

# Квантовая механика – 1

(конспект лекций для студентов ФФ ВШЭ)

Я.В. Фоминов

Последнее редактирование: 14 июня 2022 г.

Этот текст — конспект (т.е. краткая запись) лекций.

Версия, выложенная на сайте <https://sites.google.com/view/qm1-hse>, может обновляться.

Используемые в тексте сокращения:

- в.ф. — волновая функция
- с.ф. — собственная функция
- с.з. — собственное значение
- УШ — уравнение Шрёдингера

## Оглавление

<b>Оглавление</b>	<b>1</b>
<b>1 Основные принципы квантовой механики.</b>	<b>4</b>
1.1 Как возникла квантовая механика.	4
1.2 «Правила игры» в квантовой механике.	5
1.3 Смена базиса: различные представления.	8
1.4 Непрерывный спектр.	8
1.5 Дираковские обозначения.	9
1.6 Одновременная измеримость величин и коммутация.	10
1.7 Предельный переход к классике.	10
1.8 Гамильтониан.	10
1.9 Производная оператора по времени.	11
1.10 Оператор импульса.	12
1.11 Уравнение Шрёдингера и зависимость волновых функций от времени.	13
1.12 Оператор эволюции и представление Гейзенберга.	13
1.13 Вариационный принцип.	14
1.14 Двухуровневая система.	15
1.15 Осцилляции Раби.	16
1.16 Запутанные состояния.	17
1.17 Проблема измерений в квантовой механике.	18

<b>2</b>	<b>Одномерное движение.</b>	<b>19</b>
2.1	Одномерное движение частицы.	19
2.2	Плотность потока.	21
2.3	Одномерное рассеяние.	21
2.3.1	Общее описание.	21
2.3.2	Подбарьерный случай.	22
2.3.3	Матрица рассеяния.	23
2.4	Обращение времени.	23
2.5	Квазистационарные состояния.	24
2.6	Соотношение неопределённости для энергии.	25
2.7	Движение в периодическом потенциале (теорема Блоха).	25
2.8	Гармонический осциллятор.	27
2.8.1	Осцилляторные единицы.	27
2.8.2	Дираковское решение.	27
2.8.3	Матрицы операторов в дираковском представлении.	29
2.8.4	Операторы рождения и уничтожения.	29
2.8.5	Решение в координатном представлении. Полиномы Эрмита.	29
2.8.5.1	Координатное представление из дираковского решения.	29
2.8.5.2	Координатное решение с самого начала.	30
2.9	Волновые пакеты.	31
2.10	Когерентные состояния.	32
2.11	Теорема Гельмана–Фейнмана.	33
2.12	Уравнения Эренфеста.	33
2.13	Теорема вириала.	33
<b>3</b>	<b>Квазиклассика.</b>	<b>34</b>
3.1	Волновая функция в квазиклассическом приближении.	34
3.2	Граничные условия.	35
3.3	Правило квантования Бора–Зоммерфельда.	37
3.4	Прохождение под барьером (туннелирование).	38
3.5	Надбарьерное отражение.	39
<b>4</b>	<b>Теория возмущений.</b>	<b>41</b>
4.1	Стационарная теория возмущений.	41
4.2	Стационарная теория возмущений: невырожденное собственное значение.	42
4.2.1	Первый порядок теории возмущений.	42
4.2.2	Второй порядок теории возмущений.	43
4.3	Стационарная теория возмущений: вырожденное собственное значение.	43
4.4	Нестационарная теория возмущений.	45
4.5	Вероятности переходов.	46
4.6	Периодическое возмущение.	46
4.7	Вероятность ионизации под действием периодического возмущения.	47
4.8	Золотое правило Ферми.	48
<b>5</b>	<b>Движение в центрально-симметричном поле.</b>	<b>49</b>
5.1	Момент импульса.	49
5.2	Собственные значения момента.	50
5.2.1	Собственные значения и функции оператора $\hat{l}_z$ .	50
5.2.2	Собственные значения оператора $\hat{l}^2$ .	51
5.2.3	Собственные функции оператора $\hat{l}^2$ .	52
5.3	Движение в центрально-симметричном поле.	52
5.4	Атом водорода.	54
<b>6</b>	<b>Спин.</b>	<b>56</b>
6.1	Спин как собственный момент импульса.	56
6.2	Оператор спина.	57
6.3	Сложение моментов.	59
<b>7</b>	<b>Частица в магнитном поле.</b>	<b>61</b>

7.1	Собственный магнитный момент. . . . .	61
7.2	Уравнение Шрёдингера для заряженной частицы во внешнем поле. . . . .	61
7.3	Плотность тока в магнитном поле. . . . .	63
7.4	Движение в магнитном поле. Уровни Ландау. — на семинаре . . . . .	64
<b>8</b>	<b>Парамагнитный резонанс. Адиабатика.</b>	<b>65</b>
8.1	Парамагнитный резонанс. . . . .	65
8.2	Адиабатическое приближение (в нестационарных задачах). . . . .	66
8.2.1	Адиабатическая теорема. . . . .	66
8.2.2	Условие применимости адиабатической теоремы и первая поправка. . . . .	67
8.3	Переходы Ландау–Зенера в адиабатическом приближении. — на семинаре . . . . .	68
8.4	Фаза Берри. . . . .	69
8.4.1	Общее решение. . . . .	69
8.4.2	Спин $1/2$ в медленно меняющемся магнитном поле. . . . .	70
8.5	Эффект Ааронова–Бома. . . . .	71
<b>9</b>	<b>Атом.</b>	<b>73</b>
9.1	Атом. . . . .	73
9.1.1	Атомные уровни энергии. . . . .	73
9.1.2	Правила Хунда. . . . .	74
9.2	Эффект Штарка. — на семинаре . . . . .	74
9.3	Эффект Зеемана. . . . .	75
9.3.1	Сложный эффект Зеемана (слабое магнитное поле). . . . .	75
9.3.2	Простой эффект Зеемана (относительно сильное магнитное поле). . . . .	76

# Глава 1

## Основные принципы квантовой механики.

### 1.1 Как возникла квантовая механика.

К началу XX века, по мере продвижения науки «вглубь» вещества, т.е. на всё более мелкие масштабы, стало ясно, что имеется ряд явлений, которые явно противоречат классической механике и электродинамике.<sup>1</sup> Наиболее вопиющее противоречие — само существование атомов. Согласно классической электродинамике, электроны, обращающиеся вокруг ядра, движутся с ускорением, поэтому должны излучать электромагнитные волны, терять энергию и падать на ядра. Тем не менее, атомы стабильны.

В основном, квантовая механика была построена в первые три десятилетия XX века. Несколько важных этапов:

- Гипотеза Планка (Макс Планк, 1900): при тепловом излучении энергия излучается и поглощается не непрерывно, а отдельными порциями (квантами), определяемыми частотой:  $E = \hbar\omega$ , где  $\hbar \approx 1.05 \cdot 10^{-27}$  эрг·с — постоянная Планка.
- Гипотеза Планка была использована Эйнштейном при построении теории фотоэффекта (Альберт Эйнштейн, 1905). Эйнштейн предположил, что свет состоит из квантов (эти кванты затем были названы фотонами).
- Теория атома Бора (Нильс Бор, 1913), совмещающая классические и квантовые идеи: атомы стабильны, если электроны находятся на некоторых выделенных («квантованных») орбитах.
- Идея де Бройля о двойственной природе вещества (Луи де Бройль, 1923): частицы обладают также и волновыми свойствами (корпускулярно-волновой дуализм). Это подтверждено опытами по дифракции электронов в кристаллах (также с квантовыми частицами можно проделать двухщелевой эксперимент аналогично опыту Юнга, которым была доказана волновая природа света).
- Шрёдингер и Гайзенберг — создание последовательной математической формулировки квантовой механики (Эрвин Шрёдингер, Вернер Гайзенберг, 1925–1926). Другое название квантовой механики — волновая механика.
- С аксиоматической точки зрения в квантовой механике имеются проблемы. Дело в том, что для построения квантовой механики приходится привлекать её предел — классическую механику. Это нужно, чтобы ввести понятие измерения. Измерение в квантовой механике — это взаимодействие с классическим объектом. Упрощённый пример: расставили механические детекторы, которые детектируют столкновения частицы с каким-либо из них. Тогда в результате этого столкновения оказывается, что частица, изначально размазанная во всём пространстве, была детектирована в конкретной точке — так и произошло измерение. В результате измерения исходное состояние частицы изменилось: раньше она была размазана везде, теперь находится в конкретной точке (этот процесс называется редукцией волновой функции; квантовая механика не объясняет во всех подробностях, как это происходит — это ещё одна логическая проблема теории). То есть измерение, вообще говоря, меняет состояние измеряемого квантового объекта. Важно понимать, что понятие измерения не обязательно подразумевает наличие наблюдателя — важно именно взаимодействие с классическим объектом (измерителем). Несмотря на такие проблемы с точки зрения аксиоматического построения квантовой механики и логическую незамкнутость, такая странная теория прекрасно работает и описывает экспериментальные результаты.
- Тем не менее, такой необычный характер теории приводил к жарким дискуссиям в процессе её создания. Например, был предложен знаменитый парадокс кота Шрёдингера (объяснение его связано с особой ролью измерения, которое происходит при переходе от квантовых к макроскопическим системам, но, как подчёркивалось

<sup>1</sup>Под классической механикой здесь имеется в виду как ньютонова, так и релятивистская механика. Классическая электродинамика тоже, конечно, учитывает релятивистские эффекты. Нас же сейчас интересуют эффекты, специфичные для частиц малой массы и происходящие на малых пространственных масштабах.

выше, само описание процесса измерения квантовая механика не даёт). Другой знаменитый парадокс — парадокс Эйнштейна–Подольского–Розена: можно сделать две частицы в едином квантовом «запутанном» состоянии, развести их и проделать изменение над первой из них. Этим мы изменим состояние первой частицы, но согласно квантовой механике это же изменит и состояние второй частицы, находящейся далеко. Замечательно, что хотя Эйнштейн с коллегами предложили этот мысленный эксперимент как некий абсурдный вывод, следующий из квантовой механики, в дальнейшем экспериментально было показано, что такой эффект действительно имеет место (в опыте с фотонами такое квантовое запутывание и взаимовлияние измеряли на расстоянии больше 140 км).

Типичный пример квантовой частицы — электрон, его масса  $m \approx 10^{-27}$  г (когда ниже мы будем говорить о квантовой частице, можно думать, что речь идёт об электроне). Типичный пример квантовой системы — атом (размер порядка ангстремов). Это просто примеры — квантовые эффекты могут возникать и для более массивных частиц, и на больших масштабах.

## 1.2 «Правила игры» в квантовой механике.

1. *Соотношение неопределённости.* В квантовой механике нет описания в терминах движения частицы по траектории. Такое описание означало бы задание в каждый момент времени координаты  $x$  и импульса  $p$  (в классической механике часто удобно говорить про координату и скорость, но в квантовой механике импульс оказывается более фундаментальной величиной). Соотношение неопределённости Гейзенберга говорит, что одновременно нельзя знать эти две величины точно. Как идеально мы ни сделали бы наши приборы, неопределённости в измерении координаты и импульса,  $\Delta x$  и  $\Delta p$ , должны подчиняться соотношению

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (1.1)$$

[чтобы писать определённый численный коэффициент в правой части формулы (1.1), нужно дать строгое определение величин  $\Delta x$  и  $\Delta p$  — мы это сделаем позже; без этого мы можем лишь сказать, что правая часть должна быть порядка  $\hbar$ ].

Вообще,  $\hbar$  — это «мера квантовости». В формулах можно переходить к классическому пределу, формально устремляя  $\hbar \rightarrow 0$ .

2. *Волновая функция.* Состояние квантовой частицы описывается комплекснозначной волновой функцией  $\Psi(x, t)$ . Вместо детерминистического описания (траектории в классической механике) у нас теперь описание лишь вероятностное — мы не можем сказать, где частица будет в определённый момент времени, можем лишь найти соответствующее распределение вероятности. Вероятность того, что в момент времени  $t$  частица будет находиться в интервале координат  $[x, x + dx]$ , равна

$$w_{x, x+dx}(t) = |\Psi(x, t)|^2 dx. \quad (1.2)$$

Иными словами  $|\Psi(x, t)|^2$  — это плотность вероятности пространственного распределения частицы в момент времени  $t$ . Частица может, в принципе, быть одновременно везде (с разной вероятностью).

3. *Нормировка.* Условие нормировки (для финитного движения, т.е. такого, при котором частица в основном живёт в конечной области пространства и не уходит на бесконечность — подробнее обсудим это чуть позже):

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1. \quad (1.3)$$

4. *Принцип суперпозиции:* если  $\Psi_1(x, t)$  и  $\Psi_2(x, t)$  — возможные состояния, в которых некоторая физическая величина имеет определённые значения  $A_1$  и  $A_2$  соответственно, то  $c_1\Psi_1(x, t) + c_2\Psi_2(x, t)$  — тоже возможное состояние ( $c_1$  и  $c_2$  — комплексные числа). В этом состоянии результат измерения  $A$  уже не предопределён — он может быть либо  $A_1$ , либо  $A_2$ . То есть квантовая частица может одновременно находиться в нескольких состояниях. Принцип суперпозиции является следствием линейности уравнений. Это похоже на суперпозицию волн в оптике и вообще в электродинамике: если две разные волны являются решением уравнений, то и их суперпозиция — тоже возможное решение. Из-за этого может возникать интерференция волн. В квантовой механике так возникает интерференция состояний.

5. *Операторы.*

- Каждой физической величине  $A$  ставится в соответствие линейный оператор  $\hat{A}$ . Вообще, оператор — это некоторое правило перевода одних функций в другие:  $\hat{A}\psi(x) = \varphi(x)$  (если мы зададим такое правило для всех исходных функций, то это и означает, что мы задали оператор).<sup>2</sup> Есть особый набор функций, которые решают задачу на собственные значения:

$$\hat{A}\psi_n(x) = A_n\psi_n(x). \quad (1.4)$$

Числа  $A_n$  называются собственными значениями (с.з.), а функции  $\psi_n(x)$  — собственными функциями (с.ф.) оператора. Полный набор собственных значений называется спектром оператора. Это всё совершенно аналогично матрицам.

- Действительно, на уравнение (1.4) можно смотреть как на матричное уравнение с непрерывным матричным индексом  $x$ . Обычные конечномерные векторы «живут» в евклидовом пространстве, а непрерывные функции — в так называемом гильбертовом пространстве. Вообще, гильбертово пространство — это обобщение евклидова пространства, допускающее бесконечную размерность.

Важной частью определения как евклидова, так и гильбертова пространства является задание скалярного произведения векторов. В евклидовом (вещественном) пространстве скалярное произведение определено стандартным образом: если  $\vec{u}$  и  $\vec{v}$  — векторы-столбцы, то их скалярное произведение есть  $\vec{u}^T \vec{v}$ . Если же рассмотреть комплексное пространство (в котором элементы векторов могут быть комплексными величинами), то для сохранения положительной определённости скалярного произведения его определение нужно обобщить следующим образом:

$$\vec{u}^\dagger \vec{v} = \sum_i u_i^* v_i, \quad (1.5)$$

где крест означает эрмитово сопряжение, определяемое как композиция транспонирования и комплексного сопряжения (в произвольном порядке):  $\dagger = T^* = *T$ . Скалярное произведение включает в себя суммирование по матричному индексу. Если же индекс становится непрерывным, то суммирование превращается в интегрирование. Поэтому в гильбертовом пространстве скалярное произведение функций  $u(x)$  и  $v(x)$  определяется как

$$\int u^*(x)v(x)dx. \quad (1.6)$$

- Таким образом, операторы, вообще говоря, аналогичны матрицам бесконечного размера. Поэтому и собственных значений, вообще говоря, бесконечное число. В результате спектр может быть дискретным, может быть непрерывным, а может содержать как дискретные значения, так и область непрерывных (тогда можно говорить о дискретной и непрерывной частях спектра).
- В квантовой механике собственные числа  $A_n$  — это допустимые значения величины  $A$ , т.е. допустимые результаты измерений. Они должны быть вещественны (т.к. все измеримые физические величины вещественны), поэтому (аналогично матрицам) оператор  $\hat{A}$  должен быть эрмитовым, т.е.

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A}, \quad (1.7)$$

где эрмитово сопряжение определяется так же, как и для матриц:  $\hat{A}^\dagger \equiv \hat{A}^{T*} = \hat{A}^{*T}$ .

- Комплексное сопряжение действует очевидным образом — меняет все знаки перед буквами  $i$ . А вот что такое транспонирование для операторов, нужно объяснять. Как определить, какой оператор равен транспонированному? Как вообще можно задать равенство двух операторов? В случае матриц мы просто сравниваем все матричные элементы. Если все они совпадают, то и матрицы совпадают. Матричный элемент (в обычном понимании) можно задать следующим образом. Пусть  $\vec{a}^{(n)}$  — это вектор-столбец, у которого элемент номер  $n$  равен 1, а все остальные элементы равны нулю («тривиальный» базис). Тогда матричный элемент матрицы можно записать как  $A_{nm} = \vec{a}^{(n)T} \hat{A} \vec{a}^{(m)} = \sum_{ij} a_i^{(n)} A_{ij} a_j^{(m)}$ . А если в качестве  $\vec{a}^{(n)}$  взять элементы произвольного базиса, то такие комбинации будут матричными элементами по отношению к этому базису.

В случае операторов определять равенство операторов мы будем через равенство всех их матричных элементов. Транспонированный оператор определяется следующим образом:  $\hat{A}^T$  — это такой оператор, для которого выполнено соотношение

$$\int \psi(x) \hat{A}^T \varphi(x) dx = \int \varphi(x) \hat{A} \psi(x) dx \quad (1.8)$$

для любых функций  $\psi(x)$  и  $\varphi(x)$  (оператор действует на всё, что стоит справа от него — если запомнить это правило, то скобки можно не писать). То есть транспонирование оператора переставляет обкладки. Это аналогично определению транспонированной матрицы (если записать матричные элементы с помощью тривиального базиса).

<sup>2</sup>Функции, зависящие только от координаты, мы здесь обозначаем маленькой греческой буквой. Можно считать, что это волновые функции в определённый момент времени.

6. *Ортонормированность.* Собственные функции эрмитова оператора, в отличие от собственных значений, не обязаны быть вещественными. В то же время, они обладают замечательным свойством: собственные функции, соответствующие различным собственным значениям, ортогональны. Кроме того, мы можем их нормировать, поэтому получается, что они образуют ортонормированную систему. Поскольку операторы аналогичны матрицам, функции аналогичны векторам. Для векторов ортонормированность можно выразить на языке скалярных произведений. Так же можно сделать и в случае собственных функций эрмитова оператора:

$$\int \psi_n^*(x) \psi_m(x) dx = \delta_{nm}. \quad (1.9)$$

7. *Полнота.* Кроме того, система собственных функций полна. Это значит, что любую (допустимую) функцию можно разложить по системе собственных функций:

$$\psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x), \quad (1.10)$$

где  $c_n$  — комплексные коэффициенты. То есть собственные функции эрмитова оператора образуют ортонормированный базис. Опять же, аналогия с линейной алгеброй.

В линейной алгебре коэффициенты разложения вектора по базису можно найти, скалярно домножив наш вектор на базисный. С функциями — аналогично:

$$c_n = \int \psi_n^*(x) \psi(x) dx. \quad (1.11)$$

Это соотношение прямо следует из формул (1.10) и (1.9).

8. *Вероятность.* Итак,  $n$  нумерует различные возможные состояния частицы. Частица может находиться в суперпозиции состояний, т.е. в нескольких состояниях одновременно. Но если мы захотим посмотреть, в каком состоянии она находится (провести измерение), то результатом будет некоторое конкретное состояние. Вот только исход такого измерения при заданной исходной волновой функции  $\psi(x)$ , вообще говоря, не задан — мы можем лишь сказать, каковы вероятности различных исходов:

$$w_n = |c_n|^2. \quad (1.12)$$

Если же функция является собственной для оператора физической величины, то тогда мы знаем результат с определённой — вероятность соответствующего исхода будет равна единице, а вероятности всех других исходов — нулю. В этом смысле такое квантовое состояние наиболее похоже на классическое.

9. *Квантовомеханическое среднее.* Далее, если мы сделаем много независимых измерений физической величины  $A$ , то должны получить следующее среднее:

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_n w_n A_n. \quad (1.13)$$

Легко проверить, что именно такой результат даёт формула

$$\langle \hat{A} \rangle = \int \psi^*(x) \hat{A} \psi(x) dx. \quad (1.14)$$

Что значит это среднее? Откуда берётся случайность? Из-за вероятностного характера квантовой механики. Поэтому это называется *квантовомеханическое среднее по состоянию  $\psi$* . Обратите внимание, что хотя запись (1.13) более наглядна, её реальное использование требует ряда нетривиальных шагов: нужно найти спектр оператора, всю систему его собственных функций, затем все коэффициенты разложения заданной функции  $\psi$  по собственным и, наконец, вычислить сумму (1.13). В то же время, согласно формуле (1.14), вместо всего этого достаточно вычислить один интеграл — при заданной функции это многократно проще.

Формулу (1.14) можно принять как определение оператора физической величины:  $\hat{A}$  определяем так, чтобы среднее для заданного квантовомеханического состояния давалось интегралом в правой части (это среднее — экспериментально измеримая величина).

### 1.3 Смена базиса: различные представления.

Собственные функции эрмитова оператора образуют базис. Но разных операторов много, значит, и базисов много. Пусть  $\chi_n(x)$  — некоторая полная ортонормированная система функций (базис). Тогда любую функцию мы можем разложить по этому базису:

$$\psi(x) = \sum_n a_n \chi_n(x), \quad (1.15)$$

т.е. вместо задания функции  $\psi(x)$  мы можем задать набор коэффициентов  $a_n$  (чтобы объяснить основную идею, рассматриваем простейший случай дискретного спектра, при этом базис может быть бесконечномерным). Таким образом, можем сопоставить

$$\psi(x) \mapsto \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (1.16)$$

В результате действия оператора получается

$$\hat{A}\psi(x) = \varphi(x) = \sum_n b_n \chi_n(x) \mapsto \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (1.17)$$

Таким образом, в этом представлении  $\hat{A}$  переводит один вектор в другой (размерности векторов совпадают), т.е. является матрицей (опять же, возможно, бесконечного размера). Найдём её:

$$b_n = \int \chi_n^*(x) \varphi(x) dx = \int \chi_n^*(x) \hat{A}\psi(x) dx = \sum_m \left( \int \chi_n^*(x) \hat{A}\chi_m(x) dx \right) a_m = \sum_m A_{nm} a_m, \quad (1.18)$$

где

$$A_{nm} = \int \chi_n^*(x) \hat{A}\chi_m(x) dx. \quad (1.19)$$

Поэтому оператор  $\hat{A}$  представляется матрицей с элементами  $A_{nm}$ .

Таким образом, мы перешли к другому *представлению*. В новом представлении мы записали как волновые функции, так и операторы.

Если в качестве базиса мы выберем набор собственных функций какого-либо оператора, то этот оператор в этом представлении будет диагонален — это прямо следует из формулы (1.19). Например, нашим основным представлением (с которого мы и начали) будет координатное представление, в котором волновые функции зависят от координаты, а действие оператора координаты тривиально — оно сводится просто к умножению на координату:  $\hat{x}\psi(x) = x\psi(x)$ . Действительно, поскольку плотность вероятности распределения частицы в пространстве есть  $|\psi(x)|^2$ , то среднее значение координаты равно<sup>3</sup>

$$\langle x \rangle = \int x |\psi(x)|^2 dx = \int \psi^*(x) x \psi(x) dx. \quad (1.20)$$

Если же в качестве  $\chi_n(x)$  взять набор собственных функций гамильтониана (оператора энергии), то переходя в этот базис, мы перейдём в *энергетическое представление*.

Если же взять собственные функции оператора импульса, то получим *импульсное представление*. Тут, правда, есть особенность — спектр оператора импульса непрерывен, а мы пока таких ситуаций избегали. Поэтому нужно отдельно сказать, что в этом случае особенного.

### 1.4 Непрерывный спектр.

Попросту говоря, при переходе от случая дискретного спектра к случаю непрерывного, суммирование по дискретному индексу превращаются в интегралы, а символ Кронекера — в дельта-функцию. Например, формула (1.10) для разложения по базису принимает вид

$$\psi(x) = \int c_A \psi_A(x) dA \quad (1.21)$$

<sup>3</sup>Пояснение про собственные функции оператора координаты. Они должны определяться из уравнения  $x\psi_{x_0}(x) = x_0\psi_{x_0}(x)$ , где  $x_0$  обозначает конкретное значение координаты (в то время как  $x$  — переменная). Собственные функции имеют вид  $\psi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0)$ . Коэффициенты разложения произвольной функции  $\psi(x)$  по собственным равны  $c_{x_0} = \int \psi_{x_0}^*(x) \psi(x) dx = \psi(x_0)$  — это и значит, что произвольная функция координат является волновой функцией в координатном представлении.



— здесь вместо дискретного индекса  $n$  мы использовали непрерывную переменную  $A$ , которая пробегает допустимые собственные значения.

Условие ортонормированности (1.9) теперь заменяется на

$$\int \psi_A^*(x) \psi_{A'}(x) dx = C \delta(A - A'). \quad (1.22)$$

Разные собственные функции по-прежнему ортогональны, но сами по себе собственные функции ненормируемы: интеграл квадрата модуля волновой функции в непрерывном спектре расходится (математически это связано с тем, что частица в непрерывном спектре может уходить на бесконечность, т.е. волновая функция на бесконечности не убывает по модулю). Правило обращения этого интеграла в бесконечность не задано — это означает, что выбор «нормировочной» константы  $C$  остаётся на наше усмотрение и может делаться из соображений удобства.

В случае же, когда имеется и область дискретного, и область непрерывного спектра, получаются комбинированные формулы. Например, вместо формул (1.10) и (1.21) будет

$$\psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x) + \int c_A \psi_A(x) dA, \quad (1.23)$$

где области суммирования по дискретному и интегрирования непрерывному спектру, конечно, должны быть различны.

## 1.5 Дираковские обозначения.

Добавим ещё один вариант обозначений нашего квантового состояния:

$$\psi(x) \mapsto \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \mapsto |\psi\rangle. \quad (1.24)$$

В последней записи мы использовали так называемый *дираковский кет-вектор*.

В интегралах с оператором слева от оператора у нас всегда стоит волновая функция со звездочкой. Ей соответствует

$$\psi^*(x) \mapsto (a_1^* \quad a_2^* \quad \dots) \mapsto \langle\psi|. \quad (1.25)$$

Последняя запись — это *дираковский бра-вектор* (названия получились при разделении слова bracket). Таким образом,

$$\langle\psi| = |\psi\rangle^\dagger. \quad (1.26)$$

Запишем некоторые из наших предыдущих формул в дираковских обозначениях (для простоты, в случае дискретного спектра):

- $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$  — ортонормированность,
- $|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$  и  $c_n = \langle n|\psi\rangle$  — разложение функции по базису,
- $\sum_n |n\rangle\langle n| = \hat{1}$  — соотношение полноты; каждое слагаемое здесь — это проектор  $\hat{P}_n = |n\rangle\langle n|$  на состояние номер  $n$  (по определению *проектор* — это оператор, который в любой степени даёт одно и то же; в нашем случае это действительно так, поскольку  $\hat{P}^2 = |n\rangle\langle n|n\rangle\langle n| = \hat{P}$ ),
- $\langle\hat{A}\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$  — среднее по квантовомеханическому состоянию.

Помимо сокращения обозначений ещё один важный смысл дираковских обозначений — «отвязка» от базиса (т.е. от представления). Когда мы пишем дираковский вектор  $|\psi\rangle$ , мы не подразумеваем какого-то конкретного представления, оно может быть любым. В этом смысле это похоже на векторы в геометрическом смысле в нашем обычном пространстве: если мы представляем себе вектор как направленный отрезок, мы не подразумеваем какой-то конкретной системы координат. Если же мы зададим систему координат, то вектору сопоставится набор чисел (координаты), но этот набор зависит от выбора системы координат (базисных векторов) — это уже конкретное представление. Но вектор существует и сам по себе, в геометрическом смысле. Так же и «векторы состояний»  $|\psi\rangle$ .

## 1.6 Одновременная измеримость величин и коммутация.

В квантовой механике описание состояния частицы принципиально вероятностное, но есть выделенные состояния — собственные. Если состояние  $|n\rangle$  является собственным для оператора  $\hat{A}$ , то говорят, что в этом состоянии величина  $A$  *измерима* (т.е. имеет определённое значение  $A_n$ ; другими словами, результат измерения этой величины однозначен). При этом какая-либо другая величина может не быть измеримой (т.е. результат измерения этой величины  $B$  можно предсказать только с определённой вероятностью).

Допустим, величины  $A$  и  $B$  одновременно измеримы. Это означает, что у них есть общая система собственных функций. Можем ли мы проверить одновременную измеримость двух величин, не находя собственные функции их операторов? Да, можем. Для этого рассмотрим результат действия произведения этих операторов на собственную функцию — этот результат не зависит от порядка операторов (это так только потому, что функция является собственной для обоих операторов):

$$\hat{A}\hat{B}|n\rangle = \hat{B}\hat{A}|n\rangle = A_n B_n |n\rangle. \quad (1.27)$$

Вводя определение *коммутатора* двух операторов,

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}, \quad (1.28)$$

можем сказать, что в нашем случае этот коммутатор равен нулю, т.к. действие коммутатора на любую собственную функцию равно нулю, а произвольная функция может быть разложена по собственным.

## 1.7 Предельный переход к классике.

Классическая механика — предельный случай квантовой. Этот предел соответствует тому, что вместо распространения волн (описываемых волновой функцией) возникает движение частицы по траектории (и пропадают интерференционные явления). Это напоминает переход от волновой оптики к геометрической (в которой свет распространяется по определённым траекториям). Поэтому можно попробовать представить себе этот переход по аналогии с оптикой.

В оптике компоненты поля в электромагнитной волне можно представить в виде амплитуды и фазы. Например, электрическое поле  $E = E_0 e^{i\varphi}$ . Геометрическая оптика соответствует тому, что фаза (её в оптике называют эйконалом) очень велика. Дело в том, что физически геометрическая оптика соответствует малым длинам волн  $\lambda$ , поэтому фаза очень быстро набирается и становится большой даже на небольших расстояниях.

Предположим, что в квантовой механике похожим образом ведёт себя волновая функция:

$$\Psi = |\Psi| e^{i\varphi}, \quad (1.29)$$

где амплитуда  $|\Psi|$  — медленная функция, а фаза велика и меняется быстро. В классической механике траектория определяется из условия экстремальности действия  $S$ . В геометрической оптике ход лучей определяется принципом Ферма — экстремальной должна быть оптическая длина пути. А оптическая длина пути есть набег фазы (эйконал). Поэтому мы ожидаем, что фаза волновой функции в классическом пределе пропорциональна действию. Коэффициент пропорциональности называется постоянной Планка (именно так формально вводится эта константа, имеющая размерность действия):

$$\varphi = \frac{S}{\hbar}. \quad (1.30)$$

Формально можно сказать, что переход к классической механике соответствует пределу  $\hbar \rightarrow 0$  аналогично тому, как переход к геометрической оптике соответствует пределу  $\lambda \rightarrow 0$ .

Квантовомеханические операторы в классическом пределе должны сводиться просто к умножению на соответствующую физическую величину.

## 1.8 Гамильтониан.

В классической механике для полного описания движения частицы достаточно задать координату  $x(t_0)$  и скорость  $v(t_0)$  в некоторый момент времени  $t_0$ . Дальнейшее движение частицы полностью определяется уравнениями. В квантовой механике вместо координаты и скорости мы имеем волновую функцию. Мы бы хотели, чтобы задание этой функции  $\Psi(x, t_0)$  в некоторый момент времени определяло (через уравнения) поведение частицы во все последующие моменты времени (естественно, в том вероятностном смысле, который допускает квантовая механика) — это можно считать одним из постулатов квантовой механики. Математически это означает, что задание функции в некоторый момент времени задаёт и её производную  $\partial\Psi/\partial t$  в этот же момент, причём она должна линейно зависеть от самой  $\Psi$  (именно тогда будет справедлив принцип суперпозиции). Из этих соображений можно написать

$$i\hbar \frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi, \quad (1.31)$$

где  $\hat{H}$  — некоторый линейный оператор (а множитель  $i\hbar$  мы здесь выделили для дальнейшего удобства).

Интеграл  $\int |\Psi|^2 dx$  не зависит от времени, поэтому

$$\frac{\partial}{\partial t} \int |\Psi|^2 dx = \int \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi dx + \int \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} dx = 0. \quad (1.32)$$

Выражая здесь производную с помощью формулы (1.31) и переходя в первом интеграле к транспонированному оператору, получаем

$$\frac{i}{\hbar} \int (\hat{H}^* \Psi^*) \Psi dx - \frac{i}{\hbar} \int \Psi^* (\hat{H} \Psi) dx = 0 \quad \Rightarrow \quad \int \Psi^* \hat{H}^{*T} \Psi dx - \int \Psi^* \hat{H} \Psi dx = 0. \quad (1.33)$$

Это соотношение должно быть выполнено для произвольных функций, поэтому оператор  $\hat{H}$  должен быть эрмитовым:

$$\hat{H}^\dagger = \hat{H}. \quad (1.34)$$

Какой же физической величине он соответствует? Для выяснения этого воспользуемся предельным выражением (1.29) для волновой функции при переходе к классике. При вычислении производной по времени основной вклад будет от дифференцирования быстрой фазы, поэтому

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial t} \Psi. \quad (1.35)$$

Сравнивая с формулой (1.31), видим, что в классическом пределе  $\hat{H} = -\partial S / \partial t$ . Как и должно быть в классическом пределе, действие оператора сводится к умножению на соответствующую величину, а из классической механики мы знаем, что эта величина есть функция Гамильтона. Таким образом, оператор  $\hat{H}$  в квантовой механике соответствует функции Гамильтона, т.е. полной энергии. Уравнение (1.31) называют волновым уравнением (после выяснения явной операторной формы гамильтониана мы будем называть его уравнением Шрёдингера).

## 1.9 Производная оператора по времени.

Прямолинейное определение производной физической величины по времени в квантовой механике невозможно. Величины, вообще говоря, не имеют определённых значений, и даже если в некоторый момент времени некоторая величина имеет определённое значение, в следующий момент её значение уже не будет определено. Поэтому у отношения  $(A(t + \Delta t) - A(t)) / \Delta t$  не будет определённого предела.

Это означает, что понятие производной по времени в квантовой механике нужно определять иначе (естественно, сохраняя при этом связь с привычным классическим определением). Физической величине соответствует оператор, её производной по времени тоже соответствует оператор. Естественно определить этот последний так, чтобы его среднее значение было равно производной по времени от среднего значения исходного оператора:

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle. \quad (1.36)$$

Это условие позволяет прямолинейно найти интересующий нас оператор  $\hat{A}$ . Раскрывая производную в правой части с помощью волнового уравнения (1.31) и пользуясь эрмитовостью  $\hat{H}$ , получаем:

$$\langle \hat{A} \rangle = \int \Psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \Psi dx + \int \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \hat{A} \Psi dx + \int \Psi^* \hat{A} \frac{\partial \Psi}{\partial t} dx = \int \Psi^* \left( \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{A} - \frac{i}{\hbar} \hat{A} \hat{H} \right) \Psi dx, \quad (1.37)$$

поэтому<sup>4</sup>

$$\hat{A} = \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}]. \quad (1.38)$$

Если оператор  $\hat{A}$  явно от времени не зависит и при этом коммутирует с гамильтонианом, то  $\hat{A} = 0$ , поэтому среднее  $\langle \hat{A} \rangle$  во времени не меняется. В этом смысле  $A$  — сохраняющаяся величина. Если эта величина имеет определённое значение (т.е. волновая функция является собственной для оператора  $\hat{A}$ ), то это значение сохранится во все последующие моменты времени.

Сохраняющиеся величины характеризуют квантовое состояние системы и называются *хорошими квантовыми числами*. Например, если  $\hat{H}$  не зависит от времени, то  $\hat{H} = 0$ , и энергия является хорошим квантовым числом.

<sup>4</sup>Вспоминая формулы классической механики, видим, что комбинация  $(i/\hbar)[\hat{H}, \hat{A}]$  в классическом пределе переходит в скобку Пуассона  $\{H, A\}$ .

### 1.10 Оператор импульса.

Рассмотрим замкнутую систему частиц, внешних воздействий на эту систему нет. При параллельном переносе энергия такой системы не меняется. Энергии соответствует оператор  $\hat{H}$ , называемый гамильтонианом. Значит, гамильтониан не меняется при произвольном параллельном переносе. Чтобы это было так, достаточно потребовать инвариантности гамильтониана для любого бесконечно малого смещения. Если  $\mathbf{r}_a$  — координаты наших частиц (индекс  $a$  нумерует их), то при бесконечно малом смещении все они меняются на одну и ту же величину:  $\mathbf{r}_a \mapsto \mathbf{r}_a + \delta\mathbf{r}$ . Волновая функция переходит в

$$\psi(\mathbf{r}_1 + \delta\mathbf{r}, \mathbf{r}_2 + \delta\mathbf{r}, \dots) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots) + \delta\mathbf{r} \sum_a \nabla_a \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots) = \left(1 + \delta\mathbf{r} \sum_a \nabla_a\right) \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots). \quad (1.39)$$

Таким образом, выражение в скобках есть оператор бесконечно малого смещения  $\hat{T}_{\delta\mathbf{r}}$ .

Если некоторое преобразование  $\hat{O}$  не меняет гамильтониан, то это означает, что гамильтониан можно «вынести» из-под действия этого преобразования:

$$\hat{O}(\hat{H}\psi) = \hat{H}(\hat{O}\psi), \quad (1.40)$$

то есть<sup>5</sup>

$$[\hat{O}, \hat{H}] = 0. \quad (1.41)$$

В нашем случае это сводится к соотношению

$$[(\sum_a \nabla_a), \hat{H}] = 0. \quad (1.42)$$

Это означает, что величина, стоящая на первом месте в коммутаторе, сохраняется. С другой стороны, физически мы понимаем, что величина, сохранение которой для замкнутой системы следует из однородности пространства, есть импульс системы. Таким образом, закон сохранения, который выражает собой формула (1.42), по сути должен быть законом сохранения импульса. То есть с точностью до постоянного множителя оператор  $\sum_a \nabla_a$  должен быть равен оператору импульса системы, а каждый из членов суммы — оператору импульса отдельной частицы.

Коэффициент пропорциональности можно найти, рассмотрев переход к классической механике, при этом оказывается

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla. \quad (1.43)$$

Действительно, воспользовавшись соответствующей формулой (1.29) для волновой функции, получаем:

$$\hat{\mathbf{p}}\Psi = -i\hbar \frac{i}{\hbar} \Psi \nabla S = \Psi \nabla S, \quad (1.44)$$

а в классике  $\nabla S$  и есть импульс частицы (если мы рассматриваем действие как функцию координаты в момент времени  $t_2$  для траекторий, начинающихся из заданной точки в момент времени  $t_1$ ).

Векторный оператор импульса — это совокупность трёх скалярных операторов:

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}, \quad (1.45)$$

которые все коммутируют друг с другом:

$$[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0, \quad (1.46)$$

поэтому все три компоненты импульса могут одновременно иметь определённые значения (вообще говоря, так не всегда бывает с векторными операторами).

Для коммутатора импульса и одноимённой координаты находим

$$[\hat{p}_x, x] = -i\hbar, \quad (1.47)$$

откуда можно вывести соотношение неопределённости (1.1) (это будет сделано на семинаре).

<sup>5</sup>Здесь мы встречаемся с важным общим результатом: если у гамильтониана есть симметрия, то у него и оператора этой симметрии — общая система собственных функций. Поэтому с.ф. гамильтониана можно искать в том виде, который имеют с.ф. оператора симметрии (эти последние обычно проще найти).

### 1.11 Уравнение Шрёдингера и зависимость волновых функций от времени.

Мы уже выяснили, что в квантовой механике оператор  $\hat{H}$ , определяющий временную эволюцию волновой функции согласно уравнению

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H}|\Psi(t)\rangle, \quad (1.48)$$

соответствует функции Гамильтона, т.е. полной энергии. Это уравнение называют уравнением Шрёдингера (или временным уравнением Шрёдингера), а уравнение на собственные значения гамильтониана

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle \quad (1.49)$$

называют стационарным уравнением Шрёдингера.

Пусть гамильтониан не зависит от времени, и мы нашли некоторую собственную функцию  $|n\rangle$ . Тогда, во-первых, из-за линейности уравнения ясно, что она всегда может быть домножена на общий фазовый множитель. Эту фазу можно выбирать как нам нравится — ни в каких физических величинах она не проявится.

Во-вторых, легко сообразить, какой будет зависимость полной волновой функции от времени:

$$|\Psi_n(t)\rangle = e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}|n\rangle. \quad (1.50)$$

То есть зависимость от времени для собственной функции гамильтониана — это просто фазовый множитель. В каждый фиксированный момент времени он не влияет ни на какую физическую величину. Именно поэтому собственные состояния гамильтониана называют *стационарными* — хотя волновые функции от времени зависят (только через фазовый множитель), физические величины — не зависят. Если же мы будем изучать какую-то величину, для которой существенно знание состояния в разные моменты времени, тогда фаза проявится нетривиальным образом.

- Простой пример — движение свободной частицы в пространстве. Оператор полной энергии есть  $\hat{H} = \hat{\mathbf{p}}^2/2m$ , и решение стационарного уравнения Шрёдингера имеет вид

$$|\mathbf{p}\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\mathbf{r}}, \quad p = \sqrt{2mE}. \quad (1.51)$$

Это собственные функции оператора импульса, что неудивительно, т.к. в отсутствие потенциала система трансляционно инвариантна, импульс сохраняется ( $[\hat{H}, \hat{\mathbf{p}}] = 0$ ), поэтому у  $\hat{H}$  и  $\hat{\mathbf{p}}$  общая система собственных функций. Решение (1.51), конечное во всем пространстве, существует при любой положительной энергии (при  $E < 0$  оно не будет везде конечным). Полное решение уравнения Шрёдингера имеет вид плоской волны:

$$|\Psi_{\mathbf{p}}(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \mathbf{p}\mathbf{r})}, \quad E = \frac{p^2}{2m}. \quad (1.52)$$

Энергетический спектр непрерывен и расположен от нуля до  $+\infty$ . Каждое значение энергии (кроме  $E = 0$ ) вырождено с бесконечной кратностью (т.к. при заданной величине направление  $\mathbf{p}$  может быть произвольным).

Наконец, зная все собственные функции гамильтониана, мы можем ответить на вопрос, как зависит от времени произвольная функция, заданная при  $t = 0$ . Нужно эту функцию разложить по собственным:

$$|\Psi(0)\rangle = \sum_n c_n |n\rangle, \quad (1.53)$$

а как зависит от времени каждое слагаемое, мы уже знаем. В результате

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} |n\rangle. \quad (1.54)$$

### 1.12 Оператор эволюции и представление Гейзенберга.

Если гамильтониан не содержит явной зависимости от времени, то временное уравнение Шрёдингера (1.48) может быть формально решено следующим образом:

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}|\Psi(0)\rangle, \quad (1.55)$$

где

$$\hat{U} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) \quad (1.56)$$

называется оператором эволюции. Это унитарный оператор,

$$\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{U} \hat{U}^\dagger = 1, \quad (1.57)$$

поэтому говорят, что эволюция в квантовой механике унитарна. Унитарность означает сохранение нормировки: если состояние меняется как  $|\Psi\rangle \mapsto \hat{U}|\Psi\rangle$ , то нормировка переходит в

$$\langle \Psi | \hat{U}^\dagger \hat{U} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \Psi \rangle, \quad (1.58)$$

т.е. не меняется.

Если рассмотреть среднее физической величины (оператор которой не зависит от времени) как функцию времени, его можно записать по-разному:

$$\langle A(t) \rangle = \langle \Psi(t) | \hat{A} | \Psi(t) \rangle = \langle \Psi(0) | \hat{U}^\dagger(t) \hat{A} \hat{U}(t) | \Psi(0) \rangle = \langle \Psi(0) | \hat{A}(t) | \Psi(0) \rangle \quad (1.59)$$

— здесь в последней записи мы определили зависящий от времени оператор

$$\hat{A}(t) = \hat{U}^\dagger(t) \hat{A} \hat{U}(t) = \hat{U}^{-1}(t) \hat{A} \hat{U}(t). \quad (1.60)$$

То есть мы перенесли зависимость от времени на оператор, а волновые функции от времени на зависят.

Такое представление, в котором волновые функции от времени не зависят, а зависимость от времени перенесена на операторы, называется гайзенберговским. А наше изначальное представление, в котором волновые функции зависят от времени, а операторы — нет, называется шрёдингеровским. Какое из них использовать — вопрос удобства. Для гамильтониана шрёдингеровское и гайзенберговское представление совпадают. Вообще, они совпадают для любой сохраняющейся величины (т.к. оператор такой величины коммутирует с гамильтонианом). Средние в таком случае не зависят от времени (это и означает, что величина сохраняется).

В любом случае, зависимость от времени матричных элементов оператора по волновым функциям стационарных состояний имеет вид

$$A_{nm}(t) = A_{nm} e^{i\omega_{nm}t}, \quad (1.61)$$

где

$$\omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar} \quad (1.62)$$

есть частота перехода между состояниями  $n$  и  $m$ .

Продифференцировав определение гайзенберговского оператора (1.60) по времени (и предполагая, что сами  $\hat{A}$  и  $\hat{H}$  от времени не зависят), получаем уравнение

$$\frac{d\hat{A}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}(t)]. \quad (1.63)$$

По форме записи это очень похоже на формулу (1.38), но смысл другой: там было определение оператора, соответствующего производной от времени физической величины, а здесь в левой части стоит производная самого оператора физической величины. То есть мы получили уравнение, которому удовлетворяет гайзенберговский оператор [технически может оказаться, что решить уравнение (1.63) проще, чем явно вычислять гайзенберговский оператор по определению (1.60)].

### 1.13 Вариационный принцип.

Стационарное уравнение Шрёдингера  $\hat{H}\psi = E\psi$  можно представлять себе результатом применения вариационного принципа

$$\delta \int \psi^* (\hat{H} - E) \psi dx = 0. \quad (1.64)$$

Поскольку функция  $\psi$  комплексна, варьировать нужно по двум независимым вещественным функциям. Удобнее всего брать в качестве независимых функций  $\psi$  и  $\psi^*$ . Варьируя по  $\psi^*$ , сразу получаем УШ. Варьируя по  $\psi$  и воспользовавшись эрмитовостью  $\hat{H}$ , получаем

$$0 = \int \psi^* (\hat{H} - E) \delta\psi dx = \int \delta\psi (\hat{H}^* - E) \psi^* dx, \quad (1.65)$$

что даёт комплексно сопряжённое уравнение  $\hat{H}^* \psi^* = E\psi^*$ , т.е. не даёт ничего нового.

Другой способ записи вариационного принципа для стационарного УШ — в виде задачи об условном экстремуме. Мы можем сказать, что требуется найти следующий экстремум:

$$\delta \int \psi^* \hat{H} \psi dx = 0 \quad (1.66)$$

при условии  $\int \psi^* \psi dx = 1$ . Тогда  $E$  — это множитель Лагранжа. Минимальное (при этом условии) значение интеграла, входящего в уравнение (1.66), есть энергия основного состояния  $E_0$ , а функция, при которой этот минимум достигается — в.ф. основного состояния.

Вариационная формулировка может быть полезна, в частности, для вывода некоторых общих соотношений (например, осцилляционной теоремы) и для приближённого нахождения основного состояния в некотором выбранном классе функций. К возбуждённым состояниям метод тоже применим (после приближённого нахождения в.ф. основного состояния дальше надо рассматривать подпространство функций, ортогональных найденной), хотя его точность падает. Пример непосредственного наглядного следствия из вариационного принципа связан с движением в ограниченной области пространства и поведением основного уровня энергии при увеличении размера этой области. При этом возможных функций становится только больше, поэтому минимум интеграла (соответствующий энергии основного состояния) может стать только глубже.

### 1.14 Двухуровневая система.

Одной из простейших квантовых систем является двухуровневая система. Это система, в которой есть всего два собственных состояния гамильтониана (т.е. базис гильбертова пространства образован всего двумя состояниями). Такое может быть для определённых степеней свободы квантовых частиц (например, такой степенью свободы является спин электрона, поэтому если мы интересуемся поведением спина электрона, то имеем дело с двухуровневой системой). Или же в более сложной системе при определённых параметрах задачи может оказаться, что хотя уровней больше, но существенную роль играют только два, а про остальные можно забыть. Например, есть два низколежащих уровня энергии, а все остальные сильно выше. Тогда при достаточно низких температурах можно пренебречь всеми уровнями кроме двух нижних.

Помимо того, что двухуровневые системы сами по себе встречаются во многих физических задачах, особый интерес к ним связан с квантовыми вычислениями и квантовым компьютером. Квантовый бит (кубит) — это не что иное, как двухуровневая система (и разные физические реализации квантовых битов — это различные реализации двухуровневых систем). Два состояния  $|0\rangle$  и  $|1\rangle$  — это два состояния бита. В классике система может быть либо в одном состоянии, либо в другом. В квантовой механике возможна также их суперпозиция — на этом основано всё направление, связанное с квантовыми вычислениями.

Гамильтониан двухуровневой системы всегда может быть приведен к матричному виду

$$\hat{H}_0 = \begin{pmatrix} E_0 + \Delta & 0 \\ 0 & E_0 - \Delta \end{pmatrix}, \quad (1.67)$$

где  $E_0$  и  $\Delta$  — вещественные величины. Такого (диагонального) вида всегда можно добиться, выбрав в качестве базиса собственные состояния гамильтониана (т.е. в энергетическом представлении — вспомним, что в своём собственном представлении любой оператор диагонален, и на диагонали стоят собственные значения). Собственные состояния очень просты:

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (1.68)$$

Пусть теперь мы этот базис зафиксировали, а гамильтониан изменим — добавим к нему недиагональные элементы:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 + \Delta & W e^{i\chi} \\ W e^{-i\chi} & E_0 - \Delta \end{pmatrix} \quad (1.69)$$

(здесь  $W > 0$ , а  $\chi$  вещественно) — это вообще самый общий вид эрмитовой матрицы  $2 \times 2$ . Состояния (1.68) уже не являются собственными, недиагональные элементы их «перемешивают» (эти элементы  $H_{01} = \langle 0 | \hat{H} | 1 \rangle = W e^{i\chi}$  и  $H_{10} = \langle 1 | \hat{H} | 0 \rangle = H_{01}^*$  — буквально матричные элементы перехода между состояниями  $|0\rangle$  и  $|1\rangle$ ). Уровни энергии легко найти:

$$E_{\pm} = E_0 \pm \sqrt{\Delta^2 + W^2}. \quad (1.70)$$

Обратите внимание, что если  $\Delta = 0$  (т.е. исходный гамильтониан имел двукратно вырожденный уровень  $E_0$ ), то недиагональные элементы «снимают» это вырождение, и получаются два разных уровня (уровни расщепляются).

Именно такая ситуация имеет место в задаче о связанных состояниях в потенциале двух дельта-ям или в молекуле аммиака.<sup>6</sup>

Собственные состояния гамильтониана (1.69) ищем в виде

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, \quad (1.71)$$

получаем соотношение между компонентами [чередующиеся знаки соответствуют порядку чередования в (1.70)]:

$$b = \frac{\pm\sqrt{\Delta^2 + W^2} - \Delta}{We^{i\chi}} a = \left( \frac{\pm 1 - \cos \alpha}{\sin \alpha} \right) e^{-i\chi} a, \quad (1.72)$$

где в последней записи мы использовали удобные обозначения через вспомогательный «угол»  $\alpha$ , определённый согласно

$$\sin \alpha = \frac{W}{\sqrt{\Delta^2 + W^2}}, \quad \cos \alpha = \frac{\Delta}{\sqrt{\Delta^2 + W^2}}. \quad (1.73)$$

С учетом условия нормировки  $|a|^2 + |b|^2 = 1$  находим нормированные с.ф.:

$$|\psi_+\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\alpha}{2} \\ e^{-i\chi} \sin \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix}, \quad |\psi_-\rangle = \begin{pmatrix} \sin \frac{\alpha}{2} \\ -e^{-i\chi} \cos \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix}. \quad (1.74)$$

Эти с.ф. ортогональны, как и должно быть для с.ф., соответствующих разным собственным значениям:  $\langle \psi_- | \psi_+ \rangle = 0$ .

### 1.15 Осцилляции Раби.

Поставим следующую физическую задачу. Пусть система описывается гамильтонианом (1.69) и при  $t = 0$  находится в состоянии  $|\psi(0)\rangle = |0\rangle$ . Какова вероятность  $P_1(t)$  обнаружить систему в состоянии  $|1\rangle$  в произвольный момент времени  $t$ ?

Чтобы ответить на этот вопрос, найдём эволюцию нашего исходного состояния. Для этого разложим его по собственным состояниям гамильтониана:

$$|\psi(0)\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = c_+ |\psi_+\rangle + c_- |\psi_-\rangle. \quad (1.75)$$

Коэффициенты находятся следующим образом:

$$c_+ = \langle \psi_+ | \psi(0) \rangle = \cos \frac{\alpha}{2}, \quad c_- = \langle \psi_- | \psi(0) \rangle = \sin \frac{\alpha}{2}, \quad (1.76)$$

поэтому зависимость нашего состояния от времени имеет вид

$$|\psi(t)\rangle = \cos \frac{\alpha}{2} e^{-\frac{i}{\hbar} E_+ t} |\psi_+\rangle + \sin \frac{\alpha}{2} e^{-\frac{i}{\hbar} E_- t} |\psi_-\rangle. \quad (1.77)$$

Амплитуда состояния  $|1\rangle$  — это нижний элемент этого вектора-столбца, а вероятность — квадрат его модуля:

$$P_1(t) = \left| e^{-i\chi} \sin \frac{\alpha}{2} e^{-\frac{i}{\hbar} E_+ t} \cos \frac{\alpha}{2} - e^{-i\chi} \cos \frac{\alpha}{2} e^{-\frac{i}{\hbar} E_- t} \sin \frac{\alpha}{2} \right|^2 = \frac{\sin^2 \alpha}{4} \left| e^{-\frac{i}{\hbar} E_+ t} - e^{-\frac{i}{\hbar} E_- t} \right|^2 = \sin^2 \alpha \sin^2 \left( \frac{E_+ - E_-}{2\hbar} t \right). \quad (1.78)$$

Вводя обозначение

$$\Omega = \frac{2\sqrt{\Delta^2 + W^2}}{\hbar}, \quad (1.79)$$

можем записать результат в виде

$$P_1(t) = \frac{W^2}{\Delta^2 + W^2} \sin^2 \left( \frac{\Omega t}{2} \right). \quad (1.80)$$

Вероятность же остаться в состоянии  $|0\rangle$  равна  $P_0(t) = 1 - P_1(t)$ .

Таким образом, частицу можно обнаружить как в состоянии  $|0\rangle$ , так и в состоянии  $|1\rangle$ , причём вероятности оказываются периодическими функциями времени. Это называется *осцилляциями Раби* [Исидор Раби, Нобелевская премия по физике 1944]. Частота  $\Omega$  этих осцилляций называется частотой Раби.

<sup>6</sup>В молекуле аммиака  $\text{NH}_3$  три атома водорода находятся в основании тетраэдра, а атом азота — в вершине. Но для него есть две возможности — с одной или другой стороны от плоскости основания. Эти два состояния в главном приближении вырождены по энергии. Однако вырождение снимается, если учесть туннелирование, т.е. возможность квантового перехода между состояниями.



Мы рассмотрели осцилляции Раби в простейшем случае, когда «перемешивающее» воздействие (недиагональные элементы гамильтониана) постоянно во времени. Можно решить и более общую задачу, когда это воздействие имеет определённую частоту — формулы изменятся, но общий результат о периодическом изменении вероятности нахождения частицы на определённом уровне сохранится. Именно такая ситуация важна, например, в контексте кубитов. Осцилляции Раби можно использовать для того, чтобы «приготовить» кубит в нужном состоянии, подавая сигнал определённой длительности. Подбирая длительность импульса, можно приводить кубит в состояния, описываемые различными суперпозициями  $|0\rangle$  и  $|1\rangle$ .

Осцилляции Раби также имеют место в уже упоминавшейся молекуле аммиака, что может быть использовано для создания аммиачного лазера (как лазер, но не для света, а для микроволн) [Таунс, Басов и Прохоров, Нобелевская премия по физике 1964].

## 1.16 Запутанные состояния.

Рассмотрим две квантовые частицы (системы)  $A$  и  $B$ . Если первая находится в состоянии  $|\psi\rangle_A$ , а вторая — в состоянии  $|\varphi\rangle_B$ , то в целом состояние такой системы есть<sup>7</sup>

$$|\Psi\rangle_{AB} = |\psi\rangle_A |\varphi\rangle_B. \quad (1.81)$$

Состояния, имеющие такой вид в составной системе, называются *разложимыми*. Физически разложимые состояния соответствуют тому, что частицы  $A$  и  $B$  совершенно независимы друг от друга (например, если мы будем изучать какую-то физическую величину для частицы  $A$ , то результат не зависит от того, в каком состоянии находится частица  $B$  — две частицы ничего не знают друг о друге).

Наиболее общее состояние (выберем для двух систем базисы  $\{|n\rangle_A\}$  и  $\{|m\rangle_B\}$ ) имеет вид

$$|\Psi\rangle_{AB} = \sum_{n,m} c_{nm} |n\rangle_A |m\rangle_B \quad (1.82)$$

и разложимым не является. Состояние, не являющееся разложимым, называют *запутанным*. Простой пример запутанного состояния:

$$\frac{|0\rangle_A |1\rangle_B + |1\rangle_A |0\rangle_B}{\sqrt{2}}. \quad (1.83)$$

А, например, состояние

$$\frac{(|0\rangle_A + |1\rangle_A)(|0\rangle_B + |1\rangle_B)}{2} \quad (1.84)$$

относится к типу (1.81) и запутанным не является.

Если мы интересуемся подсистемой  $A$ , и её состояние запутано (с другой подсистемой), то сложность этой ситуации в том, что сама по себе подсистема  $A$  не описывается волновой функцией. То есть, в дополнение к уже привычной нам квантовомеханической неопределённости (которая описывается волновой функцией) возникает дополнительная неопределённость, связанная с тем, что состояние нашей подсистемы зависит от того, в каком состоянии находится другая подсистема.

Состояния, которые могут быть описаны волновой функцией, называются *чистыми* (у нас есть полная максимально возможная квантовомеханическая информация о них). Состояние частицы  $A$  для случая волновой функции полной системы вида (1.81) — чистое [например, (1.84)].

Запутанные состояния *в целом* описываются волновой функцией, но для каждой отдельной частицы — нет. Например, состояние частицы  $A$  для случая волновой функции полной системы вида (1.83) нельзя описать своей отдельной волновой функцией, и оно называется *смешанным*. Вместо волновой функции смешанные состояния описываются более сложным способом с помощью матрицы плотности (это будет обсуждаться во второй части курса).

Подведём итог. Состояние всей системы в целом может быть разложимым, тогда каждая подсистема находится в чистом состоянии, которое может быть описано волновой функцией. Если же состояние всей системы в целом является запутанным, то подсистемы находятся в смешанных состояниях, и эти состояния волновыми функциями не описываются (а описываются на языке матрицы плотности).

<sup>7</sup>На самом деле, поскольку эти состояния — из разных гильбертовых пространств, то должно быть не просто произведение, а так называемое тензорное произведение, которое живёт в тензорном произведении гильбертовых пространств. Но для краткости мы будем писать тензорное произведение так же, как обычное.

### 1.17 Проблема измерений в квантовой механике.

Мы уже обсуждали в самом начале особую роль измерения в квантовой механике. Как же этот процесс выглядит на языке формул? Можно сказать, что это случайный процесс, который происходит мгновенно. Результат измерения физической величины — это одно из её собственных значений, а волновая функция при этом мгновенно превращается в соответствующую с.ф.:

$$\sum_n c_n |n\rangle \mapsto |k\rangle. \quad (1.85)$$

Это называется редукцией волновой функции (редукция фон Неймана). Математически особенность этого процесса в том, что он неунитарный, в отличие от квантовой эволюции. Хотя нормировка сохраняется, неунитарность ясна, например, из того, что для такого преобразования отсутствует обратный оператор.

Предположим, что у нас имеется запутанное состояние двух частиц (1.83). Пусть есть два наблюдателя (в квантовой информатике их любят называть Алисой и Бобом), каждый из которых наблюдает за своей частицей. Пусть Алиса измерила состояние частицы  $A$ . У этого измерения есть два равновероятных исхода:

1. Алиса получила 0, и состояние системы редуцировалось в  $|0\rangle_A |1\rangle_B$ .
2. Алиса получила 1, и состояние системы редуцировалось в  $|1\rangle_A |0\rangle_B$ .

Если теперь Боб измерит состояние своей системы  $B$ , то в первом случае он всегда получит 1. Во втором случае он с единичной вероятностью получит 0. Поэтому, хотя Алиса измеряла только свою систему, она при этом повлияла на состояние системы Боба. А системы эти могут быть, например, разведены в пространстве на большое расстояние. Именно это лежит в основе парадокса Эйнштейна–Подольского–Розена.

Может показаться, что предположение о мгновенности редукции позволяет передавать информацию быстрее скорости света. На самом деле это не так. Дело в том, что Алиса заранее не знает, какой результат получит, и не может на это повлиять, поэтому информацию таким образом передать нельзя.

Более подробно измерения в квантовой механике будут обсуждаться во второй части курса.

## Глава 2

# Одномерное движение.

Гамильтониан (оператор полной энергии) частицы, движущейся в потенциале  $U(\mathbf{r})$ , имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\mathbf{r}) \quad (2.1)$$

(действие потенциала сводится просто к умножению, т.к. мы сейчас подразумеваем координатное представление). С учётом явного выражения для оператора импульса в трёхмерном случае получаем

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\mathbf{r}), \quad (2.2)$$

где  $\Delta$  — оператор Лапласа.

В этом операторе нет никакой комплексности (при наличии магнитного поля это уже будет не так), поэтому решение стационарного УШ всегда может быть выбрано вещественным (так мы можем использовать свободу выбора фазы в.ф.).

Далее мы рассмотрим движение частицы в одном измерении, а к трёхмерному случаю вернёмся позже.

### 2.1 Одномерное движение частицы.

В одномерном случае

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + U(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x). \quad (2.3)$$

Удобна следующая запись стационарного УШ:

$$\psi'' + \frac{2m(E - U(x))}{\hbar^2} \psi = 0. \quad (2.4)$$

То есть стационарное УШ — это линейное однородное дифференциальное уравнение второго порядка (по производной) с переменным коэффициентом. Основная техническая проблема с точки зрения поиска его решения — именно этот переменный коэффициент, задаваемый потенциалом  $U(x)$ . В общем случае его решить явно нельзя, но есть некоторое число потенциалов, для которых решение можно найти явно.

Что нужно знать, чтобы решать УШ в случае одномерного потенциала:

1. *Дискретный и непрерывный спектр* (см. рис. 2.1). В первом случае энергия  $E$  меньше обеих асимптотик потенциала  $[U(-\infty) \text{ и } U(\infty)]$ , частица не уходит на бесконечность и состояние нормируемо (в.ф. на бесконечности убывает, граничные условия:  $\psi(x) \rightarrow 0$  при  $x \rightarrow \pm\infty$  — это *связанные состояния*, спектр *дискретный*). Во втором случае есть уход на бесконечность, и интеграл  $\int |\psi|^2 dx$  расходится. Граничное условие для непрерывного спектра состоит в том, что в.ф. на бесконечности конечна.<sup>1</sup>
2. *Почему так получается + вырождение*. УШ — второго порядка, поэтому у него есть два линейно независимых решения.

---

<sup>1</sup>Ещё есть важный случай квазистационарных состояний (см. рис. 2.5). Строго говоря, это непрерывный спектр, но в этом случае в этом спектре есть особенности, соответствующие почти стационарным состояниям. Подробнее мы поговорим об этом случае позже.

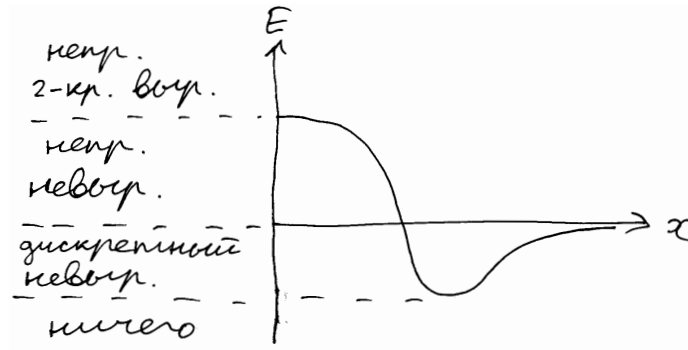


Рис. 2.1: Движение в одномерном потенциале: разные области спектра.

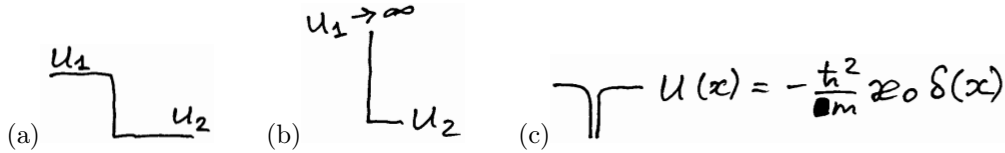


Рис. 2.2: (a) Потенциальная ступенька, (b) бесконечная стенка, (c) дельта-функция.

- В дискретном спектре есть два гран. условия на бесконечности. Эти гран. условия определяют два коэффициента при линейно независимых решениях. Но поскольку все уравнения и гран. условия линейны, всегда есть тривиальное решение с коэффициентами, равными нулю. А чтобы существовало нетривиальное решение, нужно, чтобы энергия принимала не произвольное значение, а одно из дискретного набора.
  - Если теперь движение инфинитно в одну сторону, то одно гран. условие  $\psi \rightarrow 0$  снимается. Поэтому спектр становится непрерывным (уже не нужно подбирать особое значение энергии, чтобы получить ненулевое решение).
  - Если же движение инфинитно в обе стороны, то оба гран. условия  $\psi \rightarrow 0$  на бесконечности снимаются, при каждой энергии есть оба линейно независимых решения, поэтому энергии двукратно вырождены.
3. *Осцилляционная теорема.* Нумеруем дискретные уровни энергии снизу вверх:  $n = 0, 1, 2, \dots$ . Тогда волновая функция уровня с номером  $n$  имеет ровно  $n$  нулей *внутри* области движения (на краях — не считается). Чтобы не запутаться, полезно запомнить, что основное состояние не имеет нулей внутри области движения.
4. *Граничные условия.* Общее свойство:  $\Psi(x, t)$  — непрерывная функция (хотя, например, потенциал, а значит и гамильтониан в целом, может испытывать скачки в пространстве и во времени). Дальше все зависит от того, какую границу мы рассматриваем:

- Потенциальная ступенька [рис. 2.2(a)]. Считая, что ступенька находится при  $x = 0$ , и интегрируя (2.4) по узкой окрестности этой точки, получаем

$$\psi'(+\varepsilon) - \psi'(-\varepsilon) + \frac{2m}{\hbar^2} \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} (E - U(x))\psi(x)dx = 0. \quad (2.5)$$

Устремляем  $\varepsilon \rightarrow 0$ . В интеграле все функции ограничены, поэтому интеграл в этом пределе стремится к нулю, и производная оказывается непрерывна. Таким образом, на потенциальной ступеньке граничные условия имеют вид

$$\psi(-0) = \psi(+0), \quad (2.6)$$

$$\psi'(-0) = \psi'(+0). \quad (2.7)$$

Во многих случаях (скажем, когда мы хотим исключить коэффициенты в решении и получить уравнение на дискретные уровни энергии) достаточно рассмотреть следствие этих двух граничных условий, а именно непрерывность так называемой логарифмической производной  $\psi'/\psi$ , т.е. производной от  $\ln \psi$ .

- Бесконечная ступенька (стенка),  $U_1 \rightarrow \infty$  [рис. 2.2(b)]. Под бесконечной стенкой частица существовать не может, там будет  $\psi(x) = 0$ . Из непрерывности следует обращение в ноль волновой функции с разрешённой

стороны барьера. Уравнение (2.5) теперь даёт неопределённость: интервал сжимается, но под интегралом стоит бесконечный потенциал. В результате граничного условия на производную никакого нет. Поэтому на бесконечной стенке есть только одно граничное условие:

$$\psi(0) = 0. \quad (2.8)$$

с) Дельта-функциональный потенциал (дельта-яма) [рис. 2.2(с)]

$$U(x) = -\frac{\hbar^2 \kappa_0}{m} \delta(x). \quad (2.9)$$

Во-первых, волновая функция непрерывна. Во-вторых, уравнение (2.5) имеет хорошо определённый предел. В результате гран.условия имеют вид

$$\psi(-0) = \psi(+0), \quad (2.10)$$

$$\psi'(+0) - \psi'(-0) + 2\kappa_0\psi(0) = 0. \quad (2.11)$$

Применение граничных условий в квантовой механике часто называют «сшивкой» волновых функций.

## 2.2 Плотность потока.

Мы хотим двигаться в сторону задачи рассеяния, в которой мы посылаем поток на некоторый потенциал и смотрим, что с этим потоком произойдёт. Сначала нам нужно выяснить, как описывается поток частиц (или поток вероятности) в квантовой механике. Мы разберём этот вопрос в общем трёхмерном случае, а затем сразу же обсудим подробнее случай одномерного рассеяния. Случай же трёхмерного рассеяния будет разобран позже.

Волновая функция определяет плотность вероятности  $|\Psi|^2$ . Если полная вероятность сохраняется во времени и только перетекает из одних областей пространства в другие, то выполняется общее уравнение непрерывности:

$$\frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} + \nabla \mathbf{j} = 0, \quad (2.12)$$

где  $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$  — плотность потока вероятности. Наша стратегия состоит в том, чтобы записать первое слагаемое с помощью временного УШ и выразить его в виде дивергенции. Тогда то, что окажется под дивергенцией, и есть плотность потока. Получаем:

$$\frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} = \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi = -\frac{i}{\hbar} (\Psi^* \hat{H} \Psi - \Psi \hat{H}^* \Psi^*) = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi^* \Delta \Psi - \Psi \Delta \Psi^*). \quad (2.13)$$

Правая часть здесь имеет вид  $-\nabla \mathbf{j}$ , где плотность потока вероятности есть

$$\mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*). \quad (2.14)$$

Чтобы нагляднее представить себе структуру этого выражения (и запомнить его), полезно переписать результат через оператор импульса:

$$\mathbf{j} = \text{Re} \left( \Psi^* \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} \Psi \right). \quad (2.15)$$

Здесь посередине стоит оператор скорости<sup>2</sup>

$$\hat{\mathbf{v}} = \hat{\mathbf{p}}/m, \quad (2.16)$$

а комбинация  $\Psi^* \Psi$  — это плотность вероятности. Поэтому естественно, что поток — это произведение плотности на скорость.

Обратим внимание, что для возникновения ненулевого потока вероятности необходимо изменение в.ф. в пространстве. В то же время, не любые изменения в.ф. в пространстве приводят к потоку: если выделить модуль и фазу,  $\Psi = |\Psi|e^{i\varphi}$ , то получаем  $\mathbf{j} = (\hbar/m)|\Psi|^2 \nabla \varphi$ , т.е. необходимы изменения фазы в пространстве.

## 2.3 Одномерное рассеяние.

### 2.3.1 Общее описание.

Предположим, что у нас есть некоторый потенциал, у которого есть асимптотики  $U_1$  и  $U_2$  при  $x \rightarrow -\infty$  и  $x \rightarrow +\infty$  соответственно, см. рис. 2.3. Мы хотим решать стационарное УШ, но в некоторой специальной постановке, когда

<sup>2</sup>Оператор скорости есть оператор, соответствующий производной координаты. По общему правилу (1.38) его нужно вычислять как  $\hat{\mathbf{v}} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \mathbf{r}]$ , что и даёт привычную нам формулу (2.16), которая, однако же, теперь имеет смысл соотношения между операторами.

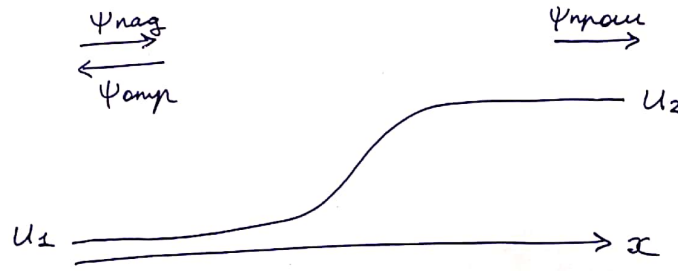


Рис. 2.3: Одномерная задача рассеяния.

мы запускаем с  $-\infty$  на наш потенциал волну и смотрим, что получится. Это называется *задача рассеяния* — мы интересуемся, как волна будет рассеиваться на потенциале (тот потенциал, который посередине, называют рассеивателем). Сейчас мы обсуждаем одномерный случай, поэтому для рассеяния есть ровно две возможности: отражение и прохождение.

Важно понимать, что по своей постановке задача рассеяния — это задача в непрерывном спектре. Это ясно из того, что мы должны иметь возможность запустить частицу с  $-\infty$ , т.е. мы должны брать энергию  $E > U_1$ , при которой есть уход по крайней мере на  $-\infty$ .

При конечных  $x$  потенциал может быть очень сложным, решить УШ мы не можем, но для обсуждения рассеяния нам достаточно рассматривать асимптотики решения. При  $x \rightarrow -\infty$  решение можно записать в виде падающей и отражённой волны:

$$\psi_{\text{пад}} + \psi_{\text{отр}} = \frac{e^{ik_1x}}{\sqrt{v_1}} + r \frac{e^{-ik_1x}}{\sqrt{v_1}}, \quad k_1 = \frac{\sqrt{2m(E - U_1)}}{\hbar} = \frac{mv_1}{\hbar}, \quad (2.17)$$

а при  $x \rightarrow +\infty$  — в виде прошедшей волны:

$$\psi_{\text{прош}} = t \frac{e^{ik_2x}}{\sqrt{v_2}}, \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - U_2)}}{\hbar} = \frac{mv_2}{\hbar}. \quad (2.18)$$

Корень из скорости в знаменателе у каждой волны написан для дальнейшего удобства. Перед падающей волной мы не написали никакого коэффициента, потому что сейчас это нам не важно. Мы будем смотреть, какая *часть* потока отразится, какая пройдет, а для этого мы можем взять исходный поток любой амплитуды. Комплексные числа  $r$  и  $t$  называются амплитудами отражения и прохождения. Вероятности отражения и прохождения определяются отношением отражённого и прошедшего потоков к налетающему (падающему).

Находим эти потоки по формуле (2.14) или (2.15):<sup>3</sup>

$$j_{\text{пад}} = 1, \quad j_{\text{отр}} = -|r|^2, \quad j_{\text{прош}} = |t|^2 \quad (2.19)$$

(здесь становится ясно, зачем мы нормировали волны на корень из скорости — чтобы потоки получались такими простыми; без этого каждый поток был бы ещё пропорционален своему  $k$ , а это неудобно). Отрицательный знак отражённого потока связан с тем, что он направлен влево. Вероятности отражения и прохождения (отношения потоков) получаются следующими:

$$R = \frac{|j_{\text{отр}}|}{j_{\text{пад}}} = |r|^2, \quad T = \frac{j_{\text{прош}}}{j_{\text{пад}}} = |t|^2. \quad (2.20)$$

По физическому смыслу этих величин следует ожидать, что

$$R + T = 1. \quad (2.21)$$

### 2.3.2 Подбарьерный случай.

В особом случае, когда  $E < U_2$ , волна не может уйти на правую бесконечность и должна полностью отразиться, поэтому  $|r| = 1$ ,  $R = 1$ . При этом решение при  $x \rightarrow +\infty$  экспоненциально убывает, но всё-таки является ненулевым при любом конечном  $x$ .

Почему же волновая функция при больших  $x$  не равна нулю, а потока направо нет? Чтобы понять это, вспоминаем, что поток не равен нулю, только если в пространстве меняется фаза в.ф. А убывающая при  $x \rightarrow +\infty$  в.ф. содержит вещественную экспоненту, поэтому фаза не меняется в пространстве, и потока нет.

<sup>3</sup>Мы написали потоки, соответствующие  $\psi_{\text{пад}}$  и  $\psi_{\text{отр}}$  так, как будто эти в.ф. «живут» независимо друг от друга. На самом же деле это два слагаемых в единой волновой функции (2.17). Поэтому может показаться, что мы пренебрегли их интерференцией. Однако прямой подстановкой полной в.ф. в выражение для потока (2.14) легко убедиться, что интерференционные вклады сокращаются, и в результате при  $x \rightarrow -\infty$  получается  $j = j_{\text{пад}} + j_{\text{отр}}$ .

### 2.3.3 Матрица рассеяния.

Давайте убедимся в справедливости соотношения (2.21). Для этого удобно рассмотреть наиболее общие волновые функции. При  $x \rightarrow -\infty$  наиболее общий вид:

$$\psi_L = a_1 \frac{e^{ik_1 x}}{\sqrt{v_1}} + b_1 \frac{e^{-ik_1 x}}{\sqrt{v_1}}. \quad (2.22)$$

При  $x \rightarrow +\infty$ :

$$\psi_R = b_2 \frac{e^{ik_2 x}}{\sqrt{v_2}} + a_2 \frac{e^{-ik_2 x}}{\sqrt{v_2}}. \quad (2.23)$$

Логика обозначений здесь следующая: коэффициенты  $a$  стоят при налетающих на рассеиватель (слева и справа) волнах, а коэффициенты  $b$  — при улетающих от рассеивателя. Они связаны матрицей, которую называют матрицей рассеяния:

$$|out\rangle = \hat{S}|in\rangle, \quad |out\rangle = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}, \quad |in\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}. \quad (2.24)$$

Эта матрица напоминает оператор эволюции — она не зависит от времени, но тем не менее определяет, как одни волны (налетающие) превращаются в другие (улетающие). Аналогично оператору эволюции матрица  $\hat{S}$  должна быть унитарна. Это следует из того, что норма каждого вектора,

$$\langle in|in\rangle = |a_1|^2 + |a_2|^2, \quad \langle out|out\rangle = |b_1|^2 + |b_2|^2, \quad (2.25)$$

равна соответствующему потоку, а полный налетающий поток должен быть равен полному улетающему (внутри области рассеивателя нет рождения или уничтожения волн). Поэтому матрица  $\hat{S}$  сохраняет норму вектора, т.е. является унитарной. Её элементы — комплексные числа:

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix}. \quad (2.26)$$

По физическому смыслу решения,  $r$  и  $t$  являются амплитудами отражения и прохождения при падении на рассеиватель слева, а  $r'$  и  $t'$  — при падении на рассеиватель справа.

Требуем унитарности матрицы рассеяния:

$$\hat{S}^\dagger \hat{S} = \begin{pmatrix} |r|^2 + |t|^2 & r^* t' + r' t^* \\ r t'^* + r'^* t & |r'|^2 + |t'|^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.27)$$

Во-первых, из диагональных элементов видим, что сумма квадратов модулей амплитуд прохождения и отражения равна единице, т.е. мы убедились, что выполнено соотношение (2.21). Во-вторых, два недиагональных элемента отличаются лишь комплексным сопряжением, поэтому дают одно нетривиальное соотношение:

$$\frac{r'^*}{r} = -\frac{t'^*}{t}. \quad (2.28)$$

Если обозначить это отношение буквой  $\gamma$ , то получаем

$$|\gamma|^2 = \frac{|r'|^2 + |t'|^2}{|r|^2 + |t|^2} = 1, \quad (2.29)$$

поэтому  $|r| = |r'|$  и  $|t| = |t'|$ , т.е. вероятности прохождения и отражения не зависят от того, с какой стороны налетает волна. А вот фаза может зависеть — амплитуды со штрихом и без могут иметь разные фазы.

## 2.4 Обращение времени.

Можно представить это себе так, что фазы отражения и прохождения набираются, пока частицы движутся в области рассеивателя (в том числе, возможно, и под барьером). Если посмотреть на рис. 2.4, то можно предположить, что фазы  $t$  и  $t'$  всё-таки должны совпадать (т.к. они набираются при прохождении одного и того же потенциала, просто в разные стороны). Это действительно так, если в системе есть симметрия обращения времени, т.е. в гамильтониане есть только кинетическая энергия и вещественные потенциалы, иными словами  $\hat{H} = \hat{H}^*$  (физически это так в отсутствие магнитных полей). Как это описать на языке в.ф.? Давайте заменим знак времени во временном УШ (1.48). Тогда мы можем вернуться к исходному виду, если применим к уравнению комплексное сопряжение. Поэтому обращённое по времени состояние описывается в.ф.  $\Psi^*(-t)$ , а соответствующий гамильтониан есть  $\hat{H}^*$ . Это утверждение

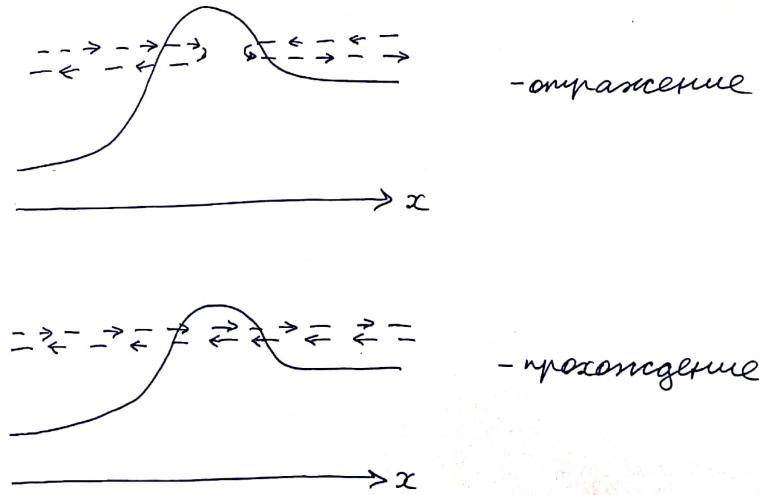


Рис. 2.4: Как набираются фазы отражения и прохождения.

с одномерностью никак не связано и справедливо в любой размерности. Симметрия обращения времени означает, что обращённая функция описывается точно таким же уравнением, как исходная. Это будет так именно в случае  $\hat{H}^* = \hat{H}$ .

В стационарном УШ зависимости от времени нет, поэтому обращению времени соответствует просто комплексное сопряжение волновой функции  $\psi$ . Для наших одномерных состояний рассеяния (2.22) и (2.23) это означает, что все волны разворачиваются в другую сторону (знаки в экспонентах меняются). Поэтому комплексно сопряженный вектор  $|in\rangle^*$  теперь становится улетающим, а  $|out\rangle^*$  — налетающим. Из формулы (2.24) видим, что они связаны соотношением

$$|out\rangle^* = \hat{S}^* |in\rangle^*. \quad (2.30)$$

А с другой стороны, если есть симметрия обращения времени, то новое улетающее состояние получается из нового налетающего действием той же самой матрицы рассеяния, как и раньше:

$$|in\rangle^* = \hat{S} |out\rangle^*. \quad (2.31)$$

Сравнивая эти две записи, находим  $\hat{S}^{-1} = \hat{S}^*$ , что с учётом общего свойства унитарности даёт

$$\hat{S}^T = \hat{S} \quad (2.32)$$

при наличии симметрии обращения времени. Таким образом, в этом случае получаем

$$t = t' \quad (2.33)$$

— не только модули, но и фазы амплитуд прохождения слева и справа совпадают.

Фазы же амплитуд отражения, вообще говоря, различны из-за геометрической асимметрии рассеивателя, т.е. из-за того, что  $U(-x) \neq U(x)$ .

## 2.5 Квазистационарные состояния.

В ситуации, показанной на рисунке 2.5, строго говоря, имеется только непрерывный спектр. Тем не менее, мы понимаем, что есть «внутренняя» яма (при  $0 < x < a$ ), которая пытается связать частицу, и есть внешний мир, отделённый барьером. Если барьер достаточно сильный (высокий и/или широкий), то яме почти удаётся связать частицу. То есть спектр непрерывный, но в нём должны быть некоторые черты дискретного. Что это за черты? Если в такой задаче найти в.ф.  $\psi_E(x)$ , взять точку  $x$  внутри ямы и менять энергию, то у в.ф. будут явные максимумы при некоторых значениях энергии  $E_n$ . Это именно те значения, которые стали бы дискретными уровнями в пределе непрозрачного барьера.

Физически можно представить себе следующую картину. В таком состоянии частица долго живет в яме, но затем всё-таки это состояние распадается, и она уходит на бесконечность. То есть вероятность найти частицу в яме  $W(t) = \int_0^a |\Psi(x, t)|^2 dx$  будет убывать во времени, а на бесконечности мы будем видеть улетающую волну  $e^{ikx}$ . Такие состояния называют *квазистационарными*.

Как это можно описать уравнениями? Закон распада можно записать как

$$\frac{dW}{dt} = -\frac{\Gamma}{\hbar} W, \quad W(t) = W_0 e^{-\Gamma t/\hbar}, \quad (2.34)$$



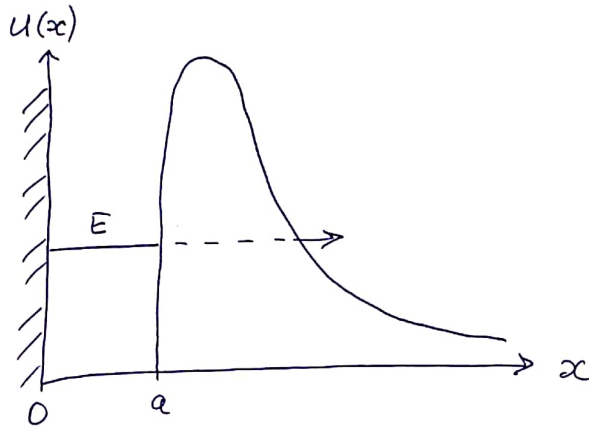


Рис. 2.5: Пример распадного потенциала, в котором есть квазистационарные уровни.

а поскольку  $W$  квадратично по  $\psi$ , затухающая экспонента должна входить в в.ф. с показателем в два раза меньше. То есть, решение в УШ нужно искать в виде

$$\Psi(x, t) = \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E t - \frac{1}{2\hbar} \Gamma t} = \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} \tilde{E} t}, \quad \tilde{E} = E - \frac{i\Gamma}{2}. \quad (2.35)$$

На этом языке мы можем говорить про квазистационарный уровень с энергией  $E$  и *шириной*  $\Gamma$ . Эта ширина — напоминание о том, что на самом деле дискретного спектра нет. Тем не менее, если ширина уровня много меньше, чем расстояние до соседних уровней, такое описание имеет смысл.

Как же получается, что энергия (т.е. собственное значение эрмитова оператора) может оказаться комплексной? Это получается, потому что мы задаём физически понятное, но некорректное (с точки зрения решения стационарного УШ) граничное условие наличия на бесконечности только улетающей волны — получается, что ничего не прилетает, а только улетает. Если решать задачу в непрерывном спектре честно, то будет ещё и налетающая волна (той же амплитуды), т.к. для истинной собственной функции гамильтониана вероятность никуда не уходит. Мы же, чтобы получить наглядную картину квазистационарных состояний, запретили налетающую волну, поэтому получили дополнительное гран.условие на бесконечности, и поэтому вместо непрерывного спектра находим дискретный (но с шириной уровней).<sup>4</sup> Оправдано это тем, что мы вообще-то интересуемся именно состоянием в яме, а улетающая волна нас интересует не сама по себе, а только как малое возмущение состояния в яме (малое в смысле малости  $\Gamma$ ).

## 2.6 Соотношение неопределённости для энергии.

- При рассмотрении квазистационарных состояний мы получили, что уровень имеет некоторую ширину, т.е. энергия определена не точно. Неопределённость энергии  $\Delta E$  по порядку величины — это ширина уровня  $\Gamma$ , а время жизни  $\tau \sim \hbar/\Gamma$ . Это даёт соотношение неопределённости для энергии:

$$\Delta E \cdot \tau \sim \hbar. \quad (2.36)$$

У настоящих стационарных состояний  $\tau = \infty$ , поэтому  $\Delta E = 0$ .

- Ещё один смысл соотношения (2.36) — минимальная возможная ошибка, с которой мы узнаём энергию состояния (даже стационарного), если проводим измерение в течение конечного времени  $\tau$ .

## 2.7 Движение в периодическом потенциале (теорема Блоха).

Решим следующую задачу:

- а) Найти собственные значения и собственные функции оператора трансляции  $\hat{T}_a$ .

<sup>4</sup>Некорректность такой постановки проявляется в том, что  $k$  будет иметь мнимую часть, т.е. в.ф. будет неограниченно расти на бесконечности. Тем не менее, в остальном такое решение осмысленно и физически наглядно. Если честно решать задачу на  $\Psi(x, t)$ , то будет иметь место асимптотическая сходимость к этому ненормируемому решению (2.35) с разделёнными переменными [см. А.И. Базь, Я.Б. Зельдович, А.М. Переломов, «Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике» (1971)].

- б) Рассмотрим движение в периодическом потенциале, таком что  $U(x+a) = U(x)$ . Гамильтониан коммутирует с  $\hat{T}_a$ , поэтому с.ф. гамильтониана имеют вид, найденный в пункте а). Это функции Блоха  $\psi_q(x) = e^{iqx}u(x)$ , где  $u(x)$  — периодическая функция с периодом  $a$  (именно это утверждает **теорема Блоха**). Обсудить возникающие в связи с этим понятия квазиимпульса и зон Бриллюэна.

### Решение.

- а) Рассмотрим задачу на собственные значения оператора трансляции  $\hat{T}_a$ :

$$\psi(x+a) = \lambda\psi(x). \quad (2.37)$$

Из этого уравнения ясно, что должно быть  $|\lambda| = 1$  — иначе, сдвигаясь дальше вправо или дальше влево, мы получим растущую на бесконечности функцию, а такого быть не должно. Таким образом, собственные значения можно записать в виде

$$\lambda = e^{iqa}, \quad (2.38)$$

где  $q$  — вещественное число (мы просто с его помощью запараметризовали  $\lambda$ ). Собственные функции тогда удовлетворяют уравнению

$$\psi(x+a) = e^{iqa}\psi(x). \quad (2.39)$$

Можно записать искомую функцию в виде

$$\psi(x) = e^{iqx}u(x), \quad (2.40)$$

и на  $u(x)$  мы тут же получаем соотношение  $u(x+a) = u(x)$ . Итак, собственная функция оператора трансляции имеет вид произведения плоской волны на периодическую функцию. Функция такого вида называется *функцией Блоха*.<sup>5</sup>

- б) В блоховских функциях  $\hbar q$  похоже на импульс, но на самом деле им не является, эта величина называется *квазиимпульсом*. Импульс в этой задаче вообще не является хорошим квантовым числом, т.к. оператор импульса не коммутирует с гамильтонианом. Тем не менее, если потенциал «выключить», то квазиимпульс превратится в обычный импульс.

В периодическом же потенциале  $q$  у нас возникло как величина, с помощью которой мы запараметризовали собственное значение оператора трансляции, по модулю равное единице:  $\lambda = e^{iqa}$ . Отсюда ясно, что  $q$  определено не однозначно, а с точностью до  $2\pi n/a$ . Поэтому достаточно рассматривать  $q$ , лежащие в интервале шириной  $2\pi/a$  — все физически различные ситуации при этом будут учтены. Такой интервал называется *зоной Бриллюэна*. Например, можно выбрать зону Бриллюэна симметричным образом:  $-\pi/a < q < \pi/a$ . Но можно одновременно рассматривать и другие интервалы (это вопрос нашего удобства). Тогда зону вокруг нуля назовём первой зоной Бриллюэна, а более дальние зоны — второй ( $-2\pi/a < q < -\pi/a$  и  $\pi/a < q < 2\pi/a$ ), третьей ( $-3\pi/a < q < -2\pi/a$  и  $2\pi/a < q < 3\pi/a$ ) и т.д.

В периодическом потенциале оказывается, что энергия является функцией от  $q$  и имеет несколько ветвей спектра. Эти ветви можно изображать в схеме приведённых зон (все ветви в первой зоне Бриллюэна, друг над другом, т.е. энергия — многозначная функция от  $q$ ), а можно — в схеме расширенных зон (каждая ветвь в своей зоне Бриллюэна, и энергия — однозначная функция от  $q$ ; так, например, удобно проследить близость спектра к параболическому для случая слабого потенциала).

Вообще, эти понятия (блоховские в.ф., квазиимпульс, зоны Бриллюэна) очень важны для физики твёрдого тела (электроны в периодическом потенциале кристаллической решётки).

<sup>5</sup>Можно задать следующий вопрос. Поскольку  $\hat{T}_a = \exp(i\hat{p}a/\hbar)$ , ясно, что он коммутирует с оператором импульса. Т.е. у них есть общая система собственных функций, поэтому мы можем сказать, что с.ф. оператора трансляции — это плоские волны. Как же так? Дело в том, что если мы в качестве с.ф. оператора трансляции возьмём  $e^{ikx}$ , то уравнение (2.37) на с.ф. скажет нам, что

$$e^{ika} = e^{iqa}.$$

То есть одному и тому же с.з. (одному и тому же  $q$ ) соответствует бесконечное число с.ф. с  $k = q + 2\pi n/a$ . Поэтому с.з. оказывается бесконечнократно вырождено. Из коммутации операторов трансляции и импульса следует, что их системы с.ф. могут быть выбраны общими. Но могут быть выбраны и не общими, если есть вырождение. В частности, в нашем случае мы можем составлять линейные комбинации плоских волн с  $k = q + 2\pi n/a$ , и они по-прежнему будут отвечать тому же самому с.з.  $\lambda = e^{iqa}$ . В результате рассмотрения всех таких линейных комбинаций получаются как раз функции Блоха —  $e^{iqx}$  умножить на произвольную периодическую функцию с периодом  $a$ .

То есть из-за вырождения мы можем выбрать с.ф. оператора трансляции по-разному — как в виде плоских волн, так и в виде функций Блоха. А с точки зрения гамильтониана удобны именно функции Блоха — они образуют общую систему с.ф. гамильтониана и оператора трансляции.

## 2.8 Гармонический осциллятор.

Рассмотрим задачу об одномерном гармоническом осцилляторе:

$$\hat{H}_{\text{осц}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \quad (2.41)$$

— квадратичная потенциальная энергия соответствует тому, что при отклонении от положения равновесия возникает возвращающая сила, пропорциональная отклонению (закон Гука).

Задача о гармоническом осцилляторе очень важна для квантовой теории в целом. Дело в том, что такой гамильтониан встречается во всех задачах, где имеют место квантованные колебания: колебания в кристаллах, квантовая электродинамика, квантовая теория поля.

Имеется несколько способов решить задачу (найти собственные числа и собственные состояниям гамильтониана). В качестве основного мы рассмотрим метод, который был предложен Дираком и не привязан ни к какому конкретному представлению, но потом обсудим и прямолинейное решение в координатном представлении.

### 2.8.1 Осцилляторные единицы.

Для начала обезразмерим сам гамильтониан, координату и импульс:

$$\hat{H}_{\text{осц}} = \varepsilon_0 \hat{H}, \quad \hat{x} = x_0 \hat{Q}, \quad \hat{p} = p_0 \hat{P}, \quad (2.42)$$

где мы использовали так называемые осцилляторные единицы энергии, импульса и координаты:

$$\varepsilon_0 = \hbar\omega, \quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad p_0 = \sqrt{\hbar m\omega} = \frac{\hbar}{x_0}. \quad (2.43)$$

В этих единицах гамильтониан принимает вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2 + \hat{Q}^2}{2}, \quad (2.44)$$

где безразмерные (эрмитовы) операторы импульса и координаты удовлетворяют коммутационному соотношению

$$[\hat{P}, \hat{Q}] = -i. \quad (2.45)$$

Мы будем решать задачу, не привязываясь к конкретному представлению (именно поэтому пишем шляпку над оператором координаты).

### 2.8.2 Дираковское решение.

Перепишем гамильтониан в немного другом виде. Для этого определим оператор  $\hat{a}$  и эрмитово сопряжённый к нему:

$$\hat{a} = \frac{\hat{Q} + i\hat{P}}{\sqrt{2}}, \quad \hat{a}^\dagger = \frac{\hat{Q} - i\hat{P}}{\sqrt{2}}. \quad (2.46)$$

Коммутационное соотношение (2.45) даёт

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1. \quad (2.47)$$

Выражая  $\hat{Q}$  и  $\hat{P}$  через  $\hat{a}$  и  $\hat{a}^\dagger$ , получаем

$$\hat{Q} = \frac{\hat{a} + \hat{a}^\dagger}{\sqrt{2}}, \quad \hat{P} = \frac{\hat{a} - \hat{a}^\dagger}{\sqrt{2}i}, \quad (2.48)$$

откуда получаем

$$\hat{H} = \frac{1}{2}(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}) = \hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2} = \hat{N} + \frac{1}{2}, \quad (2.49)$$

где мы определили новый эрмитов оператор

$$\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a}. \quad (2.50)$$

Собственные состояния операторов  $\hat{H}$  и  $\hat{N}$  совпадают, а собственные значения различаются на  $1/2$ , поэтому нам достаточно найти с.с. и с.з. для  $\hat{N}$ . Пусть

$$\hat{N}|\nu\rangle = \nu|\nu\rangle. \quad (2.51)$$

О нормировке собственного вектора мы сейчас не заботимся, нам достаточно того, что она положительна:  $\langle\nu|\nu\rangle > 0$ .

Посмотрим, что происходит с таким собственным состоянием под действием операторов  $\hat{a}$  и  $\hat{a}^\dagger$ . Рассмотрим нормы векторов  $\hat{a}|\nu\rangle$  и  $\hat{a}^\dagger|\nu\rangle$ :

$$\langle\nu|\hat{a}^\dagger\hat{a}|\nu\rangle = \langle\nu|\hat{N}|\nu\rangle = \nu\langle\nu|\nu\rangle, \quad (2.52)$$

$$\langle\nu|\hat{a}\hat{a}^\dagger|\nu\rangle = \langle\nu|\hat{N} + 1|\nu\rangle = (\nu + 1)\langle\nu|\nu\rangle. \quad (2.53)$$

Нормировка произвольного вектора гильбертова пространства по крайней мере неотрицательна, поэтому  $\nu \geq 0$ . Если  $\nu = 0$ , то вектор  $\hat{a}|\nu\rangle$  — нулевой. Во всех остальных случаях он отличен от нуля. В то же время, вектор  $\hat{a}^\dagger|\nu\rangle$  отличен от нуля всегда. Теперь посмотрим, что такое векторы  $\hat{a}|\nu\rangle$  и  $\hat{a}^\dagger|\nu\rangle$  с точки зрения действия на них оператора  $\hat{N}$ :

$$\hat{N}\hat{a}|\nu\rangle = \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}|\nu\rangle = (\hat{a}\hat{a}^\dagger - 1)\hat{a}|\nu\rangle = \hat{a}(\hat{N} - 1)|\nu\rangle = (\nu - 1)\hat{a}|\nu\rangle, \quad (2.54)$$

$$\hat{N}\hat{a}^\dagger|\nu\rangle = \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger|\nu\rangle = \hat{a}^\dagger(\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1)|\nu\rangle = \hat{a}^\dagger(\hat{N} + 1)|\nu\rangle = (\nu + 1)\hat{a}^\dagger|\nu\rangle. \quad (2.55)$$

Это означает, что при  $\nu \neq 0$  вектор  $\hat{a}|\nu\rangle$  является собственным для оператора  $\hat{N}$  и соответствует собственному значению  $\nu - 1$ . В то же время, вектор  $\hat{a}^\dagger|\nu\rangle$  всегда является собственным для оператора  $\hat{N}$  и соответствует собственному значению  $\nu + 1$ .

Мы начали наше рассуждение с состояния  $|\nu\rangle$ , отвечающего собственному значению  $\nu$ , показали, что  $\nu \geq 0$  и т.д. Если же  $\nu > 0$  (строго), то  $\hat{a}|\nu\rangle$  — собственный вектор, отвечающий собственному значению  $\nu - 1$ . Применив к нему то же самое рассуждение, получим, что  $\nu \geq 1$ . Если  $\nu > 1$  (строго), то можем применить рассуждение к вектору  $\hat{a}^2|\nu\rangle$  и т.д. В результате исходное состояние  $|\nu\rangle$  порождает последовательность собственных векторов

$$\hat{a}|\nu\rangle, \quad \hat{a}^2|\nu\rangle, \quad \hat{a}^3|\nu\rangle, \dots, \quad (2.56)$$

отвечающих собственным значениям

$$\nu - 1, \quad \nu - 2, \quad \nu - 3, \dots \quad (2.57)$$

Но собственные значения  $\hat{N}$  ограничены снизу нулём, поэтому эта последовательность должна оборваться, т.е. на каком-то шаге мы должны получить нулевой вектор (тогда этот и все последующие векторы уже не будут собственными). Это значит, что последовательность собственных значений — целые числа (именно тогда в некоторый момент мы получим с.з. ноль и соответствующий с.в., а все последующие векторы будут нулевыми).

Аналогично от исходного с.з.  $\nu$  мы можем «пойти вверх», рассматривая собственные векторы

$$\hat{a}^\dagger|\nu\rangle, \quad \hat{a}^{\dagger 2}|\nu\rangle, \quad \hat{a}^{\dagger 3}|\nu\rangle, \dots, \quad (2.58)$$

отвечающие собственным значениям

$$\nu + 1, \quad \nu + 2, \quad \nu + 3, \dots \quad (2.59)$$

— это последовательность будет неограничена.

Итак, спектр оператора  $\hat{N}$  — это целые неотрицательные числа. Все собственные векторы можно получить, действуя на один из них операторами  $\hat{a}$  и  $\hat{a}^\dagger$  произвольное число раз (можно показать, что эта система полна). Обратим внимание на нормировку. Чтобы система собственных векторов

$$|0\rangle, \quad |1\rangle, \quad |2\rangle, \dots \quad (2.60)$$

была нормированной, нужно начать с нормированного вектора и требовать, чтобы операторы  $\hat{a}$  и  $\hat{a}^\dagger$  сохраняли нормировку. Согласно формулам (2.52)–(2.53), это означает

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad (2.61)$$

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle. \quad (2.62)$$

В первой формуле ещё, строго говоря, нужно уточнить, что  $\hat{a}|0\rangle = 0$  (это легко запомнить, т.к. нам об этом напоминает  $\sqrt{0}$  в правой части, хотя вектор  $|-1\rangle$  не имеет смысла). Все нормированные векторы можно получить из нормированного вектора основного состояния по формуле

$$|n\rangle = \frac{\hat{a}^{\dagger n}}{\sqrt{n!}}|0\rangle, \quad (2.63)$$

при этом

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle, \quad \langle n|n'\rangle = \delta_{nn'}. \quad (2.64)$$

- Операторы  $\hat{a}$  и  $\hat{a}^\dagger$  называют понижающим и повышающим. Вместе их называют лестничными операторами.

Спектр исходного гамильтониана  $\hat{H}_{\text{осн}}$ , таким образом, может быть записан как

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.65)$$

Он является эквидистантным (т.е. все расстояния между уровнями одинаковы). Энергия основного состояния отлична от нуля и равна  $E_0 = \hbar\omega/2$ . Она называется энергией нулевых колебаний.

### 2.8.3 Матрицы операторов в дираковском представлении.

Легко получить матрицы, соответствующие в дираковском представлении операторам  $\hat{N}$ ,  $\hat{a}$  и  $\hat{a}^\dagger$ . Располагаем строки и столбцы матриц в порядке возрастания квантовых чисел  $n$ . Тогда для  $\hat{N}$  получается диагональная матрица  $\text{diag}(0, 1, 2, \dots)$ . Для  $\hat{a}$  и  $\hat{a}^\dagger$  получаются эрмитово сопряжённые друг другу матрицы, в каждой из которых ненулевой является только диагональ, ближайшая к главной:

$$\hat{a} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad \hat{a}^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (2.66)$$

Отсюда легко получить матрицы исходных физических величин, например, координаты:

$$\hat{x} = x_0 \frac{\hat{a} + \hat{a}^\dagger}{\sqrt{2}} = \frac{x_0}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (2.67)$$

Ненулевые матричные элементы координаты можно записать в следующем виде:

$$x_{n,n-1} = x_{n-1,n} = x_0 \sqrt{\frac{n}{2}} = \sqrt{\frac{\hbar n}{2m\omega}}. \quad (2.68)$$

### 2.8.4 Операторы рождения и уничтожения.

В решении задачи об осцилляторе мы использовали понижающий и повышающий операторы  $\hat{a}$  и  $\hat{a}^\dagger$ , а также оператор  $\hat{N}$ , который можно назвать оператором номера уровня.

Очень похожие операторы возникают в многочастичных задачах квантовой механики, но физический смысл их там другой. Полезно об этом упомянуть уже сейчас, хотя к многочастичным задачам мы обратимся только во второй части нашего курса.

Аналогия основана на эквидистантности спектра осциллятора. Для удобства (с точки зрения многочастичных приложений) изменим начало отсчета энергии:  $\hat{H} = \hat{H}_{\text{осц}} - \hbar\omega/2 = \hbar\omega\hat{N}$ . Тогда мы можем сказать, что  $\hat{H}$  — это как будто гамильтониан системы тождественных (одинаковых) частиц, энергия каждой частицы равна  $\hbar\omega$ , а число частиц может меняться. Каждое собственное состояние  $|n\rangle$  соответствует тому, что в системе есть  $n$  частиц. Состояние  $|0\rangle$  — это вакуум нашей системы (частиц нет). Тогда  $\hat{N}$  — это оператор числа частиц. Оператор  $\hat{a}^\dagger$  увеличивает число частиц на единицу, поэтому называется оператором рождения, а оператор  $\hat{a}$  уменьшает число частиц на единицу, поэтому называется оператором уничтожения.

Такая картина возникает в различных задачах, связанных, например, с колебаниями в кристаллах, а также в квантовой теории поля.

### 2.8.5 Решение в координатном представлении. Полиномы Эрмита.

#### 2.8.5.1 Координатное представление из дираковского решения.

Теперь обсудим, как выглядит решение задачи об осцилляторе в координатном представлении. Во-первых, полученное нами дираковское решение позволяет получить координатное решение напрямую. Начнем с в.ф. основного состояния — она должна удовлетворять соотношению  $\hat{a}|0\rangle = 0$ , что с учётом (2.46) может быть записано как дифференциальное уравнение

$$\left(Q + \frac{d}{dQ}\right) \varphi_0(Q) = 0 \quad (2.69)$$

на волновую функцию в координатном представлении [в дираковском формализме с.ф. в координатном представлении записываются как  $\varphi_n(Q) = \langle Q|n\rangle$ ]. Нормированным решением этого уравнения является функция

$$\varphi_0(Q) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-Q^2/2}.$$

Отсюда по формуле (2.63) можно получить все остальные с.ф.:

$$\varphi_n(Q) = \frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{2^n n!}} \left(Q - \frac{d}{dQ}\right)^n e^{-Q^2/2}. \quad (2.70)$$

Здесь можно воспользоваться операторным тождеством

$$Q - \frac{d}{dQ} = -e^{Q^2/2} \frac{d}{dQ} e^{-Q^2/2}, \quad (2.71)$$

чтобы записать с.ф. в виде

$$\varphi_n(Q) = \frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{2^n n!}} e^{-Q^2/2} H_n(Q) \quad (2.72)$$

через так называемые полиномы Эрмита, определяемые следующим образом:

$$H_n(z) = (-1)^n e^{z^2} \frac{d^n}{dz^n} e^{-z^2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.73)$$

Свойства полиномов Эрмита:

- $H_n(z)$  — полином степени  $n$ , содержащий степени  $z$  только той же чётности, что и число  $n$ . Поэтому чётность всего полинома есть  $(-1)^n$ .
- Полином  $H_n(z)$  имеет  $n$  вещественных нулей.
- Первые несколько полиномов:

$$H_0 = 1, \quad H_1 = 2z, \quad H_2 = 4z^2 - 1, \quad H_3 = 8z^3 - 12z, \quad H_4 = 16z^4 - 48z^2 + 12. \quad (2.74)$$

Если восстановить все размерности в в.ф., получим

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) H_n\left(x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right), \quad \psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right). \quad (2.75)$$

### 2.8.5.2 Координатное решение с самого начала.

Рассмотрим тезисно, как решается задача о спектре и с.ф. осциллятора, если с самого начала работать в координатном представлении. В безразмерном виде стационарное УШ имеет вид

$$\frac{\hat{P}^2 + Q^2}{2} \varphi(Q) = \frac{E}{\varepsilon_0} \varphi(Q), \quad \hat{P} = -i \frac{\partial}{\partial Q}, \quad (2.76)$$

что можно переписать как

$$\varphi'' + \left(\frac{2E}{\varepsilon_0} - Q^2\right) \varphi = 0. \quad (2.77)$$

Асимптотическое поведение решения при  $Q \rightarrow \pm\infty$  имеет вид  $\varphi \simeq e^{\pm Q^2/2}$ . Действительно, в этом случае

$$\varphi'' = (Q^2 \pm 1) e^{\pm Q^2/2}, \quad (2.78)$$

и учитывая, что при  $Q \rightarrow \pm\infty$  можно пренебречь константами рядом с  $Q^2$ , видим, что уравнение (2.77) в главном порядке выполняется. Из условия конечности в.ф. в показателе экспоненты нужно выбрать знак минус.

Выделим эту асимптотику явно, сделав подстановку

$$\varphi(Q) = e^{-Q^2/2} \chi(Q). \quad (2.79)$$

Уравнение на  $\chi$  принимает вид

$$\chi'' - 2Q\chi' + 2\nu\chi = 0, \quad \nu \equiv \frac{E}{\varepsilon_0} - \frac{1}{2}. \quad (2.80)$$

Поскольку в осцилляторе  $E > 0$ , то  $\nu > -1/2$ .

Дальше нужно исследовать решения этого уравнения. Это можно сделать методом Лапласа. В результате оказывается, что в общем случае решение ведёт себя на бесконечности как  $\chi \simeq e^{Q^2}$ , что означает расходимость  $\varphi$ . И только при  $\nu = n$ , где  $n = 0, 1, 2, \dots$ , решение растёт на бесконечности степенным образом, поэтому в.ф.  $\varphi$  в целом убывает. Эти степенные решения — полиномы Эрмита:  $\chi = H_n(Q)$ . Остаётся отнормировать получившиеся функции, и мы получаем то же решение (2.72), что и раньше.

## 2.9 Волновые пакеты.

Мы уже рассматривали плоские волны вида

$$\psi_k(x) = e^{ikx}, \quad (2.81)$$

которые являются решениями уравнения Шрёдингера в однородном потенциале. В этих состояниях импульс точно определён (и равен  $\hbar k$ ), а координата совершенно не определена: плотность вероятности обнаружения частицы не зависит от координаты. В результате это состояние ненормируемо. С физической точки зрения такое состояние нереализуемо, это математическая абстракция — предельный случай физически реализуемых состояний. В то же время, как и другие предельные случаи физически реализуемых состояний (например, точечные частицы в классической механике), оно оказывается удобным при описании ряда явлений (например, рассеяния).

Если попытаться построить физически реализуемое состояние, похожее на плоскую волну, то оно будет содержать не одну плоскую волну, а целый набор. Вообще, записывая разложение Фурье для любой функции  $\psi(x)$ , мы представляем её в виде (бесконечного) набора плоских волн. Предположим, что наибольший вес имеют волны с волновым вектором, близким к  $k_0$ , поэтому запишем интеграл Фурье в виде

$$\psi(x) = \int \frac{dk}{2\pi} c(k - k_0) e^{ikx}, \quad (2.82)$$

подразумевая, что функция  $c(k)$  имеет максимум при  $k = 0$  и спадает при отклонении  $k$  от нуля. Выделив  $k_0$  в экспоненте и сдвинув переменную интегрирования ( $k' = k - k_0$ ), можем переписать формулу в виде

$$\psi(x) = e^{ik_0 x} \int \frac{dk'}{2\pi} c(k') e^{ik'x} = e^{ik_0 x} c(x). \quad (2.83)$$

Таким образом, мы получили плоскую волну, промодулированную в пространстве функцией  $c(x)$ . Потребуем, чтобы эта функция была квадратично нормируема:  $\int |c(x)|^2 dx = 1$ . Тогда мы получаем нормированную в.ф.  $\psi(x)$ . Функция  $c(x)$  задаёт распределение нашего состояния в пространстве. То есть мы ограничиваем наше состояние по координате, и при этом одновременно размазываем его по импульсу [т.к. распределение по импульсу задаётся фурье-образом функции  $c(x)$ ]. Волновые функции такого вида называются *волновыми пакетами*.

Если теперь задуматься о временной эволюции волнового пакета, то надо начать с того, что плоская волна имеет зависимость от времени

$$\Psi_k(x, t) = e^{ikx - i\omega(k)t}, \quad \omega(k) = \frac{E(k)}{\hbar}. \quad (2.84)$$

Поэтому волновой пакет, задаваемый при  $t = 0$  формулой (2.82), будет эволюционировать следующим образом:

$$\Psi(x, t) = \int \frac{dk}{2\pi} c(k - k_0) e^{ikx - i\omega(k)t} = e^{ik_0 x - i\omega(k_0)t} \int \frac{dk'}{2\pi} c(k') e^{ik'x - i\omega(k_0 + k')t + i\omega(k_0)t}. \quad (2.85)$$

Если  $c(k')$  убывает достаточно быстро, так что в интеграле важны лишь  $k'$ , близкие к нулю, и мы можем написать

$$\omega(k_0 + k') - \omega(k_0) \approx \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} k' = v_0 k', \quad (2.86)$$

то получаем

$$\Psi(x, t) = e^{ik_0 x - i\omega(k_0)t} \int \frac{dk'}{2\pi} c(k') e^{ik'(x - v_0 t)} = e^{ik_0 x - i\omega(k_0)t} c(x - v_0 t). \quad (2.87)$$

Мы получили, что волновой пакет, не меняя формы, движется с групповой скоростью  $v_0$ . Это верно только в главном приближении в меру справедливости разложения (2.86). Поправки к этому разложению приведут к расплыванию волнового пакета (физически это будет означать учёт того факта, что разные плоские волны движутся с разной скоростью).

Важным примером является гауссов волновой пакет, в котором функция  $c(x)$  имеет гауссову форму:

$$\psi(x) = \frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{a}} \exp \left( ik_0 x - \frac{(x - x_0)^2}{2a^2} \right) \quad (2.88)$$

(каким должен быть нормировочный коэффициент, легко сообразить, исходя из знания в.ф. основного состояния линейного осциллятора). В этом случае, производя преобразование Фурье, получаем

$$c(k') = \frac{\sqrt{2\pi a}}{\pi^{1/4}} \exp \left( -ik'x_0 - \frac{k'^2 a^2}{2} \right), \quad (2.89)$$

то есть распределение импульсов тоже гауссово. Из этих формул сразу видно, что неопределённости координаты и импульса имеют порядок  $a$  и  $\hbar/a$  соответственно.



## 2.10 Когерентные состояния.

Для гармонического осциллятора мы ранее определили операторы  $\hat{a}$  и  $\hat{a}^\dagger$ . Можно рассмотреть задачу о собственных состояниях этих неэрмитовых операторов. Оказывается, что оператор  $\hat{a}^\dagger$  не имеет собственных состояний,<sup>6</sup> а оператор  $\hat{a}$  имеет. Его собственные состояния называются *когерентными состояниями гармонического осциллятора*. Они удовлетворяют уравнению

$$\hat{a}|\psi_z\rangle = z|\psi_z\rangle, \quad (2.90)$$

решение которого, как оказывается, существует при любом комплексном числе  $z$  (очевидный пример, который мы уже знаем — основное состояние осциллятора, отвечающее  $z = 0$ ). Давайте найдём эти состояния, а потом обсудим, чем они замечательны.

Когерентные состояния можно найти явно в координатном представлении, записав явное выражение для  $\hat{a} = (\hat{Q} + i\hat{P})/\sqrt{2}$ :

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left( Q + \frac{\partial}{\partial Q} \right) \psi_z = z\psi_z, \quad (2.91)$$

и решив это простое дифф.уравнение. Но можно использовать следующий поучительный способ. Выделим вещественную и мнимую часть  $z$ :

$$z = \frac{\alpha + i\beta}{\sqrt{2}}, \quad (2.92)$$

тогда уравнение принимает вид

$$\left[ (\hat{Q} - \alpha) + i(\hat{P} - \beta) \right] |\psi_z\rangle = 0 \quad (2.93)$$

— такой же, как для основного состояния осциллятора, с точностью до сдвига координаты на величину  $\alpha$ , а импульса — на величину  $\beta$ . Поэтому в координатном представлении получаем

$$\psi_z(Q) = \frac{1}{\pi^{1/4}} \exp \left[ i\beta Q - \frac{(Q - \alpha)^2}{2} \right]. \quad (2.94)$$

Обратите внимание, что волновая функция когерентного состояния имеет вид гауссова волнового пакета.<sup>7</sup>

Теперь обсудим, чем замечательны когерентные состояния, а заодно продемонстрируем, как для этих состояний производятся вычисления физических величин. Общий подход состоит в том, что физическую величину, выражающуюся через  $\hat{Q}$  и  $\hat{P}$ , нужно записать через операторы  $\hat{a}$  и  $\hat{a}^\dagger$ . После этого все операторы  $\hat{a}$  передвинуть направо, а  $\hat{a}^\dagger$  — налево с помощью коммутационного соотношения (2.47). И после этого использовать формулу (2.90) и эрмитово сопряжённую ей формулу

$$\langle \psi_z | \hat{a}^\dagger = \langle \psi_z | z^*. \quad (2.95)$$

Найдём таким способом неопределённости координаты и импульса в когерентном состоянии:

$$\langle \hat{Q} \rangle = \frac{\langle \hat{a} + \hat{a}^\dagger \rangle}{\sqrt{2}} = \frac{z + z^*}{\sqrt{2}}, \quad (2.96)$$

$$\langle \hat{P} \rangle = \frac{\langle \hat{a} - \hat{a}^\dagger \rangle}{\sqrt{2}i} = \frac{z - z^*}{\sqrt{2}i}, \quad (2.97)$$

$$\langle \hat{Q}^2 \rangle = \frac{\langle \hat{a}\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} \rangle}{2} = \frac{\langle \hat{a}\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger + 2\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1 \rangle}{2} = \frac{z^2 + z^{*2} + 2|z|^2 + 1}{2}, \quad (2.98)$$

$$\langle \hat{P}^2 \rangle = -\frac{\langle \hat{a}\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger - \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} \rangle}{2} = -\frac{\langle \hat{a}\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger - 2\hat{a}^\dagger\hat{a} - 1 \rangle}{2} = -\frac{z^2 + z^{*2} - 2|z|^2 - 1}{2}, \quad (2.99)$$

$$\langle \Delta Q^2 \rangle = \langle \hat{Q}^2 \rangle - \langle \hat{Q} \rangle^2 = \frac{z^2 + z^{*2} + 2|z|^2 + 1}{2} - \frac{(z + z^*)^2}{2} = \frac{1}{2}, \quad (2.100)$$

$$\langle \Delta P^2 \rangle = \langle \hat{P}^2 \rangle - \langle \hat{P} \rangle^2 = -\frac{z^2 + z^{*2} - 2|z|^2 - 1}{2} + \frac{(z - z^*)^2}{2} = \frac{1}{2}. \quad (2.101)$$

Поэтому когерентные состояния минимизируют соотношение неопределённости, т.к. для них

$$\langle \Delta Q^2 \rangle \langle \Delta P^2 \rangle = \frac{1}{4}, \quad (2.102)$$

а  $z$  определяет средние значения координаты и импульса:

$$z = \frac{\langle \hat{Q} \rangle + i\langle \hat{P} \rangle}{\sqrt{2}}. \quad (2.103)$$

<sup>6</sup>Это легко доказать, рассмотрев разложение предполагаемого собственного состояния по базису  $|n\rangle$ .

<sup>7</sup>Различные когерентные состояния осциллятора можно создать, например, стартуя с основного состояния осциллятора (т.е. с когерентного состояния с  $\alpha = \beta = 0$ ) и прикладывая однородную в пространстве силу, зависящую произвольным образом от времени. Тогда в результате эволюции состояние всегда будет оставаться когерентным, с некоторыми  $\alpha(t)$  и  $\beta(t)$ .



### 2.11 Теорема Гельмана–Фейнмана.

Предположим, что некоторый эрмитов оператор  $\hat{A}$  (например, гамильтониан) зависит от параметра  $\lambda$ . Тогда от этого же параметра зависят его собственные значения и функции:

$$\hat{A}(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle = A(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle. \quad (2.104)$$

Продифференцируем это соотношение по  $\lambda$ :

$$\frac{\partial \hat{A}}{\partial \lambda}|\psi\rangle + \hat{A}\frac{\partial |\psi\rangle}{\partial \lambda} = \frac{\partial A}{\partial \lambda}|\psi\rangle + A\frac{\partial |\psi\rangle}{\partial \lambda}. \quad (2.105)$$

Теперь домножим слева на бра-вектор  $\langle\psi(\lambda)|$ , в результате чего вторые слагаемые в обеих частях сократятся, и мы получим

$$\langle\psi|\frac{\partial \hat{A}}{\partial \lambda}|\psi\rangle = \frac{\partial A}{\partial \lambda}. \quad (2.106)$$

Это соотношение называется *теоремой Гельмана–Фейнмана*. В случае, когда известен спектр оператора  $\hat{A}$ , оно позволяет легко находить средние операторов, являющихся производными от  $\hat{A}$  по параметрам.

В практически важном случае гамильтониана теорема Гельмана–Фейнмана записывается как

$$\langle n|\frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda}|n\rangle = \frac{\partial E_n}{\partial \lambda}. \quad (2.107)$$

Параметром может выступать, например, масса частицы, заряд частицы, постоянная Планка.

### 2.12 Уравнения Эренфеста.

Вспомним определение производной оператора по времени и усредним его по некоторому квантовому состоянию:

$$\frac{d\langle\hat{A}\rangle}{dt} = \langle\frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\rangle + \frac{i}{\hbar}\langle[\hat{H}, \hat{A}]\rangle. \quad (2.108)$$

Рассматривая в качестве  $\hat{A}$  операторы координаты и импульса, получаем *уравнения Эренфеста*

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \frac{\langle\hat{p}\rangle}{m}, \quad \frac{d\langle\hat{p}\rangle}{dt} = -\langle\frac{\partial U}{\partial x}\rangle. \quad (2.109)$$

Таким образом, уравнения Эренфеста для средних величин являются квантовыми аналогами второго закона Ньютона (или уравнений Гамильтона).

### 2.13 Теорема вириала.

В квантовой механике справедливо соотношение, являющееся обобщением классической теоремы вириала. А именно, в случае потенциальной энергии вида  $U(x) = Ax^k$  имеет место соотношение для средних от кинетической ( $T$ ) и потенциальной ( $U$ ) энергии по стационарному состоянию:

$$2\langle T\rangle_n = k\langle U\rangle_n. \quad (2.110)$$

Это соотношение можно доказать, рассмотрев коммутатор  $[\hat{H}, \hat{p}x]$ .

## Глава 3

# Квазиклассика.

### 3.1 Волновая функция в квазиклассическом приближении.

Мы уже обсуждали ранее, что квантовая механика переходит в классическую, если дебройлевская длина волны частицы мала. Она должна быть мала по сравнению с характерными размерами конкретной задачи (это аналогично переходу от волновой оптики к геометрической). В данной главе мы рассмотрим случай, когда это условие выполнено, но будем интересоваться не только классическим пределом, но и (малыми) квантовыми поправками к нему — это называется квазиклассическим приближением (или приближением ВКБ — Вентцеля, Крамерса, Бриллюэна).

Сделаем подстановку

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar}\sigma} \quad (3.1)$$

— конечно, мы подразумеваем, что в классике  $\sigma$  близко к действию, но сейчас это просто формальная запись и, например, вещественность  $\sigma$  не подразумевается. Из стационарного УШ получаем

$$\sigma'^2 - i\hbar\sigma'' = 2m(E - U(x)). \quad (3.2)$$

Переход к классике можно рассматривать как результат малости  $\hbar$  (формальный предел  $\hbar \rightarrow 0$ ). Поэтому будем искать  $\sigma$  в виде ряда по  $\hbar$ :

$$\sigma = \sigma_0 + \frac{\hbar}{i}\sigma_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2\sigma_2 + \dots \quad (3.3)$$

В главном приближении берём  $\sigma = \sigma_0$  и отбрасываем в уравнении член, содержащий  $\hbar$ . Это даёт

$$\sigma_0(x) = \pm \int^x p(x')dx', \quad p(x) = \sqrt{2m(E - U(x))}, \quad (3.4)$$

где  $p(x)$  — классический импульс частицы. Это воспроизводит результат (1.29)–(1.30), т.е. мы получаем, что  $\sigma_0$  соответствует классическому действию.

Мы пренебрегли вторым членом в левой части уравнения (3.2) по сравнению с первым. Чтобы это было законно, необходимо  $|\hbar\sigma''/\sigma'^2| \ll 1$ . Левую сторону этого неравенства можно записать как

$$\left| \frac{d}{dx} \frac{\hbar}{\sigma'} \right| \sim \left| \frac{d}{dx} \frac{\hbar}{p} \right|. \quad (3.5)$$

В результате условие применимости квазиклассики можно записать через дебройлевскую длину волны как

$$\left| \frac{d\lambda}{dx} \right| \ll 1, \quad (3.6)$$

т.е. длина волны частицы должна слабо меняться на расстояниях порядка её самой. Это условие нарушается вблизи *классических точек поворота*, т.е. вблизи точек, в которых  $p(x) = 0$  или, что то же самое,  $E = U(x)$ . В этих точках длина волны обращается в бесконечность, т.е. быстро меняется и не может считаться малой.

Рассматривая теперь первый порядок по  $\hbar$  в уравнении (3.2), получаем

$$2\sigma'_0\sigma'_1 + \sigma''_0 = 0 \quad \Rightarrow \quad \sigma'_1 = -\frac{\sigma''_0}{2\sigma'_0} = -\frac{p'}{2p} \quad \Rightarrow \quad \sigma_1 = -\frac{1}{2} \ln p + \text{const.} \quad (3.7)$$

В результате получаем квазиклассическую волновую функцию в виде

$$\psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int^x p(x')dx'\right) + \frac{C_2}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int^x p(x')dx'\right). \quad (3.8)$$

Множитель  $1/\sqrt{p}$  в этой функции легко истолковать. Поскольку вероятность нахождения частицы на отрезке  $[x, x+dx]$  есть  $|\psi(x)|^2 dx$ , эта вероятность с точки зрения классики должна быть пропорциональна времени, в течение которого частица проходит этот отрезок, т.е. обратно пропорциональна скорости. Именно это обеспечивается импульсом в знаменателе.

В *классически запрещённой области*, где  $E < U(x)$ , импульс становится чисто мнимым. Тогда решение принимает вид

$$\psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int^x |p(x')| dx'\right) + \frac{C_2}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int^x |p(x')| dx'\right). \quad (3.9)$$

Здесь необходимо отметить, что поскольку экспоненты стали вещественными, обычно в этой записи нужно оставлять только одно слагаемое, т.к. квазиклассическая точность не позволяет удерживать экспоненциально малые слагаемые рядом с экспоненциально большими.

### 3.2 Граничные условия.

Рассмотрим решение с двух сторон от некоторой точки поворота  $a$ , в которой  $E = U(a)$ . Область, в которой  $E > U(x)$ , называется *классически разрешённой*, а область  $E < U(x)$  — *классически запрещённой*.

Пусть классически запрещённая область находится справа от точки поворота. Тогда в ней вдали от точки поворота решение имеет вид

$$\psi(x) = \frac{C}{2\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p(x')| dx'\right). \quad (3.10)$$

Двойку в знаменателе мы написали для дальнейшего удобства. Нижний предел интегрирования можно выбрать любым (его изменение сводится к переопределению  $C$ ), и мы его выбрали наиболее естественным способом.

Слева от точки поворота есть оба слагаемых:

$$\psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x') dx'\right) + \frac{C_2}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x') dx'\right) \quad (3.11)$$

— нижние пределы интегрирования мы опять же взяли равными  $a$ .

Сшивку должна связывать коэффициенты в этих решениях. Однако особенность квазиклассического предела состоит в том, что он неприменим в некоторой малой окрестности точки поворота. Как же сшивку произвести?

Вблизи точки поворота можно записать

$$E - U(x) \approx F_0(x - a), \quad F_0 = -\left.\frac{dU}{dx}\right|_{x=a} < 0, \quad (3.12)$$

поэтому получаем движение под действием постоянной силы. Можно решить эту задачу (при этом решение запишется через спец. функцию, называемую функцией Эйри), после чего с помощью полученного решения сшить квазиклассические решения с двух сторон от точки поворота. Здесь важно, чтобы область применимости разложения (3.12) перекрывалась с областью применимости квазиклассики. Пусть  $L$  — характерный масштаб изменения потенциала  $U(x)$ . Возьмём разложение (3.12) на пределе применимости, т.е. при  $|x - a| \sim L$ , и потребуем, чтобы условие квазиклассичности (3.6) хорошо выполнялось:

$$\lambda \sim \frac{\hbar}{\sqrt{m|F_0||x-a|}}, \quad \lambda' \sim \frac{\hbar}{\sqrt{m|F_0|}} \frac{1}{|x-a|^{3/2}} \sim \frac{\hbar}{\sqrt{m|F_0|}} \frac{1}{L^{3/2}} \ll 1. \quad (3.13)$$

Ясно, что можно подобрать параметры задачи так, что это условие будет выполняться. То есть мы видим, что линеаризация потенциала и условие квазиклассичности — это разные условия, которые вполне могут быть совместны.

Мы воспользуемся другим способом, связанным с обходом точки нарушения квазиклассичности через комплексную плоскость. Рассмотрим  $\psi(x)$  формально как функцию комплексного переменного  $x$ . Переход от положительных значений  $(x - a)$  к отрицательным произведём по пути, который обходит точку  $a$  и на котором условие квазиклассичности везде выполняется. При этом разложение (3.12) будем считать применимым на этом пути, поэтому когда мы ещё находимся в запрещённой области, в.ф. можно записать как

$$\psi(x) = \frac{C}{2(2m|F_0|(x-a))^{1/4}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_a^x \sqrt{2m|F_0|(x'-a)} dx'\right). \quad (3.14)$$

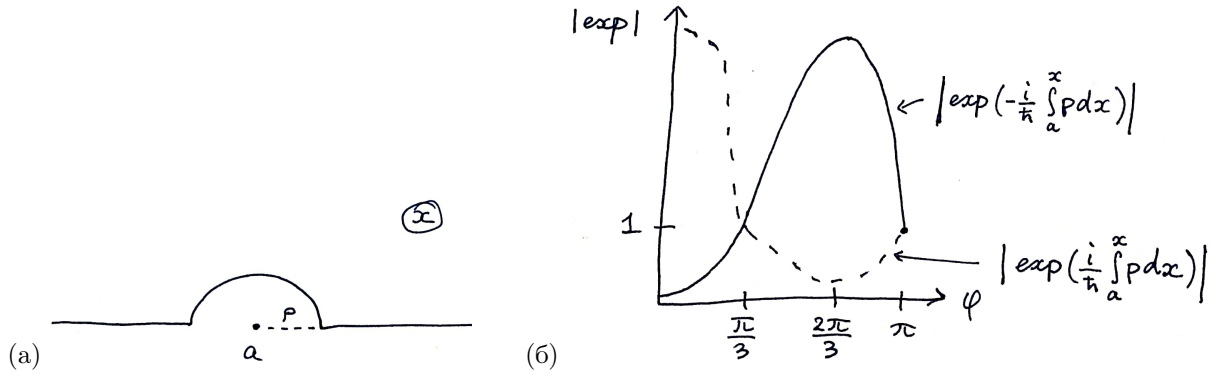


Рис. 3.1: Вывод квазиклассического гран. условия: (а) обход точки поворота в плоскости комплексной координаты, (б) изменение модуля в.ф. при обходе.

Обойдём точку  $x = a$  справа налево по полуокружности радиуса  $\rho$  в верхней полуплоскости комплексного  $x$ . На этой полуокружности<sup>1</sup>

$$x - a = \rho e^{i\varphi}, \quad \int_a^x \sqrt{x' - a} dx' = \int_a^{a+\rho} \sqrt{x' - a} dx' + \int_C \sqrt{x' - a} dx' = \frac{2}{3} \rho^{3/2} + \int_0^\varphi \sqrt{\rho} e^{i\varphi'/2} \rho e^{i\varphi'} d\varphi' = \quad (3.15)$$

$$= \frac{2}{3} \rho^{3/2} e^{i3\varphi/2} = \frac{2}{3} \rho^{3/2} \left( \cos \frac{3\varphi}{2} + i \sin \frac{3\varphi}{2} \right). \quad (3.16)$$

Здесь фаза  $\varphi$  меняется на полуокружности от 0 до  $\pi$ . Обратим внимание на модуль экспоненты в в.ф. (3.14) при обходе — он определяется поведением  $\cos(3\varphi/2)$ . Сначала при изменении  $\varphi$  от 0 до  $2\pi/3$  экспонента растёт по модулю от очень малых значений через единицу до очень больших, а затем, при изменении  $\varphi$  от  $2\pi/3$  до  $\pi$ , — убывает до единицы. То есть показатель экспоненты в конце этого обхода становится чисто мнимым и может быть записан в виде

$$-\frac{1}{\hbar} \sqrt{2m|F_0|} \frac{2}{3} \rho^{3/2} (-i) = -\frac{i}{\hbar} \sqrt{2m|F_0|} \int_a^{a-\rho} \sqrt{a - x'} dx' = -\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x') dx'. \quad (3.17)$$

В то же время, в предэкспоненте формулы (3.14) в результате обхода

$$(x - a)^{-1/4} \mapsto e^{-i\pi/4} (a - x)^{-1/4}. \quad (3.18)$$

В результате функция (3.14) переходит во второе слагаемое формулы (3.11) с коэффициентом  $C_2 = C e^{-i\pi/4}/2$ .

Почему мы получили только одно слагаемое в в.ф. для классически разрешённой области? Давайте попробуем проделать обход по тому же контуру рис. 3.1(а), но в обратную сторону, начав с в.ф. (3.11), и посмотрим, что не так с первым слагаемым. При этом из-за противоположного знака в экспоненте её модуль является обратным к модулю экспоненты из второго слагаемого. Поэтому в начале обхода, когда  $\varphi$  меняется от  $\pi$  до  $2\pi/3$ , первая экспонента убывает до экспоненциально малых значений, а квазиклассическое приближение не позволяет заметить экспоненциально малые вклады на фоне большого основного. Именно поэтому первое слагаемое теряется.

Чтобы это слагаемое получить и определить коэффициент  $C_1$ , нужно произвести почти такой же обход, как мы уже сделали, но по полуокружности в нижней полуплоскости. При этом в.ф. (3.14) переходит в первое слагаемое формулы (3.11) с коэффициентом  $C_1 = C e^{i\pi/4}/2$ .

В итоге мы получаем, что волновой функции (3.14) при  $x > a$  соответствует при  $x < a$  волновая функция

$$\psi(x) = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \cos \left( \frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right). \quad (3.19)$$

Чтобы не нужно было помнить о том, с какой стороны от точки поворота лежит классически запрещённая область, можем записать общее правило, что при переходе от классически запрещённой  $[E < U(x)]$  к классически разрешённой  $[E > U(x)]$  области в.ф. меняется так:<sup>2</sup>

$$\frac{C}{2\sqrt{|p(x)|}} \exp \left( -\frac{1}{\hbar} \left| \int_a^x p(x') dx' \right| \right) \mapsto \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \cos \left( \frac{1}{\hbar} \left| \int_a^x p(x') dx' \right| - \frac{\pi}{4} \right). \quad (3.20)$$

<sup>1</sup>Поскольку ветвь корня уже выбрана соотношением  $x - a = \rho e^{i\varphi}$ , интегрирование от  $a$  до  $x$  можно проводить по любому пути. Мы выбираем путь сначала по вещественной оси вправо, затем по дуге против часовой стрелки.

<sup>2</sup>С обеих сторон написаны модули, но срабатывают они несколько по-разному: слева модуль берётся от чисто мнимой величины, а справа — от чисто вещественной (которая может быть отрицательна).

В особом случае, когда классически доступная область ограничена вертикальной стенкой, ситуация чуть иная. В этом случае в классически запрещённой области  $\psi = 0$ , а в классически разрешённой области квазиклассика применима вплоть до самой границы (импульс не убывает при приближении к точке поворота), поэтому граничное условие состоит просто в том, что в.ф. в классически разрешённой области должна затухать в точке поворота. Поэтому можно сразу написать решение в классически разрешённой области в виде

$$\psi(x) = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \sin \left( \frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' \right). \quad (3.21)$$

### 3.3 Правило квантования Бора–Зоммерфельда.

В случае дискретного спектра квазиклассика работает для уровней с большим номером:  $n \gg 1$ . Действительно, согласно осцилляционной теореме  $n$  определяет число нулей волновой функции, а при этом расстояние между нулями по порядку величины — это длина волны. Если  $n \gg 1$ , длина волны получается малой по сравнению с масштабами, на которых меняется потенциал — это как раз условие квазиклассичности.

Рассмотрим движение, при котором классически разрешённая область ограничена точками поворота:  $b \leq x \leq a$ . Граничное условие в точке  $b$  позволяет написать решение справа от неё в виде

$$\psi(x) = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \cos \left( \frac{1}{\hbar} \int_b^x p(x') dx' - \frac{\pi}{4} \right). \quad (3.22)$$

В то же время граничное условие в точке  $a$  позволяет написать решение слева от неё в виде

$$\psi(x) = \frac{C'}{\sqrt{p(x)}} \cos \left( \frac{1}{\hbar} \int_x^a p(x') dx' - \frac{\pi}{4} \right). \quad (3.23)$$

Но это должно быть одно и то же решение в классически разрешённой области, поэтому фазы двух косинусов должны быть связаны друг с другом определённым образом. Легко заметить, что сумма этих фаз не зависит от координаты. Тогда для однозначности в.ф. необходимо, чтобы эта сумма была равна  $\pi n$ :

$$\frac{1}{\hbar} \int_b^a p(x) dx - \frac{\pi}{2} = \pi n, \quad (3.24)$$

причём тогда  $C = (-1)^n C'$ . Можно записать это соотношение через интеграл по *полному периоду классического движения частицы* (не только слева направо, как в формуле, но и справа налево, что даёт такой же интеграл):

$$\oint p(x) dx = 2\pi\hbar \left( n + \frac{1}{2} \right). \quad (3.25)$$

Это условие определяет в квазиклассическом случае стационарные состояния дискретного спектра и называется правилом квантования Бора–Зоммерфельда [энергия входит сюда через импульс  $p(x) = \sqrt{2m(E - U(x))}$ ].

Можно проверить, что целое число  $n$  в правиле квантования БЗ есть в точности число нулей в.ф. В квазиклассике это число должно быть велико. В то же время сохранение члена  $1/2$  законно, т.к. следующие поправки будут малы по сравнению с единицей. Отметим ещё наглядную запись правила квантования, для которой  $1/2$  важна. Записывая решение вблизи точки поворота  $a$  через падающую и отражённую волны,

$$\psi(x) = \frac{C'}{2\sqrt{p(x)}} \exp \left( \frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' + \frac{i\pi}{4} \right) + \frac{C'}{2\sqrt{p(x)}} \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' - \frac{i\pi}{4} \right), \quad (3.26)$$

видим, что при отражении (т.е. при переходе от левой экспоненты к правой) набирается фаза  $-\pi/2$  (фаза отражения). Таким образом, при движении между точками поворота набирается фаза  $(1/\hbar) \oint p(x) dx$ , а при двух отражениях — фаза  $-\pi$ . В результате полный набег фазы на замкнутой траектории равен

$$\frac{1}{\hbar} \oint p(x) dx - \pi. \quad (3.27)$$

Дискретный уровень аналогичен оптической стоячей волне, которая при обходе по замкнутой траектории набирает фазу  $2\pi n$ . Правило квантования БЗ говорит о том, что действительно полный набег фазы (3.27) равен  $2\pi n$ .<sup>3</sup>

<sup>3</sup>На самом деле, фаза отражения зависит от того, как устроена точка поворота (и её окрестность), и равна  $-\pi/2$  только в стандартном случае [когда области линеаризации потенциала и квазиклассичности перекрываются, как мы обсуждали в связи с формулой (3.13)]. В общем случае, когда выведенные нами правила шивки могут быть неприменимы, фазы отражения могут быть другими, и в правой части правила БЗ (3.25) вместо  $(n + 1/2)$  надо писать  $(n + \alpha)$ , где  $0 \leq \alpha \leq 1$ . Например, для случая вертикальной стенки фаза отражения равна  $-\pi$  [именно такая фаза отражения соответствует формуле (3.21)]. Тогда для потенциала, в котором есть вертикальная стенка, а вторая точка поворота — «обычная», два отражения дадут фазу  $-\pi - \pi/2 = -3\pi/2$ , и в правиле БЗ будет  $\alpha = 3/4$ .

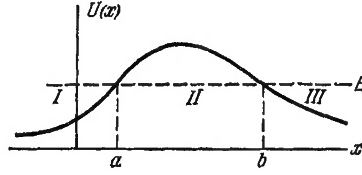


Рис. 3.2: Прохождение через потенциальный барьер.

- Интеграл от импульса по замкнутой классической траектории даёт площадь фазового пространства, охватываемую этой траекторией. Эта площадь приходится на  $n$  квантовых состояний, энергия которых не превышает заданной. Поэтому на одно квантовое состояние приходится площадь  $2\pi\hbar$ .

Давайте теперь на основании правила БЗ проанализируем распределение уровней. Пусть  $\Delta E$  — расстояние между соседними уровнями. При больших  $n$  оно мало по сравнению с самими энергиями уровней, поэтому, взяв в формуле (3.25) изменение обеих сторон, соответствующее переходу к следующему уровню, получаем:

$$\Delta E \oint \frac{\partial p}{\partial E} dx = 2\pi\hbar. \quad (3.28)$$

Учитывая, что  $\partial E / \partial p = v$ , можем написать

$$\oint \frac{\partial p}{\partial E} dx = \oint \frac{dx}{v} = T \quad (3.29)$$

— получили период классического движения. Он зависит от энергии, но между соседними состояниями меняется слабо. Для расстояния между уровнями находим

$$\Delta E = \frac{2\pi}{T} \hbar = \hbar\omega. \quad (3.30)$$

Классическая частота  $\omega$  тоже зависит от  $E$ , но между соседними уровнями меняется слабо. Поэтому для целого ряда соседних уровней (таких, что изменения  $n$  малы по сравнению с самим  $n$ ) спектр можно считать эквидистантным (хотя в целом это расстояние между уровнями  $\Delta E$  медленно меняется с изменением  $E$ ).

### 3.4 Прохождение под барьером (туннелирование).

Рассмотрим задачу о прохождении через потенциальный барьер, см. рис. 3.2. Предполагаем, что потенциал  $U(x)$  удовлетворяет условию квазиклассичности — в этом случае коэффициент прохождения можно найти в общем виде.

Для решения этой задачи нужно рассмотреть вопрос о граничных условиях в окрестности правой точки поворота. Особенность этой ситуации в том, что в задаче о прохождении решение в классически разрешённой области справа должно иметь вид уходящей волны (а не косинуса, как было раньше). Тем не менее, технически все делается точно так же, с помощью обхода точки поворота в комплексной плоскости, и результат для соответствия в.ф. при переходе от области  $x > b$  к области  $x < b$  имеет вид:

$$\frac{C}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_b^x p(x') dx' + \frac{i\pi}{4}\right) \mapsto \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \left| \int_b^x p(x') dx' \right| \right). \quad (3.31)$$

Пусть теперь в области III имеется прошедшая волна

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{T}{v(x)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_b^x p(x') dx' + \frac{i\pi}{4}\right), \quad v(x) = \frac{p(x)}{m}. \quad (3.32)$$

В этой в.ф. положительный коэффициент  $T$  имеет смысл плотности потока. По правилу (3.31) находим в.ф. в области II (в первой экспоненте переставляем пределы под знаком модуля):

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{T}{|v(x)|}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \left| \int_x^b p(x') dx' \right| \right) = \sqrt{\frac{T}{|v(x)|}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \left| \int_a^b p(x') dx' \right| - \frac{1}{\hbar} \left| \int_a^x p(x') dx' \right| \right). \quad (3.33)$$

Далее, по правилу (3.20) находим решение в области I:

$$\psi(x) = 2\sqrt{\frac{T}{v(x)}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \left| \int_a^b p(x') dx' \right| \right) \cos\left(-\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' - \frac{\pi}{4}\right). \quad (3.34)$$

Если положить здесь

$$T = \exp \left( -\frac{2}{\hbar} \int_a^b |p(x)| dx \right), \quad (3.35)$$

эта функция принимает вид

$$\psi(x) = \frac{2}{\sqrt{v(x)}} \cos \left( \frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right) = \frac{1}{\sqrt{v(x)}} \exp \left( \frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' + \frac{i\pi}{4} \right) + \frac{1}{\sqrt{v(x)}} \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' - \frac{i\pi}{4} \right). \quad (3.36)$$

Здесь содержится падающая и отражённая волна. Плотность потока в падающей волне равна единице, поэтому  $T$  — это вероятность прохождения. Формула (3.35) применима, если (отрицательный) показатель экспоненты велик по модулю, а сама вероятность мала. Именно поэтому амплитуда отражённой волны совпадает с падающей — на самом деле они различаются на экспоненциально малую величину, но эта разница в квазиклассике теряется. Но в прошедшей волне именно эта малость определяет весь результат.

### 3.5 Надбарьерное отражение.

Обратим внимание, что вероятность перехода с одной стороны барьера на другую (т.е. вероятность туннелирования) определяется экспонентой, в которой стоит абсолютная величина подбарьерного действия — см. формулу (3.35), в которой подбарьерным действием является

$$S(a, b) = \int_a^b p(x) dx. \quad (3.37)$$

Это подбарьерное действие является чисто мнимым, и формулу (3.35) (в которой для дальнейшего обобщения мы теперь пишем вместо вероятности прохождения более общую вероятность перехода  $w$  из одного состояния квантовой системы в другое) можно переписать как

$$w = \exp \left( -\frac{2}{\hbar} \operatorname{Im} S(a, b) \right) = \exp \left( -\frac{2}{\hbar} \operatorname{Im} [S(x_1, x_0) + S(x_0, x_2)] \right). \quad (3.38)$$

В последней записи имеется в виду следующее: мы рассматриваем переход из точки  $x_1$  слева от барьера в точку  $x_2$  справа от барьера, а точку  $x_0$  мы будем называть точкой перехода (из одного состояния в другое), и эту точку можно выбрать где угодно под барьером (т.е.  $a < x_0 < b$ ). Как именно выбраны точки  $x_1$  и  $x_2$  также неважно, поскольку вклад в действие, который набирается в классически разрешённой области, чисто вещественный и после взятия мнимой части выпадает. Таким образом, логика последней записи в формуле (3.38) следующая: представить переход из одного состояния квантовой системы в другое как переход из исходного состояния в «точку перехода», а затем — из точки перехода в конечное состояние.

Оказывается, что в такой записи формула является весьма общей (конечно, в рамках квазиклассического приближения, так что действие в экспоненте должно быть велико) и является основой метода *комплексных классических траекторий*. В частности, эта формула применима к задаче о надбарьерном отражении. В этом случае исходное состояние — это падающая волна, конечное состояние — отражённая волна, вероятность перехода — это вероятность отражения  $R$ , и она должна быть мала (в рамках квазиклассики). То есть если раньше нам нужно было, чтобы туннелирование было достаточно «подбарьерным», чтобы выполнялось  $T \ll 1$  (энергия достаточно низка по сравнению с вершущей потенциала), то теперь отражение должно быть достаточно «надбарьерным», чтобы выполнялось  $R \ll 1$  (энергия достаточно высока по сравнению с вершущей потенциала). В промежуточной области энергий, близких к вершущей потенциала, квазиклассика не позволяет найти коэффициенты прохождения и отражения.

Итак, рассматриваем задачу о надбарьерном отражении. Если мы теперь рассмотрим уравнение на классическую точку поворота  $U(x_0) = E$ , то оно не имеет решений при действительных  $x_0$  (т.к. энергия всегда выше потенциала). Но в то же время оно имеет решения в области комплексных  $x_0$  [таких решений может быть несколько; в этом случае нужно выбирать то, при котором полное действие в формуле (3.38) положительно и минимально по величине]. Таким образом, в плоскости комплексного  $x_0$  мы получаем ситуацию, похожую на ту, с которой мы имели дело при выводе гран.условий, но точка перехода теперь не лежит на вещественной оси, как это было на рис. 3.1(а).

Как и при выводе гран.условий в разделе 3.2, нам нужно установить соответствие между волновыми функциями далеко справа (прошедшая волна) и далеко слева от барьера (падающая и отражённая волны). Технически это можно сделать аналогично методу, использованному в разделе 3.2, учитывая что теперь точка перехода смещена относительно вещественной оси. Запишем прошедшую волну в виде

$$\psi_t(x) = \frac{t}{\sqrt{p(x)}} \exp \left( \frac{i}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' \right), \quad (3.39)$$



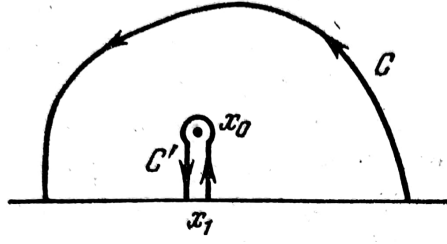


Рис. 3.3: (Рисунок из Ландау–Лифшица) Контуры, используемые для вычисления вероятности надбарьерного отражения.

где  $x_1$  — какая-либо точка на вещественной оси (её выбор влияет лишь на фазу  $t$ ; например, можно взять  $x_1 = \operatorname{Re} x_0$ , см. рис. 3.3). Далее обойдём эту точку в верхней полуплоскости по контуру  $C$ , проходящему достаточно далеко от точки поворота. При таком обходе меняется знак  $p(x)$ , т.к.  $p(x) = \sqrt{2m(E - U(x))}$ , поэтому наше решение перейдёт в отражённую волну

$$\psi_r(x) = \frac{r}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx'\right) \quad (3.40)$$

(фазовый множитель мы опять же не учитываем). Вероятность отражения  $R = |r|^2$  теперь может быть найдена, если учесть, что наша процедура обхода дала нам связь между решениями  $\psi_t$  и  $\psi_r$ , и при этом  $|t| \approx 1$ . Поэтому

$$R = \left| \frac{\psi_r}{\psi_t} \right|^2 = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \operatorname{Im} \int_C p(x) dx\right). \quad (3.41)$$

Теперь, просто рассматривая это выражение в рамках ТФКП, мы можем деформировать путь интегрирования в экспоненте, в частности, можем превратить его в путь, обозначенный  $C'$  на рис. 3.3 [он зацепляется за точку  $x_0$ , т.к. это точка ветвления квадратного корня  $\sqrt{E - U(x)}$ , входящего в выражение для  $p(x)$ , а разрез мы считаем проведённым вертикально вниз]. Тогда интеграл сводится к удвоенному интегралу от  $x_1$  до  $x_0$ , и мы окончательно получаем

$$R = \exp\left(-\frac{4}{\hbar} \operatorname{Im} \int_{x_1}^{x_0} p(x) dx\right). \quad (3.42)$$

Отметим, что точка  $x_0$  была выбрана лежащей в верхней полуплоскости, т.к. именно в этом случае величина, стоящая в экспоненте, будет отрицательной.

Нужно иметь в виду, что в нашем выводе подразумевалось, что у функции  $U(x)$  нет особых точек. Именно этим объясняется, что в некоторых задачах  $R$  для надбарьерного отражения подавляется не экспоненциальным образом [а, например, степенным, как в случае задач об отражении от прямоугольной ступеньки или прямоугольной ямы/барьера — в этих случаях функция  $U(x)$  разрывна].



## Глава 4

# Теория возмущений.

В курсе «Аналитические приближённые методы» разбиралась тема, связанная с построением теории возмущений в линейной алгебре. Все эти результаты применимы и в квантовой механике. По сути разницы между матрицами и операторами нет (от операторов в квантовой механике всегда можно перейти к матрицам). Поэтому по разделу, посвящённому стационарной теории возмущений, мы пройдемся тезисно.

В курсе «Аналитические приближённые методы» теория строилась для нормальных матриц, т.е. таких, для которых  $[\hat{A}, \hat{A}^\dagger] = 0$ . Эрмитовы матрицы (и операторы), с которыми мы имеем дело в квантовой механике — частный случай нормальных.

Напоминалка — чем особенны нормальные матрицы:

- *Спектральная теорема* утверждает, что матрица  $\hat{A}$  является нормальной тогда и только тогда, когда она может быть диагонализирована некоторой унитарной матрицей:  $\hat{A} = \hat{U} \hat{\Lambda} \hat{U}^\dagger$ , где  $\hat{\Lambda} = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots)$  — диагональная матрица, а  $\hat{U}$  — унитарная. При этом оказывается, что  $\lambda_i$  — собственные значения матрицы  $\hat{A}$ , а столбцы матрицы  $\hat{U}$  — нормированные собственные векторы матрицы  $\hat{A}$  (расставленные в том же порядке, что и  $\lambda_i$  в  $\hat{\Lambda}$ ).
- Важное для нас свойство: собственные векторы нормальной матрицы, соответствующие различным собственным значениям, образуют ортогональный базис (можно нормировать и получить ортонормированный базис). То есть если  $\hat{A}|n\rangle = \lambda_n|n\rangle$  и  $\hat{A}|m\rangle = \lambda_m|m\rangle$ , то скалярное произведение  $\langle n|m\rangle = 0$  при  $n \neq m$ .

### 4.1 Стационарная теория возмущений.

Пусть имеется гамильтониан  $\hat{H}_0$ , собственные значения и (ортонормированные) собственные функции которого мы знаем:

$$\hat{H}_0|\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle, \quad \langle\psi_n^{(0)}|\psi_m^{(0)}\rangle = \delta_{nm}. \quad (4.1)$$

Нас интересуют собственные значения  $E_n$  и собственные векторы  $|\psi_n\rangle$  возмущённого гамильтониана  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{\mathcal{V}}$ :

$$\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle. \quad (4.2)$$

Предполагаем, что возмущение  $\hat{\mathcal{V}}$  не зависит от времени — это называется *стационарным* случаем. Можно искать ответы в виде разложений по степеням возмущения:

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \dots, \quad (4.3)$$

$$|\psi_n\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + |\psi_n^{(1)}\rangle + |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots \quad (4.4)$$

(Иногда возмущение пишут в виде  $\hat{\mathcal{V}} = \epsilon \hat{\mathcal{V}}_0$  с малым параметром  $\epsilon$ ; тогда разложение идет по степеням  $\epsilon$ .)

На самом деле, вместо прямолинейной записи (4.4) удобнее искать собственные векторы в виде

$$|\psi_n\rangle = \sum_m c_m |\psi_m^{(0)}\rangle, \quad \text{где } c_m = c_m^{(0)} + c_m^{(1)} + c_m^{(2)} + \dots, \quad (4.5)$$

— мы будем делать именно так.

Подставляем всё в уравнение (4.2):

$$(\hat{H}_0 + \hat{\mathcal{V}}) \sum_m c_m |\psi_m^{(0)}\rangle = E_n \sum_m c_m |\psi_m^{(0)}\rangle. \quad (4.6)$$

Учитывая действие невозмущенного гамильтониана, получаем

$$\sum_m c_m (E_m^{(0)} + \hat{V}) |\psi_m^{(0)}\rangle = \sum_m c_m E_n |\psi_m^{(0)}\rangle. \quad (4.7)$$

Берем проекцию на  $\langle \psi_k^{(0)} |$ , получаем

$$(E_n - E_k^{(0)}) c_k = \sum_m V_{km} c_m, \quad (4.8)$$

где матричные элементы  $V_{km}$  определены следующим образом:

$$V_{km} \equiv \langle \psi_k^{(0)} | \hat{V} | \psi_m^{(0)} \rangle. \quad (4.9)$$

Смысл этих матричных элементов необходимо пояснить. Подобно тому как пространственный вектор имеет разные компоненты в разных базисах, матрицу тоже можно рассматривать в разных базисах. Если мы взяли матрицу  $\hat{A}$ , состоящую из элементов  $A_{ij}$ , то можно сказать, что это элементы матрицы в базисе, заданном векторами  $\vec{a}_1 = (1, 0, 0, \dots)^T$ ,  $\vec{a}_2 = (0, 1, 0, \dots)^T$  и т.д. Это означает, что  $A_{ij} = \vec{a}_i^\dagger \hat{A} \vec{a}_j$ . Но мы можем выбрать другой базис, задаваемый некоторыми векторами  $\vec{b}_i$ , тогда по отношению к нему матрица будет иметь матричные элементы  $A'_{ij} = \vec{b}_i^\dagger \hat{A} \vec{b}_j$ . В этом смысле  $V_{km}$  — матричные элементы матрицы  $\hat{V}$ , вычисленные в базисе собственных функций (векторов)  $|\psi_k^{(0)}\rangle$ .

Далее мы будем рассматривать уравнение (4.8) в разных порядках по возмущению. Детали рассмотрения зависят от того, является ли невозмущенное собственное значение  $E_n^{(0)}$  невырожденным (т.е. ему соответствует только один собственный вектор) или вырожденным (т.е. ему соответствуют несколько линейно независимых собственных векторов). Рассмотрим эти ситуации по-отдельности.

## 4.2 Стационарная теория возмущений: невырожденное собственное значение.

Пусть нас интересует собственное значение и собственная функция с номером  $n$ . Тогда из записи (4.5) очевидно, что  $c_k^{(0)} = \delta_{kn}$ . В нулевом порядке уравнение (4.8) (мы должны сохранить лишь нулевой порядок по  $V$  в обеих сторонах уравнения) даёт тривиальное равенство

$$(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}) \delta_{kn} = 0. \quad (4.10)$$

### 4.2.1 Первый порядок теории возмущений.

Первый порядок:

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)}, \quad (4.11)$$

$$c_k = \delta_{kn} + c_k^{(1)}, \quad (4.12)$$

и уравнение (4.8) в первом порядке даёт

$$E_n^{(1)} \delta_{kn} + (E_n^{(0)} - E_k^{(0)}) c_k^{(1)} = \sum_m V_{km} \delta_{mn} = V_{kn}. \quad (4.13)$$

Отсюда при  $k = n$  получаем

$$E_n^{(1)} = V_{nn}, \quad (4.14)$$

таким образом мы нашли поправку первого порядка к собственному значению. При  $k \neq n$  получаем поправку первого порядка к коэффициентам, определяющим собственный вектор:

$$k \neq n: \quad c_k^{(1)} = \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}. \quad (4.15)$$

При этом коэффициент  $c_n^{(1)}$  остаётся неопределённым. Он должен быть найден из условия нормировки. Записав

$$|\psi_n\rangle = (1 + c_n^{(1)}) |\psi_n^{(0)}\rangle + \sum'_m \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |\psi_m^{(0)}\rangle \quad (4.16)$$

(штрих у знака суммы означает, что суммирование ведётся по всем значениям кроме  $n$ ) и учитывая ортонормированность системы невозмущенных собственных функций, с точностью до первого порядка получаем

$$\langle \psi_n | \psi_n \rangle = 1 + 2 \operatorname{Re} c_n^{(1)}. \quad (4.17)$$

Отсюда ясно, что мы можем взять

$$c_n^{(1)} = 0. \quad (4.18)$$

Поэтому в результате поправка первого порядка к собственной функции даётся выражением

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum'_m \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |\psi_m^{(0)}\rangle. \quad (4.19)$$

Из формулы (4.19) следует условие применимости теории возмущений. Поскольку поправка к собственному вектору должна быть мала, все коэффициенты в сумме должны быть много меньше единицы:

$$|V_{mn}| \ll |E_n^{(0)} - E_m^{(0)}|. \quad (4.20)$$

### 4.2.2 Второй порядок теории возмущений.

Теперь

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)}, \quad (4.21)$$

$$c_k = \delta_{kn} + c_k^{(1)} + c_k^{(2)}, \quad (4.22)$$

и уравнение (4.8) во втором порядке даёт:

$$E_n^{(2)} \delta_{kn} + E_n^{(1)} c_k^{(1)} + (E_n^{(0)} - E_k^{(0)}) c_k^{(2)} = \sum_m V_{km} c_m^{(1)}. \quad (4.23)$$

При  $k = n$  получаем поправку второго порядка к собственному значению:

$$E_n^{(2)} = \sum'_m \frac{V_{nm} V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = \sum'_m \frac{|V_{nm}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad (4.24)$$

(в последнем равенстве мы учли, что в силу эрмитовости  $V_{mn} = V_{nm}^*$ ). Отсюда, в частности, следует, что поправка второго порядка к энергии основного состояния всегда отрицательна (т.к. все знаменатели в сумме отрицательны).

При  $k \neq n$  из уравнения (4.23) находим

$$c_k^{(2)} = \sum'_m \frac{V_{km} V_{mn}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})} - \frac{V_{kn} V_{nn}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2}. \quad (4.25)$$

Аналогично тому что было в первом порядке, коэффициент  $c_n^{(2)}$  остаётся неопределённым и должен быть найден из условия нормировки. Записывая

$$|\psi_n\rangle = (1 + c_n^{(2)}) |\psi_n^{(0)}\rangle + \sum'_m c_m^{(1)} |\psi_m^{(0)}\rangle + \sum'_m c_m^{(2)} |\psi_m^{(0)}\rangle, \quad (4.26)$$

с точностью до второго порядка получаем

$$\langle \psi_n | \psi_n \rangle = 1 + 2 \operatorname{Re} c_n^{(2)} + \sum'_m |c_m^{(1)}|^2. \quad (4.27)$$

Отсюда ясно, что для выполнения условия нормировки мы можем взять

$$c_n^{(2)} = -\frac{1}{2} \sum'_m |c_m^{(1)}|^2 = -\frac{1}{2} \sum'_m \frac{|V_{mn}|^2}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})^2}. \quad (4.28)$$

## 4.3 Стационарная теория возмущений: вырожденное собственное значение.

Пусть теперь интересующее нас невозмущённое собственное значение  $E_n^{(0)}$  вырождено с кратностью  $s$ . Это означает, что существует  $s$  линейно независимых собственных функций  $|\psi_n^{(0)}\rangle, |\psi_{n'}^{(0)}\rangle, |\psi_{n''}^{(0)}\rangle, \dots$ , соответствующих одному и тому же собственному значению  $E_n^{(0)}$  невозмущённого гамильтониана.

Выбор собственных функций «внутри» вырожденного собственного значения неоднозначен, можно взять любые их линейные комбинации, и при этом по-прежнему будут получаться функции, отвечающие тому же  $E_n^{(0)}$ . Но есть так называемые «правильные» функции нулевого приближения — это такие комбинации  $c_n^{(0)} |\psi_n^{(0)}\rangle + c_{n'}^{(0)} |\psi_{n'}^{(0)}\rangle + \dots$ , которые

*слабо* меняются под действием возмущения. Иными словами, поправки к таким комбинациям за счёт возмущения должны быть малы в меру малости возмущения. Это нетривиальное требование, для произвольных комбинаций такого не будет.

Можно пояснить эту ситуацию на физическом примере. Пусть у нас есть совершенно изотропный ферромагнетик с некоторой намагниченностью  $\mathbf{M}$ . Мы хотим приложить слабое магнитное поле. Ясно, что величина намагниченности тоже изменится слабо. Но давайте подумаем про намагниченность в полном векторном смысле. Изначально она может быть направлена куда угодно. Когда же мы приложим поле по оси  $z$ , намагниченность сначала повернётся и станет направлена по оси  $z$  (теперь ей не всё равно, куда смотреть), а затем немного изменится по модулю. То есть изменение вектора  $\mathbf{M}$  вообще говоря не мало! Есть поправка нулевого порядка, связанная с перенаправлением  $\mathbf{M}$  по  $z$ . А если мы, имея в виду дальнейшее включение поля по  $z$ , заранее направим  $\mathbf{M}$  именно туда, тогда поправка к вектору будет мала. Таким образом, намагниченность, направленная по  $z$  — это правильная намагниченность нулевого приближения. С собственными функциями (векторами) ситуация аналогична. Коэффициенты  $c_n^{(0)}$ ,  $c_{n'}^{(0)}$ , ... никакой малости не содержат — просто, зная какое возмущение затем будет приложено, мы должны заранее повернуть собственные векторы в нужную сторону.

Технически это делается довольно просто. Запишем уравнение (4.8) при  $k = n, n', \dots$  в первом порядке теории возмущений. Поскольку все эти индексы соответствуют одному вырожденному уровню, разность энергий в левой части не содержит нулевого порядка, и мы оставляем там первый порядок  $E^{(1)}$ . В то же время, в правой стороне первый порядок уже обеспечен за счёт  $V_{km}$ , поэтому  $c_k$  с обеих сторон нужно брать в нулевом порядке:

$$c_n = c_n^{(0)}, \quad c_{n'} = c_{n'}^{(0)}, \quad \dots \quad (4.29)$$

$$c_m = 0 \quad \text{при } m \neq n, n', \dots \quad (4.30)$$

В результате уравнение (4.8) даёт  $s$  уравнений

$$E^{(1)}c_n^{(0)} = \sum_{n'} V_{nn'}c_{n'}^{(0)} \quad (4.31)$$

для всех  $n$  внутри вырожденного собственного значения. Перепишем это в виде

$$\sum_{n'} (V_{nn'} - E^{(1)}\delta_{nn'})c_{n'}^{(0)} = 0, \quad (4.32)$$

откуда ясно, что для существования нетривиального решения для коэффициентов  $c_n^{(0)}$  необходимо

$$\det[V_{nn'} - E^{(1)}\delta_{nn'}] = 0. \quad (4.33)$$

Это уравнение называется секулярным. Оно полиномиальное,  $s$ -ой степени по  $E^{(1)}$ , поэтому имеет  $s$  корней (вещественных, т.к. матрица эрмитова). Сумма его корней равна сумме диагональных элементов  $V_{nn} + V_{n'n'} + \dots$ . Это можно доказать следующим образом. Обозначим корни  $\lambda_i$ , тогда

$$\begin{aligned} \det[V_{nn'} - E^{(1)}\delta_{nn'}] &= (\lambda_1 - E^{(1)})(\lambda_2 - E^{(1)}) \dots (\lambda_s - E^{(1)}) = \\ &= (-E^{(1)})^s + (\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_s)(-E^{(1)})^{s-1} + \dots \end{aligned} \quad (4.34)$$

С другой стороны, при вычислении детерминанта напрямую получится длинная сумма, но степени  $(E^{(1)})^s$  и  $(E^{(1)})^{s-1}$  возникнут только из одного слагаемого этой суммы, содержащего произведение диагональных элементов матрицы, т.е. из слагаемого  $(V_{11} - E^{(1)})(V_{22} - E^{(1)}) \dots (V_{ss} - E^{(1)})$ . Поэтому

$$\det[V_{nn'} - E^{(1)}\delta_{nn'}] = (-E^{(1)})^s + (V_{11} + V_{22} + \dots + V_{ss})(-E^{(1)})^{s-1} + \dots \quad (4.35)$$

Сравнение записей (4.34) и (4.35) доказывает сделанное выше утверждение.

Итак, рассматривая вопрос о коэффициентах, задающих правильные собственные функции нулевого приближения, мы получили секулярное уравнение (4.33), из которого находят поправки первого порядка к вырожденному уровню. В результате, вообще говоря, имеет место так называемое снятие вырождения, которое может быть полным (если все корни уравнения различны) либо частичным (вырожденное собственное значение расщепляется, но по крайней мере некоторые расщеплённые собственные значения остаются вырожденными с меньшей кратностью).

Сами же коэффициенты  $c_n^{(0)}$ , задающие правильные собственные функции нулевого приближения, нужно находить из уравнения (4.32), подставляя туда по очереди найденные значения поправок  $E^{(1)}$ .

#### 4.4 Нестационарная теория возмущений.

Теперь рассмотрим ситуацию, в которой возмущение зависит от времени:  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(x, t)$ . В этом случае вообще нет вопроса о поправках к уровням энергии, т.к. для зависящего от времени гамильтониана энергия не сохраняется, так что стационарных состояний не существует. В то же время, имеет смысл вопрос о приближённом вычислении волновых функций. На этот вопрос даёт ответ *нестационарная теория возмущений*.

У невозмущённого гамильтониана имеются собственные функции (пишем их с учётом временной зависимости)

$$\Psi_n^{(0)}(x, t) = \psi_n^{(0)}(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^{(0)} t}. \quad (4.36)$$

Пусть функция с некоторым конкретным номером  $n$  является невозмущённой функцией. Мы будем искать решение полного УШ (с учётом возмущения) в виде разложения по базису невозмущённых функций:

$$\Psi_n(x, t) = \sum_m c_{mn}(t) \Psi_m^{(0)}(x, t). \quad (4.37)$$

Второй индекс у коэффициентов показывает, какое состояние было невозмущённым, и в нулевом порядке имеем  $c_{mn}^{(0)} = \delta_{mn}$ . Полное УШ имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_n}{\partial t} = (\hat{H}_0 + \hat{V}) \Psi_n. \quad (4.38)$$

Невозмущённые функции по определению удовлетворяют уравнению

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_m^{(0)}}{\partial t} = \hat{H}_0 \Psi_m^{(0)}, \quad (4.39)$$

поэтому подстановка разложения (4.37) в полное УШ даёт

$$i\hbar \sum_m \frac{\partial c_{mn}}{\partial t} \Psi_m^{(0)} = \sum_m c_{mn} \hat{V} \Psi_m^{(0)}. \quad (4.40)$$

Возьмём проекцию на невозмущённое состояние с номером  $k$ :

$$i\hbar \frac{\partial c_{kn}}{\partial t} = \sum_m V_{km}(t) e^{i\omega_{km}t} c_{mn}, \quad (4.41)$$

где мы воспользовались записью

$$\int dx \Psi_k^{(0)*}(x, t) \hat{V}(x, t) \Psi_m^{(0)}(x, t) = V_{km}(t) e^{i\omega_{km}t}, \quad V_{km}(t) = \int dx \psi_k^{(0)*}(x) \hat{V}(x, t) \psi_m^{(0)}(x), \quad \omega_{km} = \frac{E_k^{(0)} - E_m^{(0)}}{\hbar}. \quad (4.42)$$

Мы отделили осциллирующий временной множитель, связанный с разностью энергий, хотя оставшиеся при нём матричные элементы  $V_{km}(t)$  тоже зависят от времени, правда уже только за счёт явной зависимости от времени возмущения  $\hat{V}(x, t)$ .

Для первых поправок из уравнения (4.41) получаем

$$i\hbar \frac{\partial c_{kn}^{(1)}}{\partial t} = V_{kn}(t) e^{i\omega_{kn}t}, \quad (4.43)$$

откуда

$$c_{kn}^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t V_{kn}(t') e^{i\omega_{kn}t'} dt'. \quad (4.44)$$

Этой формулой определяются волновые функции первого приближения.<sup>1</sup> Нижний предел интегрирования в этой формуле определяется точной постановкой задачи (в каком состоянии система находилась в определённый момент времени, а также когда начало действовать возмущение).

<sup>1</sup>В случае, когда возмущение не зависит от времени, при  $k \neq n$  формула (4.44) воспроизводит стационарную формулу (4.15). А если  $k = n$ , формула (4.44) даёт неограниченный линейный рост по времени, поэтому является неприменимой. Для определения  $c_{nn}^{(1)}$  в этом случае надо пользоваться соображением, связанным с нормировкой — см. раздел 4.2.1.

### 4.5 Вероятности переходов.

Обратимся к общей формуле (4.44) и предположим, что возмущение достаточно быстро затухает при  $t \rightarrow \pm\infty$  (или вообще действует лишь в течение конечного времени). Тогда при  $t \rightarrow \infty$  в первом приближении получим

$$\Psi_n = \sum_m c_{mn}(\infty) \Psi_m^{(0)}(t), \quad c_{mn}(\infty) = \delta_{mn} + c_{mn}^{(1)}(\infty) = \delta_{mn} - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} V_{mn}(t) e^{i\omega_{mn}t} dt. \quad (4.45)$$

В этой ситуации, поскольку при  $t \rightarrow \infty$  гамильтониан снова становится невозмущённым, имеет смысл вопрос о том, с какой вероятностью в результате эволюции система окажется в некотором стационарном состоянии с номером  $k$ . Эта вероятность равна квадрату модуля коэффициента  $c_{kn}(\infty)$ .

Таким образом, под действием возмущения система может перейти из начального ( $i = \text{initial}$ ) стационарного состояния в любое другое конечное ( $f = \text{final}$ ). Вероятность такого перехода равна<sup>2</sup>

$$w_{fi} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} V_{fi}(t) e^{i\omega_{fi}t} dt \right|^2. \quad (4.46)$$

Если возмущение меняется во времени адиабатически (т.е. крайне медленно, так что изменение  $V_{fi}(t)$  за время порядка  $1/\omega_{fi}$  очень мало), то интеграл из-за осциллирующей экспоненты стремится к нулю. Поэтому вероятности переходов в этом пределе стремятся к нулю, и система будет оставаться в исходном состоянии.

В целом, формула (4.46) показывает, что вероятность перехода между состояниями определяется квадратом модуля фурье-гармоники матричного элемента возмущения на частоте, соответствующей разности энергий этих состояний.

### 4.6 Периодическое возмущение.

Рассмотрим важный случай периодического возмущения:

$$\hat{V}(t) = \hat{F} e^{-i\omega t} + \hat{G} e^{i\omega t}, \quad (4.47)$$

где в силу эрмитовости  $\hat{V}^\dagger = \hat{V}$  для независимых от времени операторов  $\hat{F}$  и  $\hat{G}$  должно выполняться соотношение  $\hat{G} = \hat{F}^\dagger$ , откуда  $G_{kn} = F_{nk}^*$ . В результате

$$V_{kn}(t) e^{i\omega_{kn}t} = F_{kn} e^{i(\omega_{kn}-\omega)t} + F_{nk}^* e^{i(\omega_{kn}+\omega)t}. \quad (4.48)$$

Подставляя это в формулу (4.44), находим

$$c_{kn}^{(1)}(t) = -\frac{F_{kn} e^{i(\omega_{kn}-\omega)t}}{\hbar(\omega_{kn}-\omega)} - \frac{F_{nk}^* e^{i(\omega_{kn}+\omega)t}}{\hbar(\omega_{kn}+\omega)}. \quad (4.49)$$

<sup>2</sup>Хотя формула (4.45) для в.ф. с учётом первого порядка теории возмущений справедлива и в случае  $m = n$ , она оказывается недостаточной для решения вопроса о вероятности остаться в исходном состоянии с номером  $n$ . В этом случае мы получим

$$c_{nn}(\infty) = 1 + c_{nn}^{(1)}(\infty) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} V_{nn}(t) dt,$$

и попытка найти вероятность остаться по формуле

$$w_{nn} = |c_{nn}(\infty)|^2 = 1 + \left| \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} V_{nn}(t) dt \right|^2$$

приводит к противоречию. Мы здесь учли, что  $V_{nn}(t)$  — диагональный матричный элемент эрмитова оператора, а потому — величина вещественная. Противоречие заключается в том, что вероятность остаться в исходном состоянии как будто оказывается больше единицы. Дело здесь в том, что поправка  $c_{nn}^{(1)}$  возникает на фоне единицы, а тогда для нахождения вероятности с точностью до  $V^2$  мы должны учитывать также вклад  $c^{(2)}$ :

$$c = 1 + c^{(1)} + c^{(2)} + \dots, \quad |c|^2 \approx 1 + 2 \operatorname{Re} c^{(1)} + |c^{(1)}|^2 + 2 \operatorname{Re} c^{(2)}.$$

Парадокс получается, т.к. мы не учли последнее слагаемое. Если же его учесть, рассмотрев второй порядок теории возмущений, то получится результат

$$w_{nn} = 1 - \sum_m' w_{mn},$$

где  $w_{mn}$  при  $m \neq n$  даются формулой (4.46). Поэтому никакого противоречия нет, и формула для вероятности остаться в исходном состоянии полностью согласуется с формулой для вероятности перейти в другие состояния. См. также на эту тему задачу 8.39 из 3-го издания задачника Галицкого, Карнакова, Когана.

Эта формула несколько условна, т.к. мы не учли нижние пределы интегрирования (которые определяются точной постановкой задачи; позже мы это учтём). Но здесь можно увидеть важную особенность случая периодического возмущения. Поскольку эти коэффициенты должны давать малые поправки, знаменатели не должны становиться очень малыми, т.е. частота периодического возмущения не должна попадать в резонанс.<sup>3</sup>

## 4.7 Вероятность ионизации под действием периодического возмущения.

Рассмотрим теперь переходы из дискретного спектра в непрерывный (ионизацию) под действием периодического возмущения. Пусть при  $t = 0$  система находится в стационарном состоянии  $i$  дискретного спектра с энергией  $E_i^{(0)}$ , а частота возмущения удовлетворяет неравенству

$$\hbar\omega > E_{\min}^{(0)} - E_i^{(0)}, \quad (4.50)$$

где  $E_{\min}^{(0)}$  — нижний край непрерывного спектра (т.е. это условие означает, что частота возмущения достаточна для ионизации).

В разделе 4.6 мы уже рассматривали периодические возмущения и выяснили, что в дискретном спектре они могут приводить к резонансам, если частота возмущения совпадает с или близка к частоте перехода  $\omega_{fi} = (E_f^{(0)} - E_i^{(0)})/\hbar$ . Аналогично переходы в непрерывный спектр будут происходить в состояния с энергиями  $E_f$ , близкими к  $E_i^{(0)} + \hbar\omega$ . В матричных элементах возмущения (4.48) тогда можно оставить только первое слагаемое с близкой к нулю частотой  $\omega_{fi} - \omega$ . Подставляя это слагаемое в формулу (4.44), находим в первом порядке:

$$c_{fi} = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t V_{fi}(t') e^{i\omega_{fi}t'} dt' = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t F_{fi} e^{i(\omega_{fi}-\omega)t'} dt' = -F_{fi} \frac{e^{i(\omega_{fi}-\omega)t} - 1}{\hbar(\omega_{fi} - \omega)}, \quad (4.51)$$

откуда

$$|c_{fi}|^2 = |F_{fi}|^2 \frac{[\cos(\omega_{fi} - \omega)t - 1]^2 + \sin^2(\omega_{fi} - \omega)t}{\hbar^2(\omega_{fi} - \omega)^2} = |F_{fi}|^2 \frac{4 \sin^2 \frac{(\omega_{fi}-\omega)t}{2}}{\hbar^2(\omega_{fi} - \omega)^2}. \quad (4.52)$$

При больших  $t$  это выражение даёт результат, пропорциональный  $t$ :<sup>4</sup>

$$|c_{fi}|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |F_{fi}|^2 \pi t \delta\left(\frac{\omega_{fi} - \omega}{2}\right) = \frac{2\pi}{\hbar} |F_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i^{(0)} - \hbar\omega) t. \quad (4.53)$$

Этот результат может вызвать недоумение, связанное с тем, что написанная здесь величина должна быть мала (как результат теории возмущений), а при этом в ней есть дельта-функция (которая может обращаться в бесконечность) и время  $t$ , которое мы считаем большим. На самом деле, как всегда в ситуации с дельта-функцией, это есть некоторый предел «хорошей» функции, и надо просто проанализировать, как этот предел берётся. Из формулы (4.52) ясно, что по мере роста  $t$  (именно это имеется в виду под большими  $t$ ) в ней становятся важны частоты  $\omega$  всё более близкие к  $\omega_{fi}$ , так что  $|\omega_{fi} - \omega| \lesssim 1/t$  — при других частотах результат оказывается сильно меньше. Именно в этом смысле надо понимать дельта-функцию в формуле (4.53): на самом деле у неё есть ширина порядка  $1/t$  и высота порядка  $t$ . Поэтому в целом максимальное значение выражения (4.53) — порядка  $|F_{fi}|^2 t^2/\hbar^2$ , и это выражение должно быть мало для применимости теории возмущений (это ограничивает сверху допустимые  $t$ ).

<sup>3</sup>В случае резонанса теория возмущений перестаёт работать — мы сталкивались с такой ситуацией в контексте осцилляций Раби. Там оказалось, что для гамильтониана двухуровневой системы вида

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 + \Delta & W e^{-i\omega t} \\ W e^{i\omega t} & E_0 - \Delta \end{pmatrix}$$

вероятность обнаружить систему в состоянии  $|1\rangle$ , если изначально она была в состоянии  $|0\rangle$ , равна

$$P_1(t) = \frac{W^2}{(\Delta - \omega/2)^2 + W^2} \sin^2\left(\frac{\Omega t}{2}\right), \quad \Omega = \frac{2\sqrt{(\Delta - \omega/2)^2 + W^2}}{\hbar}.$$

Рассмотрим этот результат с точки зрения теории возмущений по  $W$ . Если нет резонанса ( $\omega \neq 2\Delta$ ), то эта вероятность перехода всегда мала — теория возмущений работает. Но в резонансе (т.е. при  $\omega = 2\Delta$ ) получается  $P_1(t) = \sin^2(Wt/\hbar)$ , т.е. вероятность перехода осциллирует между нулём и единицей и не является малой даже при очень малом  $W$ .

<sup>4</sup>Заметим, что имеет место формула

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2 \alpha t}{\pi \alpha^2 t} = \delta(\alpha).$$

Действительно, при  $\alpha \neq 0$  предел равен нулю, а при  $\alpha = 0$  функция под знаком предела превращается в  $t/\pi$ , т.е. в пределе равна бесконечности. Остаётся заметить, что

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 \alpha t}{\pi \alpha^2 t} d\alpha = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2} dx = 1.$$



Если задавать состояния непрерывного спектра некоторым параметром  $\nu$  (например, если в конечном состоянии частицу можно считать свободной, то удобно в качестве  $\nu$  брать волновой вектор), то величина  $|c_{fi}|^2 d\nu_f$  есть вероятность перехода в интервал конечных состояний  $d\nu_f$ . Эта вероятность растёт линейно со временем. Вероятность же перехода в единицу времени в интервал конечных состояний  $d\nu_f$  равна

$$dw_{fi} = \frac{|c_{fi}|^2 d\nu_f}{t} = \frac{2\pi}{\hbar} |F_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i^{(0)} - \hbar\omega) d\nu_f. \quad (4.54)$$

В целом вероятность перехода в единицу времени равна

$$w_{fi} = \int dw_{fi}. \quad (4.55)$$

Если в качестве  $\nu$  мы возьмём энергию, то нужно учесть плотность состояний: в непрерывном спектре в интервал энергий от  $E$  до  $(E + dE)$  попадает  $\rho(E)dE$  состояний (из-за того, что состояния идут непрерывно, и из-за того, что при заданной энергии состояния могут быть вырождены). Поэтому мы можем записать  $d\nu(E) = \rho(E)dE$ , и формула (4.55) даёт

$$w_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |F_{fi}|^2 \rho(E_f), \quad E_f = E_i^{(0)} + \hbar\omega. \quad (4.56)$$

Это — вероятность ухода из начального состояния в единицу времени, поэтому обратная величина — время жизни состояния:  $\tau = 1/w_{fi}$ .

## 4.8 Золотое правило Ферми.

Имеется следующий важный случай в теории возмущений: вычисление вероятности перехода в непрерывном спектре под действием независящего от времени возмущения. Дело в том, что состояния непрерывного спектра обычно вырождены (в одномерии вырождение максимум двукратно, но в двумерии и трёхмерии вырождение имеет непрерывный характер). Постоянное во времени возмущение может приводить к переходам из одного такого состояния в другое (без изменения энергии). Например, если потенциал является возмущением, мы получаем задачу рассеяния — изменение направления импульса (без изменения модуля).

Результат в этом случае может быть получен из формулы (4.54) взятием предела  $\omega = 0$  (вернём также обозначение  $V_{fi}$  для матричного элемента возмущения):

$$dw_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i) d\nu_f. \quad (4.57)$$

Эта формула называется золотым правилом Ферми [иногда золотым правилом Ферми называют и более общую формулу в записи (4.54) или (4.56)]. Дельта-функция здесь обеспечивает закон сохранения энергии (возмущение постоянно, поэтому энергия не меняется). Тонкость ситуации, когда переход происходит из состояния непрерывного спектра, состоит в том, что полученная величина пропорциональна вероятности перехода в единицу времени, но может с ней не совпадать. Дело в том, что исходная волновая функция может быть нормирована по-разному (это же непрерывный спектр, нормировка однозначно не задана). Конечная волновая функция тоже может быть нормирована по-разному, но это учитывается соответствующим выбором  $d\nu_f$ , а вот изменение нормировки исходной в.ф. меняет результат, причём даже может изменить его размерность.

Поэтому формула (4.57) определяет число переходов в единицу времени, но на что ещё эта величина нормирована, нужно уточнять для конкретной задачи. Например, если возмущением является рассеивающий потенциал, то можно выбрать нормировку в.ф. так, что (4.57) будет равно сечению рассеяния.

## Глава 5

# Движение в центрально-симметричном поле.

### 5.1 Момент импульса.

Рассмотрим движение частицы в трёхмерном пространстве. В этом случае возникает важная величина — момент импульса. Можно сказать, что это величина, сохранение которой для замкнутой системы следует из изотропии пространства (по теореме Нётер). Гамильтониан замкнутой системы не должен меняться при повороте всей системы на произвольный угол. Рассмотрим, к чему приводит это требование. Нам достаточно потребовать выполнения этого условия для произвольного бесконечно малого поворота.

Пусть  $\delta\varphi$  — вектор бесконечно малого поворота. Радиус-векторы частиц  $\mathbf{r}_a$  при таком повороте меняются на величину  $\delta\mathbf{r}_a = [\delta\varphi \times \mathbf{r}_a]$ . Волновая функция переходит в

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{r}_1 + \delta\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 + \delta\mathbf{r}_2, \dots) &= \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots) + \sum_a \delta\mathbf{r}_a \nabla_a \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots) + \sum_a [\delta\varphi \times \mathbf{r}_a] \nabla_a \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots) = \\ &= \left( 1 + \delta\varphi \sum_a [\mathbf{r}_a \times \nabla_a] \right) \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots). \quad (5.1)\end{aligned}$$

Таким образом, выражение в скобках есть оператор бесконечно малого поворота.

Поскольку поворот не меняет гамильтониан, оператор поворота должен коммутировать с гамильтонианом. Вектор  $\delta\varphi$  — постоянный, поэтому на него можно сократить и написать

$$[(\sum_a [\mathbf{r}_a \times \nabla_a]), \hat{H}] = 0. \quad (5.2)$$

Это означает, что величина, стоящая на первом месте в коммутаторе, сохраняется. С другой стороны, физически мы понимаем, что величина, сохранение которой для замкнутой системы следует из изотропии пространства, есть момент импульса. Таким образом, закон сохранения, который выражает собой формула (5.2), по сути должен быть законом сохранения момента импульса. То есть с точностью до постоянного множителя оператор  $\sum_a [\mathbf{r}_a \times \nabla_a]$  должен быть равен оператору момента импульса системы, а каждый из членов суммы — оператору момента импульса отдельной частицы. Очевидно, что коэффициент пропорциональности равен  $-i\hbar$  — в этом случае выражение для оператора  $-i\hbar[\mathbf{r} \times \nabla] = [\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}]$  в точности соответствует классическому выражению для момента импульса. Эта величина имеет размерность действия, поэтому в квантовой механике её удобно измерять в единицах  $\hbar$ . В этих единицах момент импульса равен

$$\hat{\mathbf{l}} = \frac{1}{\hbar} [\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}] = -i[\mathbf{r} \times \nabla]. \quad (5.3)$$

Как коммутируют импульс и координата, мы знаем:

$$[\hat{p}_i, x_j] = -i\hbar\delta_{ij}. \quad (5.4)$$

Отсюда можно найти коммутаторы всех компонент момента импульса с координатами и импульсами:<sup>1</sup>

$$[\hat{l}_i, x_j] = ie_{ijk}x_k, \quad (5.5)$$

$$[\hat{l}_i, \hat{p}_j] = ie_{ijk}\hat{p}_k, \quad (5.6)$$

<sup>1</sup>Проверим, например, первое из этих соотношений:

$$[\hat{l}_i, x_j] = \frac{1}{\hbar} [e_{ikm}x_k\hat{p}_m, x_j] = \frac{1}{\hbar} e_{ikm} (x_k[\hat{p}_m, x_j] + [x_k, x_j]\hat{p}_m) = -ie_{ikm}x_k\delta_{mj} = ie_{ijk}x_k.$$

где  $e_{ijk}$  — абсолютно антисимметричный тензор третьего ранга, а по повторяющимся индексам подразумевается суммирование. Следствием этих соотношений являются правила коммутации компонент момента импульса между собой:<sup>2</sup>

$$[\hat{l}_i, \hat{l}_j] = ie_{ijk}\hat{l}_k. \quad (5.7)$$

Эти коммутационные соотношения имеют важный физический смысл: поскольку коммутаторы разных компонент момента импульса друг с другом не равны нулю, эти компоненты не могут одновременно иметь определённые значения (т.е. они одновременно не измеримы). Это отличается от оператора импульса, компоненты которого коммутируют друг с другом и поэтому одновременно измеримы.

В то же время, если рассмотреть оператор квадрата импульса

$$\hat{\mathbf{l}}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2, \quad (5.8)$$

то он коммутирует со всеми компонентами момента импульса:  $[\hat{\mathbf{l}}^2, \hat{l}_i] = 0$ .<sup>3</sup> Это означает, что могут одновременно иметь определённые значения квадрат момента и какая-то одна из его компонент. Обычно в качестве компоненты, одновременно измеримой с  $\hat{\mathbf{l}}^2$ , берут компоненту  $\hat{l}_z$ .

В дальнейшем нам понадобятся выражения для этих операторов в сферических координатах ( $x = r \sin \theta \cos \varphi$ ,  $y = r \sin \theta \sin \varphi$ ,  $z = r \cos \theta$ ). В результате простой арифметики получается

$$\hat{\mathbf{l}}^2 = - \left[ \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right], \quad (5.9)$$

$$\hat{l}_z = -i \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (5.10)$$

## 5.2 Собственные значения момента.

Найдём собственные значения и собственные функции  $\hat{\mathbf{l}}^2$  и  $\hat{l}_z$  в сферических координатах. Поскольку операторы коммутируют, они имеют общую систему собственных функций.

### 5.2.1 Собственные значения и функции оператора $\hat{l}_z$ .

Уравнение  $\hat{l}_z \psi = m \psi$  (общепринято обозначать собственные значения оператора  $\hat{l}_z$  буквой  $m$ ) принимает вид

$$-i \frac{\partial \psi_m}{\partial \varphi} = m \psi_m. \quad (5.11)$$

Его решение имеет вид

$$\psi_m = f(r, \theta) e^{im\varphi}, \quad (5.12)$$

где  $f(r, \theta)$  — произвольная функция указанных аргументов. Чтобы функция  $\psi$  была однозначной, необходимо, чтобы при обходе по  $\varphi$  она не менялась, т.е.  $m$  должно принимать целые значения:

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (5.13)$$

Нормированные с.ф. возьмём в виде

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}, \quad (5.14)$$

тогда

$$\int_0^{2\pi} \Phi_m^*(\varphi) \Phi_{m'}(\varphi) d\varphi = \delta_{mm'}. \quad (5.15)$$

При заданном моменте импульса состояния с разными  $m$  физически соответствуют различным направлениям вращения. Если момент импульса сохраняется, будет иметь место вырождение по  $m$ , т.к. все направления вращения эквивалентны.

<sup>2</sup>Например,

$$[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = \frac{1}{\hbar} [\hat{l}_x, z\hat{p}_x - x\hat{p}_z] = \frac{1}{\hbar} (\hat{l}_x z\hat{p}_x - \hat{l}_x x\hat{p}_z - z\hat{p}_x \hat{l}_x + x\hat{p}_z \hat{l}_x) = \frac{1}{\hbar} (\hat{l}_x z - z\hat{l}_x) \hat{p}_x - \frac{1}{\hbar} x (\hat{l}_x \hat{p}_z - \hat{p}_z \hat{l}_x) = \frac{1}{\hbar} (-iy\hat{p}_x + ix\hat{p}_y) = i\hat{l}_z.$$

<sup>3</sup>Например, проверим, что  $[\hat{\mathbf{l}}^2, \hat{l}_z] = 0$ . Это следует из следующих соотношений:

$$[\hat{l}_x^2, \hat{l}_z] = \hat{l}_x [\hat{l}_x, \hat{l}_z] + [\hat{l}_x, \hat{l}_z] \hat{l}_x = -i (\hat{l}_x \hat{l}_y + \hat{l}_y \hat{l}_x),$$

$$[\hat{l}_y^2, \hat{l}_z] = i (\hat{l}_y \hat{l}_x + \hat{l}_x \hat{l}_y),$$

$$[\hat{l}_z^2, \hat{l}_z] = 0.$$

Суммируя эти три равенства, получаем  $[\hat{\mathbf{l}}^2, \hat{l}_z] = 0$ .

### 5.2.2 Собственные значения оператора $\hat{\mathbf{I}}^2$ .

Собственные значения  $\hat{\mathbf{I}}^2$  можно найти, используя лишь определение этого оператора и коммутационные соотношения (5.7).

Нам будет удобно работать со вспомогательными операторами

$$\hat{l}_+ = \hat{l}_x + i\hat{l}_y, \quad \hat{l}_- = \hat{l}_x - i\hat{l}_y, \quad (5.16)$$

для которых имеют место следующие правила коммутации:

$$[\hat{l}_+, \hat{l}_-] = 2\hat{l}_z, \quad [\hat{l}_z, \hat{l}_+] = \hat{l}_+, \quad [\hat{l}_z, \hat{l}_-] = -\hat{l}_-. \quad (5.17)$$

Также нам будут полезны соотношения

$$\hat{\mathbf{I}}^2 = \hat{l}_+ \hat{l}_- + \hat{l}_z^2 - \hat{l}_z = \hat{l}_- \hat{l}_+ + \hat{l}_z^2 + \hat{l}_z. \quad (5.18)$$

Как мы уже знаем, при заданном значении  $\hat{\mathbf{I}}^2$  имеются различные возможные проекции  $m$  (на ось  $z$ ). Они обязательно идут парами  $\pm m$ , т.к. ось  $z$  можно направить в противоположную сторону простым переобозначением, что приводит к изменению знака  $m$ . Обозначим наибольшее возможное (при заданном значении  $\hat{\mathbf{I}}^2$ ) значение проекции  $m$  буквой  $l$  (это обозначение намекает, что максимальное значение проекции равно модулю вектора, что естественно). Верхний предел должен существовать — это можно формально обосновать, обратив внимание на положительную определённости оператора  $\hat{\mathbf{I}}^2 - \hat{l}_z^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2$ , что означает неотрицательность его собственных значений (а при этом собственное значение  $\hat{\mathbf{I}}^2$  мы считаем заданным, поэтому с.з. оператора  $\hat{l}_z^2$  ограничены сверху).

Рассмотрим действие оператора  $\hat{l}_z \hat{l}_\pm$  на собственные функции  $\psi_m$  оператора  $\hat{l}_z$  [пользуемся при этом коммутационными соотношениями (5.17)]:

$$\hat{l}_z \hat{l}_\pm \psi_m = (\hat{l}_\pm \hat{l}_z \pm \hat{l}_\pm) \psi_m = \hat{l}_\pm (\hat{l}_z \pm 1) \psi_m = (m \pm 1) \hat{l}_\pm \psi_m. \quad (5.19)$$

Таким образом, функция  $\hat{l}_\pm \psi_m$  — это (с точностью до коэффициента) собственная функция оператора  $\hat{l}_z$ , отвечающая с.з.  $m \pm 1$ :

$$\hat{l}_+ \psi_m = \text{const} \cdot \psi_{m+1}, \quad \hat{l}_- \psi_m = \text{const} \cdot \psi_{m-1}. \quad (5.20)$$

Операторы  $\hat{l}_+$  и  $\hat{l}_-$  имеют, таким образом, смысл повышающего и понижающего оператора соответственно. В первом из равенств (5.20) возьмём  $m = l$ . Т.к. по определению состояний с  $m > l$  не существует, в правой части должен получиться ноль:  $\hat{l}_+ \psi_l = 0$ . Применяя к этому равенству оператор  $\hat{l}_-$  и пользуясь соотношением (5.18), получаем

$$\hat{l}_- \hat{l}_+ \psi_l = (\hat{\mathbf{I}}^2 - \hat{l}_z^2 - \hat{l}_z) \psi_l = 0. \quad (5.21)$$

Поскольку  $\psi_m$  — общие собственные функции операторов  $\hat{\mathbf{I}}^2$  и  $\hat{l}_z$ , имеем

$$\hat{\mathbf{I}}^2 \psi_l = \mathbf{I}^2 \psi_l, \quad \hat{l}_z^2 \psi_l = l^2 \psi_l, \quad \hat{l}_z \psi_l = l \psi_l. \quad (5.22)$$

Здесь важно понимать, что в то время как  $l$  — некоторое (произвольное) целое неотрицательное число, символ  $\mathbf{I}^2$  в правой части первого соотношения — это сейчас просто условное обозначение для собственного значения оператора  $\hat{\mathbf{I}}^2$  (мы как раз хотим его найти). Из уравнения (5.21) находим

$$\mathbf{I}^2 = l(l+1). \quad (5.23)$$

Эта формула определяет искомые собственные значения квадрата момента, здесь  $l$  — произвольное целое неотрицательное число. При заданном  $l$  собственное значение оператора  $\hat{l}_z$  может принимать значения

$$m = l, l-1, \dots, -l. \quad (5.24)$$

Это означает, что состояния будут иметь кратность вырождения по направлению момента, равную  $2l+1$ . Если же  $l = 0$ , то кратность вырождения равна единице, т.е. состояние невырождено.

Итак, квадрат момента имеет собственные значения  $l(l+1)$ , а корень из этого числа не является целым. Это особенность оператора момента импульса в квантовой механике. При этом принято говорить о «моменте  $l$ », подразумевая состояние с квадратом момента, равным  $l(l+1)$ . При этом о  $z$ -компоненте момента говорят как о «проекции момента».

### 5.2.3 Собственные функции оператора $\hat{\mathbf{l}}^2$ .

Общая система с.ф. операторов  $\hat{\mathbf{l}}^2$  и  $\hat{l}_z$  — сферические функции  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ :

$$\hat{\mathbf{l}}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = l(l+1)Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (5.25)$$

$$\hat{l}_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = mY_{lm}(\theta, \varphi). \quad (5.26)$$

Разделение переменных:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\varphi). \quad (5.27)$$

Нормировка:

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{l'm'}^* Y_{lm} \sin \theta d\theta d\varphi = \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \quad \int_0^\pi |\Theta_{lm}|^2 \sin \theta d\theta = 1. \quad (5.28)$$

«Полярная» функция удовлетворяет уравнению

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d\Theta_{lm}}{d\theta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \Theta_{lm} + l(l+1)\Theta_{lm} = 0, \quad (5.29)$$

его решения — *присоединённые полиномы Лежандра*  $P_l^{|m|}(\cos \theta)$  [их частный случай при  $m = 0$  называется просто *полиномами Лежандра* и обозначается  $P_l(\cos \theta)$ ].

В результате с учётом нормировки:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} i^l \left[ \frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} \right]^{1/2} P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\varphi}. \quad (5.30)$$

Чётность (при инверсии, т.е. при замене  $\theta \mapsto \pi - \theta$ ,  $\varphi \mapsto \varphi + \pi$ ):  $P = (-1)^l$ .

## 5.3 Движение в центрально-симметричном поле.

Теперь рассмотрим трёхмерное движение в центрально-симметричном поле  $U(r)$ , зависящем только от расстояния до центра. УШ:

$$\Delta \psi + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] \psi = 0. \quad (5.31)$$

Записывая оператор Лапласа в сферических координатах, получаем

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) - \frac{\hat{\mathbf{l}}^2 \psi}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] \psi = 0, \quad (5.32)$$

где явный вид оператора квадрата момента импульса в сферических координатах даётся формулой (5.9).

Имеет место разделение переменных:

$$\psi = R_l(r) Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (5.33)$$

В результате остаётся радиальное уравнение на функцию  $R(r)$ :

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} R + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] R = 0. \quad (5.34)$$

Оно отличается от вида одномерного УШ наличием первой производной. Чтобы привести его к знакомому виду (избавиться от первой производной), сделаем подстановку

$$R(r) = \frac{\chi(r)}{r}. \quad (5.35)$$

Уравнение на  $\chi(r)$  имеет вид

$$\frac{d^2 \chi}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U_l^{\text{eff}}(r)] \chi = 0, \quad U_l^{\text{eff}}(r) = U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}. \quad (5.36)$$

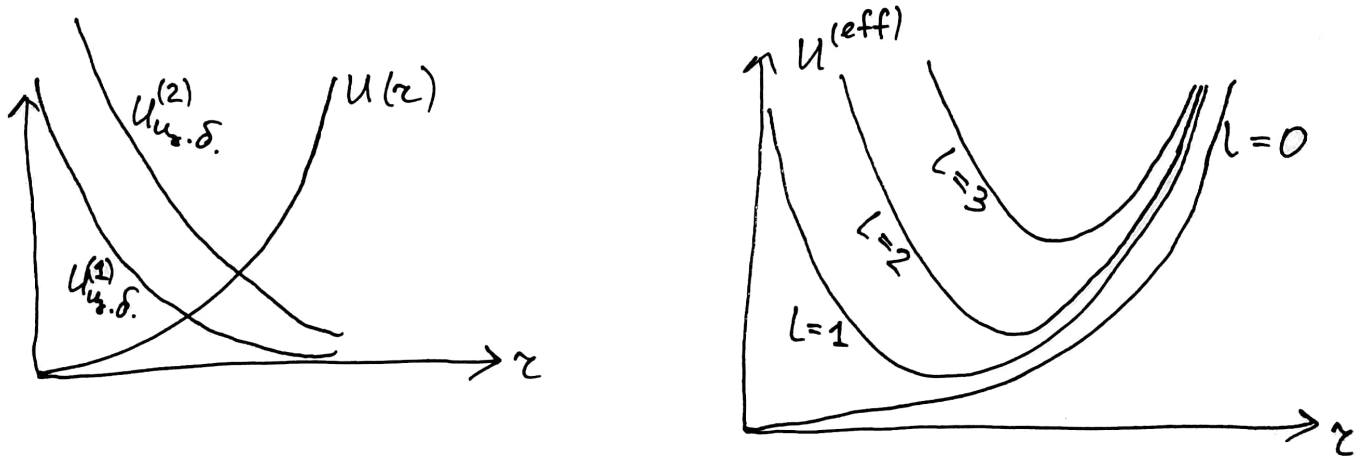


Рис. 5.1: Потенциалы:  $U(r)$ , центробежная добавка и  $U_l^{\text{eff}}(r)$ . При увеличении  $l$ : (а)  $U_l^{\text{eff}}$  растёт, (б) частица отдаляется от центра.

Мы получили одномерную задачу — движение в эффективном потенциале  $U_l^{\text{eff}}(r)$ , равном исходному потенциалу  $U(r)$  плюс центробежная энергия (эта добавка в точности соответствует классическому выражению  $L^2/2I$ , где  $I = mr^2$  — момент инерции частицы).

Условие нормировки для полной волновой функции:

$$1 = \int |\psi|^2 d^3\mathbf{r} = \int |\psi|^2 r^2 dr d\Omega = \int_0^\infty |R|^2 r^2 dr \cdot \int |Y_{lm}|^2 d\Omega = \int_0^\infty |\chi|^2 dr \quad (5.37)$$

— т.е. условие нормировки для  $\chi(r)$  имеет обычный одномерный вид. Единственная особенность одномерной квантово-механической задачи для  $\chi(r)$  состоит в том, что движение (по определению сферических координат) происходит только на полуоси  $r \geq 0$ . Исходная в.ф. не должна обращаться в бесконечность, поэтому  $R(r)$  конечно в нуле, откуда следует, что  $\chi(0) = 0$ . Это можно представить себе как бесконечно высокую стенку при  $r = 0$ .

- Таким образом, мы получили одномерную задачу с бесконечно высокой стенкой в нуле и движением при  $r \geq 0$  в потенциале  $U_l^{\text{eff}}(r)$ . Это движение зависит от  $l$  (через эффективный потенциал), но не зависит от проекции момента  $m$ , поэтому уровни энергии будут иметь  $(2l + 1)$ -кратное вырождение.

При одномерном движении, ограниченном с одной стороны, все уровни энергии (включая непрерывный спектр) невырождены. Поэтому радиальное движение полностью характеризуется энергией  $E$  (при заданном  $l$ ). В то же время, угловое движение полностью характеризуется величинами  $l$  и  $m$ . В результате полный набор квантовых чисел для движения в центральном поле есть  $E, l, m$ .

Как в такой ситуации описывается дискретный спектр?

- Фиксируем  $l$ , находим уровни одномерного движения в потенциале  $U_l^{\text{eff}}(r)$ , нумеруем их *радиальным квантовым числом*  $n_r = 0, 1, 2, \dots$  (по осцилляционной теореме это число нулей радиальной в.ф.  $\chi(r)$  за исключением точки  $r = 0$ ).
- Так делаем для всех  $l = 0, 1, 2, \dots$ . В результате каждый уровень характеризуется двумя квантовыми числами —  $l$  и  $n_r$ .
- Взяв все возможные уровни ( $\forall l, \forall n_r$ ), нумеруем их *главным квантовым числом*  $n$  (иногда его отсчитывают от нуля, иногда от единицы). В результате получаем  $n = n(l, n_r)$  — эта зависимость в общем случае не имеет простого явного вида. Но в некоторых потенциалах явная функция находится.

Состояния с  $l = 0, 1, 2, 3, \dots$  принято обозначать буквами латинского алфавита:  $s, p, d, f, \dots$  соответственно (именно эти обозначения используются в химии для обозначения состояний электронов в атомах). Для обозначения состояний с заданным главным квантовым числом и моментом импульса используются спектроскопические обозначения, такие как  $1s, 1p, 2d$  и т.д. Цифра здесь — это главное квантовое число, отсчитанное от единицы (т.е. либо  $n$ , либо  $n + 1$  — смотря от чего мы в данной задаче решили отсчитывать  $n$ ). Основным состоянием всегда является состояние  $1s$ .

Найдём, как ведёт себя в.ф. вблизи начала координат. При  $r \rightarrow 0$  уравнение (5.34) можно упростить:

$$\frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) - l(l + 1)R = 0. \quad (5.38)$$

Ищем решение в виде степенной функции  $r^a$ , получаем  $a(a+1) = l(l+1)$  — квадратное уравнение, откуда  $a = l$  или  $a = -(l+1)$ . Отрицательная степень не удовлетворяет условию конечности в.ф. при  $r = 0$ , поэтому нужно оставить  $a = l$ . В результате при  $r \rightarrow 0$  получаем

$$R_l = \text{const} \cdot r^l. \quad (5.39)$$

Вероятность нахождения частицы на расстоянии от центра между  $r$  и  $r + dr$  равна  $|R|^2 r^2 dr \propto r^{2l+2} dr$ . Поэтому при заданном малом  $r$  она убывает с ростом  $l$  в соответствии с общим выводом о том, что с ростом  $l$  частица отдаляется от центра [см. рис. 5.1(б)].

## 5.4 Атом водорода.

В атоме водорода электрон движется в кулоновском поле ядра:

$$U(r) = -\frac{e^2}{r}. \quad (5.40)$$

Уравнение (5.34) для радиальной части волновой функции принимает вид

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} R + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{e^2}{r} \right) R = 0. \quad (5.41)$$

В этой задаче удобно пользоваться кулоновскими единицами, измеряя длину и энергию в единицах

$$a_B = \frac{\hbar^2}{me^2}, \quad \varepsilon_0 = \frac{e^2}{a_B} = \frac{me^4}{\hbar^2}. \quad (5.42)$$

Величина  $a_B \approx 0.53 \text{ \AA}$  называется боровским радиусом, а половина величины  $\varepsilon_0$  называется ридбергом,  $Ry = \varepsilon_0/2 \approx 13.6 \text{ эВ}$ . В безразмерных единицах  $x = r/a_B$  и  $\epsilon = E/\varepsilon_0$  уравнение (5.41) принимает вид

$$\frac{d^2 R}{dx^2} + \frac{2}{x} \frac{dR}{dx} - \frac{l(l+1)}{x^2} R + 2 \left( \epsilon + \frac{1}{x} \right) R = 0. \quad (5.43)$$

Спектр состоит из дискретной части при  $E < 0$  и непрерывной части при  $E > 0$ . Мы будем интересоваться только дискретным спектром.

Для дальнейшего окажется удобно перейти от  $\epsilon$  и  $x$  к следующим величинам (поскольку для дискретного спектра в данной задаче  $\epsilon < 0$ , то под корнем стоит положительное число):

$$n = \frac{1}{\sqrt{-2\epsilon}}, \quad \rho = \frac{2x}{n} \quad (5.44)$$

— здесь  $n$  пока есть просто вещественный положительный параметр (позже он окажется целым, но пока мы этого не предполагаем). Уравнение (5.43) принимает вид

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR}{d\rho} + \left[ -\frac{1}{4} + \frac{n}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] R = 0. \quad (5.45)$$

Найдём асимптотики. При малых  $\rho$ , как мы уже знаем [см. (5.39)],  $R$  ведёт себя как  $\rho^l$ . При больших  $\rho$  опускаем слагаемые, содержащие  $1/\rho$  и  $1/\rho^2$ , и получаем уравнение

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} - \frac{R}{4} = 0, \quad (5.46)$$

откуда  $R \propto e^{\pm \rho/2}$ . Нужно выбрать решение с минусом, убывающее на бесконечности.

Выделим обе асимптотики, сделав подстановку

$$R = \rho^l e^{-\rho/2} w(\rho). \quad (5.47)$$



Уравнение (5.45) тогда принимает вид<sup>4</sup>

$$\rho w'' + (2l + 2 - \rho)w' + (n - l - 1)w = 0. \quad (5.48)$$

Решение этого уравнения, стремящееся к конечному пределу при  $\rho \rightarrow 0$  — вырожденная гипергеометрическая функция

$$w = F(-n + l + 1, 2l + 2; \rho). \quad (5.49)$$

В общем случае это решение при  $\rho \rightarrow \infty$  содержит экспоненту  $e^\rho$ , поэтому волновая функция [см. (5.47)] расходится. Убывание волновой функции на бесконечности получится только при  $-n + l + 1 = -n_r$ , где  $n_r = 0, 1, 2, \dots$ . Вырожденная гипергеометрическая функция тогда вырождается в полином степени  $n_r$  — это радиальное квантовое число. При этом число  $n$ , получающееся целым положительным, согласно (5.44) нумерует уровни энергии:

$$\epsilon = -\frac{1}{2n^2}, \quad E = -\frac{me^4}{\hbar^2} \frac{1}{2n^2}, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (5.50)$$

т.е. оказывается главным квантовым числом. Обратите внимание, что в данной задаче мы получили явную зависимость  $n(l, n_r)$ :

$$n = n_r + l + 1. \quad (5.51)$$

Одному и тому же  $n$  могут соответствовать различные  $l$ . Это означает, что помимо вырождения уровня по проекциям момента  $m$  имеется также вырождение по значениям самого момента. Это называется случайным вырождением (оно имеет место также и для трёхмерного осциллятора).<sup>5</sup> При вычислении кратности вырождения, таким образом, нужно не просто брать  $(2l + 1)$  (т.е. кратности вырождения по проекции момента), а ещё и суммировать эти величины по всем  $l$ , которые могут соответствовать заданному значению  $n$ . Поэтому кратность вырождения уровней энергии атома водорода равна

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2. \quad (5.52)$$

Волновые функции стационарных состояний содержат вырожденные гипергеометрические функции с целыми значениями обоих параметров. Эти функции с точностью до множителя есть так называемые *обобщённые полиномы Лагерра*, поэтому формулу (5.47) можно записать в виде

$$R_{nl}(\rho) = \text{const} \cdot \rho^l e^{-\rho/2} L_{n+l}^{2l+1}(\rho), \quad (5.53)$$

где константа находится из условия нормировки.

Волновая функция основного состояния в безразмерных единицах имеет вид

$$\psi_0(x) = R_{10}(x)Y_{00}(\theta, \varphi) = 2e^{-x} \cdot \frac{1}{\sqrt{4\pi}} = \frac{e^{-x}}{\sqrt{\pi}}, \quad (5.54)$$

а в размерных единицах:

$$\psi_0(r) = \frac{e^{-r/a_B}}{\sqrt{\pi a_B^3}}. \quad (5.55)$$

Отсюда видим, что боровский радиус  $a_B$  определяет характерный размер распределения электрона вокруг ядра, т.е. является характерным радиусом атома водорода.

<sup>4</sup>Уравнение Куммера:

$$\rho w'' + (\beta - \rho)w' - \alpha w = 0.$$

Из двух его решений одно является конечным в нуле — это вырожденная гипергеометрическая функция:

$$F(\alpha, \beta; \rho) = 1 + \frac{\alpha}{\beta} \frac{\rho}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)}{\beta(\beta+1)} \frac{\rho^2}{2!} + \frac{\alpha(\alpha+1)(\alpha+2)}{\beta(\beta+1)(\beta+2)} \frac{\rho^3}{3!} + \dots$$

— похоже на экспоненту. Асимптотика при  $\rho \rightarrow \infty$ :

$$F(\alpha, \beta; \rho) \simeq \frac{\Gamma(\beta)}{\Gamma(\alpha)} \rho^{\alpha-\beta} e^\rho.$$

Экспоненциального роста можно избежать только если ряд оборвётся:  $\alpha = -n_r$ , где  $n_r = 0, 1, 2, \dots$ . Тогда гипергеометрический ряд вырождается в полином степени  $n_r$  [при этом  $\Gamma(\alpha)$  обращается в бесконечность].

<sup>5</sup>Случайное вырождение связано с дополнительной симметрией гамильтониана [более высокой, чем группа  $SO(3)$  — симметрия относительно пространственных вращений]. Классически эта симметрия проявляется в существовании замкнутых траекторий частиц. Для  $N$ -мерного осциллятора полная группа симметрии есть  $U(N)$ , для атома водорода — группа 4-мерных вращений  $SO(4)$ .

## Глава 6

# Спин.

### 6.1 Спин как собственный момент импульса.

Момент импульса — это величина, сохраняющаяся вследствие изотропии пространства. Именно отсюда мы получали выражение  $[\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}]$  для момента импульса, связанного с движением частицы как целого в пространстве. Но первичны именно симметричные свойства. Мы уже знаем, что задание значений  $l$  и  $m$  определяет угловую зависимость в.ф. частицы, а значит и все её свойства по отношению к вращениям. Наиболее общая формулировка этих свойств — закон преобразования в.ф. при поворотах системы координат.

Из явного вида в.ф.  $|l, m\rangle$  в сферических координатах мы знаем, что при поворотах вокруг оси  $z$  она домножается на несущественный фазовый множитель (т.е. по сути не меняется). Всякий же поворот, меняющий направление оси  $z$ , приводит к существенному изменению в.ф. — в новых осях в.ф., вообще говоря, будет суперпозицией  $(2l + 1)$  функций с разными проекциями момента (на новую ось  $z$ ). Можно сказать, что при поворотах системы координат  $(2l + 1)$  функций  $|l, m\rangle$  преобразуются друг через друга:

$$|l, m\rangle \mapsto \sum_m c_m(\omega) |l, m\rangle. \quad (6.1)$$

Закон этого преобразования, т.е. коэффициенты  $c_m(\omega)$  (как функции векторов поворота  $\omega$ ), полностью определяется заданием  $l$ . Таким образом, момент импульса — это квантовое число, определяющее трансформационные свойства системы по отношению к вращениям. В этом смысле это понятие отвлечено от явного выбора системы координат — можно думать лишь про закон преобразования в.ф. друг через друга.

Но если под моментом мы понимаем квантовое число, задающее трансформационные свойства, то нам неважно происхождение этого момента. Помимо орбитального момента (связанного с движением частицы как целого), момент может быть обусловлен внутренним движением. Например, в сложной частице, такой как атомное ядро, составные части могут находиться в относительном движении. Но даже если частица является элементарной, в квантовой механике у неё может быть «собственный» момент импульса (свой для каждого типа частиц), не связанный с её движением в пространстве. Этот собственный момент импульса называется спином. Спин частицы (измеренный, как и орбитальный момент, в единицах  $\hbar$ ) будем обозначать буквой  $s$ .

Итак, момент импульса  $\hat{\mathbf{j}}$  (будем так обозначать момент в общем случае) может иметь разное происхождение:

- орбитальный момент  $\hat{\mathbf{l}} = \frac{1}{\hbar}[\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}]$  (3D и 2D задачи),
- спиновый момент  $\hat{\mathbf{s}}$ .

Проекция спина на некоторую выбранную ось (пусть это будет ось  $z$ ) будем обозначать буквой  $\sigma$ . В.ф. частицы со спином должна определять не только вероятности различных положений в пространстве, но и вероятности различных проекций спина. Поэтому она зависит не только от трёх непрерывных переменных — координат, — но и от одной дискретной спиновой переменной  $\sigma$ , т.е.  $\psi = \psi(x, y, z, \sigma)$ .

Эта в.ф. определяет различные вероятности следующим образом:

- $w_{dV} = \sum_{\sigma} |\psi|^2 dV$  — вероятность обнаружить частицу в элементе объёма  $dV$  (при этом нас не интересует, какой будет проекция спина),
- $w_{\sigma} = \int |\psi|^2 dV$  — вероятность частице иметь проекцию спина  $\sigma$  (при этом нас не интересует, где частица находится в пространстве),
- $1 = \sum_{\sigma} \int |\psi|^2 dV$  — условие нормировки.

Квантовомеханический оператор спина действует именно на спиновую переменную  $\sigma$ , т.е. некоторым образом преобразует друг через друга в.ф. с разными проекциями спина. Из общих соображений можно понять, что коммутационные соотношения для  $\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z$  такие же, как для компонент оператора орбитального момента.

При рассмотрении орбитального момента мы видели, что оператор момента задаётся оператором бесконечно малого поворота. Тогда мы рассматривали в.ф. как функцию координат и находили оператор поворота явно. В случае спинового момента такой вывод теряет смысл, т.к. оператор спина действует не на функцию координат, а на функцию дискретной переменной  $\sigma$ . Поэтому лучше думать не о том, как преобразуется функция, а о том, как преобразуется сама система координат. Если рассмотреть бесконечно малые повороты вокруг осей  $x$  и  $y$ , а затем вокруг тех же осей в обратном порядке, окажется, что разница между результатами этих двух операций эквивалентна бесконечно малому повороту вокруг оси  $z$  (на угол, равный произведению углов поворота вокруг осей  $x$  и  $y$ ). Именно это приводит к правилам коммутации для момента (независимо от его происхождения):

$$[\hat{j}_\alpha, \hat{j}_\beta] = ie_{\alpha\beta\gamma}\hat{j}_\gamma, \quad (6.2)$$

откуда следует

$$[\hat{\mathbf{j}}^2, \hat{j}_\alpha] = 0. \quad (6.3)$$

При рассмотрении орбитального момента мы получали возможные значения его абсолютной величины и проекции из коммутационных соотношений. Поскольку коммутационные соотношения не изменились, этот вывод применим и для произвольного момента. Таким образом, можем сразу утверждать, что собственные значения проекции момента образуют последовательность чисел с шагом 1. Единственный пункт рассуждений, в котором использовалась специфика орбитального момента, был связан с явным видом оператора  $\hat{l}_z$ , из которого следовал явный вид с.ф.  $e^{im\varphi}$  и утверждение о том, что проекции момента  $m$  должны быть целыми числами. В общем случае (и для спинового момента) такого утверждения нет. Но по-прежнему последовательность возможных значений проекции спина ограничена сверху и снизу значениями, отличающимися лишь знаком. Обозначим эти ограничивающие значения как  $\pm j$ . Разность  $2j$  между ними должна быть целым неотрицательным числом. Поэтому само  $j$  должно быть целым или полуцелым. В остальном весь прошлый вывод применим, и мы получаем, что

- с.з. оператора  $\hat{\mathbf{j}}^2$  равны  $j(j+1)$ , где  $j = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$
- с.з. оператора  $\hat{j}_z$  — это числа от  $-j$  до  $j$  с шагом 1 (т.е.  $-j, -j+1, \dots, j-1, j$ ), всего  $(2j+1)$  возможных значений.

В применении к спину возможность целых и полуцелых значений момента означает деление на два класса частиц: бозоны (целые спины) и фермионы (полуцелые спины). Опыт показывает, что такие частицы как электроны, протоны, нейтроны, мюоны, нейтрино имеют спин  $1/2$  и являются фермионами. А, например,  $\pi$ -мезоны и  $K$ -мезоны имеют спин  $0$  и являются бозонами.

Поскольку спин элементарных частиц оказывается заданным целым или полуцелым числом (для каждого сорта частиц), спиновый момент в размерных единицах (т.е. домноженный на  $\hbar$ ) исчезает в классическом пределе (при  $\hbar \rightarrow 0$ ). В этом он отличается от орбитального момента  $l$ , который, будучи записанным в размерных единицах как  $\hbar l$ , сохраняется в классическом пределе, если одновременно с  $\hbar \rightarrow 0$  брать  $l \rightarrow \infty$  (ведь  $l$  хоть и целое, но его конкретное значение не задано, и для любой частицы  $l$  может быть сколь угодно велико). В результате спиновый момент не допускает классической интерпретации (наиболее близкая физическая аналогия — вращение частицы вокруг своей оси, но зануление спинового момента в классическом пределе говорит о том, что такая аналогия на самом деле некорректна).

В нерелятивистском случае (мы сейчас будем обсуждать именно его) в однородном магнитном поле зависимости в.ф. от координат и спина факторизуются:

$$\psi(\mathbf{r}, \sigma) = \psi(\mathbf{r})\chi(\sigma). \quad (6.4)$$

Физически это означает, что движение частицы в реальном пространстве и её «жизнь» в спиновом пространстве происходят независимо. Релятивистские эффекты нарушают это утверждение — например, спин-орбитальные эффекты описывают взаимовлияние спина и орбитального движения. В условиях применимости формулы (6.4) мы можем считать, что спиновые операторы действуют только на спиновую в.ф. (спинор)  $\chi(\sigma)$ .

## 6.2 Оператор спина.

Для вывода спиновых операторов начнём с рассмотрения общего оператора момента  $\hat{\mathbf{j}}$ . Нам понадобятся формулы, которые мы получали для оператора орбитального момента, но которые следуют из правил коммутации, поэтому применимы в общем случае:

$$\hat{j}_+ = \hat{j}_x + i\hat{j}_y, \quad \hat{j}_- = \hat{j}_x - i\hat{j}_y, \quad (6.5)$$

$$|j, j_z + 1\rangle = \text{const} \cdot \hat{j}_+ |j, j_z\rangle, \quad |j, j_z - 1\rangle = \text{const} \cdot \hat{j}_- |j, j_z\rangle, \quad (6.6)$$

$$\hat{\mathbf{j}}^2 = \hat{j}_+ \hat{j}_- + \hat{j}_z^2 - \hat{j}_z. \quad (6.7)$$

Формулы (6.6) говорят, что в матрице оператора  $\hat{j}_+$  отличны от нуля только элементы, соответствующие переходам  $j_z \mapsto j_z + 1$ , а в матрице оператора  $\hat{j}_-$  — только элементы, соответствующие переходам  $j_z \mapsto j_z - 1$ . Найдём эти матричные элементы. Для этого возьмём диагональные матричные элементы в равенстве (6.7) (и учтём, что матрица оператора  $\hat{j}_z$  диагональна):

$$j(j+1) = \langle j, j_z | \hat{j}_+ | j, j_z - 1 \rangle \langle j, j_z - 1 | \hat{j}_- | j, j_z \rangle + j_z^2 - j_z. \quad (6.8)$$

Поскольку операторы  $\hat{j}_x$  и  $\hat{j}_y$  эрмитовы, имеет место соотношение  $\hat{j}_+^\dagger = \hat{j}_-$ , откуда

$$\langle j, j_z | \hat{j}_+ | j, j_z - 1 \rangle^* = \langle j, j_z - 1 | \hat{j}_- | j, j_z \rangle. \quad (6.9)$$

Поэтому соотношение (6.8) можно переписать в виде

$$\left| \langle j, j_z | \hat{j}_+ | j, j_z - 1 \rangle \right|^2 = j(j+1) - j_z^2 + j_z = (j + j_z)(j - j_z + 1), \quad (6.10)$$

откуда<sup>1</sup>

$$\langle j, j_z | \hat{j}_+ | j, j_z - 1 \rangle = \langle j, j_z - 1 | \hat{j}_- | j, j_z \rangle = \sqrt{(j + j_z)(j - j_z + 1)}. \quad (6.11)$$

Отсюда получаем отличные от нуля матричные элементы  $\hat{j}_x$  и  $\hat{j}_y$  (заодно для полноты картины напомним матричные элементы  $\hat{j}_z$ ):

$$\langle j, j_z | \hat{j}_x | j, j_z - 1 \rangle = \langle j, j_z - 1 | \hat{j}_x | j, j_z \rangle = \frac{1}{2} \sqrt{(j + j_z)(j - j_z + 1)}, \quad (6.12)$$

$$\langle j, j_z | \hat{j}_y | j, j_z - 1 \rangle = -\langle j, j_z - 1 | \hat{j}_y | j, j_z \rangle = -\frac{i}{2} \sqrt{(j + j_z)(j - j_z + 1)}, \quad (6.13)$$

$$\langle j, j_z | \hat{j}_z | j, j_z \rangle = j_z. \quad (6.14)$$

Эти формулы справедливы как для орбитального, так и для спинного момента. Для орбитального момента это матричное представление — альтернатива явному представлению в виде дифференциальных операторов. А в спинном случае это представление является основным.

В важнейшем случае спина  $1/2$ , заменяя  $j \mapsto s = 1/2$ ,  $j_z \mapsto \sigma = \pm 1/2$ , получаем явный вид спинных матриц:

$$\hat{s} = \frac{\hat{\sigma}}{2}, \quad (6.15)$$

где вектор  $\hat{\sigma}$  составлен из матриц Паули:

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (6.16)$$

Эти матрицы действуют на спиноры вида

$$\chi = \begin{pmatrix} \chi(1/2) \\ \chi(-1/2) \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \chi_\uparrow \\ \chi_\downarrow \end{pmatrix}. \quad (6.17)$$

Свойства матриц Паули:

- Матрицы Паули эрмитовы, след каждой из них равен нулю:

$$\hat{\sigma}_\alpha^\dagger = \hat{\sigma}_\alpha, \quad \text{Tr } \hat{\sigma}_\alpha = 0. \quad (6.18)$$

- Квадрат любой матрицы Паули равен единице:

$$\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = 1. \quad (6.19)$$

- Более общее соотношение:

$$\{\hat{\sigma}_\alpha, \hat{\sigma}_\beta\} = 2\delta_{\alpha\beta}, \quad (6.20)$$

где фигурные скобки обозначают антикоммутатор.

- Из общих коммутационных соотношений (6.2) следует

$$[\hat{\sigma}_\alpha, \hat{\sigma}_\beta] = 2ie_{\alpha\beta\gamma} \hat{\sigma}_\gamma. \quad (6.21)$$

<sup>1</sup>Здесь есть свобода в выборе фазового множителя. Мы его выбрали таким образом, чтобы он соответствовал тому явному виду собственных функций орбитального момента, который мы ранее писали.

- Сложив (6.20) и (6.21) и поделив пополам, получаем

$$\hat{\sigma}_\alpha \hat{\sigma}_\beta = \delta_{\alpha\beta} + ie_{\alpha\beta\gamma} \hat{\sigma}_\gamma. \quad (6.22)$$

- Формула (6.22) означает, что любая функция от матриц Паули сводится к линейной. Действительно, произвольная функция от матричных аргументов определяется степенным рядом. С помощью формулы (6.22) можно понижать степени попарных произведений матриц Паули, и этот процесс будет продолжаться, пока все слагаемые ряда не сведутся к линейным функциям (содержащим нулевые и первые степени).

### 6.3 Сложение моментов.

Обсудим теперь вопрос о том, как складываются два произвольных момента:  $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{j}}_1 + \hat{\mathbf{j}}_2$  (при этом сами по себе моменты  $j_1$  и  $j_2$  считаем заданными). Физически это может соответствовать различным ситуациям, например, сложению моментов двух частиц (скажем, сложению двух спинов,  $\hat{\mathbf{j}}_1 = \hat{\mathbf{s}}_1$  и  $\hat{\mathbf{j}}_2 = \hat{\mathbf{s}}_2$ ) либо сложению орбитального и спинowego момента для одной частицы ( $\hat{\mathbf{j}}_1 = \hat{\mathbf{l}}$  и  $\hat{\mathbf{j}}_2 = \hat{\mathbf{s}}$ ). Каковы возможные значения  $J$  и  $J_z$ ? Рассуждение можно провести в общем виде, не конкретизируя задачу.

В качестве полной системы физических величин можно выбрать  $\mathbf{j}_1^2, \mathbf{j}_2^2, j_{1z}, j_{2z}$ . Тогда полная система состояний составлена функциями  $\varphi_{j_1, j_2, j_{1z}, j_{2z}}$  — перебирая все возможные значения для каждой проекции, получаем  $(2j_1+1)(2j_2+1)$  разных функций.

Но мы бы хотели в качестве полной системы физических величин рассмотреть другую систему:  $\mathbf{j}_1^2, \mathbf{j}_2^2, \mathbf{J}^2, J_z$  — это и означает описание в терминах суммарного момента  $J$  и его проекции  $J_z$ , т.е. состояния мы записываем как  $\psi_{j_1, j_2, J, J_z}$ . При заданных  $j_1$  и  $j_2$  число различных состояний (т.е. возможных пар значений  $J, J_z$ ) по-прежнему должно быть равно  $(2j_1+1)(2j_2+1)$ . Наша задача состоит в нахождении всех возможных значений  $J, J_z$ .

Закон сложения проекций момента тривиален: оператор  $\hat{J}_z = \hat{j}_{1z} + \hat{j}_{2z}$ , действуя на состояния  $\varphi_{j_1, j_2}$  (для краткости заданные значения  $j_1, j_2$  не пишем), выдаёт собственные значения

$$J_z = j_{1z} + j_{2z}. \quad (6.23)$$

Основная трудность — определить собственные значения оператора  $\hat{\mathbf{J}}^2$  (если написать его по определению, то будут перекрёстные члены, с которыми заранее неясно, что делать).

Рассмотрим различные возможные значения  $J_z$  и кратности их вырождения:

$J_z$	$j_{1z}$	$j_{2z}$
$j_1 + j_2$	$j_1$	$j_2$
$j_1 + j_2 - 1$	$j_1$	$j_2 - 1$
	$j_1 - 1$	$j_2$
$j_1 + j_2 - 2$	$j_1$	$j_2 - 2$
	$j_1 - 1$	$j_2 - 1$
	$j_1 - 2$	$j_2$
$\dots$	$\dots$	$\dots$

- Наибольшее значение  $J_z$  есть  $j_1 + j_2$  и ему отвечает одно состояние  $\varphi$ . Значит, это есть состояние  $\psi$  с наибольшим значением  $J$ , равным  $j_1 + j_2$ .
- Далее, имеются два состояния  $\varphi$  с  $J_z = j_1 + j_2 - 1$ . Следовательно, должны быть и два состояния  $\psi$  с этим значением  $J_z$ : одно из них есть состояние с  $J = j_1 + j_2$  (и  $J_z = J - 1$ ), а другое — с  $J = j_1 + j_2 - 1$  (и  $J_z = J$ ).
- Для  $J_z = j_1 + j_2 - 2$  есть три различных состояния  $\varphi$ . Это значит, что возможны  $\psi$  со значениями не только  $J = j_1 + j_2$  и  $J = j_1 + j_2 - 1$ , но также и  $J = j_1 + j_2 - 2$ .
- Продолжая в том же духе, мы в конце концов придём к ситуации, когда при уменьшении  $J_z$  на единицу число разных возможных  $J$  уже не растёт (см. рисунок). Это произойдёт, когда  $J_z$  достигнет значения  $|j_1 - j_2|$ . Это, таким образом, наименьшее возможное значение  $J$ .
- Таким образом, получаем, что при заданных  $j_1$  и  $j_2$  суммарный момент  $J$  может принимать значения

$$J = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, |j_1 - j_2|. \quad (6.24)$$

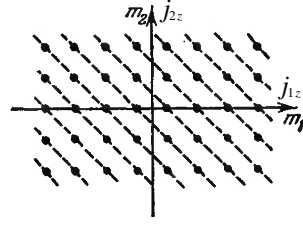


Рис. 6.1: Рисунок, иллюстрирующий сложение моментов для случая  $j_1 = 7/2$ ,  $j_2 = 2$ . Показаны возможные значения  $J_z = j_{1z} + j_{2z}$  (разные линии). Число точек на линии — число разных  $J$ , соответствующих данному  $J_z$ .

Всего их  $(2j_2 + 1)$  штук (если  $j_2 \leq j_1$ ). С учётом различных проекций получается всего

$$\sum_{i=-j_2}^{j_2} [2(j_1 + i) + 1] = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \quad (6.25)$$

состояний  $\psi_{J,J_z}$ , как и должно быть.

Этот результат можно представить с помощью так называемой *векторной модели*. Если ввести два вектора  $\mathbf{j}_1, \mathbf{j}_2$  с длинами  $j_1, j_2$ , то значения  $J$  получаются как длины векторов, идущие от максимального значения  $j_1 + j_2$  (параллельная ориентация) до минимального значения  $|j_1 - j_2|$  (антипараллельная ориентация) с шагом 1.

## Глава 7

# Частица в магнитном поле.

### 7.1 Собственный магнитный момент.

Из классики мы знаем, что если заряженная частица обладает некоторым механическим моментом, то у неё так же есть и магнитный момент. Это справедливо и для «собственного» момента в квантовой механике: собственному механическому моменту (спину) заряженной частицы  $\mathbf{s}$  должен соответствовать собственный магнитный момент  $\boldsymbol{\mu}$ . Из соображений симметрии направления этих двух моментов должны быть коллинеарны, поэтому для операторов моментов мы можем написать

$$\frac{\hat{\boldsymbol{\mu}}}{\mu} = \frac{\hat{\mathbf{s}}}{s}, \quad (7.1)$$

где  $s$  — спин частицы, а  $\mu$  — её магнитный момент (для данного типа частицы это известная «справочная» величина, как и спин). Таким образом, для того, чтобы записать оператор собственного магнитного момента, нам нужно знать отношение  $\mu/s$ . Если бы отношение магнитного момента к механическому для собственного момента было таким же, как для орбитального момента (связанного с движением заряженной частицы по траектории), мы бы знали ответ из классической электродинамики: отношение  $\mu/\hbar s$  было бы равно  $e/2mc$  (здесь  $e$  — заряд частицы; в случае электрона он отрицательный). Но для собственного момента (у которого нет классического аналога) отношение может отличаться, поэтому результат записывают в виде

$$\frac{\mu}{s} = -g\mu_B, \quad (7.2)$$

где

$$\mu_B = \frac{|e|\hbar}{2mc} \approx 0.927 \cdot 10^{-20} \frac{\text{эрг}}{\text{Гс}} \quad (7.3)$$

— *магнетон Бора* (мы сейчас имеем в виду электрон; у других частиц другие заряды и массы, поэтому и магнетоны численно будут другие), а так называемый *g-фактор* описывает отличие от классического отношения (в классике для орбитального движения было бы  $g = 1$ ). Из релятивистского волнового уравнения Дирака получается  $g = 2$ . Таким образом, собственный магнитный момент электрона равен

$$\mu = -gs\mu_B = -\mu_B. \quad (7.4)$$

В магнитном поле  $\mathbf{B}$  магнитный момент «хочет» ориентироваться по полю, это взаимодействие описывается *зеemanовской энергией* в гамильтониане:

$$\hat{H}_Z = -\hat{\boldsymbol{\mu}}\mathbf{B}. \quad (7.5)$$

### 7.2 Уравнение Шрёдингера для заряженной частицы во внешнем поле.

Зеемановский вклад (7.5) описывает спиновое действие магнитного поля, которое определяет поведение спина. Но магнитное поле действует также и на движение заряженной частицы в пространстве — в нерелятивистской квантовой механике это движение происходит независимо от поведения спина. В классической механике функция Гамильтона заряженной частицы в электромагнитном поле имеет вид

$$H = \frac{1}{2m} \left( \mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right)^2 + e\varphi, \quad (7.6)$$

где  $\varphi$  и  $\mathbf{A}$  — скалярный и векторный потенциалы поля ( $\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}$ ,  $\mathbf{E} = -\nabla\varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$ ), а  $\mathbf{p}$  — обобщённый импульс частицы. Для перехода к квантовой механике обобщённый импульс нужно заменить оператором  $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ . Также



нужно добавить зеемановский вклад, который в классике отсутствует. В результате получаем гамильтониан заряженной нерелятивистской частицы во внешнем электромагнитном поле (его называют *гамильтонианом Паули*):

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + e\varphi - \hat{\boldsymbol{\mu}} \mathbf{B}. \quad (7.7)$$

Волновые функции в УШ с таким гамильтонианом [т.е. решения уравнения  $i\hbar \partial \Psi / \partial t = \hat{H} \Psi$ ] являются  $(2s + 1)$ -компонентными спинорами.

При работе с гамильтонианом Паули (7.7) нужно иметь в виду, что оператор  $\hat{\mathbf{p}}$ , вообще говоря, не коммутирует с векторным потенциалом  $\mathbf{A}$ :

$$[\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{A}] = -i\hbar \operatorname{div} \mathbf{A}, \quad (7.8)$$

поэтому при раскрытии квадрата нужно писать

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{e}{2mc} (\hat{\mathbf{p}} \mathbf{A} + \mathbf{A} \hat{\mathbf{p}}) + \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2 + e\varphi - \frac{\mu}{s} \hat{\mathbf{s}} \mathbf{B}. \quad (7.9)$$

Обычно удобно выбирать калибровку, для которой  $\operatorname{div} \mathbf{A} = 0$  — в этом случае  $\hat{\mathbf{p}}$  и  $\mathbf{A}$  коммутируют. Например, для однородного поля этому условию удовлетворяют симметричная калибровка

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} [\mathbf{B} \times \mathbf{r}] \quad (7.10)$$

и калибровка Ландау

$$A_x = -By, \quad A_y = A_z = 0. \quad (7.11)$$

Как в квантовой механике проявляется калибровочная свобода выбора потенциалов поля? Мы можем сделать калибровочное преобразование

$$\mathbf{A} \mapsto \mathbf{A} + \nabla f, \quad \varphi \mapsto \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial f}{\partial t}, \quad (7.12)$$

при котором не меняются напряжённости полей  $\mathbf{B}$  и  $\mathbf{E}$ . А что изменится в УШ? Оказывается, что при этом волновая функция домножается на фазовый множитель:<sup>1</sup>

$$\Psi \mapsto \Psi \exp \left( \frac{ie}{\hbar c} f \right). \quad (7.13)$$

При таком преобразовании не меняется  $|\Psi|^2$  и вообще никакая физически наблюдаемая величина. Так и должно быть — это ведь просто калибровочное преобразование.

В классической механике обобщённый импульс частицы связан с её скоростью соотношением  $m\mathbf{v} = \mathbf{p} - e\mathbf{A}/c$ . В квантовой механике оператор  $\hat{\mathbf{v}}$  можно найти по общему правилу дифференцирования операторов по времени [см. формулу (1.38)<sup>2</sup>]. Применяя это правило к оператору координаты, получаем:

$$\hat{\mathbf{v}} \equiv \hat{\dot{\mathbf{r}}} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \mathbf{r}] = \frac{i}{2m\hbar} \left[ \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2, \mathbf{r} \right]. \quad (7.14)$$

Используя соотношение  $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$  и учитывая, что

$$[\hat{p}_\beta - \frac{e}{c} A_\beta, r_\alpha] = [\hat{p}_\beta, r_\alpha] = -i\hbar \delta_{\alpha\beta}, \quad (7.15)$$

<sup>1</sup>Проверим, что при таком калибровочном преобразовании величин  $\mathbf{A}$ ,  $\varphi$  и  $\Psi$  уравнение Шрёдингера  $i\hbar \partial \Psi / \partial t = \hat{H} \Psi$  не меняется. Действительно, левая часть принимает вид

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} e^{\frac{ie}{\hbar c} f} - \frac{e}{c} \frac{\partial f}{\partial t} \Psi e^{\frac{ie}{\hbar c} f},$$

и второе слагаемое здесь сокращается с дополнительным вкладом в правой части, происходящим от члена со скалярным потенциалом. Кроме того, изменяется кинетический вклад в правой части УШ:

$$\begin{aligned} \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} - \frac{e}{c} \nabla f \right)^2 \left( \Psi e^{\frac{ie}{\hbar c} f} \right) &= \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} - \frac{e}{c} \nabla f \right) \left( \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} - \frac{e}{c} \nabla f \right) \Psi \cdot e^{\frac{ie}{\hbar c} f} + \Psi \cdot \hat{\mathbf{p}} e^{\frac{ie}{\hbar c} f} \right) = \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} - \frac{e}{c} \nabla f \right) \left( \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \Psi \cdot e^{\frac{ie}{\hbar c} f} \right) = \\ &= \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} - \frac{e}{c} \nabla f \right) \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \Psi \cdot e^{\frac{ie}{\hbar c} f} + \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \Psi \cdot \hat{\mathbf{p}} e^{\frac{ie}{\hbar c} f} = \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \Psi \cdot e^{\frac{ie}{\hbar c} f}. \end{aligned}$$

Сокращая теперь калибровочный фазовый множитель в обеих сторонах уравнения, получаем исходное УШ.

$$\hat{A} = \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}]$$

находим (взяв  $\hat{A} = \hat{B} = \hat{p}_\beta - \frac{e}{c}A_\beta$  и  $\hat{C} = r_\alpha$ )

$$m\hat{\mathbf{v}} = \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \quad (7.16)$$

— полностью аналогично соотношению между скоростью  $\mathbf{v}$  и обобщённым импульсом  $\mathbf{p}$  в классике. При этом для операторов компонент скорости имеют место правила коммутации<sup>3</sup>

$$[\hat{v}_\alpha, \hat{v}_\beta] = \frac{ie\hbar}{m^2c}e_{\alpha\beta\gamma}B_\gamma \quad (7.17)$$

— т.е. разные компоненты скорости, вообще говоря, некоммутативны.

### 7.3 Плотность тока в магнитном поле.

Для вывода квантовомеханического выражения для плотности тока при движении заряженной частицы в магнитном поле удобно исходить из формулы

$$\delta H = -\frac{1}{c} \int \mathbf{j} \delta \mathbf{A} dV, \quad (7.18)$$

определяющей в классике изменение функции Гамильтона при варьировании векторного потенциала.<sup>4</sup> В квантовой механике такая формула справедлива для среднего значения гамильтониана:

$$\langle \hat{H} \rangle = \int \Psi^\dagger \left[ \frac{1}{2m} \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right)^2 + e\varphi - \hat{\boldsymbol{\mu}}\mathbf{B} \right] \Psi dV. \quad (7.19)$$

Варьируем это выражение по  $\mathbf{A}$ :

$$\delta \langle \hat{H} \rangle = \int \Psi^\dagger \left[ -\frac{e}{2mc} (\hat{\mathbf{p}}\delta\mathbf{A} + \delta\mathbf{A}\hat{\mathbf{p}}) + \frac{e^2}{mc^2} \mathbf{A}\delta\mathbf{A} - \hat{\boldsymbol{\mu}} \text{rot} \delta\mathbf{A} \right] \Psi dV. \quad (7.20)$$

Нам нужно вариацию  $\delta\mathbf{A}$  иметь в виде множителя под знаком интеграла. Для этого нужно преобразовать два из четырёх слагаемых. Преобразуем первое слагаемое с помощью интегрирования по частям (интеграл по бесконечно удалённой поверхности исчезает):

$$\int \Psi^\dagger \hat{\mathbf{p}}\delta\mathbf{A}\Psi dV = -i\hbar \int \Psi^\dagger \nabla (\delta\mathbf{A}\Psi) dV = i\hbar \int (\nabla\Psi^\dagger) \delta\mathbf{A}\Psi dV. \quad (7.21)$$

Далее, пользуясь формулой

$$\mathbf{a} \text{rot} \mathbf{b} = \mathbf{b} \text{rot} \mathbf{a} - \text{div}[\mathbf{a} \times \mathbf{b}], \quad (7.22)$$

интегрируем по частям четвёртое слагаемое (интеграл от дивергенции превращается в поверхностный интеграл и исчезает):

$$-\int \Psi^\dagger (\hat{\boldsymbol{\mu}} \text{rot} \delta\mathbf{A}) \Psi dV = -\int \delta\mathbf{A} \text{rot} (\Psi^\dagger \hat{\boldsymbol{\mu}} \Psi) dV. \quad (7.23)$$

В результате для  $\delta \langle \hat{H} \rangle$  получается формула с правой частью того же вида, что и (7.18), в которой плотность тока (электрического тока, т.е. с учётом заряда  $e$ ) имеет вид

$$\mathbf{j} = \frac{ie\hbar}{2m} [(\nabla\Psi^\dagger)\Psi - \Psi^\dagger\nabla\Psi] - \frac{e^2}{mc} \mathbf{A}\Psi^\dagger\Psi + c \text{rot}(\Psi^\dagger \hat{\boldsymbol{\mu}} \Psi). \quad (7.24)$$

Легко проверить, что

<sup>3</sup>Прделаем это вычисление:

$$[\hat{v}_\alpha, \hat{v}_\beta] = \frac{1}{m^2} [\hat{p}_\alpha - \frac{e}{c}A_\alpha, \hat{p}_\beta - \frac{e}{c}A_\beta] = -\frac{e}{m^2c} ([\hat{p}_\alpha, A_\beta] - [\hat{p}_\beta, A_\alpha]) = \frac{ie\hbar}{m^2c} \left( \frac{\partial A_\beta}{\partial r_\alpha} - \frac{\partial A_\alpha}{\partial r_\beta} \right) = \frac{ie\hbar}{m^2c} e_{\alpha\beta\gamma} B_\gamma.$$

<sup>4</sup>Эту формулу можно пояснить следующим образом. Поскольку для заряженной частицы в классике функция Гамильтона имеет вид (7.6), вариация по  $\mathbf{A}$  даёт

$$\delta H = \frac{1}{m} \left( \mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right) \left( -\frac{e}{c}\delta\mathbf{A} \right) = -\frac{e}{c} \mathbf{v} \delta\mathbf{A} = -\frac{1}{c} \int \mathbf{j} \delta\mathbf{A} dV,$$

где мы, во-первых, учли связь обобщённого импульса  $\mathbf{p}$  со скоростью  $\mathbf{v}$  [такая же формула, как (7.16), только без шляпок], а во-вторых сказали, что для точечной частицы получающаяся формула может быть записана как результат интегрирования по всему объёму выражения, содержащего плотность тока точечной частицы  $\mathbf{j} = e\mathbf{v}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ . Последняя формула специально записана в общем интегральном виде, т.к. в такой записи она справедлива для произвольного распределения плотности тока в пространстве.

- при калибровочном преобразовании (7.12)–(7.13) плотность тока не меняется;
- полученное выражение для тока вместе с плотностью заряда  $\rho = e\Psi^\dagger\Psi$  удовлетворяет уравнению непрерывности  $\partial\rho/\partial t + \operatorname{div}\mathbf{j} = 0$ .

Результат (7.24) можно записать как сумму двух слагаемых, связанных с орбитальным движением заряженной частицы и с её спиновым магнитным моментом соответственно:

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}_{\text{орб}} + \mathbf{j}_{\text{сп}}, \quad (7.25)$$

$$\mathbf{j}_{\text{орб}} = \frac{ie\hbar}{2m} [(\nabla\Psi^\dagger)\Psi - \Psi^\dagger\nabla\Psi] - \frac{e^2}{mc}\mathbf{A}\Psi^\dagger\Psi, \quad \mathbf{j}_{\text{сп}} = c\operatorname{rot}(\Psi^\dagger\hat{\boldsymbol{\mu}}\Psi) = \frac{\mu}{s}c\operatorname{rot}(\Psi^\dagger\hat{\mathbf{s}}\Psi) = c\operatorname{rot}\mathbf{m}, \quad (7.26)$$

где в последнем выражении  $\mathbf{m} = \Psi^\dagger\hat{\boldsymbol{\mu}}\Psi$  есть пространственная плотность магнитного момента частицы. Эта последняя запись показывает, что вклад  $\mathbf{j}_{\text{сп}}$  аналогичен вкладу токов намагничивания (происходящих от молекулярных токов) в веществе.<sup>5</sup>

#### 7.4 Движение в магнитном поле. Уровни Ландау. — на семинаре

Уровни Ландау для поперечного движения заряженной бесспиновой частицы в однородном магнитном поле  $\mathbf{B}$  (энергия орбитального движения без учёта зеемановской энергии):

$$E_n = \hbar\omega_B \left(n + \frac{1}{2}\right), \quad \omega_B = \frac{|e|\hbar B}{mc}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (7.27)$$

<sup>5</sup>Вспомним, что при записи уравнения Максвелла для ротора магнитного поля в веществе мы записываем полный ток как сумму тока проводимости и тока намагничивания,

$$\operatorname{rot}\mathbf{B} = \frac{4\pi}{c}\mathbf{j} = \frac{4\pi}{c}\mathbf{j}_{\text{пров}} + \frac{4\pi}{c}\mathbf{j}_{\text{магн}},$$

а ток намагничивания записываем через намагничённость как  $\mathbf{j}_{\text{магн}} = c\operatorname{rot}\mathbf{M}$ . После этого ток намагничивания можно перенести в левую часть и окончательно записать

$$\operatorname{rot}\mathbf{H} = \frac{4\pi}{c}\mathbf{j}_{\text{пров}}, \quad \mathbf{H} = \mathbf{B} - 4\pi\mathbf{M}.$$

В этой стандартной записи для уравнения Максвелла в веществе индекс обычно опускают и пишут в правой части  $\mathbf{j}$ , имея в виду ток проводимости.

## Глава 8

# Парамагнитный резонанс. Адиабатика.

### 8.1 Парамагнитный резонанс.

Рассмотрим следующую задачу. Пусть имеется частица со спином  $1/2$  и магнитным моментом  $\mu$  в однородном магнитном поле  $\mathbf{B}(t)$  следующего вида:

$$B_x = B_1 \cos \omega_0 t, \quad B_y = B_1 \sin \omega_0 t, \quad B_z = B_0, \quad (8.1)$$

где  $B_0$ ,  $B_1$ ,  $\omega_0$  от времени не зависят. Пусть при  $t = 0$  частица находится в состоянии с  $s_z = 1/2$ . Нужно найти зависимость спинора от времени и вероятности различных значений  $s_z$  в произвольный момент времени  $t$ .

Спиновая часть гамильтониана имеет вид

$$\hat{H}_Z(t) = -\mu \hat{\sigma} \mathbf{B}(t) = -\mu \begin{pmatrix} B_0 & B_1 e^{-i\omega_0 t} \\ B_1 e^{i\omega_0 t} & -B_0 \end{pmatrix}. \quad (8.2)$$

Это не что иное как задача об осцилляциях Раби — мы их обсуждали на примере абстрактной двухуровневой системы, а сейчас мы говорим о конкретной физической реализации такой системы (спин  $1/2$  в магнитном поле). Поэтому с точностью до изменения обозначений мы можем применять все результаты, полученные нами ранее в контексте осцилляций Раби (**на семинаре**). Не будем переписывать все ранее полученные результаты, выпишем лишь вероятность переворота спина (т.е. перехода в другое состояние двухуровневой системы — не то, в котором она была изначально):

$$P_{\downarrow}(t) = \frac{B_1^2}{(B_0 + \hbar\omega_0/2\mu)^2 + B_1^2} \sin^2 \left( \frac{\Omega t}{2} \right), \quad \Omega = \frac{2\sqrt{(\mu B_0 + \hbar\omega_0/2)^2 + (\mu B_1)^2}}{\hbar}. \quad (8.3)$$

Здесь мы видим, что имеется резонанс при  $\omega_0 = -2\mu B_0/\hbar$  (обратите внимание, что величина  $\omega_0$  может быть как положительной, так и отрицательной — знак просто задаёт направление вращения компонент магнитного поля в плоскости  $xy$ ). Максимальная (по времени) вероятность обнаружения спина в перевёрнутом состоянии есть

$$P_{\downarrow\max}(\omega_0) = \frac{B_1^2}{(B_0 + \hbar\omega_0/2\mu)^2 + B_1^2}. \quad (8.4)$$

Если  $B_1 \ll B_0$ , то у этой величины есть ярко выраженный узкий резонанс (по частоте) ширины  $\Delta\omega \sim \mu B_1/\hbar$ , в котором она достигает значения 1, при том что вне резонанса значения очень малы. В контексте задачи про спин это явление называется *(пара)магнитным резонансом*.

Итак, на квантовом языке парамагнитный резонанс означает, что постоянное поле  $\mathbf{B}_0$  создало расщепление уровней для спина, а затем поперечное (возможно, слабое) поле подходящей частоты (соответствующей расщеплению) привело к переходам между этими двумя уровнями (см. рис. 8.1). Получается, что система резонансным образом поглощает внешнее излучение подходящей частоты, переходя при этом между двумя своими уровнями. На классическом языке спин прецессирует в постоянном поле (т.к. со спином связан магнитный момент, а магнитный момент испытывает действие вращающего момента сил  $[\boldsymbol{\mu} \times \mathbf{B}_0]$ ), а слабое переменное поперечное поле создаёт дополнительный вращающий момент, который пытается изменить угол между магнитным моментом и осью вращения. Если частота переменного поля совпадает с исходной частотой прецессии момента, то дополнительный момент сил действует всё время в одну и ту же сторону, устанавливая вектор  $\boldsymbol{\mu}$  либо параллельно, либо антипараллельно постоянному магнитному полю  $\mathbf{B}_0$ . При этом длина вектора  $\boldsymbol{\mu}$  меняться не будет, но будет меняться его проекция на направление поля  $\mathbf{B}_0$  — это классический аналог квантовых переходов между состояниями с различными проекциями.

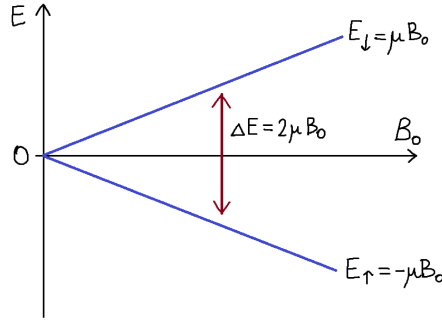


Рис. 8.1: Парамагнитный резонанс имеет место, когда частота переменного поля соответствует расщеплению уровней в постоянном поле  $\mathbf{B}_0$ , т.е. при  $\hbar\omega_0 = -\Delta E$ .

## 8.2 Адиабатическое приближение (в нестационарных задачах).

### 8.2.1 Адиабатическая теорема.

Пусть имеется гамильтониан, медленно зависящий от времени через некоторый параметр:

$$\hat{H}(\hat{p}, x, a(t)), \quad \dot{a} \rightarrow 0. \quad (8.5)$$

Рассмотрим задачу о с.з. и с.ф. «мгновенного» гамильтониана:

$$\hat{H}(\hat{p}, x, a(t)) \psi_n(x, a(t)) = E_n(a(t)) \psi_n(x, a(t)). \quad (8.6)$$

Вообще-то, поскольку  $\hat{H}$  зависит от  $t$ , энергия не сохраняется. В этом смысле  $E_n(a(t))$  — это не энергия, а некоторая вспомогательная величина.<sup>1</sup> В то же время, эти «мгновенные энергии» определяют характерные частоты системы, связанные с переходами между уровнями:  $\omega_{kn} = (E_k - E_n)/\hbar$ . Медленность изменения параметра означает, что характерное время его изменения  $t_0$  (оно же является характерным временем изменения гамильтониана) должно быть велико в том смысле, что

$$t_0 \gg 1/|\omega_{kn}|. \quad (8.7)$$

В.ф.  $\psi_n(x, a(t))$  образуют ортонормированный базис, в котором нам будет удобно работать. В стационарном случае временная зависимость в.ф. имеет вид  $\exp(-iE_n t/\hbar)$ , а в нестационарном давайте сделаем очевидное обобщение  $\exp(-i \int_0^t E_n(a(t')) dt'/\hbar)$  и будем искать истинную в.ф. в виде разложения по базису:

$$\Psi(x, a(t)) = \sum_m c_m(t) \psi_m(x, a(t)) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_m(a(t')) dt'\right) \quad (8.8)$$

[таким образом, коэффициенты  $c_m(t)$  представляют собой волновую функцию в представлении собственных функций мгновенного гамильтониана]. Подставляем это разложение в УШ  $i\hbar \partial \Psi / \partial t = \hat{H} \Psi$ . Получаем:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = i\hbar \sum_m \left[ \dot{c}_m \psi_m e^{-\frac{i}{\hbar} \int E_m dt'} + c_m \dot{\psi}_m e^{-\frac{i}{\hbar} \int E_m dt'} - \frac{i}{\hbar} E_m(a(t)) c_m \psi_m e^{-\frac{i}{\hbar} \int E_m dt'} \right], \quad (8.9)$$

$$\hat{H} \Psi = \sum_m \left[ E_m(a(t)) c_m \psi_m e^{-\frac{i}{\hbar} \int E_m dt'} \right], \quad (8.10)$$

откуда следует уравнение на коэффициенты  $c_m(t)$ :

$$\sum_m \dot{c}_m \psi_m e^{-\frac{i}{\hbar} \int E_m dt'} = - \sum_m c_m \dot{\psi}_m e^{-\frac{i}{\hbar} \int E_m dt'}. \quad (8.11)$$

<sup>1</sup>Например, придать величине  $E_n(a(t))$  прямой физический смысл, сказав, что это есть значение энергии, которое мы можем измерить в некоторый момент времени, не получится. Дело в том, что согласно соотношению неопределённости для энергии (см. раздел 2.6), измерить энергию мы можем лишь с точностью  $\Delta E \sim \hbar/\Delta t$ , если проводим измерение в течение времени  $\Delta t$ . Поэтому мгновенно мы можем измерить энергию лишь с бесконечной неопределённостью.

Берём проекцию этого уравнения на состояние с номером  $k$  (т.е. применяем операцию  $\int dx \cdot \psi_k^*(x, a(t)) \times$ ), получаем

$$\dot{c}_k(t) = - \sum_m c_m(t) e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t [E_k(a(t')) - E_m(a(t'))] dt'} \langle \psi_k(x, a(t)) | \dot{\psi}_m(x, a(t)) \rangle. \quad (8.12)$$

Последний множитель в правой части можем записать в виде

$$\langle \psi_k | \dot{\psi}_m \rangle = \langle \psi_k | \frac{\partial \psi_m}{\partial a} \rangle \dot{a}. \quad (8.13)$$

Мы предполагаем  $\dot{a} \rightarrow 0$ , поэтому хочется сказать, что в нулевом приближении правая часть обращается в ноль, откуда<sup>2</sup>

$$c_k(t) \approx \text{const}. \quad (8.14)$$

Таким образом, если система была в  $k$ -ом состоянии, то она в нём и останется. Это утверждение (сохранение номера квантового состояния при адиабатическом изменении гамильтониана) называется *адиабатической теоремой*. При адиабатической эволюции система успевает подстраиваться, хотя эволюция может быть долгой и гамильтониан может измениться сильно!

Эта адиабатическая теорема — аналог адиабатической инвариантности величины

$$I = \frac{1}{2\pi} \oint p dq \quad (8.15)$$

в классической механике. Аналогия становится очевидной в квазиклассическом случае, когда (в силу правила квантования Бора–Зоммерфельда)

$$I = \hbar \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad (8.16)$$

и сохранение  $I$  означает сохранение номера квантового состояния  $n$ .

### 8.2.2 Условие применимости адиабатической теоремы и первая поправка.

Сформулированная выше адиабатическая теорема требует пояснений. Когда мы говорим, что в результате длительной эволюции гамильтониан может сильно измениться, мы подразумеваем, что хотя производная гамильтониана  $\partial \hat{H} / \partial t$  по времени содержит  $\dot{a}$  и поэтому мала, интервал времени (интервал интегрирования) велик, поэтому в целом изменение гамильтониана может быть велико.

Казалось бы, так же можно сказать и про изменение коэффициентов  $c_k(t)$ . Однако это не так, и коэффициенты  $c_k(t)$  меняются слабо даже на большом интервале времени. Дело здесь в осциллирующей экспоненте, входящей в  $\dot{c}_k$  — из-за этого при интегрировании по времени будут иметь место осцилляции на масштабе  $\hbar / |E_k - E_m|$ . Учитывая условие (8.7), мы видим, что эти осцилляции происходят гораздо быстрее, чем меняется гамильтониан.

Разберём это подробнее. Будем считать, что при  $t = 0$  система находилась в невырожденном состоянии  $n$  [т.е. с точки зрения теории возмущений по  $\dot{a}$  можно сказать, что  $c_k^{(0)}(0) = \delta_{kn}$ ]. Мы можем строить адиабатическую теорию возмущений для коэффициентов  $c_k(t)$ , отталкиваясь от формулы (8.12). Правая часть там уже содержит малость из-за наличия производной по времени [см. формулу (8.13)], поэтому при подстановке в правую часть коэффициентов  $c_m^{(0)} = \delta_{mn}$  мы получим в левой части производную от первой поправки к коэффициенту:

$$\begin{aligned} \dot{c}_k^{(1)}(t) &= - \sum_m c_m^{(0)}(t) e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t [E_k(a(t')) - E_m(a(t'))] dt'} \langle \psi_k(x, a(t)) | \dot{\psi}_m(x, a(t)) \rangle = \\ &= - e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t [E_k(a(t')) - E_n(a(t'))] dt'} \langle \psi_k(x, a(t)) | \dot{\psi}_n(x, a(t)) \rangle. \end{aligned} \quad (8.17)$$

Рассмотрим  $\langle \psi_k | \dot{\psi}_n \rangle$ . Вспоминаем уравнение (8.6), дифференцируем его по  $t$ :

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} \psi_n + \hat{H} \dot{\psi}_n = \dot{E}_n \psi_n + E_n \dot{\psi}_n. \quad (8.18)$$

Проецируем на состояние  $\langle \psi_k |$ :

$$\langle \psi_k | \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} | \psi_n \rangle + \langle \psi_k | E_k | \dot{\psi}_n \rangle = \dot{E}_n \delta_{kn} + E_n \langle \psi_k | \dot{\psi}_n \rangle. \quad (8.19)$$

<sup>2</sup>На самом деле, это рассуждение слишком неаккуратно, а формула (8.14) даже не совсем верна. Ниже, в разделах 8.2.2 и 8.4.1, мы проделаем более аккуратные вычисления. Тем не менее, сейчас нам важно только то, что хотя к адиабатической теореме мы приходим слишком «наивным» (и требующим более аккуратного обоснования) способом, её утверждение оказывается верным.

Тогда при  $k \neq n$  получаем:

$$\langle \psi_k | \dot{\psi}_n \rangle = \frac{1}{E_n(a(t)) - E_k(a(t))} \langle \psi_k | \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} | \psi_n \rangle, \quad (8.20)$$

и формула (8.17) для поправки первого порядка даёт

$$\dot{c}_k^{(1)}(t) = \frac{1}{\hbar \omega_{kn}(a(t))} \left( \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} \right)_{kn} e^{i \int_0^t \omega_{kn}(a(t')) dt'}, \quad \omega_{kn}(a(t)) \equiv \frac{E_k(a(t)) - E_n(a(t))}{\hbar}, \quad (8.21)$$

откуда

$$c_k^{(1)}(t) = \int_0^t \frac{1}{\hbar \omega_{kn}(a(t'))} \left( \frac{\partial \hat{H}}{\partial t'} \right)_{kn} e^{i \int_0^{t'} \omega_{kn}(a(t'')) dt''} dt'. \quad (8.22)$$

Для применимости нашей адиабатической теории возмущений необходимо выполнение условия  $|c_k^{(1)}(t)| \ll 1$ . В этом случае адиабатическая теорема с хорошей точностью применима, но при этом результат (8.22) важен сам по себе — он описывает отклонение от утверждения адиабатической теоремы (которая приближённо утверждает, что  $c_k^{(1)} = 0$  при  $k \neq n$ ) и определяет (малые) вероятности переходов в другие состояния.

Оценим результат (8.22). Для этого в экспоненте в силу медленной зависимости  $a(t)$  напишем просто  $i\omega_{kn}t'$  с некоторым текущим значением  $\omega_{kn}$ . Далее, из-за осциллирующей экспоненты при больших временах  $t$  оставшийся интеграл по  $dt'$  в силу условия (8.7) можно оценить как<sup>3</sup>

$$c_k^{(1)} \sim \frac{1}{\hbar \omega_{kn}} \left( \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} \right)_{kn} \cdot \frac{1}{\omega_{kn}}. \quad (8.23)$$

Это означает, что несмотря на возможную очень долгую эволюцию,  $c_k^{(1)}$  не будет постоянно расти (по модулю). Первоначальный рост на временах  $\Delta t \sim 1/\omega_{kn}$  затем прекращается из-за осциллирующей экспоненты под интегралом.

Условия применимости адиабатической теории возмущений в результате можно сформулировать как совокупность требований

$$\left| \left( \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} \right)_{kn} \right| \cdot \Delta t \ll |E_k - E_n|, \quad \Delta t \sim \frac{1}{|\omega_{kn}|} \quad (8.24)$$

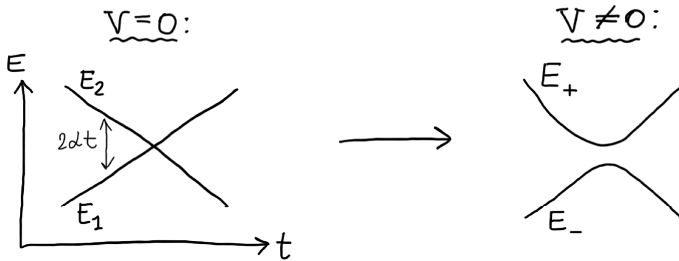
и условия (8.7).

### 8.3 Переходы Ландау–Зенера в адиабатическом приближении. — на семинаре

Пусть имеется двухуровневая система, «мгновенные» уровни которой зависят от времени и «хотят» пересечься, но недиагональные матричные элементы не дают им это сделать:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \alpha t & V \\ V^* & -\alpha t \end{pmatrix}. \quad (8.25)$$

Здесь  $\alpha$  задаёт скорость сближения (а затем удаления) уровней:



<sup>3</sup>Если  $f(t)$  — достаточно медленная функция, то при  $\omega t \gg 1$  можно сделать оценку

$$\int_0^t f(t') e^{i\omega t'} dt' = \frac{1}{i\omega} \left[ f(t') e^{i\omega t'} \Big|_0^t - \int_0^t \dot{f}(t') e^{i\omega t'} dt' \right] \approx \frac{f(t) e^{i\omega t} - f(0)}{i\omega} \sim \frac{f}{i\omega} \sim f \cdot \Delta t, \quad \Delta t \sim \frac{1}{\omega}.$$

Иными словами, существенное интегрирование, не замытое осцилляциями по  $t'$ , происходит на отрезке ширины  $\Delta t \sim 1/\omega$  вблизи краёв области интегрирования.

Медленность функции здесь проявилась в том, что мы отбросили интеграл, содержащий  $\dot{f}$  (возникший после интегрирования по частям). Если бы мы и его проинтегрировали по частям, то получили бы вклад порядка  $\dot{f}/\omega^2 \sim f/\omega^2 t_0$ , где  $t_0$  — характерное время изменения функции  $f(t)$ . По сравнению с удержанным членом этот вклад содержит дополнительный множитель  $1/\omega t_0$ , который должен быть мал. Это так при  $\omega t_0 \gg 1$  — это и есть условие медленности функции  $f(t)$ . В рамках нашей адиабатической теории возмущений оно эквивалентно условию (8.7).



Можно задать вопрос: если при  $t \rightarrow -\infty$  система находилась в состоянии  $E_+$  или  $E_-$ , какова вероятность того, что при  $t \rightarrow +\infty$  система перейдёт в другое состояние? Такие переходы называются переходами Ландау–Зенера, и их вероятность оказывается следующей:

$$W_{LZ} = \exp\left(-\frac{\pi|V|^2}{\hbar\alpha}\right). \quad (8.26)$$

В рамках адиабатики можно найти экспоненту (и в этом приближении вероятность перехода мала), а тот факт, что коэффициент перед ней равен единице, следует из точного решения.

## 8.4 Фаза Берри.

(Michael Berry, 1984)

### 8.4.1 Общее решение.

Теперь продолжим вывод, представленный в разделе 8.2, рассмотрев случай  $k = n$  (напомним, что мы считаем, что при  $t = 0$  система находилась в невырожденном состоянии  $n$ ). Нам будет интересна ситуация, когда зависящий от времени параметр в гамильтониане является вектором:  $\mathbf{a}(t)$ . Поправками к адиабатичности мы пренебрежём, т.е. будем считать  $c_k = 0$  при  $k \neq n$ . В рамках такого приближения должно быть  $|c_n| = 1$ , но это не означает, что  $c_n(t) = \text{const}$ . Действительно, рассмотрим уравнение (8.12) в случае  $k = n$ :<sup>4</sup>

$$\dot{c}_n(t) = -c_n(t)\langle n|\nabla_{\mathbf{a}}|n\rangle\dot{\mathbf{a}}. \quad (8.27)$$

Его решение можно записать в виде

$$c_n(t) = e^{i\gamma_n(t)}, \quad (8.28)$$

где

$$\dot{\gamma}_n = i\langle n|\nabla_{\mathbf{a}}|n\rangle\dot{\mathbf{a}}, \quad \gamma_n(t) = i \int_{\mathbf{a}_0}^{\mathbf{a}(t)} \langle n|\nabla_{\mathbf{a}}|n\rangle d\mathbf{a} \quad (8.29)$$

— интегрирование здесь ведётся по контуру, соответствующему эволюции параметра от значения  $\mathbf{a}_0$  в начальный момент времени до текущего значения  $\mathbf{a}(t)$ .

Оказывается, что величина  $\gamma_n(t)$  вещественна. В этом легко убедиться, применив операцию  $\nabla_{\mathbf{a}}$  к условию нормировки  $\langle n|n\rangle = 1$ . Это даёт

$$\langle \nabla_{\mathbf{a}}|n\rangle + \langle n|\nabla_{\mathbf{a}}|n\rangle = \langle n|\nabla_{\mathbf{a}}|n\rangle^* + \langle n|\nabla_{\mathbf{a}}|n\rangle = 2\text{Re}\langle n|\nabla_{\mathbf{a}}|n\rangle = 0. \quad (8.30)$$

Поэтому величина  $\langle n|\nabla_{\mathbf{a}}|n\rangle$  — чисто мнимая, а  $\gamma_n$  — вещественная [имеющая смысл фазы в формуле (8.28)]. Таким образом, решение (8.28) находится в рамках адиабатического приближения  $|c_n(t)| = 1$ , и система остаётся в исходном состоянии].

Теперь рассмотрим замкнутую траекторию  $C$  в пространстве параметров, так что в некоторый момент времени  $\mathbf{a}(T) = \mathbf{a}_0$ . Фаза  $\gamma$  для такой траектории называется *фазой Берри* и может быть записана как интеграл по поверхности, натянутой на замкнутый контур:

$$\gamma_n(C) = \oint_C \mathcal{A}_n(\mathbf{a}) \cdot d\mathbf{a} = \int_{S(C)} \Omega_n(\mathbf{a}) \cdot d\mathbf{S}, \quad (8.31)$$

где величины  $\mathcal{A}_n(\mathbf{a})$  и  $\Omega_n(\mathbf{a})$ , называемые соответственно связностью Берри и кривизной Берри (связность и кривизна — понятия из дифференциальной геометрии), даются формулами

$$\mathcal{A}_n(\mathbf{a}) = i\langle n|\nabla_{\mathbf{a}}|n\rangle, \quad \Omega_n(\mathbf{a}) = \text{rot}_{\mathbf{a}} \mathcal{A}_n(\mathbf{a}) = i \text{rot}_{\mathbf{a}} \langle n|\nabla_{\mathbf{a}}|n\rangle. \quad (8.32)$$

Кривизну Берри мы можем преобразовать как<sup>5</sup>

$$\Omega_n(\mathbf{a}) = i\langle \nabla_{\mathbf{a}}|n\rangle \times |\nabla_{\mathbf{a}}|n\rangle = i \sum_{m \neq n} \langle \nabla_{\mathbf{a}}|n|m\rangle \times \langle m|\nabla_{\mathbf{a}}|n\rangle. \quad (8.33)$$

<sup>4</sup>Комбинации вида  $\langle \psi_k | \frac{\partial \psi_m}{\partial \mathbf{a}} \rangle$ , возникающие в выражениях

$$\langle \psi_k | \dot{\psi}_m \rangle = \langle \psi_k | \frac{\partial \psi_m}{\partial \mathbf{a}} \rangle \dot{\mathbf{a}},$$

мы для краткости будем теперь записывать как  $\langle k|\nabla_{\mathbf{a}}|m\rangle$  или  $\langle k|\nabla_{\mathbf{a}}m\rangle$ .

<sup>5</sup>Поскольку

$$[\nabla \times (f\mathbf{b})]_{\alpha} = e_{\alpha\beta\gamma} \nabla_{\beta}(fb_{\gamma}) = e_{\alpha\beta\gamma}(\nabla_{\beta}f)b_{\gamma} + e_{\alpha\beta\gamma}f\nabla_{\beta}b_{\gamma},$$

получаем

$$\text{rot}(f\mathbf{b}) = [(\text{grad } f) \times \mathbf{b}] + f \text{rot } \mathbf{b}.$$

В последнем выражении исключено слагаемое с  $m = n$ , т.к. оно выпадает в силу того, что  $\langle n | \nabla_{\mathbf{a}} n \rangle$  — чисто мнимая векторная величина, поэтому вектор  $\langle \nabla_{\mathbf{a}} n | n \rangle = \langle n | \nabla_{\mathbf{a}} n \rangle^* = -\langle n | \nabla_{\mathbf{a}} n \rangle$  ей антипараллелен, и их векторное произведение равно нулю.

Раньше для случая  $m \neq n$  мы получали формулу (8.20), которая может быть переписана в виде

$$\langle m | \nabla_{\mathbf{a}} n \rangle = \frac{1}{E_n(\mathbf{a}) - E_m(\mathbf{a})} \langle m | \nabla_{\mathbf{a}} \hat{H} | n \rangle, \quad (8.34)$$

откуда окончательно находим

$$\Omega_n(\mathbf{a}) = i \sum_{m \neq n} \frac{\langle n | \nabla_{\mathbf{a}} \hat{H} | m \rangle \times \langle m | \nabla_{\mathbf{a}} \hat{H} | n \rangle}{[E_n(\mathbf{a}) - E_m(\mathbf{a})]^2}. \quad (8.35)$$

Здесь всё выражено через с.з. и с.ф. гамильтониана при заданном значении параметра  $\mathbf{a}$  и производную гамильтониана по этому параметру (зависимость гамильтониана от  $\mathbf{a}$  задана), то есть время из такой записи вообще выпало.

Что же за результат мы получили? Мы начали с в.ф. с параметром  $\mathbf{a}_0$  в момент времени  $t = 0$  и после некоторой эволюции пришли к в.ф. с тем же самым параметром  $\mathbf{a}_0$  в момент времени  $t = T$ . Эти две функции связаны следующим образом [вспоминаем формулу (8.8)]:

$$|n(\mathbf{a}_0); t = T\rangle = e^{i\gamma_n(C)} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^T E_n(\mathbf{a}(t')) dt'} |n(\mathbf{a}_0); t = 0\rangle. \quad (8.36)$$

Это адиабатика, вероятностями переходов мы пренебрегли, поэтому вернулись к той же самой в.ф., домноженной на фазовый множитель. Но в этом фазовом множителе кроме динамической фазы (определяемой энергией  $E_n$ ) есть ещё и фаза Берри  $\gamma_n(C)$ . Она имеет геометрический смысл и определяется геометрией в пространстве параметров  $\mathbf{a}$  (обратите внимание, что в выражениях для фазы Берри, связности Берри и кривизны Берри зависимость от времени не важна).

В квантовой механике есть свобода выбора фазы в.ф. Связность Берри при этом также преобразуется. В то же время, кривизна Берри и фаза Берри оказываются калибровочно инвариантны. Действительно, если мы изменим выбор общей фазы в.ф. (т.е. произведём калибровочное преобразование)

$$|n(\mathbf{a})\rangle \mapsto e^{i\chi(\mathbf{a})} |n(\mathbf{a})\rangle, \quad (8.37)$$

то одновременно мы получим

$$\mathcal{A}_n(\mathbf{a}) \mapsto \mathcal{A}_n(\mathbf{a}) - \nabla_{\mathbf{a}} \chi(\mathbf{a}). \quad (8.38)$$

Но при этом  $\Omega_n(\mathbf{a})$  [ $\mathbf{a}$ , следовательно, и  $\gamma_n(C)$ ] не меняется, т.к. ротор от дополнительного слагаемого с градиентом в формуле (8.38) равен нулю. Калибровочно-инвариантная фаза Берри, в принципе, измерима, и может проявляться в различных интерференционных экспериментах. Она оказывается важна в современной науке о так называемых *топологических* материалах (изоляторах, сверхпроводниках).

Если  $E_n(\mathbf{a}_*) = E_m(\mathbf{a}_*)$  для некоторых  $n \neq m$ , то такое  $\mathbf{a}_*$  называют точкой вырождения. Точка вырождения не может лежать на траектории адиабатической эволюции (иначе адиабатика неприменима), но её наличие очень важно для фазы Берри. Сейчас мы это увидим на конкретном примере.

#### 8.4.2 Спин 1/2 в медленно меняющемся магнитном поле.

Рассмотрим конкретный пример: частица со спином 1/2 в начальный момент времени находится в состоянии с проекцией 1/2 на ось магнитного поля  $\mathbf{B}(0)$ . Нужно найти фазу Берри, соответствующую медленному изменению направления поля  $\mathbf{B}(t)$  с возвратом к исходному направлению (и сравнить результат с результатом для медленного вращения поля по конусу в задаче про спин 1/2 из ДЗ).

Параметр  $\mathbf{a}(t)$  в нашей задаче — это магнитное поле  $\mathbf{B}(t)$ . Спиновый гамильтониан имеет вид  $\hat{H}_Z = -\mu \hat{\sigma} \mathbf{B}(t)$ . У него есть два уровня:  $E_{\uparrow}(\mathbf{B}) = -\mu B$  и  $E_{\downarrow}(\mathbf{B}) = \mu B$ . Найдём кривизну Берри по формуле (8.35). В этой формуле в нашем случае  $|n\rangle = |\uparrow\rangle$ , а для  $|m\rangle$  единственное возможное значение — это  $|\downarrow\rangle$ . Здесь состояния «вверх» и «вниз» являются с.ф. мгновенного гамильтониана, т.е. это вверх и вниз по текущему направлению магнитного поля. Нам нужна величина

$$\langle n | \nabla_{\mathbf{a}} \hat{H} | m \rangle = \langle \uparrow | \nabla_{\mathbf{B}} \hat{H}_Z | \downarrow \rangle = -\mu \langle \uparrow | \hat{\sigma} | \downarrow \rangle = -\mu(1, -i, 0). \quad (8.39)$$

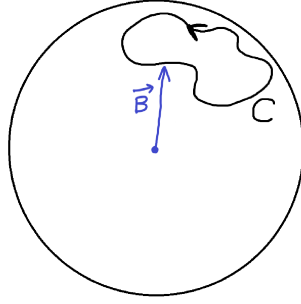
Это даёт

$$\Omega_{\uparrow}(\mathbf{B}) = i \sum_{m \neq n} \frac{\langle n | \nabla_{\mathbf{a}} \hat{H} | m \rangle \times \langle m | \nabla_{\mathbf{a}} \hat{H} | n \rangle}{[E_n(\mathbf{a}) - E_m(\mathbf{a})]^2} = i\mu^2 \frac{(1, -i, 0) \times (1, i, 0)}{[-\mu B - \mu B]^2} = -\frac{\mathbf{B}}{2B^3}. \quad (8.40)$$

Отсюда фаза Берри

$$\gamma_{\uparrow}(C) = - \int_{S(C)} \frac{\mathbf{B}}{2B^3} d\mathbf{S} = - \int_{S(C)} \frac{\mathbf{B}}{2B^3} B^2 d\Omega \frac{\mathbf{B}}{B} = -\frac{\Omega_C}{2}, \quad (8.41)$$

где  $\Omega_C$  — телесный угол, под которым траектория видна из точки вырождения  $\mathbf{B}_* = 0$  (это точка в пространстве параметров  $\mathbf{B}$ , в которой энергии двух уровней нашего спинового гамильтониана совпадают). Именно так проявилась важность точки вырождения и её геометрический смысл в данной задаче.



В задаче из ДЗ поле вращалось по поверхности конуса (будучи всё время наклонённым под углом  $\theta$  к оси  $z$ ). В случае медленного вращения мы нашли кроме динамической ещё и геометрическую фазу  $\pi(\cos \theta - 1)$  — это и есть фаза Берри. При этом телесный угол, вырезаемый конусом с таким углом, равен  $\Omega_C = 2\pi(1 - \cos \theta)$ . Поэтому фаза Берри действительно оказалась равна  $-\Omega_C/2$ .

### 8.5 Эффект Ааронова–Бома.

Этот эффект был предсказан в 1959 году, задолго до того, как было сформулировано понятие фазы Берри, но может быть истолкован на этом языке. Рассмотрим электрон, который мы хотим «обвести» вокруг области ненулевого магнитного поля. Поле считаем заключённым внутри тонкого соленоида с потоком  $\Phi$ , а электрон «живёт» снаружи. Тогда при обходе вокруг соленоида электрон вообще не чувствует магнитного поля, но тем не менее он находится в векторном потенциале. Векторный потенциал на замкнутом контуре  $C$ , проведённом вокруг соленоида, не может быть равен нулю, т.к. должно быть

$$\oint_C \mathbf{A} d\mathbf{l} = \int_{S(C)} \text{rot } \mathbf{A} d\mathbf{S} = \Phi. \quad (8.42)$$

Таким образом, магнитное поле есть только внутри соленоида, а векторный потенциал — везде! В квантовой механике в.ф. оказывается чувствительна к этому векторному потенциалу даже если электрон не чувствует самого магнитного поля.

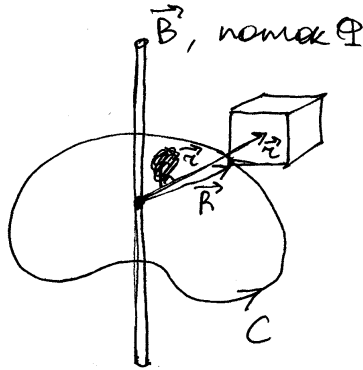


Рис. 8.2: Эффект Ааронова–Бома: обводим электрон вокруг соленоида с магнитным полем.

Для упрощения рассуждения будем считать, что электрон находится внутри некоторого ящика. Положение ящика в пространстве будем задавать координатой одного из его углов  $\mathbf{R}$ . Для обхода электрона вокруг соленоида будем адиабатически двигать ящик так, что  $\mathbf{R}(t)$  обходит замкнутую траекторию (см. рис. 8.2) — это и есть адиабатический параметр нашей задачи. Буквой  $\mathbf{r}$  будем обозначать обычную переменную координату электрона в пространстве. Тогда наша в.ф. имеет вид

$$|n(\mathbf{R})\rangle = \exp\left(\frac{ie}{\hbar c} \int_{\mathbf{R}}^{\mathbf{r}} \mathbf{A}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'\right) \psi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}), \quad (8.43)$$

где функцию  $\psi_n$  (описывающую состояние электрона внутри ящика) можно выбрать вещественной. Здесь мы воспользовались калибровочной свободой (7.12) и учли, что в области  $\mathbf{B} = 0$  мы можем векторный потенциал  $\mathbf{A}$  целиком

представить как градиент некоторой функции  $f$ . Фазовый множитель в формуле (8.43) написан в виде, соответствующем общему правилу (7.13). Точнее говоря, по этому общему правилу записано подынтегральное выражение в фазовом множителе и верхний предел интегрирования. Нижний предел можно выбирать по-разному (но снаружи соленоида, в области нулевого поля) — мы выбрали его наиболее удобным способом, а фаза Берри от этого выбора не зависит (т.к. изменение этого выбора соответствует домножению в.ф. на общий фазовый множитель).

В результате для связности Берри получаем

$$\mathcal{A}_n(\mathbf{R}) = i \int d\mathbf{r} \psi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \left[ -\frac{ie}{\hbar c} \mathbf{A}(\mathbf{R}) \psi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) + \nabla_{\mathbf{R}} \psi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \right] = \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}(\mathbf{R}) + \frac{i}{2} \nabla_{\mathbf{R}} \int d\mathbf{r} \psi_n^2(\mathbf{r} - \mathbf{R}) = \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}(\mathbf{R}), \quad (8.44)$$

откуда

$$\gamma_n(C) = \oint_C \mathcal{A}_n(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{R} = \frac{e}{\hbar c} \oint_C \mathbf{A} \cdot d\mathbf{R} = \frac{e}{\hbar c} \int_{S(C)} \text{rot } \mathbf{A} \cdot d\mathbf{S} = \frac{e}{\hbar c} \Phi. \quad (8.45)$$

Эта фаза не зависит от номера состояния  $n$ , а потому и наличие ящика не принципиально (это просто удобный способ рассуждения), главное — что электрон обходит вокруг магнитного потока. В контексте движения заряженной частицы в магнитном поле полученная нами фаза Берри называется *фазой Ааронова–Бома*. Её можно наблюдать в двухщелевом эксперименте по сдвигу интерференционной картины (т.к. к разности фаз двух проходящих через разные щели волн будет добавляться фаза Ааронова–Бома, определяемая потоком, заключённым между двумя траекториями, см. рис. 8.3).

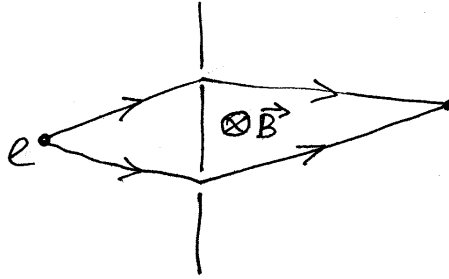


Рис. 8.3: Фаза Ааронова–Бома сдвигает интерференционную картину в двухщелевом эксперименте с заряженными частицами.

# Глава 9

## Атом.

### 9.1 Атом.

#### 9.1.1 Атомные уровни энергии.

Электроны в атоме движутся в кулоновском поле ядра и взаимодействуют друг с другом. В нерелятивистском приближении это взаимодействие чисто электростатическое (кулоновское) и не зависит от спина. Поле ядра является центрально-симметричным, поэтому сохраняется полный орбитальный момент системы электронов  $L$ , а раз спины во взаимодействии не участвуют, то сохраняется полный спин  $S$ . Кратность вырождения уровня с заданными  $L$  и  $S$  равна  $(2L + 1)(2S + 1)$ .

При учёте релятивистских эффектов энергия атома начинает зависеть не только от величины векторов  $\mathbf{L}$  и  $\mathbf{S}$ , но и от их взаимной ориентации. В этом случае орбитальный момент  $\mathbf{L}$  и спин  $\mathbf{S}$  уже, строго говоря, не сохраняются по отдельности, а сохраняется лишь полный момент  $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$  (именно сохранение полного момента импульса следует из изотропии пространства). Поэтому точные уровни энергии должны характеризоваться значениями полного момента  $J$ . По общему правилу сложения моментов  $J$  может принимать значения от  $L + S$  до  $|L - S|$ . Поэтому уровень с данными  $L$  и  $S$  расщепляется на  $2S + 1$  уровней, если  $L > S$ , или на  $2L + 1$  уровней, если  $L < S$ .

В то же время, если релятивистские эффекты малы (это во многих случаях так), то их можно учесть как возмущение. Под влиянием этого возмущения вырожденный уровень с заданными  $L$  и  $S$  расщепляется на близкие друг к другу уровни, отличающиеся значениями полного момента  $J$ . Это расщепление за счёт спин-орбитального взаимодействия называют *тонкой структурой* (или *мультиплетным расщеплением*) уровня (см. рис. 9.1).

Атомные уровни энергии (спектральные термы) обозначают теми же символами (только заглавными), что и состояния отдельных частиц: состояния с  $L = 0, 1, 2, 3, 4, 5, \dots$  обозначают  $S, P, D, F, G, H, \dots$ . Слева сверху от символа

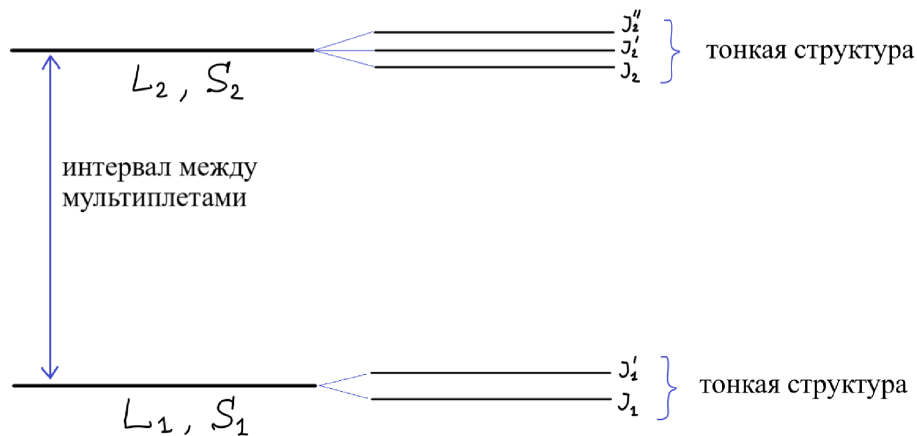


Рис. 9.1: В результате релятивистских эффектов (спин-орбитальное взаимодействие) атомные уровни с заданными значениями орбитального момента системы электронов  $L$  и спинового момента  $S$  (слева) расщепляются на уровни тонкой структуры (справа). Уровни тонкой структуры соответствуют разным значениям полного момента  $J$ . Совокупность уровней тонкой структуры называют мультиплетом. Исходный уровень имел кратность вырождения  $(2L + 1)(2S + 1)$ . Мультиплетное расщепление частично снимает вырождение, но при этом уровни мультиплета остаются вырожденными по проекциям полного момента  $M_J$ . В сложном эффекте Зеемана это оставшееся вырождение полностью снимается, и каждый уровень тонкой структуры с заданным  $J$  расщепляется ещё на  $2J + 1$  подуровней.

указывают число  $2S+1$  (его называют мультиплетностью, хотя число компонент тонкой структуры равно этому числу только при  $L \geq S$ ). Справа снизу указывают значение полного момента  $J$ . Например,  ${}^2P_{3/2}$  обозначает уровень атома с  $L = 1$ ,  $S = 1/2$ ,  $J = 3/2$ .

Для полного описания состояния атома нужно не только указать атомный терм, но и перечислить состояния всех электронов. Например, для атома бора возможен (и обладает наинизшей энергией) атомный терм  ${}^2P_{1/2}$  (для которого  $L = 1$ ,  $S = 1/2$ ,  $J = 1/2$ ), электронная конфигурация которого есть  $1s^2 2s^2 2p$ . Цифра в строке здесь означает главное квантовое число  $n$ , а буква соответствует значению орбитального момента  $l$  (каждого отдельного электрона). Если несколько электронов находятся в состояниях с одинаковыми  $n$  и  $l$ , то это обозначают показателем степени, например,  $1s^2$ . Перечисление состояний всех электронов определяет *электронную конфигурацию* атома.

При заданных  $n$  и  $l$  электроны могут иметь  $2l+1$  различных проекций орбитального момента  $m$  и две различные проекции спина, поэтому всего таких состояний —  $2(2l+1)$ . В соответствии с *принципом Паули* (согласно которому два электрона не могут находиться в одном и том же квантовом состоянии, т.е. их квантовые числа не могут полностью совпасть) это есть максимальное число электронов на данной электронной оболочке. Таким образом,  $s$ -оболочка полностью заполнена, если на ней находятся 2 электрона,  $p$ -оболочка полностью заполняется 6 электронами,  $d$ -оболочка — 10 электронами и т.д.

### 9.1.2 Правила Хунда.

Существуют эмпирически установленные *правила Хунда*, которые определяют состояние с наименьшей энергией при заданной электронной конфигурации с учётом принципа Паули. Эти правила состоят в следующем:

1. Для данной электронной конфигурации наименьшей энергией обладает терм с наибольшим возможным значением  $S$ .
2. Для этого  $S$  наименьшей энергией обладает терм с наибольшим возможным  $L$ .
3. Для состояния с заданными  $S$  и  $L$  наименьшей энергией обладает терм с полным моментом  $J$ , определяемым по следующему правилу. Если оболочка заполнена не более, чем наполовину, то  $J$  — минимально возможное (т.е.  $|L - S|$ ). Если оболочка заполнена более, чем наполовину, то  $J$  — максимально возможное (т.е.  $L + S$ ).

Эти правила хорошо работают, но тем не менее нужно иметь в виду, что они являются эмпирическими, т.е. получены в результате обобщения опытных данных и не являются строгим утверждением (можно найти примеры, когда эти правила предсказывают неправильное основное состояние).

Хотя правила Хунда не являются строгим утверждением, а значит и не могут иметь строгого обоснования, можно привести аргументы, которые объясняют, почему в целом они описывают правильную тенденцию.

Первое и второе правила связаны с электростатическим взаимодействием электронов. Рассмотрим первое правило и предположим, что электронов всего два. Тогда полный спин  $S$  может быть равен 0 или 1, причём каждому значению соответствует координатная волновая функция определённой симметрии (в соответствии с принципом Паули волновая функция двух частиц должна быть антисимметрична относительно их перестановки, т.е. перестановки, включающей в себя перемену мест координат и проекций спинов частиц). Спину  $S = 0$  должна соответствовать чётная, а спину  $S = 1$  — нечётная координатная волновая функция  $\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ . Нечётная координатная в.ф. обращается в нуль при  $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$  и в целом описывает состояние, в котором электроны не подходят очень близко друг к другу. Это приводит к меньшему кулоновскому отталкиванию двух электронов, а значит и к меньшей энергии такого состояния. Аналогично, для системы из нескольких электронов наибольшему спину соответствует «наиболее антисимметричная» координатная в.ф.

Второе правило можно пояснить с помощью классической аналогии. Большое  $L$  означает, что электроны вращаются в одном и том же направлении, а тогда они «встречаются» реже, чем если бы они вращались в разных направлениях (меньшие  $L$ ). Это опять же приводит к уменьшению средней энергии их кулоновского отталкивания.

Наконец, третье правило связано с релятивистскими эффектами (спин-орбитальное взаимодействие).

## 9.2 Эффект Штарка. — на семинаре

*Эффект Штарка* — расщепление уровней энергии атома в электрическом поле.

На семинаре, посвящённом атому водорода, рассматривалась задача о расщеплении в однородном электрическом поле  $\mathcal{E}$  уровня энергии атома водорода с  $n = 2$ . Оказалось, что этот четырёхкратно вырожденный уровень расщепляется на 3 подуровня.

Таким образом, эффекта Штарка для атома водорода линейен по полю. Оказывается, что это — особый случай. Для остальных атомов эффект Штарка оказывается квадратичным по полю.

### 9.3 Эффект Зеемана.

Рассмотрим атом в однородном магнитном поле  $\mathbf{B}$ . Векторный потенциал возьмём в виде  $\mathbf{A} = \frac{1}{2}[\mathbf{B} \times \mathbf{r}]$ , тогда  $\operatorname{div} \mathbf{A} = 0$  и  $[\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{A}] = 0$ . Гамильтониан имеет вид (здесь суммирование по  $a$  — это суммирование по всем электронам в атоме,  $\hat{H}_0$  — гамильтониан в отсутствие поля)

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{1}{2m} \sum_a \left( \hat{\mathbf{p}}_a + \frac{|e|\hbar}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_a) \right)^2 + U + 2\mu_B \mathbf{B} \sum_a \hat{\mathbf{s}}_a = \\ &= \hat{H}_0 + \frac{|e|\hbar}{mc} \sum_a \mathbf{A}(\mathbf{r}_a) \hat{\mathbf{p}}_a + \frac{e^2 \hbar^2}{2mc^2} \sum_a \mathbf{A}^2(\mathbf{r}_a) + 2\mu_B \mathbf{B} \hat{\mathbf{S}} = \\ &= \hat{H}_0 + \frac{|e|\hbar}{2mc} \mathbf{B} \sum_a [\mathbf{r}_a \times \hat{\mathbf{p}}_a] + \frac{e^2 \hbar^2}{8mc^2} \sum_a [\mathbf{B} \times \mathbf{r}_a]^2 + 2\mu_B \mathbf{B} \hat{\mathbf{S}} = \\ &= \hat{H}_0 + \mu_B (\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}}) \mathbf{B} + \frac{e^2 \hbar^2}{8mc^2} \sum_a [\mathbf{B} \times \mathbf{r}_a]^2.\end{aligned}\quad (9.1)$$

Таким образом, мы видим, что оператор

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_{\text{ат}} = -\mu_B (\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}}) \quad (9.2)$$

можно считать оператором магнитного момента атома (в отсутствие поля).

Внешнее магнитное поле снимает вырождение по направлениям момента импульса (как орбитального, так и спинового), т.е. приводит к расщеплению атомных уровней — это называется *эффектом Зеемана*. Найдём это расщепление для уровня, характеризующегося квантовыми числами  $L, S, J$ .

#### 9.3.1 Сложный эффект Зеемана (слабое магнитное поле).

Предположим, что магнитное поле настолько слабое, что  $\mu_B B$  мало по сравнению с расстояниями между уровнями энергии атома, в том числе по сравнению с интервалами тонкой структуры. Тогда зависящие от  $\mathbf{B}$  слагаемые в гамильтониане можно считать возмущением (а невозмущённые уровни — это отдельные компоненты мультиплетов). В первом порядке последним слагаемым в формуле (9.1), квадратичным по полю, можно пренебречь.

По теории возмущений энергии расщепления за счёт магнитного поля даются средними от линейного по полю слагаемого. Таким образом, из гамильтониана (9.1) с учётом формулы (9.2) получаем:

$$\Delta E = -\langle \hat{\boldsymbol{\mu}}_{\text{ат}} \rangle \mathbf{B}, \quad (9.3)$$

и нам нужно найти средний магнитный момент. Из общих соображений симметрии ясно, что поскольку единственный сохраняющийся (в отсутствие магнитного поля) момент — это полный момент  $\mathbf{J}$ , то оператор магнитного момента в векторном смысле должен быть пропорционален оператору полного момента (т.е. направлен вдоль той же прямой):

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_{\text{ат}} = \hat{G} \hat{\mathbf{J}}, \quad (9.4)$$

где  $\hat{G}$  — некоторый скалярный оператор. По определению  $\hat{\boldsymbol{\mu}}_{\text{ат}}$  получаем:

$$\hat{G} \hat{\mathbf{J}} = -\mu_B (\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}}) = -\mu_B (\hat{\mathbf{J}} + \hat{\mathbf{S}}). \quad (9.5)$$

Домножая обе стороны на  $\hat{\mathbf{J}}$ , находим

$$\hat{G} \hat{\mathbf{J}}^2 = -\mu_B (\hat{\mathbf{J}}^2 + \hat{\mathbf{J}} \hat{\mathbf{S}}) = -\mu_B (\hat{\mathbf{J}}^2 + \hat{\mathbf{L}} \hat{\mathbf{S}} + \hat{\mathbf{S}}^2). \quad (9.6)$$

Оператор  $\hat{\mathbf{L}} \hat{\mathbf{S}}$  может быть выражен из соотношения

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = (\hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}})^2 = \hat{\mathbf{L}}^2 + 2\hat{\mathbf{L}} \hat{\mathbf{S}} + \hat{\mathbf{S}}^2. \quad (9.7)$$

В результате из формулы (9.6) мы можем выразить  $\hat{G}$  в виде

$$\hat{G} = -\mu_B \left( 1 + \frac{\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{\mathbf{L}}^2 + \hat{\mathbf{S}}^2}{2\hat{\mathbf{J}}^2} \right), \quad (9.8)$$

а в состоянии с заданными значениями  $L, S, J$  все операторы в этой формуле превращаются в свои собственные значения. Поэтому

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_{\text{ат}} = -\mu_B \left( 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)} \right) \hat{\mathbf{J}}, \quad (9.9)$$



и считая поле направленным по  $z$ , из формулы (9.3) окончательно получаем

$$\Delta E = g\mu_B M_J B, \quad (9.10)$$

где

$$g = 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)} \quad (9.11)$$

называют *множителем (фактором) Ланде* или *гиромагнитным множителем* (а  $M_J$  — это проекция полного момента на ось  $z$ ).

Если  $S = 0$ , то  $g = 1$ . Если же  $L = 0$ , то  $g = 2$  (именно такой  $g$ -фактор имеет место для спинового момента электрона — правда, сейчас речь идёт о магнитной добавке к энергии не отдельного электрона, а целого атома). Формула (9.10) показывает, что магнитное поле полностью снимает вырождение уровней тонкой структуры по  $M_J$  [вспомним, что в отсутствие магнитного поля каждый уровень тонкой структуры, соответствующий полному моменту  $J$ , был  $(2J+1)$ -кратно вырожден], см. рис. 9.1.

Гамильтониан атома в слабом магнитном поле имеет вид

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \hat{\mu}\mathbf{B} = \hat{H}_0 - \hat{\mu}_z B, \quad (9.12)$$

поэтому по формуле Гельмана–Фейнмана

$$\langle \hat{\mu}_z \rangle = - \left\langle \frac{\partial \hat{H}}{\partial B} \right\rangle = - \frac{\partial \Delta E}{\partial B}. \quad (9.13)$$

Подставляя сюда результат (9.10), видим, что атом в состоянии с определённой проекцией  $M_J$  обладает средним магнитным моментом

$$\langle \hat{\mu}_z \rangle = -g\mu_B M_J. \quad (9.14)$$

В этом случае атом парамагнитен: он обладает магнитным моментом и без поля, а при приложении поля этот магнитный момент хочет ориентироваться вдоль поля.

Однако, если  $L = S = 0$  (а, следовательно,  $J = 0$ ), то формула (9.14) для магнитного момента неприменима (с одной стороны,  $M_J = 0$ , с другой стороны множитель Ланде неопределён). При этом из формулы (9.1) сразу ясно, что линейное по полю слагаемое вообще не приводит к смещению уровней (т.к. все матричные элементы  $\mathbf{L}$  и  $\mathbf{S}$  равны нулю), и нужно учитывать слагаемое, квадратичное по полю. Поэтому в первом порядке теории возмущений

$$\Delta E = \frac{e^2}{8mc^2} \sum_a \langle [\mathbf{B} \times \mathbf{r}_a]^2 \rangle. \quad (9.15)$$

Волновая функция состояния с  $L = S = 0$  сферически симметрична, поэтому можно сразу усреднить по углам:

$$[\mathbf{B} \times \mathbf{r}_a]^2 = B^2 r_a^2 \sin^2 \theta, \quad \overline{\sin^2 \theta} = 1 - \overline{\cos^2 \theta} = 1 - \overline{n_z^2} = 1 - \frac{1}{3} = \frac{2}{3}, \quad (9.16)$$

откуда

$$\Delta E = \frac{e^2}{12mc^2} B^2 \sum_a \langle r_a^2 \rangle. \quad (9.17)$$

По формуле (9.13) находим, что магнитный момент пропорционален полю (т.к. без поля у сферически-симметричного состояния нет магнитного момента). Коэффициент пропорциональности — это магнитная восприимчивость:

$$\chi = \frac{\partial \mu_z}{\partial B} = - \frac{\partial^2 \Delta E}{\partial B^2} = - \frac{e^2}{6mc^2} \sum_a \langle r_a^2 \rangle. \quad (9.18)$$

Эта формула называется *формулой Ланжевена*. Она даёт отрицательную магнитную восприимчивость, т.е. атом с  $L = S = 0$  диамагнитен.

### 9.3.2 Простой эффект Зеемана (относительно сильное магнитное поле).

В достаточно сильных магнитных полях, когда  $\mu_B B$  сравнимо с интервалами тонкой структуры или превышает их, формулы (9.10)–(9.11) перестают работать. Если зеемановское расщепление велико по сравнению с интервалами тонкой структуры (то есть по сравнению со спин-орбитальным взаимодействием), но при этом по-прежнему мало по сравнению с расстояниями между различными мультиплетными [так что в гамильтониане (9.1) по-прежнему можно пренебречь третьим членом по сравнению со вторым], ответ получается легко. Поскольку в этом пределе спин-орбитальным взаимодействием можно пренебречь, сохраняется не только  $M_J$ , но и проекции  $M_L$  и  $M_S$  орбитального момента и спина по-отдельности. Тогда среднее от второго слагаемого в гамильтониане (9.1) даёт

$$\Delta E = \mu_B B (M_L + 2M_S). \quad (9.19)$$