle = \langle\lambda, \mu|\hat{\mathbf{j}}^2 - \hat{j}_z^2|\lambda, \mu\rangle = (\lambda - \mu^2),$$

которое показывает, что при заданном  $\lambda$  величина  $\mu$  ограничена:  $\mu^2 \leq \lambda$ . Если бы  $\mu$  было совершенно произвольным, то, действуя достаточно много раз операторами  $\hat{j}_+$  или  $\hat{j}_-$  можно бы было достичь значений  $\mu$ , нарушающих выписанное неравенство. Отсюда сразу следует, что должны существовать такие числа  $\mu_{\max}$  и  $\mu_{\min}$ , что для них выполняются соотношения

$$\begin{aligned}\hat{j}_+|\lambda, \mu_{\max}\rangle &= 0, \\ \hat{j}_-|\lambda, \mu_{\min}\rangle &= 0,\end{aligned}$$

благодаря которым невозможно до бесконечности наращивать или уменьшать значения проекции момента  $\mu$ . отсюда и из (8.6) получаем два равенства  $\lambda - \mu_{\max}(\mu_{\max} + 1) = 0$  и  $\lambda - \mu_{\min}(\mu_{\min} - 1) = 0$ , которые связывают  $\mu_{\max}$  и  $\mu_{\min}$ :

$$\mu_{\max} = -\frac{1}{2} \pm \left( \mu_{\min} - \frac{1}{2} \right).$$

Решение со знаком  $+$  противоречит определению максимальной проекции, решение со знаком  $-$  дает соотношение  $\mu_{\min} = -\mu_{\max}$ . Если учесть, что действие оператора  $\hat{j}_+$  увеличивает  $\mu$  на единицу, то из равенства  $\mu_{\min} = -\mu_{\max}$  вытекает, что  $2\mu_{\max} = 0, 1, 2, \dots$ . Величину максимальной проекции момента на ось  $z$  принято обозначать буквой  $j$ . Из сказанного ясно, что

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$$

Квантовое число проекции момента на ось  $z$  обозначим буквой  $m_j$ . Оно принимает  $2j + 1$  значение  $-j, -j + 1, \dots, j - 1, j$  из интервала

$$-j \leq m_j \leq j.$$

В новых обозначениях действия операторов момента можно записать в виде соотношений

$$\begin{aligned}\hat{j}^2|j, m_j\rangle &= j(j+1)|j, m_j\rangle, \\ \hat{j}_z|j, m_j\rangle &= m_j|j, m_j\rangle, \\ \hat{j}_\pm|j, m_j\rangle &= \sqrt{j(j+1) - m_j(m_j \pm 1)}|j, m_j \pm 1\rangle.\end{aligned}\quad (8.7)$$

Векторы состояния ортонормированы:

$$\langle j', m'_j | j, m_j \rangle = \delta_{jj'} \delta_{m_j m'_j}. \quad (8.8)$$

Отсюда и из (8.7) можно найти явный вид матричных элементов операторов компонент момента импульса:

$$\begin{aligned}\langle j', m'_j | \hat{j}^2 | j, m_j \rangle &= j(j+1) \delta_{jj'} \delta_{m_j m'_j}, \\ \langle j', m'_j | \hat{j}_z | j, m_j \rangle &= m_j \delta_{jj'} \delta_{m_j m'_j}, \\ \langle j', m'_j | \hat{j}_\pm | j, m_j \rangle &= \sqrt{j(j+1) - m_j(m_j \pm 1)} \delta_{jj'} \delta_{m_j \pm 1, m'_j}.\end{aligned}\quad (8.9)$$

Алгебраический вывод выражений (8.7) не делает различия между орбитальным моментом и спином. Это различие возникает при построении собственных векторов для операторов момента. Из эксперимента следует, что возможны только целые значения орбитального момента. Как будет показано в следующем параграфе, действие операторов орбитального момента реализуется на непрерывных однокомпонентных функциях угловых переменных  $\theta$  и  $\phi$ . Значения спина могут быть как целыми, так и полуцелыми. Действие операторов спина, как будет показано в главе 12, реализуется на особых объектах, называемых *спинорами*. При данном спине  $s$  должно быть  $2s + 1$  комплексных, вообще говоря, компонент спинора, описывающих состояния с различными проекциями спина на ось  $z$ .

## 8.2 Угловые волновые функции

Уравнение Шредингера (2.1) содержит *одну* комплексную волновую функцию  $\Psi$ . Из сказанного выше очевидно, что оно описывает частицу со спином нуль. Однако состояния трехмерного движения могут обладать ненулевым орбитальным моментом. Перейдем к описанию этих состояний. Для этого надо реализовать операторные соотношения (8.7) на функциях углов сферической системы координат, взяв в качестве операторов компонент орбитального момента их выражения  $\hat{\mathbf{L}}/\hbar = \hat{\mathbf{l}} = -i[\mathbf{r} \times \nabla]$ :

$$\begin{aligned}\hat{l}_x &= -i \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \\ \hat{l}_y &= -i \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right), \\ \hat{l}_z &= -i \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right).\end{aligned}$$

После этого декартовы координаты и производные по ним следует выразить через сферические координаты

$$\begin{aligned}x &= r \sin \theta \cos \phi, \\ y &= r \sin \theta \sin \phi, \\ z &= r \cos \theta.\end{aligned}$$

Прямое, хотя и несколько длинное вычисление, приводит к выражениям:

$$\begin{aligned}\hat{l}_{\pm} &= e^{\pm i\phi} \left( \pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right), \\ \hat{l}_z &= -i \frac{\partial}{\partial \phi}, \\ \hat{l}^2 &= - \left[ \frac{1}{\sin \theta} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right].\end{aligned}\tag{8.10}$$

Угловые волновые функции  $Y_{l,m_l}(\theta, \phi)$ , на которые должны действовать операторы (8.10), получаются проектированием вектора состояния  $|l, m_l\rangle$



с определенным орбитальным моментом  $l$  и проекцией на ось  $z$ , равной  $m_l$ , на вектор состояния  $|\theta, \phi\rangle$  с определенными угловыми координатами:  $Y_{l,m_l}(\theta, \phi) = \langle \theta, \phi | l, m_l \rangle$ . Они называются *сферическими гармониками* или *сферическими функциями*. Если условие полноты векторов состояния  $|\theta, \phi\rangle$ ,

$$\int |\theta, \phi\rangle \langle \theta, \phi| d\Omega = 1$$

подставить в условие ортонормированности  $\langle l', m'_l | l, m_l \rangle = \delta_{l'l} \delta_{m'_l m_l}$ , то получим условие ортонормированности сферических функций:

$$\int Y_{l',m'_l}^*(\theta, \phi) Y_{l,m_l}(\theta, \phi) d\Omega = \delta_{l'l} \delta_{m'_l m_l}. \quad (8.11)$$

В выписанных выражениях  $d\Omega = \sin \theta d\theta d\phi$  есть дифференциальный элемент телесного угла. В соответствии с одним из основных постулатов квантовой механики, выражение  $|Y_{l,m_l}(\theta, \phi)|^2 d\Omega$  есть вероятность того, что частица с орбитальным моментом  $l$  и проекцией на ось  $z$ , равной  $m_l$ , окажется в элементе  $d\Omega$  телесного угла, заданного сферическими углами  $\theta$  и  $\phi$ . Эта величина называется *угловым распределением*.

Уравнения для нахождения явного вида сферических функций получаются из первых двух операторных выражений (8.7) с помощью замен  $j \rightarrow l$ ,  $m_j \rightarrow m_l$  и умножением слева на бра-вектор состояния  $\langle \theta, \phi |$ :

$$\begin{aligned} - \left[ \frac{1}{\sin \theta} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial Y_{l,m_l}}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y_{l,m_l}}{\partial \phi^2} \right] &= l(l+1) Y_{l,m_l}, \\ -i \frac{\partial Y_{l,m_l}}{\partial \phi} &= m_l Y_{l,m_l}. \end{aligned} \quad (8.12)$$

Решение этих уравнений можно искать методом разделения переменных:  $Y_{l,m_l} = \Phi(\phi) \Theta(\theta)$ . Из второго уравнения (8.12) сразу получаем нормированное решение для зависимости от азимутального угла  $\phi$ :

$$\Phi(\phi) \equiv \Phi_{m_l}(\phi) = \frac{e^{im_l \phi}}{\sqrt{2\pi}}. \quad (8.13)$$

Первое уравнение (8.12) даст уравнение для так называемых *присоединенных полиномов Лежандра*  $\Theta_{l,m_l}(\theta)$ :

$$-\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d\Theta_{l,m_l}}{d\theta} \right) + \frac{m_l^2}{\sin^2 \theta} \Theta_{l,m_l} = l(l+1) \Theta_{l,m_l}.$$

Но формальное решение этого уравнения мало что дает для выяснения зависимости волновой функции от полярного угла  $\theta$ , поэтому удобнее другой путь, который позволит получить выражение для  $Y_{l,m_l}(\theta, \phi)$  для любых частных значений  $l, m_l$ .

Поскольку значение максимальной проекции  $(m_l)_{\max} = l$ , то  $\hat{l}_+ Y_{l,l} = 0$ . Отсюда сразу получаем уравнение

$$\begin{aligned}\hat{l}_+ Y_{l,l} &= \hat{l}_+ (e^{il\phi} \Theta_{l,l}) = e^{i\phi} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) (e^{il\phi} \Theta_{l,l}) = \\ &= e^{i\phi} \left( \frac{d\Theta_{l,l}}{d\theta} - l \cot \theta \Theta_{l,l} \right) = 0.\end{aligned}$$

Его решение имеет вид

$$\Theta_{l,l}(\theta) \propto \sin^l \theta, \quad (8.14)$$

откуда получается нормированная сферическая функция для максимальной проекции:

$$Y_{l,l}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{(2l+1)!!}{4\pi(2l)!!}} e^{il\phi} \sin^l \theta. \quad (8.15)$$

Остальные из полного числа  $2l+1$  сферических функции с проекцией  $m_l < l$  получаются из (8.15) действием оператора  $\hat{l}_-$  нужное число раз:

$$Y_{l,m_l}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{(j+m_l)!}{(2l)!(l-m_l)!}} (\hat{l}_-)^{l-m_l} Y_{l,l}(\theta, \phi).$$

Происхождение квадратного корня из факториальных множителей прослеживается от третьего выражения в (8.7).

Воспользовавшись приведенным алгоритмом, получим в качестве примера сферические функции для орбитальных моментов  $l=0$  и  $l=1$ .

- $l=0$ . В этом случае  $Y_{0,0} = 1/\sqrt{4\pi}$ . Угловое распределение *изотропно* – плотность вероятности не зависит от углов.
- $l=1$ . Из формулы (8.15) сразу находим

$$Y_{1,1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{i\phi} \sin \theta.$$

Из выражения  $\hat{l}_- Y_{1,1} = \sqrt{2} Y_{1,0}$  получаем:

$$Y_{1,0} = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\phi} \left( -\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{i\phi} \sin \theta = -\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta.$$

Из формулы  $\hat{l}_- Y_{1,0} = \sqrt{2} Y_{1,-1}$  находим

$$Y_{1,-1} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{-i\phi} \sin \theta.$$

Выбор фазовых множителей у сферических функций является делом соглашения, поскольку условия ортонормированности от фазы не зависят. Наиболее употребительным соглашением является условие  $Y_{l,m_l}^* = (-1)^{l-m_l} Y_{l,-m_l}$ , из которого следует, что все приведенные выше выражения для  $Y_{1,m}$  следует умножить на  $(-i)$ . В ряде случаев бывает полезно представить сферические гармоники в виде линейных комбинаций произведений компонент единичного вектора  $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$  в сферической системе координат. При  $l = 1$  эти выражения имеют вид

$$\begin{aligned} \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi} &= \sqrt{\frac{3}{8\pi}} (n_x \pm i n_y), \\ \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} n_z. \end{aligned}$$

Из явного выражения для сферических функций можно найти пространственную четность состояний с определенным орбитальным моментом. Операция пространственной инверсии определяется как преобразование  $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}' = -\mathbf{r}$ ,

$$\hat{P}\psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r}).$$

Если состояние обладает определенной четностью, то  $\hat{P}\psi = P\psi$ . Двукратное применение оператора пространственной четности  $\hat{P}$  является тождественным преобразованием, поэтому  $P^2 = 1$ ,  $P = \pm 1$ . В сферических координатах инверсии координат отвечает преобразование  $\theta' = \pi - \theta$ ,  $\phi' = \phi + \pi$ ,  $r' = r$ . При таком преобразовании сферическая функция с максимальной проекцией преобразуется как  $Y_{l,l}(\theta, \phi) \rightarrow Y_{l,l}(\pi - \theta, \phi + \pi) \sim e^{il(\phi+\pi)} \sin^l(\pi - \theta) = (-1)^l e^{il\phi} \sin^l \theta \sim (-1)^l Y_{l,l}(\theta, \phi)$ . Четность состояния с максимальной проекцией равна  $(-1)^l$ . Состояния с меньшей проекцией

получаются из  $Y_{l,l}$  действием оператора  $\hat{l}_-$ . Поскольку  $[\hat{l}_-, \hat{l}^2] = 0$ , а собственные значения  $\hat{l}^2$  равны  $l(l+1)$ , то действие  $\hat{l}_-$  не меняет четности состояния с определенным орбитальным моментом. Отсюда следует, что для любых проекций момента  $m_l$  четность сферических функций равна

$$P = (-1)^l. \quad (8.16)$$

По историческим причинам квантовые состояния с  $l = 0$  называются *s*-состояниями, состояния с  $l = 1$  – *p*-состояниями, состояния с  $l = 2$  – *d*-состояниями, состояния с  $l = 3$  – *f*-состояниями.

### 8.3 Задачи

1. Найти коммутаторы  $[\hat{l}_i, \hat{r}_i]$ ,  $[\hat{l}_i, \hat{p}_i]$ .
2. Показать, что  $[\hat{j}_i, \hat{j}^2] = 0$ .
3. Вывести выражения (8.10).
4. Вычислить  $\langle j, m | \hat{j}_{x,y}^2 | j, m \rangle$ ,  $\langle j, m | \hat{j}_x \hat{j}_y | j, m \rangle$ .
5. Частица с моментом  $j = 1$  находится в состоянии  $|\psi\rangle = \alpha|1, +1\rangle + \beta|1, 0\rangle + \gamma|1, -1\rangle$ . Вычислить средние значения трех декартовых компонент оператора момента и их квадратов в этом состоянии.
6. Получить нормированные сферические функции для  $l = 2$ . Найти представление  $Y_{2,m}$  в виде линейных комбинаций произведений компонент единичного вектора  $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$ .
7. Изобразить пространственные распределения  $|Y_{1,m}|^2$ ,  $|Y_{2,m}|^2$ ,  $|Y_{l,l}|^2$  при  $l \gg 1$ .
8. Найти коэффициенты линейной комбинации сферических функций  $\psi = C_0 Y_{0,0} + \sum_{m=-1}^1 C_m^{(1)} Y_{1,m}$ , такие, что  $\int \psi^*(\mathbf{r}/r) \psi d\Omega = \mathbf{e}$ , где  $\mathbf{e}$  есть наперед заданный единичный вектор.

9. Плоский ротатор при классическом рассмотрении можно представлять как две вращающиеся массы, соединенные невесомым стержнем. При квантовом рассмотрении он представляет из себя систему с гамильтонианом  $\hat{H} = \hat{L}_z^2/2I$ , где величина  $I$  есть момент инерции. Найти уровни энергии и нормированные волновые функции плоского ротатора.
10. Плоский ротатор при  $t = 0$  находится в состоянии с волновой функцией  $\psi(\varphi) = Ae^{i\varphi} \cos^2 \varphi$ . Найти волновую функцию в произвольный момент времени  $t$ . Вычислить вероятности обнаружить собственные значения оператора  $\hat{L}_z$  в указанном состоянии и по ним найти средние значения  $\langle \hat{L}_z \rangle$  и  $\langle \hat{L}_z^2 \rangle$ .

## Глава 9

# Центральное поле

### 9.1 Задача двух взаимодействующих частиц

Допустим, что имеется система из двух частиц с массами  $m_1, m_2$  и координатами  $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ . Пусть внешнее поле отсутствует, а частицы взаимодействуют посредством потенциала  $U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ . Зависимость потенциальной энергии от разности радиус-векторов следует из пространственной однородности системы. Для нахождения стационарных состояний с энергией  $E_{\text{tot}}$  необходимо решать уравнение Шредингера

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_{\mathbf{r}_1}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_{\mathbf{r}_2}^2 + U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \right] \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E_{\text{tot}} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2),$$

где  $\nabla_{\mathbf{r}_1}$  и  $\nabla_{\mathbf{r}_2}$  обозначают градиенты по координатам частиц 1 и 2 соответственно. Если ввести радиус-вектор центра масс  $\mathbf{R}$  и радиус-вектор относительного положения двух частиц  $\mathbf{r}$  согласно выражениям

$$\begin{aligned} \mathbf{R} &= \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}, \\ \mathbf{r} &= \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \end{aligned}$$

то в этих новых переменных уравнение Шредингера

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}}^2 + U(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = E_{\text{tot}} \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}),$$

где  $\nabla_{\mathbf{R}}$  и  $\nabla_{\mathbf{r}}$  обозначают градиенты соответственно по координатам центра масс и относительным координатам,  $M = m_1 + m_2$ ,

$$m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

есть соответственно полная и приведенная массы. Если искать решение в виде  $\psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \Phi(\mathbf{R})\psi(\mathbf{r})$ , то для волновых функций центра масс  $\Phi(\mathbf{R})$  и относительного движения  $\psi(\mathbf{r})$  получаются соответственно уравнения

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_{\mathbf{R}}^2\Phi(\mathbf{R}) = E_{\text{c.m.s}}\Phi(\mathbf{R}) \quad (9.1)$$

и

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_{\mathbf{r}}^2 + U(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad (9.2)$$

а полная энергия системы двух частиц  $E_{\text{tot}} = E_{\text{c.m.s}} + E$ . Нетривиальная динамика имеет место лишь для относительного движения двух частиц и дается решением уравнения Шредингера (9.2). Предел уравнения (9.2), когда масса одной из взаимодействующих частиц стремится к бесконечности, отвечает случаю задачи одной частицы во внешнем поле с потенциальной энергией  $U(\mathbf{r})$ . Далее будет предполагаться, что рассматривается именно этот предел.

## 9.2 Уравнение Шредингера в центральном поле

Пусть потенциальная энергия поля не зависит от углов,  $U \equiv U(r)$ , где  $r = |\mathbf{r}|$ . Такое поле называется *центрально-симметричным* или *центральной*. Гамильтониан  $\hat{H}$  частицы в центральном поле коммутирует со всеми компонентами оператора орбитального момента и, как следствие, с квадратом этого оператора  $\hat{l}^2$ . Вместе с  $\hat{l}_z$  операторы  $\hat{H}$  и  $\hat{l}^2$  образуют полный набор. В сферических координатах уравнение Шредингера для волновой функции  $\psi \equiv \psi(r, \theta, \phi)$  в центральном поле,

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}\right] + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0,$$

допускает разделение переменных  $\psi = R(r)Y_{l,m_l}(\theta, \phi)$ . Последняя строка в (8.10) говорит, что в выписанном выше уравнении дифференциальный оператор в квадратных скобках равен  $-\hat{l}^2$ , и поэтому  $-\hat{l}^2 Y_{l,m_l} = l(l+1)Y_{l,m_l}$ . С учетом этого для *радиальной волновой функции*  $R \equiv R(r)$  получается обыкновенное дифференциальное уравнение

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} \left[ E - U(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] R = 0.$$

Если выразить  $R$  через новую функцию  $\chi(r)$  согласно  $R = \chi/r$ , то для новой функции получится уравнение

$$\frac{d^2 \chi}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[ E - U(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] \chi = 0, \quad (9.3)$$

которое по форме буквально повторяет одномерное уравнение Шредингера

$$\frac{d^2 \chi}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_{\text{eff}}) \chi = 0$$

с эффективным потенциалам

$$U_{\text{eff}} = U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}.$$

Второе слагаемое в этом выражении иногда называют *центробежным барьером*. Для того, чтобы  $R$  была конечна при  $r = 0$ , требуется выполнение условия

$$\chi(0) = 0. \quad (9.4)$$

Найдем решение радиального уравнения (9.3) для свободной частицы. Полагая  $U = 0$  и вводя  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ , получим уравнение вида

$$\frac{d^2 \chi}{dr^2} + \left( k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \chi = 0.$$

Его общее решение

$$\chi(r) = \sqrt{r} [AJ_{l+1/2}(kr) + BN_{l+1/2}(kr)]$$

выражается через комбинацию функций Бесселя и Неймана. Их асимптотики при  $r \rightarrow 0$  имеют соответственно вид  $\sqrt{r}J_{l+1/2}(kr) \sim (kr)^{l+1}$ ,



$\sqrt{r}N_{l+1/2}(kr) \sim (kr)^{-l}$ . Граничное условие (9.4) требует, чтобы  $B = 0$ , поэтому решение, удовлетворяющее граничному условию, имеет вид  $\chi = AJ_{l+1/2}(kr)$ . Его асимптотика при  $r \rightarrow \infty$  следует из (7.15):

$$\chi \sim \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right).$$

Если  $U(r) \neq 0$ , то асимптотический вид решений можно установить при некоторых предположениях относительно зависимости потенциальной энергии от  $r$ . Пусть при  $r \rightarrow 0$   $U$  растет медленнее, чем центробежный барьер  $r^{-2}$ . Тогда потенциальной энергией можно пренебречь, и асимптотика при малых  $r$  останется такой же как при  $U = 0$ :  $\chi \sim r^{l+1}$ ,  $R \sim r^l$ .

Если при  $r \rightarrow \infty$  потенциальная энергия уменьшается быстрее чем центробежный барьер, то ей можно пренебречь, и решение должно быть близко к решению свободного уравнения Шредингера. Однако эффекты взаимодействия с полем не исчезнут совсем, а проявятся в виде сдвига фазы  $\delta_l$  у свободной волновой функции:

$$\chi(r) \sim \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l\right). \quad (9.5)$$

Оказывается, что такая важная физическая величина как *сечение рассеяния*, полностью выражается через фазу  $\delta_l$ .

### 9.3 Спектр атома водорода

Связанное состояние протона и электрона называется *атомом водорода*. Найдем уровни энергии этой системы, решив радиальное уравнение Шредингера (9.3) в кулоновском поле  $U(r) = -e^2/r$ :

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[ E + \frac{e^2}{r} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] \chi = 0.$$

Поскольку  $m_e/m_p \sim 10^{-3}$ , то приведенная масс атома водорода

$$\frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \approx m_e$$

с такой же точностью равна массе электрона. В кулоновском поле притяжения энергии связанных состояний отрицательны. Введем безразмерные величины радиальной координаты  $\rho$ ,

$$r = \rho a_B$$

где  $a_B = \hbar^2/m_e e^2 = 0.5 \times 10^{-8}$  см есть боровский радиус, и энергии  $\epsilon$ ,

$$E = -E_0 \epsilon,$$

где  $E_0 = m_e e^4 / 2\hbar^2 = e^2 / 2a_B = 13.6$  эВ. Эта энергия называется *Ридберга*:

$$1\text{Ry} = \frac{m_e e^4}{2\hbar^2}.$$

В новых переменных уравнение для  $\chi \equiv \chi(\rho)$  принимает вид

$$\frac{d^2 \chi}{d\rho^2} + \left[ -\epsilon + \frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] \chi = 0. \quad (9.6)$$

Вначале найдем асимптотики решения, удовлетворяющие граничным условиям  $\chi(\infty) = 0$ ,  $\chi(0) = 0$ . При  $\rho \rightarrow \infty$  уравнение принимает вид  $\chi'' - \epsilon \chi = 0$  и имеет решение  $\chi \sim e^{-\sqrt{\epsilon} \rho}$ . Экспоненциально растущее решение не удовлетворяет граничному условию  $\chi(\infty) = 0$ . Для получения асимптотики решения при  $\rho \rightarrow 0$  оставляем только слагаемые с производной и  $\propto \rho^{-2}$  и приходим к уравнению  $\chi'' - l(l+1)\chi/\rho^2 = 0$ . Его решение ищется в виде  $\chi \propto \rho^\nu$ . Подстановка в предыдущее уравнение дает уравнение  $\nu^2 - \nu = l(l+1)$ , откуда  $\nu = l+1$ ,  $-\nu = -l$ . Асимптотика общего решения при  $\rho \rightarrow 0$  имеет вид  $\chi = c_1 \rho^{l+1} + c_2 \rho^{-l}$ . Граничное условие  $\chi(0) = 0$  требует выполнения равенства  $c_2 = 0$ .

При поиске точного решения уравнения (9.6) выделяем найденные асимптотики в явном виде:  $\chi = \rho^{l+1} e^{-\sqrt{\epsilon} \rho} f$ . Для неизвестной функции  $f \equiv f(\rho)$  получается уравнение

$$f'' + 2 \left( \frac{l+1}{\rho} - \sqrt{\epsilon} \right) f' + 2 \frac{1 - \sqrt{\epsilon}(l+1)}{\rho} f = 0.$$

Поиск решение в виде ряда  $f = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \rho^k$  приводит к рекуррентному соотношению

$$c_{k+1} = 2 \frac{(k+l+1)\sqrt{\epsilon} - 1}{(k+1)(k+2l+2)} c_k. \quad (9.7)$$

Допустим вначале, что значение  $\sqrt{\epsilon}$  произвольно. Тогда суммирование по  $k$  распространяется на сколь угодно большие значения  $k \gg 1$ . В этом пределе можно получить асимптотическую оценку  $f(\rho)$ . Действительно, пренебрегая в рекуррентном соотношении всеми конечными целыми числами по сравнению с  $k$ , получим асимптотическую оценку  $c_{k+1} \sim 2\sqrt{\epsilon}c_k/k$ . Решением этого рекуррентного соотношения является выражение  $c_k \sim (2\sqrt{\epsilon})^k/k!$ . Отсюда следует асимптотическая оценка

$$f(\rho) \sim \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2\sqrt{\epsilon})^k}{k!} \rho^k = e^{2\sqrt{\epsilon}\rho}.$$

Соответствующая радиальная волновая функция  $R \propto \rho^l e^{-\sqrt{\epsilon}\rho} f(\rho) \sim \rho^l e^{\sqrt{\epsilon}\rho}$  не удовлетворяет граничному условию стремления к нулю при  $\rho \rightarrow \infty$ . Следовательно, ряд для  $f(\rho)$  должен обрываться при некотором целом значении  $k = n_r = 0, 1, \dots$  таком, чтобы удовлетворялось соотношение  $(n_r + l + 1)\sqrt{\epsilon} - 1 = 0$ , а функция  $f$  превратилась в полином степени  $n_r$ . Отсюда следует, что  $\epsilon = 1/(n_r + l + 1)^2$ , и энергия квантована:

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2(n_r + l + 1)^2} \equiv -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2 n^2}. \quad (9.8)$$

Целое число

$$n = n_r + l + 1 = 1, 2, 3, \dots \quad (9.9)$$

называется *главным квантовым числом*, тогда как  $n_r = 0, 1, 2, \dots$  называется *радиальным квантовым числом*. При заданном значении главного квантового числа  $n$  допустимые значения квантового числа орбитального момента  $l = n - 1 - n_r$  попадают в интервал  $0 \leq l \leq n - 1$ .

Поскольку кулоновские уровни энергии (9.8) в конечном счете зависят лишь от главного квантового числа  $n$  и, при заданном  $n$ , не зависят от  $l$ , то имеется вырождение. При заданном  $l$  есть имеется  $2l + 1$  состояний, различающихся проекцией орбитального момента  $-l \leq m_l \leq l$ , от которой энергия также не зависит. Следовательно, кратность вырождения уровня с данным  $n$  равна

$$g_n = \sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2. \quad (9.10)$$

Волновые функции  $\psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \phi)$  связанных состояний электрона в атоме водорода ортонормированы:

$$\int \psi_{n',l',m'_l}^*(r, \theta, \phi) \psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \phi) r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi = \delta_{n,n'} \delta_{l,l'} \delta_{m_l,m'_l}.$$

С учетом ортонормированности сферических функций отсюда следует условие ортонормированности радиальных функций с *одинаковыми* орбитальными моментами

$$\int_0^\infty R_{n',l}(r) R_{n,l}(r) r^2 dr = \int_0^\infty \chi_{n',l}(r) \chi_{n,l}(r) r^2 dr = \delta_{n,n'}. \quad (9.11)$$

Получим явный вид волновых функций основного  $n = 1$  и первого возбужденного  $n = 2$  состояний электрона в атоме водорода.

- Основное состояние  $n = 1$ . Здесь  $\epsilon = 1$ , и энергия этого состояния равна

$$E_1 = -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2}.$$

При  $n = 1$  возможно только  $s$ -состояние с  $l = 0$ , радиальное квантовое число  $n_r = 0$ . Функция  $f(r)$  сводится к константе, поэтому нормированная условием (9.11) радиальная функция есть  $R_{1,0} = 2e^{-r/a_B}/a_B^{3/2}$ , а полная волновая функция основного состояния равна

$$\psi_{1,0,0}(\mathbf{r}) = \frac{e^{-r/a_B}}{\sqrt{\pi a_B^3}}. \quad (9.12)$$

Плотность вероятности  $|\psi_{1,0,0}(\mathbf{r})|^2$  не зависит от углов, поэтому пространственное распределение электронов представляет собой шарик с характерным радиусом  $a_B$ .

- Первое возбужденное состояние  $n = 2$ . Здесь  $\epsilon = 1/4$ , поэтому энергия равна

$$E_2 = -\frac{m_e e^4}{8\hbar^2}.$$

При  $n = 2$  возможны  $s$ -состояние с  $l = 0$ , радиальное квантовое число  $n_r = 1$ , и три  $p$ -состояния с  $l = 1$ ,  $m = \pm 1, 0$ , радиальное квантовое число  $n_r = 0$ . Для  $p$ -состояний функция  $f$  сводится к

константе, поэтому  $R_{2,1} \propto r e^{-r/2a_B}$ . Нормированная волновая функция трех  $p$ -состояний ( $m = 1, 0, -1$ ) имеет вид

$$\psi_{2,1,m}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{24a_B^3}} \left( \frac{r}{a_B} \right) e^{-r/2a_B} Y_{1,m}(\theta, \phi). \quad (9.13)$$

В случае  $s$ -состояние радиальное квантовое число  $n_r = 1$ , поэтому  $f(\rho) = c_0 + c_1\rho$ . Из рекуррентного соотношения (9.7) при  $\epsilon = 1/4$  находим, что  $c_1 = -c_0/2$ , где  $c_0$  находится из условия нормировки. В итоге нормированная волновая функция  $s$ -состояния принимает вид

$$\psi_{2,0,0}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{8\pi a_B^3}} \left( 1 - \frac{r}{2a_B} \right) e^{-r/2a_B}.$$

Она отлична от нуля в начале координат и имеет нуль (узел) при  $r = 2a_B$ .

Кулоновская картина уровней энергии атома водорода является приближенной. Имеется ряд поправок к уровням (9.8) за счет релятивистских эффектов, эффектов конечных размеров ядра и эффектов виртуального рождения и аннигиляции электрон-позитронных пар, которые снимают кулоновское вырождение уровней с одинаковым орбитальным моментом. Из перечисленных эффектов в свое время будет обсуждаться лишь релятивистская поправка. Полное рассмотрение всех указанных эффектов выходит за рамки курса.

В заключение этого параграфа сделаем замечание о квазиклассическом приближении для центрального поля. Хотя уравнение (9.3) имеет вид одномерного уравнения Шредингера, буквальное использование формул квазиклассического приближения невозможно из-за того, что центробежный потенциал  $\propto r^{-2}$  нарушает условие применимости этого приближения. Примем без доказательства, что для приложения квазиклассики к задачам в центральном поле следует произвести замену  $l(l+1) \rightarrow l^2 + l + 1/4 = (l + 1/2)^2$  (так называемая *поправка Лангера*) в выражении для центробежного барьера:

$$\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \rightarrow \frac{\hbar^2 (l + 1/2)^2}{2mr^2}.$$

Тогда правило квантования Бора – Зоммерфельда приобретает вид

$$\sqrt{2m} \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} \sqrt{E - U(r) - \frac{\hbar^2 (l + 1/2)^2}{2mr^2}} dr = \pi \hbar \left( n_r + \frac{\pi}{2} \right). \quad (9.14)$$

Здесь  $r_{\min}$  и  $r_{\max}$  суть классические точки поворота,  $n_r$  – радиальное квантовое число. Рассмотрение  $s$ -состояний в квазиклассическом приближении требует более тонкого анализа для конкретного вида потенциала  $U(r)$ , поскольку квазиклассические выражения для волновых функций вблизи  $r = 0$  могут оказаться неприменимы.

## 9.4 Задачи

1. Определить нормировочный коэффициент у радиальной волновой функции свободной частицы, исходя из условия  $\int_0^\infty R_{k',l} R_{k,l} r^2 dr = \delta(k - k')$ .
2. Найти нормированные волновые функции и уровни энергии  $s$ -состояний частицы в поле  $U(r) = -G\delta(r - a)$ .
3. Рассмотрим модель дейтрона как связанного состояния протона и нейтрона, взаимодействующих за счет центрально-симметричного потенциала в виде прямоугольной ямы радиуса  $a = 1.7 \times 10^{-13}$  см. Глубина ямы  $U_0$ . Известно, что энергия связи дейтрона равна  $|E_d| = 2.2$  МэВ. Предполагая, что это связанное состояние является мелким ( $|E_d| \ll U_0$ )  $s$ -волновым уровнем, вычислить необходимую глубину ямы  $U_0$ . Рассчитать вероятность того, что расстояние между протоном и нейтроном в дейтроне превышает радиус ямы  $a$ .
4. Найти уровни энергии, кратность вырождения и нормированные волновые функции частицы в поле трехмерного изотропного гармонического осциллятора  $U(r) = m\omega^2 r^2/2$ . Решить эту задачу вначале в декартовых координатах в терминах квантовых чисел  $n_{x,y,z}$  возбуждений колебаний вдоль соответствующих декартовых осей и волновых функций  $\psi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z)$ . Затем, не решая явно уравнение Шредингера в сферических координатах, выразить нормированные волновые функции в сферических координатах  $\psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \phi)$  в виде линейных комбинаций волновых функций в декартовых координатах  $\psi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z)$ , в терминах главного квантового числа  $n = n_x + n_y + n_z$ , орбитального момента  $l$  и его проекции  $m_l$  на ось

$z$  в частных случаях  $n = 0, 1, 2$ . Определить связь главного квантового числа  $n$  с радиальным  $n_r$  и орбитальным моментом  $l$  при произвольном  $n$ .

5. Найти характерный размер  $a$  и энергию основного состояния  $E_0$  (а) позитрония, (б) водородоподобного атома с зарядом ядра  $Z$ , (с)  $\mu$ -мезоатома, т.е. системы, в которой в поле тяжелого ядра с зарядом  $Z \sim 10^2$  находится  $\mu$ -мезон – частица, во всем похожая на электрон, но с массой  $m_\mu = 105m_e$ . В последнем случае сравнить  $a$  с размером ядра  $R = R_0 A^{1/3}$ , где  $A \approx 300$  есть атомный вес ядра,  $R_0 = 1.3 \times 10^{-13}$  см.
6. Вычислить нормировочные коэффициенты у радиальных волновых функций атома водорода  $R_{1,0}$ ,  $R_{2,1}$  и  $R_{2,0}$ .
7. Изобразить пространственное распределение плотности вероятности электрона в атоме водорода для всех четырех состояний с  $n = 2$ .
8. Определить пространственное распределение электрона в атоме водорода в состоянии  $|\psi_{n,n-1,n-1}(\mathbf{r})|^2$  при  $n \gg 1$ .
9. Найти электростатический потенциал, создаваемый атомом водорода в основном состоянии.
10. Найти напряженность магнитного поля в месте расположения протона, создаваемого орбитальным током электрона в атоме водорода в состояниях  $n = 1, 2$ . *Указание.* Векторный потенциал, создаваемый плотностью электрического тока  $\mathbf{j}$ , вычисляется по формуле

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{1}{c} \int \frac{\mathbf{j}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3 r'.$$

11. С помощью квазиклассической формулы (9.14) найти уровни энергии в кулоновском поле и поле изотропного гармонического осциллятора. Сравнить ответы с точными решениями.

# Глава 10

## Частица в магнитном поле

В этой главе будут рассмотрены некоторые вопросы о квантовом поведении частиц в магнитном поле.

### 10.1 Калибровочная инвариантность

Оператор Гамильтона для частицы в магнитном поле получится, если в классическом выражении (3.11) положить скалярный потенциал  $\varphi = 0$  и импульс частицы заменить оператором  $\mathbf{p} \rightarrow \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ . Для нахождения стационарных состояний в магнитном поле с напряженностью  $\mathbf{B} = [\nabla \times \mathbf{A}]$  требуется решить уравнение Шредингера

$$\frac{1}{2m} \left( -i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right)^2 \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \quad (10.1)$$

Из формулы  $\mathbf{B} = [\nabla \times \mathbf{A}]$  видно, что векторные потенциалы  $\mathbf{A}$  и  $\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla f$ , с достаточно гладкой функцией  $f \equiv f(\mathbf{r})$ , приводят к одному значению напряженности магнитного поля  $\mathbf{B}^1$ . Однако при переходе от

---

<sup>1</sup>Это следует из формулы  $[\nabla \times \nabla]f = 0$ . Хотя эта формула кажется самоочевидной, она не справедлива в случае сверхпроводников II-го рода в магнитном поле. В отличие от сверхпроводников I-го рода, куда внешнее магнитное поле не проникает вообще, в сверхпроводниках II-го рода проникновение магнитного поля возможно в виде тонких линий – *вихрей Абрикосова*. Волновая функция  $\psi(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})|e^{i\chi(\mathbf{r})}$  сверхпроводящих электронов, связанных в куперовские пары, зануляется в центре такой линии, поэтому



$\mathbf{A}$  к  $\mathbf{A}'$  изменяется форма уравнения (10.1). Попробуем найти преобразование уравнения (10.1), которое не меняло бы его формы при переходе от  $\mathbf{A}$  к  $\mathbf{A}'$ . Для этого нужно преобразовать и волновую функцию в соответствии с правилом  $\psi'(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r})e^{i\chi(\mathbf{r})}$ . Найдем функцию  $\chi(\mathbf{r})$  из условия инвариантности формы уравнения Шредингера в магнитном поле. Поскольку

$$\begin{aligned} \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}'\right)\psi'(\mathbf{r}) &= \left[-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}(\mathbf{A} + \nabla f)\right](\psi e^{i\chi(\mathbf{r})}) = \\ &= e^{i\chi(\mathbf{r})} \left[-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A} - \left(\frac{e}{c}\nabla f - \hbar\nabla\chi\right)\right]\psi, \end{aligned}$$

то при выполнении соотношения

$$f(\mathbf{r}) = \frac{\hbar c}{e}\chi(\mathbf{r})$$

для любого показателя степени  $k$  будет выполняться равенство

$$\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}'\right)^k \psi'(\mathbf{r}) = e^{i\chi(\mathbf{r})} \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^k \psi(\mathbf{r}).$$

При  $k = 2$  получаем оператор в левой части уравнения (10.1), откуда и следует неизменность формы этого уравнения при преобразовании

$$\begin{aligned} \mathbf{A}' &= \mathbf{A} + \frac{\hbar c}{e}\nabla\chi, \\ \psi' &= \psi e^{i\chi(\mathbf{r})}. \end{aligned} \tag{10.2}$$

Такое преобразование называется *локальным калибровочным преобразованием*, а неизменность формы уравнения Шредингера называется *локальной калибровочной инвариантностью*. Обобщения локальной калибровочной инвариантности сыграли решающую роль в построении стандартной модели физики элементарных частиц и в решении ряда задач физики конденсированного состояния.

---

интеграл по контуру, охватывающему эту линию, не равен нулю:  $\oint \nabla\chi d\mathbf{l} \neq 0$ . По теореме Стокса отсюда следует, что не равен нулю и интеграл по поверхности  $S$  с вектором нормали  $\mathbf{n}$ , натянутой на контур:  $\int \int (\mathbf{n} \cdot [\nabla \times \nabla])\chi dS \neq 0$ . Следовательно, в присутствии вихрей Абрикосова равенство  $[\nabla \times \nabla]\chi = 0$  не может выполняться во всем пространстве.

## 10.2 Эффект Ааронова – Бома

В классической физике заряженная частица, двигающаяся в области, где нет магнитного поля, не подвергается его действию. В квантовой механике это не так. На это обстоятельство впервые было указано Я. Аароновым и Д. Бомом в теоретической работе в 1959 г.

Свойство калибровочной инвариантности позволяет записать формальное решение задачи о частице в магнитном поле. Для этого будем искать решение уравнения (10.1) в виде

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi'(\mathbf{r}) \exp \left( \frac{ie}{\hbar c} \int_C \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} \right), \quad (10.3)$$

где  $C$  – произвольный контур, начинающийся в некоторой фиксированной точке  $\mathbf{r}_0$  и заканчивающийся в точке  $\mathbf{r}$ . Подстановка этого решения в (10.1) приводит к уравнению Шредингера для свободной частицы

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi' = E \psi'.$$

Другими словами, если решена квантовая задача без магнитного поля, и найдена волновая функция  $\psi'$ , то решение в магнитном поле формально можно записать в виде (10.3).

Применим этот результат к рассмотрению интерференции электронов на экране с двумя щелями 1 и 2, расположенными симметрично относительно источника электронов  $S$ . Расстояние между щелями  $D$ , расстояние от экрана со щелями до регистрирующего экрана  $L$ . См. рис. 10.1. Сразу за щелями находится очень тонкий и длинный соленоид, ориентированный вдоль щелей перпендикулярно плоскости рисунка. Он показан крестиком на рис. 10.1. Пусть вначале магнитное поле в соленоиде отсутствует. Расстояния считаются макроскопическими, поэтому можно применить квазиклассическое выражение для волновой функции электрона в точке  $x$  регистрирующего экрана в виде

$$\psi(x) = A e^{i \int_C \mathbf{k} \cdot d\mathbf{l}},$$

где в показателе экспоненты стоит интеграл по контуру  $C$  с началом в  $S$  и с конечной точкой  $x$ . Плотность вероятности регистрации электрона

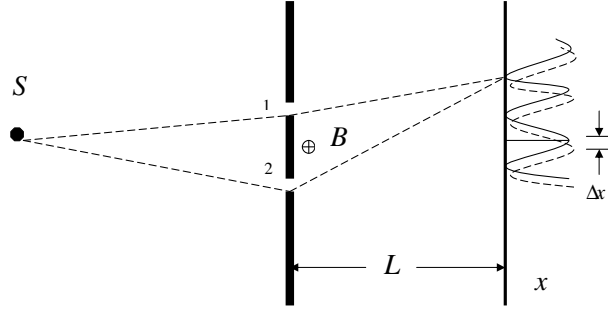


Рис. 10.1: Эффект Ааронова – Бома. Интерференционная картина сдвигается, хотя электрон движется вне области действия магнитного поля соленоида, показанного на рисунке крестиком

в точке  $x$  при обеих открытых щелях в нулевом магнитном поле равна

$$\rho(x) = A^2 \left| e^{i \int_{C_1} \mathbf{k} \cdot d\mathbf{l}} + e^{i \int_{C_2} \mathbf{k} \cdot d\mathbf{l}} \right|^2 = 4A^2 \cos^2 \left[ \frac{1}{2} \left( \int_{C_1} \mathbf{k} \cdot d\mathbf{l} - \int_{C_2} \mathbf{k} \cdot d\mathbf{l} \right) \right] = 4A^2 \cos^2 \frac{k \Delta l}{2} = 4A^2 \cos^2 \frac{k D x}{2L}.$$

В этом выражении траектория  $C_1$  состоит из отрезков прямых  $S1x$  и отвечает электрону, прошедшему через щель 1, траектория  $C_2$  – из отрезков прямых  $S2x$  и отвечает электрону, прошедшему через щель 2,  $\Delta l = xD/L$  равно разности хода по указанным траекториям,  $k = p/\hbar$ . Как обычно в таких задачах, используется параксиальное приближение, когда все поперечные координаты и импульсы считаются много меньше продольных. Максимумы распределения  $\rho(x)$  в нулевом магнитном поле находятся в точках

$$x_n = \frac{2\pi L}{kD} n, \quad (10.4)$$

$n = 0, 1, \dots$

Ненулевое магнитное поле соленоида характеризуется тем, что оно отлично от нуля внутри и равно нулю снаружи. Его учет при двух открытых отверстиях в экране в соответствии с (10.3) приводит к волновой функции вида

$$\psi(x) = A \left\{ \exp \left[ i \int_{C_1} \left( \mathbf{k} + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A} \right) \cdot d\mathbf{l} \right] + \exp \left[ i \int_{C_2} \left( \mathbf{k} + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A} \right) \cdot d\mathbf{l} \right] \right\},$$

где  $C_{1,2}$  обозначает траекторию соответственно  $S \rightarrow (1, 2) \rightarrow x$ . Плотность вероятности зарегистрировать электрон в точке  $x$  принимает вид

$$\begin{aligned}\rho(x) &= 4A^2 \cos^2 \left[ \frac{k\Delta l}{2} + \frac{e}{2\hbar c} \left( \int_{C_1} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} - \int_{C_2} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} \right) \right] = \\ &= 4A^2 \cos^2 \left[ \frac{kDx}{2L} + \frac{e}{2\hbar c} \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} \right] = 4A^2 \cos^2 \left( \frac{kDx}{2L} + \frac{e\Phi}{2\hbar c} \right).\end{aligned}$$

Здесь возник интеграл по замкнутому контуру  $S \rightarrow 1 \rightarrow x \rightarrow 2 \rightarrow S$ , и была применена теорема Стокса в виде

$$\int_{C_1} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} - \int_{C_2} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} = \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} = \int [\nabla \times \mathbf{A}] \cdot d\mathbf{\Sigma} = \int \mathbf{B} \cdot d\mathbf{\Sigma} = \Phi,$$

где  $\mathbf{\Sigma}$  обозначает поверхность, ограничивающую указанный замкнутый контур, а  $\Phi$  есть поток магнитного поля через эту поверхность. Теперь максимумы интерференционной картины будут располагаться в точках

$$\tilde{x}_n = \frac{L}{kD} \left( 2\pi n - \frac{e\Phi}{\hbar c} \right). \quad (10.5)$$

Сравнение с (10.4) показывает, что при включенном магнитном поле соленоида интерференционная картина сдвигается на расстояние

$$\Delta x = \frac{e\Phi L}{c\hbar k D}.$$

Этот результат статьи Ааронова и Бома поразителен. Ведь дело в том, что электрон движется вне области действия магнитного поля, и тем не менее это приводит к наблюдаемым изменениям картины. Это служит доказательством того, что в квантовой механике одной лишь напряженности магнитного поля недостаточно для полного описания физических явлений в магнитном поле. Квантовая механика требует введения векторного потенциала  $\mathbf{A}$ , точнее фазового множителя (10.3), зависящего от того, по какой траектории движется квантовая частица.

Первое экспериментальное обнаружение эффекта Ааронова – Бома было получено в 1960 г. Чамберсом. Оно долгое время подвергалось сомнению, поскольку, ввиду конечных размеров соленоида, не была исключена возможность влияния на движение электронов обратного потока магнитного поля. Лишь в 80-х годах XX-го века в опытах Тономуры с

ферромагнитным кольцом, помещенным в окружение из сверхпроводящего материала, была обеспечена полная экранировка локализованного в кольце магнитного поля и зарегистрирован сдвиг интерференционной картины электронов, предсказанный Аароновым и Бомом.

### 10.3 Уровни Ландау

Найдем стационарные состояния заряженной частицы в постоянном однородном магнитном поле, направленном вдоль оси  $z$ :  $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ . Воспользуемся калибровочной инвариантностью уравнения (10.1) и выберем векторный потенциал в калибровке Ландау:  $\mathbf{A} = B(0, x, 0)$ . В этой калибровке уравнение (10.1) для волновой функции  $\psi(x, y, z)$  запишется в виде

$$\hat{H}\psi(x, y, z) \equiv \frac{1}{2m} \left[ \hat{p}_x^2 + \hat{p}_z^2 + \left( \hat{p}_y - \frac{eB}{c}x \right)^2 \right] \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z).$$

Отсюда видно, что  $[\hat{H}, \hat{p}_y] = 0$ ,  $[\hat{H}, \hat{p}_z] = 0$ . Следовательно,  $y$  и  $z$  компоненты импульса сохраняются. Обозначим эти величины соответственно через  $p_{y0}$  и  $p_{z0}$ . Тогда решение уравнения можно искать в виде  $\psi(x, y, z) = e^{i(p_{y0}y + p_{z0}z)/\hbar} f(x)$ . Для функции  $f(x)$  получается одномерное уравнение Шредингера

$$\left[ \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{e^2 B^2}{2mc^2} \left( x - \frac{cp_{y0}}{eB} \right)^2 \right] f(x) = \left( E - \frac{p_{z0}^2}{2m} \right) f(x) \equiv E_{\perp} f(x). \quad (10.6)$$

Получилось в точности уравнение Шредингера для гармонического осциллятора с центром в точке

$$x_0 = \frac{cp_{y0}}{eB} \quad (10.7)$$

и с частотой

$$\omega_B = \frac{eB}{mc},$$

равной циклотронной частоте классического обращения заряженной частицы в однородном магнитном поле. Поэтому сразу можно воспользо-

ваться результатами главы 5 для уровней энергии (5.8) и записать выражение для уровней энергии поперечного движения:

$$E_{\perp} = E_n = \hbar\omega_B \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad (10.8)$$

$n = 0, 1, 2, \dots$  Уровни энергии (10.8) называются *уровнями Ландау*. Волновыми функциями стационарных состояний заряженной частицы в магнитном поле являются волновые функции осциллятора (5.13) со смещенным центром:

$$f_n(x) = \left( \frac{m\omega_B}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-m\omega_B(x-x_0)^2/2\hbar} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n \left[ (x-x_0) \sqrt{\frac{m\omega_B}{\hbar}} \right], \quad (10.9)$$

где  $x_0$  дается формулой (10.7).

Волновые функции стационарных состояний

$$\psi_n(x, y, z) = f_n(x) e^{i(p_{y0}y + p_{z0}z)/\hbar} \quad (10.10)$$

зависят от  $p_{y0}$ , тогда как энергия полная энергия

$$E = \frac{p_{z0}^2}{2m} + E_n$$

и энергия поперечного движения (10.8) от этого параметра не зависят. Это означает, что уровни Ландау вырождены. Если движение частицы в плоскости  $xy$ , поперечной к направлению магнитного поля, не ограничено, то  $p_{y0}$  и, как следствие, кратность вырождения, принимает непрерывный ряд значений. В реальной ситуации движение в плоскости  $xy$  ограничено. Пусть  $0 \leq x \leq L_x$ ,  $0 \leq y \leq L_y$ . Эффект конечного размера по  $y$  учтем так, как это принято в физике твердого тела, в виде периодического граничного условия  $\psi(y + L_y) = \psi(y)$ . В калибровке Ландау волновая функция в зависимости от координаты  $y$  ведет себя как плоская волна, поэтому  $e^{ip_{y0}(y+L_y)/\hbar} = e^{ip_{y0}y/\hbar}$ , откуда получаем условие квантования  $p_{y0} = 2\pi\hbar n_y / L_y$ . Квант  $y$ -компоненты импульса равен  $\Delta p_{y0} = 2\pi\hbar / L_y$ . Из выражения (10.7) следует, что координата центра  $x_0$  также квантована, и ее «квант» равен

$$\Delta x_0 = \frac{c\Delta p_{y0}}{eB} = \frac{2\pi\hbar c}{eBL_y}.$$

Поскольку любое из  $L_x/\Delta x_0$  положений центральной точки в интервале  $0 \leq x \leq 1L_x$  приводит к одному и тому же значению энергии, кратность вырождения уровня Ландау равна

$$g = \frac{eB}{2\pi\hbar c} L_x L_y. \quad (10.11)$$

Это выражение лежит в основе объяснения очень многих магнитных эффектов в физике твердого тела, в частности, диамагнетизма электронов в металлах, эффекта осцилляций магнитной восприимчивости в зависимости от напряженности магнитного поля (эффект Де Гааза – Ван Альфена), квантового целочисленного эффекта Холла и ряда других явлений.

Особенностью калибровки Ландау является то, что волновые функции стационарных состояний (10.10) в этой калибровке приводят к плотности вероятности  $\rho(x) = |\psi_n(x, y, z)|^2 = f_n^2(x)$ , зависящей только от координаты  $x$ . В то же время известно, что классическое движение заряженной частицы в однородном магнитном поле происходит по окружности и обладает аксиальной симметрией относительно вращения в плоскости, ортогональной магнитному полю. Очевидно, что состояние с волновой функцией (10.10) такой симметрией не обладает и не переходит в классическое движение по окружности даже в пределе больших квантовых чисел. Известно два способа преодоления этой трудности. Первый состоит в том, чтобы принять во внимание, что волновые функции в калибровке Ландау содержат  $p_{y0}$  как параметр,  $f_n(x) \equiv f_n(x, p_{y0})$ , и, используя вырождение уровней Ландау, построить линейную комбинацию

$$\psi(x, y) = \int_{-\infty}^{\infty} dp_{y0} C(p_{y0}) e^{ip_{y0}y/\hbar} f_n(x, p_{y0})$$

вырожденных состояний. Коэффициенты разложения  $C(p_{y0})$  можно подобрать так, чтобы воспроизвести аксиальную симметрию и круговые орбиты в пределе больших квантовых чисел. Однако более простой способ состоит в решении уравнения (10.1) в симметричной калибровке  $\mathbf{A} = \frac{B}{2}(-y, x, 0)$  в цилиндрических координатах. В этом подходе аксиальная симметрия закладывается с самого начала, и круговые орбиты должны получаться в пределе больших квантовых чисел.

## 10.4 Задачи

1. Показать, что выбор *симметричной калибровки*  $\mathbf{A} = \frac{B}{2}(-y, x, 0)$  приводит к той же напряженности магнитного поля  $\mathbf{B} = (0, 0, B)$  что и в калибровке Ландау. Найти функцию  $f(\mathbf{r})$ , осуществляющую переход от одной из указанных калибровок к другой.
2. Найти уровни Ландау в однородном магнитном поле в симметричной калибровке  $\mathbf{A} = \frac{B}{2}(-y, x, 0)$ . *Указание.* Перейти к цилиндрическим координатам  $(r, \varphi, z)$  и решать уравнение Шредингера методом разделения переменных. Для радиальной волновой функции ввести новую радиальную координату  $\rho \propto r^2 = x^2 + y^2$ .
3. Найти операторы скорости  $\hat{v}_x$  и  $\hat{v}_y$  в магнитном поле и показать, что их коммутатор  $[\hat{v}_x, \hat{v}_y]$  отличен от нуля. Получить из выражения для коммутатора соотношение неопределенностей для этих компонент скорости. Дать его физическое объяснение, используя оценки по порядку величины.
4. Найти величину кратности вырождения уровней Ландау при  $L_x \times L_y = 1 \times 1 \text{ см}^2$  и напряженности магнитного поля 1 гс и 1 тесла.



## Глава 11

# Вариационный метод и теория возмущений

Уравнение Шредингера допускает точное решение только в ряде сравнительно простых случаев вроде кулоновского потенциала или потенциала гармонического осциллятора, и для одной, максимум двух взаимодействующих частиц. В реальных ситуациях приходится иметь дело либо с более сложными потенциалами, либо, даже если потенциальная энергия известна (например, кулоновское взаимодействие), в системах, содержащих большое число частиц (в многоэлектронных атомах или молекулах). Поэтому необходимо использовать приближенные методы для нахождения уровней энергии и волновых функций в таких системах. В главе 7 уже был рассмотрен один из приближенных методов – метод квазиклассического приближения. Однако он годится лишь для больших квантовых чисел. В этой главе будут рассмотрены два других наиболее употребительных приближенных метода, которые «работают» при небольших квантовых числах.

### 11.1 Вариационный метод

Среднее значение энергии в состоянии  $\psi$  есть

$$E \equiv E[\psi] = \int \psi^* \hat{H} \psi dq, \quad (11.1)$$

где  $dq$  обозначает элемент конфигурационного пространства квантовой системы, т.е. произведение дифференциальных элементов объема каждой из частиц в требуемой условиями задачи системе координат. Найдем условия экстремума функционала (11.1) при дополнительном условии

$$\int |\psi|^2 dq = 1, \quad (11.2)$$

фиксирующем нормировку волновой функции. Это задача на условный экстремум. Ее можно свести к задаче на экстремум без дополнительных условий, если использовать метод *неопределенных множителей Лагранжа*  $\lambda_i$ . В данном случае это сводится к нахождению экстремума функционала

$$\tilde{E} = \int \psi^* \hat{H} \psi dq - \lambda \int |\psi|^2 dq \quad (11.3)$$

с одним множителем  $\lambda$ . При варьировании надо учесть комплексный характер волновой функции. Для этого представим ее в виде  $\psi = |\psi|e^{i\chi}$  и будем варьировать независимо вещественные модуль  $|\psi|$  и фазу  $\chi \equiv \chi(q)$  волновой функции. Поскольку

$$\begin{aligned} \delta\psi &= e^{i\chi}\delta|\psi| + i\psi\delta\chi, \\ \delta\psi^* &= e^{-i\chi}\delta|\psi| - i\psi^*\delta\chi, \end{aligned}$$

то вариацию функционала  $\tilde{E}$  можно представить в следующем виде:

$$\begin{aligned} \delta\tilde{E} &= \int \left[ \delta\psi^* (\hat{H}\psi) + (\hat{H}\psi)^* \delta\psi - 2\lambda|\psi|\delta|\psi| \right] dq = \int \left[ (e^{-i\chi}\delta|\psi| - \right. \\ &\quad \left. - i\psi^*\delta\chi) (\hat{H}\psi) + (\hat{H}\psi)^* (e^{i\chi}\delta|\psi| + i\psi^*\delta\chi) - 2\lambda|\psi|\delta|\psi| \right] dq. \end{aligned}$$

Приравнивая нулю соответственно вариационную производную по  $|\psi|$  и по  $\chi$ <sup>1</sup>, получим систему уравнений

$$\begin{aligned} \frac{\delta\tilde{E}}{\delta|\psi|} &= e^{-i\chi}(\hat{H}\psi) + e^{i\chi}(\hat{H}\psi)^* - 2\lambda|\psi| = 0, \\ \frac{\delta\tilde{E}}{\delta\chi} &= -i\psi^*(\hat{H}\psi) + i(\hat{H}\psi)^*\psi = 0. \end{aligned}$$

---

<sup>1</sup>Определение вариационной производной приведено в сноске 1.

Из второго уравнения этой системы находим, что

$$(\hat{H}\psi)^* = \frac{\psi^*(\hat{H}\psi)}{\psi}.$$

Подставив это соотношение в первое уравнение системы, получим уравнение

$$\hat{H}\psi = \lambda\psi,$$

в точности совпадающее со стационарным уравнением Шредингера. Отсюда и из (11.1), (11.2) получим, что  $\lambda = E$  – средней энергии в состоянии  $\psi$ .

Таким образом, условие экстремума функционала энергии (11.1) на классе нормируемых функций (11.2) имеет вид стационарного уравнения Шредингера. Этот результат можно применить для нахождения низколежащих уровней энергии. Соответствующий метод называется *прямым вариационным методом* и состоит в следующей последовательности действий. Вначале из более-менее разумных соображений выбирается *пробная* волновая функция  $\psi_{\text{var}}(q, \beta_i)$ , содержащая произвольные *вариационные параметры*  $\beta_i$  и не имеющая нулей. Затем вычисляется энергия как функция вариационных параметров

$$E_{\text{var}}(\beta_i) = \int \psi_{\text{var}}^*(q, \beta_i) \hat{H} \psi_{\text{var}}(q, \beta_i) dq,$$

при дополнительном условии  $\int |\psi_{\text{var}}(q, \beta_i)|^2 dq = 1$ . Из условий

$$\frac{\partial E_{\text{var}}}{\partial \beta_i} = 0$$

находятся значения вариационных параметров  $\beta_i^{(0)}$ , по которым вычисляется энергия основного состояния  $E = E_{\text{var}}(\beta_i^{(0)})$ . Для вычисления энергии первого возбужденного состояния ищется минимум функционала энергии на классе функций с одним нулем, ортогональных пробной волновой функции основного состояния и т.д.

Гамильтониан в (11.1) является дифференциальным оператором второго порядка. Между тем при выполнении расчетов вариационным методом иногда может оказаться полезным представить функционал энергии (11.1) так, чтобы он содержал производные первого порядка. Это достигается интегрированием по частям. Например, в случае одной частицы,

воспользовавшись равенством

$$\nabla(\psi^* \nabla \psi) = |\nabla \psi|^2 + \psi^* \nabla^2 \psi,$$

получим:

$$\begin{aligned} E_{\text{var}} &= \int \psi^* \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U \right) \psi d^3 r = \\ &= \int \left( \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \psi|^2 + U |\psi|^2 \right) d^3 r. \end{aligned} \quad (11.4)$$

Интеграл по бесконечно удаленной поверхности с нормалью  $\mathbf{n}$ , возникающий при этом в силу теоремы Гаусса,

$$\int \nabla(\psi^* \nabla \psi) d^3 r = \int (\psi^* \nabla \psi) \cdot \mathbf{n} dS,$$

исчезает на классе функций, удовлетворяющих условию (11.2).

Можно установить, насколько хорошо «работает» вариационный метод. Сделаем это для основного состояния. Разложим пробную волновую функцию  $\psi_{\text{var}}$  по точным собственным функциям  $\psi_n$  оператора Гамильтона  $\hat{H}$  с собственными значениями  $E_n$ :  $\psi_{\text{var}} = \sum_{n=0} c_n \psi_n$ . Из условия нормировки следует соотношение

$$|c_0|^2 = 1 - \sum_{n>0} |c_n|^2. \quad (11.5)$$

Тогда вариационной энергии получим, что

$$E_{\text{var}} = \sum_{n=0} |c_n|^2 E_n = |c_0|^2 E_0 + \sum_{n>0} |c_n|^2 E_n = E_0 + \sum_{n>0} |c_n|^2 (E_n - E_0) \geq E_0.$$

Это неравенство дает оценку снизу. Можно получить оценку сверху, если найти дисперсию энергии в состоянии с волновой функцией  $\psi_{\text{var}}$ :

$$\begin{aligned} \Delta E^2 &= \sum_{n=0} |c_n|^2 (E_n - E_{\text{var}})^2 = |c_0|^2 (E_0 - E_{\text{var}})^2 + \\ &+ \sum_{n>0} |c_n|^2 (E_n - E_{\text{var}})^2 = (E_0 - E_{\text{var}})^2 + \\ &+ \sum_{n>0} |c_n|^2 [(E_n - E_{\text{var}})^2 - (E_0 - E_{\text{var}})^2] \geq (E_0 - E_{\text{var}})^2. \end{aligned}$$

Отсюда с учетом неравенства  $E_{\text{var}} \geq E_0$  получаем оценку сверху в виде

$$E_{\text{var}} \leq E_0 + \sqrt{\Delta E^2}.$$

Объединим обе оценки:

$$E_0 \leq E_{\text{var}} \leq E_0 + \sqrt{\Delta E^2}. \quad (11.6)$$

Удобство вариационного метода состоит в том, что иногда значение энергии системы знать важнее, чем волновую функцию. Тем не менее, хотя выбор пробной волновой функции более-менее произволен, из неравенства (11.6) вытекает, что чем меньше дисперсия  $\Delta E^2$ , тем лучше вариационный расчет согласуется с точным значением. Это значит, что чем ближе «угаданная» пробная функция к точной, тем ближе вариационный расчет к точному значению энергии.

## 11.2 Стационарные возмущения в отсутствие вырождения

Часто встречаются ситуации, когда точное решение стационарного уравнения Шредингера

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n \quad (11.7)$$

невозможно получить в явном виде. Но в случае, когда гамильтониан системы представим в виде  $\hat{H} = \hat{H}_0 + g\hat{V}$ , где  $\hat{H}_0$  называется *невозмущенным гамильтонианом*,  $g\hat{V}$  – *оператором возмущения*, а  $g \ll 1$  есть малый безразмерный параметр, можно развить регулярный приближенный метод. Параметр  $g \ll 1$  иногда называют *константой связи*.

Пусть известно решение стационарного уравнения Шредингера для невозмущенного гамильтониана  $\hat{H}_0$ :

$$\hat{H}_0\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}.$$

Для определенности предполагается, что спектр невозмущенного гамильтониана дискретный. Будем искать решение уравнения (11.7), представив точную волновую функцию в виде разложения по собственным функциям  $\hat{H}_0$ :

$$\psi_n = \sum_k c_{nk}\psi_k^{(0)}.$$

Если подставить это разложение в (11.7), умножить уравнение слева на  $\psi_l^{(0)*}$  и проинтегрировать по координатам с учетом условия

$$\int \psi_l^{(0)*} \psi_k^{(0)} dq = \delta_{lk}, \quad (11.8)$$

то получим бесконечную систему зацепляющихся алгебраических уравнений:

$$c_{nl} E_l^{(0)} + g \sum_k c_{nk} V_{lk} = c_{nl} E_l. \quad (11.9)$$

Суммирование по повторяющимся индексам не предполагается. Здесь

$$gV_{lk} = g \int \psi_l^{(0)*} \hat{V} \psi_k^{(0)} dq$$

суть матричные элементы оператора возмущения. Ищем решение (11.9) в виде рядов по константе связи:

$$\begin{aligned} c_{nl} &= c_{nl}^{(0)} + g c_{nl}^{(1)} + g^2 c_{nl}^{(2)} + \dots, \\ E_n &= E_n^{(0)} + g E_n^{(1)} + g^2 E_n^{(2)} + \dots \end{aligned} \quad (11.10)$$

Очевидно, что при  $g = 0$  имеет место равенство  $c_{nl}^{(0)} = \delta_{nl}$ . Подставим (11.10) в (11.9) и будем приравнивать коэффициенты при одинаковых степенях  $g$  в обеих частях получившегося уравнения.

- Равенство коэффициентов при  $g^0 = 1$ . Получается тождество.
- Равенство коэффициентов при  $g$ . Получается выражение

$$c_{nl}^{(1)} E_l^{(0)} + V_{ln} = c_{nl}^{(1)} E_n^{(0)} + E_n^{(1)} \delta_{nl}.$$

При  $n = l$  из этого выражения получается

$$g E_n^{(1)} = g V_{nn}. \quad (11.11)$$

Поправка первого порядка равна диагональному матричному элементу оператора возмущения. При  $n \neq l$  находим выражение для поправки первого порядка к волновой функции  $n$ -го уровня:

$$c_{nl}^{(1)} = \frac{V_{ln}}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}}, \quad (11.12)$$

$l \neq n$ . Отметим, что  $c_{nn}^{(1)}$  из выписанного выражения не определяется. Покажем, что условие сохранения нормировки волновой функции с поправкой первого порядка позволяет выбрать  $c_{nn}^{(1)} = 0$ . Действительно, условие нормировки дает соотношение

$$\begin{aligned} 1 &= \int |\psi_n|^2 dq = \int \left| \psi_n^{(0)} + g \sum_l c_{nl}^{(1)} \psi_l^{(0)} \right|^2 dq = \\ &= \int \left| \psi_n^{(0)} (1 + g c_{nn}^{(1)}) + g \sum_{l \neq n} c_{nl}^{(1)} \psi_l^{(0)} \right|^2 dq \approx 1 + 2g \text{Re} c_{nn}^{(1)}, \end{aligned}$$

где учтено условие (11.8) и отброшены члены второго порядка по  $g$ . Следовательно,  $\text{Re} c_{nn}^{(1)} = 0$ , поэтому с точностью до первого порядка можно написать  $c_{nn} = 1 + gi\chi \approx e^{ig\chi}$ , т.е.  $c_{nn}$  сводится к фазовому множителю. Но в квантовой механике все волновые функции определены с точностью до умножения на *общий фазовый множитель*. Если переопределить невозмущенные волновые функции  $\psi_n^{(0)} \rightarrow e^{ig\chi} \psi_n^{(0)}$ , то это эквивалентно выбору  $c_{nn}^{(1)} = 0$ .

- Равенство коэффициентов при  $g^2$ . Получается соотношение

$$c_{nl}^{(2)} E_l^{(0)} + \sum_k c_{nk}^{(1)} V_{lk} = c_{nl}^{(2)} E_n^{(0)} + c_{nl}^{(1)} E_n^{(1)} + E_n^{(2)} \delta_{nl}.$$

При  $l = n$  получим поправку второго порядка к энергии

$$g^2 E_n^{(2)} = g^2 \sum_{k \neq n} \frac{|V_{kn}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}. \quad (11.13)$$

При  $l \neq n$  можно бы было получить выражение для  $c_{nl}^{(2)}$ , но оно нам не понадобится. Из формулы (11.13) следует, что *поправка второго порядка к энергии основного состояния отрицательна*.

Критерий применимости теории возмущений нужно устанавливать в каждом конкретном случае. Грубая оценка дается неравенством

$$|gV_{nl}| \ll |E_n^{(0)} - E_l^{(0)}|.$$

Однако бывают ситуации, когда даже малое возмущение может совершенно изменить характер спектра. Например, возьмем гамильтониан осциллятора с «малым» возмущением:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} + gx^3$$

с  $g > 0$ . При  $x < 0$  для достаточно больших  $|x| > m\omega^2/2g$  потенциальная энергия будет отрицательной, и в системе станет возможным туннелирование на  $x \rightarrow -\infty$ . Стационарные состояния невозмущенного гамильтониана перейдут в квазистационарные состояния с конечным временем жизни. Характер спектра радикально поменяется.

## 11.3 Возмущения в случае двух близких уровней

Формула (11.13) неприменима в случае близких и тем более вырожденных уровней, когда в знаменателе оказывается соответственно малое выражение или нуль. Разберем простейший случай, когда близки энергии  $E_1$  и  $E_2$  двух уровней. Пусть их волновые функции до включения возмущений  $\hat{V}$  есть  $\psi_1$  и  $\psi_2$ :

$$\begin{aligned}\hat{H}_0\psi_1 &= E_1\psi_1, \\ \hat{H}_0\psi_2 &= E_2\psi_2.\end{aligned}$$

Решение уравнения Шредингера с учетом возмущения  $(\hat{H}_0 + \hat{V})\psi = E\psi$  будем искать в виде линейной комбинации волновых функций состояний с близкой энергией  $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ . Подстановка этого выражения в предыдущее уравнение приводит к уравнению

$$c_1(E_1 - E)\psi_1 + c_2(E_2 - E)\psi_2 + c_1\hat{V}\psi_1 + c_2\hat{V}\psi_2 = 0.$$

Умножим это уравнение сначала на  $\psi_1^*$  и проинтегрируем по координатам с учетом условия ортонормированности, затем ту же самую операцию повторим, умножив уравнение на  $\psi_2^*$ . В результате получается пара алгебраических уравнений

$$\begin{aligned}(E_1 + V_{11} - E)c_1 + V_{12}c_2 &= 0, \\ V_{21}c_1 + (E_2 + V_{22} - E)c_2 &= 0.\end{aligned}\tag{11.14}$$



Здесь

$$V_{ij} = \int \psi_i^* \hat{V} \psi_j dq,$$

условие эрмитовости оператора возмущения есть  $V_{ij}^* = V_{ji}$ . Условием разрешимости однородной системы (11.14) является выражение для энергии

$$E_{\pm} = \frac{1}{2} (E_1 + V_{11} + E_2 + V_{22}) \pm \frac{1}{2} \sqrt{(E_1 + V_{11} - E_2 - V_{22})^2 + 4|V_{12}|^2}. \quad (11.15)$$

Для обоих знаков энергий из (11.14) находится также соотношение между коэффициентами разложения:

$$c_2^{(\pm)} = -\frac{c_1^{(\pm)}}{2V_{12}} (E_1 + V_{11} - E_2 - V_{22} \mp \sqrt{(E_1 + V_{11} - E_2 - V_{22})^2 + 4|V_{12}|^2}) \quad (11.16)$$

После этого неизвестный коэффициент  $c_1^{(\pm)}$  с точностью до фазового множителя находится из условия нормировки  $|c_1^{(\pm)}|^2 + |c_2^{(\pm)}|^2 = 1$ . Если имеет место вырождение  $E_1 = E_2 = E$ , а матричные элементы оператора возмущения обладают свойством, что  $V_{11} = V_{22} = 0$  и  $\text{Im}V_{12} = 0$ , то  $E_{\pm} = E \pm V_{12}$ ,

$$\psi_{\pm} = \frac{\psi_1 \pm \psi_2}{\sqrt{2}}.$$

Ниже будут и другие примеры использования расчетов по теории возмущений как в задачах, так и в основном тексте.

## 11.4 Взаимодействие нейтральных атомов

Как взаимодействуют между собой два атома водорода, находящиеся в основном состоянии? Если ввести координаты протонов как  $\mathbf{R}/2$  и  $-\mathbf{R}/2$ , то координаты соответствующих им электронов будут  $\mathbf{R}/2 + \mathbf{r}_1$ ,  $-\mathbf{R}/2 + \mathbf{r}_2$ . Считая протоны бесконечно тяжелыми, гамильтониан этой системы можно записать как  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ , где невозмущенный гамильтониан есть

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_e} (\nabla_{\mathbf{r}_1}^2 + \nabla_{\mathbf{r}_2}^2) - e^2 \left( \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right),$$

а оператор возмущения имеет вид

$$\hat{V} = e^2 \left( \frac{1}{R} + \frac{1}{|\mathbf{R} + \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} - \frac{1}{|\mathbf{R} + \mathbf{r}_1|} - \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_2|} \right).$$

Первое и второе слагаемое в скобках описывают потенциальную энергию отталкивания соответственно двух протонов и двух электронов, тогда как третье и четвертое – потенциальную энергию притяжения электронов к «чужим» протонам. Поскольку  $r_{1,2} \ll R$ , то можно воспользоваться разложением

$$\frac{1}{|\mathbf{R} + \mathbf{r}|} \approx \frac{1}{R} - \frac{(\mathbf{r} \cdot \mathbf{R})}{R^3} + \frac{r_i r_j}{2R^3} \left( \frac{3R_i R_j}{R^2} - \delta_{ij} \right)$$

и записать оператор возмущения в виде выражения

$$\hat{V} = \frac{1}{R^3} \left[ (\mathbf{d}_1 \cdot \mathbf{d}_2) - \frac{3(\mathbf{d}_1 \cdot \mathbf{R})(\mathbf{d}_2 \cdot \mathbf{R})}{R^2} \right] \quad (11.17)$$

где  $\mathbf{d}_1 = e\mathbf{r}_1$  и  $\mathbf{d}_2 = e\mathbf{r}_2$  есть электрические дипольные моменты атомов водорода. Волновая функция нулевого приближения есть

$$\Psi^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_{1,0,0}(\mathbf{r}_1)\psi_{1,0,0}(\mathbf{r}_2),$$

где  $\psi_{1,0,0}$  есть волновая функция основного состояния атома водорода (9.12). В силу сферической симметрии этого состояния

$$\int |\psi(\mathbf{r})_{1,0,0}|^2 e\mathbf{r} d^3r \equiv \langle \mathbf{d} \rangle = 0,$$

поэтому поправка первого порядка к энергии основного состояния обращается в нуль:

$$\begin{aligned} E_0^{(1)} &= \int \Psi^{(0)*}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \hat{V} \Psi^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d^3r_1 d^3r_2 = \frac{(\langle \mathbf{d}_1 \rangle \cdot \langle \mathbf{d}_2 \rangle)}{R^3} - \\ &\quad - \frac{3(\langle \mathbf{d}_1 \rangle \cdot \mathbf{R})(\langle \mathbf{d}_2 \rangle \cdot \mathbf{R})}{R^5} = 0. \end{aligned}$$

Поправка второго порядка вычисляется как

$$E_0^{(2)} = \sum_{k_1, k_2} \frac{|\langle k_1, k_2 | \hat{V} | 0, 0 \rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_{n_1, n_2}^{(0)}}$$

где  $k = (n, l, m)$  служит кратким обозначением набора квантовых чисел электрона в атоме водорода,

$$\begin{aligned} E_0^{(0)} &= -\frac{m_e e^4}{\hbar^2}, \\ E_{n_1, n_2}^{(0)} &= -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2} \left( \frac{1}{n_1^2} + \frac{1}{n_2^2} \right), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle k_1, k_2 | \hat{V} | 0, 0 \rangle &= \int \psi_{n_1, l_1, m_1}^*(\mathbf{r}_1) \psi_{n_2, l_2, m_2}^*(\mathbf{r}_2) \hat{V} \times \\ &\times \psi_{1, 0, 0}(\mathbf{r}_1) \psi_{1, 0, 0}(\mathbf{r}_2) d^3 r_1 d^3 r_2, \end{aligned}$$

а  $\psi_{n, l, m}(\mathbf{r})$  есть волновая функция  $n$ -го состояния атома водорода. Поскольку  $E_0^{(0)} - E_{n_1, n_2}^{(0)} < 0$  а  $V \sim R^{-3}$ , то

$$E_0^{(2)} = -\frac{C}{R^6},$$

где  $C > 0$ . Это отвечает притяжению между двумя атомами водорода в основном состоянии. Сила притяжения ведет себя как  $R^{-7}$  и называется *силой Ван-Дер-Ваальса*.

## 11.5 Задачи

1. Применить прямой вариационный метод для нахождения энергии основного состояния осциллятора, используя пробные волновые функции вида  $\psi(x) = A_1|x - a|\theta(a - |x|)$  и  $\psi(x) = A_2 e^{-k|x|}$ . Сравнить с точным решением. Найти  $\Delta E^2$  для обеих пробных функций. *Указание.* Использовать функционал энергии в форме (11.4) в одном пространственном измерении.
2. Рассчитать вариационным методом потенциалы ионизации гелия и гелиеподобных атомов (атомов, у которых два электрона находятся в связанном состоянии с ядром с зарядом  $Z$ ). В качестве пробной функции взять произведение двух волновых функций основного состояния водородоподобного атома с зарядом ядра  $Z_{\text{eff}}$ .

3. Найти поправку к энергии основного состояния водородоподобного атома с зарядом ядра  $Z$  за счет конечного размера ядра в модели, где ядро считается равномерно заряженным шаром.
4. Найти поправки первого и второго порядка к  $n$ -ому уровню энергии гармонического осциллятора за счет ангармонической добавки  $V = gx^3$ .
5. Оператор возмущения за счет релятивистской зависимости энергии от импульса имеет вид  $\hat{V} = -\hat{p}^4/8m^3c^2$ . Найти соответствующую поправку к энергии водородоподобного атома с зарядом ядра  $Z$  в состоянии с главным квантовым числом  $n$ .
6. Гамильтониан квантовой системы имеет вид  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ , где невозмущенный гамильтониан равен

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - G [\delta(x-a) + \delta(x+a)],$$

$G > 0$ , а оператор возмущения есть  $\hat{V} = -\Delta G \delta(x-a)$ , а  $\Delta G \ll G$ . Найти энергии и волновые функции системы при условии, что  $mGa/\hbar^2 \gg 1$ . Разобрать, в частности, предельные случаи, когда разность невозмущенных энергий много больше и много меньше характерной величины возмущения. Ответ для волновых функций представить в терминах собственных функций  $\psi_{s,a}(x)$  невозмущенного гамильтониана, имеющих определенную четность.

7. Рассмотреть в рамках теории возмущений влияние слабого однородного электрического поля на атом водорода в состоянии  $n = 2$ .
8. Вывести выражение (11.17).

# Глава 12

## Спин

В середине 20-х годов XX-го века была осознана необходимость введение новой сугубо квантовой степени свободы микрочастиц, впоследствии названной *спином*. На наличие у частиц спина указывал опыт Штерна – Герлаха, в котором пучок атомов серебра, пропущенный через неоднородное магнитное поле, расщеплялся на два пучка. Другое указание на эту характеристику было получено В. Паули при анализе заполнения электронных оболочек и особенностей спектральных линий атомов в магнитном поле. Паули предположил, что электрон с заданной энергией, орбитальным моментом и его проекцией на ось  $z$  может находиться в двух квантовых состояниях, и назвал такую ситуацию *неклассической двузначностью*. Было выяснено, что свойства спина аналогичны свойствам орбитального момента, но связать эту степень свободы с неким внутренним пространственным вращением типа вращения вокруг собственной оси оказалось невозможным.

### 12.1 Операторы спина и спиноры

Так как математические свойства спина аналогичны свойствам орбитального момента, то можно применить результаты главы 8, в которой рассматривалась алгебра операторов момента импульса. Теперь квантовое число  $j$  будет относиться лишь к спину, для которого принято обозначение  $s$ . Квантовое число проекции спина на ось  $z$  обозначается буквой

$m_s$ ,  $-s \leq m_s \leq s$ . Построим операторы спина, ограничившись случаем  $s = 1/2$ , тогда  $m_s = \pm 1/2$ . Спин  $s = 1/2$  имеют элементарные частицы, из которых построен окружающий нас мир: электроны, протоны и нейтроны. В целях сокращения обозначений у вектора состояния  $|s, m_s\rangle$  можно не указывать значение  $s = 1/2$ . В этом случае в литературе часто используется удобное наглядное обозначение

$$\begin{aligned} |\uparrow\rangle &\equiv |s = 1/2, m_s = +1/2\rangle, \\ |\downarrow\rangle &\equiv |s = 1/2, m_s = -1/2\rangle. \end{aligned} \quad (12.1)$$

Из формул (8.9) сразу находим операторы спина. Запишем их, временно восстановив размерность:

$$\begin{aligned} \hat{s}_x &= \frac{\hbar}{2}\sigma_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \\ \hat{s}_y &= \frac{\hbar}{2}\sigma_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \\ \hat{s}_z &= \frac{\hbar}{2}\sigma_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (12.2)$$

которая явно указывает на сугубо квантовую природу этих операторов. Если для орбитального момента  $\hbar l$  классический предел оказался возможным при  $l \gg 1$ , то для спина такого предела очевидно нет, поскольку  $s$  конечно. Три выражения (12.2) можно записать в виде одного «векторного»<sup>1</sup> равенства

$$\hat{\mathbf{s}} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}, \quad (12.3)$$

где три матрицы  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  называются *матрицами Паули*. Непосредственное вычисление дает

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} \hat{I} + i\epsilon_{ijk} \sigma_k. \quad (12.4)$$

Символ  $\hat{I}$  обозначает единичную  $2 \times 2$  матрицу,  $\epsilon_{ijk}$  есть символ Леви-Чивита, по повторяющимся индексам подразумевается суммирование.

---

<sup>1</sup>Кавычки указывают на условный характер этого соотношения, поскольку понятие вектора подразумевает определенный закон преобразования при поворотах системы координат. Задача 2 к этой главе раскрывает точный смысл соотношения  $\boldsymbol{\sigma}$  с вектором.

При вычислениях чрезвычайно полезны соотношения

$$\begin{aligned}\epsilon_{ijk}\epsilon_{kmn} &= \delta_{im}\delta_{jn} - \delta_{in}\delta_{jm}, \\ \epsilon_{ijk}\epsilon_{njk} &= 2\delta_{in}.\end{aligned}\tag{12.5}$$

При  $s = 1/2$  (мы снова вернулись к безразмерным величинам) операторы спина являются матрицами  $2 \times 2$  и должны действовать на двухкомпонентные величины  $\psi = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$ , называемые *спинорами*. Эрмитово сопряженный спинор записывается в виде строки  $\psi^\dagger = (\alpha^*, \beta^*)$ , условием нормировки является соотношение

$$\psi^\dagger \psi = (\alpha^*, \beta^*) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1.\tag{12.6}$$

По аналогии с преобразованием при повороте координатной волновой функции  $\psi'(\mathbf{r}) = \hat{U}_{\mathbf{n}}(\theta)\psi(\mathbf{r})$  (6.12) закон преобразования спинора при повороте на угол  $\theta$  вокруг оси  $\mathbf{n}$  можно записать в виде

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}' = e^{-i\theta\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{s}}} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = e^{-i\theta\mathbf{n}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}/2} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}\tag{12.7}$$

Это выражение говорит, что даже у покоящейся частицы вектор состояния нетривиально преобразуется при повороте системы координат в случае, если спин не равен нулю. Спинор общего вида  $\begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}) \\ \psi_2(\mathbf{r}) \end{pmatrix}$  при поворотах системы координат преобразуется по закону, обобщающему (6.12) и (12.7):

$$\begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}) \\ \psi_2(\mathbf{r}) \end{pmatrix}' = e^{-i\theta(\hat{\mathbf{l}}+\hat{\mathbf{s}})\cdot\mathbf{n}} \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}) \\ \psi_2(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \equiv e^{-i\theta\hat{\mathbf{j}}\cdot\mathbf{n}} \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}) \\ \psi_2(\mathbf{r}) \end{pmatrix},\tag{12.8}$$

где оператор  $\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{s}}$  есть оператор *полного момента*.

Спинор, отвечающий проекции спина на ось  $z$ , равной  $\pm 1/2$ , находится из уравнения

$$\frac{1}{2}\sigma_z\psi_{\pm} \equiv \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{\pm} \\ \beta_{\pm} \end{pmatrix} = \pm \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \alpha_{\pm} \\ \beta_{\pm} \end{pmatrix}$$

Нормированное решение имеет вид

$$\begin{aligned}\psi_+ &\equiv |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ \psi_- &\equiv |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.\end{aligned}\tag{12.9}$$

Следовательно, спинор общего вида можно разложить как

$$\psi = \alpha|\uparrow\rangle + \beta|\downarrow\rangle,$$

откуда видно, что  $|\alpha|^2$ ,  $|\beta|^2$  соответственно есть вероятности того, что частица имеет проекцию спина на ось  $z$ , равную  $+1/2$ ,  $-1/2$ . Спиноры, отвечающие разным проекциям, ортогональны:

$$\psi_-^\dagger \psi_+ = 0,$$

поэтому, найдя спинор для одной проекции, ответ для другой можно получить из условия ортогональности. Частица, имеющая определенное значение проекции спина на какую либо ось, называется *поляризованной*.

## 12.2 Уравнение Паули. Магнитный момент

Строгое обоснование динамического уравнения для описания квантовых состояний частицы со спином  $s = 1/2$  возможно на основе релятивистского *уравнения Дирака*. Это находится вне рамок данного курса. Однако с помощью правдоподобных рассуждений можно установить вид уравнения для спинора в нерелятивистском случае. Оно должно иметь вид уравнения Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi$$

для двухкомпонентного спинора  $\Psi \equiv \Psi(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}, t) \\ \psi_2(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix}$ , поэтому оператор  $\hat{H}$  должен являться матричным  $2 \times 2$  оператором, содержащим матрицы Паули. Сам В. Паули показал, что аналог уравнения Шредингера для частицы со спином  $1/2$  в магнитном поле с векторным потенциалом  $\mathbf{A}$  и в потенциальном поле с потенциальной энергией  $U$  имеет



вид

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left[ \frac{1}{2m} \left( \boldsymbol{\sigma}, \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 + U(\mathbf{r}, t) \right] \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (12.10)$$

где  $(\mathbf{a}, \mathbf{b})$  обозначает скалярное произведение векторов  $(\mathbf{a}$  и  $\mathbf{b})$ . Распишем оператор в квадратных скобках, используя соотношение (12.4):

$$\begin{aligned} \left( \boldsymbol{\sigma}, \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 &= \sigma_i \sigma_j \left( \hat{p}_i - \frac{e}{c} A_i \right) \left( \hat{p}_j - \frac{e}{c} A_j \right) = \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + \\ &+ i\epsilon_{ijk} \left( \hat{p}_i - \frac{e}{c} A_i \right) \left( \hat{p}_j - \frac{e}{c} A_j \right) \sigma_k = \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \\ &- i\frac{e}{c} \epsilon_{ijk} (\hat{p}_i A_j + A_j \hat{p}_j). \end{aligned}$$

Структура в последнем слагаемом преобразуется как

$$\begin{aligned} \epsilon_{ijk} (\hat{p}_i A_j + A_j \hat{p}_j) &= \epsilon_{ijk} \left( -i\hbar \frac{\partial A_j}{\partial x_i} + A_j \hat{p}_i + A_i \hat{p}_j \right) = -i\hbar \epsilon_{ijk} \frac{\partial A_j}{\partial x_i} = \\ &= -i\hbar [\nabla \times \mathbf{A}]_k = -i\hbar B_k. \end{aligned}$$

Итоговое уравнение, которое получается подстановкой этих равенств в (12.10), принимает вид

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}, t) \\ \psi_2(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} &= \left[ \frac{1}{2m} \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 + U(\mathbf{r}, t) - \right. \\ &\left. - \frac{e\hbar}{2mc} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}) \right] \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}, t) \\ \psi_2(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} \equiv \\ &\equiv \hat{H}_{\text{Pauli}} \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}, t) \\ \psi_2(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (12.11)$$

и называется *уравнением Паули*. Слагаемое  $\propto (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B})$  имеет вид энергии взаимодействия магнитного дипольного момента с внешним магнитным полем, поэтому величину

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = \frac{e\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma}$$

можно назвать оператором магнитного момента частицы с зарядом  $e$  и массой  $m$ . Отметим, что это не весь магнитный момент, а только часть его, называемая *спиновым нормальным магнитным моментом*. Для электрона величина

$$\mu = \mu_B = \frac{|e|\hbar}{2m_e c} = 0.9274 \times 10^{-20} \text{ эрг/Гс} \quad (12.12)$$

называется *магнетоном Бора*, для протона

$$\mu = \mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p c} = 5.050 \times 10^{-24} \text{ эрг/Гс} \quad (12.13)$$

называется *ядерным магнетоном*.

Для движущихся заряженных частиц есть еще и *орбитальный магнитный момент*. Его можно найти, взяв случай однородного магнитного поля с векторным потенциалом  $\mathbf{A} = \frac{1}{2}[\mathbf{B} \times \mathbf{r}]$ . С помощью равенства

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m} \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 &= \frac{1}{2m} \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{2c} [\mathbf{B} \times \mathbf{r}] \right)^2 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{e}{2mc} [\mathbf{B} \times \mathbf{r}] \cdot \hat{\mathbf{p}} + \\ &+ \frac{e^2}{8mc^2} [\mathbf{B} \times \mathbf{r}]^2 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{e}{2mc} \mathbf{B} \cdot [\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}] + \\ &+ \frac{e^2}{8mc^2} [\mathbf{B} \times \mathbf{r}]^2 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{e\hbar}{2mc} \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{l}} + \frac{e^2}{8mc^2} [\mathbf{B} \times \mathbf{r}]^2 \end{aligned}$$

гамильтониан  $\hat{H}_{\text{Pauli}}$  в (12.11) в случае электрона принимает вид

$$\hat{H}_{\text{Pauli}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_e} + \mu_B \mathbf{B} \cdot (\hat{\mathbf{l}} + 2\hat{\mathbf{s}}) + \frac{e^2}{8m_e c^2} [\mathbf{B} \times \mathbf{r}]^2 + U. \quad (12.14)$$

Учтено, что для электрона  $e = -|e|$ , а  $\hat{\mathbf{s}} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$ .

Из выражения (12.14) видно, что оператор магнитного момента электрона представляется в виде суммы спинового и орбитального вклада

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_e = -\mu_B \left( g_s^{(e)} \hat{\mathbf{s}} + g_l^{(e)} \hat{\mathbf{l}} \right), \quad (12.15)$$

где величины  $g_s^{(e)} = 2$  и  $g_l^{(e)} = 1$  называются соответственно спиновым и орбитальным *гиромагнитным отношением*. Казалось бы, что в случае нейтральной частицы с  $e = 0$  магнитный момент должен равняться нулю, однако это не так. У элементарных частиц имеется *аномальный магнитный момент*, учет которого сводится к тому, что спиновое гиромагнитное отношение  $g_s \neq 2$ . Например, для нейтрона  $g_s^{(n)} \approx -2 \times 1.91$ , а орбитальное гиромагнитное отношение  $g_l^{(n)} = 0$ . Вообще, измерение аномальных магнитных моментов элементарных частиц составляет важную задачу современной экспериментальной физики. Дело в том, что значения  $g_s \neq 2$  указывают на тонкие квантовые эффекты в виде виртуального рождения и аннигиляции пар частица – античастица и на возможное наличие внутренней структуры частиц, считавшихся элементарными. Измерения аномальных магнитных моментов относятся к одним из

самых точных измерений в физике. Чтобы в этом убедиться, достаточно взглянуть на значения спиновых магнитных моментов электрона, протона, антипротона, нейтрона и мюона<sup>2</sup> в выражениях для их операторов:

$$\begin{aligned}\hat{\mu}_s^{(e)} &= \frac{e\hbar}{2m_e c} \times 2\hat{s} \times (1.00115965218076 \pm 0.00000000000027), \\ \hat{\mu}_s^{(p)} &= \frac{e\hbar}{2m_p c} \times 2\hat{s} \times (2.792847356 \pm 0.000000023), \\ \hat{\mu}_s^{(\bar{p})} &= \frac{e\hbar}{2m_p c} \times 2\hat{s} \times (-2.792845 \pm 0.000012), \\ \hat{\mu}_s^{(n)} &= \frac{e\hbar}{2m_p c} \times 2\hat{s} \times (-1.9130427 \pm 0.0000005), \\ \hat{\mu}_s^{(\mu)} &= \frac{e\hbar}{2m_\mu c} \times 2\hat{s} \times (1.0011659209 \pm 0.0000000006).\end{aligned}$$

Для получения этих результатов использовались разные методы. Например, аномальные магнитные моменты электрона и антипротона были получены в опытах по наблюдению электромагнитных переходов между близко лежащими квантовыми уровнями одиночных частиц в ловушке Пеннинга. Найти эти уровни в случае электрона предлагается в задаче 5 к этой главе.

## 12.3 Прецессия спина в магнитном поле

Аномальный магнитный момент мюона был измерен в опыте по прецессии спина этой частицы в магнитном поле. Разберем это явление в простейшей модели нейтральной частицы со спином  $s = 1/2$  и с магнитным моментом величины  $\mu$  в однородном магнитном поле напряженностью  $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$ . Рассмотрим только ту часть задачи, которая связана со спиновой степенью свободы. Ей отвечает гамильтониан  $\hat{H} = \mu\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} = \mu B\sigma_z$ . Собственные значения этого гамильтониана, равные  $\pm\mu B$ , дают магнитные подуровни частицы. Спиновое состояние задается соответственно спинорами  $|z, +1/2\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  и  $|z, -1/2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ , где в качестве

---

<sup>2</sup>Мюоном называется элементарная частица, во всем похожая на электрон, но в 200 раз более массивная.

меток вектора состояния указана ось и проекция спина на эту ось. Какой будет динамика спина частицы в таком магнитном поле?

Уравнение Паули в данном случае принимает вид

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_1(t) \\ \psi_2(t) \end{pmatrix} = \mu B \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1(t) \\ \psi_2(t) \end{pmatrix}$$

и имеет общее решение

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \psi_1(t) \\ \psi_2(t) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} C_1 e^{-i\mu B t/\hbar} \\ C_2 e^{i\mu B t/\hbar} \end{pmatrix} = C_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-i\mu B t/\hbar} + \\ &+ C_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{i\mu B t/\hbar} = \\ &\equiv C_1 e^{-i\mu B t/\hbar} |z, +1/2\rangle + C_2 e^{i\mu B t/\hbar} |z, -1/2\rangle. \end{aligned}$$

Квадраты модулей коэффициентов разложения дают вероятности иметь заданную проекцию спина на ось  $z$ . Если при  $t = 0$  приготовить частицу в состоянии  $|\psi(0)\rangle = |z, +1/2\rangle$ , то  $C_1 = 1$ ,  $C_2 = 0$ . Частица будет оставаться в этом состоянии сколь угодно долго (если пренебречь малой вероятностью перехода из состояния  $|z, +1/2\rangle$  в  $|z, +1/2\rangle$  за счет излучения). Тот же вывод справедлив и для  $|\psi(0)\rangle = |z, -1/2\rangle$ . Тогда  $C_1 = 0$ ,  $C_2 = 1$ , и частица, приготовленная в момент времени  $t = 0$  в этом состоянии, будет оставаться в нем сколь угодно долго (излучение из состояния  $|z, -1/2\rangle$  с наиминимальшей энергией  $E = -\mu B$  строго запрещено).

Что произойдет с частицей, поляризованной в плоскости, поперечной направлению магнитного поля  $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$ ? Для ответа на этот вопрос найдем собственные векторы с определенной проекцией спина на ось  $x$  из уравнения на собственные значения  $\sigma_x \psi = 2s_x \psi$ . Нормированные векторы имеют вид  $|x, +1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$  и  $|x, -1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ . Пусть в начальный момент времени  $t = 0$  проекция спина на ось  $x$  равнялась  $+1/2$ , тогда  $|\psi(0)\rangle = |x, +1/2\rangle$ . Этот вектор состояния можно разложить по векторам стационарных состояний  $|z, \pm 1/2\rangle$ :

$$|x, +1/2\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (|z, +1/2\rangle + |z, -1/2\rangle).$$

Согласно выражению (4.2), первоначальный вектор состояния в произвольный момент времени будет иметь вид

$$\begin{aligned}
|\psi(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{-i\mu Bt/\hbar}|z, +1/2\rangle + e^{i\mu Bt/\hbar}|z, -1/2\rangle) \equiv \\
&\equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-i\mu Bt/\hbar} + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{i\mu Bt/\hbar} = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \cos \frac{\mu Bt}{\hbar} - \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \sin \frac{\mu Bt}{\hbar} \equiv \\
&\equiv \cos \frac{\mu Bt}{\hbar} |x, +1/2\rangle - i \sin \frac{\mu Bt}{\hbar} |x, -1/2\rangle.
\end{aligned}$$

По общим правилам квантовой механики вероятности иметь проекцию спина на ось  $x$ , равную  $+1/2$  и  $-1/2$  в момент времени  $t$  равны соответственно

$$\begin{aligned}
w_{x,+1/2} &= \cos^2 \frac{\mu Bt}{\hbar}, \\
w_{x,-1/2} &= \sin^2 \frac{\mu Bt}{\hbar}.
\end{aligned} \tag{12.16}$$

Среднее значение проекции спина на ось  $x$  равно

$$\langle s_x \rangle = \frac{1}{2} \left( \cos^2 \frac{\mu Bt}{\hbar} - \sin^2 \frac{\mu Bt}{\hbar} \right) = \frac{1}{2} \cos \frac{2\mu Bt}{\hbar}.$$

Видно, что оно меняется периодически с частотой

$$\Omega = \frac{2\mu B}{\hbar}. \tag{12.17}$$

Если проследить за направлением спина частица при прецессии, то можно измерить магнитный момент  $\mu$ , измерив  $\Omega$ . В случае мюона такая возможность возникает благодаря тому, что мюон нестабилен и распадается по каналу  $\mu^- \rightarrow e^- \nu_\mu \bar{\nu}_e$ . В конечном состоянии имеется электрон  $e^-$ , который можно детектировать, и мюонное нейтрино  $\nu_\mu$  и электронное антинейтрино  $\bar{\nu}_e$ , которые не регистрируются ввиду их крайне слабого взаимодействия с веществом. Распад мюона происходит за счет слабого взаимодействия, которое не сохраняет четность. Несохранение проявляется в том, что электрон вылетает в основном в направлении, противоположном направлению спина мюона. Временная зависимость счета числа зарегистрированных электронов обнаружила периодическую зависимость, по которой и было получено значение магнитного момента мюона, приведенное в предыдущем разделе.

## 12.4 Опыт Штерна – Герлаха

Опыт Штерна – Герлаха показал, что пучок нейтральных частиц со спином  $1/2$  в неоднородном магнитном поле расщепляется в пространстве на два пучка. Для объяснения результатов этого опыта применим уравнения Гейзенберга (4.11) для оператора импульса с гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \mu \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B},$$

описывающего нейтральную частицу со спином  $1/2$  в магнитном поле. Для  $i$ -й компоненты оператора импульса получим:

$$\frac{d\hat{p}_i}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{p}_i] = -i \frac{\mu}{\hbar} \sigma_j [B_j, \hat{p}_i] = \frac{\partial}{\partial r_i} (\mu \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}).$$

В векторном виде это уравнение запишется как

$$\frac{d\hat{\mathbf{p}}}{dt} = \boldsymbol{\nabla} (\mu \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}), \quad (12.18)$$

из которого видно, что оператор в правой части  $\hat{\mathbf{F}} = -\boldsymbol{\nabla} (-\mu \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B})$  можно интерпретировать как оператор силы, действующей на частицу со спином  $1/2$ .

Пусть первоначальный пучок движется вдоль оси  $y$ . Выберем напряженность магнитного поля в виде

$$\mathbf{B} = (-\beta x, 0, B_0 + \beta z),$$

где неоднородность направленного вдоль оси  $z$  поля учтена в простейшей линейной форме с постоянным наклоном  $\beta$ . Компонента напряженности вдоль  $x$  возникает с необходимостью ввиду уравнения Максвелла  $\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{B} = 0$ . Возьмем среднее от операторного уравнения (12.18) по состоянию, описываемому спинором  $\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$ . Для любого оператора  $\hat{A}$  его среднее в случае частицы со спином  $1/2$  определяется как

$$\langle \hat{A} \rangle \equiv \psi^\dagger \hat{A} \psi = (\psi_1^*, \psi_2^*) \hat{A} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}.$$

По определению оператора производной по времени от оператора импульса усреднение левой части (12.18) приводит к соотношению

$$\left\langle \frac{d\hat{\mathbf{p}}}{dt} \right\rangle = \frac{d\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle}{dt}.$$

Поскольку

$$\nabla(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}) = \left[ \begin{pmatrix} 0 & -\beta \\ -\beta & 0 \end{pmatrix}, 0, \begin{pmatrix} \beta & 0 \\ 0 & -\beta \end{pmatrix} \right],$$

то уравнения движения для средних значений компонент оператора импульса запишутся в виде

$$\begin{aligned} \frac{d\langle \hat{p}_x \rangle}{dt} &= -\mu\beta(\psi_1^*, \psi_2^*) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = -\mu\beta(\psi_1^* \psi_2 + \psi_2^* \psi_1), \\ \frac{d\langle \hat{p}_y \rangle}{dt} &= 0, \\ \frac{d\langle \hat{p}_z \rangle}{dt} &= -\mu\beta(\psi_1^*, \psi_2^*) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \mu\beta(|\psi_1|^2 - |\psi_2|^2). \end{aligned}$$

Если пучок поляризован в состоянии с проекцией спина на ось  $z$ , равной  $+1/2$ , то  $\psi_2 = 0$ , и

$$\frac{d\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle}{dt} = \mathbf{e}_z \mu \beta.$$

Такой пучок будет отклоняться в сторону положительных  $z$ , поскольку при сделанном выборе напряженности магнитного поля  $\beta > 0$  задает направление и величину ее градиента. Если пучок поляризован в состоянии с проекцией  $s_z = -1/2$ , то  $\psi_1 = 0$  и

$$\frac{d\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle}{dt} = -\mathbf{e}_z \mu \beta.$$

Такой пучок будет отклоняться вниз.

## 12.5 Сложение моментов

Всякая движущаяся частица может обладать ненулевым орбитальным моментом  $l$ . Если у нее кроме того есть ненулевой спин  $s$ , то возникает вопрос о возможных значениях полного момента  $j$ . Можно также задаться вопросом о том, каков спин составной системы, являющейся связанным состоянием двух частиц со спинами  $s_1$  и  $s_2$ . Например, каков спин дейтона, который представляет собой связанное состояние протона и нейтрона, каждый из которых имеет спин  $1/2$ ? Для ответа на такие вопросы необходимо решить задачу *сложения моментов*. Сформулируем эту задачу более детально.

Пусть имеется две частицы с полными моментами  $j_1$  и  $j_2$ . Состояние каждой из частиц задается вектором состояния соответственно  $|j_1, m_1\rangle$  и  $|j_2, m_2\rangle$ , где  $m_{1,2}$  обозначает квантовое число проекции момента на ось  $z$ . Для составной системы из этих частиц в качестве базиса векторов состояния можно взять прямое произведение  $|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle$ . Это очевидно возможно, если взаимодействие между частицами пренебрежимо мало. Но и при сильном взаимодействии вектор состояния составной системы в силу условия полноты может быть разложен в виде линейной комбинации указанных прямых произведений. Очевидно, что размерность базиса из этих прямых произведений равна  $N = \sum (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ . Далее для сокращения записи будем использовать обозначение

$$|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle \equiv |j_1, m_1; j_2, m_2\rangle.$$

С другой стороны, при сильном взаимодействии двух частиц их связанное состояние реагирует на внешние поля как одна частица с моментом  $j$  и проекцией  $m$  на ось  $z$ , вектор состояния имеет вид  $|j, m\rangle$ . Эти векторы состояния тоже образуют базис. В силу полноты оба базиса эквиваленты, поэтому один из них можно разложить по другому:

$$|j, m\rangle = \sum_{j_1, m_1; j_2, m_2} C_{j_1, m_1; j_2, m_2}^{j, m} |j_1, m_1; j_2, m_2\rangle. \quad (12.19)$$

Коэффициенты разложения  $C_{j_1, m_1; j_2, m_2}^{j, m}$  называются *коэффициентами Клебша – Гордана*. Задача сложения моментов состоит в том, чтобы по заданным  $j_{1,2}$  и  $m_{1,2}$  найти спектр возможных значений полного момента  $j$  и его проекции и соответствующие им коэффициенты Клебша – Гордана.



Оператор момента составной системы равен прямой сумме операторов момента двух частиц:  $\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{j}}_1 + \hat{\mathbf{j}}_2$ . В частности,  $\hat{j}_z = \hat{j}_{1z} + \hat{j}_{2z}$ , поэтому  $\hat{j}_z|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle = (m_1 + m_2)|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle$ . Так как этот результат справедлив для каждого слагаемого в суперпозиции (12.19), а  $\hat{j}_z|j, m\rangle = m|j, m\rangle$ , то из этих соотношений вытекает равенство

$$m = m_1 + m_2.$$

Алгоритм нахождения коэффициентов Клебша – Гордана состоит в следующей последовательности действий. Поскольку  $(m_1)_{\max} = j_1$ ,  $(m_2)_{\max} = j_2$ , то  $m_{\max} = j_1 + j_2$ , поэтому  $j_{\max} = j_1 + j_2$ . В линейной комбинации (12.19) остается лишь одно слагаемое; из условия нормировки сразу вытекает, что  $C_{j_1, j_1; j_2, j_2}^{j_1+j_2, j_1+j_2} = 1$ . Всего должно быть  $2(j_1+j_2)+1$  состояний с  $j = j_1 + j_2$ , различающихся проекцией момента на ось  $z$ , которые должны получаться действием понижающего оператора  $\hat{j}_- = \hat{j}_{1-} + \hat{j}_{2-}$  на вектор состояния  $|j_1 + j_1, j_1 + j_2\rangle = |j_1, j_1; j_2, j_2\rangle$ . Применив (8.7), получим, что

$$\begin{aligned} \hat{j}_-|j_1 + j_1, j_1 + j_2\rangle &= \sqrt{2(j_1 + j_2)}|j_1 + j_1, j_1 + j_2 - 1\rangle = \\ &= (\hat{j}_{1-} + \hat{j}_{2-})|j_1, j_1; j_2, j_2\rangle = \\ &= \sqrt{2j_1}|j_1, j_1 - 1; j_2, j_2\rangle + \sqrt{2j_2}|j_1, j_1; j_2, j_2 - 1\rangle, \end{aligned}$$

откуда следует выражение

$$\begin{aligned} |j_1 + j_1, j_1 + j_2 - 1\rangle &= \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}}|j_1, j_1 - 1; j_2, j_2\rangle + \\ &+ \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}}|j_1, j_1; j_2, j_2 - 1\rangle. \end{aligned} \quad (12.20)$$

Коэффициенты Клебша – Гордана равны

$$\begin{aligned} C_{j_1, j_1-1; j_2, j_2}^{j_1+j_2, j_1+j_2-1} &= \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}}, \\ C_{j_1, j_1; j_2, j_2-1}^{j_1+j_2, j_1+j_2-1} &= \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}}. \end{aligned}$$

Далее действуем оператором  $\hat{j}_-$  на левую часть равенства (12.20), а оператором  $\hat{j}_{1-} + \hat{j}_{2-}$  на его правую часть и находим соответствующие коэффициенты разложения. Так действуем до тех пор, пока не переберем все  $2(j_1 + j_2) + 1$  проекции.

Но это не все состояния. Состоянием, ортогональным к линейной комбинации (12.20), является

$$\begin{aligned} |j_1 + j_1 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle = & -\sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} |j_1, j_1 - 1; j_2, j_2\rangle + \\ & + \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} |j_1, j_1; j_2, j_2 - 1\rangle. \end{aligned} \quad (12.21)$$

Тот факт, что эта комбинация отвечает значению  $j = j_1 + j_2 - 1$ , проверяется прямым вычислением. Для этого надо показать, что  $\hat{j}^2 |j_1 + j_1 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle = (j_1 + j_2)(j_1 + j_2 - 1) |j_1 + j_1 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle$ , для чего необходимо вычислить результат действия оператора  $(\hat{j}_1 + \hat{j}_1)^2$  на вектор состояния в правой части (12.21). Действием понижающего оператора найдутся все  $2(j_1 + j_2 - 1) + 1$  состояния с разными проекциями и коэффициенты Клебша – Гордана для  $j = j_1 + j_2 - 1$ . В частности, среди них будет присутствовать и линейная комбинация для  $|j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 2\rangle$ .

Это опять-таки не все состояния. Состоянием, ортогональным к  $|j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 2\rangle$  и к  $|j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 2\rangle$ , будет состояние  $|j_1 + j_2 - 2, j_1 + j_2 - 2\rangle$ . Коэффициенты соответствующей линейной комбинации находятся из условий ортогональности и нормировки.

Пусть  $j_1 > j_2$ . Процедура будет продолжаться до тех пор, пока не будет достигнуто значение  $j = j_1 - j_2$ , которое отвечает  $m_{\max} = (m_1)_{\max} - (m_2)_{\max}$ . В классической физике это состояние с ориентированными вдоль оси  $z$  и противоположно направленными векторами  $\hat{j}_1$  и  $\hat{j}_2$ . Процесс остановится при  $j = j_2 - j_1$ . В результате спектр возможных значений  $j$  при сложении двух моментов  $j_1$  и  $j_2$  простирается от  $j_1 + j_2$  до  $j_1 - j_2$ . Подсчитаем полное число полученных состояний, выписав возможные значения полученных моментов вместе с числом проекций момента на ось  $z$ :

$$\left. \begin{array}{ll} j_1 + j_2 & 2(j_1 + j_2 + 0) + 1 \text{ значение проекции} \\ j_1 + j_2 - 1 & 2(j_1 + j_2 - 1) + 1 \text{ значение проекции} \\ j_1 + j_2 - 2 & 2(j_1 + j_2 - 2) + 1 \text{ значение проекции} \\ \dots & \dots \\ j_1 + j_2 - 2j_2 & 2(j_1 + j_2 - 2j_2) + 1 \text{ значение проекции} \end{array} \right\} 2j_2 + 1 \text{ строка.}$$

Полное число полученных состояний получится суммированием чисел в правом столбце этой таблицы:

$$N = 2(j_1 + j_2)(2j_2 + 1) - 2 \sum_{k=1}^{2j_2} k + 2j_2 + 1 = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1).$$

Процедуру можно повторить при  $j_1 < j_2$ . Тогда нижнее значения момента при сложении будет  $j_2 - j_1$ . Объединив два рассмотрения, получим, что возможные значения момента  $j$ , которые получаются при сложении двух моментов  $j_1$  и  $j_2$ , попадают в интервал

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2. \quad (12.22)$$

Число состояний, полученных при сложении моментов, в обоих случаях совпадает с числом, рассчитанным для двух частиц с моментами  $j_1$  и  $j_2$ .

Для примера рассмотрим сложение моментов  $j_1 = j_2 = 1/2$ . Такая задача возникает, в частности, при нахождении спиновых состояний электронов в гелии и гелиеподобных ионов. В случае спина  $1/2$ , как уже упоминалось, удобно обозначать векторы состояния стрелкой вверх  $\uparrow$  или вниз  $\downarrow$  в зависимости от того, равна ли проекция спина на ось  $z$   $+1/2$  или  $-1/2$ . В соответствии с правилом (12.22) возможными значениями полного спина являются  $S = 1$  (три состояния с проекциями  $S_z = +1, 0, -1$ ) и  $S = 0$  (одно состояние). Состояние с максимальным спином и максимальной проекцией  $S = 1$ ,  $S_z = +1$  имеет вид

$$|1, +1\rangle = |1/2, +1/2; 1/2, +1/2\rangle \equiv |\uparrow\uparrow\rangle. \quad (12.23)$$

Построим остальные два состояния с  $S = 1$  действием понижающего оператора  $\hat{S}_- = \hat{s}_{1-} + \hat{s}_{2-}$ :

$$\hat{S}_-|1, +1\rangle = \sqrt{2}|1, 0\rangle = \hat{s}_{1-}|\uparrow\uparrow\rangle + \hat{s}_{2-}|\uparrow\uparrow\rangle = |\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle,$$

откуда получим:

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle). \quad (12.24)$$

Применив к этому вектору состояния оператор  $\hat{S}_-$ , получим

$$|1, -1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle. \quad (12.25)$$

Вектор состояния  $|0, 0\rangle$  находится из условия ортогональности к  $|1, 0\rangle$  и может быть выбран в виде

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle). \quad (12.26)$$

Отметим очень важное свойство симметрии векторов состояний с определенным спином. При  $S = 1$  все три вектора состояния симметричны относительно перестановки проекций спина каждой из частиц, а при  $S = 0$  – антисимметричны. Так что четность относительно перестановки спиновых проекций двух частиц равна  $P_S = (-1)^{S+1}$ . Эта формула верна только для данного случая двух частиц со спином  $1/2$ . Вместе с тем для любого числа  $N$  частиц со спином  $1/2$  все  $2N + 1$  спиновых векторов состояния с максимальным полным спином  $N/2$  этой системы симметричны относительно перестановки любой пары частиц.

## 12.6 Правила отбора и теорема Вигнера – Экарта

*Правила отбора* представляют из себя утверждения, позволяющие без вычислений указывать на матричные элементы операторов, обращаемые в нуль. В этом состоит их несомненная практическая польза. В основе вывода таких правил лежат самые общие свойства квантовомеханических операторов при преобразованиях симметрии, которые даются формулой (6.15).

*Скалярным оператором* называется оператор  $\hat{S}$ , который не меняется при повороте системы координат на угол  $\theta$  вокруг оси  $\mathbf{n}$ :

$$\hat{S} = e^{-i\theta\hat{\mathbf{j}}\cdot\mathbf{n}}\hat{S}e^{i\theta\hat{\mathbf{j}}\cdot\mathbf{n}}.$$

При  $\theta \ll 1$  отсюда следует, что  $[\hat{S}, \hat{\mathbf{j}} \cdot \mathbf{n}] = 0$ , а поскольку в качестве  $\mathbf{n}$  можно взять любой декартовый орт, то

$$[\hat{S}, \hat{j}_i] = 0. \quad (12.27)$$

Геометрический смысл этого соотношения состоит в том, что  $\hat{j}_i$  есть генератор поворотов вокруг оси  $i$ , а скалярный оператор при поворотах не меняется. Вычислим матричный элемент (12.27) при  $i = z$ :

$$0 = \langle j', m' | [\hat{S}, \hat{j}_z] | j, m \rangle = \langle j', m' | \hat{S}\hat{j}_z - \hat{j}_z\hat{S} | j, m \rangle = (m - m') \langle j', m' | \hat{S} | j, m \rangle.$$

Из этого равенство следует, что  $\langle j', m' | \hat{S} | j, m \rangle \neq 0$  при  $m = m'$ . Скалярный оператор не меняет значения проекции полного момента квантовой системы на ось  $z$ . Из (12.27) вытекает также, что  $[\hat{S}, \hat{\mathbf{j}}^2] = 0$ . Из этого коммутатора получаем, что

$$[j(j+1) - j'(j'+1)] \langle j', m' | \hat{S} | j, m \rangle = 0,$$

откуда видно, что ненулевые матричные элементы скалярного оператора возможны лишь при  $j = j'$ .

*Векторным оператором*  $\hat{V}_i$  ( $i = x, y, z$ ) называется оператор, который при поворотах системы координат преобразуется как радиус-вектор. Это условие выражается через его коммутационные соотношения с генератором поворотов  $\hat{\mathbf{j}}$ :

$$[\hat{j}_i, \hat{V}_j] = i\epsilon_{ijk} \hat{V}_k. \quad (12.28)$$

В частности,  $[\hat{j}_z, \hat{V}_z] = 0$ , откуда, взяв матричный элемент, получим

$$0 = \langle j', m' | \hat{j}_z \hat{V}_z - \hat{V}_z \hat{j}_z | j, m \rangle = (m - m') \langle j', m' | \hat{V}_z | j, m \rangle.$$

Отсюда видно, что если  $m \neq m'$ , то  $\langle j', m' | \hat{V}_z | j, m \rangle = 0$ . В случае повышающих и понижающих компонент  $\hat{V}_\pm = \hat{V}_x \pm i\hat{V}_y$  из коммутатора  $[\hat{j}_z, \hat{V}_\pm] = \pm \hat{V}_\pm$  следует соотношение  $(m - m') \langle j', m' | \hat{V}_\pm | j, m \rangle = \pm \langle j', m' | \hat{V}_\pm | j, m \rangle$ , которое говорит, что  $\langle j', m' | \hat{V}_\pm | j, m \rangle \neq 0$  лишь при  $m' = m \pm 1$ .

Для вывода правила отбора по моменту надо воспользоваться операторным тождеством

$$[\hat{\mathbf{j}}^2, [\hat{\mathbf{j}}^2, \hat{V}_i]] = 2(\hat{V}_i \hat{\mathbf{j}}^2 + \hat{\mathbf{j}}^2 \hat{V}_i) - 4\hat{j}_i(\hat{\mathbf{j}} \cdot \hat{\mathbf{V}}), \quad (12.29)$$

которое можно доказать с помощью коммутационных соотношений (12.28). Возьмем матричный элемент от операторного равенства (12.29) и получим выражение

$$\begin{aligned} -4\langle j', m' | \hat{j}_i(\hat{\mathbf{j}} \cdot \hat{\mathbf{V}}) | j, m \rangle &= \{[j'(j'+1) - j(j+1)]^2 - \\ &\quad - 2[j'(j'+1) + j(j+1)]\} \times \\ &\quad \times \langle j', m' | \hat{V}_i | j, m \rangle. \end{aligned} \quad (12.30)$$

Матричный элемент в левой части (12.30) распишем с применением условия полноты  $1 = \sum_{j_1, m_1} |j_1, m_1\rangle \langle j_1, m_1|$ :

$$\begin{aligned} \langle j', m' | \hat{j}_i(\hat{\mathbf{j}} \cdot \hat{\mathbf{V}}) | j, m \rangle &= \sum_{j_1, m_1} \langle j', m' | \hat{j}_i | j_1, m_1 \rangle \langle j_1, m_1 | (\hat{\mathbf{j}} \cdot \hat{\mathbf{V}}) | j, m \rangle = \\ &= \delta_{jj'} \langle j, m' | \hat{j}_i | j, m \rangle \langle j, m | (\hat{\mathbf{j}} \cdot \hat{\mathbf{V}}) | j, m \rangle. \end{aligned}$$

При получении правой части этого равенства было учтено, что оператор  $(\hat{\mathbf{j}} \cdot \hat{\mathbf{V}})$  является скалярным оператором с правилами отбора  $j' = j$ ,  $m' = m$ , полученными в начале этого параграфа, а компоненты оператора момента не изменяют квантового числа  $j$ :  $\langle j', m' | \hat{j}_i | j, m \rangle \propto \delta_{jj'}$ . С учетом этого (12.30) принимает вид

$$\begin{aligned} -4\delta_{jj'} \langle j, m' | \hat{j}_i | j, m \rangle \langle j, m | (\hat{\mathbf{j}} \cdot \hat{\mathbf{V}}) | j, m \rangle &= \{ [j'(j' + 1) - j(j + 1)]^2 - \\ &- 2[j'(j' + 1) + j(j + 1)] \} \times \\ &\times \langle j', m' | \hat{V}_i | j, m \rangle. \end{aligned} \quad (12.31)$$

При  $j' \neq j$  из (12.31) следует уравнение

$$[j'(j' + 1) - j(j + 1)]^2 - 2[j'(j' + 1) + j(j + 1)] = 0,$$

имеющее четыре решения:  $j' = -1/2 \pm (j - 1/2)$ ,  $j' = -1/2 \pm (j + 3/2)$ . Поскольку  $j'$  неотрицательно, то в обеих группах решений следует отбросить решения с нижним знаком. В результате получим, что  $j' = j \pm 1$ . Если  $j' = j$ , то из (12.31) следует важное соотношение

$$\langle j, m' | \hat{\mathbf{V}} | j, m \rangle = \frac{\langle j, m | (\hat{\mathbf{j}} \cdot \hat{\mathbf{V}}) | j, m \rangle}{j(j + 1)} \langle j, m' | \hat{\mathbf{j}} | j, m \rangle, \quad (12.32)$$

которое выражает матричные элементы векторного оператора через известные матричные элементы оператора момента импульса  $\langle j, m' | \hat{\mathbf{j}} | j, m \rangle$ , чья зависимость от квантовых чисел  $j$ ,  $m$  и  $m'$  полностью известна. Собрвав все случаи, получим, что правила отбора матричных элементов векторного оператора по полному моменту гласят

$$j' = j \pm 1, j. \quad (12.33)$$

Хотя (12.32) выражает собой соотношение между матричными элементами, его можно трактовать более широко, заменив в правой части матричный элемент оператора момента на сам оператор  $\hat{\mathbf{j}}$ , по умолчанию подразумевая последующее взятие матричного элемента между состояниями с данным полным моментом  $j$ , но с разными проекциями  $m$  и  $m'$ . Тогда оно принимает вид

$$\langle \hat{\mathbf{V}} \rangle = \alpha_V(j, m) \hat{\mathbf{j}}, \quad (12.34)$$

где коэффициент пропорциональности

$$\alpha_V(j, m) = \frac{\langle j, m | (\hat{\mathbf{j}} \cdot \hat{\mathbf{V}}) | j, m \rangle}{j(j + 1)}.$$

Соотношение (12.32) (или эквивалентное ему (12.34)) является одной из форм *теоремы Вигнера – Эккарта*. Еще до создания аппарата квантовой механики и доказательства теоремы Вигнера – Эккарта применялся квазиклассический аналог выражения (12.34) в виде так называемой *векторной модели*: среднее значение вектора спина  $\mathbf{s}$  или орбитального момента  $\mathbf{l}$  пропорционально полному моменту  $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$ , сохраняющемуся в отсутствие внешних полей:  $\langle \mathbf{s} \rangle = \alpha_s \mathbf{j}$ ,  $\langle \mathbf{l} \rangle = \alpha_l \mathbf{j}$ .

Получим правила отбора по четности. Пусть  $\hat{P}$  есть оператор четности, а состояния  $i$  и  $f$  имеют определенные четности  $P_i = \pm 1$  и  $P_f = \pm 1$ :  $\hat{P}|i\rangle = P_i|i\rangle$ ,  $\hat{P}|f\rangle = P_f|f\rangle$ . Оператор  $\hat{S}$  называется скалярным, если  $\hat{P}\hat{S}\hat{P}^\dagger = \hat{S}$ , и псевдоскалярным, если  $\hat{P}\hat{S}\hat{P}^\dagger = -\hat{S}$ . Из цепочки равенств

$$\langle f|\hat{S}|i\rangle = \langle f|\hat{P}^\dagger\hat{P}\hat{S}\hat{P}^\dagger\hat{P}|i\rangle = P_iP_f\langle f|\hat{P}\hat{S}\hat{P}^\dagger|i\rangle = P_iP_f\langle f|\hat{S}|i\rangle$$

следует, что  $\langle f|\hat{S}|i\rangle \neq 0$  при  $P_iP_f = 1$ . Аналогичное рассмотрение для псевдоскалярного оператора показывает, что его матричные элементы между состояниями с определенной четностью отличны от нуля при выполнении условия  $P_iP_f = -1$ . Для векторного оператора  $\hat{\mathbf{V}}$  с законом преобразования  $\hat{P}\hat{\mathbf{V}}\hat{P}^\dagger = -\hat{\mathbf{V}}$  то же рассмотрение дает правила отбора по четности  $P_iP_f = -1$ , тогда как для *псевдовекторного или аксиально-векторного* оператора  $\hat{P}\hat{\mathbf{A}}\hat{P}^\dagger = \hat{\mathbf{A}}$  правила отбора по четности гласят  $P_iP_f = 1$ .

## 12.7 Задачи

1. Найти операторы спина в случае  $s = 1$ .
2. Показать, что величина  $\chi^\dagger \boldsymbol{\sigma} \psi$ , где  $\psi$  и  $\chi$  суть два спинора, при пространственных поворотах (12.7) преобразуется как вектор. *Указание.* Рассмотреть случай бесконечно малого угла  $\theta \ll 1$  и применить (12.4).
3. Найти нормированные спиноры, отвечающие определенной проекции  $\pm 1/2$  на ось, заданную единичным вектором

$$\mathbf{n} = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta).$$

Получить из них спиноры, отвечающие определенным проекциям на оси  $x, y, z$ .

4. Найти уровни энергии электрона в однородном магнитном поле с учетом спина.
5. В экспериментах по прецизионному измерению магнитного момента электрона использовалась *ловушка Пеннинга* в виде комбинации однородного магнитного поля  $\mathbf{B} = B(0, 0, 1)$  и электрического поля квадрупольного типа с электростатическим потенциалом  $\varphi(\mathbf{r}) = \gamma(x^2 + y^2 - 2z^2)$ ,  $\gamma = \text{const}$ . Найти уровни энергии электрона с магнитным моментом  $\mu = \mu_B \frac{g}{2}$  в такой ловушке. Определить квантовые числа двух наиболее близких уровней. Используя экспериментальные значения  $\frac{g}{2} = 1,00115965218076$  и  $B = 5$  Тесла, вычислить длину волны излучения, испускаемого при переходе между такими уровнями в приближении  $\gamma = 0$ . *Указание.* Решить уравнение Паули с векторным потенциалом магнитного поля в виде  $\mathbf{A} = \frac{1}{2}[\mathbf{B} \times \mathbf{r}]$  методом разделения переменных в цилиндрических координатах  $(r, \varphi, z)$ , вводя новую радиальную координату  $\rho \propto r^2 = x^2 + y^2$ .

6. Показать, что оператор скорости заряженной частицы в магнитном поле имеет вид

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{1}{m} \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right).$$

Получить операторные уравнения движения для этого оператора, для оператора спинового магнитного момента

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_s = \frac{e\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} g_s$$

и для оператора  $\hat{h} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{v}}$ . *Указание.* Использовать уравнения Гейзенберга для соответствующих операторов.

7. Проверить, что линейная комбинация (12.21) отвечает значению  $j = j_1 + j_2 - 1$ .
8. Найти коэффициенты Клебша – Гордана при сложении моментов  
(а)  $j_1 = j_2 = 1$ ; (б)  $j_1 = 1, j_2 = 1/2$ .



9. Найти коэффициенты Клебша – Гордана при сложении орбитального момента электрона  $l$  и спина  $s = 1/2$ . Выписать волновые функции электрона с заданным полным моментом  $j$  и его проекцией на ось  $z$  в виде линейных комбинаций прямых произведений сферических функций и двухкомпонентных спиноров.
10. Получить правила отбора по четности для скалярного, псевдоскалярного, векторного и аксиально-векторного операторов.
11. Вывести выражение (12.29).
12. Две частицы со спином  $1/2$  взаимодействуют по закону

$$\hat{V} = -J(\hat{\mathbf{s}}_1, \hat{\mathbf{s}}_1).$$

В начальный момент времени они находились в состоянии  $|\uparrow, \downarrow\rangle$ . Найти вероятность того, что в момент времени  $t$  частицы окажутся в состоянии  $|\downarrow, \uparrow\rangle$ .

13. Частица со спином  $s = 1$  описывается гамильтонианом вида  $\hat{H} = A\hat{s}_z^2 + B(\hat{s}_x^2 - \hat{s}_y^2)$ . Найти энергии и соответствующие им векторы состояния такой частицы.
14. Две частицы со спином  $s = 1/2$  и магнитными моментами  $\mu_1$  и  $\mu_2$ , взаимодействующие по закону  $\hat{V} = -J(\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2)$ , помещены в постоянное однородное магнитное поле  $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ . Найти уровни энергии такой системы и соответствующие им спиновые векторы состояния в базисе  $|s_{1z}, s_{2z}\rangle$ . Поступательным движением пренебречь.

## Глава 13

# Квантовые вычисления

Теория сложности вычислений классифицирует задачи по тому, как зависит время счета на компьютере от длины входного регистра начальных данных. Если зависимость экспоненциальная, решение задачи в реальном времени невозможно. Как показали теоретические изыскания последних пятнадцати лет, этот пессимистический вывод может не иметь места, если решать задачу не на классическом, а на квантовом компьютере, т. е. компьютере, работа которого и программирование существенно опираются на принципы квантовой механики. Разумеется, работа классического компьютера основана на преобразовании потоков электронов в микросхемах, а электроны несомненно квантовые объекты. Тем не менее, электронные логические элементы типа «А» или «НЕТ» работают с макроскопически большим числом электронов и в этом смысле классичны. В работе квантовых компьютеров фундаментальную роль играет принцип суперпозиции волновых функций, который вместо классического бита типа «ДА/НЕТ» позволяет использовать квантовый бит, для краткости иногда называемый кубитом. Одним из первых идею квантового компьютера высказал Ю. И. Манин 1980 г. в книге «Вычислимое и невычислимое» [6]. Он указал, что пространство состояний квантового устройства имеет экспоненциально большую емкость в зависимости от числа элементов. Например, пространство состояний  $N$  частиц со спином  $1/2$  имеет размерность  $2^N$ . Поэтому задачи, не допускающие решения на классическом компьютере из-за нехватки ресурсов, могли бы быть решены на квантовом компьютере. Манин в этом пункте ссылается на работу, в которой оценивались вычислительные ресурсы, необходимые для квантовомеханического расчета молекулы аммиака на обычной вы-

числительной машине. Оказывается, что для этого требуется провести вычисления по методу сеток примерно в 1042 точках. Если считать, что в каждой точке проводится примерно 10 элементарных операций, а компьютер работает при сверхнизкой температуре  $T = 10^{-3}$  К, то и тогда на расчет молекулы аммиака потребовалась бы энергия, выработанная на Земле за столетие. В то же время число состояний порядка  $10^{43}$  было бы обеспечено всего

$$N = 43 \times \frac{\ln 10}{\ln 2} \approx 143$$

частицами спина 1/2.

В дальнейшем идея квантового компьютера независимо была выдвинута Р. Фейнманом на конференции по физике вычислений, проводившейся в 1981 г. в Массачусетском технологическом институте. Спустя еще три года Фейнман предложил конкретный гамильтониан квантового компьютера. Законченная концепция квантового вычисления, которая используется и по сей день, была сформулирована Д. Дойчем в 1985 г. в статье, опубликованной в журнале Лондонского королевского общества. В 1994 г. Питер Шор, ныне работающий в Массачусетском технологическом институте, предложил квантовый алгоритм факторизации. Еще один квантовый алгоритм поиска в неструктурированной базе данных был предложен Ловом Гровером из лаборатории фирмы «Bell». Если до того времени число работ по квантовым компьютерам и квантовым вычислениям исчислялось единицами, то после статьи Шора начался экспоненциальный рост числа публикаций на эту тему. Это означало, что тема стала необычайно актуальной. Такой она остается и по сей день.

Работа в этой области идет по двум основным направлениям. Первое – это собственно квантовая информатика, которая занимается теоретическим поиском и анализом квантовых алгоритмов решения сложных задач, не допускающих решения на классическом компьютере. Сюда же примыкает теория квантовой сложности вычислений и проблема создания квантовых кодов, исправляющих ошибки. Второе направление – это практическая реализация квантовых вычислений путем создания и изучения работы квантовых вентилях с помощью изученных к настоящему времени физических систем. К сожалению, степени продвижения в указанных направлениях не сравнимы. В то время как теоретические разработки продвинулись довольно далеко, физическая реализация достигнута лишь на весьма скромных по числу кубитов системах, включающих несколько квантовых частиц. Для решения серьезных задач нужно

несколько десятков кубитов. При этом сама возможность масштабирования, т. е. построения устройств, более сложных, чем единичные квантовые вентили, все еще остается открытой проблемой.

## 13.1 Кубиты и основные квантовые вентили

Классический компьютер оперирует классическими битами «ДА» и «НЕТ». Пример физической реализации: значению «ДА» отвечает намагниченный участок вещества, ненамагниченный участок изображает «НЕТ». Намагниченность существенно макроскопична, так как включает много спинов. Квантовый компьютер оперирует квантовыми битами. Абстрактно квантовый  $|\psi\rangle$  является элементом двумерного комплексного пространства:

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix},$$

где комплексные числа  $\alpha$  и  $\beta$  подчинены условию нормировки

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1. \quad (13.1)$$

Условие (13.1) можно переписать в виде

$$(\operatorname{Re}\alpha)^2 + (\operatorname{Im}\alpha)^2 + (\operatorname{Re}\beta)^2 + (\operatorname{Im}\beta)^2 = 1,$$

который говорит, что пространством состояний кубита является 3-сфера в четырехмерном пространстве. Пространство состояний классического бита состоит всего из двух элементов. Любой кубит имеет физическую реализацию в виде какого-либо квантового объекта, например, частицы спина  $1/2$ , фотона той или иной поляризации и т. д. Поэтому оправданно использованное обозначение кубита как вектора состояния некоторой квантовой системы. Как и любой вектор состояния, кубит можно разложить по базисным состояниям так, как это делается в квантовой механике для частицы со спином  $1/2$ :

$$|\psi\rangle = \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle,$$

где базисные векторы состояния имеют вид

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (13.2)$$

Этот квантово-механический базис определен как базис из собственных векторов матрицы Паули

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

с собственными значениями  $\pm 1$ . С кубитом  $|\psi\rangle$  естественно связать оператор

$$\begin{aligned} \hat{\rho} &= |\psi\rangle\langle\psi| = (\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle)(\alpha^*\langle 0| + \beta^*\langle 1|) = |\alpha|^2|0\rangle\langle 0| + |\beta|^2|1\rangle\langle 1| + \\ &+ \alpha\beta^*|0\rangle\langle 1| + \alpha^*\beta|1\rangle\langle 0|. \end{aligned}$$

Его называют оператором плотности, или *матрицей плотности*. В написанном выражении существенна фазовая когерентность, проявляющаяся в наличии перекрестных членов  $\propto \alpha^*\beta, \alpha\beta^*$ . Потеря фазовой когерентности называется *декогеренцией*. Это физическое явление может вызываться различными причинами, в частности, взаимодействием кубита с окружением. Декогеренция приводит к тому, что фазы  $\arg\alpha$  и  $\arg\beta$  становятся некоррелированными:  $\langle\alpha^*\beta\rangle = 0$ . При этом оператор  $\hat{\rho}$  принимает вид

$$\hat{\rho} = |\alpha|^2|0\rangle\langle 0| + |\beta|^2|1\rangle\langle 1|,$$

отвечающий некогерентной смеси состояний  $|0\rangle$  и  $|1\rangle$  соответственно. Таким образом, мы получили классические биты информации «ДА» с вероятностью  $|\alpha|^2$  и  $|\beta|^2$ . Иногда квантовое состояние с такой матрицей плотности называют вероятностным битом. По существу, вероятностный бит является простым классическим битом плохого качества.

Квантовая механика говорит нам, что на векторы состояния могут действовать операторы и преобразовывать их в другие векторы состояния. Операторы должны быть унитарными для того, чтобы сохранялась нормировка (13.1). В квантовых компьютерах операции над кубитами реализуются посредством вентилях. Очевидно, действие однокубитового вентиля представляется умножением на унитарную матрицу размерности  $2 \times 2$ . Имеется два основных однокубитовых вентиля. Во-первых, это вентиль NOT: квантовый «НЕТ». Он изображается унитарным оператором  $\hat{U}_{\text{NOT}}$ , который действует по правилу

$$\hat{U}_{\text{NOT}}|0\rangle = |1\rangle, \hat{U}_{\text{NOT}}|1\rangle = |0\rangle. \quad (13.3)$$

Во-вторых, имеется вентиль Адамара  $\hat{U}_H$ , который действует следующим образом:

$$\hat{U}_H|0\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}, \quad \hat{U}_H|1\rangle = \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (13.4)$$

Многокубитовые вентили действуют на регистр из кубитов. Одним из представителей  $n$ -кубитовых регистров является прямое произведение  $n$  кубитов:

$$|\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n\rangle = \prod_{i=1}^n |\psi_i\rangle \equiv |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \cdots \otimes |\psi_n\rangle.$$

Число состояний  $n$ -кубитового регистра равно  $2^n$ . При  $n = 2$  имеем

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \beta_1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \alpha_2 \\ \beta_2 \end{pmatrix} &= (\alpha_1|0\rangle + \beta_1|1\rangle) \otimes (\alpha_2|0\rangle + \beta_2|1\rangle) = \\ &= \alpha_1\alpha_2|0,0\rangle + \alpha_1\beta_2|0,1\rangle + \alpha_2\beta_1|1,0\rangle + \\ &+ \beta_1\beta_2|1,1\rangle. \end{aligned} \quad (13.5)$$

Двухкубитовое состояние в виде прямого произведения однокубитовых не является самым общим. Общий вид ненормированного двухкубитового вектора состояния можно представить в виде

$$|2\text{-qubit}\rangle = a|0,0\rangle + b|0,1\rangle + c|1,0\rangle + d|1,1\rangle \quad (13.6)$$

с комплексными коэффициентами  $a, b, c, d$ . Отсюда и из (13.5) видно, что двухкубитовый вектор состояния можно представить в виде прямого произведения однокубитовых только при выполнении условия

$$ad = bc. \quad (13.7)$$

В противном случае  $|2\text{-qubit}\rangle \neq |\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle$ . Вообще, если многокубитовый вектор состояния не представим в виде прямого произведения однокубитовых, квантовое состояние называется запутанным (англоязычный термин entangled). Такие состояния играют определяющую роль в теории квантовых вычислений и квантовой информации.

Прямое произведение вентилей Адамара действует на двухкубитовое  $|0,0\rangle$  состояние по правилу

$$\hat{U}_H \otimes \hat{U}_H|0,0\rangle = \frac{1}{2}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes (|0\rangle + |1\rangle) = \frac{1}{2}(|0,0\rangle + |0,1\rangle + |1,0\rangle + |1,1\rangle).$$

Далее знак прямого произведения  $\otimes$  векторов состояния явно выписываться не будет. Можно видеть, что линейную суперпозицию векторов состояния в этом соотношении можно записать в виде  $|0\rangle + |1\rangle + |2\rangle + |3\rangle$ , если использовать двоичное представление целых чисел. Для  $n$ -кубитового регистра справедливо равенство

$$\hat{U}_H^{\otimes n} |\underbrace{0, 0, \dots, 0}_n\rangle = \frac{1}{2^{n/2}} \sum_{i=0}^{2^n-1} |i\rangle, \quad (13.8)$$

где аргумент  $n$ -кубитового вектора состояния  $|i\rangle$  надо представить в виде регистра из  $n$  элементов, в качестве которых стоит двоичное представление чисел  $i$ . Было показано [8], что для реализации квантовых алгоритмов однокубитовых вентилей недостаточно.

Недостающим вентилем, необходимым для создания квантового компьютера, является двухкубитовый вентиль «онтолируемое НЕТ» (в англоязычной литературе «Controlled NOT»), или CNOT. Этот вентиль действует на состояние двух кубитов по правилу

$$\hat{U}_{\text{CNOT}}|a, b\rangle = |a, a + b\rangle, \quad (13.9)$$

где сложение всюду будет пониматься по модулю 2:  $0 + 0 = 0$ ,  $0 + 1 = 1 + 0 = 1$ ,  $1 + 1 = 0$ . Поэтому действие вентилей CNOT на базисные векторы состояния двух кубитов можно записать как

$$\begin{aligned} \hat{U}_{\text{CNOT}}|00\rangle &= |00\rangle, \\ \hat{U}_{\text{CNOT}}|01\rangle &= |01\rangle, \\ \hat{U}_{\text{CNOT}}|10\rangle &= |11\rangle, \\ \hat{U}_{\text{CNOT}}|11\rangle &= |10\rangle. \end{aligned} \quad (13.10)$$

Если первый кубит находится в состоянии  $|0\rangle$ , то состояние второго кубита не меняется. Если же первый кубит находится в состоянии  $|1\rangle$ , то состояние второго кубита инвертируется. Для практических приложений вентиль CNOT обычно представляют в виде комбинации более простых для реализации операторов. Одна из возможностей дается выражением

$$\hat{U}_{\text{CNOT}} = \hat{U}_H \hat{U}_\Phi \hat{U}_H, \quad (13.11)$$

где оператор  $\hat{U}_H$  изображает действие вентилей Адамара (13.4). Вентиль,

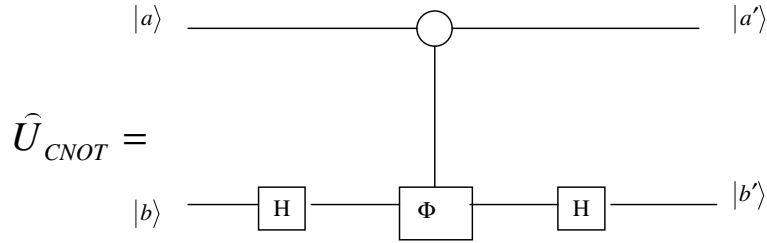


Рис. 13.1: Блок-схема квантового вентиля CNOT.  $H$  означает вентиль Адамара (13.4),  $\Phi$  — вентиль контролируемого обращения фазы

изображаемый на диаграмме блоком  $\hat{\Phi}$ , производит контролируемое обращение фазы:

$$\begin{aligned}\hat{U}_{\Phi}|0,0\rangle &= |0,0\rangle, \\ \hat{U}_{\Phi}|0,1\rangle &= |0,1\rangle, \\ \hat{U}_{\Phi}|1,0\rangle &= |1,0\rangle, \\ \hat{U}_{\Phi}|1,1\rangle &= -|1,1\rangle.\end{aligned}\tag{13.12}$$

Проиллюстрируем на двух примерах важность вентиля CNOT для квантовых вычислений. В качестве первого примера подействуем оператором  $\hat{U}_{\text{CNOT}}$  на двухкубитовое состояние в виде прямого произведения однокубитовых:

$$\begin{aligned}\hat{U}_{\text{CNOT}}(\alpha_1|0\rangle + \beta_1|1\rangle)(\alpha_2|0\rangle + \beta_2|1\rangle) &= \alpha_1\alpha_2|0,0\rangle + \alpha_1\beta_2|0,1\rangle + \\ &+ \alpha_2\beta_1|1,1\rangle + \beta_1\beta_2|1,0\rangle.\end{aligned}$$

Сравнение с (13.5) показывает, что здесь  $ad \neq bc$ . Поэтому вентиль  $\hat{U}_{\text{CNOT}}$  превращает прямое произведение однокубитовых вентилях в запутанное двухкубитовое состояние. Далее  $n$ -кубитовый вектор состояния  $|j\rangle = |j_1\rangle|j_2\rangle \dots |j_n\rangle$ ,  $j_l = 0, 1$ ,  $l = 1, 2, \dots, n$  будем называть *вектором состояния в вычислительном базисе* с целью отличить его от запутанных векторов состояния  $|\psi_j\rangle$ , которые нельзя представить в виде прямого произведения однокубитовых векторов.

В качестве второго примера покажем, как с помощью последовательного действия вентилях  $\hat{U}_{\text{CNOT}}$  можно из трехкубитового вектора состояния

$$|\psi_i\rangle = (\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle)|00\rangle$$



получить вектор состояния типа «шредингеровского кота»

$$|\psi_f\rangle = \alpha|000\rangle + \beta|111\rangle.$$

Свое название такие состояния получили после знаменитой статьи одного из создателей квантовой механики Э. Шредингера, вышедшей в 1935 г., в которой тот рассмотрел мысленный эксперимент, где приписал кошке вектор состояния вида

$$|\text{cat}\rangle = \alpha|\text{dead cat}\rangle + \beta|\text{living cat}\rangle.$$

В нашем случае можно отождествить  $|\text{dead cat}\rangle \equiv |000\rangle$ ,  $|\text{living cat}\rangle \equiv |111\rangle$ . Обозначим через  $\hat{U}_{\text{CNOT}}^{(ij)}$  вентиль «контролируемое нет» с контролирующим кубитом  $i$  и контролируемым кубитом  $j$ . Представим исходный вектор состояния в виде  $|\psi_i\rangle = (\alpha|00\rangle + \beta|10\rangle)|0\rangle$  и подействуем на него оператором  $(\hat{U}_{\text{CNOT}}^{(12)} \otimes \hat{I}_3)$ . Этот оператор действует как вентиль CNOT на состояние первого и второго кубитов, а третий кубит оставляет в исходном состоянии. Здесь и далее  $\hat{I}_a$  будет означать единичный оператор, действующий на кубит  $a$ . С учетом (13.10) получим:

$$|\psi'\rangle \equiv (\hat{U}_{\text{CNOT}}^{(12)} \otimes \hat{I}_3) |\psi_i\rangle = \alpha|000\rangle + \beta|110\rangle.$$

Затем подействуем на вектор состояния  $|\psi'\rangle$  оператором  $(\hat{I}_1 \otimes \hat{U}_{\text{CNOT}}^{(23)})$ , который не изменяет состояния первого кубита, а на состояние двух кубитов 2 и 3 действует как вентиль CNOT. Получим

$$(\hat{I}_1 \otimes \hat{U}_{\text{CNOT}}^{(23)}) |\psi'\rangle = \alpha|000\rangle + \beta|111\rangle.$$

Таким образом, поставленная задача решается в виде соотношения

$$|\psi_f\rangle = (\hat{I}_1 \otimes \hat{U}_{\text{CNOT}}^{(23)}) (\hat{U}_{\text{CNOT}}^{(12)} \otimes \hat{I}_3) |\psi_i\rangle.$$

Из представленного решения понятно, как строить состояния типа шредингеровского кота в случае  $n$  кубитов.

После нескольких рассмотренных примеров можно сказать, что квантовый компьютер представляет собой устройство, которое входной  $n$ -кубитовый регистр  $|\text{input}\rangle$  преобразует в регистр на выходе  $|\text{output}\rangle$ :

$$|\text{output}\rangle = \hat{U}|\text{input}\rangle.$$

С точки зрения квантовой механики устройство представляется действием унитарного оператора  $\hat{U}$ . Было показано, что действие любого вентиля можно составить из однокубитовых вентилях произвольного вида  $e^{(i\nu \cdot \sigma \frac{\theta}{2})}$  и двухкубитовых вентилях  $\hat{U}_{\text{CNOT}}$  [8].

## 13.2 Квантовый параллелизм и задача Дойча

Д. Дойчу принадлежит одна из первых концепций квантового компьютера как устройства, существенно опирающегося на принципы квантовой механики уже на стадии программирования. Он рассмотрел свойство квантового параллелизма на очень простой модели. Пусть имеется устройство, вычисляющее бинарную функцию  $f(x)$ . Бинарной называется функция, принимающая только два значения 0 и 1. Пусть эта функция настолько сложна, что время, затрачиваемое на ее вычисление, составляет 24 часа. Требуется узнать, является ли  $f(x)$  постоянной,  $f(0) = f(1)$ , или сбалансированной,  $f(1) = 1 + f(0)$ . Классически ответ на поставленный вопрос можно получить, прогнав устройство два раза, т. е. за 48 часов. Дойч показал, что квантовое устройство требует одного прогона.

Далее для краткости будем опускать знак прямого произведения у векторов состояния. Допустим, что создан вентиль  $\hat{U}_f$ , действующий на двухкубитовое состояние  $|x, y\rangle = |x\rangle|y\rangle$  по правилу

$$\hat{U}_f|x, y\rangle = |x, y + f(x)\rangle. \quad (13.13)$$

Приготовим входной регистр  $|0, 0\rangle$ . В соответствии с квантовой блок-схемой, приведенной на рис. 13.2, применим к входному регистру последовательно ряд операций:

$$(\hat{U}_H \otimes \hat{I})\hat{U}_f(\hat{U}_H \otimes \hat{U}_H)(\hat{I} \otimes \hat{U}_{\text{NOT}}).$$

В результате получится вектор состояния

$$|\psi_f\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}} \{ |0\rangle (|f(0)\rangle - |1 + f(0)\rangle + |f(1)\rangle - |1 + f(1)\rangle) + |1\rangle (|f(0)\rangle - |1 + f(0)\rangle - |f(1)\rangle + |1 + f(1)\rangle) \}.$$

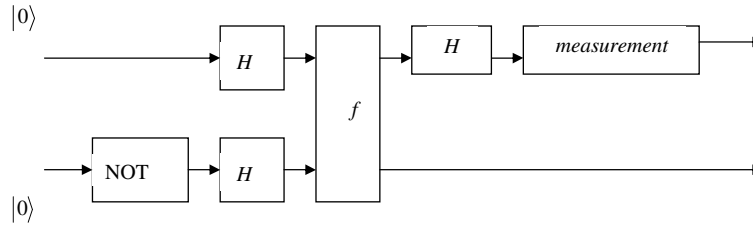


Рис. 13.2: Блок-схема квантового вычислительного устройства для решения задачи Дойча. Здесь  $H$  – вентиль Адамара (13.4), «NOT» – вентиль (13.3),  $f$  – вентиль (13.13)

Если функция постоянна, то результирующий вектор состояния будет  $(-1)^{f(0)}|0\rangle(|0\rangle - |1\rangle)/\sqrt{2}$ . Если функция сбалансирована, то в результате получится  $(-1)^{f(0)}|1\rangle(|0\rangle - |1\rangle)/\sqrt{2}$ . (Проверить сделанное утверждение, воспроизводя последовательно действие указанных выше вентилях.) Не будем следить за состоянием второго кубита. При этом первый кубит окажется в состоянии  $|0\rangle$  или  $|1\rangle$ , в зависимости от того, какому из двух классов принадлежит функция  $f(x)$ . Проведем измерение и узнаем, в каком состоянии окажется первый кубит (операция *measurement* на блок-схеме 13.2). Процесс такого измерения можно осознать на примере частицы со спином  $1/2$ . Если направить частицу в прибор Штерна – Герлаха, то он отклонит частицу по одной или другой траектории в зависимости от того, равна ли проекция спина на ось  $z$   $+1/2$  (состояние  $|0\rangle$ ), или  $-1/2$  (состояние  $|1\rangle$ ). В конце этих двух различных траекторий можно установить счетчики, срабатывающие всякий раз, когда в них попадет частица. Итак, для определения класса, к которому принадлежит в этом примере функция  $f$ , достаточно одного прогона квантового вычислительного устройства вместо двух прогонов у классического устройства. В этом и состоит идея «квантового параллелизма».

### 13.3 Квантовое преобразование Фурье

Квантовое преобразование Фурье определяется как действие на  $n$ -

кубитовый регистр  $|k\rangle$  оператора  $\hat{U}_{\text{QFT}}$  по правилу

$$|\psi_j\rangle \equiv \hat{U}_{\text{QFT}}|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k=0}^{2^n-1} e^{i2\pi jk/2^n} |k\rangle. \quad (13.14)$$

Распишем правую часть (13.14), приняв во внимание, что метки вектора состояния в вычислительном базисе  $|k\rangle = |k_1, k_2, \dots, k_n\rangle = |k_1\rangle|k_2\rangle \dots |k_n\rangle$  являются строкой из нулей и единиц, совпадающих с двоичной записью числа

$$k = \sum_{l=1}^n k_l 2^{n-l},$$

( $k_l = 0, 1$ ). Тогда сумма по  $k$  сведется к независимому суммированию по  $k_l = 0, 1$ :

$$\begin{aligned} |\psi_j\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k_1=0}^1 \sum_{k_2=0}^1 \dots \sum_{k_n=0}^1 e^{i2\pi j \sum_{l=1}^n k_l / 2^l} |k_1\rangle |k_2\rangle \dots |k_n\rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k_1=0}^1 \sum_{k_2=0}^1 \dots \sum_{k_n=0}^1 e^{i2\pi j (k_1 2^{-1} + k_2 2^{-2} + \dots + k_n 2^{-n})} |k_1\rangle \times \\ &\times |k_2\rangle \dots |k_n\rangle = \prod_{l=1}^n \frac{|0\rangle + e^{i2\pi j / 2^l} |1\rangle}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \quad (13.15)$$

Это выражение показывает, что квантовое преобразование Фурье представимо в виде прямого произведения линейных комбинаций однокубитовых векторов состояния. Самим изобретателем алгоритма факторизации (см. ниже) П. Шором было показано, что задача нахождения квантового преобразования Фурье полиномиальна по времени.

## 13.4 Поиск и исправление ошибок в квантовых вычислениях

Как уже отмечалось, квантовое вычисление существенно использует корреляцию фаз квантовых состояний. Декогеренция разрушает квантовую когерентность. Имеющиеся в литературе оценки показывают, что

в ряде физических реализаций кубитов и двухкубитовых вентилях время декогеренции очень мало, часто много меньше времени, необходимого для выполнения квантового вычисления. Поэтому необходимо применять специальные меры для того, чтобы сохранить когерентность квантового состояния компьютера. Одной из таких мер является квантовое кодирование. Оно вводится по аналогии с классическим кодированием, когда бит «0» кодируется тремя битами «000». Бит «1» кодируется тремя битами «111». Пусть вероятность инверсии бита равна  $p$ . Тогда при самопроизвольной инверсии одного бита из трех,  $(000) \rightarrow (100)$ , ошибка исправляется на основе решения «большинством голосов»:  $(100), (010), (001) \rightarrow (000)$ , а  $(000)$  декодируется как «0». Настоящая ошибка возможна при инверсии двух битов, что может произойти тремя способами:  $(000) \rightarrow (110), (101)$ , или  $(011)$ , либо при инверсии трех битов  $(000) \rightarrow (111)$ . Вероятность неисправимой ошибки равна  $3p^2(1-p) + p^3 = 3p^2 - 2p^3$  и может быть сделана приемлемо малой при достаточно малом  $p$ . (Оценить  $p$  исходя из требования, что вероятность неисправимой ошибки должна быть меньше  $3 \times 10^{-6}$ .)

В квантовом случае, кроме неконтролируемого изменения квантового числа кубита  $|0\rangle \rightarrow |1\rangle$ , возможны следующие ошибки, не имеющие классического аналога.

- Ошибка фазы, например  $|1\rangle \rightarrow -|1\rangle$ . Ошибка серьезная, поскольку состояние  $|0\rangle + |1\rangle$  в результате такой ошибки переходит в состояние  $|0\rangle - |1\rangle$ , ортогональное исходному!
- Малые ошибки. Общий вид кубита  $a|0\rangle + b|1\rangle$  непрерывно зависит от комплексных чисел  $a$  и  $b$ , которые могут слегка изменяться за счет внешних воздействий. Такая ошибка может накапливаться.
- Измерение в квантовой системе вносит неконтролируемые изменения в ее состояние. Собственно, задача квантовой информатики в том и состоит, чтобы, во-первых, придумать алгоритм решения задачи. После прогона информация закодирована в фазах слагаемых в линейной суперпозиции базисных состояний. Поэтому, во-вторых, нужно извлечь эту информацию из квантового компьютера с помощью процедуры, которая не уничтожит хранящийся результат.

Основы теории квантовых кодов, исправляющих ошибки, уже созданы. Идея таких кодов, предложенная Питером Шором, основана на ана-

логии с классическим способом – тоекратном повторении кубита. Состояние  $a|0\rangle + b|1\rangle$  кодируется как  $a|000\rangle + b|111\rangle$ . Допустим, произошла ошибка инвертирования первого кубита:

$$a|000\rangle + b|111\rangle \rightarrow a|100\rangle + b|011\rangle.$$

Мы не можем просто измерить первый кубит для того, чтобы выяснить, произошла инверсия или нет. Согласно одному из постулатов квантовой механики, измерение вносит неконтролируемое возмущение в квантовое состояние объекта. В данном случае при измерении первого кубита произойдет коллапс вектора состояния  $a|100\rangle + b|011\rangle \rightarrow |100\rangle$ , если при измерении будет выяснено, что первый кубит находился в состоянии  $|0\rangle$ . Хорошо, что ошибка обнаружена, но исправить ее нельзя, поскольку суперпозиция, необходимая для проведения квантового вычисления, при обнаружении ошибки разрушилась. Для того чтобы суперпозиция не разрушалась, необходимо измерять у суперпозиции трехкубитовых векторов состояния вида  $|x, y, z\rangle$  значение наблюдаемой  $(y \oplus z, x \oplus z)$ , где  $\oplus$  означает сложение по модулю два.

Такая наблюдаемая называется *синдромом ошибки*. Измерение синдрома выявляет положение инвертированного кубита, не разрушая при этом квантовой суперпозиции. Действительно, у исходной трехкубитовой суперпозиции  $a|000\rangle + b|111\rangle$  значение указанной наблюдаемой равно  $(0, 0)$ , а у суперпозиции  $a|100\rangle + b|011\rangle$ , появившейся после ошибки инвертирования первого кубита, значение наблюдаемой равно  $(0, 1)$ . Двоичная запись 01 явно указывает на номер инвертированного кубита. Если инвертировался третий кубит,

$$a|000\rangle + b|111\rangle \rightarrow a|001\rangle + b|110\rangle,$$

то синдром равен  $(1, 1)$ .  $(1, 1)$ . Двоичная запись числа 3 как раз и есть 11.

Если говорить более подробно, то способ квантового исправления ошибок состоит в следующих действиях. Исходное произвольное однокубитовое состояние  $|x\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$  превращаем в трехкубитовое состояние  $(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle)|00\rangle = \alpha|000\rangle + \beta|100\rangle$  с помощью двух вспомогательных кубитов. Вспомним, что  $\hat{U}_{\text{CNOT}}^{(ij)}$  обозначает вентиль «контролируемое нет» с контролирующим кубитом  $i$  и контролируемым кубитом  $j$ . Вспомогательные кубиты нужны для того, чтобы закодировать исход-

ный однокубитовый вектор состояния в виде состояния «шредингеровского кота»:

$$|\psi_c\rangle = \hat{U}_{\text{CNOT}}^{(12)} \hat{U}_{\text{CNOT}}^{(23)} (\alpha|000\rangle + \beta|100\rangle) = \alpha|000\rangle + \beta|111\rangle.$$

Ошибка инверсии кубита возникает за счет возможного взаимодействия с окружением. В квантовой теории всякое воздействие на систему представляется в виде некоторого оператора, действующего на вектор состояния. В данном случае назовем этот оператор  $\hat{E}$  оператором ошибки. Для ошибки переворота кубита его можно записать в виде

$$\hat{E} = \epsilon_0(t) \sigma_0^{(1)} \sigma_0^{(2)} \sigma_0^{(3)} + \epsilon_1(t) \sigma_x^{(1)} \sigma_0^{(2)} \sigma_0^{(3)} + \epsilon_2(t) \sigma_0^{(1)} \sigma_x^{(2)} \sigma_0^{(3)} + \epsilon_3(t) \sigma_0^{(1)} \sigma_0^{(2)} \sigma_x^{(3)}.$$

В целях единообразия записи единичная  $2 \times 2$  матрица обозначена как  $\sigma_0^{(i)}$ . Верхний индекс в скобках указывает номер кубита, на который действует матрица. Функции времени  $\epsilon_{0,1,2,3}(t)$  характеризуют детали динамического воздействия окружения на кодированный кубит. Они могут быть вычислены в конкретной модели декогерентности, однако в нашем случае их вид несущественен. Вспоминая, что действие матрицы  $\sigma_x$  есть действие вентилей  $\hat{U}_{\text{NOT}}$ , т.е.  $\sigma_x|0\rangle = |1\rangle$ ,  $\sigma_x|1\rangle = |0\rangle$ , получаем, что

$$\begin{aligned} \hat{E}|\psi_c\rangle &= \epsilon_0(t)(\alpha|000\rangle + \beta|111\rangle) + \epsilon_1(t)(\alpha|100\rangle + \beta|011\rangle) + \\ &+ \epsilon_2(t)(\alpha|010\rangle + \beta|101\rangle) + \epsilon_3(t)(\alpha|001\rangle + \beta|110\rangle). \end{aligned}$$

Т В соответствии с идеей, изложенной в начале этого параграфа, резервируем еще два квантовых бита для записи синдрома ошибок:

$$\begin{aligned} \hat{E}|\psi_c\rangle \rightarrow \hat{E}|\psi_c\rangle|00\rangle &= \epsilon_0(t)(\alpha|00000\rangle + \beta|11100\rangle) + \\ &+ \epsilon_1(t)(\alpha|10000\rangle + \beta|01100\rangle) + \\ &+ \epsilon_2(t)(\alpha|01000\rangle + \beta|10100\rangle) + \epsilon_3(t)(\alpha|00100\rangle + \beta|11000\rangle). \end{aligned}$$

Синдром ошибок представляется оператором  $\hat{S}$ , действующим на шестикубитовый вектор состояния по правилу

$$\hat{S}|x_1, x_2, x_3, 0, 0\rangle = |x_1, x_2, x_3, x_2 \oplus x_3, x_1 \oplus x_3\rangle.$$

В результате вектор состояния кодированного кубита вместе с синдромом ошибок принимает вид

$$\begin{aligned} \hat{S}\hat{E}|\psi_c\rangle|00\rangle &= \epsilon_0(t)(\alpha|00000\rangle + \beta|11100\rangle) + \\ &+ \epsilon_1(t)(\alpha|10001\rangle + \beta|01101\rangle) + \\ &+ \epsilon_2(t)(\alpha|01010\rangle + \beta|10110\rangle) + \\ &+ \epsilon_3(t)(\alpha|00111\rangle + \beta|11011\rangle). \end{aligned}$$

Отсюда видно, что с вероятностью  $|\epsilon_0(t)|^2$  кодированное трехкубитовое состояние не меняется от взаимодействия с окружением (идеальная ситуация), а с вероятностью соответственно  $|\epsilon_1(t)|^2$ ,  $|\epsilon_2(t)|^2$ ,  $|\epsilon_3(t)|^2$  в кодированном трехкубитовом состоянии произойдет обращение первого, второго, третьего кубита. Но информация о перевернутом кубите оказалась записана в четвертом и пятом квантовых регистрах! Допустим, состояние этих регистров измерено и получено значение 11 (с вероятностью  $|\epsilon_3(t)|^2$ ). После измерения вектор состояния коллапсировал в  $(\alpha|001\rangle + \beta|110\rangle)|11\rangle$ . Состояние закодированного кубита при таком измерении не разрушилось, и известно, что нужно инвертировать третий кубит для исправления ошибки:  $(\alpha|001\rangle + \beta|110\rangle)|11\rangle \rightarrow (\alpha|000\rangle + \beta|111\rangle)|11\rangle$ . Если к этому исправленному вектору состояния применить оператор  $\hat{U}_{\text{CNOT}}^{(12)} \hat{U}_{\text{CNOT}}^{(23)} \otimes \hat{I}^{(45)}$ , то получим вектор состояния  $(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle)|00\rangle|11\rangle$ . (Проверить это утверждение!) Вспомогательные кубиты 2, 3, 4, 5 можно в конце игнорировать.

Аналогичные методы троекратного повторения применяются и для исправления фазовых ошибок. В целом, теория квантовых кодов, исправляющих ошибки, является динамично развивающейся отраслью теории квантовых вычислений. Подробности можно узнать из книги Дж. Прескилла [8], основанной на курсе лекций, прочитанных им в Калифорнийском технологическом институте.

## 13.5 Задачи

1. Найти вид оператора  $\hat{\mu}$ , у которого собственные значения  $\mu$  в базисе  $\{|0\rangle, |1\rangle\}$  равны 0 и 1.
2. Показать, что матричной реализацией вентиля NOT и Адамара в базисе векторов состояния (13.2) являются  $\hat{U}_{\text{NOT}} = \sigma_x$ ,  $\hat{U}_{\text{H}} = (\sigma_x + \sigma_z)/\sqrt{2}$ . Здесь  $\sigma_{x,z}$  – матрицы Паули. Найти также матричную реализацию вентиля  $\sqrt{\hat{U}_{\text{NOT}}}$ .
3. С помощью (13.4) и (13.12) проверить справедливость (13.9) и (13.10).
4. Допустим, некто измеряет проекции спина частицы со спином  $1/2$  на декартовы оси  $x$ ,  $y$  и  $z$ . Найти операторы проектирования (6 операторов!) на состояния с проекциями спина  $\pm 1/2$  на все эти оси.



5. Найти матричный элемент  $\langle k' | \hat{U}_{\text{QFT}} | k \rangle$  в вычислительном базисе.
6. Найти результат действия оператора  $\hat{U}_{\text{QFT}}$  на трехкубитовый вектор состояния  $\frac{1}{\sqrt{8}} \sum_{k=0}^7 \cos \frac{2\pi k}{8} |k\rangle$ .
7. Допустим, что в результате ошибки начальное состояние  $|0, 0\rangle$  в задаче Дойча перешло (а) в  $|0, 0\rangle + \epsilon |0, 1\rangle$ ,  $|\epsilon| \ll 1$  и (б) в  $(|0, 0\rangle + e^{i\chi} |0, 1\rangle) / \sqrt{2}$ . Каким будет конечное состояние квантового компьютера, решающего задачу Дойча, в этих двух случаях?

## Глава 14

# Квантовые алгоритмы

Бурное развитие теории и практической реализации квантовых вычислений началось после того, как Питер Шор предложил квантовый алгоритм факторизации в 1994 г. [11], а Лов Гровер изобрел в 1997 г. алгоритм поиска в неструктурированной квантовой базе данных [12]. Третьим широко известным алгоритмом является алгоритм телепортации неизвестного квантового состояния удаленному получателю. Разберем основные принципы указанных алгоритмов.

### 14.1 Квантовый алгоритм факторизации

Одна из широко используемых систем шифрования данных (система RSA), названная в честь ее создателей Ривеста, Шамира и Адлемана (Rivest, Shamir, Adleman), использует тот эмпирический, но не доказанный строго математически факт, что задача о нахождении множителей большого нечетного числа относится к классу вычислительных задач, время счета которых зависит от длины входных данных  $N$  как  $\exp[c(\lg N)^{1/3}(\lg \lg N)^{2/3}]$ , т. е. неполиномиально. Однако П. Шор в 1995 г. показал, что квантовый алгоритм способен решить эту задачу за число шагов порядка  $(\lg N)^2(\lg \lg N)(\lg \lg \lg N)$ .

В теории чисел доказано, что нахождение множителей числа  $N$  сводится к нахождению периода  $r$  этого числа. Определение:  $r$  называется периодом числа  $N$ , если существует  $x$  такое, что  $x^r = 1(\bmod N)$ . На-

помним, что  $x(\bmod N)$  означает остаток от деления  $x$  на  $N$ . Если  $r$  четное, то определим  $y$  через соотношение  $x^{r/2} = y(\bmod N)$ . Тогда  $y - 1$  и  $y + 1$  будут множителями числа  $N$ . Проверим, как это работает. Пусть  $N = 21$ . Возьмем  $x = 2$ . Имеем  $2^r(\bmod 21) = 2, 4, 8, 16, 11, 1, 2, \dots$  при  $r = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, \dots$ . Следовательно, период равен  $r = 6$ . Поэтому  $y = 2^{6/2}(\bmod 21) = 8$ ,  $y - 1 = 7$ ,  $y + 1 = 9 = 3 \times 3$ . Отсюда  $21 = 7 \times 3$ .

Разберем идею квантового алгоритма факторизации на том же примере числа  $N = 21$  [13][18]. Число  $N$  в двоичном представлении записывается в виде регистра из  $n = \lceil \log_2 N \rceil$  символов 0 и 1. При  $N = 21$  будет  $n = 5$ . Выбираем целое число  $t$  исходя из неравенства  $N^2 < 2^t < 2N^2$ . В нашем случае  $t = 9$ . Входной регистр подготовим в виде прямого произведения двух подрегистров:

$$|\psi_0\rangle = \underbrace{|0, 0, \dots, 0\rangle}_{t=9} \underbrace{|0, 0, \dots, 0\rangle}_{n=5}.$$

Подвергнем первый подрегистр действию прямого произведения вентилей Адамара  $\underbrace{\hat{U}_H \otimes \hat{U}_H \otimes \dots}_t$ . Применив (13.8), получим вектор состояния

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^t}} \sum_{j=0}^{2^t-1} |j\rangle |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{512}} \sum_{j=0}^{511} |j\rangle |0\rangle.$$

Следующий шаг состоит в применении к вектору состояния  $|\psi_1\rangle$  линейного унитарного оператора  $\hat{V}_x$ , действующего по правилу

$$\hat{V}_x |j\rangle |k\rangle = |j\rangle |k + x^j(\bmod N)\rangle,$$

и переходе к вектору состояния

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^t}} \sum_{j=0}^{2^t-1} |j\rangle |x^j(\bmod N)\rangle. \quad (14.1)$$

Квантовый параллелизм проявился именно на этом шаге: как видно из (14.1), в состояниях второго подрегистра закодированы все степени числа  $x$ , необходимые для поиска периода. В рассматриваемом примере  $x = 2$ , а явный вид  $|\psi_2\rangle$  есть

$$\begin{aligned} |\psi_2\rangle = & \frac{1}{\sqrt{512}} \{ |0\rangle |1\rangle + |1\rangle |2\rangle + |2\rangle |4\rangle + |3\rangle |8\rangle + |4\rangle |6\rangle + |5\rangle |11\rangle + \\ & + |7\rangle |2\rangle + \dots |511\rangle |2\rangle \}. \end{aligned} \quad (14.2)$$

На первый взгляд, в этой записи трудно разглядеть какую-либо закономерность. Однако соберем линейную комбинацию векторов состояния первого подрегистра при фиксированном состоянии второго подрегистра. Получим:

$$\begin{aligned}
|\psi_2\rangle = & \frac{1}{\sqrt{512}} \{(|0\rangle + |6\rangle + \dots + |510\rangle) |1\rangle + \\
& + (|1\rangle + |7\rangle + \dots + |511\rangle) |2\rangle + \\
& + (|2\rangle + |8\rangle + \dots + |506\rangle) |4\rangle + \\
& + (|3\rangle + |9\rangle + \dots + |507\rangle) |8\rangle + \\
& + (|4\rangle + |10\rangle + \dots + |508\rangle) |16\rangle + \\
& + (|5\rangle + |11\rangle + \dots + |509\rangle) |11\rangle\}. \tag{14.3}
\end{aligned}$$

Напомним, что вектор состояния каждого из подрегистров, имеющий вид  $|n\rangle$ , записывается в виде  $|1, 0, 0, \dots, 1\rangle$ , где последовательность единиц и нулей представляет собой двоичную запись целого числа  $n$ .

В нашем конкретном примере внимательное рассмотрение суммы векторов состояния в любой из скобок выражения (14.3) показывает наличие периода  $r = 6$ . Из этого выражения видно, что знание всего вектора состояния избыточно для нахождения периода: линейная комбинация состояний первого подрегистра содержит период, закодированный в линейной комбинации состояний первого подрегистра. Поэтому в качестве следующего шага «измерим» второй подрегистр. Чтобы понять, каков может быть результат измерения, необходимо вспомнить один из основных постулатов квантовой механики. Он гласит, что если квантовая система до измерения находилась в состоянии

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle,$$

представляющем собой линейную суперпозицию собственных состояний какого-либо оператора  $\hat{A}$ ,  $\hat{A}|\psi_n\rangle = a_n|\psi_n\rangle$ , отвечающего физической величине  $a$ , то после измерения этой величины с вероятностью  $|c_n|^2$  получается одно из собственных значений  $a_n$ , а система сразу после измерения оказывается в состоянии  $|\psi_n\rangle$  [5]. В результате измерения происходит редукция (коллапс) квантового состояния  $|\psi\rangle \rightarrow |\psi_n\rangle$ , см. раздел 2 главы 4.

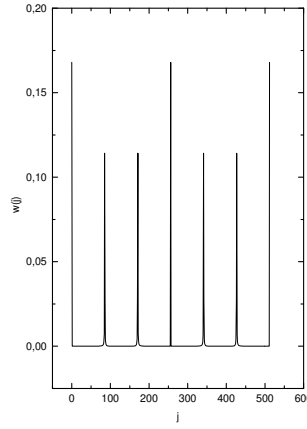


Рис. 14.1: Зависимость от  $j$  вероятности обнаружить первый подрегистр в состоянии  $|j\rangle$ . Поскольку  $j$  – целое, кривая является огибающей дискретных пиков

Допустим, что после измерения второй подрегистр оказался в состоянии  $|2\rangle$ . Весь квантовый компьютер при этом переходит в состояние

$$|\psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{86}} \sum_{a=0}^{85} |6a+1\rangle|2\rangle. \quad (14.4)$$

Нормировочный множитель выбран из обычного условия  $\langle\psi_3|\psi_3\rangle = 1$ . Из первых принципов теории сигналов известно, что для выявления периодической структуры нужно применить преобразование Фурье. В данном случае более удобно обратное квантовое преобразование Фурье первого подрегистра, которое сводится к переводу компьютера в новое состояние:

$$|\psi_4\rangle = \left(\hat{U}_{\text{QFT}}^\dagger \otimes 1\right) \frac{1}{\sqrt{86}} \sum_{a=0}^{85} |6a+1\rangle|2\rangle. \quad (14.5)$$

Используя (13.14), получим

$$\begin{aligned} |\psi_4\rangle &= \frac{1}{\sqrt{86 \times 512}} \sum_{a=0}^{85} \sum_{j=0}^{511} e^{-i2\pi j(6a+1)/512} |j\rangle|2\rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{86 \times 512}} \sum_{j=0}^{511} e^{-i2\pi j/512} \left( \sum_{a=0}^{85} e^{-i2\pi j \cdot 6a/512} \right) |j\rangle|2\rangle. \end{aligned} \quad (14.6)$$

Согласно общим принципам квантовой механики вероятность обнаружить первый подрегистр в состоянии  $|j\rangle$  равна

$$w(j) = \frac{1}{86 \times 512} \left| \sum_{a=0}^{85} e^{-i2\pi j \cdot 6a/512} \right|^2 = \frac{1}{86 \times 512} \left[ \frac{\sin^2 \left( \frac{6\pi j}{512} \times 86 \right)}{\sin^2 \frac{6\pi j}{512}} \right]. \quad (14.7)$$

График зависимости  $w(j)$  от  $0 \leq j \leq 511$  приведен на рис. 14.1. На нем четко видны пики. Аналогичные пики в угловом распределении проявляются при рассеянии частиц на периодической кристаллической решетке. Их положение дается законом Вульфа – Брэгга. В нашем случае положение пиков дается нулями знаменателя:  $j_l = 512l/6$ . Решения при целых  $j$  отвечают  $l = 0, 3, 6$ . Им соответствуют большие пики, расположенные при  $j = 0, 256, 512$ . Положение малых пиков дается условием, когда  $512l/6$  близко к целому числу. Поскольку  $512/6 = 85 + 1/3$ , малые пики расположены при  $j = 85, 171, 341, 427$ .

Допустим, после прогона квантового алгоритма Шора получено  $j = 85$ , с вероятностью  $w \approx 0,1142$ . Тогда период  $r \approx 512/85 \approx 6$ . По этому поводу стоит заметить, что в теории чисел существует регулярная процедура получения значения  $r$  из известного отношения типа  $\frac{85}{512}$ . Она основана на представлении отношений целых чисел в виде цепных дробей:

$$\frac{85}{512} = \frac{1}{6 + \frac{1}{42 + \frac{1}{2}}}.$$

Разумеется, в рассмотренном примере заранее было известно, что  $r = 6$ . Однако и в общем случае значение  $r$  извлекается из положения пиков. Чтобы в этом убедиться, вернемся к (14.1) и повторим описанную выше цепочку действий при произвольных  $x$  и  $r$ . Аналогично тому, что было сделано при рассмотрении частного случая  $r = 6$ , выделим конкретный вектор состояния второго подрегистра  $|x^{j_0}(\text{mod } N)\rangle$  и соберем при нем

всю линейную комбинацию векторов состояния первого подрегистра:

$$\begin{aligned}
|\psi_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2^t}} \left[ (|0\rangle + |r\rangle + |2r\rangle + \dots) |x^0\rangle + \right. \\
&\quad + (|1\rangle + |r+1\rangle + |2r+1\rangle + \dots) |x^1\rangle + \\
&\quad \dots + \\
&\quad \left. + (|j_0\rangle + |r+j_0\rangle + |2r+j_0\rangle + \dots) |x^{j_0}\rangle + \dots \right] = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2^t}} \sum_{j_0=0}^{r-1} \sum_{a=0}^{a_{\max}} |ar+j_0\rangle |x^{j_0}\rangle. \tag{14.8}
\end{aligned}$$

Здесь

$$a_{\max} \approx \frac{2^t}{r} - 1,$$

и знак приближенного равенства означает, что при различных  $j_0$  верхний предел  $a_{\max}$  может слегка отличаться от выписанного. Проведем измерение второго подрегистра и с отличной от нуля вероятностью получим после измерения состояние с каким-то  $j_0$ :

$$|\psi_3\rangle = \sqrt{\frac{r}{2^t}} \sum_{a=0}^{a_{\max}} |ar+j_0\rangle |x^{j_0}\rangle. \tag{14.9}$$

Новый нормировочный множитель выбран из условия  $\langle\psi_3|\psi_3\rangle = 1$ . Применяем обратное квантовое Фурье-преобразование к первому подрегистру:

$$|\psi_4\rangle = \left( \hat{U}_{\text{QFT}}^\dagger \otimes 1 \right) |\psi_3\rangle = \sum_{j=0}^{2^t-1} \left( \frac{\sqrt{r}}{2^t} \sum_{a=0}^{a_{\max}} e^{-i\frac{2\pi j}{2^t}(ar+j_0)} \right) |j\rangle |x^{j_0}\rangle. \tag{14.10}$$

Последний шаг: измеряем первый подрегистр и получаем состояние квантового компьютера  $|j\rangle |x^{j_0}\rangle$  с вероятностью, равной квадрату модуля выражения в скобках (14.10):

$$w(j) = \left| \frac{\sqrt{r}}{2^t} \sum_{a=0}^{a_{\max}} e^{-i\frac{2\pi j}{2^t}(ar+j_0)} \right|^2 = \frac{r}{2^{2t}} \left( \frac{\sin^2 \frac{\pi jr}{2^t} a_{\max}}{\sin^2 \frac{\pi jr}{2^t}} \right). \tag{14.11}$$

Анализ этого выражения проводится так же, как в разобранным выше частном случае. Пики вероятности  $w(j)$  даются нулями знаменателя

(14.11) и отвечают  $j = j_l$ , где

$$j_l = \frac{2^t}{r} l.$$

Отсюда, в принципе, и находится период  $r$ . Как показывает разобранный выше частный случай, возможно, необходим более тщательный анализ ситуации, когда получается нецелое  $j_l$ . Существенно, что такой анализ не требует экспоненциально больших затрат времени и проводится чисто классическими методами.

В проведенном анализе алгоритма Шора использовался конкретный выбор  $x = 2$ . В принципе, для поиска множителей другого числа такой выбор мог бы оказаться неудачным. В этом случае следовало бы попробовать другие числа  $x$ . Ясно, что несколько таких попыток не приведут к экспоненциальному росту ресурсных затрат.

## 14.2 Алгоритм Гровера поиска в базе данных

Классическая задача о поиске определенной записи в неструктурированной базе данных из  $N$  элементов требует примерно  $N$  обращений к ней. Грубо говоря, мы перебираем все записи, пока не найдем нужную. В 1997 г. Л. Гровер опубликовал в ведущем мировом физическом журнале статью [12], в которой предложил *квантовый алгоритм поиска* в неструктурированной квантовой базе данных из  $N$  записей, позволяющий найти нужную запись после примерно  $\sqrt{N}$  обращений к этой базе. Хотя квантовое ускорение не экспоненциальное, как в случае алгоритма Шора, а степенное, при  $N = 10^8$  время поиска уменьшалось бы в 10 000 раз по сравнению с классическим случаем.

Квантовая база данных состоит из  $n$ -кубитовых регистров, каждый из которых представлен вектором состояния вида  $|\underbrace{1001101000 \dots}_n\rangle$  с последовательностью нулей и единиц, являющихся двоичным представлением какого-то целого числа  $x$ . Для краткости, как уже указывалось выше, такой  $n$ -кубитовый вектор состояния можно записывать в виде  $|x\rangle$ . Всего имеется  $N = 2^n$  записей в квантовой базе данных. Среди этих  $N$



векторов состояния имеется один помеченный вектор состояния  $|\omega\rangle$ , который и нужно найти, обращаясь к базе минимальное число раз. Запрос в квантовую базу данных производится путем обращения к *квантовому оракулу*. В современной литературе по квантовым алгоритмам это название относится к устройству, которое сообщает нам значения бинарной, т. е. принимающей всего два значения 0 и 1, функции  $f_\omega(x)$ . Эта функция обладает свойством:

$$f_\omega(x) = \begin{cases} 1, & \text{если } x = \omega, \\ 0, & \text{если } x \neq \omega. \end{cases} \quad (14.12)$$

Действие оракула изображается унитарным преобразованием

$$\hat{U}_{f_\omega}|x\rangle|y\rangle = |x\rangle|y + f_\omega(x)\rangle. \quad (14.13)$$

Здесь  $|x\rangle$  представляет собой  $n$ -кубитовый вектор состояния, а  $|y\rangle$  является однокубитовым вектором; сложение осуществляется по модулю 2. Удобство квантового оракула состоит в том, что ему можно предъявлять не только один квантовый регистр, но и линейную комбинацию двух или нескольких регистров. Подействуем оператором  $\hat{U}_{f_\omega}$  на вектор состояния  $|x\rangle\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}$ . С учетом правила действия (14.13) получим:

$$\begin{aligned} \hat{U}_{f_\omega}|x\rangle\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|x\rangle|f_\omega(x)\rangle - |x\rangle|1 + f_\omega(x)\rangle) = \\ &= \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}(|\omega\rangle|1\rangle - |\omega\rangle|0\rangle) = -|\omega\rangle\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}, & \text{если } x = \omega \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|x\rangle|0\rangle - |x\rangle|1\rangle) = +|x\rangle\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}, & \text{если } x \neq \omega \end{cases}. \end{aligned}$$

Этот результат можно переписать как

$$\hat{U}_{f_\omega}|x\rangle\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} = (-1)^{f_\omega(x)}|x\rangle\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}.$$

Если не обращать внимания на второй однокубитовый регистр, то  $\hat{U}_{f_\omega}$  осуществляет фазовое преобразование  $n$ -кубитового регистра:

$$|x\rangle \rightarrow (-1)^{f_\omega(x)}|x\rangle.$$

Если найдена нужная запись в квантовой базе данных, то с учетом (14.12) получим, что  $x = \omega$ ,  $|\omega\rangle \rightarrow -|\omega\rangle$ . Если поиск неудачен, т. е.

$x \neq \omega$ , то  $|x\rangle \rightarrow |x\rangle$ . Указанное действие представляет собой инверсию фазы искомого квантового регистра и может быть представлено в виде оператора  $\hat{U}_\omega$ , действующего на  $n$ -кубитовый регистр:

$$\hat{U}_\omega = \hat{I} - 2|\omega\rangle\langle\omega|. \quad (14.14)$$

Отсюда видно, что  $\hat{U}_\omega|\omega\rangle = -|\omega\rangle$  и  $\hat{U}_\omega|x\rangle = |x\rangle$ , если  $x \neq \omega$ .

Для построения алгоритма с помощью формулы (13.8) из исходного вектора состояния  $|\underbrace{00\cdots 0}_n\rangle$  строим вектор

$$|s\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x=0}^{N-1} |x\rangle, \quad (14.15)$$

где  $N = 2^n$ . Среди  $N$  векторов состояния  $|x\rangle$  присутствует один нужный вектор  $|\omega\rangle$  с вероятностью  $|\langle\omega|s\rangle|^2 = 1/N$ . Для того чтобы его найти, вводится оператор

$$\hat{U}_s = 2|s\rangle\langle s| - \hat{I}. \quad (14.16)$$

Этот оператор действует так:  $\hat{U}_s|s\rangle = |s\rangle$ ,  $\hat{U}_s|\omega\rangle = 2|s\rangle\langle s|\omega\rangle - |\omega\rangle \equiv \frac{2}{\sqrt{N}}|s\rangle - |\omega\rangle$ . Последнее тождество выполняется ввиду того, что

$$\langle\omega|s\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}.$$

Теперь все готово для того, чтобы ввести *итерацию Гровера*, которая представляется действием оператора  $\hat{U}_G = \hat{U}_s\hat{U}_\omega$ . С учетом (14.14) и (14.16) находим:

$$\begin{aligned} \hat{U}_G|s\rangle &= \left(1 - \frac{4}{N}\right)|s\rangle + \frac{2}{\sqrt{N}}|\omega\rangle, \\ \hat{U}_G|\omega\rangle &= -\frac{2}{\sqrt{N}}|s\rangle + |\omega\rangle. \end{aligned} \quad (14.17)$$

Отсюда видно, что после итерации Гровера  $\hat{U}_G|s\rangle$  амплитуда вероятности состояния  $|s\rangle$  слегка уменьшается за счет появления амплитуды вероятности искомого состояния  $|\omega\rangle$ . Покажем, что после многократно проведенной итерации Гровера искомое состояние  $|\omega\rangle$  будет иметь единичную вероятность. Для этого удобно представить (14.17) в матричном виде:

$$\hat{U}_G \begin{pmatrix} |s\rangle \\ |\omega\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - \frac{4}{N} & \frac{2}{\sqrt{N}} \\ -\frac{2}{\sqrt{N}} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |s\rangle \\ |\omega\rangle \end{pmatrix}.$$

При  $N \gg 1$  добавкой  $4/N$  можно пренебречь, и матрица становится похожей на матрицу поворота на бесконечно малый угол  $2\theta$ , где  $\theta = 1/\sqrt{N}$ . Отсюда понятно, что  $\hat{U}_G^n$  в матричном представлении в базисе  $|s\rangle, |\omega\rangle$  будет  $n$ -ой степенью матрицы поворота

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} 1 & 2\theta \\ -2\theta & 1 \end{pmatrix}^n &= \left( \hat{1} + i \frac{2n\theta}{n} \sigma_y \right)^n \approx e^{2in\theta \sigma_y} = \cos 2n\theta + i \sigma_y \sin 2n\theta = \\ &= \begin{pmatrix} \cos 2n\theta & \sin 2n\theta \\ -\sin 2n\theta & \cos 2n\theta \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Здесь  $\hat{1}$  суть единичная матрица размерности  $2 \times 2$ , а  $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$  одна из матриц Паули. Отсюда получаем, что

$$\begin{aligned} \hat{U}_G^n |s\rangle &= \cos 2n\theta |s\rangle + \sin 2n\theta |\omega\rangle, \\ \hat{U}_G^n |\omega\rangle &= \cos 2n\theta |\omega\rangle - \sin 2n\theta |s\rangle. \end{aligned} \quad (14.18)$$

Если  $2n\theta = \pi/2$ , то вероятность обнаружения искомого состояния  $|\omega\rangle$  близка к единице. Это значит, что после  $n = \left\lceil \frac{\pi}{4} \sqrt{N} \right\rceil$  обращений к оракулу с достоверностью найдется нужная квантовая запись  $|\omega\rangle$ . Важно, что надо знать, когда следует остановить итерации Гровера, поскольку после указанного числа итераций вероятность обнаружения состояния  $|\omega\rangle$  начнет уменьшаться.

Итак, алгоритм Гровера, в принципе, позволяет ускорение поиска примерно в  $\sqrt{N}$  раз по сравнению с классическими алгоритмами, требующими примерно  $N$  обращений к классическому оракулу. Другое дело, что сам процесс перекодирования базы данных в квантовый режим может потребовать затрат ресурсов, перекрывающих выгоды алгоритма Гровера. В этой связи в литературе высказывались соображения, что квантовый поиск мог бы оказаться полезным при решении других задач квантовых вычислений в качестве подпрограммы.

Допустим, что в квантовой базе данных из  $N$  записей имеется  $r$  помеченных записей  $|\omega_i\rangle$ , где  $i = 1, 2, \dots, r$ . Найдём минимальное число обращений к квантовому оракулу, необходимое для обнаружения хотя бы одной из помеченных записей. Для этого обратим внимание на геометрическую интерпретацию алгоритма Гровера. В случае одной помеченной записи  $|\omega\rangle$  квантовый оракул  $\hat{U}_\omega$  отражает векторы состояния в плоскости, ортогональной  $|\omega\rangle$ :  $\hat{U}_\omega |\omega\rangle = -|\omega\rangle$ ,  $\hat{U}_\omega |x\rangle = |x\rangle$ , если  $x \neq \omega$ .

Разумеется, плоскости, векторы и т. д. здесь относятся к пространству квантовых состояний, а не обычному координатному пространству. Сама же итерация Гровера согласно (14.18) интерпретируется как поворот в плоскости, натянутой на векторы  $|s\rangle$  и  $|\omega\rangle$ , в сторону вектора  $|\omega\rangle$ . Изменим алгоритм так, чтобы квантовый оракул

$$\hat{U}_{\tilde{\omega}} = \hat{I} - 2|\tilde{\omega}\rangle\langle\tilde{\omega}|$$

отражал в плоскости, ортогональной вектору состояния

$$|\tilde{\omega}\rangle = r^{-1/2} \sum_{i=1}^r |\omega_i\rangle.$$

Модифицированная для решения поставленной задачи итерация Гровера будет иметь вид  $\hat{U}_{\tilde{G}} = \hat{U}_s \hat{U}_{\tilde{\omega}}$ . Для того чтобы узнать, как этот оператор действует на  $|s\rangle$ , вычислим амплитуду вероятности того, что состояние  $|\tilde{\omega}\rangle$  содержится в состоянии  $|s\rangle$ :

$$\langle s|\tilde{\omega}\rangle = \frac{1}{\sqrt{r}} \sum_{i=1}^r \langle s|\omega_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{rN}} \sum_{j=0}^{N-1} \langle j|\omega_i\rangle = \sqrt{\frac{r}{N}},$$

при этом  $\langle s|\tilde{\omega}\rangle = \langle\tilde{\omega}|s\rangle$ . Здесь было учтено, что  $|s\rangle$  имеет вид (14.15) и что среди  $N$  состояний вычислительного базиса  $|j\rangle$  обязательно присутствуют все помеченные состояния  $|\omega_i\rangle$  в количестве  $r$  штук. Теперь можно найти, что

$$\begin{aligned} \hat{U}_{\tilde{G}}|s\rangle &= \hat{U}_s(\hat{I} - 2|\tilde{\omega}\rangle\langle\tilde{\omega}|)|s\rangle = \hat{U}_s(|s\rangle - 2|\tilde{\omega}\rangle\langle\tilde{\omega}|s\rangle) = \\ &= |s\rangle - 2\sqrt{\frac{r}{N}}(2|s\rangle\langle s|\tilde{\omega}\rangle - |\tilde{\omega}\rangle) = \left(1 - 4\frac{r}{N}\right)|s\rangle + 2\sqrt{\frac{r}{N}}|\tilde{\omega}\rangle. \end{aligned}$$

Сравнение с (14.17) показывает, что наша задача сводится к предыдущей с помощью замены  $N \rightarrow N/r$ . Поэтому поиск среди  $N$  состояний одного из  $r$  помеченных требует  $\sqrt{N/r}$  обращений к квантовому оракулу.

## 14.3 Телепортация неизвестного квантового состояния

Введем в действие трех персонажей, которые фигурируют во всех современных публикациях по проблеме квантовых информационных технологий. Это Алиса (А), Боб (В) и Чарли (С). Допустим, Чарли приготовил квантовое состояние

$$|\psi\rangle_C = a|0\rangle_C + b|1\rangle_C.$$

Здесь и далее нижние индексы  $A, B, C$  указывают на принадлежность кубита конкретному из указанных персонажей. Чарли передал Алисе этот кубит и исчез в неизвестном направлении, не сообщив ей значения комплексных амплитуд вероятности  $a$  и  $b$ . Бобу нужен этот кубит. Как Алиса может передать этот кубит Бобу, если Боб находится на расстоянии, не допускающим прямого контакта, а единственным видом связи между ним и Алисой является только телефон? Алиса могла бы измерить кубит, проецируя его на базисные состояния либо  $|0\rangle_A$ , либо  $|1\rangle_A$ , и сообщить результат Бобу по телефону. Но принципы квантовой механики говорят, что при измерении квантовое состояние объекта может измениться неконтролируемым образом. Например, с вероятностью  $|a|^2$  произойдет редукция (коллапс) вектора состояния  $a|0\rangle_C + b|1\rangle_C \rightarrow |0\rangle_C$ . Информация о  $b$  разрушится в результате измерения. Алиса могла бы скопировать неизвестный ей вектор состояния  $|\psi\rangle_C$  в числе копий, которые позволили бы ей определить модули амплитуд вероятности и их относительную фазу. Для копирования кубита Алисе потребовался бы квантовый ксерокс, в качестве которого выступал бы квантовомеханический оператор  $\hat{U}_{\text{херок}}$ , действующий по правилу

$$\hat{U}_{\text{херок}}|\psi\rangle|0\rangle = |\psi\rangle|\psi\rangle. \quad (14.19)$$

Оператор  $\hat{U}_{\text{херок}}$  создает неизвестное состояние  $|\psi\rangle$  вместо некоторого «пустого» состояния  $|0\rangle$ .

Увы, квантовый ксерокс создать невозможно! Препятствием к этому служит теорема о невозможности клонирования неизвестного квантового состояния, доказанная в 1982 г. Вутерсом и Зуреком (Wooters, Zurek). Теорема доказывается от противного. Допустим, что существует оператор  $\hat{U}_{\text{херок}}$ , удовлетворяющий свойству (14.19) для любого вектора состояния  $|\psi\rangle$ . Но тогда утверждение должно быть справедливо для линейной

комбинации векторов состояния  $|\psi\rangle = c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle$ . В силу линейности оператора  $\hat{U}_{\text{херох}}$  в левой части равенства (14.19) получится вектор состояния

$$c_1|\psi_1\rangle|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle|\psi_2\rangle,$$

тогда как в правой части (14.19) получится вектор состояния

$$c_1^2|\psi_1\rangle|\psi_1\rangle + c_2^2|\psi_2\rangle|\psi_2\rangle + c_1c_2(|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle + |\psi_2\rangle|\psi_1\rangle),$$

не совпадающий с только что полученным. Противоречие! Следовательно, оператор с требуемым свойством не существует.

Выходом из ситуации является использование Алисой и Бобом запутанных состояний двух кубитов. Еще в 1966 г. знаменитый ирландский физик Дж. Белл, работавший в ЦЕРНе, ввел удобный базис для запутанных состояний двух частиц, с тех пор называемый базисом Белла. В случае двухкубитовых состояний, которыми обладают Алиса и Боб, базис состоит из четырех векторов состояния:

$$\begin{aligned} |\phi^\pm\rangle_{AB} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle_{AB} \pm |11\rangle_{AB}), \\ |\psi^\pm\rangle_{AB} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle_{AB} \pm |10\rangle_{AB}). \end{aligned} \quad (14.20)$$

В этой записи и далее  $|00\rangle_{AB} \equiv |0\rangle_A|0\rangle_B$  и т. д., но состояния  $|\phi^\pm\rangle_{AB}$  и  $|\psi^\pm\rangle_{AB}$  в виде прямых произведений не представимы ввиду их запутанности. Нижние двойные индексы в виде заглавных латинских букв указывают на принадлежность к персонажам, которые владеют запутанным двухкубитовым состоянием.

Алиса и Боб должны быть предусмотрительными и заранее приготовить совместное двухкубитовое запутанное состояние. Допустим, этим состоянием будет состояние с вектором  $|\phi^+\rangle_{AB}$ . После этого Боб может увозить свой кубит сколь угодно далеко и хранить в надежном месте. Алиса также хранит свой кубит, запутанный с кубитом Боба. Чтобы проиллюстрировать этот пункт, допустим, что Алиса и Боб делят двухкубитовое состояние  $|\psi^-\rangle_{AB} = (|01\rangle_{AB} - |10\rangle_{AB})/\sqrt{2}$ . Если кубиты реализуются как состояния частицы со спином  $1/2$  с определенной проекцией спина на ось  $z$ , то

$$|\psi^+\rangle_{AB} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_z\downarrow_z\rangle_{AB} - |\downarrow_z\uparrow_z\rangle_{AB}).$$

Запутанное состояние  $|\psi^-\rangle_{AB}$  в этом случае является состоянием с полным спином  $S = 0$ . Приготовив две частицы в таком состоянии, их можно разносить на большие расстояния и хранить. Это вполне реализуемая ситуация, особенно если учесть, что одиночный электрон хранился в *ловушке Пеннинга* в течение примерно года.

Другая пара максимально запутанных состояний Белла  $|\phi^\pm\rangle$  в спиновой записи выглядит как  $(|\uparrow_z\uparrow_z\rangle \pm |\downarrow_z\downarrow_z\rangle)/\sqrt{2}$ . Для приготовления таких состояний требуется включить спин-спиновое взаимодействие и поместить систему в переменное магнитное поле. Возможность приготовления таких состояний обсуждается в следующей главе.

Теперь решение поставленной задачи, называемое в литературе *протоколом телепортации неизвестного квантового состояния*, можно представить в виде последовательности следующих действий. Получив от Чарли неизвестное состояние  $a|0\rangle_C + b|1\rangle_C$ , Алиса присоединяет к нему свой кубит, спутанный с кубитом Боба, приготовив тем самым состояние с вектором  $|\psi_i\rangle_{ABC} = (a|0\rangle_C + b|1\rangle_C)|\phi^+\rangle_{AB}$ . Это выражение можно переписать в виде

$$\begin{aligned} |\psi_i\rangle_{ABC} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a|0\rangle_C + b|1\rangle_C)(|00\rangle_{AB} + |11\rangle_{AB}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(a|0\rangle_C|0\rangle_A|0\rangle_B + \\ &+ a|0\rangle_C|1\rangle_A|1\rangle_B + b|1\rangle_C|0\rangle_A|0\rangle_B + b|1\rangle_C|1\rangle_A|1\rangle_B) = \frac{1}{2} \times \\ &\times [a(|\phi^+\rangle_{AC} + |\phi^-\rangle_{AC})|0\rangle_B + a(|\psi^+\rangle_{AC} - |\psi^-\rangle_{AC})|0\rangle_B + \\ &+ b(|\psi^+\rangle_{AC} + |\psi^-\rangle_{AC})|0\rangle_B + b(|\phi^+\rangle_{AC} - |\phi^-\rangle_{AC})|1\rangle_B] = \\ &= \frac{1}{2} [|\phi^+\rangle_{AC}(a|0\rangle_B + b|1\rangle_B) + |\phi^-\rangle_{AC}(a|0\rangle_B - b|1\rangle_B) + \\ &+ |\psi^+\rangle_{AC}(a|1\rangle_B + b|0\rangle_B) + |\psi^-\rangle_{AC}(-a|1\rangle_B + b|0\rangle_B)]. \end{aligned}$$

Если учесть, что  $\sigma_x|0\rangle = |1\rangle$ ,  $\sigma_x|1\rangle = |0\rangle$ ,  $\sigma_y|0\rangle = i|1\rangle$ ,  $\sigma_y|1\rangle = -i|0\rangle$ ,  $\sigma_z|0\rangle = |0\rangle$ , то окончательно получаем:

$$\begin{aligned} |\psi_i\rangle_{ABC} &= \frac{1}{2} [|\phi^+\rangle_{AC}(a|0\rangle_B + b|1\rangle_B) + \\ &+ |\phi^-\rangle_{AC}\sigma_z^{(B)}(a|0\rangle_B + b|1\rangle_B) + \\ &+ |\psi^+\rangle_{AC}\sigma_x^{(B)}(a|0\rangle_B + b|1\rangle_B) + \\ &+ |\psi^-\rangle_{AC}i\sigma_y^{(B)}(a|0\rangle_B + b|1\rangle_B)]. \end{aligned} \quad (14.21)$$

Верхний индекс  $(B)$  у  $\sigma_{x,y,z}$  означает, что соответствующая матрица Паули должна действовать на кубит  $B$ . Цель этих действий состоит в том,

что начальный вектор состояния трех кубитов оказался переразложен по базису Белла, Алисы и Чарли. После этого Алиса может провести измерение в указанном базисе, см. раздел 2 главы 4.

Вернемся к действиям Алисы. Проведение измерений в базисе Белла означает, что Алиса применяет один из четырех операторов проектирования  $|\phi^\pm\rangle_{AC}\langle\phi^\pm|_{AC}$ ,  $|\psi^\pm\rangle_{AC}\langle\psi^\pm|_{AC}$ . Допустим, что в результате измерений, выполненных Алисой над кубитами, находящимися в ее распоряжении, вектор их состояния оказался  $|\phi^+\rangle_{AC}$ . Алиса сообщает свой результат Бобу. В соответствии с выражением (14.21) Боб знает, что он получил квантовый бит в состоянии  $a|0\rangle_B + b|0\rangle_B$ . Если в результате измерений Алисы произошла проекция на состояние  $|\phi^-\rangle_{AC}$  и Алиса сообщила об этом Бобу, он в соответствии с (14.21) должен подействовать на свой кубит оператором  $\sigma_z^{(B)}$  и после этого с гарантией получить тот же самый кубит. Если Алиса осуществила проекцию на вектор состояния  $|\psi^+\rangle_{AC}$ , Боб применяет к своему кубиту оператор  $\hat{U}_{\text{CNOT}}^{(B)} \equiv \sigma_x^{(B)}$  для того, чтобы получить кубит  $a|0\rangle_B + b|1\rangle_B$  и т. д. Произошла телепортация неизвестного квантового состояния к Бобу, который может находиться сколь угодно далеко от Алисы. Теорема о запрете клонирования не нарушилась, поскольку исходный кубит, приготовленный Чарли, в результате измерений, проведенных Алисой, разрушился. Мы видим, что такое глубоко квантовое явление, как существование запутанных квантовых состояний, может использоваться в качестве ресурса при квантовой передаче данных. Квантовое запутывание является следствием нелокальных квантовых корреляций между состояниями разнесенных в пространстве квантовых объектов. Разумеется, выводы специальной теории относительности не нарушаются, поскольку при телепортации не передается ни энергия, ни информация. Ведь для того, чтобы провести телепортацию квантового состояния, Алисе, согласно протоколу, нужно передать Бобу классическую информацию по классическому каналу связи. При этом сообщение передается со скоростью, не превышающей скорости света.

Экспериментальное подтверждение алгоритма телепортации было получено в конце 90-х гг. прошлого века с помощью запутанных состояний поляризации фотонов. Расстояние телепортации было порядка нескольких метров. С тех пор квантовые инженеры продвинулись настолько далеко, что квантовая телепортация осуществляется с использованием коммерческих оптоволоконных сетей связи на расстояния порядка сотен метров. Подробности этих интереснейших исследований и ссылки на



специальную литературу можно найти в статье [10].

## 14.4 Задачи

1. Вычислить высоту больших и малых пиков на рис. 14.1 и величину вероятности  $w(j)$  для  $j$ , отличающихся на  $\pm 1$  от тех значений, при которых возникают пики вероятности. Этот расчет позволит оценить остроту пиков вероятности.
2. Повторить приведенное в тексте рассмотрение этапов алгоритма Шора для поиска множителей числа  $N = 15$ .
3. Выразить все четыре состояния базиса Белла (14.20) в виде четырехрядных спиноров.
4. Допустим, что однокубитовые состояния  $|0\rangle$  и  $|1\rangle$  являются состояниями с определенной проекцией спина не на ось  $z$ , а на произвольную ось, заданную единичным вектором

$$\mathbf{n} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta).$$

Решить предыдущую задачу для такого выбора оси квантования.

5. Выразить все четыре оператора проектирования на базис состояний Белла  $|\phi^\pm\rangle_{AC}\langle\phi^\pm|_{AC}$  и  $|\psi^\pm\rangle_{AC}\langle\psi^\pm|_{AC}$  через линейные комбинации прямых произведений матриц Паули  $\sigma_i^{(A)} \otimes \sigma_j^{(C)}$  и  $\hat{1}^{(A)} \otimes \hat{1}^{(C)}$ .

## Глава 15

# Атомы тяжелее водорода

Одним из многочисленных успехов квантовой механики было объяснение периодической системы Д. И. Менделеева и электрических и магнитных свойств атомов. Нейтральные атомы тяжелее водорода имеют электронную оболочку, содержащую более одного электрона. Это обстоятельство требует дополнительного постулата о волновых функциях многоэлектронной системы, не вытекающих из уравнения Шредингера (2.2).

### 15.1 Тожественность частиц в квантовой механике

Тожественными считаются частицы, одинаково реагирующие на внешние поля. Они имеют совпадающие массы, заряды, спины и другие квантовые числа. Тожественность частиц имеет место и в классической механике, однако в квантовой механике она приводит к следствиям, не имеющим классического аналога. Рассмотрим рассеяние двух тождественных частиц на угол  $\theta$  в системе их центра масс на рис. 15.1. В рамках классической механики обе ситуации, обозначенные как А и В, очевидно различны, поскольку им отвечают разные траектории частиц. Можно с уверенностью утверждать, что частица 1 попала в детектор  $D_1$ , а частица 2 – в детектор  $D_2$ .

Но в квантовой механике дело обстоит по-другому. Поскольку понятие траектории частицы отсутствует, волновые функции двух частиц в

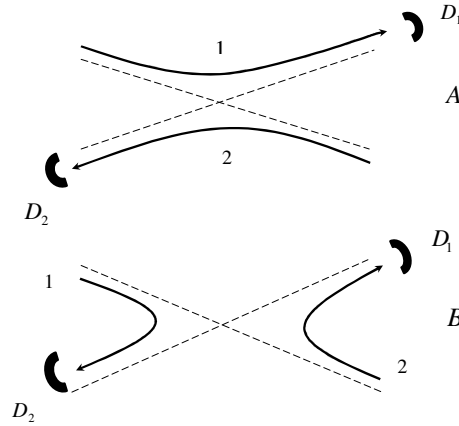


Рис. 15.1: Рассеяние тождественных частиц в квантовой механике. Штриховые линии обозначают асимптотические направления импульсов рассеиваемых частиц

пространстве вообще говоря сильно перекрываются из-за конечной длины волны де Бройля. Поэтому единственное, что можно утверждать, то это то, что одна из частиц попала в детектор  $D_1$ , а другая – в детектор  $D_2$ . Ситуации, обозначенные на рис. 15.1 как  $A$  и  $B$ , отличаются перестановкой частиц 1 и 2, и эти ситуации неразличимы. Волновые функции в этих случаях условно обозначим как  $\Psi_A \equiv \Psi(1, 2)$ ,  $\Psi_B \equiv \Psi(2, 1)$ , где 1 обозначает радиус-вектор  $\mathbf{r}_1$  и проекцию спина  $s_{z1}$  на ось  $z$ . Аналогично 2 обозначает радиус-вектор  $\mathbf{r}_2$  и проекцию спина  $s_{z2}$  на ось  $z$ . Казалось бы, что в согласии с принципом суперпозиции можно взять любую линейную комбинацию  $c_A\Psi_A + c_B\Psi_B$  волновых функций, и она равно хорошо будет описывать квантовое состояние тождественных частиц при рассеянии. Однако это не так, и вся совокупность экспериментов по рассеянию тождественных частиц говорит, что в дополнение к принципу суперпозиции необходимо включить дополнительный *постулат симметризации*, который утверждает, что в трехмерном пространстве<sup>1</sup> для частиц с целым спином допустим лишь выбор  $c_B = c_A$ , тогда как для частиц с полуцелым спином – только выбор  $c_B = -c_A$ . Частицы с целым спи-

<sup>1</sup>В двумерном пространстве ситуация более сложная, и допустимы произвольные фазовые соотношения между  $c_A$  и  $c_B$ . Двумерные электронные системы экспериментально реализованы в физике конденсированного состояния, а общие фазовые соотношения играют решающую роль в объяснении *дробного квантового эффекта Холла*.

ном называются *бозонами*, частицы с полуцелым спином – *фермионами*. Если ввести оператор перестановки  $\hat{P}_{12}$ , действие которого сводится к перестановке координат и проекций спина частиц, то волновая функция двух тождественных бозонов должна удовлетворять условию

$$\hat{P}_{12}\Psi(1, 2) = \Psi(2, 1) = +\Psi(1, 2), \quad (15.1)$$

тогда как волновая функция двух тождественных фермионов должна удовлетворять условию

$$\hat{P}_{12}\Psi(1, 2) = \Psi(2, 1) = -\Psi(1, 2), \quad (15.2)$$

Условие (15.2) представляет собой формулировку *принципа запрета Паули*: два тождественных фермиона не могут находиться в одном квантовом состоянии. Действительно, при совпадающих квантовых числах из (15.2) следует, что  $\Psi(1, 1) = 0$ .

Казалось бы, какое отношение к реальному миру может иметь чисто математическое требование антисимметрии полной волновой функции тождественных фермионов? Дело в том, что свойства волновой функции должны отражать и объяснять всю совокупность наблюдаемых в природе явлений. Да, принцип неопределенности запрещает электронам упасть на ядро. Но он не запрещает им всем оказаться в состоянии с наименьшей энергией. Понятно, что в этом случае было бы невозможно все химическое многообразие химических свойств элементов периодической системы Д. И. Менделеева, существование органических веществ и, в конечном счете, жизни. И действительно, одним из аргументов, приведших В. Паули к формулировке принципа запрета электронам находиться в одном состоянии, было объяснение периодической таблицы элементов.

Квантово-механическое требование правильных свойств симметрии волновой функции тождественных фермионов имеет решающее значение и в современной физике. Оно привело к появлению концепции нового квантового числа и отвечающего ему взаимодействия в мире фундаментальных составляющих материи – *кварков*. Это квантовое число получило название *цвета*. Несмотря на название, к реальному свету, то есть восприятию глазом электромагнитного излучения с определенной длиной волны, это квантовое число отношения не имеет. Кварки были введены таким образом, что протон представляет собой связанное состояние из трех кварков  $uud$ , где электрический заряд кварка  $u$  равен  $2e/3$ , а у кварка  $d$  заряд равен  $-e/3$ . Все кварки являются фермионами со спином  $1/2$ . Уже довольно давно в опытах по столкновению элементарных

частиц достаточно больших энергий была обнаружена короткоживущая частица со спином  $s = 3/2$  и зарядом  $2e$ , названная  $\Delta^{++}$ -резонанс. На языке кварковой модели квантовое состояние  $\Delta^{++}$  с проекцией спина  $s_z = +3/2$  представляется в виде вектора  $|u \uparrow u \uparrow u \uparrow\rangle$  и по энергии лежит ниже других короткоживущих состояний.

Но тогда сразу возникает противоречие с принципом Паули. В самом деле, координатная волновая функция состояний с наименьшей энергией симметрична относительно перестановки координат трех  $u$ -кварков. Из выписанного вектора состояния видно, что спиновая волновая функция симметрична относительно перестановки спиновых переменных. Следовательно, полная волновая функция оказывается также симметричной, что невозможно для системы тождественных фермионов. Для того чтобы избежать противоречия с принципом Паули было введено новое квантовое число, принимающее три значения  $a = 1, 2, 3$ , которое и было названо цветом. Таким образом, в дополнение к проекции спина каждому кварку необходимо приписать цвет. С учетом цвета вектор состояния  $\Delta^{++}$ -резонанса записывается в виде

$$\sum_{a,b,c} e_{abc} |u_a \uparrow u_b \uparrow u_c \uparrow\rangle,$$

где  $e_{abc}$  есть символ Леви-Чивита, антисимметричный по любой паре индексов. Выписанный вектор состояния антисимметричен относительно перестановки любой пары тождественных кварков в согласии с принципом Паули. В дальнейшем квантовому числу цвета была придана и динамическая природа. Его стали рассматривать как некоторый *цветовой заряд*, а по аналогии с электродинамикой цветовые заряды должны взаимодействовать друг с другом посредством определенного поля, названного *глюонным полем*. Кванты этого поля называются *глюонами*. Но если у электромагнитного поля квант один - фотон, то число глюонов разного вида, в соответствии с тремя значениями цвета, равно  $3 \times 3 - 1 = 8$ ; -1 появилась из-за того, что одно из девяти возможных состояний не может осуществлять цветового взаимодействия. Была создана квантовая теория взаимодействия кварков с глюонами - *квантовая хромодинамика*, в рамках которой были успешно описаны многочисленные эксперименты с элементарными частицами. Хотя кварки и глюоны были введены в теорию на фундаментальном уровне, в свободном состоянии эти объекты, в отличие от электронов и фотонов, не наблюдаются. Это обстоятельство представляет собой проблему, не решенную до сих пор.

Разумеется, приведенные примеры не исчерпывают всего многообразия явлений, в которых проявляется принцип Паули. Во второй части курса будут обсуждаться некоторые другие явления и свойства, для которых этот принцип имеет решающее значение.

И для тождественных бозонов требование симметрии волновой функции относительно перестановок позволяет понять многие явления, наблюдаемые в экспериментах. Полная волновая функция системы тождественных бозонов симметрична, поэтому принцип запрета находится в одном состоянии на них не распространяется. Любое сколь угодно большое число бозонов может оказаться в одном квантовом состоянии. Физическим следствием этого в случае фотонов является появление генерации монохроматического электромагнитного излучения в *лазерах и мазерах*. Накопление при сверхнизких температурах макроскопически большого числа атомов с целым спином в состоянии с наименьшей энергией в магнито-оптических ловушках, называемое *конденсацией Бозе - Эйнштейна*, является другим примером проявления принципа симметрии волновой функции. Хотя такая конденсация была предсказана Эйнштейном в 1926 г., ее экспериментальное подтверждение было получено лишь в 1995 г.

## 15.2 Атом гелия и обменное взаимодействие

Ядро атома гелия имеет заряд  $Z = 2$  в единицах элементарного заряда, а нейтральный атом содержит два электрона. По правилу сложения моментов полный спин электронной оболочки может принимать значения  $S = 0$  (синглетное состояние, называемое парагелием) либо  $S = 1$  (триплетное состояние, называемое ортогелием). За счет кулоновских сил электроны притягиваются к ядру и отталкиваются друг от друга. Будем пренебрегать возможными магнитными эффектами. Тогда гамильтониан электронной оболочки атома гелия записывается в виде

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - 2e^2 \left( \frac{1}{|\mathbf{r}_1|} + \frac{1}{|\mathbf{r}_2|} \right) + \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}. \quad (15.3)$$

Он не содержит слагаемых, зависящих от операторов спина, поэтому полная волновая функция двух электронов является прямым произве-

дением координатной и спиновой волновых функций:

$$\Psi(1, 2) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \otimes \chi(s_{z1}, s_{z2}).$$

Проанализируем состояния электронной оболочки, рассматривая кулоновское отталкивание электронов как возмущение. Пусть пространственные состояния электронов 1 и 2 в гелии характеризуются набором

$$k_{1,2} = (n_{1,2}, l_{1,2}, m_{1,2})$$

соответственно главного квантового числа, орбитального момента и проекции орбитального момента на ось  $z$ . В нулевом приближении координатная волновая функция двух электронов должна выражаться в виде линейной комбинации произведений одноэлектронных волновых функций. Но в силу принципа Паули допустимы только такие линейные комбинации, которые приводят к антисимметричной полной волновой функции двух электронов. Для триплетного состояния  $S = 1$  спиновые волновые функции (12.23), (12.24) и (12.25) симметричны относительно перестановки двух электронов, поэтому координатная волновая функция должна быть антисимметричной. Следовательно, три полных волновых функции триплетного состояния в нулевом приближении имеют вид

$$\Psi_{S=1}(1, 2) = \frac{\psi_{k_1}(\mathbf{r}_1)\psi_{k_2}(\mathbf{r}_2) - \psi_{k_1}(\mathbf{r}_2)\psi_{k_1}(\mathbf{r}_2)}{\sqrt{2}} \otimes \begin{cases} |\uparrow\uparrow\rangle \\ \frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{cases} \quad (15.4)$$

для соответственно  $S_z = +1, 0$  и  $-1$ . Полная волновая функция синглетного состояния с  $S = S_z = 0$ , с учетом (12.26), записывается в виде

$$\Psi_{S=0}(1, 2) = \frac{\psi_{k_1}(\mathbf{r}_1)\psi_{k_2}(\mathbf{r}_2) + \psi_{k_1}(\mathbf{r}_2)\psi_{k_1}(\mathbf{r}_2)}{\sqrt{2}} \otimes \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \quad (15.5)$$

Эти выражения справедливы, если  $k_1 \neq k_2$ . Если же  $k_1 = k_2$ , т.е. электроны имеют одинаковые орбитальные квантовые числа, то допустимо только синглетное состояние с волновой функцией

$$\Psi_{S=0}(1, 2) = \psi_{k_1}(\mathbf{r}_1)\psi_{k_1}(\mathbf{r}_2) \otimes \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (15.6)$$

Энергия атома гелия в нулевом порядке теории возмущения вычисляется как среднее от невозмущенного гамильтониана по волновым функциям (15.4) и (15.5). Поскольку гамильтониан является тождественным

оператором по спиновым переменным, его среднее значение по спиновым волновым функциям равно единице. Среднее по координатным волновым функциям при  $k_1 \neq k_2$  записывается в виде

$$\begin{aligned} E_{S=1,0}^{(0)} &= \frac{1}{2} \int d^3r_1 d^3r_2 [\psi_{k_1}(\mathbf{r}_1)\psi_{k_2}(\mathbf{r}_2) \mp \psi_{k_1}(\mathbf{r}_2)\psi_{k_1}(\mathbf{r}_2)]^* \times \\ &\times \left( -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_1^2 - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_2^2 - \frac{2e^2}{r_2} \right) \times \\ &\times [\psi_{k_1}(\mathbf{r}_1)\psi_{k_2}(\mathbf{r}_2) \mp \psi_{k_1}(\mathbf{r}_2)\psi_{k_1}(\mathbf{r}_2)]. \end{aligned}$$

Поскольку имеют место равенства

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 - \frac{2e^2}{r_i} \right) \psi_{k_i}(\mathbf{r}_i) = -\frac{m_e(2e^2)^2}{2\hbar^2 n_i^2} \psi_{k_i}(\mathbf{r}_i),$$

где  $i = 1, 2$ , то с учетом ортонормированности волновых функций  $\psi_{k_i}$  получаем, что

$$E_{S=1,0}^{(0)} = -\frac{m_e(2e^2)^2}{2\hbar^2} \left( \frac{1}{n_1^2} + \frac{1}{n_2^2} \right).$$

В нулевом приближении триплетное и синглетное состояния вырождены. Для волновой функции (15.6) энергия нулевого приближения равна

$$E_{S=0}^{(0)} = -\frac{m_e(2e^2)^2}{2\hbar^2} \frac{2}{n_1^2}.$$

Поправка первого порядка к невозмущенным уровням с  $S = 1$  и  $S = 0$  вычисляется следующим образом:

$$\begin{aligned} E_{S=1,0}^{(1)} &= \frac{e^2}{2} \int \frac{d^3r_1 d^3r_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} |\psi_{k_1}(\mathbf{r}_1)\psi_{k_2}(\mathbf{r}_2) \mp \psi_{k_1}(\mathbf{r}_2)\psi_{k_1}(\mathbf{r}_2)|^2 = \\ &= e^2 \int \frac{d^3r_1 d^3r_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} [|\psi_{k_1}(\mathbf{r}_1)|^2 |\psi_{k_2}(\mathbf{r}_2)|^2 \mp \\ &\mp \text{Re} [\psi_{k_1}^*(\mathbf{r}_1)\psi_{k_2}(\mathbf{r}_1)\psi_{k_2}^*(\mathbf{r}_2)\psi_{k_1}(\mathbf{r}_2)]] \equiv E_C \mp J. \end{aligned} \quad (15.7)$$

Видно, что вклад  $E_C$  есть просто кулоновская энергия отталкивания двух распределенных в пространстве плотностей заряда  $-e|\psi_{k_i}|^2$ . Этот носит название *прямого кулоновского взаимодействия*. По порядку величины он оценивается как  $E_C \sim Ry \sim 10$  эВ. Слагаемое же

$$J = e^2 \text{Re} \int \frac{d^3r_1 d^3r_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \psi_{k_1}^*(\mathbf{r}_1)\psi_{k_2}(\mathbf{r}_1)\psi_{k_2}^*(\mathbf{r}_2)\psi_{k_1}(\mathbf{r}_2) \quad (15.8)$$



носит название *обменного кулоновского взаимодействия*. Оно имеет сугубо квантовую природу, поскольку вызвано требованием правильной квантовомеханической симметрии волновой функции двух электронов. По порядку величины он оценивается как

$$J \sim \text{Ry} \times \xi, \quad (15.9)$$

где множитель  $\xi = 1/10 - 1/100$  может возникать за счет слабого перекрытия волновых функций состояний  $k_{1,2}$  в разных пространственных точках. Если использовать Фурье-представление кулоновского потенциала

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left( \frac{4\pi}{\mathbf{k}^2} \right) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}, \quad (15.10)$$

то обменное кулоновское взаимодействие можно переписать в виде

$$J = 4\pi e^2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3 \mathbf{k}^2} \left| \int e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \psi_{k_1}^*(\mathbf{r}) \psi_{k_2}(\mathbf{r}) \right|^2. \quad (15.11)$$

Отсюда видно, что  $J > 0$ , поэтому триплетное состояние атома гелия имеет меньшую энергию чем синглетное. Физическая причина этого состоит в том, что в триплетном состоянии координатная волновая функции антисимметрична, поэтому электроны имеют тенденцию находиться дальше друг от друга, что приводит к уменьшению среднего значения потенциальной энергии отталкивания.

Из (15.7) видно, что несмотря на независимость кулоновского взаимодействия от спинов энергии состояний с разным полным спином в гелии оказались различны. Этот результат можно переформулировать в терминах оператора эффективного взаимодействия  $\hat{V}_{\text{exch}}$ , явно зависящего от спиновых операторов двух электронов. Будем искать его в виде  $\hat{V}_{\text{exch}} = a + b(\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2)$ . Это выражение является единственным. Действительно, введем оператор полного спина двух электронов  $\hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{s}}_1 + \hat{\mathbf{s}}_2$  и возведем его в квадрат:

$$\hat{\mathbf{S}}^2 = \hat{\mathbf{s}}_1^2 + \hat{\mathbf{s}}_2^2 + 2(\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2).$$

Поскольку в любом операторном равенстве неявно подразумевается его действие на волновые функции с определенным спином, квадраты спиновых операторов можно сразу же заменить на их собственные значения. Отсюда получим, что

$$(\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2) = \frac{1}{2}S(S+1) - \frac{3}{4},$$

поэтому

$$\hat{V}_{\text{exch}}|S, S_z\rangle = \left\{ a + \frac{b}{2} \left[ S(S+1) - \frac{3}{2} \right] \right\} |S, S_z\rangle \equiv E_{S=1,0}^{(1)} |S, S_z\rangle.$$

Из этого выражения находим

$$\begin{aligned} a &= E_C - \frac{J}{2}, \\ b &= -2J, \end{aligned}$$

поэтому эффективное спин-спиновое взаимодействие, возникающее благодаря квантово-механическому требованию антисимметризации волновой функции тождественных фермионов, которое называется *обменным взаимодействием*, можно представить в виде оператора

$$\hat{V}_{\text{exch}} = E_C - \frac{J}{2} - 2J(\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2) \quad (15.12)$$

Обменное взаимодействие отвечает за возникновение *ферромагнетизма*, то есть явления, при котором появляется спонтанная намагниченность как, например, у обычных магнитов, используемых, в частности, в быту. Поскольку со спином связан магнитный момент, то выстраивание спинов в одном направлении и означает появление спонтанной намагниченности. Впервые идею о роли обменного взаимодействия в возникновении ферромагнетизма обосновал В. Гейзенберг в начале 30-х годов XX-го столетия. Он обобщил выражение (15.12) на случай многих электронов. Если отсчитывать энергию от не зависящего от спинов слагаемого  $E_C - \frac{J}{2}$ , то предложенный Гейзенбергом гамильтониан можно условно представить в виде

$$\hat{V}_{\text{exch}} = -2J \sum_i (\hat{\mathbf{s}}_i \cdot \hat{\mathbf{s}}_{i+1}). \quad (15.13)$$

Условность состоит в том, что индекс  $i$  нумерует оператор спина  $i$ -го электрона, тогда как  $i+1$  обозначает соседний электрон. Взаимодействием с электронами, находящимися на расстоянии, превышающем расстояние до ближайшего соседа, можно пренебречь ввиду экспоненциального падения величины обменного взаимодействия  $J$  от расстояния между электронами. Если  $J > 0$  то энергия системы электронов понижается при параллельной ориентации спинов, что приводит к появлению спонтанной

намагниченности. Но если образец находится при температуре, отличной от нуля, то тепловые флуктуации ориентации соседних спинов должны приводить к разрушению упорядоченного состояния с параллельной ориентацией. Если тепловая энергия  $E_{\text{th}} \sim k_B T$ , где  $k_B = 1,38 \times 10^{-16}$  эрг/Град есть постоянная Больцмана, превысит характерную энергию выстраивания спинов, обязанную обменному взаимодействию (15.9), то упорядоченное ферромагнитное состояние исчезнет. Такое исчезновение наблюдается экспериментально, а соответствующая температура  $T_C$  называется *температурой Кюри*. При  $\xi \sim 10^{-2}$  оценка дает

$$T_C \sim \xi R y / k_B \sim 10^{-2} \times 10^{-11} / 10^{-16} \sim 10^3 \text{ К.}$$

Для сравнения, температура Кюри для железа равна 1043 К; такой же порядок величины  $T_C$  обнаруживают кобальт и никель.

## 15.3 Таблица Менделеева

Даже такая простая система как атом гелия или гелие-подобных ионов, составленная из двух взаимодействующих электронов, находящихся в электростатическом поле атомного ядра, не допускает точного решения. Чего уж говорить о более тяжелых химических элементах с многими десятками электронов! Тем не менее, квантовая механика позволяет на качественном уровне понять свойство периодичности химических свойств элементов в таблице Менделеева. В основе такого понимания лежит идея *самосогласованного поля*. Проиллюстрируем ее, пренебрегая эффектами тождественности электронов, рассмотренными в предыдущем разделе на примере двухэлектронного атома. Для этого представим гамильтониан (15.3) в виде суммы гамильтонианов индивидуальных электронов, взаимодействующих только с ядром, и потенциальной энергией кулоновского отталкивания электронов:

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \frac{e^2}{r_{12}}.$$

Здесь

$$\begin{aligned}\hat{H}_1 &= -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_1^2 - \frac{2e^2}{r_1}, \\ \hat{H}_2 &= -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_2^2 - \frac{2e^2}{r_2}, \\ r_{1,2} &= |\mathbf{r}_{1,2}|, \\ r_{12} &= |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|.\end{aligned}$$

В духе вариационного метода будем искать минимум энергии системы двух этой системы на классе двухэлектронных волновых функций в виде произведения одноэлектронных волновых функций,  $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2)$ , при двух дополнительных условиях  $\int \psi_a^*(\mathbf{r}_a)\psi_a(\mathbf{r}_a)d^3r_a = 1$ ,  $a = 1, 2$ . Задача на условный экстремум некоторого функционала сводится к задаче на безусловный экстремум модифицированного функционала с помощью введения множителей Лагранжа  $E_1$  и  $E_2$ . В нашем случае его роль играет выражение

$$\begin{aligned}\tilde{E} &= \int d^3r_1 d^3r_2 \psi_1^*(\mathbf{r}_1)\psi_2^*(\mathbf{r}_2) \left( \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \frac{e^2}{r_{12}} \right) \psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2) - \\ &- E_1 \int \psi_1^*(\mathbf{r}_1)\psi_1(\mathbf{r}_1)d^3r_1 - E_2 \int \psi_2^*(\mathbf{r}_2)\psi_2(\mathbf{r}_2)d^3r_2.\end{aligned}\quad (15.14)$$

Для нахождения экстремума функционала надо взять его вариационную производную по правилу, приведенному в сноске 1 и приравнять ее нулю. Так как волновые функции в принципе комплексны, можно варьировать независимо либо саму функцию, либо ее комплексное сопряжение. Варьируя (15.14) по  $\psi_1^*(\mathbf{r}_1)$  и приравнявая результат нулю, получаем

$$\frac{\delta \tilde{E}}{\delta \psi_1^*(\mathbf{r}_1)} = \left[ \hat{H}_1 + e^2 \int d^3r_2 \frac{|\psi_2(\mathbf{r}_2)|^2}{r_{12}} \right] \psi_1(\mathbf{r}_1) - E_1 \psi_1(\mathbf{r}_1) = 0. \quad (15.15)$$

Варьируя по  $\psi_2^*(\mathbf{r}_2)$ , получим

$$\frac{\delta \tilde{E}}{\delta \psi_2^*(\mathbf{r}_2)} = \left[ \hat{H}_2 + e^2 \int d^3r_1 \frac{|\psi_1(\mathbf{r}_1)|^2}{r_{12}} \right] \psi_2(\mathbf{r}_2) - E_2 \psi_2(\mathbf{r}_2) = 0. \quad (15.16)$$

Уравнение (15.15) можно интерпретировать как стационарное уравнение Шредингера для электрона в поле с потенциальной энергией

$$U_{\text{eff}}(\mathbf{r}_1) = -\frac{2e^2}{r_1} + e^2 \int d^3r_2 \frac{|\psi_2(\mathbf{r}_2)|^2}{r_{12}}. \quad (15.17)$$

(Аналогично для второго электрона). Она является суперпозицией энергии кулоновского притяжения к ядру и кулоновского отталкивания от распределенной электронной плотности  $|\psi_2(\mathbf{r}_2)|^2$ , создаваемой вторым электроном. Эта энергия отталкивания в свою очередь определяется волновой функцией второго электрона, которую надо находить из решения уравнения (15.16). На практике применяется итерационная процедура, согласно которой находится  $\psi_1$  исходя из разумно выбранной  $\psi_2$ , а затем  $\psi_2$  подправляется с помощью решения уравнения (15.16).

Поле с потенциальной энергией (15.17), определяемой состоянием другого электрона, называется *самомогласованным полем*. Предполагается, что оно является центрально-симметричным. В некоторых случаях центральную симметрию можно доказать. Понятие самосогласованного поля обобщается и на случай  $Z > 2$  электронов, только надо подставить потенциальную энергию притяжения данного электрона к ядру в виде  $-Ze^2/r_1$ , а вместо второго слагаемого следует взять сумму вкладов от остальных  $Z - 1$  электронов.

Центральная симметрия самосогласованного поля означает, что орбитальный момент индивидуального электрона  $l$  сохраняется. Это позволяет использовать  $l$  как квантовое число, характеризующее состояние. По аналогии со схемой уровней в атоме водорода можно использовать и главное квантовое число  $n = n_r + l + 1$ , где  $n_r$  есть число узлов радиальной волновой функции. Состояние индивидуального электрона характеризуется заданием двух квантовых чисел  $n$  и  $l$ . При этом вместо  $l$  по историческим причинам указывается соответствующая буква:  $s, p, d, f, g, h, \dots$  обозначают соответственно  $l = 0, 1, 2, 3, 4, 5, \dots$ . Число электронов в состоянии с заданными  $n$  и  $l$  указывается справа и сверху. Например,  $2d^3$  означает три электрона в состоянии  $n = 2, l = 2$ . Совокупность состояний с заданными  $(n, l)$  называется *оболочкой*. «Вместимость» оболочки, т.е. максимальное число электронов, которое на ней можно разместить, в силу принципа запрета Паули равна  $2(2l + 1)$ . Действительно, число состояний с разными значениями проекции орбитального момента равно  $2l + 1$ , и это число нужно удвоить из-за двух проекций спина электрона. Если число электронов на оболочке равно  $2(2l + 1)$ , оболочка называется *заполненной*. Значение полного орбитального момента и полного спина заполненной оболочки равны нулю.

Схема уровней энергии электрона в самосогласованном поле, вычисленная в рамках указанной процедуры, показана на рис. 15.2. Видно, что кулоновское вырождение уровней по орбитальному моменту при за-

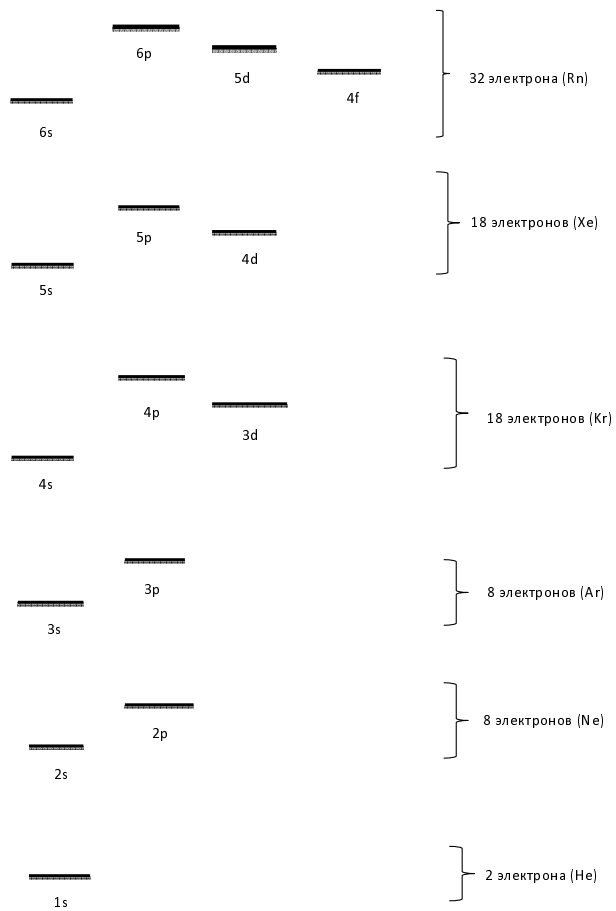


Рис. 15.2: Уровни энергии в самосогласованном поле

данном главном квантовом числе теперь не имеет места. Заполнение этих уровней происходит в соответствии с принципом Паули: на данном уровне не может находиться более одного электрона. Если ограничиться элементами таблицы Менделеева с номерами  $Z \leq 36$ , то заполнение происходит регулярно. Например, хлор является химическим элементом с  $Z = 17$ . Глядя на схему уровней на рис. 15.2, 17 электронов «рассаживаем» так, что на уровне  $1s$  находится 2 электрона, столько же находится на уровне  $2s$ . На уровне  $2p$  шесть электронов, на уровне  $3s$  два электрона, наконец, на уровне  $3p$  расположены остающиеся пять электронов. Это расположение записывается в виде *электронной конфигурации химического элемента*  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$ . Но даже для элементов с  $Z \leq 36$  есть два исключения из регулярного заполнения. Это хром с  $Z = 24$  с конфигурацией  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s$  вместо  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^4 4s^2$  и медь с  $Z = 29$  с конфигурацией

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s$$

вместо  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^9 4s^2$ . Эти особенности имеют качественное объяснение.  $4s$ -электроны имеют волновую функцию, которой отвечает относительно большая вероятность нахождения на ядре, что приводит к более низкой энергии за счет притяжения к ядру. Но эти  $s$ -электроны находятся относительно близко друг к другу, из-за чего энергия системы повышается в силу кулоновского отталкивания. А поскольку  $3d$ -уровень лежит лишь немного выше  $4s$ -уровня, одному из  $4s$ -электронов энергетически выгодно перейти на  $3d$ -уровень и понизить энергию кулоновского отталкивания. Аналогичные нерегулярности встречаются и при  $Z > 36$ , и предсказать их заранее невозможно. Поэтому лучше иметь под руками таблицу электронных конфигураций химических элементов.

## 15.4 Правила Хунда

При заданной электронной конфигурации атома у него имеется много состояний с разной энергией, поскольку спины и орбитальные моменты отдельных электронов могут по-разному складываться по правилам сложения моментов в полный спин  $S$  и соответственно орбитальный момент  $L$  электронной оболочки. При данных  $S$  и  $L$  полный момент  $J$  принимает значения от  $L + S$  до  $|L - S|$ . Набор квантовых чисел  $L$ ,  $S$  и  $J$

задает *атомный терм* элемента таблицы Менделеева. Принято обозначать терм в виде записи  $^{2S+1}L_J$ , где число спиновых состояний  $2S + 1$  называется *мультиплетностью терма*, а вместо квантового числа орбитального момента  $L$  приводится его спектроскопическое обозначение по уже упоминавшемуся правилу  $L = 0$  -  $S$ -состояние,  $L = 1$  -  $P$ -состояние и т.д. Например, запись  $^3P_2$  означает терм со спином  $S = 1$ , орбитальным моментом  $L = 1$  и полным моментом  $J = 2$ .

Возникает задача определения терма с наинизшей энергией. Он называется *нормальным термом*. Для его нахождения нужно принять в расчет, что в полностью заполненных оболочках полный спин и полный орбитальный момент равны нулю. Поэтому нужно рассматривать только электроны над заполненными оболочками. Нормальный терм для таких электронов определяется на основе эмпирически найденных *правил Хунда*.

- (Первое правило Хунда). Наинизшей энергией обладает терм с наибольшим спином. Качественное обоснование правила состоит в том, что в состоянии с максимальным электронным спином спиновая волновая функция четна относительно перестановки спиновых переменных любой пары электронов. В соответствии с принципом Паули координатная волновая функция должны быть нечетной. Для такой функции электроны имеют тенденцию находиться дальше друг от друга, что приводит к уменьшению энергии кулоновского отталкивания и к понижению полной энергии.
- (Второе правило Хунда). Наинизшей энергией обладает терм с наибольшим, при данном спине, орбитальным моментом. Качественно это можно понять, если учесть, что при больших орбитальных моментах пространственные распределения электронных плотностей отдельных электронов резко анизотропны. Перекрытие волновых функций мало, что опять-таки приводит к уменьшению энергии кулоновского отталкивания электронов и к понижению полной энергии электронной оболочки.
- (Третье правило Хунда). При данном спине  $S$  и орбитальном моменте  $L$  электронной оболочки наименьшей энергией обладает терм с  $J = |L - S|$ , если оболочка заполнена менее чем на половину, и терм с  $J = L + S$ , если оболочка заполнена более чем на половину. Если оболочка заполнена ровно наполовину, то  $L = 0$ ,  $J = S$ . Для



обоснования третьего правила требуется учесть слабые релятивистские эффекты, которые будут обсуждаться в следующем разделе.

## 15.5 Спин-орбитальное взаимодействие

Для задач физики твердого тела необходимо, в частности, предсказывать магнитные свойства химических элементов. Между тем одна лишь картина уровней энергии в кулоновском поле многоэлектронных атомов, представленная на рис. 15.2, для этой цели недостаточна. Необходимо принять в расчет поправки к кулоновскому взаимодействию, возникающие за счет релятивистских эффектов. Строгое рассмотрение этих эффектов, возможное лишь с использованием релятивистского уравнения Дирака, выходит за рамки данного курса. Однако можно установить вид релятивистских поправок, исходя из качественных соображений без обращения к уравнению Дирака.

Для этого обратимся к боровской планетарной модели атома, согласно которой электроны движутся вокруг атомного ядра по круговым орбитам как планеты вокруг Солнца. В лабораторной системе отсчета имеется лишь статическое кулоновское электрическое поле

$$\mathbf{E} = -\nabla\varphi = -\frac{1}{e}\nabla U(r) = -\frac{\mathbf{r}}{er} \frac{dU}{dr},$$

где  $e$  есть заряд электрона, а  $U(r)$  - потенциальная энергия самосогласованного поля атома. В системе покоя электрона ядро движется, поэтому возникает магнитное поле с напряженностью

$$\mathbf{B}' = \frac{1}{c}[\mathbf{E} \times \mathbf{v}],$$

где  $\mathbf{v}$  - скорость электрона. Электрон с магнитным моментом  $\mu \approx \mu_B$  взаимодействует с этим магнитным полем, что приводит в системе покоя электрона к появлению добавки к гамильтониану:

$$\hat{V}'_{ls} = -\mu_e \boldsymbol{\sigma} \mathbf{B}' \approx \frac{\hbar^2}{m_e^2 c^2 r} \frac{dU}{dr} (\mathbf{s} \cdot \mathbf{l}), \quad (15.18)$$

где  $\mathbf{l} = m_e [\mathbf{r} \times \mathbf{v}] / \hbar$ ,  $\mathbf{s} = \boldsymbol{\sigma} / 2$ ,  $\mu_e \approx -\mu_B$ , а множители порядка единицы

при таких оценках по порядку величины можно опускать <sup>2</sup>. Поскольку потенциальная энергия электрона в самосогласованном поле отрицательна и спадает с ростом  $r$ , то  $dU/dr > 0$ . При обратном преобразовании энергии в лабораторную систему с точностью до членов 1-го порядка по  $v/c$  справедливо равенство  $\hat{V}_{\text{ls}} = \hat{V}'_{\text{ls}}$ . Взаимодействие (15.18) называется *спин-орбитальным взаимодействием*, или, для краткости, *ls-взаимодействием*. Оценка по порядку величины получится, если взять  $r \sim \hbar^2/m_e Z e^2$ . Тогда

$$V_{\text{ls}} \sim \frac{Z^4}{a_B^3} \left( \frac{e\hbar}{m_e c} \right)^2.$$

По отношению к главному кулоновскому взаимодействию  $E_{\text{Coulomb}} \sim Z^2 m_e e^4 / \hbar^2$  это составит

$$\frac{V_{\text{ls}}}{E_{\text{Coulomb}}} \sim (Z\alpha)^2,$$

где фундаментальная физическая постоянная

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137} \quad (15.19)$$

носит название *постоянной тонкой структуры*. Из оценки видно, что спин-орбитальное взаимодействие становится существенным в тяжелых атомах. В легких атомах с  $Z \sim 10$  его можно считать малой поправкой.

Для многоэлектронных атомов нужно взять сумму от (15.18) по всем электронам незаполненной оболочки:

$$\hat{V}_{\text{ls}} = \frac{\hbar^2}{m_e^2 c^2} \sum_a \frac{dU(r_a)}{r_a dr_a} (\mathbf{s}_a \cdot \mathbf{l}_a). \quad (15.20)$$

Учтено, что спин-орбитальное взаимодействие заполненной оболочки равно нулю. При вычислении вклада от спин-орбитального взаимодействия (15.20) в первом порядке теории возмущений вначале проводится усреднение по радиальной координате электронов с использованием радиальной волновой функции  $R_{n_a, l_a}(r_a)$  в самосогласованном поле. В результате

---

<sup>2</sup>Буквальное следование модели спина электрона как волчка привело Томаса к анализу движения электрона в неинерциальной системе отсчета. В результате было установлено, что выражение (15.18) должно включать множитель  $1/2$ , называемый *томасовской половинкой*. На самом деле этот множитель строго выводится из релятивистского уравнения Дирака, описывающего электрон и его взаимодействие с электромагнитным полем.

получится оператор, который выражается только через операторы орбитального момента и спина:

$$\hat{V}_{ls} = \sum_a \beta(n_a, l_a) (\hat{\mathbf{s}}_a \cdot \hat{\mathbf{l}}_a), \quad (15.21)$$

где

$$\beta(n_a, l_a) = \frac{\hbar^2}{m_e^2 c^2} \int_0^\infty dr_a r_a R_{n_a, l_a}^2(r_a) \frac{dU(r_a)}{dr_a} > 0.$$

Хотя было проведено усреднение по радиальным координатам, для полученного в результате оператора использовано то же обозначение, что и для исходного. На следующем этапе надо усреднить полученный оператор по состояниям незаполненной оболочки. Коммутаторы операторов орбитального  $\hat{\mathbf{l}}_a$  и спина  $\hat{\mathbf{s}}_a$  с операторами полного орбитального момента  $\hat{\mathbf{L}} = \sum_a \hat{\mathbf{l}}_a$  и спина  $\hat{\mathbf{S}} = \sum_a \hat{\mathbf{s}}_a$  соответственно равны  $[\hat{L}_i, \hat{l}_{aj}] = i\epsilon_{ijk} \hat{l}_{ak}$  и  $[\hat{S}_i, \hat{s}_{aj}] = i\epsilon_{ijk} \hat{s}_{ak}$ . По математической структуре они имеют вид коммутаторов векторного оператора с моментом импульса. Следовательно, можно применить теорему Вигнера – Эккарта в форме (12.34) и записать  $\hat{\mathbf{l}}_a = \gamma_a \hat{\mathbf{L}}$ ,  $\hat{\mathbf{s}}_a = \delta_a \hat{\mathbf{S}}$ . Отсюда

$$(\hat{\mathbf{s}}_a \cdot \hat{\mathbf{l}}_a) = \gamma_a \delta_a (\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}).$$

В результате операторный вид спин-орбитального взаимодействия в атоме можно записать в общепринятой форме

$$\hat{V}_{LS} = A_{LS} (\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}), \quad (15.22)$$

$A_{LS} = \sum_a \beta(n_a, l_a) \gamma_a \delta_a$ . Для вычисления диагонального матричного элемента от (15.22) возведем в квадрат операторное равенство  $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$  и выразим из него скалярное произведение

$$(\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}) = \frac{1}{2} (\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{S}}^2).$$

При взятии диагонального матричного элемента по состоянию с вектором  $|J, M_J, L, S\rangle$  квадраты операторов заменяются их собственными значениями. Выражение для поправки у уровням энергии за счет спин-орбитального взаимодействия примет вид:

$$\Delta E_{LS} = \frac{A_{LS}}{2} [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)]. \quad (15.23)$$

При заданных  $L$  и  $S$  возможные  $J$  пробегают значения от  $L+S$  до  $|L-S|$ . Им отвечают подуровни *тонкой структуры*.

Теперь можно обосновать третье правило Хунда. Если электронная оболочка заполнена менее чем наполовину, то по первому правилу Хунда спин  $n$  находящихся на ней электронов равен  $S = n/2$ . Тогда  $\hat{s}_a = \hat{S}/n$  и

$$\hat{V}_{ls} = \frac{\hat{S}}{n} \sum_a \beta(n_a, l_a) \hat{l}_a.$$

Но для всех электронов в оболочке  $\beta(n_a, l_a) \equiv \beta$  одинаковы, поэтому

$$\hat{V}_{ls} = \frac{\beta}{2S} (\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}),$$

следовательно,  $A_{LS} = \beta/2S > 0$ . Наименьшую энергию имеет уровень с наименьшим  $J = |L - S|$ . Если оболочка заполнена больше чем наполовину, то сделаем тождественное преобразование, распространив суммирование по занятым электронами состояниям в (15.20) на незанятые состояния (дырки) и вычтя этот вклад:

$$\sum_{\text{электроны}} = \underbrace{\sum_{\text{электроны}} + \sum_{\text{дырки}}}_{\text{заполненная оболочка}} - \sum_{\text{дырки}} = - \sum_{\text{дырки}}.$$

Сумма по состояниям заполненной оболочки равна нулю, а вычтенный вклад по незанятым (*дырочным*) состояниям отвечает  $-A_{LS} < 0$ . Поэтому наименьшей энергией обладает терм с  $J = L + S$ .

## 15.6 Эффект Зеемана

Уровни энергии атома, помещенного в магнитное поле, расщепляются на систему магнитных подуровней. Этот эффект был экспериментально обнаружен Зееманом и носит его имя. Для объяснения эффекта найдем вид гамильтониана возмущения, вызванного внешним магнитным полем. В случае одного электрона эта добавка дается вторым и третьим членом гамильтониана Паули (12.14). Пренебрежем квадратичным по полю вкладом. Тогда искомая добавка получится суммированием по всем электронам:

$$\hat{V}_{\text{magn}} = \mu_B \mathbf{B} \cdot (\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}}) = \mu_B \mathbf{B} \cdot (\hat{\mathbf{J}} + \hat{\mathbf{S}}). \quad (15.24)$$

Магнитное поле будем считать настолько слабым, чтобы интервал между возможными магнитными подуровнями был много меньше интервала между уровнями тонкой структуры:

$$\mu_B B \ll A_{LS}.$$

Тогда  $\hat{V}_{\text{magn}}$  является возмущением к  $\hat{V}_{LS}$  (15.22). В нулевом порядке по  $\hat{V}_{\text{magn}}$ , но с учетом спин-орбитального взаимодействия, сохраняются операторы  $\hat{\mathbf{J}}$ ,  $\hat{\mathbf{L}}^2$  и  $\hat{\mathbf{S}}^2$  (см. задачу 4 к этой главе). Поправка к уровням энергии от  $\hat{V}_{\text{magn}}$  равна

$$\Delta E_{\text{magn}} = \mu_B \mathbf{B} \langle J, M_J, L, S | \hat{\mathbf{J}} + \hat{\mathbf{S}} | J, M_J, L, S \rangle, \quad (15.25)$$

где через  $M_J$  обозначено квантовое число проекции момента на ось  $z$ . Среднее значение оператора полного момента равно

$$\langle J, M_J, L, S | \hat{\mathbf{J}} | J, M_J, L, S \rangle = M_J \mathbf{e}_z,$$

где  $\mathbf{e}_z$  суть единичный вектор вдоль оси  $z$ . Для вычисления среднего значения оператора спина применим формулу усреднения векторного оператора (12.34):

$$\langle \hat{\mathbf{S}} \rangle = \beta_S \hat{\mathbf{J}}.$$

Умножив это равенство скалярно на  $\hat{\mathbf{J}}$  и взяв среднее значение по состоянию  $|J, M_J, L, S\rangle$ , находим коэффициент  $\beta_S$ :

$$\beta_S = \frac{\langle J, M_J, L, S | \hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{S}} | J, M_J, L, S \rangle}{\langle J, M_J, L, S | \hat{\mathbf{J}}^2 | J, M_J, L, S \rangle}.$$

Среднее значение скалярного произведения в числителе определяется из среднего значения операторного равенства  $\hat{\mathbf{L}}^2 = (\hat{\mathbf{J}} - \hat{\mathbf{S}})^2 = \hat{\mathbf{J}}^2 + \hat{\mathbf{S}}^2 - 2\hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{S}}$ , после чего находим

$$\beta_S = \frac{1}{2} + \frac{S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}.$$

Окончательное выражение для  $\Delta E_{\text{magn}}$  получится, если направить в (15.25) магнитное поле вдоль оси  $z$ :

$$\Delta E_{\text{magn}} = \mu_B B \left[ \frac{3}{2} + \frac{S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \right] M_J \equiv \mu_B B g M_J. \quad (15.26)$$

Множитель

$$g = \frac{3}{2} + \frac{S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \quad (15.27)$$

называется *фактором Ланде* или *g-фактором*. Из (15.26) следует, что каждый из уровней тонкой структуры в слабом магнитном поле расщепляется на зеемановские подуровни, характеризуемые квантовым числом  $-J \leq M_J \leq J$ , итого  $2J + 1$  подуровня.

## 15.7 Двухтомная молекула

Следующей по сложности квантовой системой после многоэлектронных атомов является двухатомная молекула. Примеры:  $H_2$ ,  $O_2$ ,  $NO$  и т.д. Потенциальная энергия такой системы не меняется при повороте вокруг оси, соединяющей атомы. Поэтому сохраняется проекция оператора полного орбитального момента электронов на эту ось. Будем предполагать, что эта проекция равна нулю. Двухатомные молекулы подразделяются на два класса - *гомоядерные*, т.е. молекулы из одинаковых атомов и *гетероядерные*, составленные из разных атомов. Если пренебречь слабыми спиновыми и магнитными эффектами, то гамильтониан двухатомной молекулы включает все парные кулоновские взаимодействия электронов с ядрами и друг с другом и кулоновское отталкивание ядер. Для определенности рассмотрим гетероядерную молекулу. Пусть  $\mathbf{r}_a$ ,  $\mathbf{R}_{1,2}$  обозначают соответственно радиус-векторы электронов и двух ядер. Для нахождения уровней энергии молекулы требуется решить уравнение Шредингера

$$\hat{H}\Psi(\{\mathbf{r}_a\}, \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) = E\Psi(\{\mathbf{r}_a\}, \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) \quad (15.28)$$

с гамильтонианом

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_a \nabla_a^2 + U_{\text{el}} - \\ & -\frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{\nabla_{\mathbf{R}_1}^2}{M_1} + \frac{\nabla_{\mathbf{R}_2}^2}{M_2} \right) + \frac{Z_1 Z_2 e^2}{|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|}, \end{aligned} \quad (15.29)$$

где

$$U_{\text{el}} \equiv U(\{\mathbf{r}_a\}, \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) = -e^2 \sum_a \left( \frac{Z_1}{|\mathbf{r}_a - \mathbf{R}_1|} + \frac{Z_2}{|\mathbf{r}_a - \mathbf{R}_2|} \right) + \\ + \sum_{a' < a} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_{a'}|}$$

отвечает за притяжение электронов к ядрам и их отталкивание друг от друга. Здесь  $\nabla_a$  и  $\nabla_{\mathbf{R}_{1,2}}$  означают градиенты по координатам электронов и ядер соответственно. Очевидно, что аналитическое решение выписанного уравнения невозможно. Однако возможен полуколичественный анализ в приближении *Борна - Оппенгеймера*. Приближение основано на малом параметре отношения массы электрона к массе молекулы  $m_e/M_{1,2} \sim 10^{-3} - 10^{-4} \ll 1$ . В нулевом порядке ядра считаются бесконечно тяжелыми и «решается»<sup>3</sup> уравнение Шредингера для электронов при фиксированных координатах ядер  $\mathbf{R}_{1,2}$ , которые входят как параметры:

$$E_n(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) \psi_{\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2}(\{\mathbf{r}_a\}) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_a \nabla_a^2 + U_{\text{el}} \right) \times \\ \times \psi_{\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2}(\{\mathbf{r}_a\}). \quad (15.30)$$

Электронные уровни энергии  $E_n(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2)$  при фиксированных координатах ядер называются *электронными термами молекулы*. По порядку величины они оцениваются как  $E_n \sim R_y \sim 10$  эВ, поскольку происходят от суммы кулоновских вкладов.

В первом порядке по оператору кинетической энергии ядер

$$\hat{K}_N = -\frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{\nabla_{\mathbf{R}_1}^2}{M_1} + \frac{\nabla_{\mathbf{R}_2}^2}{M_2} \right)$$

решение уравнения (15.28) ищется в виде

$$\Psi(\{\mathbf{r}_a\}, \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) = \psi_{\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2}(\{\mathbf{r}_a\}) \Phi(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2),$$

---

<sup>3</sup>Кавычки означают, что на самом деле более-менее аналитическое решение возможно лишь для самых простых систем вроде молекулярного иона водорода. На практике строят определенные модели для электронных термов, содержащие свободные параметры, определяемые исходя из соответствия экспериментальным данным.

где  $\Phi(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2)$  есть волновая функция ядер. Подстановка в (15.28) с учетом (15.30) приводит к уравнению

$$\left[ \hat{K}_N + \frac{Z_1 Z_2 e^2}{|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|} + E_n(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) - E \right] \psi_{\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2}(\{\mathbf{r}_a\}) \Phi(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) = 0.$$

Волновая функция  $\psi_{\text{el}} \equiv \psi_{\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2}(\{\mathbf{r}_a\})$ , как и любая волновая функция стационарного состояния, может быть выбрана вещественной. Умножим предыдущее уравнение слева на  $\psi_{\text{el}}$  и проинтегрируем по координатам электронов  $d\tau_a = \prod_a d^3 r_a$ , учитывая условие нормировки

$$\int \psi_{\text{el}}^2 d\tau_a = 1.$$

Интегрирование тривиально во всех слагаемых кроме содержащих оператор  $\hat{K}_N$ . Действительно, из-за параметрической зависимости  $\psi_{\text{el}}$  от  $\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2$  возникают слагаемые вида

$$(\nabla_{\mathbf{R}_{1,2}} \Phi) \int \psi_{\text{el}} (\nabla_{\mathbf{R}_{1,2}} \psi_{\text{el}}) d\tau_a = \frac{1}{2} (\nabla_{\mathbf{R}_{1,2}} \Phi) \nabla_{\mathbf{R}_{1,2}} \int \psi_{\text{el}}^2 d\tau_a = 0$$

и слагаемые вида  $\Phi \int \psi_{\text{el}} (\nabla_{\mathbf{R}_{1,2}}^2 \psi_{\text{el}}) d\tau_a$ . Обычно их добавляют к электронным термам  $E_n(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2)$ , тем самым переопределяя эти величины. В итоге получается уравнение Шредингера для волновой функции ядер

$$[\hat{K}_N + U_n(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2)] \Phi(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) = E \Phi(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2),$$

где  $U_n(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) = E_n(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) + Z_1 Z_2 e^2 / |\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|$ . Индекс  $n$  указывает, что вид потенциальной энергии ядер зависит от квантового состояния электронной подсистемы.

Если перейти в систему центра масс ядер, то в силу трансляционной инвариантности зависимость от координат ядер будет входить только через относительные координаты  $\mathbf{R} = \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2$ :  $U_n(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) \equiv U_n(\mathbf{R})$ . Оставив старое обозначение  $\Phi$  для волновой функции относительного движения, получим для нее уравнение

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 + U_n(\mathbf{R}) \right] \Phi(\mathbf{R}) = E \Phi(\mathbf{R}),$$

где

$$M = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}.$$



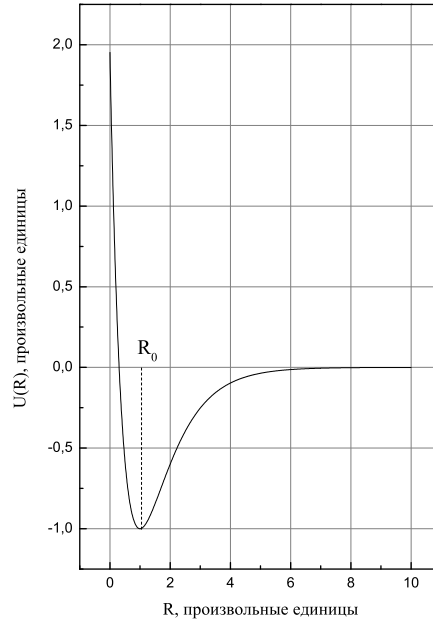


Рис. 15.3: Межатомный потенциал в двухатомной молекуле

Предполагая сферическую симметрию  $U(\mathbf{R})$ , можно, следуя изложенному в главе 9 методу, записать волновую функцию ядер в виде произведения радиальной и угловой волновых функций<sup>4</sup>

$$\Phi(\mathbf{R}) = \frac{F(R)}{R} Y_{K, M_K}(\vartheta, \varphi)$$

и получить для функции  $F$  уравнение

$$\frac{d^2 F}{dR^2} + \frac{2M}{\hbar^2} \left[ E - U_n(R) - \frac{\hbar^2 K(K+1)}{2MR^2} \right] F = 0. \quad (15.31)$$

Типичный вид межатомного потенциала, который приводит к образованию двухатомной молекулы, показан на рис. 15.3. Он имеет минимум в точке  $R_0$ . Эффективный потенциал

$$U_{\text{eff}}(R) = U_n(R) + \frac{\hbar^2 K(K+1)}{2MR^2}$$

<sup>4</sup>По историческим причинам орбитальный момент двухатомной молекулы обозначают буквой  $K$  а не  $L$ .

можно разложить в ряд по малому отклонению  $\xi = R - R_0$ :

$$U_{\text{eff}}(R) \approx U_n(R_0) + \frac{\hbar^2 K(K+1)}{2MR_0^2} + \frac{1}{2}M\omega^2\xi^2,$$

где

$$\omega = \sqrt{\frac{U_n''(R_0)}{M}}. \quad (15.32)$$

Квадратичная зависимость от  $\xi$  указывает на осцилляторный характер движения ядер по радиальной координате. Энергия центробежного барьера была взята при  $R = R_0$ , поскольку далее станет понятно, что она является малой величиной по сравнению с энергией колебаний. Уравнение (15.31) в этом приближении приобретает вид уравнения Шредингера для осциллятора

$$\frac{d^2 F}{d\xi^2} + \frac{2M}{\hbar^2} \left[ E - U_n(R_0) - \frac{\hbar^2 K(K+1)}{2MR_0^2} - \frac{1}{2}M\omega^2\xi^2 \right] F = 0.$$

Следовательно, энергетический спектр двухатомной молекулы можно записать в виде

$$E = U_n(R_0) + \hbar\omega \left( v + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 K(K+1)}{2MR_0^2}, \quad (15.33)$$

где колебательное квантовое число  $v = 0, 1, \dots$ . Вращательное квантовое число  $K = 0, 1, 2, \dots$  (для гетероядерных молекул). Для гомоядерных молекул  $K$  либо только четное, либо только нечетное, в зависимости от того, каков спин ядер.

Оценим по порядку величины все три вклада в (15.33). Все межатомные расстояния в двухатомных молекулах

$$R_0 \sim a_B = \frac{\hbar^2}{m_e e^2},$$

а электронные термы порядка ридберга

$$U_n(R_0) \sim \frac{e^2}{R_0} \sim \frac{m_e e^4}{\hbar^2}.$$

Характерная энергия колебаний ядер оценивается с помощью (15.32) как

$$\hbar\omega \sim \left[ \frac{\hbar^2 U_n(R_0)}{MR_0^2} \right]^{1/2} \sim \sqrt{\left( \frac{\hbar^2}{m_e e^2} \right) \left( \frac{e^4}{R_0^3} \right) \left( \frac{m_e}{M} \right)} \sim U_n(R_0) \sqrt{\frac{m_e}{M}}.$$

Характерная энергия вращения ядер оценивается как

$$E_{\text{rot}} \sim \frac{\hbar^2}{MR_0^2} \sim \frac{\hbar^2}{m_e R_0^2} \left( \frac{m_e}{M} \right) \sim U_n(R_0) \frac{m_e}{M}.$$

Собирая эти три оценки, приходим к пропорции между энергией электронов  $E_{\text{el}}$ , энергией колебаний ядер  $E_{\text{vib}}$  и энергией вращения ядер  $E_{\text{rot}}$ :

$$E_{\text{el}} : E_{\text{vib}} : E_{\text{rot}} = 1 : \sqrt{\frac{m_e}{M}} : \frac{m_e}{M} \sim 1 : 10^{-2} : 10^{-4}. \quad (15.34)$$

Эта иерархия энергий окажется важной при рассмотрении вопроса о теплоемкости газов.

## 15.8 Задачи

1. Вычислить обменный интеграл (15.8) в случае  $n_1 = 1$  и  $n_2 = 2$ .
2. Выписать электронные конфигурации элементов таблицы Менделеева с  $Z \leq 36$ .
3. Найти нормальные термы элементов таблицы Менделеева с  $Z \leq 36$ .
4. Показать, что при учете спин-орбитального взаимодействия в форме (15.22) ни спин, ни орбитальный момент не сохраняются, однако сохраняющимися операторами являются полный момент  $\hat{\mathbf{J}}$ , квадрат орбитального момента  $\hat{\mathbf{L}}^2$  и квадрат оператора спина  $\hat{\mathbf{S}}^2$ .
5. Два тождественных фермиона со спином  $1/2$  находятся в одномерной потенциальной яме ширины  $a$  с бесконечными стенками. Взаимодействие между ними вначале отсутствует. Выписать полные (т.е. включающие спиновую и координатную часть) волновые функции системы, отвечающие четырём низшим энергетическим уровням. Вычислить в первом порядке теории возмущений поправки к найденным уровням энергии за счет возмущения вида  $\hat{V}(x_1, x_2) = g(\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2)\delta(x_1 - x_2)$ .

6. Применив правила Хунда, определить термы с наименьшей энергией элементов Sc, Ga, Ge, As, Se, Br, Rb, Zr, Tc и вычислить магнитные моменты этих термов. То же самое сделать для  $(+++)$ -ионов редкоземельных элементов, которые характеризуются последовательным заполнением  $f$ -оболочки.

## Глава 16

# Возмущения, зависящие от времени

Стационарные квантовые состояния играют важнейшую роль в квантовой механике. Существование наинизшего из них по энергии отвечает за стабильность вещества в природе. Но не будь переходов между стационарными состояниями, их нельзя бы было детектировать. Переходы между этими состояниями вызываются, в частности, действием переменных во времени полей. Да и спонтанные квантовые переходы вроде испускания света атомом фактически сводятся к действию переменных полей. Поэтому на очереди стоит задача рассмотрения возмущений, зависящих от времени.

### 16.1 Теория возмущений, зависящих от времени

Пусть зависимость от времени входит в гамильтониан  $\hat{H}$  в виде явно зависящего от времени *оператора возмущения*  $\hat{V}$ :  $\hat{H}(\mathbf{r}, t) = \hat{H}_0 + \hat{V}(\mathbf{r}, t)$ . Требуется решить уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = [\hat{H}_0 + \hat{V}(\mathbf{r}, t)] \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (16.1)$$

Предполагается, что известны собственные функции и собственные зна-

чения энергии *невозмущенного* гамильтониана  $\hat{H}_0$ :

$$\hat{H}_0\psi_n(\mathbf{r}) = E_n\psi_n(\mathbf{r}).$$

Пусть для определенности спектр дискретный, условие нормировки:

$$\int \psi_{n'}^*(\mathbf{r})\psi_n(\mathbf{r})d^3r = \delta_{n'n}.$$

Требуется найти изменение волновой функции некоторого уровня  $n_0$ . Решение уравнения (16.1) ищется методом вариации произвольных постоянных общего решения уравнения Шредингера (4.2).

$$\Psi_{n_0}(\mathbf{r}, t) = \sum_n \psi_n(\mathbf{r})c_{nn_0}(t)e^{-iE_nt/\hbar}.$$

Согласно одному из основных принципов квантовой механики  $|c_{nn_0}(t)|^2$  суть вероятность обнаружить систему в состоянии  $n$  в момент времени  $t$ , если до воздействия возмущения она пребывала в состоянии  $n_0$ . Поэтому  $c_{nn_0}(t)$  иногда называют *амплитудой вероятности перехода*. Подставим приведенное выше разложение в (4.2), умножим слева на  $\psi_m^*(\mathbf{r})$  и проинтегрируем по объему. Получим, с учетом условия ортонормированности, обыкновенное дифференциальное уравнение для амплитуды вероятности:

$$i\hbar \frac{dc_{mn_0}(t)}{dt} = \sum_n V_{mn}(t)c_{nn_0}(t)e^{-i(E_n-E_m)t/\hbar}, \quad (16.2)$$

где

$$V_{mn}(t) = \int \psi_m^*(\mathbf{r})\hat{V}(\mathbf{r}, t)\psi_n(\mathbf{r})$$

есть матричные элементы оператора возмущения. Далее для краткости аргумент  $\mathbf{r}$  у оператора возмущения не выписывается. Если возмущения нет, то в нулевом порядке имеем  $c_{nn_0}^{(0)}(t) = \delta_{nn_0}$ . Считая возмущение малым (критерий малости будет сформулирован ниже) из (16.2) находим поправку первого порядка

$$c_{mn_0}^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^t V_{mn_0}(t)e^{i(E_m-E_{n_0})t/\hbar}dt. \quad (16.3)$$

Начальный момент времени  $t_i$  соответствует началу действия возмущения. Вероятность перехода из состояния  $n_0$  в состояние  $m$  к моменту времени  $t$  равна

$$w_{mn_0}^{(1)}(t) = |c_{mn_0}^{(1)}(t)|^2. \quad (16.4)$$

Разберем несколько частных случаев применения (16.3) и (16.4). Т.к. уровень  $n_0$  ничем не выделен, заменим  $n_0 \rightarrow n$ .

## 16.2 Адиабатические возмущения

К адиабатическим относятся возмущения, нарастающие с нуля в далеком прошлом, достигающие максимума и затем затухающие до нуля в далеком будущем, с характерным временем изменения  $\tau$ . Вероятность перехода дается формулой

$$w_{mn} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} V_{mn}(t) e^{i\omega_{mn}t} dt \right|^2,$$

где

$$\omega_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar}$$

называется *частотой перехода*. Критерием применимости теории возмущений является условие

$$|c_{mn}^{(1)}| \ll |c_{mn}^{(0)}| = 1,$$

откуда

$$\frac{V\tau}{\hbar} \ll 1, \quad (16.5)$$

где через  $V$  обозначена характерная величина возмущения, а через  $\tau$  его длительность.

Если возмущение выходит на константу при  $t \rightarrow \infty$ , то для вычисления вероятности перехода следует совершить в (16.3) интегрирование по частям

$$c_{mn}^{(1)} = -\lim_{t_f \rightarrow \infty} \frac{V_{mn}(t_f)}{E_m - E_n} e^{i\omega_{mn}t_f} + \frac{1}{\hbar\omega_{mn}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial V_{mn}(t)}{\partial t} e^{i\omega_{mn}t} dt.$$

Первое слагаемое в этом выражении в точности соответствует поправке первого порядка стационарной теории возмущений под действием возмущения  $\hat{V}(t_f \rightarrow \infty)$ <sup>1</sup>, см. (11.12). Эта поправка не описывает переходов

---

<sup>1</sup>Экспоненциальный множитель здесь появился в силу того, что использованы волновые функции стационарных состояний с учетом их зависимости от времени  $e^{-iE_n t/\hbar}$ .

из одного состояния в другое, поэтому ее можно не учитывать. Переходам отвечает второй член выписанного выражения, поэтому вероятность перехода под действием возмущения, стремящегося к постоянному оператору  $\hat{V}(t_f \rightarrow \infty)$  дается выражением

$$w_{mn} = \frac{1}{\hbar^2 \omega_{mn}^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial V_{mn}(t)}{\partial t} e^{i\omega_{mn}t} dt \right|^2. \quad (16.6)$$

### 16.3 Внезапные возмущения

Если до момента времени  $t = 0$  возмущение отсутствует, а затем внезапно включается, то  $\hat{V}(t) = \hat{V}\theta(t)$ , где  $\theta(t)$  - ступенчатая функция Хэвисайда. Поскольку  $\partial\theta(t)/\partial t = \delta(t)$ , то из (16.6) находим

$$w_{mn} = \frac{|V_{mn}|^2}{\hbar^2 \omega_{mn}^2}. \quad (16.7)$$

Условием применимости этого выражения является  $w_{mn} \ll 1$ , что означает малость возмущения. Однако можно получить выражение для вероятности перехода под действием внезапного возмущения, не предполагая его малым. Эта возможность основана на том, что критерий применимости (16.5) выполняется при сколь угодно большом  $V$ , если  $\tau \rightarrow 0$ .

Пусть до момента времени  $t = 0$  система находилась в одном из собственных состояний  $\psi_i$  гамильтониана  $\hat{H}_i$ . При  $t = 0$  гамильтониан внезапно изменился и стал  $\hat{H}_f$ . Волновая функция начального состояния не успела измениться за исчезающе малый промежуток времени, но она теперь не является собственной функцией нового гамильтониана  $\hat{H}_f$ . Если разложить  $\psi_i$  по полной системе волновых функций нового гамильтониана,

$$\psi_i = \sum_f \psi_f c_{fi},$$

то согласно общим правилам квантовой механики величины

$$w_{fi} = |c_{fi}|^2 = \left| \int \psi_f^* \psi_i d^3r \right|^2 \quad (16.8)$$

будут равны вероятностям перехода из состояния  $i$  в состояние  $f$  при внезапном возмущении.



## 16.4 Периодические возмущения

Периодические возмущения представляется гамильтонианом

$$\hat{V}(t) = \hat{V}e^{-i\omega t} + \hat{V}^\dagger e^{i\omega t}.$$

Они играют решающую роль в теории испускания и поглощения света атомами. На самом деле такие возмущения являются идеализацией, поскольку в реальных системах они включаются в некоторый момент времени  $t = 0$  и выключаются при  $t = T \rightarrow \infty$ . Матричные элементы оператора возмущения,

$$V_{mn}(t) = V_{mn}e^{-i\omega t} + V_{nm}^*e^{i\omega t},$$

после подстановки в (16.3) с пределами интегрирования  $t_i = 0$  и  $t_f = T$  приводят к выражению

$$c_{mn}^{(1)} = -\frac{2i}{\hbar} \left\{ \frac{V_{mn}e^{i(\omega_{mn}-\omega)T/2}}{\omega_{mn}-\omega} \sin \frac{(\omega_{mn}-\omega)T}{2} + \frac{V_{nm}^*e^{i(\omega_{mn}+\omega)T/2}}{\omega_{mn}+\omega} \sin \frac{(\omega_{mn}+\omega)T}{2} \right\}. \quad (16.9)$$

Если  $\omega \neq \pm\omega_{mn}$ , то при  $T \rightarrow \infty$  синусы очень быстро осциллируют, в среднем давая нулевой вклад. Ненулевой вклад получится при  $\omega = \pm\omega_{mn}$ . Поскольку  $\omega > 0$ , то отсюда видно, что первое слагаемое в (16.9) доминирует при условии

$$E_m = E_n + \hbar\omega,$$

которое означает, что система в состоянии  $n$  поглотила квант энергии  $\hbar\omega$  и перешла в состояние  $m$ . Второе слагаемое будет главным при выполнении условия

$$E_m = E_n - \hbar\omega,$$

которое интерпретируется как условие испускания кванта энергии  $\hbar\omega$ . Отсюда понятно, что в (16.9) первое слагаемое «работает» в случае процессов поглощения энергии, тогда как процессы испускания энергии описываются вторым слагаемым.

Рассмотрим вначале процесс испускания, которому отвечает второй член в (16.9). Для того чтобы полученное выражение можно было использовать в дальнейшем, удобно сменить обозначения и назвать состояние  $n$  начальным состоянием  $i$ , а состояние  $m$  - конечным состоянием  $f$ . Оператор возмущения также удобно взять в виде  $\hat{V}$  вместо  $\hat{V}^\dagger$  в исходном выражении. Вероятность перехода с испусканием в новых обозначениях равна

$$w_{fi}(T) = \frac{4|V_{fi}|^2}{\hbar^2(\omega_{fi} + \omega)^2} \sin^2 \frac{(\omega_{fi} + \omega)T}{2}.$$

Для перехода к пределу  $T \rightarrow \infty$  используется одно из представлений  $\delta$ -функции:

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{\sin^2 \omega T}{\omega^2} = \pi T \delta(\omega),$$

которое проверяется интегрированием по  $\omega$  в бесконечных пределах с использованием интеграла

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2} dx = \pi.$$

С учетом этих результатов видно, что вероятность перехода растет линейно с ростом  $T$ . Поэтому вводят понятие *вероятности перехода в единицу времени, или скорости перехода*  $\dot{w}_{fi} = w_{fi}/T$ :

$$\dot{w}_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i + \hbar\omega). \quad (16.10)$$

Буквально эта формула применима, когда точно известны начальное и конечное состояние квантовой системы. Между тем типичным процессом с испусканием кванта энергии является излучение фотона атомом. Начальное и конечное состояние атомы заданы, но фотон может вылететь в любом направлении. Значит, конечные состояния образуют непрерывное множество. В таких случаях надо суммировать вероятность перехода по всем возможным конечным состояниям  $\sum_f \dot{w}_{fi}$ . Для вычисления таких сумм существует удобный прием, когда суммирование по квантовым состояниям сводится к интегрированию по энергии с помощью так называемой *плотности состояний*

$$\nu_f(E) = \sum_f \delta(E - E_f). \quad (16.11)$$

Действительно, в силу свойств  $\delta$ -функции для любой гладкой функции  $g(E)$  справедливо равенство

$$\sum_f g(E_f) = \int g(E) \nu_f(E) dE.$$

С помощью плотности состояний полную вероятность перехода в единицу времени можно записать как

$$\sum_f \dot{w}_{fi} = \int \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \delta(E - E_i + \hbar\omega) \nu_f(E) dE.$$

Отсюда дифференциальная вероятность перехода в интервал конечных состояний  $d\nu_f = \nu_f dE$  равна

$$d\dot{w}_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i + \hbar\omega) d\nu_f. \quad (16.12)$$

В этом выражении энергия конечного состояния  $E$  заменена на  $E_f$  для согласования с предыдущими обозначениями. Полная вероятность перехода в единицу времени равна

$$\dot{w}_{i \rightarrow \text{all}} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \nu_f(E_i - \hbar\omega).$$

Эта формула вместе с (16.12) называется *золотым правилом Ферми*.

Найдем  $d\nu_f$  в важном частном случае, когда в конечном состоянии присутствует свободная частица (электрон, фотон и т.д.). Пусть система помещена в ящик размерами  $V = L_x \times L_y \times L_z$  с волновой функцией  $\psi(x, y, z) = V^{-1/2} e^{i(p_x x + p_y y + p_z z)/\hbar}$  в виде бегущей волны. Конечные размеры учтем так, как это принято в физике твердого тела, с помощью периодических граничных условий<sup>2</sup>

$$\psi(x + L_x, y, z) = \psi(x, y + L_y, z) = \psi(x, y, z + L_z) = \psi(x, y, z). \quad (16.13)$$

Отсюда сразу следуют условия квантования компонент импульса

$$p_i = \frac{2\pi\hbar}{L_i} n_i,$$

---

<sup>2</sup>Этот выбор диктуется соображениями удобства. Граничные условия в виде  $\psi(L_x, y, z) = \psi(x, L_y, z) = \psi(x, y, L_z) = 0$  приводят к волновой функции в виде стоячей волны и не очень удобны при вычислении различных матричных элементов по сравнению с бегущей волной.

где  $n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ,  $i = x, y, z$ . Тогда сумма по конечным состояниям сводится к суммированию по  $n_x, n_y, n_z$ . Для макроскопически больших  $L_x, L_y, L_z$  суммирование можно заменить на интегрирование:

$$\sum_f = \sum_{n_x, n_y, n_z} \approx \int dn_x dn_y dn_z = V \int \frac{dp_x dp_y dp_z}{(2\pi\hbar)^3} \equiv V \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}.$$

Поскольку при вычислении вероятности перехода волновые функции обязательно входят квадратично, то  $|V_{fi}|^2 \propto V^{-1}$ , что сократит множитель  $V$  в сумме по состояниям. Поэтому обычно сразу полагают  $V = 1 \text{ см}^3$ . В результате дифференциальный элемент плотности конечных состояний в случае присутствия одной свободной частицы в конечном состоянии есть

$$d\nu_f = \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (16.14)$$

Первое слагаемое в (16.9) отвечает поглощению кванта энергии системой. Примером таких процессов являются возбуждение электрона в атоме с нижнего на верхний уровень, а также фотоэффект, когда квант света поглощается металлом, а в конечном состоянии возникает электрон. Повторяя предыдущее рассмотрение, можно прийти к формуле для вероятности поглощения в единицу времени вида (16.10). В случае возбуждения электрона в атоме опять-таки формула требует уточнения, поскольку поглощаемый фотон появился из реального источника излучения (лампы накаливания, лазера и т.д.), не являющегося абсолютно монохроматическим. Тогда полная вероятность поглощения в единицу времени получится интегрированием с весом, равным спектральному распределению  $g(\omega)$  источника фотонов:

$$\dot{w}_{\text{absorb}} = \frac{2\pi}{\hbar} \int g(\omega) |V_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) d\omega.$$

Золотое правило Ферми можно применить и для состояний непрерывного спектра в постоянном внешнем поле. В этом случае переходы имеют место между состояниями с разным импульсом частицы. Выше было показано, что такие состояния являются предельным случаем дискретных состояний в конечном объеме. Поэтому можно воспользоваться формулой (16.12) и учесть, что постоянное поле отвечает частоте  $\omega = 0$ .

Если использовать нормировку волновых функций свободной частицы такую, что  $\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}$ , то матричный элемент возмущения,

$$V_{fi} = \int (e^{i\mathbf{p}_f\cdot\mathbf{r}/\hbar})^* U(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{p}_i\cdot\mathbf{r}/\hbar} d^3r = \int U(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d^3r \equiv U_{\mathbf{q}},$$

равен фурье-образу потенциальной энергии возмущения по переданному импульсу  $\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_f = \hbar\mathbf{q}$ . Отношение вероятности перехода в единицу времени к плотности потока падающих частиц  $j = v_i$  имеет размерность площади:

$$d\sigma \equiv \frac{d\dot{w}_{fi}}{v_i} = \frac{2\pi}{\hbar v_i} |U_{\mathbf{q}}|^2 \delta\left(\frac{p_i^2}{2m} - \frac{p_f^2}{2m}\right) \frac{d^3p_f}{(2\pi\hbar)^3}.$$

С помощью дельта-функции можно провести интегрирование по модулю конечного импульса, записав  $d^3p_f = p_f dp_f^2 d\Omega/2$ . В результате получится выражение

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left| \frac{mU_{\mathbf{q}}}{2\pi\hbar^2} \right|^2, \quad (16.15)$$

называемое *дифференциальным сечением упругого рассеяния* в элемент телесного угла  $d\Omega$ . Более подробно о задаче рассеяния речь пойдет в главе 18.

## 16.5 Соотношение неопределенностей энергия-время

Пусть постоянное возмущение  $\hat{V}$  включается на время  $\Delta t$  и затем выключается. Вероятность перехода  $i \rightarrow f$  равна

$$w_{fi} = \frac{|V_{fi}|^2}{\hbar^2} \left| \int_0^{\Delta t} e^{i\omega_{fi}t} dt \right|^2 = \frac{|V_{fi}|^2}{\hbar^2 \omega_{fi}^2} \sin^2 \frac{\omega_{fi} \Delta t}{2}.$$

Наибольший вклад получается для переходов в конечные состояния, удовлетворяющие условию  $\omega_{fi} \Delta t \sim 1$ , или в терминах  $\Delta E = |E_f - E_i|$ ,

$$\Delta E \Delta t \sim \hbar. \quad (16.16)$$

---

<sup>3</sup>Выбранная нормировка волновой функции соответствует одной частице в кубическом сантиметре. Плотность потока в такой нормировке равна  $\mathbf{j} = \mathbf{p}/m = \mathbf{v}$ .

Это соотношение называется *соотношением неопределенности энергия-время*. Несмотря на название, оно имеет совершенно иной смысл по сравнению с соотношением неопределенностей координата-импульс. В то время как соотношение неопределенностей координата-импульс следует из операторного характера этих величин, соотношению (16.16) нельзя приписать такого характера, поскольку время в нерелятивистской квантовой механике не является оператором.

## 16.6 Задачи

1. Атом водорода находился в основном состоянии при  $t \rightarrow -\infty$ . Найти вероятность его перехода в первое возбужденное состояние под действием однородного электрического поля  $\mathbf{E}(t) = E_0 \mathbf{e}_z e^{-|t|/\tau}$  при  $t \rightarrow +\infty$ .
2. Гармонический осциллятор с частотой  $\omega$  находится в основном состоянии. В некоторый момент времени частота удвоилась. Найти вероятность того, что осциллятор останется в основном состоянии.
3. Атом водорода в основном состоянии находится под воздействием однородного электрического поля  $\mathbf{E}(t) = E_0 \mathbf{e}_z \cos \omega t$ . Найти вероятность перехода в первое возбужденное состояние, если источник поля имеет распределение по частотам вида

$$g(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-(\omega-\omega_0)^2/2\sigma^2}.$$

4. Двухуровневая система с векторами состояния  $|1\rangle$  и  $|2\rangle$  и с уровнями энергии соответственно  $E_1$  и  $E_2$  при  $t = 0$  находилась в состоянии  $|1\rangle$ . В момент времени  $t = 0$  включилось поле с потенциальной энергией  $V_0$ . Определить вероятность того, что в произвольный момент времени  $t$  система окажется в состоянии  $|2\rangle$ , не предполагая поле слабым. Решить эту же задачу для периодического поля  $V(t) = V_0 \cos \omega t$ .

# Глава 17

## Излучение света

Учет испускания и поглощения света атомами требует квантового рассмотрения электромагнитного поля. Для этого необходимо ввести полевые аналоги  $q$  и  $p$  механических координаты и импульса и постулировать канонические коммутационные соотношения  $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$  для соответствующих операторов.

### 17.1 Свободное электромагнитное поле

Для того чтобы понять, что будет аналогом координаты и импульса в случае свободного электромагнитного поля, требуется вспомнить основные его свойства в классической электродинамике. Свободное (без зарядов и токов) электромагнитное поле описывается векторным потенциалом  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ , который удовлетворяет волновому уравнению

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} - \nabla^2 \mathbf{A} = 0 \quad (17.1)$$

с дополнительным условием

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0. \quad (17.2)$$

Скалярный потенциал  $\varphi$  свободного электромагнитного поля может быть выбран равным нулю. В качестве гамильтониана берем энергию электро-

магнитного поля

$$H = \frac{1}{8\pi} \int (\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2) d^3r = \frac{1}{8\pi} \int \left[ \frac{1}{c^2} \left( \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right)^2 + [\nabla \times \mathbf{A}]^2 \right], \quad (17.3)$$

в которой напряженности соответственно магнитного и электрического полей выражены через векторный потенциал:

$$\begin{aligned} \mathbf{B} &= [\nabla \times \mathbf{A}], \\ \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}. \end{aligned}$$

Поиск решения уравнения (17.1) в виде плоской волны

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{a}_{\mathbf{k}}(t) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$$

приводит к уравнению

$$\frac{d^2 \mathbf{a}_{\mathbf{k}}}{dt^2} + c^2 \mathbf{k}^2 \mathbf{a}_{\mathbf{k}} = 0,$$

по форме совпадающему с уравнением движения гармонического осциллятора с частотой  $\omega_{\mathbf{k}} = c|\mathbf{k}|$ . Решением является  $\mathbf{a}_{\mathbf{k}} \propto e^{-i\omega_{\mathbf{k}} t}$ .

Условие (17.2) сводится к соотношению

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{\mathbf{k}} = 0, \quad (17.4)$$

поэтому, несмотря на векторный характер  $\mathbf{a}_{\mathbf{k}}$ , независимы только две из этих трех компонент, ортогональные направлению распространения электромагнитной волны  $\mathbf{k}$ . В этом состоит свойство *поперечности* свободного электромагнитного поля. Эти две независимые компоненты нумеруются индексом  $\lambda = 1, 2$ , который служит для обозначения *поляризации* волны. Обычно направление поляризации задается в виде взаимно ортогональных, вообще говоря, комплексных единичных векторов  $\mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}$ :

$$\mathbf{a}_{\mathbf{k}} \equiv \mathbf{a}_{\mathbf{k},\lambda}(t) = a_{\mathbf{k},\lambda}(t) \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda} = \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda} a_{\mathbf{k},\lambda} e^{-i\omega_{\mathbf{k}} t}.$$

Векторы  $\mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}$  вещественны в случае линейной поляризации. Если волна распространяется вдоль оси  $z$ ,  $\mathbf{k} = |\mathbf{k}| \mathbf{e}_z$ , то возможен выбор

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_{\mathbf{k},1} &= \mathbf{e}_x, \\ \mathbf{e}_{\mathbf{k},2} &= \mathbf{e}_y. \end{aligned} \quad (17.5)$$



Разумеется допустим любой другой выбор, получаемый из (17.5) поворотом вокруг направления распространения волны, в данном случае, оси  $z$ . Эти векторы удовлетворяют соотношению ортонормированности:

$$\mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda'} = \delta_{\lambda,\lambda'}. \quad (17.6)$$

Используя явный вид векторов линейной поляризации (17.5) можно вывести важную формулу *суммирования по поляризациям*. Действительно,

$$\begin{aligned} \sum_{\lambda=1,2} (\mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda})_i (\mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda})_j &= (\mathbf{e}_{\mathbf{k},1})_i (\mathbf{e}_{\mathbf{k},1})_j + (\mathbf{e}_{\mathbf{k},2})_i (\mathbf{e}_{\mathbf{k},2})_j = \delta_{i1}\delta_{j1} + \delta_{i2}\delta_{j2} = \\ &= \delta_{i1}\delta_{j1} + \delta_{i2}\delta_{j2} + \delta_{i3}\delta_{j3} - \delta_{i3}\delta_{j3} = \delta_{ij} - \delta_{i3}\delta_{j3} = \\ &= \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{\mathbf{k}^2}. \end{aligned}$$

Здесь где  $i, j = 1, 2, 3$ . В случае круговой поляризации векторы комплексны:

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_{\mathbf{k},R} &= -\frac{\mathbf{e}_x + i\mathbf{e}_y}{\sqrt{2}}, \\ \mathbf{e}_{\mathbf{k},L} &= \frac{\mathbf{e}_x - i\mathbf{e}_y}{\sqrt{2}}, \end{aligned}$$

и справедливо более общее выражение:

$$\sum_{\lambda} (\mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda})_i (\mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}^*)_j = \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{\mathbf{k}^2}. \quad (17.7)$$

Хотя при выводе предполагалось, что волна распространяется вдоль  $z$ , формула суммирования (17.7) годится для любого  $\mathbf{k}$ . Обобщение (17.6) записывается как

$$\mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda'}^* = \delta_{\lambda,\lambda'}. \quad (17.8)$$

Общее решение волнового уравнения (17.1) записывается так, чтобы векторный потенциал  $\mathbf{A}$  был явно вещественным:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) &= \sum_{\lambda} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} [a_{\mathbf{k},\lambda} \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda} e^{-i\omega_{\mathbf{k}} t + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \\ &+ a_{\mathbf{k},\lambda}^* \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}^* e^{i\omega_{\mathbf{k}} t - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}]. \end{aligned} \quad (17.9)$$

Получим выражение для гамильтониана, выраженное через  $a_{\mathbf{k},\lambda}$ . Для этого подставим (17.9) в (17.3) и используем представление

$$\int e^{i(\mathbf{k} \pm \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} d^3 r = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} \pm \mathbf{k}'),$$

условие (17.8) и векторное равенство

$$([\mathbf{k} \times \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}] \cdot [\mathbf{k}' \times \mathbf{e}_{\mathbf{k}',\lambda'}]) = (\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}')(\mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}',\lambda'}^*),$$

справедливое при условии поперечности  $(\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}) = 0$ . После интегрирования по  $\mathbf{r}$  и по  $\mathbf{k}'$  возникают слагаемые четырех типов:  $a_{\mathbf{k},\lambda} a_{-\mathbf{k}',\lambda'}$ ,  $a_{\mathbf{k},\lambda}^* a_{-\mathbf{k},\lambda'}^*$ ,  $a_{\mathbf{k},\lambda}^* a_{\mathbf{k},\lambda'}$  и  $a_{\mathbf{k},\lambda} a_{\mathbf{k},\lambda'}^*$ . Слагаемые первых двух типов от  $\mathbf{E}^2$  и  $\mathbf{B}^2$  взаимно сокращаются, тогда слагаемые третьего и четвертого вида складываются. В результате получается выражение

$$H = \frac{1}{2\pi c^2} \sum_{\lambda} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \omega_{\mathbf{k}}^2 |a_{\mathbf{k},\lambda}|^2. \quad (17.10)$$

Осцилляторный характер задачи позволяет переписать этот гамильтониан в привычном виде

$$H = \sum_{\lambda} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2} (p_{\mathbf{k},\lambda}^2 + \omega_{\mathbf{k}}^2 q_{\mathbf{k},\lambda}^2),$$

введя набор вещественных переменных

$$\begin{aligned} p_{\mathbf{k},\lambda} &= -i\omega_{\mathbf{k}} \frac{a_{\mathbf{k},\lambda} - a_{\mathbf{k},\lambda}^*}{\sqrt{4\pi c}}, \\ q_{\mathbf{k},\lambda} &= \frac{a_{\mathbf{k},\lambda} + a_{\mathbf{k},\lambda}^*}{\sqrt{4\pi c}}, \end{aligned} \quad (17.11)$$

которые играют роль соответственно импульса и координаты осциллятора. Однако в отличие от одномерного осциллятора, свободное электромагнитное поле представляется в виде непрерывного двойного (из-за двух состояний поляризации) набора *мод*, т.е. осцилляторов с частотами  $\omega_{\mathbf{k}} = c|\mathbf{k}|$ . Удобнее, однако, иметь дело не с непрерывным, а дискретным множеством значений импульса. Для этого система помещается в ящик с объемом

$$V = L_x \times L_y \times L_z = 1 \times 1 \times 1 \text{ см}^3$$

и накладываются периодические граничные условия на компоненты векторного потенциала свободного поля:

$$A_i(x + L_x, y, z) = A_i(x, y + L_y, z) = A_i(x, y, z + L_z) = A_i(x, y, z). \quad (17.12)$$

Отсюда сразу следуют условия квантования компонент волнового вектора

$$k_i = \frac{2\pi n_i}{L_i},$$

где  $n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ,  $i = x, y, z$ . Тогда интегрирование по волновому вектору замениться на суммирование по дискретному набору компонент волнового вектора:

$$\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \rightarrow \sum_{\mathbf{k}}.$$

Отметим, что обратная процедура перехода от суммирования к интегрированию применялась при выводе золотого правила Ферми.

## 17.2 Квантование электромагнитного поля

Процедура квантования электромагнитного поля состоит в том, что набор  $(p_{\mathbf{k},\lambda}, q_{\mathbf{k},\lambda})$  становится набором операторов с каноническими коммутационными соотношениями

$$[\hat{q}_{\mathbf{k},\lambda}, \hat{p}_{\mathbf{k},\lambda}] = i\hbar.$$

Коммутаторы операторов с различными квантовыми числами равны нулю. Фурье-амплитуды  $(a_{\mathbf{k},\lambda}, a_{\mathbf{k},\lambda}^*)$  также становятся операторами  $(\hat{a}_{\mathbf{k},\lambda}, \hat{a}_{\mathbf{k},\lambda}^\dagger)$ , чей коммутатор равен

$$[\hat{a}_{\mathbf{k},\lambda}, \hat{a}_{\mathbf{k},\lambda}^\dagger] = \frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_{\mathbf{k}}}.$$

Для того чтобы соответствие с осциллятором было полным, следует перейти к новым операторам

$$(\hat{c}_{\mathbf{k},\lambda}, \hat{c}_{\mathbf{k},\lambda}^\dagger) = \sqrt{\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{2\pi\hbar c^2}} (\hat{a}_{\mathbf{k},\lambda}, \hat{a}_{\mathbf{k},\lambda}^\dagger),$$

для которых

$$[\hat{c}_{\mathbf{k},\lambda}, \hat{c}_{\mathbf{k},\lambda}^\dagger] = 1 \quad (17.13)$$

в точности как у осциллятора. Операторы  $\hat{c}_{\mathbf{k},\lambda}, \hat{c}_{\mathbf{k},\lambda}^\dagger$  называются соответственно операторами уничтожения, рождения фотона с волновым вектором  $\mathbf{k}$  и поляризацией  $\lambda$ .

Операторное выражение для векторного потенциала в терминах операторов  $\hat{c}_{\mathbf{k},\lambda}, \hat{c}_{\mathbf{k},\lambda}^\dagger$  имеет вид

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{A}}_{\text{rad}}(\mathbf{r}, t) = & \sum_{\mathbf{k},\lambda} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_{\mathbf{k}}}} \left( \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda} \hat{c}_{\mathbf{k},\lambda} e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \right. \\ & \left. + \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}^* \hat{c}_{\mathbf{k},\lambda}^\dagger e^{i\omega_{\mathbf{k}}t - i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right), \end{aligned} \quad (17.14)$$

где значок rad указывает на то, что это оператор, относящийся к кванту поля излучения - фотону. Операторами будут также напряженности электрического и магнитного поля фотона. Поскольку свободное поле сведено к системе гармонических осцилляторов, можно использовать результаты главы 5.

Оператор Гамильтона свободного электромагнитного поля представится в виде суммы по отдельным модам

$$\hat{H}_{\text{e.m.}} = \sum_{\mathbf{k},\lambda} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \left( \hat{c}_{\mathbf{k},\lambda}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\lambda} + \frac{1}{2} \right). \quad (17.15)$$

Оператор

$$\hat{n}_{\mathbf{k},\lambda} = \hat{c}_{\mathbf{k},\lambda}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\lambda}$$

является оператором числа фотонов с заданным волновым вектором и поляризацией:

$$\hat{n}_{\mathbf{k},\lambda} |n_{\mathbf{k},\lambda}\rangle = n_{\mathbf{k},\lambda} |n_{\mathbf{k},\lambda}\rangle.$$

Имеется состояние *вакуума*  $|0\rangle$ , в котором вообще нет фотонов  $\hat{n}_{\mathbf{k},\lambda}|0\rangle = 0$ . Вакуумное состояние имеет наименьшую энергию  $E_0$ , но она не равна нулю:

$$E_0 = \sum_{\mathbf{k},\lambda} \frac{1}{2} \hbar\omega_{\mathbf{k}}.$$

Формально эта сумма расходится, но до тех пор, пока эффекты гравитации не существенны<sup>1</sup>, от этой расходимости можно избавиться, переопределив начало отсчета энергии. Однако в современной теории гравитации - общей теории относительности - любая энергия является источником гравитационного поля, в том числе и  $E_0$ . В физике элементарных частиц вообще все поля квантуются так, как здесь намечено для случая электромагнитного поля, и вносят свой формально бесконечный вклад в энергию вакуума. Между тем имеется ряд экспериментальных ограничений на величину плотности энергии вакуума, которые указывают на ее исчезающе малое (но не нулевое!) значение. В этом состоит до сих пор нерешенная проблема *космологической постоянной*. Возможно, что наличие ненулевой плотности энергии вакуума отвечает за открытое в 1998 г. ускоренное расширение Вселенной.

Состояния квантованного электромагнитного поля задаются указанием числа фотонов с заданным волновым вектором и поляризацией. Они строятся на основе формулы (5.12), полученной для простого гармонического осциллятора:

$$|n_{\mathbf{k},\lambda}\rangle = \frac{(\hat{c}_{\mathbf{k},\lambda}^\dagger)^{n_{\mathbf{k},\lambda}}}{\sqrt{n_{\mathbf{k},\lambda}!}}|0\rangle. \quad (17.16)$$

Действие операторов уничтожения и рождения на состояния с определенным числом фотонов записывается аналогично случаю гармонического осциллятора (5.10) и (5.11):

$$\begin{aligned} \hat{c}_{\mathbf{k},\lambda}|n_{\mathbf{k},\lambda}\rangle &= \sqrt{n_{\mathbf{k},\lambda}}|n_{\mathbf{k},\lambda}-1_{\mathbf{k},\lambda}\rangle, \\ \hat{c}_{\mathbf{k},\lambda}^\dagger|n_{\mathbf{k},\lambda}\rangle &= \sqrt{n_{\mathbf{k},\lambda}+1_{\mathbf{k},\lambda}}|n_{\mathbf{k},\lambda}+1_{\mathbf{k},\lambda}\rangle. \end{aligned} \quad (17.17)$$

Для дальнейшего полезно отметить, что

$$\hat{c}_{\mathbf{q},\lambda_0}|n_{\mathbf{k},\lambda}\rangle = 0 \quad (17.18)$$

либо при  $\mathbf{q} \neq \mathbf{k}$ , либо при  $\lambda_0 \neq \lambda$ . Это следует из формулы (17.16), из того, что коммутатор операторов рождения и уничтожения фотонов с разными квантовыми числами равен нулю и из определения вакуумного состояния  $\hat{c}_{\mathbf{q},\lambda_0}|0\rangle = 0$ .

---

<sup>1</sup>Эффекты гравитации не существенны в масштабах расстояний и энергий, типичных для атомов, ядер и элементарных частиц.

## 17.3 Испускание и поглощение фотонов

Процессы испускания и поглощения электромагнитного излучения квантовой системой будут рассмотрены здесь на примере атома водорода. В основу рассмотрения формально кладется гамильтониан в правой части уравнения Паули (12.11) с потенциальной энергией кулоновского притяжения  $U(\mathbf{r}) = -e^2/r$ , но с существенным отличием в том, что касается интерпретации векторного потенциала  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ . Там это был векторный потенциал *внешнего* магнитного поля. Но для решения задач с испусканием и поглощением фотонов необходимо считать операторами входящие в гамильтониан векторный потенциал  $\hat{\mathbf{A}}_{\text{rad}}(\mathbf{r}, t)$  (17.14) и напряженность магнитного поля

$$\hat{\mathbf{B}}_{\text{rad}} = [\nabla \times \hat{\mathbf{A}}_{\text{rad}}].$$

Полный гамильтониан получится после добавления гамильтониана фотонов (17.15):

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \hbar \omega_{\mathbf{k}} \left( \hat{c}_{\mathbf{k}, \lambda}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, \lambda} + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2m} \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \hat{\mathbf{A}}_{\text{rad}} \right)^2 - \frac{e^2}{r} - \frac{e\hbar}{2mc} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{B}}_{\text{rad}}).$$

Поскольку вклад фотонов в энергию мал, можно рассматривать его как возмущение и отбросить в гамильтониане слагаемые  $\propto \hat{\mathbf{A}}_{\text{rad}}^2$ . После этого можно представить гамильтониан в виде  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ , где

$$\hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \hbar \omega_{\mathbf{k}} \left( \hat{c}_{\mathbf{k}, \lambda}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, \lambda} + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} \quad (17.19)$$

есть невозмущенный гамильтониан фотонов и электрона в поле неподвижного протона. Для получения оператора возмущения надо учесть, что

$$\sum_i [\hat{p}_i, (\hat{A}_{\text{rad}})_i] = -i\hbar \nabla \cdot \hat{\mathbf{A}}_{\text{rad}} = 0.$$

Последнее равенство выполняется ввиду того, что дивергенция  $\nabla \cdot \hat{\mathbf{A}}_{\text{rad}}$  под знаком суммы содержит скалярные произведения  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}$  и  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}^*$ , равные нулю в силу условия поперечности (17.4). Поэтому получим, что  $(\hat{\mathbf{A}}_{\text{rad}} \cdot$

$\hat{\mathbf{p}}) = (\hat{\mathbf{p}}) \cdot \hat{\mathbf{A}}_{\text{rad}}$ , а гамильтониан взаимодействия электрона с фотонами примет вид

$$\hat{V} = -\frac{e}{mc}(\hat{\mathbf{A}}_{\text{rad}} \cdot \hat{\mathbf{p}}) - \frac{e\hbar}{2mc}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{B}}_{\text{rad}}). \quad (17.20)$$

Чтобы задать состояния свободного гамильтониана (17.19) удобно использовать смешанное представление, когда состояния электрона характеризуются волновыми функциями в координатном представлении  $\psi(\mathbf{r})$ , тогда как для фотонов используется язык дираковских обозначений  $|n_{\mathbf{k},\lambda}\rangle$ , так что, например, начальный вектор состояния представляется в виде

$$|i\rangle = \psi_i(\mathbf{r})\chi_i|n_{\mathbf{k},\lambda}\rangle,$$

где явно указана волновая функция электрона в координатном представлении  $\psi_i(\mathbf{r})$ , его спиновая волновая функция (спинор)  $\chi_i$  и вектор состояния с определенным числом фотонов  $|n_{\mathbf{k},\lambda}\rangle$ . Аналогично записывается конечный вектор состояния полной системы фотоны+электрон.

Сначала рассмотрим излучение фотона. По формуле «золотого» правила Ферми (16.12) нужно вычислить матричный элемент  $V_{fi}$  от оператора возмущения (17.20). Вначале вычислим матричный элемент по фотонам. Пусть в начальном состоянии нет фотонов, поэтому вектор состояния фотонного поля есть  $|0\rangle$ . Вектор конечного состояния  $|1_{\mathbf{q},\lambda_0}\rangle = \hat{c}_{\mathbf{q},\lambda_0}^\dagger|0\rangle$  описывает один фотон с волновым вектором  $\mathbf{q}$  и поляризацией  $\lambda_0$ . Применяя соотношения (17.13) и (17.17), получим

$$\begin{aligned} \langle 1_{\mathbf{q},\lambda_0} | \hat{\mathbf{A}}_{\text{rad}} | 0 \rangle &= \langle 0 | \hat{c}_{\mathbf{q},\lambda_0} \hat{\mathbf{A}}_{\text{rad}} | 0 \rangle = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_{\mathbf{q}}}} \mathbf{e}_{\mathbf{q},\lambda_0}^* e^{i(\omega_{\mathbf{q}}t - \mathbf{q} \cdot \mathbf{r})}, \\ \langle 1_{\mathbf{q},\lambda_0} | \hat{\mathbf{B}}_{\text{rad}} | 0 \rangle &= \langle 0 | \hat{c}_{\mathbf{q},\lambda_0} \hat{\mathbf{B}}_{\text{rad}} | 0 \rangle = -i \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_{\mathbf{q}}}} [\mathbf{q} \times \mathbf{e}_{\mathbf{q},\lambda_0}^*] e^{i(\omega_{\mathbf{q}}t - \mathbf{q} \cdot \mathbf{r})}. \end{aligned}$$

Эти выражения позволяют записать матричный элемент по фотонам:

$$\begin{aligned} \langle 1_{\mathbf{q},\lambda_0} | \hat{V} | 0 \rangle &= -\frac{e}{mc} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_{\mathbf{q}}}} e^{i\omega_{\mathbf{q}}t - i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \{ (\mathbf{e}_{\mathbf{q},\lambda_0}^* \cdot \hat{\mathbf{p}}) - \\ &\quad - i\hbar \hat{\mathbf{s}} \cdot [\mathbf{q} \times \mathbf{e}_{\mathbf{q},\lambda_0}^*] \}, \end{aligned} \quad (17.21)$$

где  $\hat{\mathbf{s}} = \boldsymbol{\sigma}/2$  есть оператор спина электрона. Матричный элемент (17.21) все еще является оператором по отношению к электрону и имеет вид

оператора периодического возмущения. Поэтому можно применить формулу (16.12) для вычисления вероятности перехода в единицу времени. В нее входит матричный элемент оператора возмущения и по фотонам, и по электронам:

$$V_{fi} = -\frac{e}{mc} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_q}} \int \psi_f^*(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \{(\mathbf{e}_{\mathbf{q},\lambda_0}^* \cdot \hat{\mathbf{p}}) - i\hbar \hat{\mathbf{s}} \cdot [\mathbf{q} \times \mathbf{e}_{\mathbf{q},\lambda_0}^*]\} \psi_i(\mathbf{r}) d^3r. \quad (17.22)$$

уже есть  $n_{\mathbf{q},\lambda_0}$  фотонов с волновым вектором  $\mathbf{q}$  и поляризацией  $\lambda_0$ . В соответствии с формулой «золотого» правила Ферми (16.12) нужно вычислить матричный элемент  $V_{fi}$  от оператора возмущения, задаваемого первым членом в (17.20) в случае, когда начальное состояние фотонов задается вектором  $|n_{\mathbf{q},\lambda_0}\rangle$ , а конечное – вектором  $|(n+1)_{\mathbf{q},\lambda_0}\rangle$ . Вначале найдем матричный элемент по фотонам. С учетом правил действия (17.17) и формулы (17.18) от бесконечной суммы в (17.14) останется вклад только от одного слагаемого:

$$\begin{aligned} \langle (n+1)_{\mathbf{q},\lambda_0} | \hat{V} | n_{\mathbf{q},\lambda_0} \rangle &= -\frac{e}{mc} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_q}} e^{i\omega_q t - i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} (\mathbf{e}_{\mathbf{q},\lambda_0}^* \cdot \hat{\mathbf{p}}) \times \\ &\times \sqrt{(n+1)_{\mathbf{q},\lambda_0}}. \end{aligned} \quad (17.23)$$

При этом возникает возможность упрощения. Действительно, волновой вектор фотона, испущенного при переходе между уровнями атома водорода, разделенными интервалом энергии  $\Delta E \sim me^4/\hbar^2 \sim e^2/a_B$ , оценивается как  $q = \Delta E/\hbar c \sim e^2/\hbar c a_B$ . Характерные расстояния в атоме водорода оцениваются как  $r \sim a_B$ , поэтому показатель экспоненты в выписанном матричном элементе оценивается как

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} \sim q a_B \sim e^2/\hbar c = 1/137 \ll 1.$$

Поэтому справедливо так называемое *дипольное приближение*  $e^{\pm i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \approx 1$ , в рамках которого матричный элемент испускания фотона с переходом электрона из состояния  $i$  в состояние  $f$  примет вид

$$V_{fi} = -\frac{e}{mc} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_q}} (\mathbf{e}_{\mathbf{q},\lambda_0}^* \cdot \mathbf{p}_{fi}) \sqrt{(n+1)_{\mathbf{q},\lambda_0}}, \quad (17.24)$$



где

$$\mathbf{p}_{fi} = \int \psi_f^*(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{p}} \psi_i(\mathbf{r}) d^3r.$$

Аналогичное рассмотрение показывает, что матричный элемент поглощения фотона с переходом электрона из состояния  $f$  в состояние  $i$  записывается как

$$V_{if} = -\frac{e}{mc} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_q}} (\mathbf{e}_{q,\lambda_0} \cdot \mathbf{p}_{if}) \sqrt{n_{q,\lambda_0}}.$$

Сравнив матричные элементы испускания и поглощения фотона приходим к выводу, что отношение вероятностей испускания и поглощения фотона в единицу времени в случае, когда в системе уже есть  $n_{\mathbf{k},\lambda}$  фотонов равно

$$\frac{\dot{w}_{\text{исп}}}{\dot{w}_{\text{погл}}} = \frac{n_{\mathbf{k},\lambda} + 1}{n_{\mathbf{k},\lambda}}. \quad (17.25)$$

## 17.4 Лазерный эффект и формула Планка

Соотношение (17.25) лежит в основе качественного объяснения *принципа действия лазера*. Пусть в полости имеется  $N_g$  атомов в основном состоянии,  $N_e$  атомов в возбужденном состоянии и  $n$  фотонов с одинаковыми волновыми векторами и поляризациями. Найдем скорость изменения числа фотонов в полости. Это число увеличивается за счет перехода атомов из возбужденного состояния в основное и уменьшается за счет обратного процесса. Если обозначить за  $\dot{w}_0$  вероятность в единицу времени излучения фотона в случае, когда в полости нет фотонов (эта вероятность называется вероятностью *спонтанного излучения* и будет рассчитана в следующем разделе), то можно составить уравнение баланса числа фотонов в полости:

$$\begin{aligned} \frac{dn}{dt} &= \dot{w}_{\text{исп}} N_e - \dot{w}_{\text{погл}} N_g = \dot{w}_0 [(n+1)N_e - nN_g] \approx \\ &\approx \dot{w}_0 (N_e - N_g)n. \end{aligned} \quad (17.26)$$

Приближенное равенство справедливо при  $n \gg 1$ . Из уравнения (17.26) следует, что в случае создания *инверсной заселенности*, когда число атомов в возбужденном состоянии превышает число атомов в основном состоянии  $N_e - N_g > 0$ , число фотонов с одинаковыми квантовыми числами в полости нарастает со временем экспоненциально. Реально роста

до бесконечности не наблюдается, поскольку включаются не учтенные при простом рассмотрении процессы потерь фотонов. Разумеется, что в полости есть и фотоны с другими направлениями импульса и поляризацией, но их число экспоненциально мало по сравнению с когерентными фотонами, т.е. фотонами с одинаковыми квантовыми числами.

На практике используется схема не с двумя, а с тремя уровнями. Два возбужденных уровня расположены близко друг к другу. Инверсная заселенность достигается в два этапа. Сначала производится оптическая накачка фотонов на верхний из этих двух близких возбужденных подуровней. Он имеет очень малое время жизни относительно перехода на чуть ниже лежащий соседний уровень со сравнительно большим временем жизни относительно перехода в основное состояние. Именно на этом подуровне создается инверсная заселенность.

Другим предельным случаем является стационарное распределение фотонов в полости при температуре  $T$ . Из условия  $\dot{n} = 0$  получается уравнение

$$\frac{\dot{w}_{\text{исп}}}{\dot{w}_{\text{погл}}} = \frac{n+1}{n} = \frac{N_g}{N_e}. \quad (17.27)$$

В соответствии с распределением Больцмана отношение числа атомов в возбужденном и основном состоянии при температуре  $T$  дается формулой

$$\frac{N_e}{N_g} = e^{-(E_e - E_g)/k_B T} = e^{-\hbar\omega/k_B T}.$$

Отсюда и из (17.27) находится равновесное число фотонов в полости:

$$n = \frac{1}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}.$$

Эта формула называется *формулой Планка*. Она лежит в основе объяснения *излучения абсолютно черного тела*. Ею также описывается спектр *космического фонового излучения*.

## 17.5 Электрическое дипольное излучение

С помощью «золотого» правила Ферми (16.12) вычислим вероятность спонтанного излучения в единицу времени. Матричный элемент этого процесса дается формулой (17.24), в которой надо положить  $n_{\mathbf{q}, \lambda_0} = 0$ .

Это условие означает, что до момента испускания в полости не было фотонов. Для вычисления матричного элемента оператора импульса применим уравнение Гейзенберга для электронной степени свободы с оператором Гамильтона в нулевом приближении  $\hat{H}_e^{(0)} = \hat{\mathbf{p}}^2/2m - e^2/r$ :

$$\begin{aligned}\mathbf{p}_{fi} &= m \left\langle f \left| \frac{d\hat{\mathbf{r}}}{dt} \right| i \right\rangle = \frac{im}{\hbar} \langle f | [\hat{H}_e^{(0)}, \hat{\mathbf{r}}] | i \rangle = \\ &= \frac{im(E_f - E_i)}{\hbar} \mathbf{r}_{fi} \equiv im\omega_{fi} \mathbf{r}_{fi},\end{aligned}$$

где векторы состояния в матричном элементе оператора скорости относятся только к электрону (напомним, что матричный элемент по фотонам уже взят).

Матричный элемент испускания фотона при переходе электрона из состояния  $f$  в состояние  $i$  принимает вид:

$$V_{fi} = -e \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_{\mathbf{q}}}} \omega_{fi} (\mathbf{r}_{fi} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{q},\lambda_0}^*).$$

Дальнейшие вычисления зависят от того, какие предположения делаются относительно условий эксперимента. Одна из типичных постановок состоит в том, что экспериментатор не измеряет поляризацию испущенного фотона. Тогда в соответствии с общими правилами квантовой механики для получения вероятности излучения следует просуммировать по поляризациям квадрат модуля матричного элемента излучения фотона с данной поляризацией:

$$\sum_{\lambda} |V_{fi}|^2 = \frac{2\pi\hbar e^2 \omega_{fi}^2}{\omega_{\mathbf{q}}} \sum_{\lambda} |(\mathbf{r}_{fi} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{q},\lambda}^*)|^2.$$

Это делается с помощью выведенной формулы (17.7):

$$\begin{aligned}\sum_{\lambda} |(\mathbf{r}_{fi} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{q},\lambda}^*)|^2 &= (\mathbf{r}_{fi})_j (\mathbf{r}_{fi})_l \sum_{\lambda} (\mathbf{e}_{\mathbf{q},\lambda})_j (\mathbf{e}_{\mathbf{q},\lambda}^*)_l = (\mathbf{r}_{fi})_j (\mathbf{r}_{fi})_l \times \\ &\times \left( \delta_{jl} - \frac{q_j q_l}{q^2} \right) = |\mathbf{r}_{fi}|^2 - |(\mathbf{r}_{fi} \cdot \mathbf{n})|^2 = |[\mathbf{r}_{fi} \times \mathbf{n}]|^2,\end{aligned}$$

где  $\mathbf{n} = \mathbf{q}/|\mathbf{q}|$  есть единичный вектор в направлении вылета фотона. Если выбрать ось  $z$  вдоль вектора  $\mathbf{r}_{fi}$ , то  $|[\mathbf{r}_{fi} \times \mathbf{n}]|^2 = |\mathbf{r}_{fi}|^2 \sin^2 \theta$ , где

угол  $\theta$  между  $\mathbf{n}$  и  $\mathbf{r}_{fi}$  является полярным углом при сделанном выборе оси.

С помощью «золотого» правила Ферми (16.12) можно найти вероятность излучения в единицу времени:

$$d\dot{w}_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(\hbar\omega_{\mathbf{q}} + E_f - E_i) \frac{2\pi\hbar e^2 \omega_{if}^2}{\omega_{\mathbf{q}}} |\mathbf{r}_{fi}|^2 \sin^2 \theta \frac{d^3 q}{(2\pi)^3}. \quad (17.28)$$

Здесь  $\hbar\omega_{if} = E_i - E_f > 0$ . Поскольку

$$d^3 q = \frac{\omega_{\mathbf{q}}^2}{c^3} d\omega_{\mathbf{q}} \sin \theta d\theta d\varphi,$$

то вначале выполняется интегрирование по частоте с помощью дельта-функции, а затем проводится интегрирование по углам. В результате получается выражение

$$\dot{w}_{fi} = \frac{4e^2 \omega_{if}^3}{3\hbar c^3} |\mathbf{r}_{fi}|^2. \quad (17.29)$$

Поскольку  $e\mathbf{r}_{fi}$  есть матричный элемент электрического дипольного момента электрона, то (17.29) называется формулой вероятности *электрического дипольного излучения* или *E1-излучения*.

Эта вероятность равна обратному времени жизни уровня  $1/\tau_i$ . Действительно, вероятность остаться в начальном состоянии  $i$  к моменту времени  $\Delta t$  равна

$$w_i(\Delta t) = 1 - \sum_f w_{fi} = 1 - \Delta t \sum_f \dot{w}_{fi} \approx e^{-\Delta t \sum_f \dot{w}_{fi}} = e^{-\Delta t / \tau_i}, \quad (17.30)$$

где приближенное равенство справедливо при достаточно малом  $\Delta t$ . Последнее равенство в (17.30) буквально выражает собой экспоненциальный закон распада со временем жизни

$$\tau_i = \frac{1}{\sum_f \dot{w}_{fi}}.$$

Числовое значение времени жизни будет получено ниже на примере времени жизни уровня  $n = 2$  в атоме водорода.

## 17.6 Правила отбора и угловое распределение

Правила отбора позволяют без долгих вычислений указать, какие процессы в квантовых системах возможны, а какие нет. В случае электрического дипольного излучения правила отбора следуют из правил отбора для векторного оператора  $\hat{\mathbf{r}}$ , чьи матричные элементы определяют скорость перехода (17.29). В разделе 12.6 главы 12 было показано, что ненулевые матричные элементы векторного оператора возможны между состояниями, чьи полные моменты удовлетворяют соотношению  $j_f - j_i = 0, \pm 1$ , а четности противоположны:  $P_i P_f = -1$ . Кроме того, переход  $j_i = 0 \rightarrow j_f = 0$  запрещен. Этот запрет обусловлен тем, что у волновых функций состояний с  $j = 0$  нет угловой зависимости, а проекции векторных операторов с необходимостью содержат такую зависимость, поэтому интегрирование по углам дает тождественный нуль.

Если указанные правила отбора запрещают электрическое дипольное излучение, то возможен переход другого типа, за счет второго слагаемого в (17.20). Его предлагается рассмотреть в качестве задачи к этой главе. В приближении  $e^{\pm i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \approx 1$  он называется *магнито-дипольным*, или *M1-переходом* и в принципе возможен в случае, когда  $(\boldsymbol{\sigma})_{fi} \neq 0$ . Поскольку оператор спина  $\hat{\mathbf{s}} = \boldsymbol{\sigma}/2$  является аксиально-векторным оператором, для него справедливы правила отбора  $j_i - j_f = 0, \pm 1$ ,  $P_i P_f = 1$ . Опять-таки, переход  $j_i = 0 \rightarrow j_f = 0$  запрещен по причине того, что матричные элементы оператора спина подразумевают наличие спиновых волновых функций - спиноров, что уже означает  $j_{\min} = 1/2$ .

Большой интерес представляет вероятность излучения в единицу времени, в которой проведено интегрирование по частоте вылетевшего фотона, но не по его направлению вылета. Такая вероятность носит название *углового распределения* и записывается в виде

$$d\dot{w}_{fi} = \frac{e^2 \omega_{if}^3}{2\pi \hbar c^3} |[\mathbf{r}_{fi} \times \mathbf{n}]|^2 d\Omega_{\mathbf{n}}. \quad (17.31)$$

Найдем угловое распределение для излучения фотонов при переходе  $n = 2$  в  $n = 1$  в атоме водорода.

При  $n = 2$  возможны орбитальные моменты  $l = 0$  (2s-состояние) с волновой функцией  $\psi_{2,0,0}(\mathbf{r})$  и  $l = 1$  с волновой функцией  $\psi_{2,1,m_l}(\mathbf{r})$

с  $m_l = 0, \pm 1$  (2р-состояние). Электрический дипольный переход из 2s-состояния запрещен правилом отбора по четности, из 2р-состояния разрешен. Матричные элементы оператора координаты вычисляются с волновыми функциями (9.12) и (9.13):

$$\langle 2, 1, m_l | (x, y, z) | 1, 0, 0 \rangle = \int_0^\infty R_{21} R_{10} r^3 dr \int Y_{1, m_l}^* \left( \frac{x}{r}, \frac{y}{r}, \frac{z}{r} \right) Y_{0, 0} d\Omega.$$

Вычисление радиального интеграла дает

$$\int_0^\infty R_{21} R_{10} r^3 dr = \frac{2^8 a_B}{3^4 \sqrt{6}}.$$

Поскольку  $Y_{0, 0} = (4\pi)^{-1/2}$ , а

$$\begin{aligned} \frac{x}{r} &= \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \frac{Y_{1, 1} + Y_{1, -1}}{\sqrt{2}}, \\ \frac{y}{r} &= i \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \frac{Y_{1, 1} - Y_{1, -1}}{i\sqrt{2}}, \\ \frac{z}{r} &= \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{1, 0}, \end{aligned}$$

то для вычисления интеграла по телесному углу можно использовать условие (8.11). В результате интегрирование по телесному углу приводит к результату

$$\int Y_{1, m_l}^* \left( \frac{x}{r}, \frac{y}{r}, \frac{z}{r} \right) Y_{0, 0} d\Omega = \frac{1}{\sqrt{3}} \left( \frac{\delta_{m_l, 1} + \delta_{m_l, -1}}{\sqrt{2}}, \frac{\delta_{m_l, 1} - \delta_{m_l, -1}}{i\sqrt{2}}, \delta_{m_l, 0} \right).$$

Полученные выражения позволяют найти вероятность излучения в единицу времени в единичный телесный угол из 2р-состояния с заданной

проекцией орбитального момента  $m_l$ :

$$\begin{aligned}
\frac{d\dot{w}(2p_{m_l} \rightarrow 1s)}{d\Omega} &= \frac{2^{14}e^2\omega_{if}^3a_B^2}{3^{10}\pi\hbar c^3} \left( \left| \frac{\delta_{m_l,1} - \delta_{m_l,-1}}{i\sqrt{2}}n_z - \delta_{m_l,0}n_y \right|^2 + \right. \\
&\quad \left. + \left| \frac{\delta_{m_l,1} + \delta_{m_l,-1}}{\sqrt{2}}n_z - \delta_{m_l,0}n_x \right|^2 + \right. \\
&\quad \left. + \left| \frac{\delta_{m_l,1} + \delta_{m_l,-1}}{\sqrt{2}}n_y - \frac{\delta_{m_l,1} - \delta_{m_l,-1}}{i\sqrt{2}}n_x \right|^2 \right) = \\
&= \frac{2^{13}e^2\omega_{if}^3a_B^2}{3^{10}\pi\hbar c^3} [(1 + \cos^2 \theta)(\delta_{m_l,1} + \delta_{m_l,-1}) + \\
&\quad + 2\delta_{m_l,0} \sin^2 \theta] .
\end{aligned}$$

Из этого выражения видно, что дифференциальные вероятности излучения из состояний  $2p_{\pm 1}$  и  $2p_0$  равны соответственно

$$\frac{d\dot{w}(2p_{\pm 1} \rightarrow 1s)}{d\Omega} = \frac{2^{13}e^2\omega_{if}^3a_B^2}{3^{10}\pi\hbar c^3} (1 + \cos^2 \theta)$$

и

$$\frac{d\dot{w}(2p_0 \rightarrow 1s)}{d\Omega} = \frac{2^{14}e^2\omega_{if}^3a_B^2}{3^{10}\pi\hbar c^3} \sin^2 \theta.$$

Если проекция орбитального момента в начальном состоянии неизвестна, то необходимо *усреднить* выражение дифференциальной вероятности по этим проекциям:

$$\frac{d\dot{w}(2p \rightarrow 1s)}{d\Omega} = \frac{1}{3} \sum_{m_l} \frac{d\dot{w}(2p_{m_l} \rightarrow 1s)}{d\Omega} = \frac{2^{16}e^2\omega_{if}^3a_B^2}{3^{11}\pi\hbar c^3}.$$

Обратное время жизни уровня  $2p$  атома водорода получается интегрированием по телесному углу и равно

$$\frac{1}{\tau_{2p \rightarrow 1s}} = \frac{2^{17}e^2\omega_{if}^3a_B^2}{3^{11}\pi\hbar c^3} c^{-1}.$$

Частота рассматриваемого перехода

$$\omega_{if} = \frac{3}{4} \frac{\text{Ry}}{\hbar} = \frac{3e^2}{8\hbar a_B},$$

поэтому

$$\frac{1}{\tau_{2p \rightarrow 1s}} = 2 \left( \frac{2}{3} \right)^8 \frac{\text{Ry}}{\hbar} \left( \frac{e^2}{\hbar c} \right)^3 \equiv 2\alpha^3 \left( \frac{2}{3} \right)^8 \frac{\text{Ry}}{\hbar},$$

$\alpha = 1/137$ . Расчет дает  $\tau_{2p \rightarrow 1s} = 1.5 \times 10^{-9}$  с. Конечное время жизни уровня означает, что его ширина не равна нулю. Из формулы для времени жизни относительно  $E1$ -перехода можно получить оценку отношения ширины уровня к разности энергий:

$$\frac{\Gamma_{E1}}{\Delta E} \sim \alpha^3 \sim 4 \times 10^{-7}.$$

Напомним, что отношение расщепления за счет релятивистского  $ls$ -взаимодействия в атоме водорода составляет  $\Delta E_{ls}/\Delta E \sim \alpha^2 \sim 5 \times 10^{-5}$ .

Если правила отбора запрещают электрическое дипольное излучение, то нужно рассмотреть следующие члены разложения экспоненты в матричных элементах по фотонам (17.23)  $e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \approx 1 - i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}$ .

## 17.7 Задача Элитцур – Вайдмана

В 1993 г. два физика, А. Элитцур и Л. Вайдман, опубликовали в статье под названием «Квантово-механические измерения, не требующие взаимодействия» [17]. В ней была рассмотрена и решена задача, иллюстрирующая свойства квантовых систем столь же ярко, как известный мысленный эксперимент по одноквантовой интерференции на двух щелях.

Задача формулируется так. Допустим, имеется  $N \gg 1$  бомб, у части которых взрыватели испорчены, а у другой части исправны. Необходимо гарантированно определить, по крайней мере, одну исправную бомбу, которую в дальнейшем можно бы было использовать. Классическим (не квантово-механическим) методом задачу не решить.

Классический метод требует непосредственного воздействия на взрыватель (скажем, с помощью удара по нему молотком). Очевидно, что так можно определить лишь неисправные бомбы, тогда как все исправные бомбы при такой проверке взорвутся. Элитцур и Вайдман показали, что свойства квантовой интерференции фотонов могут использоваться для решения поставленной задачи. Необходимое для этого устройство носит название интерферометра Маха – Цандера. Оно схематично показано



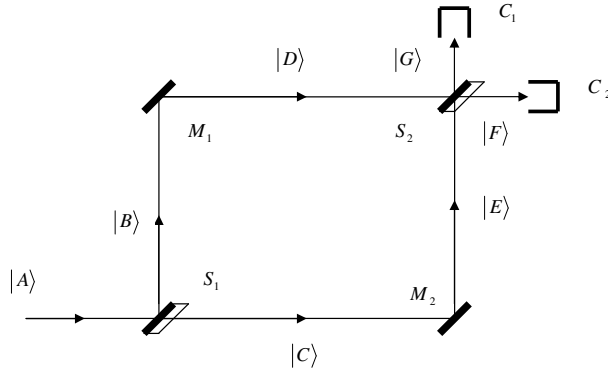


Рис. 17.1: Интерферометр Маха – Цандера, состоящий из зеркал  $M_1$  и  $M_2$ , делителей пучка света  $S_1$  и  $S_2$  и счетчиков фотонов  $C_1$  и  $C_2$ . Светоделители  $S_1$  и  $S_2$  расщепляют поток фотонов на отраженный и прошедший пучки, каждый с интенсивностью 50% от интенсивности падающего пучка. Но их фазы различаются на  $90^\circ$

на рис. 17.1. Фотон испускается из лазера в состоянии  $|A\rangle$  и попадает на светоделитель  $S_1$ . Этот светоделитель действует на состояние фотона как оператор, преобразующий начальный вектор состояния в линейную суперпозицию  $i|B\rangle + |C\rangle$ . Здесь вектор состояния  $|B\rangle$  описывает фотон, летящий по прямой к зеркалу  $M_1$  в верхнем левом углу интерферометра, а вектор состояния  $|C\rangle$  описывает фотон, летящий к зеркалу  $M_2$  в правом нижнем углу. Следовательно, светоделитель  $S_1$  действует на состояние фотона как оператор

$$\hat{U}_{S_1} : |A\rangle \rightarrow \frac{i}{\sqrt{2}}|B\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|C\rangle, \quad (17.32)$$

преобразующий начальный вектор состояния в определенную линейную суперпозицию, в которой вектор состояния  $|B\rangle$  описывает отраженный фотон, летящий вверх по прямой к зеркалу  $M_1$  в верхнем левом углу интерферометра, а вектор состояния  $|C\rangle$  описывает прошедший фотон, летящий направо к зеркалу  $M_2$  в правом нижнем углу. Множители  $1/\sqrt{2}$  показывают, что проходит и отражается ровно 50% падающих на светоделитель фотонов. Мнимая единица  $i$  у вектора состояния  $|B\rangle$  показывает, что фаза отраженной волны отличается на  $90^\circ$  от фазы прошедшей волны. Этот факт установлен в работах [18, 19, 20]. Зеркала  $M_1$  и  $M_2$

соответственно преобразуют вектора состояния в соответствии с правилами

$$\begin{aligned}\hat{U}_{M_1} : |B\rangle &\rightarrow |D\rangle, \\ \hat{U}_{M_2} : |C\rangle &\rightarrow |E\rangle.\end{aligned}\quad (17.33)$$

Наконец, светоделитель  $S_2$  производит над векторами состояния падающих на него фотонов от зеркал  $M_1$  и  $M_2$  преобразования

$$\begin{aligned}\hat{U}_{S_2} : |D\rangle &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}|F\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}}|G\rangle, \\ \hat{U}_{S_2} : |E\rangle &\rightarrow \frac{i}{\sqrt{2}}|F\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|G\rangle.\end{aligned}\quad (17.34)$$

Число фотонов, зарегистрированных в единицу времени счетчиками  $C_1$  и  $C_2$ , согласно правилам квантовой механики пропорционально соответственно квадрату модуля коэффициентов при векторах состояния  $|G\rangle$  и  $|F\rangle$ . Найдем эти коэффициенты, проследив всю цепочку действий при прохождении фотонов через интерферометр Маха – Цандера:

$$\begin{aligned}|A\rangle &\rightarrow \frac{i}{\sqrt{2}}|B\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|C\rangle \rightarrow \frac{i}{\sqrt{2}}|D\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|E\rangle \rightarrow \\ &\rightarrow \frac{i}{\sqrt{2}}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}|F\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}}|G\rangle\right) + \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{i}{\sqrt{2}}|F\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|G\rangle\right) = \\ &= \left(\frac{i}{2}|F\rangle - \frac{1}{2}|G\rangle\right) + \left(\frac{i}{2}|F\rangle + \frac{1}{2}|G\rangle\right) = i|F\rangle + 0|G\rangle.\end{aligned}\quad (17.35)$$

Из этих соотношений видно, что искомые коэффициенты (амплитуды вероятности) равны  $a_F = i$ ,  $a_G = 0$ . Вероятности зарегистрировать фотон в счетчиках  $C_1$  и  $C_2$  равны соответственно  $w_{C_1} = |a_G|^2 = 0$ ,  $w_{C_2} = |a_F|^2 = 1$ . Следовательно, ни один фотон не попадет в счетчик  $C_1$ ! Все фотоны, испущенные лазером, попадут в детектор  $C_2$ .

Допустим, что на пути фотонов от светоделителя  $S_1$  до зеркала  $M_2$  поставлен поглотитель. Тогда на зеркало  $M_2$  фотоны не попадают. Единственной траектории отвечает следующая цепочка преобразований векторов состояния:

$$\begin{aligned}|A\rangle &\rightarrow \frac{i}{\sqrt{2}}|B\rangle \rightarrow \frac{i}{\sqrt{2}}|D\rangle \rightarrow \frac{i}{\sqrt{2}}\left(\frac{i}{\sqrt{2}}|G\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|F\rangle\right) = \\ &= -\frac{1}{2}|G\rangle + \frac{i}{2}|F\rangle.\end{aligned}$$

Теперь амплитуды вероятности равны  $a_F = i/2$ ,  $a_G = -1/2$ , а вероятности зарегистрировать фотон счетчиками  $C_1$  и  $C_2$  одинаковы:  $w_{C_1} = |a_G|^2 = 1/4$ ,  $w_{C_2} = |a_F|^2 = 1/4$ .

Приспособим интерферометр Маха – Цандера для проверки бомб на пригодность. Для этого прикрепим зеркало  $M_2$  к взрывателю бомбы. Если фотон полетит по пути  $S_1 - M_2$  и попадет на это зеркало, то при отражении он передаст импульс взрывателю, и бомба, если она исправна, взорвется. Вероятность того, что исправная бомба при таком тестировании взорвется, равна  $1/2$ . Иными словами, в среднем половина исправных бомб при первом прогоне такого тестирования будет потеряна. Если фотон летит по пути  $S_1 - M_2 - S_2$ , то бомба, если она исправна, остается целой. Однако после прохождения этим фотоном светоделителя  $S_2$  он с вероятностью  $1/2$  может оказаться как в детекторе  $C_2$ , так и в детекторе  $C_1$ . Если бомба не взорвалась, а фотон попал в детектор  $C_2$ , то нельзя сказать, исправна она или нет. Ставим на бомбе знак вопроса и откладываем ее в сторону для того, чтобы подвергнуть вторичному тестированию. Но если фотон попал в детектор  $C_1$ , а бомба осталась целой, то она гарантированно исправна! Вероятность этого события при прохождении одного фотона равна  $1/4$ , поскольку с вероятностью  $1/2$  фотон пойдет по траектории  $S_1 - M_2 - S_2$ , и с вероятностью  $1/2$  после прохождения светоделителя  $S_2$  попадет в детектор  $C_1$ . Таким образом, после первого тестирования будет отобрано в среднем 25% от общего числа исправных бомб.

Итак, способ поиска исправных бомб состоит в отборе событий, когда бомба не взрывается, а детектор  $C_1$  срабатывает. После первого прогона в среднем  $1/2$  исправных бомб взорвалось,  $1/4$  исправных бомб гарантированно пригодны для использования и  $1/4$  исправных бомб оказалась в категории со знаком вопроса. После второго прогона через интерферометр Маха – Цандера останется  $1/16$  доля исправных бомб и т. д. После многократного повторения рассмотренной процедуры доля пригодных к использованию (в мирных целях) бомб оказывается равной

$$\Delta_{\text{ready-for-use}} = \frac{1}{4} + \frac{1}{16} + \frac{1}{64} + \dots = \frac{1}{3}.$$

Следует напомнить, что классический способ отбора дает нулевое число исправных бомб.

Задача Элитцура – Вайдмана важна в том отношении, что иллюстрирует принцип действия квантовой безопасной передачи данных (кванто-

вой криптографии). Если два персонажа А (Алиса) и В (Боб) пересылают друг другу сообщения посредством квантовых частиц, например фотонов, то законы квантовой механики позволяют установить, было ли сообщение перехвачено третьим персонажем С (Ева). Перехват сообщения означает возможность регистрации Евой фотона, летящего, допустим, по траектории  $S_1 - M_2$ . При регистрации фотон поглощается. Как было показано выше, это приводит к тому, что детектор  $C_1$  начинает регистрировать фотоны, чего бы никогда не случилось, не будь на траектории  $S_1 - M_2$  подслушивающего персонажа. В реальности все гораздо сложнее. Переданное сообщение кодируется квантовым состоянием поляризации пересылаемых одиночных фотонов, в системе есть шумы, которые могут имитировать перехват, и множество других факторов. Для практической реализации необходим источник одиночных когерентных фотонов, оптоволоконная линия связи с хорошими характеристиками и т. д. Тем не менее, эти сложности преодолеваются. Применяя методы квантовой механики, можно разработать статистические критерии, которые на основании статистики регистрации фотонов позволяют и при наличии шумов установить, было ли сообщение перехвачено. Первый такой протокол квантовой передачи данных, названный BB84, был предложен в 1984 г., к настоящему времени он реализован на коммерческих оптоволоконных линиях связи на расстояниях порядка десяти километров. Можно считать, что квантовая механика стала и инженерной наукой.

## 17.8 Задачи

1. Провести в явном виде все этапы получения гамильтониана свободного электромагнитного поля, обозначенные в тексте.
2. Определим оператор импульса электромагнитного поля как операторное выражение проинтегрированного по всему пространству вектора Умова - Пойнтинга

$$\hat{P} = \frac{1}{4\pi c} \int [\hat{E} \times \hat{B}] d^3r.$$

Найти этот оператор импульса в терминах операторов рождения и уничтожения фотонов с заданными волновыми векторами и поляризациями.

3. Нейтральная частица со спином  $1/2$  и с магнитным моментом  $\mu$  находится на верхнем уровне в магнитном поле напряженностью  $B_0$ . Определить время жизни частицы на этом уровне относительно испускания фотона. Найти угловое распределение излучения. *Указание.* За такой процесс отвечает второй член в (17.20), в котором при подстановке оператора (17.14) можно положить  $e^{\pm i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \approx 1$ .
4. 2. Однократно заряженная частица находится на уровне с главным квантовым числом  $n = 1$  изотропного гармонического осциллятора. Вычислить время жизни частицы на этом уровне, обусловленное однофотонным переходом. Ответ довести до числа в предположении, что масса частицы равна массе атома рубидия, а частота осциллятора  $\omega/2\pi = 50$  Гц. Найти угловое распределение испущенных квантов при излучении из состояний  $(n_x, n_y, n_z) = (1, 0, 0)$ ,  $(0, 1, 0)$  и  $(0, 0, 1)$  соответственно. (Нейтральные атомы рубидия в осцилляторном потенциале с аналогичными параметрами изучались в опытах с конденсатом Бозе – Эйнштейна.). Каким окажется время жизни на указанном уровне протона, если характерная энергия для потенциала ядерных сил равна  $\hbar\omega = 1$  МэВ?

# Глава 18

## Рассеяние

Под рассеянием имеется в виду процесс взаимодействия частицы с мишенью. В самом простом случае в качестве мишени выступает внешний источник поля. В более сложном случае мишенью является либо частица того же сорта, либо другая. Как показано в главе 9, этот случай можно свести к рассеянию на внешнем потенциале, если задачу о взаимодействии двух частиц разбить на задачи о движении центра масс и относительном движении. От движения центра масс можно избавиться переходом в систему отсчета, в которой центр масс покоится. Относительное движение сводится к задаче о движении частицы с приведенной массой во внешнем поле. Далее такое разделение будет предполагаться совершенным. Рассеяние бывает *упругим*, если частица изменяет лишь направление движения, не изменив энергию. При *неупругом* рассеянии частица теряет или приобретает энергию, либо вообще может поглотиться. В любом случае она выбывает из пучка.

В данном курсе не будет рассматриваться вся теория нерелятивистского рассеяния. Мы ограничимся случаем *борновского приближения*, предполагающего малость взаимодействия частицы с полем.

### 18.1 Постановка задачи рассеяния

В практическом плане постановка эксперимента по рассеянию состоит в том, что на большом расстоянии от центра поля имеется пучок свободных частиц, движущихся, допустим, вдоль оси  $z$ . Пучок предпо-

лагается стационарным. Частицы проходят через область действия потенциала и рассеиваются. На большом расстоянии от силового центра, таком, что действием потенциала можно пренебречь, имеется детектор, регистрирующий попавшие в него частицы. Пусть детектор расположен в направлении, заданном углами  $\theta, \varphi$  сферической системы координат, имеет площадь  $dS$  и регистрирует  $d\dot{N}$  рассеянных частиц в единицу времени (скорость счета). Угол рассеяния определяется как угол между векторами начального и конечного импульсов на большом удалении от центра поля. Если начало координат выбрано в центре силового поля, действующего на частицу, то угол рассеяния совпадает с углом  $\theta$ . *Дифференциальное сечение рассеяния* определяется как отношение скорости счета в детекторе к потоку падающих частиц  $j_i = v^1$ :

$$d\sigma = \frac{d\dot{N}}{v}. \quad (18.1)$$

В квантовой механике постановка задачи упругого рассеяния состоит в том, что требуется найти решение стационарного уравнения Шредингера

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(\mathbf{r})] \psi = 0, \quad (18.2)$$

имеющее асимптотику на больших расстояниях от центра в виде линейной комбинации плоской падающей волны, распространяющейся вдоль оси  $z$ , и расходящейся сферической волны:

$$\psi(r \rightarrow \infty) \sim e^{ikz} + f(k, \theta) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (18.3)$$

Энергия частицы равна  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ . Вся информации о рассеянии содержится в вообще говоря комплексной *амплитуде рассеяния*  $f(k, \theta)$ , зависящей от модуля волнового вектора и угла рассеяния. Число частиц, зарегистрированных детектором, расположенном на расстоянии  $r$  от центра поля и имеющего площадь  $dS = r^2 d\Omega$ , где через  $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$  обозначен дифференциал телесного угла, равно  $j_r dS$ . Здесь

$$j_r = \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi_f^* \frac{d\psi_f}{dr} - \frac{d\psi_f^*}{dr} \psi_f \right)_{r \rightarrow \infty} \sim \frac{\hbar k}{mr^2} |f|^2 = \frac{v}{r^2} |f|^2 \quad (18.4)$$

---

<sup>1</sup>Если волновую функцию падающих частиц взять в виде  $\psi_i = Ae^{ikz}$ , то ей отвечает поток  $j_i = \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi_i^* \frac{d\psi_i}{dz} - \frac{d\psi_i^*}{dz} \psi_i \right) = |A|^2 v$ . Если выбрать нормировку так, чтобы в единице объема была одна частица, то  $|A|^2 = 1 \text{ см}^{-3}$ , и поток равен  $j_i = v \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1}$ .

есть поток рассеянных частиц. При вычислении потока в качестве  $\psi_f$  взята волновая функция расходящейся волны, а производные от  $1/r$  дали слагаемые, исчезающие в пределе  $r \rightarrow \infty$ . Из (18.1) и (18.4) находится выражение для дифференциального сечения упругого (elastic) рассеяния

$$\frac{d\sigma_{\text{el}}}{d\Omega} = |f|^2. \quad (18.5)$$

Полное сечение упругого рассеяния получается интегрированием по телесному углу:

$$\sigma_{\text{el}} = \int |f|^2 d\Omega. \quad (18.6)$$

## 18.2 Задача рассеяния в классической механике

Полезно вспомнить постановку задачи рассеяния во внешнем поле в рамках классической механики. В этом случае частица при движении имеет определенную траекторию. Траектория задается зависимостью угла рассеяния  $\theta$  от прицельного расстояния  $\rho$ . Дифференциальное сечения упругого рассеяния равно

$$d\sigma = d^2\rho = \rho d\rho d\varphi = \frac{\rho}{\sin\theta} \left| \frac{d\rho}{d\theta} \right| d\Omega.$$

Из этого выражения видно, что полное сечение упругого рассеяния расходится, если только потенциал поля не обрывается на некотором прицельном расстоянии  $\rho_{\text{max}}$ . Это говорит о том, что классическая механика неприменима при больших прицельных параметрах, эквивалентно, малых углах рассеяния.

При малых углах рассеяния в классической механике справедливо вытекающее из второго закона Ньютона выражение для угла рассеяния

$$\theta \approx \frac{p_{\perp}}{p} = \frac{1}{p} \int_{-\infty}^{\infty} f_{\perp} dt \sim \frac{f_{\perp} \rho}{pv}.$$

Предполагается, что частица на большом удалении от силового центра движется вдоль оси  $z$  на прицельном расстоянии  $\rho$ . Классический



режим реализуется, когда квантовая неопределенность угла рассеяния  $\delta\theta \sim \delta p_{\perp}/p$  будет много меньше классического угла рассеяния  $\theta$ . Если в поперечном направлении частица локализована на прицельном расстоянии  $\rho$ , то по соотношению неопределенности координата-импульс возникает неопределенность в поперечном импульсе порядка  $\delta p_{\perp} \sim \hbar/\rho$ , откуда  $\delta\theta \sim \hbar/p\rho$ . Для обеспечения классического предела при рассеянии на малые углы необходимо потребовать выполнения неравенства  $\delta\theta \ll \theta$ , откуда получим

$$\frac{\hbar}{p\rho} \ll \frac{f_{\perp}\rho}{pv}.$$

Оценивая поперечную компоненту силы через характерную потенциальную энергию как  $f_{\perp} \sim U/\rho$ , окончательно находим критерий справедливости классического описания рассеяния на малые углы:

$$\frac{U\rho}{\hbar v} \gg 1.$$

Из этого неравенства следует, что оно нарушается на достаточно больших расстояниях, где потенциальная энергия стремится к нулю. Вырожденным случаем является кулоновское поле. Потенциальная энергия в этом случае оценивается как  $U \sim Ze^2/\rho$ , и критерий классического описания сводится к неравенству

$$\frac{Ze^2}{\hbar v} \gg 1. \quad (18.7)$$

### 18.3 Борновское приближение

Хотя имеется ряд общих соотношений для амплитуды упругого рассеяния, точные выражения для нее могут быть получены лишь в исключительных случаях. Для преодоления этой трудности развит ряд приближенных подходов к вычислению амплитуды рассеяния. Одним из них является *борновское приближение*. Для получения амплитуды рассеяния в борновском приближении выведем методом функции Грина из дифференциального уравнения (18.2), переписанного в виде

$$\nabla^2\psi + k^2\psi = \frac{2mU(\mathbf{r})}{\hbar^2}\psi,$$

где

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2},$$

эквивалентное интегральное уравнение, которое и попытаемся решить приближенно. В данном случае функция Грина должна удовлетворять уравнению

$$(\nabla^2 + k^2)G(\mathbf{r}) = \delta^{(3)}(\mathbf{r}). \quad (18.8)$$

Эквивалентное интегральное уравнение принимает вид

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi^{(0)}(\mathbf{r}) + \frac{2m}{\hbar^2} \int G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')U(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}'), \quad (18.9)$$

в котором  $\psi^{(0)}(\mathbf{r})$  есть решение уравнения (18.2) в нулевом поле. Выберем его в виде свободной падающей волны  $\psi^{(0)}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{r}/\hbar}$ ,  $\mathbf{p}_i = \hbar k \mathbf{e}_z$ . Уравнение (18.8) решается методом фурье-разложения:

$$G(\mathbf{r}) = \int G_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \frac{d^3 q}{(2\pi)^3}.$$

Подстановка в (18.8) дает выражение для фурье-амплитуды:

$$G_{\mathbf{q}} = -\frac{1}{\mathbf{q}^2 - k^2},$$

откуда можно получить выражение для функции Грина

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}) &= -\frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty d|\mathbf{q}| \frac{\mathbf{q}^2}{\mathbf{q}^2 - k^2} \int_0^\pi e^{i|\mathbf{q}|r \cos \theta} \sin \theta d\theta = \\ &= -\frac{1}{4\pi^2 i r} \int_{-\infty}^\infty \frac{q e^{iqr}}{q^2 - k^2} dq. \end{aligned}$$

Видно, что при интегрировании по  $q$  встретятся полюсы при  $q = \pm k$ . Появление таких полюсов является обычным при вычислении функций Грина. Поэтому требуется доопределение возникающих интегральных представлений исходя из физического смысла задачи. В данном случае доопределение усматривается из асимптотики волновой функции задачи рассеяния (18.3), согласно которой эффект рассеяния сводится к возникновению расходящейся сферической волны  $\propto e^{ikr}/r$ . Для воспроизведения этой асимптотики необходимо задать обход полюса в интегральном представлении  $k^2 \rightarrow k^2 + i\varepsilon$ ,  $\varepsilon \rightarrow 0$ . Тогда контур можно замкнуть в

верхней полуплоскости переменной интегрирования  $q$  и вычислить интеграл методом вычетов. В верхней полуплоскости есть единственный полюс  $q = k + i\varepsilon$ , в результате функция Грина для задачи принимает вид расходящейся сферической волны

$$G(\mathbf{r}) = -\frac{e^{ikr}}{4\pi r}. \quad (18.10)$$

Интегральное уравнение (18.9) принимает вид

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi^{(0)}(\mathbf{r}) - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3r'. \quad (18.11)$$

Асимптотика при  $r \rightarrow \infty$  получится, если использовать разложение  $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \approx r - (\mathbf{r}' \cdot \mathbf{r})/r \equiv r - (\mathbf{r}' \cdot \mathbf{n})$ , где  $\mathbf{n}$  обозначает единичный вектор в направлении уходящей волны. Тогда

$$\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \approx -\frac{e^{ikr-ik(\mathbf{r}' \cdot \mathbf{n})}}{4\pi r}.$$

Учитывая, что  $k\mathbf{n} = \mathbf{k}_f$  есть волновой вектор рассеянной частицы, получим *точное* выражение для амплитуды рассеяния

$$f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}'} U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3r'. \quad (18.12)$$

Это выражение служит основой для доказательства ряда общих утверждений об амплитуде рассеяния, но для получения явного вида для амплитуды оно неудобно, поскольку в него входит неизвестная волновая функция  $\psi(\mathbf{r}')$  под знаком интеграла.

Явное выражение для амплитуды рассеяния можно получить, если рассматривать поле  $U(\mathbf{r})$  как возмущения и решать уравнение (18.9) методом итераций. Для этого представим  $\psi$  в виде ряда  $\psi = \psi^{(0)} + \psi^{(1)} + \psi^{(2)} + \dots$ , где  $\psi^{(n)}$  имеет  $n$ -ю степень потенциала. Подставив это разложение в (18.9), получим

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &= \psi^{(0)}(\mathbf{r}) + \frac{2m}{\hbar^2} \int G(\mathbf{r}-\mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \psi^{(0)}(\mathbf{r}') d^3r' + \\ &+ \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^2 \int G(\mathbf{r}-\mathbf{r}') U(\mathbf{r}') G(\mathbf{r}'-\mathbf{r}'') U(\mathbf{r}'') \times \\ &\times \psi^{(0)}(\mathbf{r}'') d^3r' d^3r'' + \dots \end{aligned} \quad (18.13)$$

После подстановки этого разложения в (18.12) и с учетом того, что  $\psi^{(0)} = e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}}$  получается разложение для амплитуды рассеяния в ряд по степеням потенциала:

$$f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}'} U(\mathbf{r}') \left[ e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}'} + \frac{2m}{\hbar^2} \int G(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') U(\mathbf{r}'') \times \right. \\ \left. \times e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}''} d^3 r'' + \dots \right] d^3 r'. \quad (18.14)$$

Первый член разложения по степеням потенциальной энергии,

$$f^{(1)} \equiv f_B = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int U(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f) \cdot \mathbf{r}} d^3 r \equiv -\frac{m}{2\pi\hbar^2} U_{\mathbf{q}}, \quad (18.15)$$

где  $\mathbf{q} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f$ , называется *формулой Борна*, а само выражение (18.15) есть амплитуда рассеяния в первом борновском приближении. Отметим, что это выражение вещественно, поскольку потенциальная энергия вещественна. Действительно, взяв от (18.15) комплексное сопряжение убеждаемся, что изменение знака в показателе экспоненты можно скомпенсировать заменой переменной интегрирования  $\mathbf{r}' = -\mathbf{r}$ . Эти же аргументы приводят к соотношению  $U_{\mathbf{q}}^* = U_{-\mathbf{q}}$ . Дифференциальное сечение рассеяния в первом борновском приближении дается формулой

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left| \frac{mU_{\mathbf{q}}}{2\pi\hbar^2} \right|^2. \quad (18.16)$$

Оно буквально совпадает с выражением (16.15), выведенным из «золотого» правила Ферми.

При вычислении полного сечения из дифференциального удобно преобразовать переменные интегрирования от телесного угла к переданному импульсу исходя из выражения

$$\mathbf{q}^2 = \mathbf{k}_i^2 + \mathbf{k}_f^2 - 2|\mathbf{k}_i||\mathbf{k}_f| \cos \theta.$$

Отсюда  $d\mathbf{q}^2 = 2|\mathbf{k}_i||\mathbf{k}_f| \sin \theta d\theta$ , поэтому

$$d\Omega = \frac{d\mathbf{q}^2 d\varphi}{2|\mathbf{k}_i||\mathbf{k}_f|}. \quad (18.17)$$

Пределы интегрирования по  $\mathbf{q}^2$  есть соответственно

$$0 \leq \mathbf{q}^2 \leq 4\mathbf{k}_i^2$$

в случае упругого рассеяния и

$$(|\mathbf{k}_i| - |\mathbf{k}_f|)^2 \leq \mathbf{q}^2 \leq (|\mathbf{k}_i| + |\mathbf{k}_f|)^2 \quad (18.18)$$

в случае неупругого рассеяния.

Для справедливости борновского приближения необходимо, чтобы первая поправка к невозмущенной волновой функции  $\psi^{(0)}$  в (18.13) была мала:

$$\left| \frac{m}{\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} U(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}'} d^3 r' \right| = \left| \frac{m}{\hbar^2} \int \frac{e^{ik\rho}}{\rho} U(\mathbf{r}-\boldsymbol{\rho}) e^{i\mathbf{k}_i \cdot (\mathbf{r}-\boldsymbol{\rho})} d^3 \rho \right| \ll 1.$$

Оценим эту поправку, предполагая, что потенциал имеет конечный радиус действия  $a$ , а его характерная величина равна  $U_0$ . Для медленных частиц  $ak \ll 1$ , поэтому в показателе экспоненты можно положить  $|\mathbf{k}_i| = k = 0$ . Отсюда получим критерий применимости борновского приближения *для медленных частиц*:

$$\frac{mU_0 a^2}{\hbar^2} \ll 1. \quad (18.19)$$

Для быстрых частиц  $ka \gg 1$  оценка интеграла под знаком модуля такова:

$$\left| \frac{m}{\hbar^2} \int \frac{e^{ik\rho(1-\cos\theta)}}{\rho} U(\mathbf{r}-\boldsymbol{\rho}) \rho^2 d\rho \sin\theta d\theta \right| \sim \left| \frac{m}{k\hbar^2} \int_0^\infty (e^{2ik\rho} - 1) U(\rho) d\rho \right| \sim \frac{mU_0 a}{k\hbar^2}.$$

При оценке было учтено, что при  $ka \gg 1$  экспоненциальное слагаемое  $e^{2ik\rho}$  не вносит вклада ввиду быстрых осцилляций. Отсюда получается критерий применимости борновского приближения *для быстрых частиц*:

$$\frac{mU_0 a}{k\hbar^2} \ll 1. \quad (18.20)$$

Оба полученных критерия допускают качественную интерпретацию на основе соотношения неопределенностей, поскольку условие борновского приближения фактически означает малость взаимодействия частицы с полем. Рассуждая от противного допустим, что при  $ka \ll 1$  частица оказалась в связанном состоянии в поле притяжения глубиной порядка  $U_0$  и с характерным радиусом действия порядка  $a$ . Неопределенность импульса будет порядка  $\hbar/a$ , неопределенность в кинетической

энергии порядка  $\hbar^2/ma^2$ . Если эта неопределенность превысит глубину ямы,

$$\frac{\hbar^2}{ma^2} \gg U_0,$$

то связанного со стояния не возникнет. Это условие совпадает с (18.19). Для быстрых частиц имеется конечное время взаимодействия  $\Delta t \sim a/v = ma/\hbar k$  при пролете через область действия потенциала. Согласно соотношению неопределенностей энергия-время конечное время взаимодействия приводит к неопределенности в энергии порядка  $\Delta E \sim \hbar/\Delta t$ . Если  $\Delta E \gg U_0$ , то воздействие внешнего поля на частицу будет пренебрежимо малым. Отсюда возникает неравенство

$$\frac{\hbar^2 k}{ma} \gg U_0,$$

совпадающее с критерием применимости борновского приближения для быстрых частиц.

## 18.4 Оптическая теорема

Из разложения (18.14) следует, что амплитуда рассеяния во втором борновском приближении равна

$$f^{(2)} = \frac{m^2}{\pi \hbar^4} \int e^{-i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}'} U(\mathbf{r}') G(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') U(\mathbf{r}'') e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}''} d^3 r' d^3 r''.$$

Интегрирование по координатам можно провести явно, если подставить фурье-разложение функции Грина

$$G(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') = -\frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r}' - \mathbf{r}'')}}{\mathbf{p}^2 - k^2 - i\varepsilon} d^3 p.$$

Получим, явно указав в качестве аргументов начальный и конечный волновой вектор:

$$f^{(2)} \equiv f^{(2)}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_f) = \frac{m^2}{8\pi^4 \hbar^4} \int \frac{U_{\mathbf{p}-\mathbf{k}_f} U_{\mathbf{k}_i-\mathbf{p}}}{\mathbf{p}^2 - k^2 - i\varepsilon} d^3 p.$$

Используя выражение<sup>2</sup>

$$\frac{1}{x \mp i\varepsilon} = P\frac{1}{x} \pm i\pi\delta(x),$$

где  $P$  есть символ главного значения, можно определить мнимую часть амплитуды рассеяния вперед (при  $\mathbf{k}_f = \mathbf{k}_i$ ):

$$\text{Im}f^{(2)}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_i) = \frac{m^2}{8\pi^3\hbar^4} \int |U_{\mathbf{k}_i-\mathbf{p}}|^2 \delta(\mathbf{p}^2 - \mathbf{k}_i^2) d^3p,$$

$d^3p = \frac{1}{2}|\mathbf{p}|d|\mathbf{p}|^2d\Omega$ . Интеграл по  $|\mathbf{p}|$  сразу берется с помощью дельта-функции, после чего остается интегрирование по телесному углу вектора  $\mathbf{p}$ , длина которого равна  $|\mathbf{k}_i|$ . Этот телесный угол с равным успехом можно отождествить с телесным углом вектора  $\mathbf{k}_f$  и записать

$$\text{Im}f^{(2)}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_i) = \frac{m^2|\mathbf{k}_i|}{16\pi^3\hbar^4} \int |U_{\mathbf{k}_i-\mathbf{k}_f}|^2 d\Omega.$$

Приняв во внимание, что  $\text{Im}f^{(1)} = 0$  и выражение для сечения (18.16), получим важное соотношение между мнимой частью амплитуды упругого рассеяния вперед и полным сечением упругого рассеяния:

$$\text{Im}f(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_i) = \text{Im}(f^{(1)}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_i) + (f^{(2)}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_i))) = \frac{|\mathbf{k}_i|}{4\pi} \sigma_{\text{el}}. \quad (18.21)$$

Это соотношение выведено здесь в рамках борновского приближения для упругого рассеяния с учетом второй поправки. На самом деле без всяких приближений можно доказать справедливость общего утверждения о связи мнимой части амплитуды упругого рассеяния вперед с *полным* сечением рассеяния  $\sigma_{\text{tot}} = \sigma_{\text{el}} + \sigma_{\text{inel}}$ , где  $\sigma_{\text{inel}}$  учитывает неупругие процессы:

$$\text{Im}f(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_i) = \frac{|\mathbf{k}_i|}{4\pi} \sigma_{\text{tot}}. \quad (18.22)$$

Это важное соотношение называется *оптической теоремой*.

---

<sup>2</sup>Оно следует из соотношения  $\frac{1}{x \mp i\varepsilon} = \frac{x}{x^2 + \varepsilon^2} \pm i\frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2}$ , в котором надо перейти к пределу  $\varepsilon \rightarrow 0$  и использовать одно из представлений дельта-функции Дирака  $\delta(x) = \frac{1}{\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2}$ .

## 18.5 Рассеяние в кулоновском поле

Буквальное применение критерия борновского приближения для рассеяния медленных частиц (18.19) в кулоновском поле точечного заряда  $U = \pm Ze^2/r$  невозможно, поскольку это поле имеет бесконечный радиус действия  $a \rightarrow \infty$ . Однако в случае быстрых частиц  $a \rightarrow \infty$  выпадает из оценки (18.20), приводя к критерию применимости в виде

$$\frac{Ze^2}{\hbar v} = Z\alpha \frac{c}{v} \ll 1. \quad (18.23)$$

С учетом того, что уравнение Шредингера и все его следствия справедливы при нерелятивистских скоростях  $v/c \ll 1$ , получаем критерий справедливости нерелятивистского рассмотрения рассеяния в кулоновском поле в борновском приближении:

$$Z\alpha \ll \frac{v}{c} \ll 1.$$

Для не слишком тяжелых ядер до  $Z \lesssim 10$  имеем  $Z\alpha \lesssim 10^{-1}$ , так что при  $v/c \sim 1/3 - 1/5$  борновское приближение можно применить.

Согласно формуле Борна (18.15) требуется вычислить фурье-образ потенциала. Сделаем это вначале для кулоновского поля точечного заряда. Электростатический потенциал этого заряда удовлетворяет уравнению Пуассона

$$\nabla^2 \phi(\mathbf{r}) = -4\pi Ze\delta(\mathbf{r}).$$

Ответ сразу же получается методом преобразования Фурье. Поскольку

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{r}) &= \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \phi_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}, \\ \delta(\mathbf{r}) &= \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}, \end{aligned}$$

то для фурье-образа потенциальной энергии взаимодействия точечных зарядов  $e$  и  $Ze$  получим выражение

$$U_{\mathbf{q}} = \frac{4\pi Ze^2}{q^2}. \quad (18.24)$$



Амплитуда рассеяния в первом борновском приближении равна

$$f_B = -\frac{2mZe^2}{\hbar^2 \mathbf{q}^2} = -\frac{mZe^2}{2\mathbf{p}_i^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}} = \frac{Ze^2}{4E \sin^2 \frac{\theta}{2}}. \quad (18.25)$$

Соответствующее выражение для дифференциального сечения рассеяния

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left( \frac{Ze^2}{4E} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} \quad (18.26)$$

называется *формулой Резерфорда*. Любопытно, что постоянная Планка выпала из окончательного ответа. Сам Резерфорд вывел эту формулу в рамках классической механики для того, чтобы объяснить результаты своих экспериментов по рассеянию альфа-частиц (ядер  $\text{He}^4$ ). Анализ этих экспериментов привел его к выводу о существовании тяжелых ядер, окруженных легкими электронами и к формулировке в 1913 г. планетарной модели атома. Дальнейший теоретический анализ этой модели Н. Бором потребовал полного пересмотра классической физики и спустя 10 лет привел к созданию квантовой механики. Интересно отметить, что точное решение задачи рассеяния в кулоновском поле приводит в выражении для дифференциального сечения, совпадающему с (18.26). Полное сечение рассеяния в кулоновском поле расходится при малых углах рассеяния как  $\lim_{\theta \rightarrow 0} \frac{1}{\theta^2}$ . Эта расходимость является следствием дальнодействующего характера кулоновского поля.

Если кулоновское поле задается распределенной плотностью заряда  $\rho(\mathbf{r})$ , то нужно решать уравнение Пуассона

$$\nabla^2 \phi(\mathbf{r}) = -4\pi\rho(\mathbf{r}).$$

Снова применив метод Фурье, получим фурье-образ электростатического потенциала

$$\phi_{\mathbf{q}} = \frac{4\pi\rho_{\mathbf{q}}}{\mathbf{q}^2},$$

где  $\rho_{\mathbf{q}}$  обозначает фурье-образ плотности заряда. Дифференциальное сечение рассеяния в этом случае принимает вид

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left( \frac{e}{4E} \right)^2 \frac{|\rho_{\mathbf{q}}|^2}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} \quad (18.27)$$

Фурье-образ плотности заряда  $\rho_{\mathbf{q}}$  называется *формфактором* и обозначается как

$$F(\mathbf{q}) = \int \rho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} d^3r.$$

При малых переданных импульсах и для сферически-симметричного распределения заряда разложение этого выражения в ряд по  $|\mathbf{q}|$  принимает вид

$$\begin{aligned} F(\mathbf{q}) &\equiv F(|\mathbf{q}|^2) = \int \rho(\mathbf{r}) \left[ 1 - i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \frac{1}{2}(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})^2 + \dots \right] d^3r = \\ &= \int \rho(\mathbf{r}) d^3r - \frac{|\mathbf{q}|^2}{6} \int \rho(\mathbf{r}) r^2 d^3r + \dots = \\ &= Q - \frac{|\mathbf{q}|^2}{6} \langle r^2 \rangle + \dots, \end{aligned} \quad (18.28)$$

где  $Q = \int \rho(\mathbf{r}) d^3r$  есть просто полный заряд распределенной системы, а величина

$$\langle r^2 \rangle = \int \rho(\mathbf{r}) r^2 d^3r$$

называется *среднеквадратичным зарядовым радиусом*. При выводе было учтено, что для  $\rho(\mathbf{r}) \equiv \rho(|\mathbf{r}|)$  справедливо равенство

$$\int r_i r_j \rho d^3r = \frac{1}{3} \delta_{ij} \int r^2 \rho d^3r.$$

С другой стороны, из непосредственного разложения формфактора

$$F(|\mathbf{q}|^2) = F(0) + |\mathbf{q}|^2 \frac{dF}{d|\mathbf{q}|^2} + \dots$$

путем сравнения с (18.28) получаем важные соотношения

$$\begin{aligned} Q &= F(0), \\ \langle r^2 \rangle &= -6 \frac{dF}{d|\mathbf{q}|^2} \Big|_{q^2=0}. \end{aligned} \quad (18.29)$$

Из первого соотношения следует, что для электронейтральной системы  $F(0) = 0$ , поэтому  $F(q) \propto q^2$ , и дифференциальное сечение конечно при  $\theta = 0$ . Следовательно, конечным будет и полное сечение упругого рассеяния. Важность приведенных соотношений обусловлена тем, что из измерений дифференциального сечения рассеяния можно определить зависимость формфактора от переданного импульса, откуда можно определить

профиль распределения заряда. Такие эксперименты по рассеянию электронов на тяжелых ядрах были успешно проведены Р. Хофштадтером в 50-х гг. прошлого века и принесли ему Нобелевскую премию.

## 18.6 Неупругое рассеяние в борновском приближении

Разберем, как в рамках борновского приближения рассматривается неупругое рассеяние. Сделаем это на примере рассеяния быстрых электронов на атоме водорода, при котором атом водорода в состоянии с  $n = 1$  в результате рассеяния на нем электрона перейдет в состояние с  $n = 2$ . Как указывалось, для рассеяния быстрых электронов в кулоновском поле применимо борновское приближение, которое сводится к формуле «золотого» правила Ферми (16.12). Дифференциальное сечение получится делением вероятности перехода в единицу времени на поток падающих частиц  $j_i = v_i$ , где начальная скорость  $v_i = \hbar k_i / m_e$ :

$$d\sigma = \frac{2\pi}{\hbar v_i} |V_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i) \frac{d^3 p_f}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (18.30)$$

Ввиду того что протон гораздо тяжелее электрона,  $m_p \gg m_e$ , можно пренебречь его отдачей при рассеянии, т.е. считать протон неподвижным и поместить его в начале координат. Оператор возмущения в данном случае сводится к потенциальной энергии взаимодействия падающего электрона с радиус-вектором  $\mathbf{r}_0$  со связанным электроном с радиус-вектором  $\mathbf{r}$  и протоном:

$$\hat{V} = e^2 \left( \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|} - \frac{1}{|\mathbf{r}_0|} \right).$$

Условие применимости борновского приближения сводится к неравенству

$$v_i \gg \alpha c = \frac{e^2}{\hbar}. \quad (18.31)$$

Поскольку протон неподвижен, полная энергия системы в начальном состоянии есть

$$E_i = \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m_e} + \epsilon_1,$$

энергия в конечном состоянии равна

$$E_f = \frac{\hbar^2 k_f^2}{2m_e} + \epsilon_2,$$

где

$$\epsilon_n = -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2 n^2},$$

( $n = 1, 2$ ) отвечает кулоновским уровням энергии атома водорода. Ввиду того что электроны неразличимы, нужно, строго говоря, координатную волновую функцию двух электронов выбирать в виде симметричной или антисимметричной линейной комбинации произведений волновых функций падающего и связанного электронов. Но при выполнении неравенства (18.31) связанный и падающий электроны можно считать различимыми и пренебречь эффектом симметризации. Тогда начальная и конечная волновая функция системы представимы в виде соответственно  $\psi_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) = e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_0} \psi_1(\mathbf{r})$  и  $\psi_f(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}_0} \psi_2(\mathbf{r})$ . Матричный элемент оператора возмущения запишется в виде:

$$\begin{aligned} V_{fi} &= e^2 \int d^3r d^3r_0 e^{-i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}_0} \psi_2^*(\mathbf{r}) \left( \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|} - \frac{1}{|\mathbf{r}_0|} \right) e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_0} \psi_1(\mathbf{r}) = \\ &= \frac{4\pi e^2}{q^2} \int d^3r \psi_2^*(\mathbf{r}) (-1 + e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}) \psi_1(\mathbf{r}) = \\ &= \frac{4\pi e^2}{q^2} \int d^3r \psi_2^*(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \psi_1(\mathbf{r}) \equiv \frac{4\pi e^2}{q^2} (e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}})_{21}, \end{aligned} \quad (18.32)$$

где  $\mathbf{q} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f$ . При выводе было использовано фурье-представление кулоновского потенциала и учтено условие ортогональности волновых функций  $\psi_2(\mathbf{r})$  и  $\psi_1(\mathbf{r})$ . Дельта-функция в (18.30) позволяет сразу же проинтегрировать по  $|\mathbf{p}_f|$ . Поскольку теперь

$$|\mathbf{p}_f| = \sqrt{\mathbf{p}_i^2 + 2m_e(\epsilon_1 - \epsilon_2)} \neq |\mathbf{p}_f|,$$

то для дифференциального сечения неупругого рассеяния вместо выражения (16.15) получается

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{|\mathbf{p}_f|}{|\mathbf{p}_i|} \left| \frac{m V_{fi}}{2\pi\hbar^2} \right|^2. \quad (18.33)$$

Полное сечение получится интегрированием с учетом выражения (18.17) и пределов интегрирования (18.18).

## 18.7 Задачи

1. Вывести формулу для дифференциального сечения рассеяния на малые углы в кулоновском поле в классической механике.
2. Вывести формулу для дифференциального сечения рассеяния на малые углы в поле  $U(r) = U_0 e^{-r/a}$  в классической механике. Оценить прицельное расстояние, начиная с которого нарушится применимость классической механики при рассеянии в этом поле.
3. Пластика меди толщиной 1 см ослабляет интенсивность пучка тепловых нейтронов в 2.7 раза. Найти сечение рассеяния таких нейтронов. Массовая плотность меди равна  $\rho_{\text{Cu}} = 8.96 \text{ г/см}^3$ .
4. Вычислить дифференциальное и полное сечение упругого рассеяния в потенциале Юкавы  $U(r) = \frac{g}{r} e^{-r/a}$  в борновском приближении.
5. Вычислить в борновском приближении дифференциальное и полное сечение упругого рассеяния в поле с потенциальной энергией 
$$U(r) = \begin{cases} U_0, & r \leq a, \\ 0, & r > a \end{cases}$$
6. Вычислить полное сечение упругого рассеяния быстрых электронов на атоме водорода, находящегося в основном состоянии.
7. Пусть заряд атомного ядра равен  $Ze$ . Вычислить формфактор и среднеквадратичный зарядовый радиус для пространственных распределений  $\rho(\mathbf{r}) = Ae^{-r/a}$  и  $\rho(\mathbf{r}) = A\theta(a - r)$ . Величину  $a$  считать заданным параметром, константу  $A$  определить из условия нормировки на полный заряд. Найти угловое распределение быстрых нерелятивистских электронов, рассеянных на ядре.
8. Вывести выражение для  $V_{fi}$  (18.32) и вычислить полное сечение неупругого рассеяния быстрых электронов с возбуждением атома водорода из состояния  $1s$  в  $2s$ .

# Литература

- [1] *Д. И. Блохинцев*, Основы квантовой механики.
- [2] Валиев К. А., Кокин А. А. Квантовые компьютеры: Надежды и реальность. М.-Ижевск: РХД, 2001.
- [3] Валиев К. А. Квантовые компьютеры и квантовые вычисления // Успехи физических наук. 2005. Т. 175. С. 3.
- [4] В. Гейзенберг. Физические принципы квантовой теории. РХД, Ижевск, 2002.
- [5] *Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц*, Квантовая механика. Нерелятивистская теория.
- [6] *Манин Ю. И.* Вычислимое и невычислимое. М.: Советское радио, 1980.
- [7] Фон Нейман. Математические основы квантовой механики. «Наука», 1964.
- [8] *Дж. Прескилл*, Квантовая информация и квантовые вычисления. Том 1 (2008) и том 2 (2011). РХД: Ижевск.
- [9] *Р. Фейнман, Р. Лейтон, М. Сэндс*, Фейнмановские лекции по физике вып. 8 и 9.
- [10] N. Gisin, R. Thew R. Quantum Communication. Nature Photonics. 2007. Vol. 1. P. 165. Электронный ресурс: arXiv:quant-ph/0703255.
- [11] P. V. Shor. Polynomial time algorithms for prime factorization and discrete logarithm on a quantum computer, SIAM Journal on computing, **26**, 1484 (1997). Электронный ресурс: arXiv:quant-ph/9508027.

- [12] L. K. Grover. Quantum mechanics helps in searching for a needle in a haystack, Physical Review Letters, **79**, 325 (1997).
- [13] C. Lavor, L. R. U. Manssur, R. Portugal, Shor's algorithm for factoring large integers. Электронный ресурс: arXiv:quant-ph/0303175.
- [14] Ladd T. D., Jelezko F., Laflamme R., et al. Quantum Computing // Nature. 2010. Vol. 464. P. 45. Электронный ресурс: arXiv:1009.2267.
- [15] Vandersypen L. M. K., Chuang I. L. NMR Techniques for Quantum Control and Computation // Reviews of Modern Physics. 2005. Vol. 76. P. 1037. Электронный ресурс: arXiv:quant-ph/0404064.
- [16] Jones J. A. Quantum Computing with NMR // Электронный ресурс: arXiv:1011.1382.
- [17] Elitzur A. C., Vaidman L. Quantum Mechanical Interaction-Free Measurements // Foundation of Physics. 1993. Vol. 23. P. 987. Электронный ресурс: arXiv:hep-th/9305002.
- [18] *Zeilinger A.* General properties of lossless beamsplitters in interferometry // American Journal of Physics. 1981. Vol. 49. P. 882.
- [19] *Degiorgio V.* Phase shift between the transmitted and the reflected optical fields of a semireflecting lossless mirror is  $\pi/2$  // American Journal of Physics. 1980. Vol. 48. P. 81.
- [20] *Ou Z. Y., Mandel L.* Derivation of reciprocity relations for a beamsplitter from energy balance // American Journal of Physics. 1980. Vol. 57. P. 66.