

Содержание

Предисловие	3
Семинар I	5
Введение	5
Математический аппарат квантовой механики	5
Семинар II	12
Коммутатор. Соотношение неопределенностей	12
Оператор импульса и координаты	14
Семинар III	19
Эволюция квантовых систем. Уравнение Шрёдингера	19
Семинар IV	25
Решение задач на потенциальные ямы	25
Семинар V	33
Продолжение решения задач в одномерии	33
Семинар VI	37
Гармонический осциллятор в квантовой механике	37
Семинар VII	43
Трёхмерное пространство	43
Оператор момента импульса	44
Семинар VIII	49
Собственные значения момента импульса	49
Собственные состояния момента импульса	52
Спин	53
Семинар IX	57
Атом водорода	57
Семинар X	63
Решение задач в трёхмерном пространстве	63
Семинар XI	72
Квазиклассика	72
Классически разрешенные и запрещённые зоны	72
Точки поворота	74
Приложение A	81
Приложение B	84
Опыт Штерна – Герлаха	84
Поляризация света	86
Векторы Джонса	87
Матрицы Джонса. Сфера Пуанкаре	89
Группа вращений $SO(3)$ и $SU(2)$, их связь	90
Векторы и матрицы Паули	92

Спиноры Паули	95
Итог	97
Приложение С	98
Благодарности	105
Список литературы	106

Предисловие

Я прекрасно помню тот момент, когда перед началом второго семестра третьего курса узнал, что меня ждёт годовой курс квантовой механики. И хоть за моими плечами уже был один курс теоретической физики, а именно теории поля, квантовая механика оставалась для меня оплотом “новой” физики. Казалось, если получится понять квантовую механику, то тебе под силу понять всё. Тогда я даже не представлял, как сильно моя заинтересованность этой сферой изменит мой жизненный путь.

Семинары по квантовой механике, наверное, единственные семинары, которые я не пропустил ни разу. Сидя на них, я усиленно старался вникнуть в новый математический аппарат и осознать новые постулаты. Получалось это далеко не всегда. Поэтому, приходя в общежитие, я с большим интересом открывал различные источники, пытаюсь разобраться, что же в этом квантовом мире происходит. Не раз я находил себя сидящим за столом, с 20 открытыми на ноутбуке вкладками и лежащим передо мной третьим томом Ландау – Лифшица. Нотация Дирака, волновая функция, туннелирование, эрмитовы операторы, уравнение Шрёдингера – все эти новые для меня объекты кружили надо мной, пока я пытался их осознать и почувствовать. Теория давалась мне не быстро, но зато достаточно стабильно. С практикой ситуация была совсем иная.

Каждый раз открывая задавальник и обещая себе решить все задачи самостоятельно, через пару часов я кидал на стол ручку и лез открывать задачник Белоусова или искать ответы в интернете. Нельзя сказать, что я был совсем безнадёжен: все упражнения (читай как упрощённые задачи) и пару-тройку задач я всё-таки решил сам. Однако большинство задач казались мне неподъёмными. Я видел единственный вариант их решения – посмотреть где-то идею и дальше решать самостоятельно. Это действительно работало, но не приносило мне никакого удовольствия, так как создавалось ощущение, что я ничего не понимаю. И хоть на сдачах у меня получалось отвечать достаточно хорошо, я не чувствовал в себе уверенность, что смог бы сам решить не типовую задачу, если бы встретился с ней в “реальной” жизни.

Второй семестр только усугубил ситуацию. Мой семинарист отличался глубоким уровнем понимания предмета и тотальным неумением его объяснять (возможно ещё и нежеланием). Поэтому, много задач и тем второго семестра легли на плечи самих студентов. Простыми назвать их было совсем нельзя. С релятивизмом и матрицами Дирака я смог разобраться только спустя два года. Усугубляло ситуацию то, что материал по задачам было найти гораздо сложнее. Приходилось действительно разбираться, либо забивать и пользоваться решениями старшекурсников.

Вспоминая это сейчас, кажется странным, что я не потерял веру в фундаментальность и глубину квантовой механики, продолжая набивать шишки о неподъёмные задачи. Возможно, мне помогло то, что ещё на этапе изучения квантмеха я начал работать в этой сфере. Будучи окружённым разбирающимися людьми, я был замотивирован стать таким же. И именно в момент окончания курса квантмеха мне захотелось рассказывать его так, чтобы у студентов не возникало тех ощущений, которые переживал я. Я искренне верил, что рассказать квантмех без боли можно.

Собственно, так и появились сначала мои семинары, а затем и эти конспекты. Всё, что вы будете читать далее – это моя попытка облегчить ваш путь в понимании квантовой механики и решении задач. Здесь подробно решена большая часть задач, которые я решал во время своего курса по квантовой механике. Однако, помимо задач, здесь собрано достаточно последовательное (на мой взгляд) построение теории. Хотя теория может показаться недостаточно глубокой, её достаточно для осознания и самостоятельного решения любой из представленных задач. Если у читателя получится решить хотя бы несколько задач, используя только теоретические выкладки и знания математики на уровне третьекурсника, то моя работа была проделана не зря.

Конечно, эти конспекты и для меня самого. Пока они создавались, я систематизировал все свои знания и даже приобрёл новые. Всего есть три основных источника, которыми я пользовался при создании этих семинаров. Основная книга, которой я пользовался при создании семинаров, это книга А. Львовского “Отличная квантовая механика” [1]. Именно она вдохновила меня на то, что квантовую механику можно рассказывать понятно, и что рассказывать её надо через задачи и упражнения. Поэтому в этих семинарах вы найдёте с ней много сходств. Самое большое различие, однако, заключается в том, что я ориентировался на программу и знания третьекурсника МФТИ (если быть точнее, то на студента родного для меня факультета аэрокосмических исследований). Поэтому у меня получилось изложить материал в более коротком издании, при этом решая более сложные задачи.

Вторая и третья книги более академичные – это Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц “Теоретическая физика, том 3. Квантовая механика” [2] и David J. Griffiths “Introduction to Quantum Mechanics” [3], соответственно. Подход в них, конечно, более строгий, однако читаются они, на удивление, достаточно плавно. В ЛЛ вы найдёте более математический подход, у Гриффитса же можно найти много интересных задач и достаточно подробное решение к ним. Если бы меня сейчас спросили, по какому из этих учебников лучше ботать – я бы точно ответил, что по учебнику Гриффитса. Поэтому, если хорошо читаете по английский, очень вам его советую.

Не обошлось и без задачника Белоусова по теоретической физике [4]. Задач в нём решено много, и большинство из них из года в год попадают в программе ФАКТ-а. Все решения, взятые оттуда, я попытался расписать чуть более подробно, для формирования у читателя более полной картины.

То, что вы это читаете, для меня уже большое достижение. Я буду искренне рад, если смогу помочь вам сдать экзамен, сделать домашку или, может даже, заинтересовать вас в такой непростой, но очень многогранной и красивой науке, как квантовая механика. Если при прочтении у вас появится желание поблагодарить меня или вы нашли опечатку и хотите её исправить – заходите в GitHub репозиторий <https://github.com/MVanza/QM-handbook-for-mipt>, ставьте звездочку и делайте pull request (или пишите мне в телеграм, ссылка там есть). И, конечно, стоит упомянуть, что один с таким количеством текста, формул и рисунков я бы не справился. Поэтому, в конце есть важная часть с благодарностями.

Татаркин Олег,
2024

Семинар I

Введение

Рассказывая о новом направлении в науке, важно определиться, по какому пути будут проходить первые шаги в изучении ещё не изведанной для слушателя области. Я вижу два основных пути: первый – вести повествование в хронологическом порядке, второй – выстраивать его с точки зрения чётких и формальных постулатов и определений. Примеры для первого случая – курсы по общефизу. Вместо того чтобы сразу дать уравнения Максвелла, нас аккуратно ведут за руку через весь путь, который прошли физики, чтобы прийти к тем самым 4 важнейшим уравнениям. Пример для второго случая – любая математическая дисциплина. Прямо сейчас на читателя должна нахлынуть волна ностальгии по первому курсу и попытке лектора объяснить ещё совсем школьникам, что же такое эти действительные числа и каким аксиомам они подчиняются.

Мы планируем заниматься физикой, но физикой теоретической! А значит, и подход будет смешанным, т.е. начнём мы со строгих (где это необходимо) математических определений, а затем перейдём к основным достижениям в физике, которые получилось достичь благодаря аппарату квантовой механики. Я считаю этот подход наиболее логичным, так как проработка математического фундамента сразу позволяет сосредоточиться на физике эксперимента, а значит, развить ту самую физическую интуицию.

Стоит уточнить, что данную работу не следует воспринимать как лекции по квантовой механике. С точки зрения теории здесь будет “смузи” из всевозможных источников, которые когда-то попали мне в голову и были нещадно поглощены и обработаны. Теория здесь для понимания практики. В идеале это пособие должно научить вас не только решать задачи, но и понимать их суть. Давайте же приступим!

Математический аппарат квантовой механики

В квантовой механике описание объектов будет осуществляться в комплексном *гильбертовом пространстве* \mathcal{H} . Гильбертово пространство является обобщением евклидова, добавляя в него полноту. Напомню, что полнота – это свойство, при котором любая фундаментальная последовательность сходится к элементу из этого пространства. Это очень важное свойство, так как мы будем описывать состояние частиц, используя, в том числе, бесконечномерные объекты. Для таких объектов важно, чтобы они не расходились и лежали внутри нашего пространства. Полнота как раз и обеспечивает эти условия.

Рассмотрим примеры пространств, которые являются Гильбертовыми:

- Комплексное двумерное пространство \mathbb{C}^2 . С его помощью мы будем описывать, например, частицы со спином $1/2$ (электроны, нейтроны).
- Комплексное n -мерное пространство \mathbb{C}^n . Используя его, мы будем описывать уже n -уровневые системы, такие как квантовый осциллятор.
- Пространство квадратично интегрируемых функций $L^2(\mathbb{R})$. Является первым пространством, с которым мы встретимся, так как используется для описания операторов координаты и импульса.

Вектор состояния. Первый постулат квантовой механики

Основным инструментом описания состояния частицы является элемент Гильбертового пространства, который мы будем называть *кет вектор* $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$. Здесь наступает очень

важный момент (не то что бы до этого он был не очень важный, но всё же) – пришло время познакомиться с обозначением Дирака, или *Bra-ket* нотацией! Помимо того, что она будет использоваться при изучении теории, сложно переоценить вклад данного подхода в упрощение записи различных задач и в обеспечение удобства их понимания. Итак, мы будем описывать состояния частиц с помощью кет векторов, т.е. используя правую угловую скобку ($|\psi\rangle$, $|\varphi\rangle$ и т.п.). Кет – это элемент Гильбертового пространства, он может быть как конечномерным, так и бесконечномерным. Кет векторы можно складывать, умножать на скаляр, делать что угодно, что позволяет линейная алгебра. В том числе, мы можем делать преобразования с использованием операторов. Мы обязательно вернёмся к этому чуть позже.

У кет вектора есть “злой брат-близнец” – бра. Хотя бра и называют вектором, на самом деле его правильно воспринимать как функционал, который при скалярном произведении с кет вектором даёт скаляр. Другими словами, если кет векторы лежат в пространстве \mathcal{H} , то бра векторы лежат в дуальном пространстве \mathcal{H}^{dual} . Учитывая, что бра будет обозначаться левой угловой скобкой, т.е. $\langle\psi|$, при действии бра на кет получается скалярное произведение, которое можно записать следующим образом: $\langle\psi|\psi\rangle \in \mathbb{C}$.

Теперь у нас есть вся информация, необходимая для формулировки первого постулата квантовой механики: *Состояние изолированной физической системы в фиксированный момент времени задается вектором состояния (кет вектором) $|\psi\rangle$, который принадлежит Гильбертовому пространству \mathcal{H} , называемому пространством состояний.*

Рассмотрим конкретные векторы состояний квантового объекта, чтобы стало чуть понятнее. Возьмём самый очевидный квантовый объект – фотон (частица света). У фотона несколько характеристик, а значит, мы можем по-разному задать базис для векторов его состояний. Очень иллюстративный пример – рассмотреть поляризацию. Напомню, что вектор поляризации указывает, куда направлен вектор E при распространении света. Обозначим вертикальную поляризацию через $|V\rangle$. Тогда ортогональной к вертикальной будет, очевидно, горизонтальная $|H\rangle$. Так как они ортогональные, можно с уверенностью написать $\langle H|V\rangle = 0$. Однако это не единственный вариант, так как мы могли задать базис через диагональную $|D\rangle$ и антидиагональную $|A\rangle$ поляризацию. В следующем параграфе мы посмотрим, как сделать переход от одного состояния к другому.

Операторы. Второй постулат квантовой механики

Отлично, состояния ввели, но что делать с их динамикой? И, тем более, каким образом мы хотим измерять состояние в мире действительных чисел, когда состояние объекта описывается комплексным вектором? Для этого мы воспользуемся понятием линейного оператора. Напомню, что линейный оператор отображает линейное пространство в себя и удовлетворяет аксиомам линейности. Давайте рассмотрим подробнее использование операторов для изменения состояния и измерения.

В линейной алгебре для перехода от одного состояния к другому используются линейные операторы. Вы наверняка заметили, что квантовая механика с линейной алгеброй имеет очень прочную связь. Таким образом, переход от одного состояния к другому будет осуществляться через действие на это состояние неким линейным оператором. Формальная запись этого действия следующая: $\hat{A}|\psi\rangle = |\psi'\rangle$, где \hat{A} – линейный оператор. Для дальнейшей работы нам понадобятся несколько свойств операторов, а именно:

- Эрмитово сопряженным оператором \hat{A}^\dagger называется оператор, для которого выполняется условие $(Ax, y) = (x, A^\dagger y)$. Оператор называется эрмитовым, если $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$.
- Оператор называется унитарным, если выполняется условие $\hat{A}^\dagger = \hat{A}^{-1}$.

- Операторы, как и матрицы, необязательно коммутируют: $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$. Свойство коммутации операторов играет большую роль в квантовой механике, и мы обязательно рассмотрим его подробнее.

Операторы всегда действует направо, т.е. запись $\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle$ подразумевает действие на кет вектор $|\psi\rangle$. Чтобы оператор подействовал на бра, нужно воспользоваться эрмитовым сопряжением $(\hat{A}|\psi\rangle)^\dagger = \langle\psi|\hat{A}^\dagger$. Тут важно отметить, что мы пользуемся тем фактом, что бра лежит в дуальном векторном пространстве и получается путём применения на кет эрмитового сопряжения.

Теперь обсудим измерения с использованием операторов. Для этого вспомним, что такое собственные векторы и собственные значения. Собственный вектор $|a\rangle$ и собственное значение a оператора \hat{A} удовлетворяют следующему условию: $\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$. Если оператор эрмитов, его собственные значения действительные, а собственные векторы можно привести к ортонормированному виду. Доказательство этого утверждения можно легко найти в соответствующей литературе. Сопоставим любому физическому измерению *наблюдаемый оператор* или просто наблюдаемую $\hat{A} = \sum_i a_i |a_i\rangle \langle a_i|$, где $|a_i\rangle$ – базис возможных состояний системы, а коэффициент a_i – собственные значения оператора. Такое представление оператора называется *спектральным разложением*. Произведение вида $|\psi\rangle \langle\varphi|$ называется внешним произведением. Внешнее произведение можно представлять себе следующим образом: если векторы $|\psi\rangle$ и $|\varphi\rangle$ имеют одинаковую размерность, то $|\psi\rangle \langle\varphi|$ – это матрица, образованная обычным матричным умножением столбца на строку (именно в таком порядке). Оказывается, что эрмитовые операторы всегда можно представить в таком виде.

Самое время сформулировать первую часть второго постулата квантовой механики: *Каждая измеряемая физическая величина A описывается эрмитовым оператором \hat{A} , действующим в пространстве состояний \mathcal{H} . Этот оператор называется наблюдаемым. Результат измерения физической величины A должен быть одним из собственных значений соответствующей наблюдаемой величины A .*

До этого мы говорили преимущественно о математике и почти не затрагивали физическую сторону вопроса. Теперь, когда мы говорим об измерениях, обойти физику никак не получится. Ведь именно здесь мы первый раз встречаемся с принципиальным отличием классического представления от квантового. При взаимодействии с квантовыми объектами мы возмущаем их состояние. Значит при измерении они потеряют то состояние, в котором находились, и перейдут в новое. Как теоретически описать такие измерения?

Давайте вернёмся примеру с поляризованным фотоном. Пусть мы не знаем его поляризацию изначально, т.е. его состояние $|\psi\rangle$. Если на пути фотона мы поставим beam splitter, который будет отражать вертикальную поляризацию и пропускать горизонтальную, то мы ожидаем, что фотон либо пройдёт, либо отразится. Однако на деле оказывается, что фотон имеет свойства волны (тот самый корпускулярно-волновой дуализм) и при прохождении через beam splitter фотон будет находиться на обоих путях одновременно. Затем, если мы поставим детектор на обоих путях, то мы будем с равной вероятностью детектировать фотоны с вертикальной и горизонтальной поляризацией.

Раз у нас появилось слово вероятность, давайте определим, каким образом мы будем её вычислять. Чтобы посчитать вероятность, будем проецировать вектор состояния на одно из возможных состояний объекта. Так, например, если фотон был в состоянии $|\psi\rangle$, то вероятность найти его в состоянии с горизонтальной поляризацией будет $|\langle H|\psi\rangle|^2$. Модуль в квадрате мы берём, так как величина в общем случае комплексная, а нам важно получить действительное значение. Тогда, если состояние после прохождения beam splitter было диагональным, т.е. $|D\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle + |V\rangle)$, то вероятность найти фотон в горизонтальном состоянии будет

$$P(H) = |\langle H|D\rangle|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}}(\langle H|H\rangle + \langle H|V\rangle) \right|^2 = \frac{1}{2}(1 + 0) = \frac{1}{2}.$$

Как и ожидалось, вероятность получить горизонтальную поляризацию составляет 50%.

Вернёмся к математике и сформулируем вторую часть второго постулата: *Когда физическая величина A измеряется для нормированного состояния $|\psi\rangle$, вероятность получения собственного значения a_i задается квадратом амплитуды проекции на соответствующий собственный вектор (правило Борна)*

$$P(a_i) = |\langle a_i | \psi \rangle|^2.$$

Также нам понадобится среднее значение какой-то наблюдаемой. Напомню, что в общем случае среднее значение есть сумма произведения вероятностей на значение величины. Тогда среднее значение наблюдаемой будет равно

$$\langle A \rangle = \sum_i a_i |\langle a_i | \psi \rangle|^2 = \sum_i a_i \langle \psi | a_i \rangle \langle a_i | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$$

Волновая функция

Все выводы в предыдущем параграфе были сделаны из предположения, что наша система дискретная. Давайте обобщим результат на непрерывный случай. Это важно, так как большинство физических величин непрерывные (например, координата или импульс). Для описания базисных состояний будем использовать дельта-функцию (или функцию Дирака). Тогда скалярное произведение запишется как $\langle x' | x \rangle = \delta(x - x')$. Напомню основные свойства дельта-функции:

1. $\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1$
2. $\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta(x - a) dx = f(a)$
3. $\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(\alpha x) dx = \frac{1}{|\alpha|}$

В случае непрерывного спектра удобнее работать с *волновой функцией*. Вообще, если следовать классическому курсу Физтеха или книге Ландау-Лифшица, то описание квантовой механики начинается именно с волновой функции. Я не считаю это целесообразным, так как волновая функция на данном этапе развития квантовой механики является скорее объектом, полученным из постулата о состояниях в Гильбертовом пространстве, а не постулатом сама по себе. Заканчивая лирику, напомним определение волновой функции:

$$\psi(\alpha) = \langle \alpha | \psi \rangle.$$

Волновая функция координаты будет выглядеть как $\psi(x) = \langle x | \psi \rangle$, где $|x\rangle$ – собственные векторы для оператора координаты. Тогда состояние квантового объекта можно описать следующим образом:

$$|\psi\rangle = \int |x\rangle \psi(x) dx$$

Из определения несложно заметить, что квадрат модуля волновой функции есть вероятность найти частицу в определенном состоянии непрерывного спектра. Напомню, что скалярное произведение на непрерывном спектре задаётся следующим образом:

$$(\varphi, \psi) = \int \varphi^*(x) \psi(x) dx$$

Мы сформулировали два постулата квантовой механики и построили формальную нотацию для теоретического описания. Давайте попробуем применить наши знания для решения первых упражнений.

Упражнение №1

Найдите операторы, эрмитово сопряженные и обратные по отношению к операторам:
а) инверсии \hat{I} и б) трансляции \hat{T}_a

Для начала определим, что значат эти операторы. В целом, их действие понятно из названия: оператор инверсии меняет знак аргумента, а трансляция перемещает его. Я думаю, с обратными уже становится понятно, но давайте пойдём по порядку. Сначала найдём сопряженные и обратные для инверсии, потом для трансляции.

1. $\hat{I}\psi(x) = \psi(-x)$. Основной способ найти эрмитово сопряженный оператор – это проверить скалярное произведение. Давайте это и сделаем:

$$\begin{aligned} (\varphi, \hat{I}\psi) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x)\psi(-x)dx = - \int_{+\infty}^{-\infty} \varphi(-x)\psi(x)dx = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(-x)\psi(x)dx = (\hat{I}\varphi(x), \psi(x)) \implies \hat{I}^\dagger = \hat{I} \end{aligned}$$

Первое действие – меняем x на $-x$. Далее меняем пределы интегрирования, чтобы избавиться от минуса. Возвращаемся к скалярному произведению и видим, что оно равно эрмитово сопряженному, а значит, оператор инверсии эрмитов.

2. Давайте посмотрим, что будет, если дважды применить оператор инверсии к волновой функции:

$$\hat{I}^2\psi(x) = \psi(x) \implies \hat{I}^2 = \hat{1} \implies \hat{I} = \hat{I}^{-1}$$

Получается оператор инверсии равен эрмитово сопряженному и обратному. Значит, он не только эрмитов, но ещё и унитарен.

3. $\hat{T}_a\psi(x) = \psi(x+a)$. Решение аналогичное:

$$(\phi, \hat{T}_a\psi) = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(x)\psi(x+a)dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(x-a)\psi(x)dx = (\hat{T}_{-a}\phi, \psi) \implies \hat{T}_a^\dagger = \hat{T}_{-a}$$

Заметим, что в этот раз оператор оказался не эрмитов, а значит, мы не можем использовать его для описания какой-то физической величины.

4. Тем же самым способом находим:

$$\hat{T}_a\hat{T}_{-a}\psi(x) = \psi(x) \implies \hat{T}_a^{-1} = \hat{T}_{-a}$$

Получается, что оператор трансляции унитарный, но не эрмитовый.



Упражнение №2

Найдите собственные значения и собственные состояния оператора инверсии \hat{I}

Напомним, что собственные значения λ и собственные функции φ определяются как $\hat{I}\varphi = \lambda\varphi$. Домножим левую часть на \hat{I} и получим

$$\begin{cases} \hat{I}^2\varphi = \hat{I}(\lambda\varphi) = \lambda^2\varphi \\ \hat{I}^2\varphi = \varphi \end{cases} \implies \lambda^2 = 1 \implies \lambda = \pm 1$$

Таким образом, собственные значения λ равны ± 1 . Теперь найдём общий вид собственных функций из следующих рассуждений:

$$\lambda = 1 : \hat{I}\varphi(r) = \varphi(-r) = \varphi(r) \implies \varphi(r) - \text{чётная}$$

$$\lambda = -1 : \hat{I}\varphi(r) = \varphi(-r) = -\varphi(r) \implies \varphi(r) - \text{нечётная}$$

То есть, в зависимости от собственного значения, собственные функции либо чётные, либо нечётные.

Упражнение №3

Найдите собственные значения и собственные состояния оператора трансляции \hat{T}_a

Для решения этой задачи сделаем несколько предположений. Рассмотрим действие двух операторов трансляции на волновую функцию:

$$\hat{T}_a\hat{T}_b\psi(x) = \psi(x+a+b) = \hat{T}_{a+b}\psi(x)$$

Тогда, рассматривая уравнение $\hat{T}_a\varphi(r) = \lambda(a)\varphi(r)$, можно заметить, что

$$\hat{T}_a\hat{T}_b\varphi(x) = \lambda(a)\lambda(b)\varphi(x) = \lambda(a+b)\varphi(x).$$

Значит, нужно подобрать такое значение $\lambda(a)$, чтобы оно удовлетворяло следующему условию: $\lambda(a)\lambda(b) = \lambda(a+b)$. При этом $\lambda(a)$ должно быть комплексным, так как оператор трансляции унитарен, но не эрмитов. Представим $\lambda(a)$ в виде $\lambda(a) = e^{sa}$, где $s \in \mathbb{C}$. Так как квадрат волновой функции есть вероятность найти частицу в определенном месте пространства, должно выполняться условие нормировки, а именно $\int |\varphi(x)|^2 dx = 1$. Но тогда

$$\int |\hat{T}_a\varphi(x)|^2 dx = |\lambda(a)|^2 \int |\varphi(x)|^2 dx = 1 \implies |\lambda(a)|^2 = 1.$$

Этому условию удовлетворяет $s = ik$, где k – действительное число. Тогда уравнение на собственные значения будет выглядеть так:

$$\hat{T}_a\varphi(x) = e^{ika}\varphi(x).$$

Осталось подобрать волновую функцию. Понятно, что функция должна быть периодична с периодом a . Тогда остаётся только подобрать множитель так, чтобы при действии оператора трансляции он оставался таким же, но ещё домножался на $\lambda(a) = e^{ika}$. Учитывая эти предпосылки, выберем волновую функцию в виде $\varphi_k(x) = e^{ikx}u_k(x)$, где $u_k(x+a) = u_k(x)$. Подействуем оператором трансляции на эту волновую функцию и проверим, что мы сделали правильное предположение:

$$\hat{T}_a\varphi_k(x) = e^{ik(x+a)}u_k(x+a) = e^{ika}e^{ikx}u_k(x) = \lambda(a)\varphi_k(x)$$

Всё сошлось!

Упражнение №4

Найти явный вид оператора $e^{i\varphi\hat{I}}$.

Такой оператор называется функцией оператора. Функции оператора оказываются полезными для описания динамики системы. Поговорим об этом подробнее, когда дойдём до уравнения Шрёдингера. Пока вспомним, что, когда мы видим матричную экспоненту, первое, что мы хотим сделать – разложить в ряд Тейлора. Проверим, что получится:

$$\begin{aligned} e^{i\varphi\hat{I}} &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(i\varphi\hat{I})^k}{k!} = \sum_{s=0}^{\infty} \left(\frac{(i\varphi)^{2s}}{2s!} \right) \hat{1} + \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(i\varphi\hat{I})^{2s+1}}{(2s+1)!} = \\ &= \hat{1} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s \varphi^{2s}}{2s!} + i\hat{I} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s \varphi^{2s+1}}{(2s+1)!} = \hat{1} \cos\varphi + i\hat{I} \sin\varphi. \end{aligned}$$

Оператор $\hat{1}$ называется единичным оператором (вообще, его обозначают как \hat{I} , но в нашем случае эта буква занята). Его действие очевидно: $\hat{1}|\psi\rangle = |\psi\rangle$. В спектральном разложении он будет выглядеть как $\hat{1} = \sum_n |n\rangle \langle n|$. Он оказывается очень полезным, когда нам нужно перейти от одного представления к другому. Потом обязательно вспомним про него. А пока радуемся, что решили ещё одно упражнение.

Упражнение №5

Эрмитов оператор с дискретным спектром $\hat{f}(\lambda)$ зависит от параметра λ . Собственные значения $f_n(\lambda)$ и собственные векторы $|n(\lambda)\rangle$ этого оператора также зависят от λ . Докажите теорему:

$$\frac{\partial f_n(\lambda)}{\partial \lambda} = \langle n(\lambda) | \frac{\partial \hat{f}(\lambda)}{\partial \lambda} | n(\lambda) \rangle.$$

Из условия составим уравнение на собственные значения:

$$\hat{f}(\lambda) |n(\lambda)\rangle = f_n(\lambda) |n(\lambda)\rangle$$

Продифференцируем его правую и левую часть:

$$\frac{\partial \hat{f}}{\partial \lambda} |n\rangle + \hat{f} \frac{\partial}{\partial \lambda} |n\rangle = \frac{\partial f_n}{\partial \lambda} |n\rangle + f_n \frac{\partial}{\partial \lambda} |n\rangle$$

Умножим на бра вектор $\langle n|$ и преобразуем:

$$\langle n | \frac{\partial \hat{f}}{\partial \lambda} | n \rangle + \langle n | \hat{f} \frac{\partial}{\partial \lambda} | n \rangle = \frac{\partial f_n}{\partial \lambda} \langle n | n \rangle + f_n \langle n | \frac{\partial}{\partial \lambda} | n \rangle$$

Посмотрим на второе слагаемое. Вспоминая, что, по условию, оператор \hat{f} эрмитов и действуя им на бра вектор $\langle n|$, получим 4 слагаемое:

$$\langle n | \hat{f} \frac{\partial}{\partial \lambda} | n \rangle = f_n \langle n | \frac{\partial}{\partial \lambda} | n \rangle$$

Сокращая их, получим уравнение из условия.

На следующем семинаре поговорим о важном свойстве операторов – их коммутации. Также обсудим два очень важных оператора: оператор импульса и оператор координаты.

Семинар II

Коммутатор. Соотношение неопределенностей

На прошлом семинаре мы обсуждали возможность измерения наблюдаемых, используя собственные значения и собственные функции. Это связано с тем, что наблюдаемое имеет нулевую неопределенность:

$$\sqrt{\langle \Delta A^2 \rangle} = \sqrt{\langle \psi | \hat{A}^2 | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle^2} = 0$$

Вы наверняка помните из курса общей физики про принцип неопределенности Гейзенберга, согласно которому две физические величины могут находиться в таком соотношении, что измерить их одновременно точно невозможно. Так вот оказывается, что, зная операторы этих величин, можно определить, будут они совместны для системы или нет. И для этого нам понадобится новый оператор – коммутатор. Он записывается в виде квадратной скобки, внутри которой находятся два оператора, и показывает степень коммутации между этими операторами:

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

Из выражения очевидно, что, если операторы коммутируют, то коммутатор равен нулю. Иначе он будет равен какому-то другому оператору. Решим небольшое упражнение на коммутаторы.

Упражнение №6

Убедитесь в справедливости следующих соотношений:

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}, \quad [\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C}.$$

Задача просто на определение коммутатора. Раскроем левую и правую часть:

$$\hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}\hat{B} = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{A}\hat{C}\hat{B} + \hat{A}\hat{C}\hat{B} - \hat{C}\hat{A}\hat{B} = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}\hat{B}$$

Второе по аналогии.

Важная теорема: Пусть \hat{A} и \hat{B} – два эрмитовых оператора. Тогда существует базис, в котором они одновременно диагонализуются (у них есть общая система собственных векторов состояний), тогда и только тогда, когда $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$. Идея доказательства следующая:

1. Если одни одновременно приводимы к диагональному виду, то достаточно записать их в виде спектрального разложения по общим базисным векторам $\hat{A} = \sum_i A_i |v_i\rangle \langle v_i|$, $\hat{B} = \sum_i B_i |v_i\rangle \langle v_i|$ и рассмотреть их произведение.
2. Если же они коммутируют, то можно показать, что действие одного из операторов на собственный вектор второго само по себе является собственным состоянием: $\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle \implies \hat{B}\hat{A}|a_i\rangle = a_i\hat{B}|a_i\rangle \implies \hat{A}(\hat{B}|a_i\rangle) = a_i(\hat{B}|a_i\rangle)$. Далее через пропорциональность $\hat{B}|a_i\rangle$ и $|a_i\rangle$ показываем, что вектор $|a_i\rangle$ собственный и для \hat{B} .

Из этого следует, что, если операторы коммутируют, то их можно одновременно точно измерить. Если же нет, то точность измерения будет определяться принципом неопределённости Гейзенберга:

$$\langle \Delta \hat{A}^2 \rangle \langle \Delta \hat{B}^2 \rangle \geq \frac{1}{4} |[\hat{A}, \hat{B}]|^2$$

Доказательство общей теоремы я здесь приводить не буду, лишь оставлю два неравенства, которые проще вывести самому. Итоговое неравенство получается из них напрямую:

$$\begin{aligned} |[\hat{A}, \hat{B}]|^2 &\leq 4|\langle \hat{A}\hat{B} \rangle|^2 \\ \langle \hat{A}^2 \rangle \langle \hat{B}^2 \rangle &\geq |\langle \hat{A}\hat{B} \rangle|^2 \end{aligned}$$

Выполним упражнение на неопределенность.

Упражнение №7

Пусть $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$. A, B, C – эрмитовые операторы. Покажите, что в этом случае они удовлетворяют соотношению неопределенности

$$\langle \Delta \hat{A}^2 \rangle \langle \Delta \hat{B}^2 \rangle \geq \frac{1}{4} \langle \hat{C}^2 \rangle, \text{ где } \Delta \hat{A} = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle.$$

Для начала разберёмся с дисперсией. Посмотрим на коммутатор дисперсий операторов:

$$\begin{aligned} [\Delta \hat{A}, \Delta \hat{B}] &= (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) - (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) = \\ &= \hat{A}\hat{B} - \hat{A}\langle \hat{B} \rangle - \langle \hat{A} \rangle \hat{B} + \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle - \hat{B}\hat{A} + \hat{B}\langle \hat{A} \rangle + \\ &+ \langle \hat{B} \rangle \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = [\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}. \end{aligned}$$

Мы сократили все члены со средними значениями, так как среднее значение – это просто число и оно всегда коммутирует с операторами.

Введём вектор состояния $|\varphi\rangle$, определённый следующим образом: $|\varphi\rangle = (\Delta \hat{A} - i\gamma \Delta \hat{B}) |\psi\rangle$, где $\gamma \in \mathbb{R}$. Так как скалярное произведение вектора на самого себя – величина неотрицательная, т.е. $\langle \varphi | \varphi \rangle \geq 0$, подставим значение векторов и перейдём к квадратному уравнению относительно γ :

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

Получилось квадратное уравнение, ветви параболы смотрят вверх. Так как нам нужны решения большие или равные нулю, подходит только дискриминант меньший или равный нулю. То есть

$$\langle \hat{C}^2 \rangle - 4\langle \Delta \hat{B}^2 \rangle \langle \Delta \hat{A}^2 \rangle \leq 0 \implies \langle \Delta \hat{A}^2 \rangle \langle \Delta \hat{B}^2 \rangle \geq \frac{1}{4} \langle \hat{C}^2 \rangle.$$



Оператор импульса и координаты

Первые две величины, которые приходят на ум после разговора о принципе неопределенностей – это координата и импульс. Чтобы ввести их операторы, сначала вспомним про переход от дискретного спектра к непрерывному.

	Дискретный базис $ a_i\rangle$	Непрерывный базис $ x\rangle$
Ортонормальность	$\langle a_i a_j \rangle = \delta_{ij}$	$\langle x x' \rangle = \delta(x - x')$
Разложение состояния	$ \psi\rangle = \sum_i \psi_i a_i\rangle$	$ \psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) x\rangle dx$ $\psi(x) = \langle x \psi \rangle$
Измерения	$P(a_i) = \langle a_i \psi \rangle ^2$ (вероятность)	$P(x) = \langle x \psi \rangle ^2$ (плотность вероятности)
Разложение оператора	$A_{ij} = \langle a_i \hat{A} a_j \rangle$ $\hat{A} = \sum_{i,j} A_{ij} a_i\rangle \langle a_j $	$A(x, x') = \langle x \hat{A} x' \rangle$ $\hat{A} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} A(x, x') x\rangle \langle x' dx dx'$
Разложение $\hat{1}$	$\hat{1} = \sum_i a_i\rangle \langle a_i $	$\hat{1} = \int_{-\infty}^{+\infty} a_i\rangle \langle a_i dx$

Теперь можно ввести два новых оператора: оператор координаты \hat{x} и оператор импульса \hat{p} . Начнём с координаты. В отличие от геометрического пространства, где координата имеет размерность один, гильбертово пространство обладает бесконечной размерностью, т.е. существует бесконечно много координатных собственных состояний $|x\rangle^*$, и все эти собственные состояния ортогональны. Самое важное, что стоит понимать про собственные состояния непрерывных наблюдаемых, это то, что они *нефизичны* – невозможно поместить частицу в абсолютно точную позицию или заставить её двигаться с абсолютно точной скоростью. Поэтому $|x\rangle$ и $|p\rangle$ представляют собой математическую абстракцию. Все физически реальные состояния есть лишь линейная комбинация этих состояний. Давайте посмотрим, как действует оператор координаты на свои собственные состояния:

$$\begin{aligned} \hat{x} |x\rangle &= \left(\int_{-\infty}^{+\infty} x' |x'\rangle \langle x'| dx' \right) |x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x' |x'\rangle \langle x'| x \rangle dx' = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} x' |x'\rangle \delta(x' - x) dx' = x |x\rangle. \end{aligned}$$

Получается, что действие оператора координаты на свои собственные состояния сводится к умножению состояния на значение координаты.

Теперь перейдём к оператору импульса и его собственным состояниям. Для этого постулируем отношение между собственными состояниями координаты и импульса:

$$\langle x | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i \frac{px}{\hbar}}$$

Эта формула утверждает, что волновая функция состояния с определенным значением импульса представляет собой бесконечную волну, известную как волна де Бройля. Эта волна – проявление корпускулярно-волнового дуализма. Из этой формулы можно вывести

*Обычно, если внутри кет состояния пишется символ, совпадающий с оператором, например $\hat{x} |x\rangle$, то таким образом указывают на то, что эти состояния собственные для оператора. То же самое и с $\hat{p} |p\rangle$.

следующую связь:

$$|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\frac{px}{\hbar}} |x\rangle dx$$

$$|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\frac{px}{\hbar}} |p\rangle dp$$

Давайте посмотрим на квадрат волновой функции де Бройля: $|\langle x|p\rangle|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar}$. Если мы возьмём интеграл от этой константы по всему пространству, то он будет бесконечен. Дело в том, что, как уже говорилось ранее, собственные состояния оператора координаты и импульса нефизичны, так как мы предполагаем, что знаем импульс точно. Реальные же состояния нормированные, и модуль квадрата будет соответствовать вероятности. Давайте разберёмся, откуда у нас появляется этот нормировочный множитель, вычислив $\langle p|p'\rangle$ через $\langle x|x'\rangle$ (далее я буду опускать пределы интеграла, кроме случаев, где они неочевидны):

$$\begin{aligned} \langle p|p'\rangle &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int \int e^{i\frac{p'x' - px}{\hbar}} \langle x|x'\rangle dx dx' = \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int \int e^{i\frac{p'x' - px}{\hbar}} \delta(x' - x) dx dx' = \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{i\frac{(p' - p)x}{\hbar}} dx = \frac{1}{2\pi\hbar} 2\pi\hbar \delta(p - p') = \delta(p - p'). \end{aligned}$$

В предпоследнем выражении мы воспользовались тем, что $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{iapx} dx = \frac{2\pi\delta(p)}{|a|}$ — это следует из Фурье разложения $f(x) = 1$ при $a = 1$ и затем обобщается на произвольную $a \neq 0$.

Сейчас, дорогие читатели, начинаем читать внимательно. На этом вопросе очень многие валятся как на сдачах, так и на экзамене. Поэтому читаем и запоминаем, как переходить от координатного представления к импульсному и обратно. Для перехода между представлениями мы будем пользоваться тем самым единичным оператором и его различными представлениями:

$$\hat{1}_x = \int |x\rangle \langle x| dx, \quad \hat{1}_p = \int |p\rangle \langle p| dp$$

Используя его, найдём явную формулу для преобразования координатного представления $\psi(x)$ в $\psi(p)$.

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \langle x|\psi\rangle = \langle x|\hat{1}_p|\psi\rangle = \langle x|\left(\int |p\rangle \langle p| dp\right)|\psi\rangle = \\ &= \int \langle x|p\rangle \langle p|\psi\rangle dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{i\frac{px}{\hbar}} \psi(p) dp. \end{aligned}$$

Обратно то же самое, только с минусом в экспоненте:

$$\psi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{-i\frac{px}{\hbar}} \psi(x) dx.$$

Часто можно услышать, что переход осуществляется за счёт Фурье преобразования. Это действительно так, когда мы работаем с волновым числом $k = p/\hbar$. Тогда $\psi(p) = \psi(k)/\sqrt{\hbar}$, и переход будет иметь вид $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{ikx} \psi(k) dk$, что соответствует Фурье преобразованию.

Легко показать, что оператор импульса действует на свои собственные состояния так же, как и оператор координаты на свои: $\hat{p} |p\rangle = p |p\rangle$. Но как действует оператор импульса в координатном представлении? Чтобы это выяснить, найдём матричный элемент оператора импульса, т.е. $\langle x | \hat{p} | x' \rangle$:

$$\langle x | \hat{p} | x' \rangle = \int p \langle x | p \rangle \langle p | x' \rangle dp = \frac{1}{2\pi\hbar} \int p e^{\frac{ip}{\hbar}(x-x')} dp.$$

Представим $p e^{\frac{ip}{\hbar}(x-x')} = -i\hbar \frac{d}{dx} e^{\frac{ip}{\hbar}(x-x')}$. Тогда

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi\hbar} \int p e^{\frac{ip}{\hbar}(x-x')} dp &= \frac{1}{2\pi\hbar} (-i\hbar) \frac{d}{dx} \int e^{\frac{ip}{\hbar}(x-x')} dp = \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} (-i\hbar) \frac{d}{dx} (2\pi\hbar) \delta(x-x') = -i\hbar \frac{d}{dx} \delta(x-x') \end{aligned}$$

Теперь получим, как действует оператор на произвольное состояние в координатном представлении:

$$\begin{aligned} \langle x | \hat{p} | \psi \rangle &= \langle x | \hat{p} \hat{1} | \psi \rangle = \int \langle x | \hat{p} | x' \rangle \langle x' | \psi \rangle dx' = \\ &= -i\hbar \int \left[\frac{d}{dx} \delta(x-x') \right] \psi(x') dx' = \\ &= -i\hbar \frac{d}{dx} \left[\int \delta(x-x') \psi(x') dx' \right] = -i\hbar \frac{d}{dx} \psi(x). \end{aligned}$$

Действие оператора импульса на волновую функцию в координатном базисе можно записать как $\hat{p}\psi(x) = -i\hbar \frac{d}{dx} \psi(x)$. Такими же рассуждениями можно получить, что $\hat{x}\psi(p) = i\hbar \frac{d}{dp} \psi(p)$. Это очень важные формулы, которые мы постоянно будем использовать в дальнейшем. Выполним несколько упражнений на закрепление материала.

Упражнение №8

Докажите следующие коммутационные соотношения:

$$\begin{aligned} [\hat{x}_\alpha, F(\hat{\mathbf{p}})] &= i\hbar \frac{\partial F(\hat{\mathbf{p}})}{\partial \hat{p}_\alpha} \\ [\hat{p}_\alpha, G(\hat{\mathbf{r}})] &= -i\hbar \frac{\partial G(\hat{\mathbf{r}})}{\partial \hat{x}_\alpha} \end{aligned}$$

Начнём со второго. Мы знаем, как оператор импульса действует на волновую функцию в координатном базисе: $\hat{p}_\alpha \psi(\mathbf{r}) = -i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r})}{\partial x_\alpha}$. Остается только вспомнить, что коммутатор сам по себе тоже является оператором, и применить его к волновой функции в координатном базисе:

$$[\hat{p}_\alpha, G(\hat{\mathbf{r}})] f(\mathbf{r}) = -\left(i\hbar \frac{\partial G(\hat{\mathbf{r}})}{\partial x_\alpha} f(\mathbf{r}) + i\hbar G(\hat{\mathbf{r}}) \frac{\partial f(\mathbf{r})}{\partial x_\alpha} \right) + i\hbar G(\hat{\mathbf{r}}) \frac{\partial f(\mathbf{r})}{\partial x_\alpha} = -i\hbar \frac{\partial G(\hat{\mathbf{r}})}{\partial x_\alpha} f(\mathbf{r})$$

Второе делается аналогично, только вместо действия оператора импульса на волновую функцию в координатном представлении, мы действуем оператором координаты на волновую функцию в импульсном представлении.



Упражнение №9

Используя “табличный” коммутатор операторов импульса и координаты и результаты упражнений 6 и 8, раскройте следующие коммутаторы:

$$[\hat{x}_\alpha, \hat{\mathbf{p}}^2], [U(\mathbf{r}), \hat{\mathbf{p}}], [U(r), \hat{\mathbf{p}}^2].$$

Сначала покажем, чему равен коммутатор $[\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\beta]$:

$$\begin{aligned} [\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\beta]\psi(x) &= \hat{x}_\alpha \hat{p}_\beta \psi(x) - \hat{p}_\beta \hat{x}_\alpha \psi(x) = \\ &= -x_\alpha i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\beta} \psi(x) + i\hbar \frac{\partial x_\alpha}{\partial x_\beta} \psi(x) + i\hbar x_\alpha \frac{\partial}{\partial x_\beta} \psi(x) = i\hbar \delta_{\alpha\beta} \psi(x). \end{aligned}$$

Получается, $[\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\beta] = i\hbar \delta_{\alpha\beta}$. Идём дальше, пользуясь результатом, полученном в упражнении 6:

$$\begin{aligned} [\hat{x}_\alpha, \hat{\mathbf{p}}^2] &= \hat{p}_\beta [\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\beta] + [\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\beta] \hat{p}_\beta = \\ &= 2i\hbar \delta_{\alpha\beta} \hat{p}_\beta = 2i\hbar \hat{p}_\alpha. \end{aligned}$$

Следующее ещё проще. Мы знаем выражение для $[\hat{p}, U(\hat{r})]$, здесь нужно найти обратный коммутатор. А он равен "прямому" с другим знаком, то есть

$$[U(\mathbf{r}), \hat{p}_\alpha] = -[\hat{p}_\alpha, U(\mathbf{r})] = i\hbar \nabla U(\mathbf{r})$$

В последнем придётся немного посчитать, но я не думаю, что вас это волнует, считать же мне придётся...

$$\begin{aligned} [U(r), \hat{\mathbf{p}}^2] &= \hat{\mathbf{p}}[U(r), \hat{\mathbf{p}}] + [U(r), \hat{\mathbf{p}}]\hat{\mathbf{p}} = \hat{\mathbf{p}} i\hbar U'(r) \frac{\mathbf{r}}{r} + i\hbar U'(r) \frac{\mathbf{r}}{r} \hat{\mathbf{p}} = \\ &= \hbar^2 (U''(r) \frac{\mathbf{r}^2}{r^2} + U'(r) \frac{\nabla \mathbf{r}}{r} + U'(r) \mathbf{r} (-\frac{1}{r^2}) \frac{\mathbf{r}}{r} + 2U'(r) \frac{\mathbf{r}}{r} \frac{d}{d\mathbf{r}}) = \\ &= \hbar^2 (U''(r) + U'(r) \frac{2}{r} + 2U'(r) \frac{\mathbf{r}}{r} \frac{d}{d\mathbf{r}}) \end{aligned}$$



Упражнение №10

Используя свойства оператора трансляции и результаты упражнений 8 и 9, преобразуйте операторное выражение:

$$e^{\frac{i}{\hbar} a \hat{\mathbf{p}}} U(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} a \hat{\mathbf{p}}}.$$

Поработаем немного с оператором трансляции. Мы уже знаем, что, действуя на функцию, оператор трансляции смещает её на значение a . Давайте попробуем найти связь между \hat{T}_a и \hat{p} . Для этого разложим функцию, на которую подействовал оператор трансляции, в ряд Тейлора:

$$\hat{T}_a f(x) = f(x + a) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{a^k f^{(k)}(x)}{k!} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{a^k (\frac{\partial}{\partial x})^k f(x)}{k!} = e^{a \frac{\partial}{\partial x}} f(x)$$

Вспомним, что оператор импульса в координатном представлении действует как производная. Тогда, можно записать:

$$\hat{T}_a = e^{a\nabla} = e^{\frac{i}{\hbar}a\hat{p}}$$

Возвращаясь к условию упражнения, мы видим, что это равносильно действию оператора трансляции с двух сторон (и с разными знаками a !)

$$e^{\frac{i}{\hbar}a\hat{p}}U(\mathbf{r})e^{-\frac{i}{\hbar}a\hat{p}}f(\mathbf{r}) = \hat{T}_a U(\mathbf{r})\hat{T}_{-a}f(\mathbf{r}) = \hat{T}_a U(\mathbf{r})f(\mathbf{r} - \mathbf{a}) = U(\mathbf{r} + \mathbf{a})f(\mathbf{r})$$



Упражнение №11

Постройте оператор, соответствующий физической величине $\varphi = (\mathbf{r}\mathbf{p})$, где \mathbf{r} и \mathbf{p} – соответственно радиус-вектор и импульс частицы.

Оператор физической величины *всегда* эрмитов. Оператор $\hat{r}\hat{p}$ не эрмитов, так как при эрмитовом сопряжении порядок операторов меняется, а они не коммутируют. Значит, нужно составить из них такую комбинацию, чтобы при эрмитовом сопряжении оператор $\hat{\varphi}$ не менялся даже с учетом изменения порядка $\hat{p}\hat{r}$. На ум приходит такая комбинация:

$$\hat{\varphi} = \frac{1}{2}(\hat{r}\hat{p} + \hat{p}\hat{r})$$



На следующем семинаре поговорим про основное уравнение динамики квантовой системы – уравнение Шрёдингера.

Семинар III

Эволюция квантовых систем. Уравнение Шрёдингера

Перед тем, как начать обсуждать динамику квантовых систем, важно обговорить одно исключение: время в квантовой механике не рассматривается как оператор. Не существует ни собственных состояний времени ни квантового времени. Время – просто непрерывная переменная.

Теперь перейдём к эволюции квантовых объектов. Поставим задачу: при заданном начальном состоянии $|\psi(0)\rangle$ системы нужно определить её состояние $|\psi(t)\rangle$ в произвольный момент времени. Решение этой задачи не получится вывести из аппарата, который у нас есть на данном этапе, поэтому постулируем, что эволюция системы будет описываться следующим уравнением:

$$|\psi_E(t)\rangle = |\psi(0)\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}Et}.$$

Это уравнение имеет место, когда система находится в состоянии с определенной энергией.

В классической механике для описания динамики системы достаточно было знать *гамильтониан* системы. В квантовой механике всё работает примерно так же, только гамильтониан надевает шляпку и становится оператором \hat{H} . Как и у любого оператора, у гамильтониана есть свои собственные состояния и собственные значения. Логично предположить, что эти значения и состояния будут соответствовать определенным значениям энергии:

$$\hat{H} = \sum_j E_j |E_j\rangle \langle E_j|.$$

Тогда, любое состояние может быть разложено в этом базисе:

$$|\psi(0)\rangle = \sum_j \psi_j |E_j\rangle.$$

Собственные энергетические состояния называют *стационарными*. Исходя из введённого выше постулата, эволюция системы будет описываться уравнением:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_j \psi_j |E_j\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_j t}.$$

С помощью этого уравнения можно вычислять эволюции состояния, однако на практике мы чаще будем пользоваться двумя другими уравнениями, о которых сейчас поговорим.

Мы уже привыкли пользоваться операторами для изменения состояния системы. Давайте и здесь введём унитарный оператор для описания эволюции системы. Унитарность здесь важна, в том числе для того, чтобы все преобразования были обратимы относительно эрмитового сопряжения. Такой оператор мы назовём *оператором эволюции* \hat{U} . Он будет удовлетворять уравнению:

$$|\psi_E(t)\rangle = \hat{U} |\psi(0)\rangle$$

В явном виде матричный элемент оператора эволюции выглядит как:

$$U_{jk} = \langle E_j | \hat{U} | E_k \rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t} \langle E_j | E_k \rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t} \delta_{jk}.$$

Или, если записать это в бракет нотации:

$$\hat{U} = \sum_k e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t} |E_k\rangle \langle E_k|.$$

Чтобы получить итоговый вид оператора эволюции, перепишем его через оператор гамильтониана:

$$\hat{U} = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}$$

Чтобы получить последнее, самое важное уравнение, продифференцируем состояние, полученное применением оператора эволюции на начальное состояние:

$$\frac{d}{dt} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} |\psi(0)\rangle = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} |\psi(0)\rangle = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} |\psi(t)\rangle.$$

Если оставить справа только оператор гамильтониана, то мы получим *уравнение Шрёдингера*:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle.$$

В общем случае гамильтониан также может зависеть от времени, но этот случай мы рассмотрим позднее. Пока наша задача в том, чтобы найти множество собственных значений и состояний гамильтониана. Т.е. нужно найти состояния $|\psi\rangle$, такие что:

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle.$$

Это уравнение называется *стационарным уравнением Шрёдингера*. Так, для гамильтониана частицы в поле $\hat{H} = V(\hat{x}) + \hat{p}^2/2M$, где первый член – это потенциальная энергия, а второй – кинетическая, стационарное уравнение Шрёдингера, будет выглядеть следующим образом:

$$\left[V(x) - \frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} \right] \psi(x) = E \psi(x).$$

Здесь мы перешли от вектора состояния к волновой функции, домножив слева на бра состояние $\langle x|$.

Можно сказать, что теорминимум был нами освоен и можно приступать к решению первых содержательных задач. В целом, решение большинства задач в курсе по квантовой механике сводится к решению либо стационарного либо зависящего от времени уравнения Шрёдингера. Поэтому запоминаем его, записываем на обложках тетрадей, делаем татуировки и т.п. Чтобы помочь вам запомнить, решим несколько задач на потенциальные ямы. Этот тип задач основан на том, что мы решаем стационарное уравнение Шрёдингера, но с разным потенциалом. В общем, хватит слов, переходим к задаче.

Упражнение №12

Частица массы m совершает финитное движение в одномерной “прямоугольной” потенциальной яме конечной глубины:

$$U(x) = \begin{cases} -U_0, & |x| < a, \\ 0, & |x| > a. \end{cases}$$

Найдите уровни энергии E_n и волновые функции $\psi_n(x)$ стационарных состояний

Для начала разберёмся с условием. *Связанные состояния* – состояния, для которых волновая функция при $x \rightarrow \pm\infty$ равна 0. Получается, состояние как бы локализовано в определенном объёме пространства. Из-за наложенных ограничений связанные состояния имеют *дискретный спектр* собственных значений энергии, которые называют энергетическими уровнями.

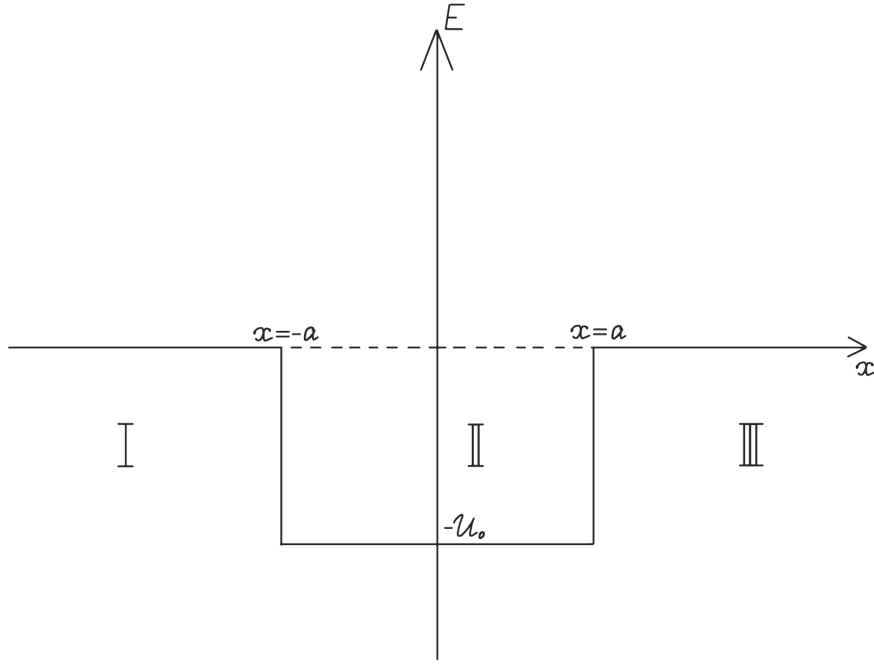


Рис. 1: Прямоугольная и симметричная потенциальная яма

На рисунке 1 можно посмотреть, как выглядит яма из задачи. Думаю, уже сейчас понятно, насколько это модельная задача. Но для понимания поведения частиц, хорошо описываемых уравнением Шрёдингера, она незаменима.

Выпишем одномерное стационарное уравнение Шрёдингера:

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

Перепишем его так, чтобы в правой части остался только 0:

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

Теперь давайте по отдельности рассмотрим каждую из трёх областей. В первой области (т.е. в области $x < -a$) потенциальная энергия нулевая. Так как мы рассматриваем случай финитного движения, частица не может оказаться над потенциальной энергией в непрерывном спектре. Значит, энергия частицы меньше нуля. В классическом случае мы бы с уверенностью сказали, что в этой области частица присутствовать не может. Но в квантовой механике не всё так гладко. Давайте решим стационарное уравнение Шрёдингера для этого случая:

$$\psi_I'' - \kappa^2\psi_I = 0, \quad \kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2}|E|$$

κ – величина действительная, так как связана с энергией. Значит, корень нужно брать из положительного числа. Поэтому энергию мы берём по модулю. Это гармоническое уравнение, только с минусом. Решение такого уравнения известно и выражается в виде суммы двух экспонент с разными знаками:

$$\psi_I(x) = Ae^{\kappa x} + \tilde{A}e^{-\kappa x}$$

Оказывается, что второй член из этого уравнения выпадает. Это связано с условием нормировки – волновая функция при $x \rightarrow -\infty$ не должна уходить в бесконечность. Тогда

мы видим, что волновая функция для первой области имеет следующий вид:

$$\psi_I(x) = Ae^{\kappa x},$$

Получается, функция затухает экспоненциально и на минус бесконечности уходит в ноль.

Думаю, понятно, что для третьей области решение будет аналогично. Для тренировки можете проделать все выкладки самостоятельно, я же выпишу только ответ:

$$\psi_{III}(x) = De^{-\kappa x}$$

Теперь выпишем уравнение для второй области:

$$\psi''_{II} + k^2 \psi_{II} = 0, \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - |E|)$$

Соответственно, решение для него:

$$\psi_{II}(x) = B \cos kx + C \sin kx$$

Для дальнейших рассуждений нам понадобится важный теоретический факт о том, что, если операторы коммутируют, то у них существует общий базис собственных функций. Далее, исходя из симметрии задачи ($U(x) = U(-x)$), понимаем, что оператор инверсии может коммутировать с гамильтонианом. Проверим:

$$[\hat{H}, \hat{I}] = [U(x) + \frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{I}] = [U(x), \hat{I}] + \frac{1}{2m}[\hat{p}^2, \hat{I}] = 0$$

Значит, можно искать собственные функции гамильтониана как собственные функции оператора инверсии. Но мы знаем, что для оператора инверсии собственные функции обладают определенной чётностью. Тогда найдём чётные и нечётные волновые функции нашей задачи:

$$\psi_+ = \begin{cases} Ae^{\kappa x} & x < -a, \\ B \cos kx & -a < x < a, \\ Ae^{-\kappa x} & x > a \end{cases}, \quad \psi_- = \begin{cases} -De^{\kappa x} & x < -a, \\ C \sin kx & -a < x < a, \\ De^{-\kappa x} & x > a \end{cases}$$

Думаю, понятно, откуда взялись функции с синусом и косинусом. Чуть меньше ясности может быть с оставшимися функциями. Они связаны с самим определением четной функции: $Ae^{\kappa x}$ получаем из решения уравнения Шрёдингера, нужно составить такую функцию, которая при изменении знака x не будет менять знак выражения. Получается $Ae^{-\kappa x}$. То же самое для второго: $De^{-\kappa x}$ есть, $-De^{\kappa x}$ дополняем для нечетности функции.

Рассмотрим условия на волновую функцию. Пока что она не определена на границах. То есть нужно ввести условия “сшивки”. Их берем из физического смысла волновой функции, а именно:

$$\psi(x) - \text{непрерывна}, \quad \frac{\psi'(x)}{\psi(x)} - \text{непрерывна}$$

Из этих условий “сошьём” границы для чётных и нечётных функций отдельно. Так как потенциал симметричен, достаточно рассмотреть только одну границу.

$$\begin{aligned} \frac{\psi'_+(x)}{\psi_+(x)} \Big|_{x=a-0} &= \frac{\psi'_+(x)}{\psi_+(x)} \Big|_{x=a+0} = \frac{-Bk \sin ka}{B \cos ka} = \frac{-\kappa A e^{-\kappa a}}{A e^{-\kappa a}} \implies \\ &\implies k \operatorname{tg} ka = \kappa \end{aligned}$$

Для нечётных:

$$\begin{aligned} \frac{\psi'_-(x)}{\psi_-(x)} \Big|_{x=a-0} &= \frac{\psi'_-(x)}{\psi_-(x)} \Big|_{x=a+0} = \frac{Ck \cos ka}{C \sin ka} = \frac{-\kappa D e^{-\kappa a}}{D e^{-\kappa a}} \Rightarrow \\ &\Rightarrow k \operatorname{ctg} ka = -\kappa \end{aligned}$$

Ещё немного повертим выражение и придём к итоговому, красивому виду:

$$\begin{aligned} \text{Пусть } (\kappa a)^2 &= (k_0 a)^2 - (ka)^2, \text{ где } k_0^2 = k^2 + \kappa^2 \\ \kappa a &= \sqrt{(k_0 a)^2 - (ka)^2} \Rightarrow ka \operatorname{tg} ka = \sqrt{(k_0 a)^2 - (ka)^2} \Rightarrow \\ &\Rightarrow \operatorname{tg} ka = \sqrt{\frac{(k_0 a)^2}{(ka)^2} - 1} \end{aligned}$$

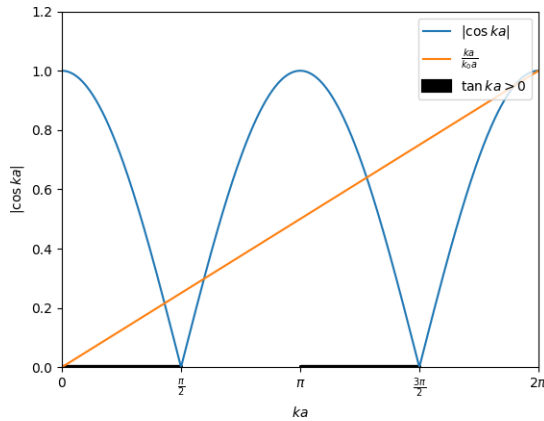
Пользуясь тригонометрией, выразим квадрат тангенса через косинус:

$$\begin{aligned} \operatorname{tg}^2 ka &= \frac{1}{\cos^2 ka} - 1 \Rightarrow \frac{1}{\cos^2 ka} - 1 = \frac{(k_0 a)^2}{(ka)^2} - 1 \Rightarrow \\ &\Rightarrow \cos^2 ka = \frac{(ka)^2}{(k_0 a)^2} \Rightarrow |\cos ka| = \frac{ka}{k_0 a}, \operatorname{tg} ka > 0 \end{aligned}$$

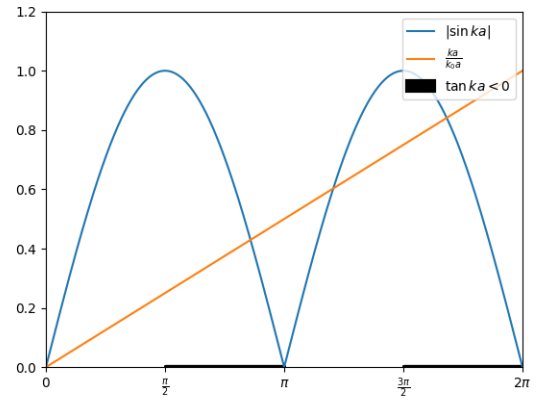
Прodelав аналогичные вычисления для нечётных функций, в итоге получаем компактное выражение:

$$\begin{cases} |\cos ka| = \frac{ka}{k_0 a}, & \operatorname{tg} ka > 0 \\ |\sin ka| = \frac{ka}{k_0 a}, & \operatorname{tg} ka < 0 \end{cases}$$

У нас получаются трансцендентные уравнения. Это значит, что просто выразить какую-либо величину из этого уравнения сложно, или даже нереально. Мы можем только проанализировать его. Например:



(а) График для чётных функций. Выделенные области удовлетворяют условию $\operatorname{tg} ka > 0$



(б) График для нечётных функций. Выделенные области удовлетворяют условию $\operatorname{tg} ka < 0$

Рис. 2

Что мы можем вынести из этих графиков? Для чётных функций видно, что решение существует при любом положительном $k_0 a$. Так как этот параметр отвечает параметрам задачи, получается, что при любой глубине ямы у нас существует хотя бы одно чётное

решение. В то же время, из графика нечётных функций достаём следующее условие существования решений: $k_0 a > \frac{\pi}{2}$. Можно легко проверить, что чётные и нечётные решения чередуются. Формулы для количества решений:

$$\left[\frac{k_0 a}{\pi} \right] + 1 = N_+, \quad \left[\frac{k_0 a}{\pi/2} \right] = N_-$$

Теперь найдём коэффициенты A и B из неиспользованного условия непрерывности:

$$\begin{aligned} \psi_+(a-0) &= \psi_+(a+0) \implies A = B e^{\kappa a} \cos ka \\ \langle \psi_+ | \psi_+ \rangle &= 1 \implies 2 * \left(\int_0^a |B|^2 \cos^2 kx dx + \int_a^\infty |A|^2 e^{-2\kappa x} dx \right) = 1 \implies \\ &\implies 2 * |B|^2 \left(\int_0^a \cos^2 kx dx + \int_a^{+\infty} \cos^2 ka e^{-2\kappa(x-a)} dx \right) = 1 \implies \\ &\implies |B|^2 = \left(a + \frac{\sin 2ka}{2k} + \frac{\cos^2 ka}{\kappa} \right)^{-1} \end{aligned}$$

Проделав ту же самую процедуру с D и C, получим:

$$D = C e^{\kappa a} \sin ka, \quad |C|^2 = \left(a - \frac{\sin 2ka}{2k} + \frac{\sin^2 ka}{\kappa} \right)^{-1}$$

Выпишем, какие состояния получили в итоге:

$$\begin{aligned} \psi_+ &= \begin{cases} \sqrt{\left(a + \frac{\sin 2ka}{2k} + \frac{\cos^2 ka}{\kappa} \right)^{-1}} e^{\kappa(x+a)} \cos ka, & x < -a, \\ \sqrt{\left(a + \frac{\sin 2ka}{2k} + \frac{\cos^2 ka}{\kappa} \right)^{-1}} \cos kx, & -a \leq x \leq a, \\ \sqrt{\left(a + \frac{\sin 2ka}{2k} + \frac{\cos^2 ka}{\kappa} \right)^{-1}} e^{\kappa(a-x)} \cos ka, & x > a \end{cases} \\ \psi_- &= \begin{cases} -\sqrt{\left(a - \frac{\sin 2ka}{2k} + \frac{\sin^2 ka}{\kappa} \right)^{-1}} e^{\kappa(x+a)} \sin ka, & x < -a, \\ \sqrt{\left(a - \frac{\sin 2ka}{2k} + \frac{\sin^2 ka}{\kappa} \right)^{-1}} \sin kx, & -a \leq x \leq a, \\ \sqrt{\left(a - \frac{\sin 2ka}{2k} + \frac{\sin^2 ka}{\kappa} \right)^{-1}} e^{\kappa(a-x)} \sin ka, & x > a \end{cases} \end{aligned}$$

Всё, основную часть мы проанализировали, волновые функции и уровни энергии получили.



На следующем семинаре продолжим разбирать задачи, связанные с одномерным потенциалом и уравнением Шрёдингера.

Семинар IV

Решение задач на потенциальные ямы

Упражнение №13

Найдите уровни энергии и волновые функции стационарных состояний для частицы m в одномерной потенциальной яме следующего вида:

$$U(x) = \begin{cases} +\infty, & x < 0, \\ -U_0, & 0 \leq x \leq a, \\ 0, & x > a \end{cases}$$

На рисунке 3 можем увидеть потенциальную яму, но уже с бесконечной стенкой. Давайте обсудим, как от этого изменится задача.

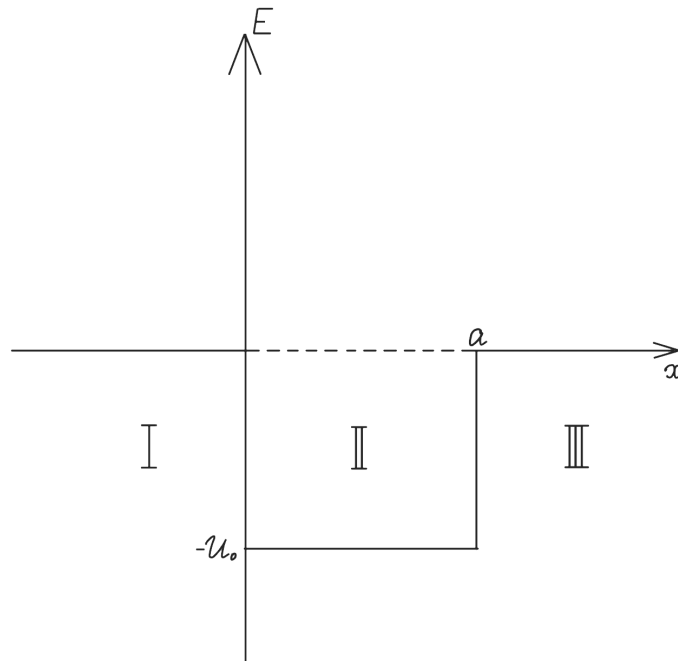


Рис. 3: Потенциальная яма с одной бесконечной стенкой

Запишем уравнение Шрёдингера:

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

Заметим, что правая часть ямы очень похожа на яму из упражнения 12. Рассмотрим, что происходит у левой стенки. Мы считаем, что частица не может пройти через такой бесконечный барьер, то есть $\psi(x) = 0$ при $x \leq 0$. Тогда, из условия непрерывности, получим условия “сшивки” (напоминаю, что решения в области II имеет вид $\psi(x) = \tilde{A} \cos kx + A \sin kx$):

$$\psi(0) = \tilde{A} = 0 \implies \psi(x) = \begin{cases} 0, & x \leq 0, \\ A \sin kx, & 0 < x < a, \\ B e^{-\kappa x}, & x \geq a \end{cases}$$

Я думаю, уже видно, что мы можем переписать это через нечетные волновые функции из упражнения 12. Тогда получим:

$$\psi(x) = \begin{cases} 0, & x \leq 0, \\ \sqrt{2}\psi_-(x), & x > 0 \end{cases}$$

Коэффициент $\sqrt{2}$ появился из следующих соображений: волновая функция, относительно первой задачи, уменьшилась вдвое, значит, нужно её перенормировать. Если хотите в этом убедиться, подставьте вместо корня из двух коэффициент C и решите уравнение $\int_0^{+\infty} |\psi(x)|^2 = 1$.



Упражнение №14

Частица массы m совершает финитное движение в одномерной модельной потенциальной яме, вид которой может быть представлен δ -функцией:

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

где κ_0 - параметр ямы. Покажите, что в этой яме имеется только одно связанное состояние и найдите энергию и волновую функцию частицы связанного состояния в координатном представлении. Вычислите $\langle x \rangle$, $\langle p \rangle$, $\langle (\Delta x)^2 \rangle$ и $\langle (\Delta p)^2 \rangle$ в этом состоянии

Не переживайте, дельта функция только выглядит страшно. На деле у нас получается примерно такой рисунок:

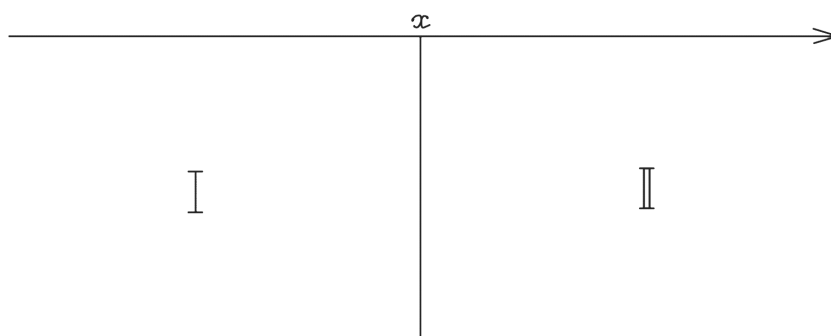


Рис. 4: Потенциальная дельта яма

Введём уже знакомую нам величину $\kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2} |E|$ и запишем уравнение Шрёдингера:

$$\psi''(x) - (\kappa^2 - 2\kappa_0 \delta(x))\psi(x) = 0$$

С областями такого типа, как I и II мы встречаемся уже третий раз, так что сразу выпишу их волновые функции:

$$\begin{cases} \psi_I(x) = Ae^{\kappa x} \\ \psi_{II}(x) = Be^{-\kappa x} \end{cases}$$

Волновая функция в нуле должна быть непрерывна:

$$\psi(+0) = \psi(-0)$$

Производная же будет разрывна (из-за дельта-функции). Доопределим разрыв, проинтегрировав уравнение Шрёдингера с пределами от $-\epsilon$ до ϵ , где $\epsilon \rightarrow 0$. Получим:

$$\begin{aligned} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \psi''(x) dx &= \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \kappa^2 \psi(x) dx - \int_{-\epsilon}^{\epsilon} 2\kappa_0 \delta(x) \psi(x) dx \implies \\ \implies \psi'(+0) - \psi'(-0) &= -2\kappa_0 \psi(0) \end{aligned}$$

Второй интеграл равен нулю, так как по теореме о среднем этот интеграл равен $2\mu\epsilon$, но $\epsilon \rightarrow 0$.

Выпишем волновые функции и воспользуемся полученными условиями:

$$\begin{cases} \psi_I(x) = Ae^{\kappa x} \\ \psi_{II}(x) = Be^{-\kappa x} \\ \psi(+0) = \psi(-0) \end{cases} \implies A = B \implies \psi(x) = Ae^{-\kappa|x|}$$

Подставим условие на производную и получим:

$$-A\kappa - A\kappa = -2A\kappa_0 \implies \kappa = \kappa_0$$

Тогда, можно явно выразить энергию через заданное нам условием значение κ_0 :

$$E_0 = -\frac{\hbar^2 \kappa_0^2}{2m}$$

Выходит, что в дельта яме только один уровень энергии. Найдём коэффициент A из условия нормировки:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx &= A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\kappa|x|} dx = A^2 \left[\int_{-\infty}^0 e^{2\kappa x} dx + \int_0^{+\infty} e^{-2\kappa x} dx \right] = \\ &= A^2 \left[\frac{1}{2\kappa} (1 - 0) - \frac{1}{2\kappa} (0 - 1) \right] = \frac{A^2}{\kappa} = 1 \implies \\ \implies A &= \sqrt{\kappa} \end{aligned}$$

Наконец, запишем итоговую волновую функцию:

$$\psi(x) = \sqrt{\kappa_0} e^{-\kappa_0|x|}$$

Найдём среднее значение координаты и импульса. Дисперсию читателю предлагается найти самостоятельно в виде упражнения.

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int \psi^* x \psi dx = 0, \text{ т.к. } \psi - \text{чётная} \\ \langle p \rangle &= \int \psi^* (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi) dx = -i\hbar \kappa_0^2 \int e^{-\kappa_0|x|} (-e^{-\kappa_0|x|} \text{sign}(x)) dx = 0 \end{aligned}$$



Упражнение №15

Частица массы m совершает финитное движение в одномерном потенциальном поле вида:

$$U(x) = -\frac{\hbar^2 \kappa_0}{m} (\delta(x+a) + \delta(x-a)),$$

где κ_0 - параметр ямы. Найдите энергии уровней и волновые функции стационарных состояний. Как зависит число связанных состояний от параметров a и κ_0 ?

Покажите, что в случае $\kappa_0 a \gg 1$ связанные состояния представляют собой дублет близко расположенных уровней

На рисунке 5 можно увидеть ситуацию, описываемую в задаче.

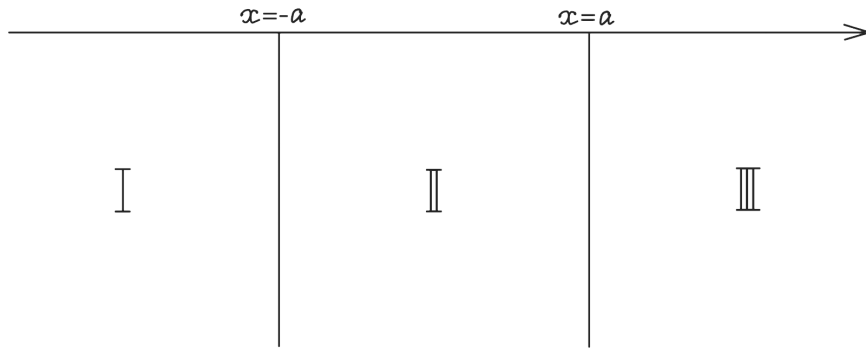


Рис. 5: Две потенциальные дельта ямы

Давайте для начала рассмотрим области вне дельта ям. Ясно (если нет, сделайте те же самые выкладки, что мы делали в упражнении 12), что решением здесь будут так же четные и нечетные функции следующего вида:

$$\psi_+ = \begin{cases} Ae^{\kappa x}, & x < -a, \\ B \operatorname{ch} \kappa x, & -a < x < a, \\ Ae^{-\kappa x}, & x > a \end{cases}, \quad \psi_- = \begin{cases} -De^{\kappa x}, & x < -a, \\ C \operatorname{sh} \kappa x, & -a < x < a, \\ De^{-\kappa x}, & x > a \end{cases}$$

Тригонометрические функции превратились в гиперболические из-за отсутствия отрицательного потенциала между ямами. Далее, приведём к форме, удобной для анализа (в очередной раз графического). Для этого вновь воспользуемся условиями “сшивки”, а именно разрывом производной и непрерывностью, полученной в прошлой задаче:

$$\begin{cases} \psi'(a+0) - \psi'(a-0) = -2\kappa_0 \psi(a) \\ \psi(a+0) = \psi(a-0) \end{cases}$$

Проведем все необходимые преобразования для чётных функций (для нечётных аналогично):

$$Ae^{-\kappa a} = B \operatorname{ch} \kappa a \implies B = \frac{Ae^{-\kappa a}}{\operatorname{ch} \kappa a}$$

Из первого уравнения получим:

$$-A\kappa e^{-\kappa a} - B\kappa \operatorname{sh} \kappa a = -2\kappa_0 A e^{-\kappa a}$$

Подставляя B и проведя все сокращения, получим итоговое выражение:

$$\frac{\kappa a}{\kappa_0 a} = 1 + e^{-2\kappa a}$$

Для нечетного же случая:

$$\frac{\kappa a}{\kappa_0 a} = 1 - e^{-2\kappa a}$$

Давайте опять сделаем красивый (или не очень) график и обсудим его.

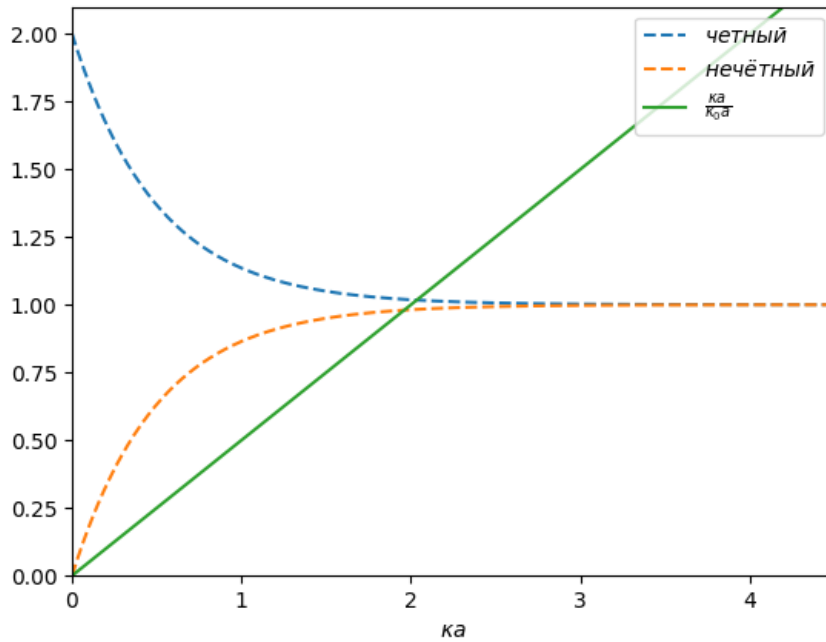


Рис. 6: График для нечетных и четных функций

Два важных замечания по графику:

1. Видно, что чётное решение, в отличие от нечётного, существует всегда. Нечётное решение же существует только при $\kappa_0 a \geq 1/2$.
2. При $\kappa_0 a \gg 1$ решения почти неразличимы. Однако, если $\kappa a \ll 1$, то у нас остаётся одна дельта яма с удвоенным κ_0 .

Найдём коэффициенты для собственных функций (так же, как в упражнении 12).

$$|B|^2 = \left(a + \frac{\operatorname{sh} 2\kappa a}{2\kappa} + \frac{\operatorname{ch}^2 \kappa a}{\kappa}\right)^{-1}, \quad A = B e^{\kappa a} \operatorname{ch} \kappa a$$

Аналогично для коэффициентов D и C :

$$|D|^2 = \left(-a + \frac{\operatorname{sh} 2\kappa a}{2\kappa} + \frac{\operatorname{sh}^2 \kappa a}{\kappa}\right)^{-1}, \quad C = D e^{\kappa a} \operatorname{sh} \kappa a$$



Упражнение №16

Частица массы m движется в одномерном периодическом поле вида

$$U(x) = -\frac{\hbar^2 \kappa_0}{m} \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} \delta(x - na),$$

где κ_0 и a - параметры потенциала. Исследуйте, при каких отрицательных и положительных энергиях E частицы такое движение возможно. Покажите, что имеются зоны “разрешенных” и “запрещенных” энергий. Исследуйте, что происходит с шириной зон в предельных случаях $\kappa_0 a \gg 1$ (сильная связь) и $\kappa_0 a \ll 1$ (слабая связь).

Мы решили задачу на одну яму, на две ямы, следующий логичный шаг – решить задачу на три бесконечность дельта ям.

Писать условие сшивки для бесконечного количества ям – не самая приятная задача, поэтому она предоставляется читателю в качестве упражнения на дом. Мы же пойдём другим путём, заметив важную особенность задачи. Посмотрев на рисунок 7 и на дельта потенциал, становится понятно, что задача a -периодична. А какой оператор у нас двигает частицу на a ? Правильно, оператор трансляции \hat{T}_a . Проверим, коммутирует ли гамильтониан с оператором трансляции:

$$[\hat{H}, \hat{T}_a] = [U(x), \hat{T}_a] + [\hat{p}^2, \hat{T}_a] = \left[\sum \delta(x - na), \hat{T}_a \right] + \left[\hat{p}^2, e^{-\frac{i}{\hbar} a \hat{p}} \right] = 0.$$

Значит, мы можем искать собственные функции гамильтониана в виде $e^{ikx} \phi(x)$, где $\phi(x+a) = \phi(x)$. Помимо этого, нам достаточно написать условия сшивки для зоны I и зоны II. Теперь, когда мы знаем, что волновые функции для задачи являются собственными для оператора трансляции, можем выписать действие оператора трансляции отдельно:

$$\hat{T}_a \psi(x) = \psi(x+a) = e^{ika} \psi(x)$$

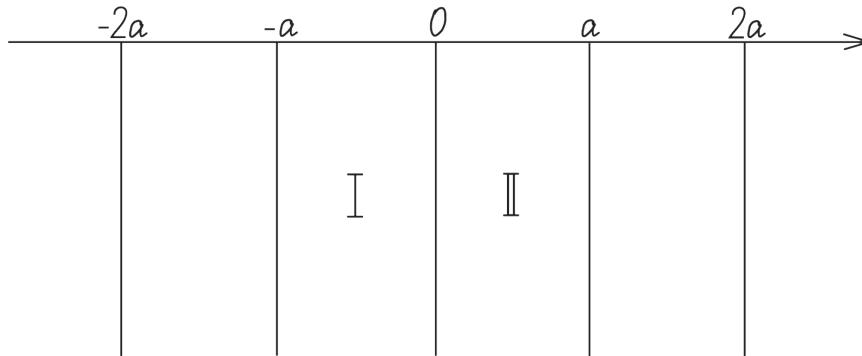


Рис. 7: Бесконечные дельта ямы

Напишем уравнение Шрёдингера для зоны I и зоны II без учёта дельта потенциала и с положительной энергией (!):

$$\psi''(x) + \kappa^2 \psi(x) = 0, \quad \kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$$

Решение в первой области мы знаем:

$$\psi_I(x) = Ae^{i\kappa x} + Be^{-i\kappa x}$$

Получим из него уравнение для второй области:

$$\hat{T}_a \psi_I(x) = \psi_I(x + a) = e^{ika} \psi_I(x)$$

Мы знаем, что волновые функции являются собственными для оператора трансляции. Тогда:

$$\psi_{II}(x) = e^{ika} \psi_I(x - a) = e^{ika} (Ae^{i\kappa(x-a)} + Be^{-i\kappa(x-a)})$$

Таким образом, мы смогли выразить оба наших решения через одни коэффициенты А и В.

Теперь запишем условия сшивки. Напомню, что $\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$ и $\psi'_{II}(0) - \psi'_I(0) = -2\kappa_0 \psi(0)$. Тогда

$$\begin{cases} A + B = e^{ika} (Ae^{-i\kappa a} + Be^{i\kappa a}) \\ e^{ika} (A i \kappa e^{-i\kappa a} - B i \kappa e^{i\kappa a}) - A i \kappa + B i \kappa = -2\kappa_0 (A + B) \end{cases}$$

Чтобы у системы уравнений было нетривиальное решение, необходимо, чтобы определитель матрицы системы был равен нулю. Давайте выпишем матрицу системы:

$$\begin{aligned} & \begin{cases} A(1 - e^{i(k-\kappa)a}) + B(1 - e^{i(k+\kappa)a}) = 0 \\ A(e^{i(k-\kappa)a} i \kappa - i \kappa + 2\kappa_0) - B(e^{i(k+\kappa)a} i \kappa - i \kappa - 2\kappa_0) = 0 \end{cases} \implies \\ \implies & \begin{vmatrix} 1 - e^{i(k-\kappa)a} & 1 - e^{i(k+\kappa)a} \\ i \kappa e^{i(k-\kappa)a} - i \kappa + 2\kappa_0 & -i \kappa e^{i(k+\kappa)a} + i \kappa + 2\kappa_0 \end{vmatrix} = 0 \end{aligned}$$

Распишем детерминант и воспользуемся всей мощью тригонометрии:

$$\begin{aligned} & (1 - e^{i(k-\kappa)a}) (-i \kappa e^{i(k+\kappa)a} + i \kappa + 2\kappa_0) - (1 - e^{i(k+\kappa)a}) (i \kappa e^{i(k-\kappa)a} - i \kappa + 2\kappa_0) = \\ & = 2e^{i(k+\kappa)a} (\kappa_0 - i \kappa) + 2i \kappa e^{2ika} + 2i \kappa - 2e^{i(k-\kappa)a} (i \kappa + \kappa_0) = \\ & = 2e^{ika} (e^{i\kappa a} \kappa_0 - i \kappa e^{i\kappa a} + i \kappa e^{i\kappa a} + i \kappa e^{-i\kappa a} - i \kappa e^{-i\kappa a} - \kappa_0 e^{-i\kappa a}) = \\ & = 4ie^{ika} (\kappa_0 \sin \kappa a - \kappa \cos \kappa a + \kappa \cos \kappa a) = 0 \end{aligned}$$

В итоге получаем:

$$\cos \kappa a = \cos \kappa a - \frac{\kappa_0}{\kappa} \sin \kappa a$$

Проделав то же самое для отрицательной энергии, получим:

$$\cos \kappa a = \cosh(\eta a) - \frac{\kappa_0}{\eta} \sinh(\eta a), \quad \eta^2 = \frac{2m}{\hbar^2} |E|$$

Мы получили зависимость энергии (κ или η) от квазиимпульса k , т.е. у нас получились дисперсионные соотношения. Давайте проанализируем случай положительных энергий. Для этого преобразуем получившееся уравнение:

$$\begin{aligned} \cos \kappa a - \frac{\kappa_0}{\kappa} \sin \kappa a &= \frac{\sqrt{(\kappa a)^2 + (\kappa_0 a)^2}}{\kappa} \left(\frac{\kappa \cos \kappa a}{\sqrt{(\kappa a)^2 + (\kappa_0 a)^2}} - \frac{\kappa_0 \sin \kappa a}{\sqrt{(\kappa a)^2 + (\kappa_0 a)^2}} \right) = \\ &= \frac{\sqrt{(\kappa a)^2 + (\kappa_0 a)^2}}{a \kappa} \left(\frac{\cos \kappa a}{\sqrt{1 + (\frac{\kappa_0}{\kappa})^2}} - \frac{\sin \kappa a}{\sqrt{(\frac{\kappa}{\kappa_0})^2 + 1}} \right) = \\ &= \frac{\sqrt{(\kappa a)^2 + (\kappa_0 a)^2}}{a \kappa} (\cos \phi \cos \kappa a - \sin \phi \sin \kappa a) = \\ &= \frac{\sqrt{(\kappa a)^2 + (\kappa_0 a)^2}}{a \kappa} \cos(\kappa a + \phi), \quad \phi = \arctan \frac{\kappa_0}{\kappa} \end{aligned}$$

В итоге получим уравнение:

$$\cos ka = \frac{\sqrt{(\kappa a)^2 + (\kappa_0 a)^2}}{a\kappa} \cos(\kappa a + \phi)$$

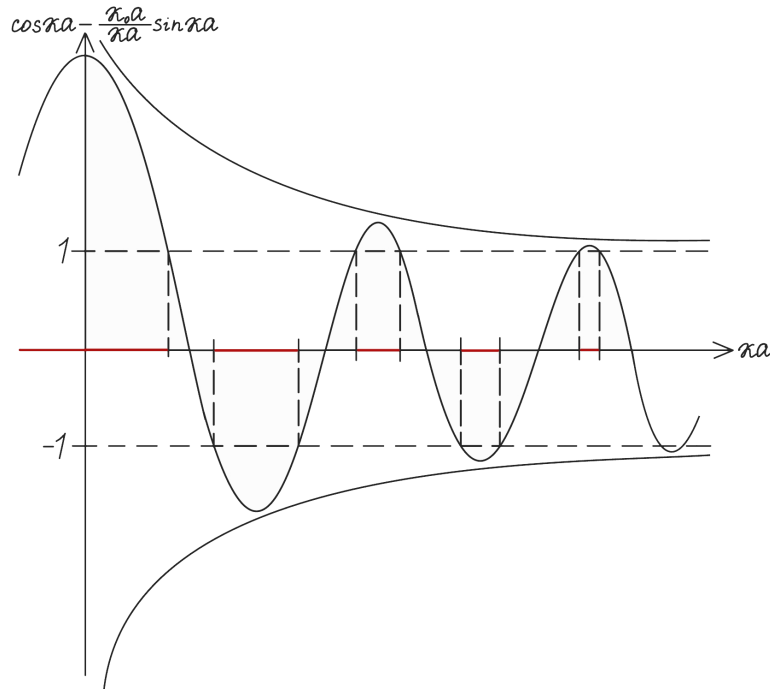


Рис. 8: График для положительных энергий

Проанализируем это уравнения на графике 8. Множитель перед косинусом указывает на вид огибающих, внутри которых будет распространяться косинус $\cos(\kappa a + \phi)$. Так как значение k действительные, косинус энергии не может выходить за пределы 1 и -1. Получается, что все зоны, когда график выходит за пределы, являются запрещёнными для энергии. И наоборот, значения внутри наших пределов будут разрешенными. Мы получили зонную структуру. Это значит, что существует область, в которых мы не сможем найти нашу систему. Анализ случая с отрицательной энергией можно провести самостоятельно.



На следующем семинаре мы с вами решим последнюю задачу на ямы и обсудим ситуацию с барьерами.

Семинар V

Продолжение решения задач в одномерии

Упражнение №17

Получите стационарное уравнение Шрёдингера из упражнения 14 в импульсном представлении. Найдите решение этого уравнения, описывающее связанное состояние частицы. Преобразуйте найденную волновую функцию частицы в импульсном представлении в волновую функцию в координатном представлении и удостоверьтесь в правильности ответа.

Вообще, задача очень нудная, но если прорешать её самостоятельно (что я вам очень советую), то можно очень хорошо разобраться с переходами между импульсными и координатными представлениями. Напомню, что в бракет форме уравнение Шрёдингера выглядит так:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle$$

Обычно мы записываем это уравнение, проецируя вектор состояния на координату. В данном случае нужно спроецировать на вектор импульса. Буду писать эту часть достаточно подробно:

$$\langle p | i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = \langle p | \hat{H} |\psi\rangle$$

Раскроем оператор Гамильтона как $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + U(x)$ и перепишем $\langle p | \psi \rangle$ в виде ψ_p

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi_p = \frac{p^2}{2m} \psi_p + \langle p | U(x) \hat{1}_p | \psi \rangle = \frac{p^2}{2m} \psi_p + \int \langle p | U(x) | p' \rangle \psi_{p'} dp'.$$

Нам необходимо вычислить матричный элемент $U(x)$ в импульсном представлении. Используем единичный оператор (только на этот раз координаты), вставляя его в наше скалярное произведение:

$$\begin{aligned} \int \langle p | U(x) \hat{1}_x | p' \rangle \psi_{p'} dp' &= \int \langle p | U(x) \left[\int |x\rangle \langle x| dx \right] | p' \rangle \psi_{p'} dp' = \\ &= \int \int U(x) \langle p | x \rangle \langle x | p' \rangle \psi_{p'} dx dp' = \frac{1}{2\pi\hbar} \int \int U(x) e^{-\frac{i}{\hbar}(p-p')x} \psi_{p'} dx dp' \end{aligned}$$

Подставляя его в изначальное уравнение, получим уравнение Шрёдингера в импульсном представлении:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi_p = \frac{p^2}{2m} \psi_p + \frac{1}{2\pi\hbar} \int \int U(x) e^{-\frac{i}{\hbar}(p-p')x} \psi_{p'} dx dp'.$$

Подставляя потенциальную энергию из упражнения, получим:

$$\frac{p^2}{2m} \psi_p - \frac{\kappa_0 \hbar}{2\pi m} \int \int \delta(x) e^{-\frac{i}{\hbar}(p-p')x} \psi_{p'} dx dp' = \frac{p^2}{2m} \psi_p - \frac{\kappa_0 \hbar}{2\pi m} \int \psi_{p'} dp' = E \psi_p$$

Предположим, что интеграл сходится, и введём для него обозначение $I = \int \psi_{p'} dp'$. Далее, выражая энергию через κ , получим простое алгебраическое выражение на ψ_p :

$$\frac{p^2}{2m} \psi_p - I \frac{\kappa_0 \hbar}{2\pi m} = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} \psi_p \implies \psi_p = \frac{\hbar \kappa_0}{\pi} \frac{I}{p^2 + \hbar^2 \kappa^2}$$

Теперь выразим ψ_p обратно через I и получим:

$$I = \frac{\hbar\kappa_0}{\pi} \int \frac{I}{p^2 + \hbar^2\kappa^2} dp = \frac{\hbar\kappa_0}{\pi} \frac{I\pi}{\hbar\kappa} = I \frac{\kappa_0}{\kappa} \implies \kappa_0 = \kappa$$

Тогда, можем записать энергию как:

$$E = -\frac{\kappa_0^2 \hbar^2}{2m}$$

Волновую функцию в импульсном представлении можно найти двумя путями: либо решить ранее полученное алгебраическое уравнение относительно I с условием нормировки $\int |\psi_p|^2 dp = 1$, либо спроецировать уже известное нам решение $\psi(x) = \sqrt{\kappa_0} e^{-\kappa_0|x|}$ из упражнения 14 на вектор импульса, то есть посчитать скалярное произведение $\langle p|\psi \rangle$ (не забыв по дороге воспользоваться единичным проекционным оператором).

Упражнение №18

Частица массы m свободно движется вдоль оси x с энергией E и в области $x > 0$ попадает в область действия потенциала, который имеет вид:

- а) прямоугольной потенциальной ямы ширины a и глубины U_0 ,
- б) прямоугольного потенциального барьера ширины a и высоты U_0 .

Найдите коэффициенты прохождения $T(E)$ и отражения $R(E)$ частицы от указанных потенциалов.

Начнём решать эту задачу с условия а, то есть с потенциалом в виде ямы. Запишем уравнения для волновых функций вне ямы:

$$\begin{cases} \psi_I = Ae^{i\kappa x} + Be^{-i\kappa x} \\ \psi_{III} = Ce^{i\kappa x} + De^{-i\kappa x} \end{cases}$$

Так как нам интересно посмотреть на коэффициенты прохождения и отражения, можем сразу заменить некоторые элементы. В первом уравнении $A = 1$, так как мы предполагаем, что справа приходит полная волна, а $B = r$, где r – это reflection, или коэффициент отражения. Во втором же уравнении мы не рассматриваем ситуацию, когда волна идёт справа, то есть $D = 0$, и $C = t$, где t – это transmission, или коэффициент прохождения. Тогда, система преобразуется к следующему виду:

$$\begin{cases} \psi_I = e^{i\kappa x} + re^{-i\kappa x} \\ \psi_{III} = te^{i\kappa x} \end{cases}$$

Далее запишем уравнение для области в потенциальной яме:

$$\psi_{II}'' + k^2 \psi_{II} = 0, \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (|U_0| + E)$$

Выпишем решение этого уравнения:

$$\psi_{II}(x) = c_1 e^{ikx} + c_2 e^{-ikx}$$

Отмечу, что мы поменяли обозначения k для случая положительной энергии (потенциал по модулю, так как мы рассматриваем яму). Воспользуемся условиями непрерывности волновой функции и её производной и найдём коэффициенты:

$$\begin{cases} \psi_I(0) = \psi_{II}(0) \\ \psi'_I(0) = \psi'_{II}(0) \end{cases} \quad \begin{cases} \psi_{II}(a) = \psi_{III}(a) \\ \psi'_{II}(a) = \psi'_{III}(a) \end{cases}$$

Подставим в эти системы волновые функции:

$$\begin{cases} 1 + r = c_1 + c_2 \\ 1 - r = \frac{k}{\kappa}(c_1 - c_2) \end{cases} \quad \begin{cases} c_1 e^{ika} + c_2 e^{-ika} = t e^{i\kappa a} \\ c_1 e^{ika} - c_2 e^{-ika} = \frac{\kappa}{k} t e^{i\kappa a} \end{cases}$$

Из правой системы выразим $c_1(t)$ и $c_2(t)$:

$$\begin{aligned} c_1 &= \frac{t}{2} e^{ia(\kappa-k)} \left(1 + \frac{\kappa}{k}\right) \\ c_2 &= \frac{t}{2} e^{ia(\kappa+k)} \left(1 - \frac{\kappa}{k}\right) \end{aligned}$$

Подставим их в левую систему, просуммировав уравнения:

$$\begin{aligned} 2 &= \frac{c_1(\kappa + k) + c_2(\kappa - k)}{\kappa} \implies \\ \implies \frac{1}{t} &= \frac{e^{ia(\kappa-k)} \left(1 + \frac{\kappa}{k}\right)(\kappa + k) + e^{ia(\kappa+k)} \left(1 - \frac{\kappa}{k}\right)(\kappa - k)}{4\kappa} \end{aligned}$$

Выпишем окончательное выражение для t :

$$t = \frac{4\kappa k}{e^{ia(\kappa-k)}(\kappa + k)^2 - e^{ia(\kappa+k)}(\kappa - k)^2}$$

Таким же образом можно получить и r :

$$r = \frac{(\kappa^2 - k^2) \sin(ak)}{2i\kappa k \cos(ak) + (\kappa^2 + k^2) \sin(ak)}$$

Как мы помним из правила Борна, вероятность определяется как $|\psi|^2$. Тогда, коэффициент прохождения T выражается следующим образом:

$$T = |\psi_{III}|^2 = |t|^2$$

Подставив t и сделав несколько преобразований, получим:

$$T = \frac{1}{1 + \frac{U_0^2}{4E(|U_0| + E)} \sin^2(ak)}$$

Будем считать, что всё, что не прошло через барьер, отразилось обратно. Тогда $R = 1 - T$, то есть

$$R = \frac{U_0^2 \sin^2(ak)}{4E(|U_0| + E) + U_0^2 \sin^2(ak)}$$

Из уравнения на T видно, что вероятность частице пролететь над ямой не равна 1. Это значит, что квантовая частица может отразиться от ямы и полететь обратно с вероятностью $1 - T$. Естественно, для классического тела такая ситуация не происходит.

Для случая потенциального барьера решение будет точно такое же, только вместо $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(|U_0| + E)$ мы берём $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)$, так как считаем, что барьер выше энергии нашей частицы. В итоге получим те же самые уравнения, но с новым k :

$$T = \frac{1}{1 + \frac{U_0^2}{4E(U_0 - E)} \sin^2(ak)}, \quad R = \frac{U_0^2 \sin^2(ak)}{4E(U_0 - E) + U_0^2 \sin^2(ak)}$$

И в данном случае наблюдается обратная ситуация. Вместо того чтобы отразиться, частица может пролететь сквозь барьер и вылететь с другой стороны. Это называется *туннелированием*. Тоже чисто квантовый эффект.

Упражнение №19

Частица массы m находится в связанном состоянии в δ -потенциале (см. упражнение 14). В момент $t=0$ происходит мгновенное изменение параметра ямы от κ_0 до κ_1 . Найдите вероятность "ионизации". Обсудите эволюцию волновой функции частицы сразу после ионизации в случае, когда $\kappa_1 = 0$.

Расчёты в задаче не представляют никакой сложности, если понимать, что есть что. Разберём по порядку. Мгновенное изменение говорит о том, что уравнение Шрёдингера остаётся стационарным. Вероятность ионизации – вероятность вылета частицы из ямы. Теперь давайте всё покажем наглядно. Из упражнения 14 мы знаем, что волновая функция дельта ямы есть $\psi_0(x) = \sqrt{\kappa_0} e^{-\kappa_0|x|}$. Соответственно, в момент $t = 0$ волновая функция запишется в виде $\psi_1(x) = \sqrt{\kappa_1} e^{-\kappa_1|x|}$. Найдём вероятность перехода от ψ_0 к ψ_1 , используя правила Борна (т.е. через скалярное произведение):

$$\begin{aligned} P &= \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0(x) \psi_1(x) dx \right|^2 = \kappa_0 \kappa_1 \left| \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(\kappa_0 + \kappa_1)|x|} dx \right|^2 = \\ &= \kappa_0 \kappa_1 \left| 2 \int_0^{+\infty} e^{-(\kappa_0 + \kappa_1)x} dx \right|^2 = 4 \frac{\kappa_0 \kappa_1}{(\kappa_0 + \kappa_1)^2} \end{aligned}$$

Тогда вероятность выхода, то есть ионизации, есть $1 - P$, то есть:

$$P_{exit} = 1 - 4 \frac{\kappa_0 \kappa_1}{(\kappa_0 + \kappa_1)^2}$$

На этой задаче мы временно прощаемся с одномерными потенциалами и переходим к темам осциллятора и углового момента, которые будут обсуждаться на следующем семинаре.

Семинар VI

Гармонический осциллятор в квантовой механике

Этот семинар будет полностью посвящен особенностям описания колебательного движения в квантовой механике. Изучение гармонического осциллятора является принципиально важным, так как любое колебательное движение описывается гамильтонианом, аналогичным гамильтониану гармонического осциллятора. Есть два подхода к описанию осциллятора в квантмехе: через непосредственное решение уравнения Шрёдингера и через операторы рождения и уничтожения. Я считаю второй подход более изящным и более квантовомеханическим, поэтому будем пользоваться именно им. Но сначала выполним несколько подготовительных действий.

Во-первых, вспомним классическое описание гармонического осциллятора. Запишем его гамильтониан:

$$H = \frac{p^2}{2M} + \frac{kx^2}{2}.$$

Тогда, используя уравнения Гамильтона, получим уравнения движения:

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= \frac{p}{M} \\ \frac{dp}{dt} &= -kx\end{aligned}$$

Найдя их решения и выразив частоту как $\omega = \sqrt{k/M}$, получим:

$$\begin{aligned}x(t) &= x(0) \cos \omega t + \frac{1}{M\omega} p(0) \sin \omega t \\ p(t) &= p(0) \cos \omega t - M\omega x(0) \sin \omega t\end{aligned}$$

Во-вторых, перемасштабируем наблюдаемые координаты и импульсы и сделаем их безразмерными. Для этого найдём коэффициенты A и B , где $\hat{X} = A\hat{x}$, $\hat{P} = B\hat{p}$. Коммутатор этих наблюдаемых $[X, P] = i$, и эти наблюдаемые удовлетворяют уравнениям движения классического осциллятора:

$$\begin{aligned}X(t) &= X(0) \cos \omega t + P(0) \sin \omega t \\ P(t) &= P(0) \cos \omega t - X(0) \sin \omega t\end{aligned}$$

Подставим в классические уравнения движения координату и импульс, выраженные через наши новые операторы $\hat{x} = \hat{X}/A$, $\hat{p} = \hat{P}/B$:

$$\begin{aligned}X(t) &= X(0) \cos \omega t + \frac{1}{M\omega} \frac{A}{B} P(0) \sin \omega t \\ P(t) &= P(0) \cos \omega t - M\omega \frac{B}{A} X(0) \sin \omega t\end{aligned}$$

Чтобы эти уравнения имели такой же вид, как и уравнения выше, необходимо чтобы:

$$\frac{A}{B} = M\omega$$

Из коммутационного соотношения следует, что $[\hat{X}, \hat{P}] = AB[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar AB$, т.е. $AB = \frac{1}{\hbar}$. Решая два полученных уравнения, находим:

$$A = \sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}}; \quad B = \frac{1}{\sqrt{M\omega\hbar}}$$

Подставив их в выражения для операторов, получим:

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}} \hat{x}; \quad \hat{P} = \frac{1}{\sqrt{M\omega\hbar}} \hat{p}$$

Выпишу свойства этих операторов без вывода, так как их можно проверить самостоятельно:

- $\langle X|P\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{iPX}$
- $\psi(X) = \left(\frac{\hbar}{M\omega}\right)^{1/4} \psi(x); \quad \psi(P) = (\hbar M\omega)^{1/4} \psi(p)$
- $\hat{P}\psi(X) = -i\frac{d}{dX}\psi(X); \quad \hat{X}\psi(P) = i\frac{d}{dP}\psi(P)$
- $\langle \Delta X^2 \rangle \langle \Delta P^2 \rangle \geq \frac{1}{4}$

Гамильтониан же запишется как:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \hbar \omega (\hat{X}^2 + \hat{P}^2)$$

На последнем шаге нашей подготовки к описанию квантового гармонического осциллятора, введём *операторы рождения и уничтожения*. Оператор уничтожения определяется следующим образом:

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{X} + i\hat{P}).$$

Оператор рождения, в свою очередь, определяется как эрмитово сопряженный к нему:

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{X} - i\hat{P}).$$

Обратно, оператор координаты и импульса можно выразить через операторы рождения так:

$$\hat{X} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger); \quad \hat{P} = \frac{1}{i\sqrt{2}} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)$$

Операторы рождения и уничтожения не коммутируют:

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

Нам понадобится ещё одно коммутационное соотношение:

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger \hat{a}] = \hat{a}$$

Теперь все приготовления позади, и мы готовы обсудить квантовый гармонический осциллятор, его собственные значения, собственные состояния и особенности, которые отличают его от классического. Начнём с гамильтониана, записав его через операторы рождения и уничтожения:

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

Порядок операторов здесь очень важен. Именно оператор $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ определяется как оператор числа квантов с собственным значением n и собственным состоянием $|n\rangle$, то есть:

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

Такие состояния называются *состояниями Фока*. Интерпретация значения n зависит от задачи: в одной ситуации n может быть количеством частиц, в другой – энергетическими уровнями. Ясно, что собственные состояния и собственные значения гамильтониана будут такими же.

Однако это не объясняет в полной мере, почему операторы имеют такое название. Давайте посмотрим на то, как операторы \hat{a} и \hat{a}^\dagger действуют на состояния $|n\rangle$ по отдельности. Для этого покажем, что состояние $\hat{a}|n\rangle$ является собственным для оператора $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ с собственным значением $n - 1$:

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

Для оператора рождения аналогично:

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

Мы все ещё не знаем, как действует оператор \hat{a} на состояние $|n\rangle$, но теперь мы можем понять это из следующих рассуждений. Мы знаем, что энергетические спектры связанных состояний не вырождены, то есть каждому состоянию $|n\rangle$ соответствует только одно конкретное n . Тогда, так как собственное значение состояния $\hat{a}|n\rangle$ равно $n - 1$, можно заключить, что состояние так же будет пропорционально $|n - 1\rangle$. Почему пропорционально, а не равно? Потому что, в отличие от состояний $\hat{a}|n\rangle$ и $\hat{a}^\dagger|n\rangle$, состояния $|n - 1\rangle$ и $|n + 1\rangle$ нормированы по определению. Для первых же необходимо определить нормировочный коэффициент. Давайте сделаем это.

Пусть $\hat{a}|n\rangle = |\phi\rangle$. Мы знаем, что $|\phi\rangle = A|n - 1\rangle$. Посчитаем двумя способами скалярное произведение введенного состояния на себя:

$$\begin{cases} \langle\psi|\psi\rangle = \langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = n \\ \langle\psi|\psi\rangle = |A|^2 \langle n - 1|n - 1\rangle = |A|^2 \end{cases} \implies |A| = \sqrt{n}$$

Сделав то же самое для оператора рождения, получим следующие уравнения:

$$\begin{aligned} \hat{a}|n\rangle &= \sqrt{n}|n - 1\rangle \\ \hat{a}^\dagger|n\rangle &= \sqrt{n + 1}|n + 1\rangle \end{aligned}$$

Теперь выбор названия этих операторов может стать чуть понятнее. В самом деле, действие одного из этих операторов, например, оператора уничтожения, на состояние с определенным количеством квантов энергии $E = \hbar\omega(n + 1/2)$ уменьшит количество квантов энергии на единицу. Получается, что, во-первых, количество уровней энергии в гармоническом осцилляторе дискретно, а во-вторых, эти уровни эквидистантны с расстоянием $\hbar\omega$, называемым квантом энергии. Это значит, что мы можем представить осциллятор как набор квазичастиц, количество которых определяет энергию системы. Такой подход (описание состояния системы через частицы и квазичастицы) называется *вторичным квантованием*. Это очень элегантный метод, с которым вы познакомитесь более подробно на курсе статистической физики.

Вернёмся к осциллятору. Получается, с помощью оператора уничтожения мы можем понижать количество квантов энергии. Но в какой-то момент энергия станет отрицательной, что не имеет смысла в нерелятивистской теории (с ситуациями, когда это возможно, мы познакомимся во втором семестре). Поэтому важно определить *вакуумное состояние* $|0\rangle$. Определяется оно следующим образом:

$$\hat{a}|0\rangle = \vec{0}.$$

Под нулём в правой части подразумевается нулевой вектор Гильбертового пространства. Понятно, что из вакуумного состояния можно получить любое состояние $|n\rangle$, используя оператор рождения:

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

Давайте посчитаем волновые функции вакуумных состояний в координатном представлении $\langle X|0\rangle$ и затем обобщим это на произвольное фоковское состояние $|n\rangle$:

$$\hat{a} |0\rangle = (\hat{X} + i\hat{P}) |0\rangle = 0$$

Умножим слева на бра состояние $\langle X|$:

$$\langle X| \hat{X} |0\rangle + i \langle X| \hat{P} |0\rangle = (X + \frac{d}{dX})\psi(X) = 0$$

Решением этого обыкновенного дифференциального уравнения будет функция $\psi(X) = Ae^{-X^2/2}$. Вычислим коэффициент А из условия нормировки:

$$\langle \psi|\psi\rangle = \int |\psi(X)|^2 dX = |A|^2 \int e^{-X^2} dX = |A|^2 \sqrt{\pi}$$

В итоге получаем:

$$\psi_0(X) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-X^2/2}$$

В общем случае волновая функция будет выглядеть следующим образом:

$$\psi_n(X) = \frac{H_n(X)}{\pi^{1/4} \sqrt{2^n n!}} e^{-X^2/2}, \text{ где } H_n(X) = (X - \frac{d}{dX})^n - \text{полиномы эрмита.}$$

Теперь немного обсудим результаты, которые получили. Для начала заметим, что в вакуумном состоянии импульс и координата не определены. Это называется *нулевыми колебаниями* – в состоянии минимальной энергии мы обнаруживаем отклонение от положения равновесия. Это отличает квантовый осциллятор от классического.

Далее, волновые функции фоковских состояний, в отличие от потенциальных ям, которые мы рассматривали на прошлых семинарах, не кусочно определены, а представляют собой единые элементарные функции. Количество пересечений с осью абсцисс равно числу квантов n (рис. 9).

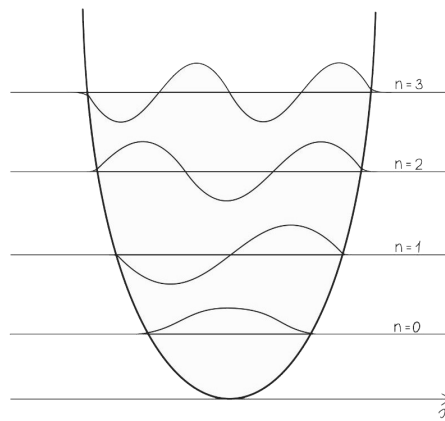


Рис. 9: Первые несколько уровней квантового гармонического осциллятора.

Может возникнуть вопрос: чему равны собственные состояния для оператора \hat{a} или \hat{a}^\dagger (напомню, что состояния $|n\rangle$ собственные для оператора $\hat{a}^\dagger\hat{a}$, но не по отдельности)? Оказывается, что такие состояния называются *когерентными*. Они играют большую роль в описании физических систем, так как в когерентном состоянии неопределенность минимальная – значит оно максимально приближает классический осциллятор. Мы не будем обсуждать когерентные состояния подробнее, так как они не присутствуют в задачах, однако настоятельно рекомендую прочитать про эту тему самостоятельно.

Переходим к решению задач на осциллятор.

Упражнение №20

Воспользовавшись повышающим и понижающим операторами \hat{a}^\dagger и \hat{a} , найдите средние значения оператора \hat{x}^2 , \hat{x}^4 и \hat{x}^{2k+1} в n -м стационарном состоянии линейного гармонического осциллятора.

Давайте вспомним из теории, как выглядит оператор координаты \hat{X} :

$$\hat{x} = \frac{x_0}{\sqrt{2}}(\hat{a}^\dagger + \hat{a}), \quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

Тогда, запишем среднее значение по определению и, используя действия оператора рождения и оператора уничтожения на энергетический уровень n ($\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ и $\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$), посчитаем:

$$\begin{aligned} \langle n|\hat{x}^2|n\rangle &= \frac{x_0^2}{2} \langle n|(\hat{a}^\dagger + \hat{a})^2|n\rangle = \\ &= \frac{x_0^2}{2} (\langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger|n\rangle + \langle n|\hat{a}\hat{a}|n\rangle + \langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle + \langle n|\hat{a}\hat{a}^\dagger|n\rangle) = \\ &= \frac{x_0^2}{2} \left(\sqrt{(n+1)(n+2)} \langle n|n+2\rangle + \sqrt{n(n-1)} \langle n|n-2\rangle + \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{(n+1)(n+1)} \langle n|n\rangle + \sqrt{n^2} \langle n|n\rangle \right) \end{aligned}$$

Мы знаем, что векторы различных уровней ортогональны, а значит все скалярные произведения для различных n будут равны 0. Убрав все нулевые скалярные произведения, получим:

$$\langle n|\hat{x}^2|n\rangle = \frac{x_0^2}{2}((n+1) + n) = x_0^2(n + \frac{1}{2})$$

Поступая точно так же с четвертой степенью, получим:

$$\langle n|\hat{x}^4|n\rangle = \frac{x_0^4}{4}(6n^2 + 6n + 3)$$

Теперь с нечетной степенью. Достаточно заметить, что в случае разложения по нечетным степеням, у нас не будет членов с последовательными действиями операторов с одинаковыми степенями ($\hat{a}\hat{a}^\dagger$, $\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger$ и т.п.). Значит, скалярные произведения будут только между ортогональными векторами. Иначе говоря, все скалярные произведения будут равны нулю. Значит:

$$\langle n|\hat{x}^{2k+1}|n\rangle = 0$$



Упражнение №21

Частица массы m движется в потенциале трёхмерного изотропного осциллятора:

$$U(r) = \frac{m\omega^2 r^2}{2}.$$

Найдите энергии уровней, кратности их вырождения, а также волновые функции стационарных состояний, разделяя переменные: а) в декартовых координатах, б) в сферических координатах. Обсудите связь задачи с моделью ядерных оболочек и получите первые магические числа: 2, 8, 20.

В этом семинаре решим только в декартовых координатах. В 10 семинаре, когда будем проходить трёхмерное пространство, решим в сферических координатах.

Давайте подставим потенциал в уравнение Шрёдингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r}) + \frac{m\omega^2\vec{r}^2}{2}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

Так как координаты декартовы, можем записать гамильтониан в виде:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^3 \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{m\omega^2 x_i^2}{2} \right)$$

Такой гамильтониан коммутирует с каждым из операторов координаты $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$, а значит, решение можно искать в виде произведения их собственных функций. В то же время, это гамильтониан гармонического осциллятора, т.е. его можно описать через оператор $\hat{a}^\dagger \hat{a}$. Тогда эти функции будут собственные ещё и для этого оператора. В итоге можем записать волновые функции в следующем виде:

$$\begin{aligned} \psi_{n_1 n_2 n_3}(\vec{r}) &= u_{n_1}(X) u_{n_2}(Y) u_{n_3}(Z) \\ u_{n_i}(X_i) &= \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}} \sqrt{2^{n_i} n_i!}} e^{-X_i^2/2} H_{n_i}(X_i) \end{aligned}$$

где $H_n(X_i)$ – полиномы Эрмита. Энергия тогда будет иметь вид:

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{3}{2}\right), \text{ где } n = n_1 + n_2 + n_3$$

Давайте посчитаем кратность вырождения уровней. Если мы произвольно задаём $n_1 \leq n$, то для n_2 останется $n - n_1 + 1$ вариантов ($n_2 = 0, 1, \dots, n - n_1$). В этом случае $n_3 = n - n_1 - n_2$ зафиксировано, и можно посчитать кратность вырождения, используя формулу арифметической прогрессии:

$$\sum_{n_1=0}^n n_2 = \sum_{n_1=0}^n n - n_1 + 1 = \frac{1}{2}(n+1)(n+2)$$

Посмотрим, что получилось. Если $n = 0$, то кратность вырождения 1, то есть в стационарном состоянии у нас нет вырождения по координате. Если $n = 1$, то кратность вырождения 3, то есть на первом уровне у нас три возможных состояний координаты с одинаковым состоянием энергии. Если проследить последовательность, то можно заметить, что она очень сильно напоминает расположение электронов на оболочке атома (без учёта вырождения по спину). И это не просто так! Далее мы увидим, что осциллятором вполне можно приблизить модель атомной оболочки.

В следующем семинаре начнём рассматривать системы в трёхмерном пространстве. Поговорим про центральное поле и операторы момента импульса.

Семинар VII

Трёхмерное пространство

Всё хорошее когда-нибудь заканчивается и настает пора суровой реальной жизни. Так и для нас самое время переходить к трехмерному пространству. Давайте попробуем разобраться, как изменится подход к описанию систем такого типа.

Так как пространство трёхмерное, мы рассматриваем трёхмерные операторы, то есть вместо привычных нам \hat{r} и \hat{p} появляются $\hat{\vec{r}} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ и $\hat{\vec{p}} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$. Гамильтониан частицы в поле принимает вид:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2M} + \frac{\hat{p}_y^2}{2M} + \frac{\hat{p}_z^2}{2M} + V(\vec{r})$$

Тогда стационарное уравнение Шрёдингера принимает вид:

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2M} + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

Или, если расписать оператор импульса в координатном представлении:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

Теперь мы работаем с трёхмерным дифференциальным уравнением в частных производных. Решение этого уравнения в общем виде весьма затруднительно. Поэтому разберём особо важный для физических задач частный случай, а именно *центрально-симметричный потенциал*. В центрально-симметричном потенциале имеет вид $V(\vec{r}) = V(r)$, где $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$. Как потом окажется, решать трёхмерное уравнение Шрёдингера при таких условиях гораздо удобнее. Но для начала нужно навести немного математики.

Начнём с того, что перейдём к сферической системе координат. Делаем мы это, исходя из опыта работы с классическим случаем. Мы хотим разделить потенциал на три отдельные составляющие – по одной на каждую переменную. Тогда Гильбертово пространство будет состоять из тензорного произведения трёх пространств $\mathbf{V} = \mathbf{V}_r \otimes \mathbf{V}_\theta \otimes \mathbf{V}_\phi$.

Осуществим переход к сферическим координатам:

$$\begin{cases} x = r \sin \theta \cos \phi \\ y = r \sin \theta \sin \phi \\ z = r \cos \theta \end{cases}$$

Нам также понадобится скалярное произведение в сферических координатах. Для этого посчитаем якобиан перехода из декартовой системы в сферическую:

$$J = \left| \frac{\partial(x, y, z)}{\partial(r, \theta, \phi)} \right| = r^2 \sin \theta$$

Тогда, скалярное произведение запишется в виде:

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(r) \varphi(r) dx dy dz = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty \psi^*(r) \varphi(r) r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi$$

На практике принято объединять пространства, связанные с угловым движением $\mathbf{Y} = \mathbf{V}_\theta + \mathbf{V}_\phi$, и оставлять произведение *радиальной* части и *угловой* $\mathbf{V} = \mathbf{V}_r \otimes \mathbf{Y}$. Элементами этих пространств являются волновые функции радиуса $R(r)$ и волновые функции углов $Y(\theta, \phi)$. Для дальнейшего описания нам понадобится новый оператор – оператор момента импульса.

Оператор момента импульса

В соответствии с классическим подходом, введём понятие оператора момента импульса как:

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}$$

Или, если расписать покомпонентно, получим:

$$\begin{aligned}\hat{L}_x &= \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \\ \hat{L}_y &= \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z \\ \hat{L}_z &= \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x\end{aligned}$$

Давайте найдём все важные коммутаторы и оформим это в виде упражнения.

Упражнение №22

Найдите следующие коммутаторы: $[\hat{L}_j, \hat{r}_k]$, $[\hat{L}_j, \hat{p}_k]$, $[\hat{L}_j, \hat{L}_k]$, $[\hat{L}_j, \hat{r}^2]$, $[\hat{L}_j, \hat{p}^2]$, $[\hat{L}_j, \hat{L}^2]$.

Для удобства записи вспомним, что такое *символ Леви-Чивита*:

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} 1, & \text{если чётность перестановки индексов } \{i, j, k\} \text{ чётная;} \\ -1, & \text{если чётность перестановки индексов } \{i, j, k\} \text{ нечётная;} \\ 0, & \text{иначе.} \end{cases}$$

Тогда оператор импульса можно переписать в виде $\hat{L}_j = \varepsilon_{jmn}\hat{r}_m\hat{p}_n$. Используя это обозначение, найдём первый коммутатор:

$$[\hat{L}_j, \hat{r}_k] = [\varepsilon_{jmn}\hat{r}_m\hat{p}_n, \hat{r}_k] = \varepsilon_{jmn}\hat{r}_m[\hat{p}_n, \hat{r}_k] = \varepsilon_{jmn}\hat{r}_m(-i\hbar)\delta_{nk}$$

Далее свернём $\varepsilon_{jmn}\delta_{nk} = \varepsilon_{jmk}$ и, так как символ Леви-Чивита антисимметричный, заменим $\varepsilon_{jmk} = -\varepsilon_{jkm}$. В итоге получим:

$$[\hat{L}_j, \hat{r}_k] = i\hbar\varepsilon_{jkm}\hat{r}_m.$$

Аналогично с импульсом:

$$[\hat{L}_j, \hat{p}_k] = [\varepsilon_{jmn}\hat{r}_m\hat{p}_n, \hat{p}_k] = \varepsilon_{jmn}\hat{p}_n[\hat{r}_m, \hat{p}_k] = i\hbar\varepsilon_{jmn}\hat{p}_n\delta_{mk} = i\hbar\varepsilon_{jkn}\hat{p}_n$$

Сейчас придётся немножко помучиться с индексами, но нам не впервой, так что посчитаем третий коммутатор:

$$\begin{aligned}[\hat{L}_j, \hat{L}_k] &= [\varepsilon_{jmn}\hat{r}_m\hat{p}_n, \varepsilon_{klq}\hat{r}_l\hat{p}_q] = \varepsilon_{jmn}\varepsilon_{klq}[\hat{r}_m\hat{p}_n, \hat{r}_l\hat{p}_q] = \\ &= \varepsilon_{jmn}\varepsilon_{klq}(-i\hbar\delta_{nl}\hat{r}_m\hat{p}_q + i\hbar\delta_{mq}\hat{r}_l\hat{p}_n) = \\ &= -i\hbar\varepsilon_{jml}\varepsilon_{klq}\hat{r}_m\hat{p}_q + i\hbar\varepsilon_{jmn}\varepsilon_{klm}\hat{r}_l\hat{p}_n = \\ &= -i\hbar\varepsilon_{ljm}\varepsilon_{lqk}\hat{r}_m\hat{p}_q + i\hbar\varepsilon_{mnj}\varepsilon_{mkl}\hat{r}_l\hat{p}_n\end{aligned}$$

Разворачиваем произведение символов Леви-Чивиты по формуле $\varepsilon_{ljm}\varepsilon_{lqk} = \delta_{jq}\delta_{mk} - \delta_{jk}\delta_{mq}$ и продолжим преобразование:

$$\begin{aligned}[\hat{L}_j, \hat{L}_k] &= -i\hbar(\delta_{jq}\delta_{mk} - \delta_{jk}\delta_{mq})\hat{r}_m\hat{p}_q + i\hbar(\delta_{nk}\delta_{jl} - \delta_{nl}\delta_{jk})\hat{r}_l\hat{p}_n = \\ &= -i\hbar\hat{r}_k\hat{p}_j + i\hbar\delta_{jk}\hat{r}_m\hat{p}_m + i\hbar\hat{r}_j\hat{p}_k - i\hbar\delta_{jk}\hat{r}_l\hat{p}_l = \\ &= -i\hbar\hat{r}_k\hat{p}_j + i\hbar\hat{r}_j\hat{p}_k.\end{aligned}$$

Теперь давайте попробуем пойти обратным путём, т.е. выразить полученную формулу через произведение символов Леви-Чивиты. Причём мы хотим подобрать индексы так, чтобы в итоге можно было представить выражение как символ Леви-Чивиты, умноженный на оператор момента импульса.

$$i\hbar\hat{r}_j\hat{p}_k - i\hbar\hat{r}_k\hat{p}_j = i\hbar(\delta_{jn}\delta_{km} - \delta_{jm}\delta_{kn})\hat{r}_n\hat{p}_m = i\hbar\varepsilon_{ljk}\varepsilon_{lnm}\hat{r}_n\hat{p}_m = i\hbar\varepsilon_{ljk}\hat{L}_l$$

Приравнивая, получим (тут циклически были переставлены индексы в символе Леви-Чивита для красоты записи):

$$[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar\varepsilon_{jkl}\hat{L}_l$$

Полпути пройдено, осталось посчитать коммутатор с квадратами операторов. Приступим:

$$[\hat{L}_j, \hat{r}^2] = [\hat{L}_j, \hat{r}_k\hat{r}_k] = 2i\hbar\varepsilon_{jkl}\hat{r}_k\hat{r}_l$$

Индексы k и l – немые, значит мы можем менять их как хотим. Давайте поменяем их местами. С одной стороны, это нечётная перестановка, значит, $\varepsilon_{jkl} = -\varepsilon_{jlk}$. С другой стороны, операторы координаты коммутируют, а значит, $2i\hbar\varepsilon_{jkl}\hat{r}_k\hat{r}_l = 2i\hbar\varepsilon_{jlk}\hat{r}_k\hat{r}_l$. Получается, что единственный вариант, при котором это выполняется – когда это выражение равно нулю.

$$[\hat{L}_j, \hat{r}^2] = [\hat{L}_j, \hat{r}_k\hat{r}_k] = 0$$

С импульсом аналогично:

$$[\hat{L}_j, \hat{p}^2] = 2i\hbar\varepsilon_{jkl}\hat{p}_k\hat{p}_l = 0$$

Вы удивитесь, но то же самое работает и для момента импульса:

$$[\hat{L}_j, \hat{L}^2] = 2i\hbar\varepsilon_{jkl}\hat{L}_k\hat{L}_l = 0$$

Последнее выражение играет важную роль, так как это значит, что в системе могут быть одновременно определены и компонента момента импульса, и его квадрат.



Может возникнуть вопрос: для чего мы искали коммутатор с квадратом импульса и координаты? Оказывается, благодаря этому коммутационному соотношению мы можем получить, что в случае центрально-симметричного потенциала гамильтониан коммутирует с каждой из компонент и квадратом момента импульса. Действительно, гамильтониан равен:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2M} + V(r).$$

Коммутация с квадратами как раз показывает, что $[\hat{H}, \hat{L}_i] = 0$ и $[\hat{H}, \hat{L}^2] = 0$.

Теперь выразим уравнение Шрёдингера через момент импульса. Для этого нам понадобится связь квадрата момента импульса с операторами импульса и координаты:

$$\hat{L}^2 = \hat{r}^2\hat{p}^2 - (\hat{\vec{r}}\hat{\vec{p}})^2 + i\hbar\hat{\vec{r}}\hat{\vec{p}}.$$

Вывести это уравнение можно, если честно расписать \hat{L}^2 как $\hat{L}_j\hat{L}_k = (\varepsilon_{jlm}\hat{r}_l\hat{p}_m)(\varepsilon_{knq}\hat{r}_n\hat{p}_q)$. Умножив стационарное уравнение Шрёдингера на \hat{r}^2 и заменив $\hat{r}^2\hat{p}^2$ на $\hat{L}^2 + (\hat{\vec{r}}\hat{\vec{p}})^2 - i\hbar\hat{\vec{r}}\hat{\vec{p}}$, получим:

$$\left[\frac{(\hat{\vec{r}}\hat{\vec{p}})^2 - i\hbar\hat{\vec{r}}\hat{\vec{p}}}{2M} + \frac{\hat{L}^2}{2M} + \hat{r}^2V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = \hat{r}^2E\psi(\vec{r})$$

Можно заметить, что у нас разделились переменные: первое слагаемое влияет только на радиальную часть, второе – на вращательную, третье тоже на радиальную, если потенциал вращательно инвариантен, т.е. $V(\vec{r}) = V(r)$. Но это пока не показано строго, так как мы работаем в сферических координатах, а значит, должны перейти к ним.

Упражнение №23

Найдите представление операторов \hat{L}^2 , $\hat{r}\hat{p}$ и $(\hat{r}\hat{p})^2$ в сферических координатах.

Расписав компоненту \hat{L}_j в координатном базисе, получим:

$$\hat{L}_j = -i\hbar\varepsilon_{jkl}r_k\frac{\partial}{\partial r_l}$$

Далее я подробно буду расписывать случай только для координаты z , для всех остальных вариантов расчёты можно провести по аналогии.

Запишем дифференциал в новых координатах:

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial \theta}\frac{\partial \theta}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial \phi}\frac{\partial \phi}{\partial z}$$

Выразим переменные сферических координат через переменные декартовых:

$$\begin{cases} x = r \sin \theta \cos \phi \\ y = r \sin \theta \sin \phi \\ z = r \cos \theta \end{cases} \implies \begin{cases} r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \\ \theta = \arccos\left(\frac{z}{r}\right) \\ \phi = \arctg\left(\frac{y}{x}\right) \end{cases}$$

Тогда, честно дифференцируя и выражая результат в сферических координатах, найдём:

$$\begin{aligned} \frac{\partial r}{\partial z} &= \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} = \cos \theta. \\ \frac{\partial \theta}{\partial z} &= \frac{-(x^2 + y^2)}{\sqrt{\frac{x^2 + y^2}{x^2 + y^2 + z^2}}(x^2 + y^2 + z^2)^{3/2}} = -\frac{r^2 \sin^2 \theta}{\sqrt{\frac{r^2 \sin^2 \theta}{r^2}}r^3} = -\frac{\sin \theta}{r} \\ \frac{\partial \phi}{\partial z} &= 0 \end{aligned}$$

Выпишу значение производных по оставшимся компонентам, чтобы читатели могли проверить себя:

$$\begin{aligned} \frac{\partial r}{\partial x} &= \sin \theta \cos \phi; \quad \frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{1}{r} \cos \theta \cos \phi; \quad \frac{\partial \phi}{\partial x} = -\frac{1}{r} \frac{\sin \phi}{\sin \theta} \\ \frac{\partial r}{\partial y} &= \sin \theta \sin \phi; \quad \frac{\partial \theta}{\partial y} = \frac{1}{r} \cos \theta \sin \phi; \quad \frac{\partial \phi}{\partial y} = \frac{1}{r} \frac{\cos \phi}{\sin \theta} \end{aligned}$$

Теперь, зная все необходимые частные производные, подставим их в изначальное уравнение и получим:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \sin \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{1}{r} \frac{\sin \phi}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \sin \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r} \frac{\cos \phi}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \\ \frac{\partial}{\partial z} &= \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \end{aligned}$$

Подставим эти значения в компоненты момента импульса:

$$\begin{aligned}\hat{L}_z &= -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) = \\ &= -i\hbar\left(r\sin\theta\cos\phi\left(\sin\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\cos\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{r}\frac{\cos\phi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) - \dots\right)\end{aligned}$$

Можно заметить, что $r\sin^2\theta\cos\phi\sin\phi\frac{\partial}{\partial r} - r\sin^2\theta\cos\phi\sin\phi\frac{\partial}{\partial r} = 0$. Второй член, аналогично, сократится. Тогда можно записать:

$$\begin{aligned}\hat{L}_z &= -i\hbar\left(r\sin\theta\cos\phi\frac{1}{r}\frac{\cos\phi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} + r\sin\theta\sin\phi\frac{1}{r}\frac{\sin\phi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) = \\ &= -i\hbar(\cos^2\phi + \sin^2\phi)\frac{\partial}{\partial\phi} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\end{aligned}$$

Аналогично для других компонент:

$$\begin{aligned}\hat{L}_x &= i\hbar\left(\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \operatorname{ctg}\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \\ \hat{L}_y &= i\hbar\left(-\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \operatorname{ctg}\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\end{aligned}$$

Далее найдём квадрат момента импульса, записав его как: $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$:

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]$$

Используя производные в сферических координатах, найдём операторы $\hat{r}\hat{p}$ и $(\hat{r}\hat{p})^2$:

$$\begin{aligned}\hat{r}\hat{p} &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial r} \\ (\hat{r}\hat{p})^2 &= -\hbar^2\left(r^2\frac{\partial^2}{\partial r^2} + r\frac{\partial}{\partial r}\right)\end{aligned}$$

Посмотрев на получившиеся операторы, сразу можно заметить, что наше предположение о разделении переменных оказалось верным. Действительно, операторы $\hat{r}\hat{p}$ и $(\hat{r}\hat{p})^2$ содержат в себе только радиальную часть, а \hat{L}^2 , наоборот, зависит только от углов. Также мы показали, что оператор \hat{L}^2 коммутирует с гамильтонианом.

Казалось бы, ну и отлично, давайте будем искать решения уравнения Шрёдингера в собственных состояниях квадрата момента импульса. Однако на деле не всё так просто. Проблема в том, что оператор \hat{L}^2 , как мы выяснили ранее, локализован в \mathbf{Y} . Это значит, что собственные состояния эквивалентного для него оператора во всём пространстве $\hat{1} \otimes \hat{L}^2$ имеют собственные состояния $|R\rangle \otimes |\lambda\rangle$, где $|\lambda\rangle$ – собственные состояния оператора \hat{L}^2 в \mathbf{Y} , а $|R\rangle$ – произвольное (!) состояние в \mathbf{V}_r . Эта произвольность как раз и мешает нам находить решение в таком виде – сильная вырожденность собственных значений оператора $\hat{1} \otimes \hat{L}^2$ не даёт нам уверенности в том, что случайно выбранное состояние вида $|R\rangle \otimes |\lambda\rangle$ будет собственным для гамильтониана.

Получается, из всего многообразия таких состояний нам нужно отобрать те, которые являются собственными для гамильтониана. Для этого подставим найденные в сферических координатах операторы в уравнение Шрёдингера, запишем волновую функцию как $\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y_\lambda(\theta, \phi)$ и заменим оператор \hat{L}^2 на его собственное значение:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\left(r^2\frac{\partial^2}{\partial r^2} + 2r\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\lambda}{2M} + r^2V(r)\right]R(r)Y_\lambda(\theta, \phi) = r^2ER(r)Y_\lambda(\theta, \phi).$$

Тогда, воспользовавшись тем, что

$$r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} + 2r \frac{\partial}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)$$

и сокращая $Y_\lambda(\theta, \phi)$, получим так называемое *радиальное уравнение*:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2Mr^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\lambda}{2Mr^2} + V(r) \right] R(r) = ER(r).$$

Какой полезный вывод можно сделать? Оказывается, если радиальная часть волновой функции $\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y_\lambda(\theta, \phi)$ удовлетворяет радиальному уравнению, то эта волновая функция является собственной для гамильтониана с собственным значением E . Таким образом, мы разделили задачу на две: нахождение собственных значений \hat{L}^2 (приведение к диагональному виду) и решение диффура. Первую часть задачу достаточно решить один раз. Этим мы и займёмся в следующем семинаре.

Семинар VIII

Собственные значения момента импульса

Предыдущий семинар мы закончили на радиальном уравнении:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2Mr^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\lambda}{2Mr^2} + V(r) \right] R(r) = ER(r).$$

Напомню, что сейчас мы хотим привести оператор \hat{L}^2 к диагональному виду. Однако тут возникает проблема: собственные значения λ в \mathbf{Y} вырождены. Соответственно, просто найдя λ мы не сможем однозначно идентифицировать для неё собственное состояние $|\lambda\rangle$, так как каждому λ будет соответствовать линейное подпространство. Для того чтобы решить проблему, мы добавим к нашей системе оператор, коммутирующий с оператором \hat{L}^2 . Тогда в каждом вырожденном подпространстве λ мы сможем определить ортонормированный собственный базис, так как у коммутирующих операторов общий набор собственных состояний.

Оказывается, что для такого решения очень удачно подходит оператор \hat{L}_z , собственные значения которого мы обозначим через μ . Тогда задача сводится к поиску $|\lambda\mu\rangle$, т.е. собственных состояний для операторов \hat{L}^2 и \hat{L}_z .

$$\begin{cases} \hat{L}^2 |\lambda\mu\rangle = \lambda |\lambda\mu\rangle \\ \hat{L}_z |\lambda\mu\rangle = \mu |\lambda\mu\rangle \end{cases}$$

В целом, можно получить волновые функции состояния $|\lambda\mu\rangle$, честно решив эту систему уравнений. Однако мы пойдём более квантовомеханическим путём. Подход будет похож на тот, который мы использовали при анализе осциллятора в шестом семинаре. Давайте введём *повышающий и понижающий* операторы следующим образом:

$$\begin{aligned} \hat{L}_+ &= \hat{L}_x + i\hat{L}_y \\ \hat{L}_- &= \hat{L}_x - i\hat{L}_y \end{aligned}$$

Некоторые особенности этих операторов:

- $\hat{L}_+ = \hat{L}_-^\dagger$
- $[\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] = \pm\hbar\hat{L}_\pm$, $[\hat{L}^2, \hat{L}_\pm] = 0$, $[\hat{L}_+, \hat{L}_-] = 2\hbar\hat{L}_z$
- $\hat{L}^2 = \hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_z^2 - \hbar\hat{L}_z$

Используя полученные коммутационные соотношения, покажем, что состояния $\hat{L}_\pm |\lambda\mu\rangle$ являются собственными для операторов \hat{L}^2 и \hat{L}_z одновременно, с собственными значениями λ и $\mu \pm \hbar$ соответственно. Действительно, подействовав оператором \hat{L}^2 на состояние $\hat{L}_\pm |\lambda\mu\rangle$, получим:

$$\hat{L}^2 \hat{L}_\pm |\lambda\mu\rangle = \hat{L}_\pm \hat{L}^2 |\lambda\mu\rangle = \lambda \hat{L}_\pm |\lambda\mu\rangle$$

Теперь, подействуем оператором \hat{L}_z :

$$\hat{L}_z \hat{L}_\pm |\lambda\mu\rangle = (\hat{L}_\pm \hat{L}_z \pm \hbar \hat{L}_\pm) |\lambda\mu\rangle = (\mu \hat{L}_\pm \pm \hbar \hat{L}_\pm) |\lambda\mu\rangle = (\mu \pm \hbar) \hat{L}_\pm |\lambda\mu\rangle$$

Значит, состояние после действия понижающего или повышающего оператора действительно является собственным для \hat{L}^2 и \hat{L}_z .

Продолжим строить рассуждения в том же порядке, как и с операторами рождения и уничтожения. Запишем, как оператор \hat{L}_{\pm} действует на состояние $|\lambda\mu\rangle$:

$$\hat{L}_{\pm}|\lambda\mu\rangle = \sqrt{\lambda - \mu(\mu \pm \hbar)} |\lambda, \mu \pm \hbar\rangle.$$

В очередной раз операторы оправдывают своё название. Как видите, мы либо повышаем значение μ на константу \hbar , либо понижаем её на то же значение. Но что это за значение? Давайте разбираться.

Для начала заметим, что выполняется неравенство $\lambda \geq \mu^2$. В самом деле, для оператора $\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2$ состояние $|\lambda\mu\rangle$ является собственным с собственным значением $\lambda - \mu^2$. Но, в то же время, оператор можно переписать как $\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2$ (так как $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$). Этот оператор неотрицательный и имеет неотрицательные собственные значения. Значит, $\lambda - \mu^2 \geq 0 \Rightarrow \lambda \geq \mu^2$.

Используя оператор повышения, мы можем поднять состояние $|\lambda, \mu + j\hbar\rangle$, где j - целое неотрицательное число. Но теперь мы знаем, что $(\mu + j\hbar)^2$ должно быть не больше λ . Тогда, как и в случае с понижающим оператором, нам нужно поставить условие, что, дойдя до определенного $j = j_0$, у нас получится уравнение $\hat{L}_+|\lambda, \mu + j_0\hbar\rangle = 0$. Найдём, при каком λ это выполняется:

$$\begin{aligned} \hat{L}_+|\lambda, \mu + j_0\hbar\rangle &= \sqrt{\lambda - (\mu + j_0\hbar)(\mu + (j_0 + 1)\hbar)} |\lambda, \mu + (j_0 + 1)\hbar\rangle = 0 \Rightarrow \\ &\Rightarrow \lambda = (\mu + j_0\hbar)(\mu + \hbar(j_0 + 1)) \end{aligned}$$

Аналогично, для понижающего оператора должно выполняться $\hat{L}_-|\lambda, \mu - k_0\hbar\rangle = 0$. Тогда $\lambda = (\mu - k_0\hbar)(\mu - \hbar(k_0 + 1))$ и должно выполняться уравнение:

$$(\mu + j_0\hbar)(\mu + \hbar(j_0 + 1)) = (\mu - k_0\hbar)(\mu - \hbar(k_0 + 1))$$

Если для удобства обозначения мы сделаем замену $\mu + j_0\hbar = x$ и $\mu - (k_0 + 1)\hbar = y$, то уравнение примет вид:

$$x(x + \hbar) = y(y + \hbar)$$

Решаем это квадратное уравнение относительно y и учитываем, что нам подходит только тот корень, который удовлетворяет условию $x > y$. Получим $y = -(x + \hbar)$ или:

$$\mu - (k_0 + 1)\hbar = -\mu - (j_0 + 1)\hbar \Rightarrow \mu = \frac{k_0 - j_0}{2}\hbar.$$

Определим значение λ , подставив μ в уравнение, полученное выше:

$$\lambda = (\mu + j_0\hbar)(\mu + \hbar(j_0 + 1)) = \frac{k_0 + j_0}{2} \left(\frac{k_0 + j_0}{2} + 1 \right) \hbar^2$$

Сейчас мы определим два важных значения, с которыми вы уже не один раз сталкивались ещё со школы. Пусть $l \equiv (k_0 + j_0)/2$ - будем называть его *орбитальным квантовым числом*. Его значения лежат в множестве $\{n/2, n \in \mathbb{Z}_+\}$, то есть являются целочисленными или полуцелыми* неотрицательными числами $(0, 1/2, 1, \dots)$.

Запишем собственное значение λ через l :

$$\lambda = \hbar^2(l + 1)l$$

*Отмечу, что пока не было доказано, что l - только целочисленное значение, хотя при рассмотрении атомов мы пользовались только целочисленными орбитальными числами. Объяснение этой особенности будет рассмотрено далее.

То же самое сделаем и с собственным значением μ :

$$\mu = (l - j_0)\hbar = (-l + k_0)\hbar$$

Пусть $m \equiv \mu/\hbar$. Мы видим, что значение m зависит от l и определяется в диапазоне от $-l$ до l с шагом единица. Действительно, по условию $m^2 \leq l(l+1)$. Так как j_0 и k_0 – целочисленные неотрицательные значения, то шаг может происходить только на единицу. Значит, крайние значения для m – это l и $-l$, иначе неравенство нарушается. Число m мы будем называть *магнитным квантовым числом*. С ним вы тоже уже встречались.

Используя новые обозначения, перепишем полученное ранее действие операторов \hat{L}_\pm :

$$\hat{L}_\pm |lm\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m\pm 1)} |l, m\pm 1\rangle = \hbar\sqrt{(l\mp m)(l\pm m+1)} |l, m\pm 1\rangle$$

Давайте найдём матричные элементы всех новых операторов в общем виде, а затем решим упражнение для конкретного орбитального числа. Начнём с самого простого оператора – \hat{L}^2 . Напомню, что матричный элемент – это конструкция вида $\langle\psi|\hat{A}|\psi'\rangle$. В нашем случае $\langle lm|\hat{L}^2|l'm'\rangle$. Итак:

$$\langle lm|\hat{L}^2|l'm'\rangle = \hbar^2 l'(l'+1) \langle lm|l'm'\rangle = \hbar^2 l'(l'+1) \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

Далее, для оператора \hat{L}_z :

$$\langle lm|\hat{L}_z|l'm'\rangle = \hbar m' \langle lm|l'm'\rangle = \hbar m' \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

Для повышающего и понижающего мы уже знаем действие на состояние $|lm\rangle$, так что найти матричный элемент не составит проблемы:

$$\langle lm|\hat{L}_\pm|l'm'\rangle = \hbar\sqrt{l'(l'+1) - m'(m'\pm 1)} \delta_{ll'} \delta_{m, m'\pm 1}$$

Операторы \hat{L}_x и \hat{L}_y выражаются через понижающие и повышающие операторы по определению:

$$\begin{aligned}\hat{L}_x &= \frac{\hat{L}_+ + \hat{L}_-}{2}; \\ \hat{L}_y &= \frac{\hat{L}_+ - \hat{L}_-}{2i}\end{aligned}$$

Тогда, подставляя их в такой форме в выражение для матричных элементов, получим:

$$\begin{aligned}\langle lm|\hat{L}_x|l'm'\rangle &= \frac{\hbar}{2} \left(\sqrt{l'(l'+1) - m'(m'+1)} \delta_{ll'} \delta_{m, m'+1} + \sqrt{l'(l'+1) - m'(m'-1)} \delta_{ll'} \delta_{m, m'-1} \right) \\ \langle lm|\hat{L}_y|l'm'\rangle &= \frac{\hbar}{2i} \left(\sqrt{l'(l'+1) - m'(m'+1)} \delta_{ll'} \delta_{m, m'+1} - \sqrt{l'(l'+1) - m'(m'-1)} \delta_{ll'} \delta_{m, m'-1} \right)\end{aligned}$$

Теперь, зная все матричные элементы, выполним следующее упражнение.

Упражнение №24

Постройте матрицы операторов момента импульса \hat{L}_x , \hat{L}_y , \hat{L}_z , а также \hat{L}^2 , \hat{L}_+ и \hat{L}_- для квантовой системы с орбитальным числом $l = 1$. Как выглядят собственные вектора операторов \hat{L}^2 и \hat{L}_z ?

Всю “сложную” часть мы уже проделали, осталось только подставить значение $l = 1$ в полученные выше формулы:

$$\hat{L}^2 \simeq 2\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad \hat{L}_z \simeq \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

В остальных операторах значения уйдут с главной диагонали, т.к. в дельтах индексы m отличаются на единицу:

$$\begin{aligned} \hat{L}_+ &\simeq \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \hat{L}_x &\simeq \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \hat{L}_- &\simeq \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} & \hat{L}_y &\simeq \frac{i\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Так как матрицы операторов \hat{L}^2 и \hat{L}_z диагональны, найти их собственные вектора несложно – это просто базисные вектора $(1 \ 0 \ 0)^T$, $(0 \ 1 \ 0)^T$ и $(0 \ 0 \ 1)^T$.

Собственные состояния момента импульса

Процесс нахождения собственных функций, к сожалению, не получится свести к определению новых операторов и чисто квантово-механическому подходу. Поэтому рассуждения и поиск волновых функций я вынес в [Приложение А](#). Здесь же я приведу только ответ.

Итак, волновая функция состояния $|lm\rangle$ задаётся сферическими гармониками:

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \mathcal{N}_l \sqrt{\frac{(l+m)!}{(l-m)!}} \frac{1}{\sin^m \theta} \frac{d^{l-m}}{d(\cos \theta)^{l-m}} \sin^{2l} \theta e^{im\phi},$$

где $\mathcal{N}_l = (-1)^l \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \frac{1}{2^l l!}$ – коэффициент нормировки.

Вычислим явно сферические гармоники для $l = 0$ и $l = 1$:

$$\begin{aligned} Y_0^0(\theta, \phi) &= (-1)^0 \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \sqrt{\frac{0!}{0!}} \sin^0 \theta \frac{d^0}{d(\cos \theta)^0} \sin^0 \theta e^0 = \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \\ Y_1^1(\theta, \phi) &= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\phi} \\ Y_1^0(\theta, \phi) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \\ Y_1^{-1}(\theta, \phi) &= \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\phi} \end{aligned}$$

Обсудим вопрос, почему l может быть только целым. Действительно, если l может принимать полуцелые значения, значит m также может быть полуцелым. Тогда, множитель $e^{im\phi}$ даст нам ситуацию, в которой $\psi(r, \theta, \phi) = -\psi(r, \theta, \phi + 2\pi)$. А это невозможно, так как мы работаем в координатном базисе. Значит, l в радиально-симметричном поле должна принимать только целые значения.

Спин

Чтобы рассказать про спин подробно, нужно уделять этому целую лекцию (а то и две), поэтому здесь мы ограничимся самым необходимым. Если хотите узнать про спин больше, прочитайте [Приложение В](#). Там я постарался раскрыть спин с двух сторон: со стороны чистой математики и со стороны физики. Думаю, его должно быть достаточно для более полного понимания, что же такое этот спин и как с ним обращаться.

Очень упрощая, можно сказать, что спин – это собственный магнитный момент частицы. Это не значит, что она крутится – просто это экспериментальный факт, который был подтвержден в огромном количестве работ. Стоит воспринимать спин как естественную характеристику частицы.

Итак, теперь общее вращение частицы будет задаваться двумя слагаемыми: $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$, где \hat{S} – спиновый оператор. Его особенность в том, что он коммутирует с операторами координаты и импульса, а значит, никак не действует на них.

$$[\hat{S}_j, \hat{x}_k] = 0, \quad [\hat{S}_j, \hat{p}_k] = 0, \quad [\hat{S}_j, \hat{L}_k] = 0.$$

С самим собой оператор \hat{S} коммутирует так же, как и оператор момента импульса.

$$[\hat{S}_j, \hat{S}_k] = i\hbar\varepsilon_{jkl}\hat{S}_l$$

Так же, как и у операторов момента импульса, у состояний спина есть повышающие и понижающие операторы.

$$\hat{S}_{\pm} |s, m_s\rangle = \sqrt{s(s+1) + m_s(m_s \pm 1)} |s, m_s \pm 1\rangle$$

И точно так же должны выполняться следующие уравнения:

$$\hat{S}^2 |s, m_s\rangle = \hbar^2 s(s+1) |s, m_s\rangle, \quad \hat{S}_z |s, m_s\rangle = \hbar m_s |s, m_s\rangle$$

Аналогично для проекций на другие оси:

$$\hat{S}_x = \frac{\hat{S}_+ + \hat{S}_-}{2};$$
$$\hat{S}_y = \frac{\hat{S}_+ - \hat{S}_-}{2i}$$

Соответственно, как и в случае момента импульса, у спина будет проекция на ось Z . Обозначаться она будет m_s . Ведёт она себя также, как и m – её значения лежат во множестве $\{-s, -s+1, \dots, s\}$. Разница в том, что спин может принимать полуцелые значения – значит, и проекция может быть полуцелая.

Давайте рассмотрим два самых основных примера – $S = 0$ и $S = 1/2$.

- $S = 0$. Тогда и проекция спина на ось z тоже равна нулю: $S_z = 0$. Значит $\hat{S} = \hat{1}$ и волновые функции будут такими, какими мы их знали до того, как появилась внутренняя степень свободы. Примеры частиц с нулевым спином: Бозон Хиггса, π -мезон.
- $S = 1/2$. Проекция спина на ось теперь имеет две компоненты: $S_z = \{1/2, -1/2\}$. Обозначим состояние спина “вверх” (в смысле положительной проекции на z) как

$|\uparrow\rangle = |1/2, 1/2\rangle$, а состояние “вниз” – $|\downarrow\rangle = |1/2, -1/2\rangle$. Посмотрим, как на эти состояния действуют разные операторы.

$$\begin{aligned} S_z |\uparrow\rangle &= \hbar/2 |\uparrow\rangle & S_z |\downarrow\rangle &= -\hbar/2 |\downarrow\rangle \\ S_+ |\uparrow\rangle &= 0 & S_+ |\downarrow\rangle &= \hbar |\uparrow\rangle \\ S_- |\uparrow\rangle &= -\hbar |\downarrow\rangle & S_- |\downarrow\rangle &= 0 \\ S_x |\uparrow\rangle &= \hbar/2 |\downarrow\rangle & S_y |\uparrow\rangle &= -i\hbar/2 |\downarrow\rangle \end{aligned}$$

Зная, как действуют операторы на состояния вверх и вниз, найдём их матрицы:

$$\hat{S}_i \simeq \begin{pmatrix} \langle\uparrow|\hat{S}_i|\uparrow\rangle & \langle\uparrow|\hat{S}_i|\downarrow\rangle \\ \langle\downarrow|\hat{S}_i|\uparrow\rangle & \langle\downarrow|\hat{S}_i|\downarrow\rangle \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_i,$$

где σ_i - матрицы Паули. Поговорим про них подробнее, как только найдём, чему они равны. Итак:

$$\begin{aligned} S_x &= \frac{\hbar}{2}\sigma_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \\ S_y &= \frac{\hbar}{2}\sigma_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \\ S_z &= \frac{\hbar}{2}\sigma_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Мы видим, что матрицы Паули – унитарные и эрмитовые матрицы, которыми можно представить безразмерный оператор спина. Давайте решим несколько упражнений, чтобы подробнее разобраться с их свойствами.

Упражнение №25

Докажите справедливость следующих соотношений для матриц Паули:

$$\hat{\sigma}_k \hat{\sigma}_l = \delta_{kl} + i\varepsilon_{klm} \hat{\sigma}_m$$

$$(\hat{\sigma}\mathbf{a})(\hat{\sigma}\mathbf{b}) = (\mathbf{a}\mathbf{b}) + i(\boldsymbol{\sigma}[\mathbf{a} \times \mathbf{b}])$$

Ещё раз выпишем явный вид матриц паули для спина $S = 1/2$:

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Данные матрицы обладают следующими свойствами:

- $\hat{\sigma}^2 = \hat{1}$,
- $[\hat{\sigma}_k, \hat{\sigma}_l] = 2i\varepsilon_{klm}\hat{\sigma}_m$,
- $\{\hat{\sigma}_k, \hat{\sigma}_l\} = 2\delta_{kl}$, где $\{\hat{\sigma}_k, \hat{\sigma}_l\} = \hat{\sigma}_k\hat{\sigma}_l + \hat{\sigma}_l\hat{\sigma}_k$ – антикоммутатор.

Пользуясь данными свойствами, можем записать:

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}_k \hat{\sigma}_l &= \frac{1}{2}([\hat{\sigma}_k, \hat{\sigma}_l] + \{\hat{\sigma}_k + \hat{\sigma}_l\}) = \\ &= \frac{1}{2}(2i\varepsilon_{klm}\hat{\sigma}_m + 2\delta_{kl}) = \\ &= \delta_{kl} + i\varepsilon_{klm}\hat{\sigma}_m\end{aligned}$$

Покажем справедливость второго соотношения:

$$\begin{aligned}(\hat{\sigma}\mathbf{a})(\hat{\sigma}\mathbf{b}) &= \hat{\sigma}_k a_k \hat{\sigma}_l b_l = \hat{\sigma}_k \hat{\sigma}_l a_k b_l = \\ &= (i\varepsilon_{klm}\hat{\sigma}_m + \delta_{kl})a_k b_l = \\ &= i\varepsilon_{klm}\hat{\sigma}_m a_k b_l + a_k b_k = \\ &= i(\hat{\sigma}[\mathbf{a} \times \mathbf{b}]) + (\mathbf{a}\mathbf{b})\end{aligned}$$



Упражнение №26

Найдите собственные значения и собственные векторы спинового оператора $\hat{\sigma}_n = (\hat{\vec{\sigma}}, \vec{n})$, где \vec{n} – единичный вектор с составляющими:

$$\vec{n} = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)^T$$

Обсудите случаи, когда вектор \vec{n} направлен вдоль осей x , y и z .

Запишем скалярное произведение вектора матриц паули на вектор \vec{n} :

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}_n &= (\hat{\vec{\sigma}}, \vec{n}) = \hat{\sigma}_x n_x + \hat{\sigma}_y n_y + \hat{\sigma}_z n_z = \\ &= \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta (\cos \phi - i \sin \phi) \\ \sin \theta (\cos \phi + i \sin \phi) & -\cos \theta \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} \cos \theta & e^{-i\phi} \sin \theta \\ e^{i\phi} \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Теперь, зная явный вид оператора $\hat{\sigma}_n$, можем решить характеристическое уравнение и найти собственные значения и векторы:

$$\begin{aligned}|\hat{\sigma}_n - \lambda E| &= \begin{vmatrix} \cos \theta - \lambda & e^{-i\phi} \sin \theta \\ e^{i\phi} \sin \theta & -\cos \theta - \lambda \end{vmatrix} = \\ &= \lambda^2 - 1 = 0 \implies \lambda = \pm 1\end{aligned}$$

Соответствующие этим собственным значениям собственные функции (нормированные на единицу) имеют вид:

$$\Psi_1 = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad \Psi_{-1} = \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

Вектор-функции, элементы которых определяют состояние спина у частиц, мы будем называть *спинорами*. Линейная комбинация функций Ψ_1 и Ψ_{-1} как раз и образует спинор. Запомните это обозначение, в будущем оно нам ещё понадобится. Рассмотрим случаи, когда \vec{n} направлен вдоль осей x , y и z :

1. $\vec{n} = (1, 0, 0) \implies \theta = \frac{\pi}{2}, \phi = 0$. Подставляя данные значения в найденные собственные функции, получим $\Psi_1 = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix}, \Psi_{-1} = \begin{pmatrix} -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix}$
2. $\vec{n} = (0, 1, 0) \implies \theta = \phi = \frac{\pi}{2}$, откуда $\Psi_1 = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ i\frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix}, \Psi_{-1} = \begin{pmatrix} -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ i\frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix}$
3. $\vec{n} = (0, 0, 1) \implies \theta = 0, \phi$ любой, откуда $\Psi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \Psi_{-1} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

Последний результат особенно важен, так как с помощью него мы будем обозначать волновые функции введённых выше состояний вверх $|\uparrow\rangle$ и вниз $|\downarrow\rangle$.

Теперь, когда мы разобрались с матрицами Паули, можно порешать упражнения про спин.

Упражнение №27

Пусть электрон находится в состоянии с проекцией спина на ось z , равной $1/2$. Найдите вероятность того, что проекция спина этого электрона на направление n равна $1/2$ (или $-1/2$).

Из прошлого упражнения мы знаем, как выглядит волновая функция для спина вверх: $\psi_{1/2} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}^T$. Также мы знаем базисные векторы для электрона, спин которого равен $1/2$:

$$\Psi_1 = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \Psi_{-1} = \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

Разложим исходное состояние $\psi_{1/2}$ по этим базисным векторам:

$$\psi_{1/2} = (\Psi_1^\dagger \psi_{1/2}) \Psi_1 + (\Psi_{-1}^\dagger \psi_{1/2}) \Psi_{-1}$$

Заметим, что $\Psi_1^\dagger = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & e^{-i\phi} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \Psi_{-1}^\dagger = \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} & e^{i\phi} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$, откуда

$$\begin{aligned} \psi_{1/2} &= \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & e^{-i\phi} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \Psi_1 + \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} & e^{i\phi} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \Psi_{-1} = \\ &= \cos \frac{\theta}{2} \Psi_1 - \sin \frac{\theta}{2} \Psi_{-1} \end{aligned}$$

Как мы помним, если у нас есть разложение состояния, то его вероятность оказаться в каком-то из состояний есть модуль квадрата коэффициента, стоящего при этом состоянии. Тогда, запишем итоговые вероятности:

$$P(S_z = 1/2) = \cos^2 \frac{\theta}{2}, \quad P(S_z = -1/2) = \sin^2 \frac{\theta}{2}$$

Семинар IX

Атом водорода

Давайте применим полученные нами знания на практике. Попробуем решить радиальное уравнение для атома водорода. В атоме водорода электрон движется в электростатическом потенциале, создаваемом тяжелым ядром. Потенциал имеет следующий вид:

$$V(r) = \frac{e^2}{r}, \text{ где } e - \text{ заряд электрона.}$$

Видим, что потенциал зависит только от r . Это значит, что задача об атоме водорода представляет собой частный случай движения в центральном поле. Из предыдущих семинаров мы знаем, как выглядит волновая функция этой частицы:

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)Y_l^m(\theta, \phi).$$

Что значит первый индекс n – выясним в этом семинаре. Угловая часть нам известна, осталось найти только радиальную часть. Значит, надо решить радиальное уравнение:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2Mr^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} - \frac{e^2}{r} \right] R_{nl}(r) = ER_{nl}(r)$$

Сделаем замену переменной $R_{nl} = U_{nl}(r)/r$ и перепишем уравнение через новую переменную:

$$\begin{aligned} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[r^2 \frac{\partial}{\partial r} R_{nl} \right] &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[r^2 \frac{\partial}{\partial r} \frac{U_{nl}}{r} \right] = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[r^2 \left(\frac{U'_{nl}}{r} - \frac{U_{nl}}{r^2} \right) \right] = \frac{U''_{nl}}{r} \Rightarrow \\ &\Rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} - \frac{e^2}{r} \right] U_{nl}(r) = EU_{nl}(r) \end{aligned}$$

Давайте рассмотрим асимптотики данного уравнения при $r \rightarrow 0$ и $r \rightarrow +\infty$. При $r \rightarrow 0$ доминируют члены с минимальными степенями (максимальными в знаменателе), то есть второй член в квадратных скобках. Перепишем уравнение, оставив только его и производную:

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2} U_{nl}(r) = \frac{l(l+1)}{r^2} U_{nl}(r)$$

Это уравнение Коши-Эйлера (решается заменой $U_{nl} = r^\alpha$), его решением будет:

$$U_{nl}(r) = c_1 r^{l+1} + c_2 r^{-l}$$

Второе слагаемое отпадает, чтобы волновая функция не имела разрыва при $r = 0$. Представим эту функцию в виде ряда:

$$U_{nl} = \sum_{j=l+1}^n A_j r^j e^{-\kappa r},$$

где n - некоторое натуральное число и $A_{j+1} \neq 0$ - действительные коэффициенты.

Найдём коэффициент κ , рассмотрев этот ряд и радиальное уравнение при $r \rightarrow +\infty$. В этом случае доминировать будут члены с максимальной степенью, т.е. правая часть уравнения. Найдём производную ряда:

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2} U_{nl}(r) = \sum_{j=l+1}^n A_j [\kappa^2 r^j - 2\kappa j r^{j-1} + j(j-1) r^{j-2}] e^{-\kappa r}.$$

Тогда, подставляя максимальную степень, получим:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}A_n\kappa^2r^ne^{-\kappa r}=EA_nr^ne^{-\kappa r}$$

Отсюда $\kappa = \sqrt{-2ME}/\hbar$.

Теперь найдём коэффициенты A_j и n . Для этого подставим в радиальное уравнение функцию $U_{nl}(r)$ в виде ряда, умножим обе стороны на $2M/\hbar^2$ и выразим энергию через $E = -\hbar^2\kappa^2/2M$. Тогда уравнение преобразуется к следующему виду:

$$2\kappa \sum_{j=l+1}^n jA_jr^{j-1} - \sum_{j=l+1}^n j(j-1)A_jr^{j-2} + l(l+1) \sum_{j=l+1}^n A_jr^{j-2} - \frac{2Me^2}{\hbar^2} \sum_{j=l+1}^n jA_jr^{j-1} = 0$$

Сгруппируем подобные члены и перепишем выражение:

$$\sum_{j=l+1}^n \left(2\kappa j - \frac{2Me^2}{\hbar^2}\right) A_jr^{j-1} + \sum_{j=l+1}^n [l(l+1) - j(j-1)]A_jr^{j-2} = 0$$

Если во второй сумме сделать замену на $j' = j + 1$, можно заметить, что при $j' = l$ выражение внутри суммы равно нулю. Значит, суммирование мы можем начать с $j' = l+1$. Тогда можно переписать:

$$\sum_{j=l+1}^n \left[\left(2\kappa j - \frac{2Me^2}{\hbar^2}\right) A_j + [l(l+1) - j(j+1)]A_{j+1} \right] r^{j-1} = 0$$

Этот многочлен равен нулю при любой степени r тогда, когда выполняется рекурсивное соотношение:

$$\left(2\kappa j - \frac{2}{a}\right) A_j + [l(l+1) - j(j+1)]A_{j+1} = 0$$

Здесь мы ввели новую важную величину $a = \frac{\hbar^2}{Me^2} \sim 0.53\text{\AA}$ - *боровский радиус*. Его физический смысл будет понятен чуть позже.

С коэффициентами A разобрались, осталось найти условие на n . Может появиться вопрос: почему мы вообще решили, что сумма должна быть конечна? Оказывается, что получившийся ряд расходится, если $n = \infty$. Действительно, при больших j $A_j \sim (2\kappa)^j/j!$, и тогда функция имеет вид:

$$U_{nl} \sim \sum_j \frac{(2\kappa r)^j}{j!} e^{-\kappa r} \rightarrow e^{2\kappa r} e^{-\kappa r} = e^{\kappa r}$$

Волновая функция, которая стремится к бесконечности, нефизична. Значит, n должно быть меньше бесконечности. Условие того, что сумма конечна, выполняется, если множитель перед A_j обнуляется при некотором $j = n$. В этом случае:

$$2\kappa n = \frac{2}{a}$$

и все A_j при $j > n$ обнуляются.

Теперь мы обладаем достаточным количеством знаний, чтобы найти радиальные волновые функции для конкретных значений n и l . Попробуем это сделать в виде упражнения.

Упражнение №28

Вычислите радиальные волновые функции $R_{nl}(r)$ атома водорода при а) $n = 1, l = 0$,
б) $n = 2, l = 0$ и в) $n = 2, l = 1$

а) При $n = 1, l = 0$ получим равенство $\kappa = 1/a$. Из всех коэффициентов A_j ненулевым остаётся только A_1 , так как значения j лежат в промежутке от $l+1$ до n . Тогда, вспоминая, что $R_{nl}(r) = U_{nl}(r)/r$, получаем:

$$R_{10}(r) = A_1 e^{-r/a}$$

Получим значение коэффициента A_1 из нормировки волновой функции:

$$\begin{aligned} \int_0^{+\infty} |R_{10}(r)|^2 r^2 dr &= A_1^2 \int_0^{+\infty} e^{-2r/a} r^2 dr = A_1^2 2! \left(\frac{a}{2}\right)^3 = \frac{a^3}{4} A_1^2 = 1 \implies \\ \implies A_1 &= 2a^{-3/2} \end{aligned}$$

Тогда итоговая радиальная часть волновой функции имеет вид:

$$R_{10}(r) = 2a^{-3/2} e^{-r/a}$$

б) При $n = 2, l = 0$ получим $\kappa = \frac{1}{2a}$. В этот раз не будут обнуляться два коэффициента – A_1 и A_2 . В нашем случае они связаны соотношением:

$$\left[2\kappa - \frac{2}{a}\right] A_1 - 2A_2 = 0 \implies A_2 = -\frac{A_1}{2a}$$

Тогда радиальная часть волновой функции имеет вид:

$$R_{20}(r) = A_1 \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-r/2a}$$

Отнормируем:

$$\begin{aligned} \int_0^{+\infty} |R_{20}(r)|^2 r^2 dr &= A_1^2 \int_0^{+\infty} \left(r^2 - \frac{r^3}{a} + \frac{r^4}{4a^2}\right) e^{-r/a} dr = \\ &= A_1^2 a^3 (2! - 3! + 4!/4) = 2A_1^2 a^3 = 1 \implies \\ \implies A_1 &= (2a^3)^{-1/2} \end{aligned}$$

Итоговый вид:

$$R_{20}(r) = (2a^3)^{-1/2} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-r/2a}$$

в) Для последнего случая $n = 2, l = 1$ остаётся только коэффициент A_2 , радиальная волновая функция равна:

$$R_{21}(r) = A_2 r e^{-r/2a}$$

Нормируя, получим:

$$\begin{aligned} \int_0^{+\infty} |R_{21}(r)|^2 r^2 dr &= A_2^2 \int_0^{+\infty} r^4 e^{-r/a} dr = 4! A_2^2 a^5 = 1 \implies \\ \implies A_2 &= (24a^5)^{-1/2} \end{aligned}$$

Итог:

$$R_{21}(r) = (24a^5)^{-1/2} r e^{-r/2a}$$

Посмотрев на получившиеся радиальные волновые функции, становится чуть понятнее, в чём физический смысл боровского радиуса: он определяет характерный размер волновых функций, а также примерный радиус орбитали основного состояния.



Теперь определим энергетический спектр атома водорода. У нас для этого уже всё готово – достаточно соединить два уравнения на κ (выраженное через n и через E):

$$E_n = -\frac{1}{2M} \left(\frac{\hbar}{na} \right)^2 = -\frac{M}{2} \left(\frac{e^2}{n\hbar} \right)^2$$

Заметим, что энергия от l не зависит, только от n . Поэтому n называется *главным квантовым числом*. Оно определяет степень вырождения по остальным квантовым числам.

Давайте вспомним все квантовые числа, которые у нас имеются на данный момент:

- $n \in \mathbb{N}$ - главное квантовое число
- $l \in 0, 1, 2, \dots, n-1$ - орбитальное квантовое число
- $m \in -l, -l+1, \dots, l-1, l$ - магнитное квантовое число.

Получается, что при заданном главном квантовом числе n , вырождение определяется как $2n^2$. Действительно, количество значений l равно n , степень вырождения l в свою очередь $2l+1$. Тогда, посчитав сумму первых n членов арифметической прогрессии, получим $\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2$. Двойка появится, если мы учтём вырождение по спину: он может принимать два значения – $\pm 1/2$.

Упражнение №29

Атом водорода находится в состоянии с главным квантовым числом $n = 2$. Вычислите все возможные проекции дипольного момента атома $\mathbf{d} = \langle \psi | e \hat{\mathbf{r}}_j | \psi' \rangle$

Дипольный момент характеризует переход атома из одного состояния в другое после излучения фотона. Значит, остаться на одном и том же уровне электрон никак не может – если фотон излучился, то энергия должна уменьшиться. Давайте покажем это на одной из проекций. Напомню, что $r_j = (r \sin \theta \cos \phi \ r \sin \theta \sin \phi \ r \cos \theta)^T$, для x , y и z соответственно.

$$\begin{aligned} \langle 2, 0, 0 | z | 2, 0, 0 \rangle &= \int_0^{+\infty} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} (R_{20})^2 (Y_0^0)^2 r \cos \theta r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi = \\ &= \frac{1}{8a^3\pi} \int_0^{+\infty} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \left(1 - \frac{r}{2a}\right)^2 e^{-r/a} r^3 \cos \theta \sin \theta dr d\theta d\phi = \\ &= \left(\int_0^\pi \cos \theta \sin \theta d\theta = 0 \right) = 0 \end{aligned}$$

То же самое будет и со всеми остальными проекциями состояния на самих себя.

Теперь посмотрим на переходы между энергетическими уровнями. Давайте попробуем сделать это в общем виде:

$$\begin{aligned}\langle nlm | \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} | n'l'm' \rangle &= \int_0^{+\infty} r^2 R_{nl}^* R_{n'l'} dr \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} (Y_{l'}^{m'}) (Y_l^m)^* \begin{pmatrix} r \sin \theta \cos \phi \\ r \sin \theta \sin \phi \\ r \cos \theta \end{pmatrix} d\phi = \\ &= I_r(n, l, n', l') I_{\theta\phi}(l, m, l', m'),\end{aligned}$$

где $I_r(n, l, n', l')$ и $I_{\theta\phi}(l, m, l', m')$ - радиальный и угловой интеграл, соответственно:

$$\begin{aligned}I_r(n, l, n', l') &= \int_0^{+\infty} r^3 R_{nl}^* R_{n'l'} dr \\ I_{\theta\phi}(l, m, l', m') &= \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} (Y_{l'}^{m'}) (Y_l^m)^* \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \phi \\ \sin \theta \sin \phi \\ \cos \theta \end{pmatrix} d\phi\end{aligned}$$

Посчитаем сначала радиальные интегралы, так как их всего два.

$$\begin{aligned}I_r(1, 0, 2, 0) &= \int_0^{+\infty} R_{10}^* R_{20} r^3 dr = \int_0^{+\infty} 2a^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a}} (2a)^{-\frac{1}{2}} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-\frac{r}{2a}} r^3 dr = \\ &= \frac{\sqrt{2}}{a^3} \int_0^{+\infty} e^{-\frac{3}{2a}r} r^3 dr - \frac{1}{\sqrt{2}a^4} \int_0^{+\infty} e^{-\frac{3}{2a}r} r^4 dr = \\ &= \left(\int_0^{+\infty} x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}}, n = 0, 1, 2, \dots, a > 0 \right) = -\frac{32\sqrt{2}}{81} a \\ I_r(1, 0, 2, 1) &= \int_0^{+\infty} R_{10}^* R_{21} r^3 dr = \int_0^{+\infty} 2a^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a}} (24a^5)^{-\frac{1}{2}} r e^{-\frac{r}{2a}} r^3 dr = \frac{256}{81\sqrt{6}} a\end{aligned}$$

Теперь посчитаем угловые интегралы. Начнём с того, что убедимся, что переход между уровнями $\langle 1, 0, 0 | \mathbf{r} | 2, 0, 0 \rangle$ невозможен.

$$\begin{aligned}I_{\theta\phi}(0, 0, 0, 0) &= \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} (Y_0^0)^2 \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \phi \\ \sin \theta \sin \phi \\ \cos \theta \end{pmatrix} d\phi = \\ &= \int_0^\pi \begin{pmatrix} \sin^2 \theta \\ \sin^2 \theta \\ \sin \theta \cos \theta \end{pmatrix} d\theta \int_0^{2\pi} \left(\frac{1}{2\sqrt{\pi}}\right)^2 \begin{pmatrix} \cos \phi \\ \sin \phi \\ 1 \end{pmatrix} d\phi = \\ &= \left(\int_0^{2\pi} \cos \phi d\phi = \int_0^{2\pi} \sin \phi d\phi = \int_0^\pi \sin \theta \cos \theta d\theta = 0 \right) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Найдём переходы, которые могут происходить:

$$\begin{aligned}
I_{\theta\phi}(0, 0, 1, 0) &= \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} (Y_1^0)(Y_0^0)^* \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \phi \\ \sin \theta \sin \phi \\ \cos \theta \end{pmatrix} d\phi = \\
&= \frac{\sqrt{3}}{4\pi} \int_0^\pi \begin{pmatrix} \sin^3 \theta \\ \sin^3 \theta \\ \sin^2 \theta \cos \theta \end{pmatrix} d\theta \int_0^{2\pi} \begin{pmatrix} \cos \phi \\ \sin \phi \\ 1 \end{pmatrix} d\phi = \\
&= \frac{\sqrt{3}}{4\pi} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 2/3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 2\pi \end{pmatrix} = \frac{\sqrt{3}}{3} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_{\theta\phi}(0, 0, 1, 1) &= \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} (Y_1^1)(Y_0^0)^* \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \phi \\ \sin \theta \sin \phi \\ \cos \theta \end{pmatrix} d\phi = \\
&= -\frac{\sqrt{3}}{4\pi\sqrt{2}} \int_0^\pi \begin{pmatrix} \sin^2 \theta \cos \theta \\ \sin^2 \theta \cos \theta \\ \sin \theta \cos^2 \theta \end{pmatrix} d\theta \int_0^{2\pi} \begin{pmatrix} e^{i\phi} \cos \phi \\ e^{i\phi} \sin \phi \\ e^{i\phi} \end{pmatrix} d\phi = \\
&= -\frac{\sqrt{3}}{4\pi\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 4/3 \\ 4/3 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \pi \\ i\pi \\ 0 \end{pmatrix} = -\frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_{\theta\phi}(0, 0, 1, -1) &= \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} (Y_0^0)^* (Y_1^{-1}) \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \phi \\ \sin \theta \sin \phi \\ \cos \theta \end{pmatrix} d\phi = \\
&= \frac{\sqrt{3}}{4\sqrt{2}\pi} \int_0^\pi \begin{pmatrix} \sin^3 \theta \\ \sin^3 \theta \\ \sin^2 \theta \cos \theta \end{pmatrix} d\theta \int_0^{2\pi} \begin{pmatrix} e^{-i\phi} \cos \phi \\ e^{-i\phi} \sin \phi \\ e^{-i\phi} \end{pmatrix} d\phi = \\
&= \frac{\sqrt{3}}{4\sqrt{2}\pi} \begin{pmatrix} 4/3 \\ 4/3 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \pi \\ -i\pi \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

В итоге, получим:

$$\begin{aligned}
\langle 1, 0, 0|x|2, 1, \pm 1 \rangle &= \mp \frac{2^7}{3^5} a \\
\langle 1, 0, 0|y|2, 1, \pm 1 \rangle &= \mp i \frac{2^7}{3^5} a \\
\langle 1, 0, 0|y|2, 1, 0 \rangle &= \frac{2^7 \sqrt{2}}{3^5} a
\end{aligned}$$



Семинар X

Решение задач в трёхмерном пространстве

Упражнение №30

Записать уравнение Шрёдингера для двух частиц с массами m_1 и m_2 , взаимодействующих по закону $U(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ в системе центра масс. Какой вид имеет волновая функция $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$?

Запишем уравнение Шрёдингера для двух частиц:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = \hat{H} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t),$$

где гамильтониан \hat{H} в координатном представлении имеет следующий вид:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta_{r_1} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \Delta_{r_2} + U(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$$

Так как мы хотим получить уравнение Шрёдингера в системе центра масс, перейдем от радиус-векторов частиц \vec{r}_1 и \vec{r}_2 к радиус-вектору центра масс \vec{R} и относительному расстоянию \vec{r} :

$$\vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2}, \quad \vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$$

Пользуясь правилами дифференцирования сложной функции, выразим лапласианы Δ_{r_1} , Δ_{r_2} через производные по \vec{R} и \vec{r} :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial r_1} &= \frac{\partial}{\partial R} \frac{\partial r}{\partial r_1} + \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial r_1} = \frac{\partial}{\partial R} \frac{m_1}{m_1 + m_2} + \frac{\partial}{\partial r} \\ \frac{\partial}{\partial r_2} &= \frac{\partial}{\partial R} \frac{m_2}{m_1 + m_2} - \frac{\partial}{\partial r} \end{aligned}$$

Теперь, когда у нас есть эти выражения, можем найти связь между вторыми производными:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial r_1^2} &= \frac{\partial^2}{\partial R^2} \frac{\partial^2 R}{\partial r_1^2} + 2 \frac{\partial^2}{\partial R \partial r} \frac{\partial R \partial r}{\partial r_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} \frac{\partial^2 r}{\partial r_1^2} = \\ &= \frac{\partial^2}{\partial R^2} \frac{m_1^2}{(m_1 + m_2)^2} + 2 \frac{\partial^2}{\partial R \partial r} \frac{m_1}{m_1 + m_2} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} \\ \frac{\partial^2}{\partial r_2^2} &= \frac{\partial^2}{\partial R^2} \frac{\partial^2 R}{\partial r_2^2} + 2 \frac{\partial^2}{\partial R \partial r} \frac{\partial R \partial r}{\partial r_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} \frac{\partial^2 r}{\partial r_2^2} = \\ &= \frac{\partial^2}{\partial R^2} \frac{m_2^2}{(m_1 + m_2)^2} - 2 \frac{\partial^2}{\partial R \partial r} \frac{m_2}{m_1 + m_2} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} \end{aligned}$$

Так как $\partial^2 / \partial r_i^2 = \Delta_{r_i}$, выпишем гамильтониан в новых переменных:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m_1} \left(\frac{m_1^2}{(m_1 + m_2)^2} \Delta_R + 2 \frac{m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial^2}{\partial R \partial r} + \Delta_r \right) - \\ &\quad - \frac{\hbar^2}{2m_2} \left(\frac{m_2^2}{(m_1 + m_2)^2} \Delta_{\vec{R}} - 2 \frac{m_2}{m_1 + m_2} \frac{\partial^2}{\partial R \partial r} + \Delta_{\vec{r}} \right) + U(\vec{r}) = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{m_1 + m_2}{(m_1 + m_2)^2} \Delta_{\vec{R}} + \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \Delta_{\vec{r}} \right) + U(\vec{r}) \end{aligned}$$

Для удобства обозначения введём общую массу системы M и приведённую массу μ , определяемые следующим образом:

$$M = m_1 + m_2, \quad \frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}$$

Тогда, уравнение можно переписать следующим образом:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_R - \frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_r + U(\vec{r})$$

Ввиду того, что система является стационарной, а переменные \vec{R} и \vec{r} в гамильтониане можно разделить, волновая функция будет иметь вид

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \Phi(\vec{R}) \phi(\vec{r}), \quad E = E_{\text{цм}} + E_{\text{отн}},$$

где полная энергия E складывается из энергии движения центра масс $E_{\text{цм}}$ и энергии относительного движения $E_{\text{отн}}$. Функции $\Phi(\vec{R})$ и $\phi(\vec{r})$ подчиняются уравнениям:

$$\begin{aligned} E_{\text{цм}} \Phi(\vec{R}) &= -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\vec{R}} \Phi(\vec{R}), \\ E_{\text{отн}} \phi(\vec{r}) &= \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\vec{r}} + U(\vec{r}) \right] \phi(\vec{r}) \end{aligned}$$

Из первого уравнения следует, что функция $\Phi(\vec{R})$ описывает свободное движение центра масс: $\Phi(\vec{R}) = C e^{\frac{i}{\hbar} \vec{P} \vec{R}}$, характеризующееся полным импульсом P и энергией $E_{\text{цм}} = \vec{P}^2/2M$.



Упражнение №31

Частица массы m движется в потенциале трехмерного изотропного осциллятора:

$$V(r) = \frac{m\omega^2 r^2}{2}$$

Найдите энергии уровней, кратности их вырождения, а также волновые функции стационарных состояний, разделяя переменные в декартовых и сферических координатах.

Запишем уравнение Шрёдингера для трехмерного изотропного осциллятора:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{m\omega^2 r^2}{2} \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

В декартовой системе данная задача была решена в семинаре 6, поэтому сейчас посмотрим, что происходит при использовании сферических координат. Сначала выпишем явный вид лапласиана:

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

В 7 семинаре в упражнении 24 было показано, что оператор квадрата момента импульса \hat{L}^2 выглядит так:

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]$$

Написанное в квадратных скобках очень похоже на последние два слагаемых лапласиана, поэтому можем его немного преобразовать:

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2} = \frac{1}{r^2} \left(2r \frac{\partial}{\partial r} + r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right) - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2} = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2}$$

Поработаем теперь над уравнением Шрёдингера:

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} - \frac{\hbar^2}{mr} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} \psi + \frac{m\omega^2 r^2}{2} \psi - E\psi = 0 \quad \Bigg| \cdot r^2 \implies \\ \implies & -\frac{\hbar^2 r^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} - \frac{\hbar^2 r}{m} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\hat{L}^2}{2m} \psi + \frac{m\omega^2 r^4}{2} \psi - Er^2 \psi = 0 \end{aligned}$$

Внимательно посмотрев на уравнение можно заметить, что волновая функция разделяется на радиальную и угловую части:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r) \cdot Y(\theta, \phi)$$

Подставим преобразованную волновую функцию в уравнение Шрёдингера:

$$\begin{aligned} & -Y \frac{\hbar^2 r^2}{2m} \frac{d^2 R}{dr^2} - Y \frac{\hbar^2 r}{m} \frac{dR}{dr} + R \frac{\hat{L}^2 Y}{2m} + \frac{m\omega^2 r^4}{2} RY - Er^2 RY = 0 \quad \Bigg| \cdot \frac{1}{YR} \implies \\ \implies & -\frac{1}{R} \frac{\hbar^2 r^2}{2m} \frac{d^2 R}{dr^2} - \frac{1}{R} \frac{\hbar^2 r}{m} \frac{dR}{dr} + \frac{1}{Y} \frac{\hat{L}^2 Y}{2m} + \frac{m\omega^2 r^4}{2} - Er^2 = 0 \end{aligned}$$

Для собственных функций оператора квадрата углового момента выполняется $\hat{L}^2 Y(\theta, \phi) = \hbar^2 l(l+1) Y(\theta, \phi)$. Тогда:

$$-\frac{1}{R} \frac{\hbar^2 r^2}{2m} \frac{d^2 R}{dr^2} - \frac{1}{R} \frac{\hbar^2 r}{m} \frac{dR}{dr} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m} + \frac{m\omega^2 r^4}{2} - Er^2 = 0$$

Осталось только уравнение на радиальную часть. Попробуем его преобразовать и решить. Для начала домножим обе части на $-\frac{2m}{\hbar^2 r^2} R$:

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{m^2 \omega^2 r^2}{\hbar^2} R + \frac{2mE}{\hbar^2} R - \frac{l(l+1)}{r^2} R = 0$$

Обезразмерим данное уравнение, перейдя от r к $z = \frac{r}{\rho}$, где $\rho = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ и посмотрим на асимптотическое поведение искомой радиальной функции. Найдём связь между старыми и новыми производными:

$$\frac{d}{dr} = \frac{1}{\rho} \frac{d}{dz}, \quad \frac{d^2}{dr^2} = \frac{1}{\rho^2} \frac{d^2}{dz^2}$$

Подставим их в радиальное уравнение:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\rho^2} \frac{d^2 R}{dz^2} + \frac{1}{\rho^2} \frac{2}{z} \frac{dR}{dz} - \frac{\rho^2 z^2}{\rho^4} R + \frac{2mE}{\hbar^2} R - \frac{l(l+1)}{\rho^2 z^2} R = 0 \quad \Bigg| \cdot \rho^2 \implies \\ \implies & \frac{d^2 R}{dz^2} + \frac{2}{z} \frac{dR}{dz} - z^2 R + \frac{2\rho^2 mE}{\hbar^2} R - \frac{l(l+1)}{z^2} R = 0 \end{aligned}$$

При $z \rightarrow \infty$:

$$\frac{d^2 R}{dz^2} - z^2 R = 0 \implies R(z) \sim e^{-z^2/2}$$

При $z \rightarrow 0$:

$$\frac{d^2 R}{dz^2} + \frac{2}{z} \frac{dR}{dz} - \frac{l(l+1)}{z^2} R = 0$$

Подставляя $R(z) \sim z^s$, получим:

$$\begin{aligned} s(s-1)z^{s-2} + 2sz^{s-2} - l(l+1)z^{s-2} &= 0 \implies \\ \implies s(s+1) &= l(l+1) \implies s = l \implies R(z) \sim z^l \end{aligned}$$

Понимая предельное поведение функции, представим её в виде ряда и посчитаем первую и вторую производные:

$$\begin{aligned} R(z) &= z^l e^{-\frac{z^2}{2}} \sum_{k=0}^{\infty} a_k z^k = \sum_{k=0}^{\infty} a_k z^{l+k} e^{-z^2/2} \\ \frac{dR}{dz} &= \sum_{k=0}^{\infty} a_k [(l+k)z^{l+k-1} - z^{l+k+1}] e^{-z^2/2} \\ \frac{d^2 R}{dz^2} &= \sum_{k=0}^{\infty} a_k [(l+k)(l+k-1)z^{l+k-2} - (2l+2k+1)z^{l+k} + z^{l+k+2}] e^{-z^2/2} \end{aligned}$$

Полученные ряды можно подставлять назад в радиальное уравнение:

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^{\infty} a_k \left[(l+k)(l+k-1)z^{l+k-2} - (2l+2k+1)z^{l+k} + z^{l+k+2} + \right. \\ \left. + 2(l+k)z^{l+k-2} - 2z^{l+k} - z^{l+k+2} - l(l+1)z^{l+k-2} + \frac{2E}{\hbar\omega} z^{l+k} \right] e^{-z^2/2} = 0 \end{aligned}$$

Множитель $e^{-z^2/2}$ является общим для всех слагаемых и положителен для всех действительных чисел, поэтому на него можно сократить. Кроме этого, можем привести подобные и получить достаточно компактное уравнение:

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_k \left[\left(\frac{2E}{\hbar\omega} - 2l - 2k - 3 \right) z^{l+k} + k(2l+k+1)z^{l+k-2} \right] = 0$$

Заметим, что z входит в сумму с двумя разными показателями степени. Анализировать выражение в таком виде не очень удобно, поэтому сведём данную сумму к привычному виду степенного ряда:

$$\begin{aligned} &\sum_{k=0}^{\infty} a_k \left(\frac{2E}{\hbar\omega} - 2l - 2k - 3 \right) z^{l+k} + \sum_{k=0}^{\infty} a_k k(2l+k+1)z^{l+k-2} = \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} a_k \left(\frac{2E}{\hbar\omega} - 2l - 2k - 3 \right) z^{l+k} + \sum_{k=-2}^{\infty} a_{k+2}(2+k)(2l+k+3)z^{l+k} = \\ &= a_0 \cdot 0 + a_1(2l+2)z^{l-1} + \sum_{k=0}^{\infty} \left[a_k \left(\frac{2E}{\hbar\omega} - 2l - 2k - 3 \right) + a_{k+2}(2+k)(2l+k+3) \right] z^{l+k} = 0 \end{aligned}$$

Так как это уравнение должно быть верным для любого z , занулим все коэффициенты данного ряда. В частности, очевидно, что $a_1 = 0$. Для остальных членов запишем:

$$\begin{aligned} a_{k+2}(2+k)(2l+k+3) &= -a_k \left(\frac{2E}{\hbar\omega} - 2l - 2k - 3 \right) \implies \\ \implies a_{k+2} &= -a_k \frac{\frac{2E}{\hbar\omega} - 2l - 2k - 3}{(2+k)(2l+k+3)} \end{aligned}$$

В такой формулировке становится понятно, что все нечетные коэффициенты a_k тождественно равны нулю. Заметим, что при больших k коэффициенты $a_{k+2} \approx -\frac{a_k}{k}$, что делает наш ряд расходящимся. Получается, мы должны “обрубить” ряд, обнуляя все слагаемые, начиная с некоторого $k = n_k = 0, 2, 4, \dots$:

$$\frac{2E}{\hbar\omega} - 2l - 2n_k - 3 = 0$$

$$E = \left(l + n_k + \frac{3}{2}\right) \hbar\omega$$

Видно, что выражение для энергии получилось точно таким же, как и при решении данной задачи в декартовой системе координат. Теперь подставим полученное выражение для энергии назад в рекурсивное соотношение для коэффициентов:

$$a_{k+2} = a_k \frac{2(k - n_k)}{(2 + k)(2l + k + 3)}$$

Наконец, для большего удобства, переобозначим $k \rightarrow 2k$, $n_k \rightarrow 2n_k$ и выпишем решение радиального уравнения вместе с выражением для энергии:

$$a_{k+1} = a_k \frac{k - n}{(1 + k)(l + k + \frac{3}{2})}$$

$$R(z) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k z^{2k+l} e^{-z^2/2}, \text{ где } z = \frac{r}{\rho}, \rho = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

$$E = \left(l + 2n_k + \frac{3}{2}\right) \hbar\omega$$

Для того чтобы найти кратность вырождения, нужно вспомнить, что в исходном уравнении Шрёдингера была еще и угловая часть, для нахождения которой нужно найти собственные функции оператора \hat{L}^2 . Процесс поиска подробно описан в [Приложение А](#). Здесь же выпишем только результат:

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \mathcal{N}_l \sqrt{\frac{(l+m)!}{(l-m)!} \frac{1}{\sin^m \theta}} \frac{d^{l-m}}{d(\cos \theta)^{l-m}} \sin^{2l} \theta e^{im\phi},$$

где $\mathcal{N}_l = (-1)^l \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{1}{2^l l!}}$ - нормировочный коэффициент, l и m - орбитальное и магнитное квантовые числа. Вводя еще и главное квантовое число $n = 2k + l = 2n_k + l$, мы понимаем, что каждым фиксированным n и l соответствуют $2l + 1$ разных состояний (так как m - целое число, удовлетворяющее системе неравенств $-l \leq m \leq l$). Заметим, что для четных n орбитальный момент $l = 0, 2, \dots, n - 2, n$, а для нечетных $l = 1, 3, \dots, n - 2, n$. Тогда, кратность вырождения:

$$\sum_l (2l + 1) = \frac{(n + 1)(n + 2)}{2}$$



Упражнение №32

Частица массы m движется в трехмерной потенциальной яме с “плоским” дном и бесконечно высокими стенками:

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r < a \\ \infty, & r > a \end{cases}$$

Найдите уровни энергии и волновые функции s -состояний. Чему равна $\psi_{ns}(0)$?

Запишем уравнение Шрёдингера для данного потенциала. Оно, как мы знаем из предыдущих семинаров, будет разделяться на угловую и радиальную часть. Таким образом, волновую функцию можно записать в виде $\Psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)Y_l^m(\theta, \phi) = \frac{1}{r}U_{nl}(r)Y_l^m(\theta, \phi)$, где $U_{nl}(r) = rR_{nl}(r)$. Тогда, подставляя её в радиальное уравнение, получим:

$$\left(\frac{d}{dr^2} - \frac{l(l-1)}{r^2} + \kappa^2 \right) U_{nl}(r) = 0;$$

$$\kappa^2 = \frac{E\hbar^2}{2m}, \quad V(r) = 0.$$

Функция $U_{nl}(r)$ удовлетворяет данному уравнению при $0 < r < a$. При $r = 0$ и $r > a$ функция $U_{nl}(r)$ должна быть равна 0. Решим это уравнение для двух различных значений орбитального числа l : $l = 0$ и $l > 0$.

1) Пусть $l = 0$. Тогда уравнение Шрёдингера принимает вид:

$$\left(\frac{d}{dr^2} + \kappa^2 \right) U_{n0}(r) = 0;$$

$$U_{n0}(0) = U_{n0}(a) = 0$$

Это уравнение аналогично одномерному уравнению для ямы с бесконечными стенками. Тогда, запишем энергию и волновую функцию:

$$E_{n0} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2, \quad U_{n0}(r) = \begin{cases} \frac{1}{r\sqrt{2\pi a}} \sin \frac{\pi n}{a} r, & 0 < r < a \\ 0, & r > a \end{cases}$$

2) Пусть $l > 0$. Приведём уравнение Шрёдингера к уравнению Бесселя с помощью замены $U_{nl}(r) = \sqrt{r}\varphi_{nl}(r)$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr^2} (\varphi(r)r^{1/2}) &= \frac{d}{dr} \left(\varphi' r^{1/2} + \frac{1}{2} \varphi r^{-1/2} \right) = r^{1/2} \left(\varphi'' + \varphi' r^{-1} - \frac{1}{4} \varphi r^{-2} \right) \Rightarrow \\ \Rightarrow r^{1/2} \varphi'' + r^{-1/2} \varphi' - \frac{1}{4} r^{-3/2} \varphi + \kappa^2 r^{1/2} \varphi - l(l+1) r^{-3/2} \varphi &= 0 \quad \cdot r^{3/2} \Rightarrow \\ \Rightarrow r^2 \varphi'' + r \varphi' + (r^2 \kappa^2 - (l+1/2)^2) \varphi &= 0 \end{aligned}$$

Решением данного уравнения является линейная комбинация сферических функций Бесселя (обратите внимание, что мы перешли обратно к $U_{nl}(r)$, отсюда домножение на \sqrt{r}):

$$U_{nl}(r) = C_1 j_l(r\kappa) + C_2 n_l(r\kappa),$$

где:

$$j_l(r) = \sqrt{\frac{\pi r}{2}} J_{l+1/2}(r), \quad n_l(r) = (-1)^{l+1} \sqrt{\frac{\pi r}{2}} J_{-l-1/2}(r)$$

Воспользуемся асимптотикой при малых значениях аргумента:

$$j(r) \rightarrow \frac{2^l l!}{(2l+1)!} r^l \text{ при } r \rightarrow 0, \quad n(r) \rightarrow -\frac{(2l)!}{2^l l!} \frac{1}{r^{l+1}} \text{ при } r \rightarrow 0$$

Заметим, что сферическая функция Неймана $n(r)$ уходит в бесконечность при $r \rightarrow 0$. В нашем случае должно выполняться граничное условие $U_{nl}(0) = 0$, поэтому мы оставляем в решении только первый член:

$$U_{nl}(r) = C j_l(r\kappa)$$

Значение κ нужно подобрать такие, чтобы они соответствовали второму граничному условию $U_{nl}(a) = C j_l(a\kappa) = 0$. Это возможно, если $\kappa = 1/a \lambda_{nl}$, где λ_{nl} - n -ый ноль l -ой сферической функции Бесселя.

Теперь мы можем записать энергию и радиальную функцию:

$$E_{nl} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \lambda_{nl}^2; \quad R_{nl}(r) = \begin{cases} \frac{c}{r} j_l\left(\frac{\lambda_{nl}}{a} r\right), & 0 < r < a \\ 0, & r > a \end{cases}$$

Если расположить нули λ_{nl} в порядке следования, то получится известная нам из химии последовательность:

$$1s, 1p, 1d, 2s, 1f, 2p, 1g, 2d, 1h, 3s, 2f, \dots,$$

где число перед буквой обозначает номер уровня n , а буквы s, p, d, f, g, h описывают состояния с орбитальным моментом $l = 1, 2, 3, 4, 5, 6, \dots$, соответственно. На графике 10 можно увидеть их расположение.

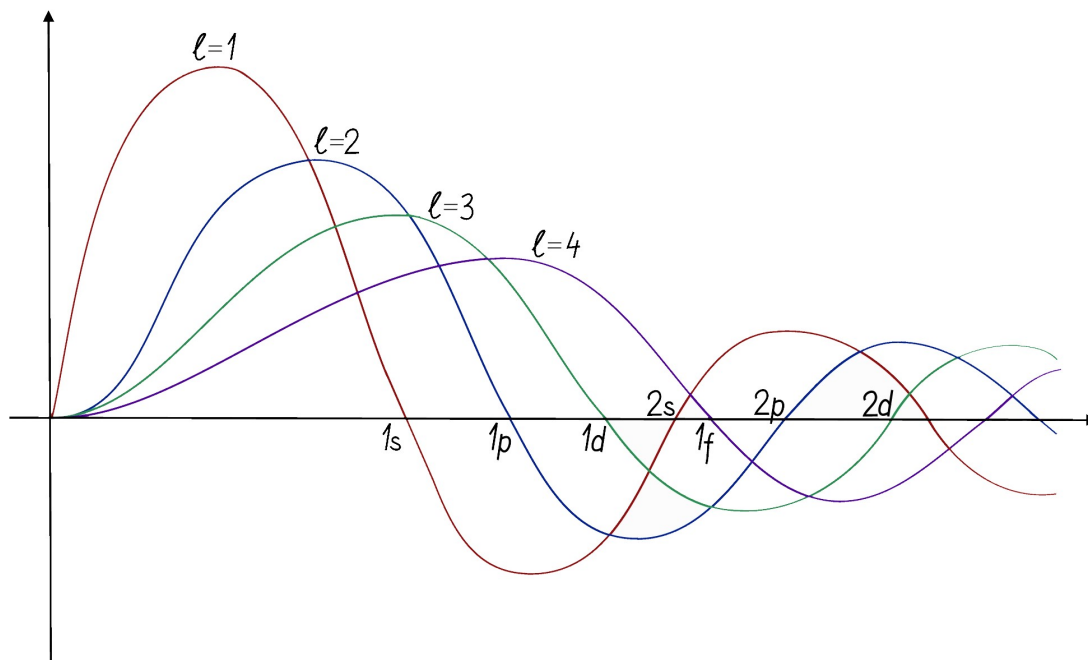


Рис. 10: Первые сферические функции Бесселя

Упражнение №33

Электрон покоится в осциллирующем магнитном поле, направленном вдоль оси z :

$$\vec{B} = B_0 \cos(\omega t) \hat{z}.$$

Пусть в момент $t_0 = 0$ электрон со спином, направленным вдоль оси x , начинает движение. Определите положение спина (спинор) $\chi(t)$ в произвольный момент времени. Найдите вероятность получить $-\hbar/2$ при измерении спина по оси x (то есть применяя оператор \hat{S}_x). Найдите минимальное поле B_0 , необходимое для полного поворота спина в сторону против оси x .

Для начала немного теории. У частиц со спином есть так называемый собственный магнитный момент, который обозначается как $\vec{\mu}$. Эта величина зависит от спинового момента \mathbf{S} следующим образом:

$$\vec{\mu} = \gamma \vec{S}, \text{ где } \gamma - \text{это гиромагнитное отношение.}$$

Когда частица со спином помещается в магнитное поле, она испытывает крутящий момент $\vec{\mu} \times \vec{B}$, который поворачивает её спин по полю. Энергию этого крутящего момента можно вычислить как:

$$H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\gamma \vec{B} \cdot \vec{S}$$

Зная это, запишем гамильтониан для нашей задачи:

$$H = -\gamma \vec{B} \cdot \vec{S} = -\gamma B_0 \cos(\omega t) \hat{S}_z = -\frac{\gamma B_0 \hbar}{2} \cos(\omega t) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Если забыли, откуда появилась такая матрица и что такое спин – вам в 8 семинар.

Запишем спинор, определяющий положение спина на оси x:

$$\chi(t) = \begin{pmatrix} \alpha(t) \\ \beta(t) \end{pmatrix}, \quad \alpha(0) = \beta(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Теперь, чтобы получить значения α и β в произвольный момент времени, решим уравнение Шрёдингера для спинора:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\chi(t)}{dt} &= H\chi(t) = -\frac{\gamma B_0 \hbar}{2} \cos(\omega t) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = -\frac{\gamma B_0 \hbar}{2} \cos(\omega t) \begin{pmatrix} \alpha \\ -\beta \end{pmatrix} \Rightarrow \\ &\Rightarrow i\hbar \begin{pmatrix} \dot{\alpha} \\ \dot{\beta} \end{pmatrix} = -\frac{\gamma B_0 \hbar}{2} \cos(\omega t) \begin{pmatrix} \alpha \\ -\beta \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Решаем эту систему диффузов:

$$\begin{aligned} \dot{\alpha} &= i \frac{\gamma B_0}{2} \cos(\omega t) \alpha \Rightarrow \frac{d\alpha}{\alpha} = i \frac{\gamma B_0}{2} \cos(\omega t) dt \Rightarrow \ln \alpha = i \frac{\gamma B_0}{2} \frac{\sin(\omega t)}{\omega} + C \Rightarrow \\ &\Rightarrow \alpha(t) = A e^{i \frac{\gamma B_0}{2\omega} \sin(\omega t)}, \end{aligned}$$

Найдём коэффициент A:

$$\alpha(0) = A = \frac{1}{\sqrt{2}} \Rightarrow \alpha(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i \frac{\gamma B_0}{2\omega} \sin(\omega t)}$$

Аналогично для функции $\beta(t)$:

$$\beta(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i \frac{\gamma B_0}{2\omega} \sin(\omega t)}$$

Тогда:

$$\chi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i \frac{\gamma B_0}{2\omega} \sin(\omega t)} \\ e^{-i \frac{\gamma B_0}{2\omega} \sin(\omega t)} \end{pmatrix}$$

Найдём вероятность того, что спин частицы будет повернут антипараллельно оси x. Для этого воспользуемся правилом Борна:

$$\begin{aligned} P(\chi_-^{(x)}) &= \left| \langle \chi_-^{(x)} | \chi(t) \rangle \right|^2 = \left| \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right) \begin{pmatrix} 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i \frac{\gamma B_0}{2\omega} \sin(\omega t)} \\ e^{-i \frac{\gamma B_0}{2\omega} \sin(\omega t)} \end{pmatrix} \right|^2 = \\ &= \left| \frac{1}{2} \left(e^{i \frac{\gamma B_0}{2\omega} \sin(\omega t)} - e^{-i \frac{\gamma B_0}{2\omega} \sin(\omega t)} \right) \right|^2 = \left| i \sin \left(\frac{\gamma B_0}{2\omega} \sin(\omega t) \right) \right|^2 = \\ &= \sin^2 \left(\frac{\gamma B_0}{2\omega} \sin(\omega t) \right) \end{aligned}$$

Чтобы спин частицы развернулся в другую сторону, необходимо, чтобы $P(\chi_-^{(x)}) = 1$, то есть

$$\sin^2\left(\frac{\gamma B_0}{2\omega} \sin(\omega t)\right) = 1 \implies \frac{\gamma B_0}{2\omega} = \frac{\pi}{2} \implies B_0 = \frac{\pi\omega}{\gamma}$$



Семинар XI

Квазиклассика

Всю первую часть курса мы решали задачи с потенциальными ямами. Решали мы их честно – через уравнение Шрёдингера для каждой из областей. Но почти все задачи были модельными – то и дело приходилось работать с бесконечными стенками, вертикальными барьерами и так далее. На практике же потенциалы совершенно разные, необязательно константные. Для таких потенциалов решать уравнение Шрёдингера становится сильно сложнее. Поэтому для исследования более сложных систем мы начинаем привлекать различные приближённые методы. И первый такой метод – рассмотрение *квазиклассических* систем. В англоязычной литературе этот подход называется в честь метода ашпроксимации, который мы будем использовать – WKB approximation.

Классически разрешенные и запрещённые зоны

Давно мы не писали уравнение Шрёдингера. Исправим это недоразумение:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V(x)\psi = E\psi$$

Пусть $E > V(x)$, то есть рассматриваемая область классически разрешенная. Будем искать решение этого уравнения в виде $\psi(x) = e^{iS(x)}$. В отличие от классических для нас решений, здесь потенциал имеет общий вид, поэтому в экспоненте есть функция, зависящая от x . Подставим волновую функцию такого вида в уравнение:

$$\frac{1}{2m}(S')^2 - \frac{i\hbar}{2m}S'' = E - V(x)$$

Чтобы продолжить решение этого уравнения, необходимо воспользоваться тем самым квазиклассическим приближением.

В классике $\hbar \rightarrow 0$, поэтому мы можем разложить функцию $S(x)$ по степеням \hbar и, включая в решение всё более высокую степень \hbar , управлять точностью решения уравнения. Таким образом:

$$S(x) = S_0 + \hbar S_1 + \hbar^2 S_2 + \dots$$

Для получения важных результатов нам достаточно взять два первых члена. Подставим их в левую часть уравнения и получим:

$$\frac{1}{2m}(S'_0 + \hbar S'_1)^2 - \frac{i\hbar}{2m}(S''_0 + \hbar S''_1) = \frac{1}{2m}((S'_0)^2 + 2\hbar S'_0 S'_1 + \hbar^2 (S'_1)^2) - \frac{i\hbar}{2m}(S''_0 + \hbar S''_1)$$

Выделим члены при $\hbar^0 = 1$. Добавив правую часть уравнения, получим:

$$\frac{1}{2m}(S'_0)^2 = E - V(x)$$

Это простое дифференциальное уравнение с разделяющимися переменными. Решением будет:

$$S_0(x) = \pm \int \sqrt{2m(E - V(x))} dx = \int p(x) dx,$$

где функция $p(x)$ – классический импульс.

В первом приближении мы получаем классическое действие. Это логично – мы отбрасываем квантовый множитель, получая чисто классическое уравнение. Условие для

использования такого приближения можно записать в виде $\hbar|S''/(S')^2| \ll 1$. Если подставить $S' = p$, получим:

$$\left| \frac{d\lambda(x)}{dx} \right| \ll 1, \quad \lambda(x) = \frac{\hbar}{px}$$

Получается, что условие квазиклассичности – малое изменение волны де-Бройля. Если говорить проще, то классический импульс частицы не должен становиться слишком маленьким. Такое происходит, например, в точках поворота, когда $V(x) = E$. Мы рассмотрим этот случай чуть позже. Пока давайте найдём решение при учёте первой степени \hbar :

$$\frac{\hbar}{m} S'_0 S'_1 - \frac{i\hbar}{2m} S''_0 = 0 \implies S'_1 = \frac{i S''_0}{2 S'_0} = \frac{i}{2} \frac{p'}{p}$$

Тогда, решая этот диффур, находим:

$$S_1 = C \frac{i}{2} \ln p$$

Теперь, подставив найденные значения в исходный вид волновой функции $\psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar}(S_0 + \hbar S_1)}$, получим:

$$\psi(x) \simeq \frac{C_1}{\sqrt{p}} e^{\frac{i}{\hbar} \int p dx} + \frac{C_2}{\sqrt{p}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int p dx}$$

В запрещённой области импульс будет мнимым (так как $E - V(x) < 0$), поэтому показатель экспоненты будет вещественным. Волновая функция будет иметь вид:

$$\psi(x) \simeq \frac{C_1}{\sqrt{|p|}} e^{\frac{1}{\hbar} \int |p| dx} + \frac{C_2}{\sqrt{|p|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int |p| dx}$$

Этих знаний уже достаточно, чтобы рассмотреть какой-нибудь простенький потенциал.

Упражнение №34

Используя квазиклассическое приближение, найдите энергию и волновые функции, представленного на рисунке 11.

$$V(x) = \begin{cases} \text{какая-то функция, } 0 < x < a \\ +\infty, \text{ в другом случае} \end{cases}$$

Мы уже решали похожую задачу, однако здесь мы имеем какое-то произвольное дно. Для нас самое главное, чтобы на нём не было резких изменений – тогда условия квазиклассичности будут соблюдены.

Волновая функция за стенками, очевидно, равна нулю. Внутри ящика мы воспользуемся полученными выражениями:

$$\psi(x) \simeq \frac{\tilde{C}_1}{\sqrt{p}} e^{\frac{i}{\hbar} S(x)} + \frac{\tilde{C}_2}{\sqrt{p}} e^{-\frac{i}{\hbar} S(x)} = \frac{C_1}{\sqrt{p}} \sin\left(\frac{S(x)}{\hbar}\right) + \frac{C_2}{\sqrt{p}} \cos\left(\frac{S(x)}{\hbar}\right),$$

где $S(x) = \int_0^x p dx'$. Так как $\psi(0) = 0$, получим, что $C_2 = 0$ (так как $S(0) = 0$). В точке a волновая функция $\psi(a) = 0$, значит $S(a) = \pi n$, $n = 0, 1, 2, \dots$. Тогда:

$$\int_0^a p dx = \pi n \hbar$$

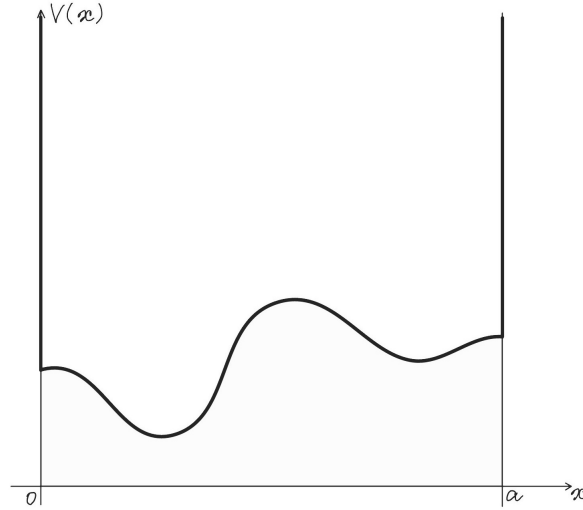


Рис. 11: Какое-то связанное состояние

С помощью этого выражения можно находить приближённые значения энергии. Давайте посмотрим на случай, когда дно ровное (то есть $V(x) = 0$ – константная функция). В таком случае интеграл от импульса равен $\int_0^a p dx = \int_0^a \sqrt{2mE} = a\sqrt{2mE}$. Подставляя его в полученное выражение, выразим энергию:

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

Результат получился такой же, как и при честном решении уравнения Шрёдингера. Это отлично!



Точки поворота

Теперь эти два решения нужно каким-то образом объединить. Сложность здесь состоит в том, что вблизи точек поворота импульс частицы в классическом случае стремится к нулю и применение квазиклассического приближения становится невозможным. Поэтому приходится решать уравнение Шрёдингера “честно”.^{*} Так как мы рассматриваем потенциал достаточно близко к точкам поворота (см. рисунок 12), давайте аппроксимируем наш потенциал прямой линией, используя разложение Тейлора:

$$V(x) \simeq E + V'(0)x, \quad E = V(0)$$

Подставим этот потенциал в уравнение Шрёдингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_T}{dx^2} + [E + V'(0)x] \psi_T = E \psi_T$$

или

$$\frac{d^2 \psi_T}{dx^2} = \alpha^3 x \psi_T, \quad \alpha = \left[\frac{2m}{\hbar} V'(0) \right]^{1/3}$$

^{*}Здесь, в отличие от Ландау, я не буду уходить в “методически более поучительный” вариант, так как он привлекает знания ТФКП, которых после сдачи экзамена остаётся не так уж и много. Давайте лучше решать диффуры, это у нас хорошо получается.

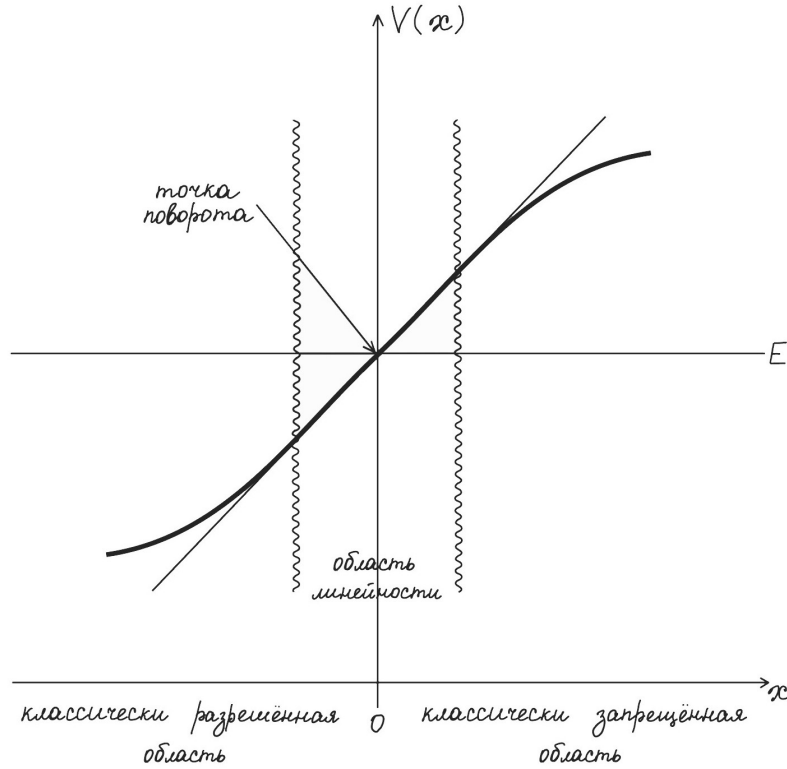


Рис. 12: Линейное приближение потенциала.

Здесь я ввёл обозначение ψ_T для уточнения, что это волновая функция в окрестности точки поворота. Тогда, введя новую переменную $z = \alpha x$, получим *уравнение Эйри*:

$$\frac{d^2\psi_T}{dz^2} = z\psi(x)$$

Решением этого уравнения будут функции Эйри:

$$\psi_T(x) = aAi(z) + bBi(z)$$

Подробнее про решение этого уравнения и сами функции можно почитать в третьем томе Ландау, в математических дополнениях. Я не буду вдаваться в это слишком подробно, выпишу лишь основные свойства функций, которые нам понадобятся.

Интегральный вид функций Эйри:

$$Ai(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \cos\left(\frac{s^3}{3} + sz\right) ds; \quad Bi(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \left[e^{\frac{-s^3}{3} + sz} + \sin\left(\frac{s^3}{3} + sz\right) \right] ds;$$

Асимптотики:

$$\left. \begin{aligned} Ai(z) &\sim \frac{1}{2\sqrt{\pi}z^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}z^{3/2}} \\ Bi(z) &\sim \frac{1}{\sqrt{\pi}z^{1/4}} e^{\frac{2}{3}z^{3/2}} \end{aligned} \right\} z \gg 0; \quad \left. \begin{aligned} Ai(z) &\sim \frac{1}{\sqrt{\pi}(-z)^{1/4}} \sin\left[\frac{2}{3}(-z)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right] \\ Bi(z) &\sim \frac{1}{\sqrt{\pi}(-z)^{1/4}} \cos\left[\frac{2}{3}(-z)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right] \end{aligned} \right\} z \ll 0$$

Теперь мы знаем, как выглядит волновая функция, которая поможет нам объединить две области – классически запрещённую (слева) и классически разрешённую (справа). Найдём волновую функцию справа. Сначала запишем общий вид волновой функции вне

области точки поворота.

$$\psi(x) \simeq \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{p}} \left(B e^{\frac{i}{\hbar} \int_x^0 p dx'} + C e^{-\frac{i}{\hbar} \int_x^0 p dx'} \right), & x < 0 \\ \frac{1}{\sqrt{|p|}} D e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^x |p| dx'}, & x > 0 \end{cases}$$

Возьмём область достаточно далёкую от точки поворота, чтобы можно было воспользоваться квазиклассическим приближением, и при этом достаточно близкую, чтобы потенциал был линейный. Тогда:

$$p(x) \simeq \sqrt{2m(E - V'(0)x)} = \hbar \alpha^{3/2} \sqrt{-x}$$

Для запрещённой области будет выполняться:

$$\int_0^x |p| dx' \simeq \hbar \alpha^{3/2} \int_0^x \sqrt{x'} dx' = \frac{2}{3} \hbar (\alpha x)^{3/2}$$

Подставляя это в волновую функцию, получим:

$$\psi(x) \simeq \frac{D}{\sqrt{\hbar \alpha^{3/4} x^{1/4}}} e^{-\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}}$$

Возвращаясь к волновой функции у точки поворота, воспользуемся асимптотикой для больших значений z^\dagger . Тогда её вид в правой области будет следующий:

$$\psi_T \simeq \frac{a}{2\sqrt{\pi}(\alpha x)^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}} + \frac{b}{\sqrt{\pi}(\alpha x)^{1/4}} e^{\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}}$$

Сравнивая эти волновые функции, мы видим:

$$a = \sqrt{\frac{4\pi}{\alpha \hbar}} D, \quad b = 0$$

Прделаем то же самое с областью слева. Посчитаем интеграл от импульса, не забывая, что x теперь отрицательный:

$$\int_x^0 p dx' \simeq \frac{2}{3} \hbar (-\alpha x)^{3/2}$$

Подставляем в волновую функцию для классически разрешенной области:

$$\psi(x) \simeq \frac{1}{\sqrt{\hbar \alpha^{3/4} (-x)^{1/4}}} \left[B e^{i\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2}} + C e^{-i\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2}} \right]$$

Снова используем асимптотику, но теперь z – большое отрицательное число, значит и асимптотика будет для $z \ll 0$. Также учитываем, что мы уже нашли коэффициент b – он равен нулю. Теперь, когда мы ничего не забыли, пишем:

$$\begin{aligned} \psi_T &\simeq \frac{a}{\sqrt{\pi}(-\alpha x)^{1/4}} \sin \left(\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right) = \\ &= \frac{a}{\sqrt{\pi}(-\alpha x)^{1/4}} \frac{1}{2i} \left(e^{i\pi/4} e^{i\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2}} - e^{-i\pi/4} e^{-i\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2}} \right) \end{aligned}$$

[†]Возможность использовать такую аппроксимацию может показаться странной, так как при $z = 0$ мы находимся к точке поворота очень близко. Но, на практике, такое решение имеет место, так как и значение αx достаточно большое, и потенциал ещё линейный. Конкретные значения можно увидеть в [Приложение С](#) в первой задаче.

Вновь сравнивая функции, получим:

$$\frac{a}{2i\sqrt{\pi}}e^{i\pi/4} = \frac{B}{\sqrt{\hbar\alpha}}, \quad \frac{-a}{2i\sqrt{\pi}}e^{-i\pi/4} = \frac{C}{\sqrt{\hbar\alpha}},$$

или, если подставим ранее полученное выражение для a :

$$B = -ie^{i\pi/4}D, \quad C = ie^{-i\pi/4}D$$

Подставляя эти коэффициенты в первоначальное общее выражение для волновой функции, получим *формулы связи* для области возрастающего потенциала, где x_2 – точка поворота:

$$\psi_R(x) \simeq \begin{cases} \frac{2D}{\sqrt{p}} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p dx' + \frac{\pi}{4} \right), & x < x_2 \\ \frac{D}{\sqrt{|p|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x |p| dx'}, & x > x_2 \end{cases}$$

Используя тот же самый подход, получим волновую функцию для области убывающего потенциала, где x_1 – точка поворота. Точный расчёт можно посмотреть во второй задаче в [Приложение С](#).

$$\psi_L(x) \simeq \begin{cases} \frac{D'}{\sqrt{|p|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} |p| dx'}, & x < x_1 \\ \frac{2D'}{\sqrt{p}} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p dx' + \frac{\pi}{4} \right), & x > x_1 \end{cases}$$

Теперь, когда у нас есть обе волновые функции, вновь рассмотрим потенциальную яму, но без бесконечных стенок. Рассматривая “пересекающуюся” область, волновую функцию для классической области можно записать в виде:

$$\psi(x) \simeq \frac{2D}{\sqrt{p}} \sin \theta_2(x), \quad \theta_2(x) = \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p dx' + \frac{\pi}{4},$$

или, используя левую точку поворота:

$$\psi(x) \simeq \frac{-2D'}{\sqrt{p}} \sin \theta_1(x), \quad \theta_1(x) = -\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p dx' - \frac{\pi}{4}.$$

Аргументы у синусов должны быть равны по модулю π , то есть $\theta_2 = \theta_1 + \pi n$. Подставляя значения выше, получим:

$$\int_{x_1}^{x_2} p dx = (n + \frac{1}{2})\hbar\pi, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Это так называемое *правило квантования Бора - Зоммерфельда*. Оно позволяет в случае потенциальных ям с большим значением n найти энергию без решения уравнения Шрёдингера.

Имея на руках все инструменты, давайте попробуем решить следующую задачу.

Упражнение №35

Найдите энергию и волновые функции для следующих потенциалов:

$$a) V(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$$

$$b) V(x) = \begin{cases} \frac{m\omega^2 x^2}{2}, & x > 0 \\ +\infty, & x < 0 \end{cases}$$

а) Для начала найдём энергию, воспользовавшись правилом Бора-Зоммерфельда. Импульс в нашей задаче равен $p = \sqrt{2mE - m^2\omega^2 x^2}$. Точку поворота можно получить, приравняв импульс к нулю и выразив x :

$$x_0 = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$$

Подставим это в интеграл и посчитаем его:

$$\begin{aligned} \int_{-x_0}^{x_0} p \, dx &= \int_{-x_0}^{x_0} \sqrt{2mE - m^2\omega^2 x^2} \, dx = \\ &= \frac{m\omega}{2} \left[x \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2} - x^2} + \frac{2E}{m\omega^2} \arctan \left(\frac{x}{\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2} - x^2}} \right) \right] \Big|_{-x_0}^{x_0} = \\ &= \left(\arctan(\pm\infty) = \pm \frac{\pi}{2} \right) = 2 \left(\frac{m\omega}{2} \frac{2E}{m\omega^2} \frac{\pi}{2} \right) = \frac{E\pi}{\omega} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi \hbar \end{aligned}$$

Выражая энергию, получим ожидаемый результат

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

Теперь найдём волновые функции. Мы знаем, что в аргументе синуса и в показателях экспоненты будут стоять следующие интегралы:

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_x^{-x_0} \left| \sqrt{2mE_n - m^2\omega^2 x'^2} \right| dx' \\ I_2 &= \int_{-x_0}^x \sqrt{2mE_n - m^2\omega^2 x'^2} dx' \\ I_3 &= \int_{x_0}^x \left| \sqrt{2mE_n - m^2\omega^2 x'^2} \right| dx' \end{aligned}$$

Посчитаем I_3 :

$$\begin{aligned}
I_3 &= \int_{x_0}^x \left| m\omega \sqrt{x_0^2 - x'^2} \right| dx' = \int_{x_0}^x m\omega \sqrt{x'^2 - x_0^2} dx' = \\
&= \frac{m\omega}{2} \left[x' \sqrt{x'^2 - x_0^2} - x_0^2 \ln \left(x' + \sqrt{x'^2 - x_0^2} \right) \right] \Big|_{x_0}^x = \\
&= \frac{m\omega}{2} \left[x \sqrt{x^2 - x_0^2} - x_0^2 \ln \left(x + \sqrt{x^2 - x_0^2} \right) + x_0^2 \ln x_0 \right] = \\
&= \frac{x_0^2 m\omega}{2} \left[\frac{x}{x_0} \sqrt{\left(\frac{x}{x_0} \right)^2 - 1} - \ln \left(\frac{x}{x_0} + \sqrt{\left(\frac{x}{x_0} \right)^2 - 1} \right) \right] = \\
&= \frac{E_n}{\omega} \left[\frac{x}{x_0} \sqrt{\left(\frac{x}{x_0} \right)^2 - 1} - \ln \left(\frac{x}{x_0} + \sqrt{\left(\frac{x}{x_0} \right)^2 - 1} \right) \right]
\end{aligned}$$

Интеграл I_1 будет отличаться от него только знаком:

$$I_1 = \frac{E_n}{\omega} \left[-\frac{x}{x_0} \sqrt{\left(\frac{x}{x_0} \right)^2 - 1} - \ln \left(-\frac{x}{x_0} + \sqrt{\left(\frac{x}{x_0} \right)^2 - 1} \right) \right]$$

Осталось посчитать I_2 :

$$\begin{aligned}
I_2 &= \int_{-x_0}^x m\omega \sqrt{x_0^2 - x'^2} dx' = \\
&= \frac{m\omega}{2} \left[x \sqrt{x_0^2 - x^2} + x_0^2 \arcsin \left(\frac{x}{x_0} \right) \right] \Big|_{-x_0}^x = \\
&= \frac{x_0^2 m\omega}{2} \left[\frac{x}{x_0} \sqrt{1 - \left(\frac{x}{x_0} \right)^2} + \arcsin \left(\frac{x}{x_0} \right) - \arcsin(-1) \right] = \\
&= \frac{E_n}{\omega} \left[\frac{x}{x_0} \sqrt{1 - \left(\frac{x}{x_0} \right)^2} + \arcsin \left(\frac{x}{x_0} \right) + \frac{\pi}{2} \right]
\end{aligned}$$

Подставив эти интегралы, получим волновую функцию в квазиклассическом приближении:

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \frac{C}{\sqrt{|p|}} e^{-\frac{1}{\hbar} I_1}, & x < -x_0 \\ \frac{C}{\sqrt{p}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} I_2 + \frac{\pi}{4}\right), & -x_0 < x < x_0 \\ \frac{C}{\sqrt{|p|}} e^{-\frac{1}{\hbar} I_3}, & x > x_0 \end{cases}$$

Коэффициент C находится из нормировки.

б) Такой потенциал представляет собой правую половину потенциала, рассмотренного нами выше. Значит, в правой части волновая функция будет частично совпадать с волновой функцией из предыдущей задачи. Осталось определить, какой чётностью будет обладать эта часть волновой функции. Для этого воспользуемся граничным условием: $\psi(0) = 0$. Тогда классическая часть квазиклассического приближения волновой функции

в той же точке так же должна быть равна нулю:

$$\sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_0^{x_0} p dx + \frac{\pi}{4} \right) = 0$$

Тогда, для такой задачи получаем модифицированное правило Бора-Зоммерфельда:

$$\int_0^{x_0} p dx = \pi \hbar \left(n + \frac{3}{4} \right)$$

Отсюда энергия равна:

$$E_n = \hbar \omega \left(2n + \frac{3}{2} \right)$$

Видим, что у нас получились только нечётные значения энергии. Значит, и волновая функция имеет только нечётную часть:

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{2} \psi_{2n+1}(x), & x > 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}$$



Приложение А

Нахождение собственных функций операторов \hat{L}^2 и \hat{L}_z

Найдём волновые функции состояния $|lm\rangle$. Для начала напомним вид операторов повышения и понижения в координатном базисе

$$\begin{aligned}\hat{L}_+ &\simeq \hbar e^{i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ \hat{L}_- &\simeq \hbar e^{-i\phi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right)\end{aligned}$$

В каком виде нам искать решения для нашего уравнения? Здесь нам помогут уравнения математической физики и определенные там *сферические функции*. Выпишем их и докажем с помощью математической индукции, что они действительно являются собственными функциями в рассматриваемой системе:

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \mathcal{N}_l \sqrt{\frac{(l+m)!}{(l-m)!}} \frac{1}{\sin^m \theta} \frac{d^{l-m}}{d(\cos \theta)^{l-m}} \sin^{2l} \theta e^{im\phi},$$

где $\mathcal{N}_l = (-1)^l \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{1}{2^l l!}}$ - коэффициент нормировки.

Доказательство построим в 4 шага. Для начала покажем, что при действии оператора повышения на состояние $|l\rangle$ (то есть $m = l$) мы получим 0. На втором шаге убедимся в том, что правильно определили нормирующий множитель. На третьем шаге применим к сферической функции при $l = m$ оператор \hat{L}^2 и убедимся, что функции являются собственными с собственным значением $\hbar^2(l+1)l$. В конце сделаем шаг математической индукции: предположим, что состояние $|lm\rangle$ задаётся сферической функцией и покажем, что состояние $|l, m-1\rangle$ так же задаётся сферической функцией.

1. При $m = l$ сферические функции имеют вид

$$Y_l^l(\theta, \phi) = \mathcal{N}_l \sqrt{(2l)!} \sin^l \theta e^{i\phi l}.$$

Поддействуем на неё повышающим оператором:

$$\begin{aligned}\hat{L}_+ |l\rangle &\simeq \hbar e^{i\phi} \mathcal{N}_l \sqrt{(2l)!} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \sin^l \theta e^{i\phi l} = \\ &= \hbar e^{i\phi} \mathcal{N}_l \sqrt{(2l)!} (l \cos \theta \sin^{l-1} \theta - l \operatorname{ctg} \theta \sin^l \theta e^{i\phi l}) = \\ &= 0\end{aligned}$$

2. Для проверки нормировки приравняем скалярное произведение состояния на самого себя к единице:

$$\begin{aligned}\langle ll|ll\rangle &= \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |Y_l^l(\theta, \phi)|^2 \sin \theta d\theta d\phi = \mathcal{N}_l^2 (2l)! \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \sin^{2l} \theta \sin \theta d\theta d\phi = \\ &= (\text{сделаем замену } x = \cos \theta, dx = -\sin \theta d\theta, \text{ проинтегрируем по } \phi) = \\ &= 2\pi \mathcal{N}_l^2 (2l)! \int_{-1}^1 (1-x^2)^l dx.\end{aligned}$$

Вычислим этот интеграл. В квадратурах, к сожалению, не получится - решением будет бета-функция. Но мы люди подкованные, таких страшных слов не испугаемся! Напомню, что бета-функция имеет вид

$$B(x, y) = \int_0^1 t^{x-1} (1-t)^{y-1} dt = \frac{\Gamma(x)\Gamma(y)}{\Gamma(x+y)}$$

Приведём наш интеграл к похожему виду:

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 (1-x^2)^l dx &= 2 \int_0^1 (1-x^2)^l dx = (z = x^2, dz = 2x dx) = \\ &= \int_0^1 z^{-\frac{1}{2}} (1-z)^l dz = B(1/2, l+1) = \frac{\Gamma(1/2)\Gamma(l+1)}{\Gamma(l+3/2)}. \end{aligned}$$

Теперь вспоминаем свойства гамма-функций. Во-первых, если n - целое, то $\Gamma(n+1) = n!$. Во-вторых, $\Gamma(1/2 + n) = \frac{(2n)!}{4^n n!} \sqrt{\pi}$. Если подставить $n+1$, то получим $\Gamma(3/2 + n) = \frac{(2n+2)!}{4^{n+1} (n+1)!} \sqrt{\pi}$. В-третьих, $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$. Воспользовавшись этими свойствами, найдём, чему равен интеграл:

$$\int_{-1}^1 (1-x^2)^l dx = \frac{\Gamma(1/2)\Gamma(l+1)}{\Gamma(l+3/2)} = 4^{l+1} \frac{(l+1)! \sqrt{\pi}!}{\sqrt{\pi} (2l+2)!} = 2^{2l+1} \frac{(l!)^2}{(2l+1)!}$$

Подставив это выражение, получим

$$\begin{aligned} 2\pi \mathcal{N}_l^2 (2l)! \int_{-1}^1 (1-x^2)^l dx &= 2\pi \mathcal{N}_l^2 (2l)! \frac{2^{2l+1} (l!)^2}{(2l+1)!} = \\ &= 4\pi \mathcal{N}_l^2 \frac{2^{2l} (l!)^2}{(2l+1)!} = 1 \implies \mathcal{N} = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \frac{1}{2^l l!} \end{aligned}$$

Обычно перед коэффициентом нормировки добавляют $(-1)^l$.

3. Посчитаем $\hat{L}^2 |ll\rangle$. Напомню, что оператор \hat{L}^2 в координатном базисе имеет вид

$$\hat{L}^2 \simeq -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \phi} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]$$

Тогда, подставляя его в выражение, получим:

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 |ll\rangle &\simeq -\mathcal{N}_l \sqrt{(2l)!} \hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \sin^l \theta \right) e^{i\phi l} + \sin^l \theta \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} e^{i\phi l} \right] = \\ &= -\mathcal{N}_l \sqrt{(2l)!} \hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (l \cos \theta \sin^l \theta) e^{i\phi l} - l^2 \sin^{l-2} \theta e^{i\phi l} \right] = \\ &= -\mathcal{N}_l \sqrt{(2l)!} \hbar^2 \left[\frac{l}{\sin \theta} (-\sin^{l+1} \theta + l \cos^2 \theta \sin^{l-1} \theta) - l^2 \sin^{l-2} \theta \right] e^{i\phi l} = \\ &= -\mathcal{N}_l \sqrt{(2l)!} \hbar^2 [-l \sin^l \theta + l^2 \cos^2 \theta \sin^{l-2} \theta - l^2 \sin^{l-2} \theta] e^{i\phi l} = \\ &= -\mathcal{N}_l \sqrt{(2l)!} \hbar^2 [-l \sin^l \theta - l^2 \sin^l \theta] e^{i\phi l} = \mathcal{N}_l \sqrt{(2l)!} \hbar^2 [l(l+1) \sin^l \theta] e^{i\phi l} = \\ &= \hbar^2 l(l+1) Y_l^l(\theta, \phi). \end{aligned}$$

Получилось как раз что нам нужно было: $\hat{L}^2 |ll\rangle = \lambda |ll\rangle$. На этом моменте мы подтвердили базу индукции.

4. Осталось сделать шаг индукции. Пусть $|lm\rangle$ представим в виде сферической функции. Докажем, что $|l, m-1\rangle$ тоже имеет такой вид. Для этого подействуем на состояние $|lm\rangle$ понижающим оператором. Напомню, что в 8 семинаре мы показали, что состояние $\hat{L}_\pm |lm\rangle$ является собственным для операторов \hat{L}^2 и \hat{L}_z . Это позволяет нам спокойно использовать его для доказательства при переходе.

$$\begin{aligned}
\hat{L}_- |lm\rangle &\simeq \hbar e^{-i\phi} \mathcal{N}_l \sqrt{\frac{(l+m)!}{(l-m)!}} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \frac{1}{\sin^m \theta} \frac{d^{l-m}}{d(\cos \theta)^{l-m}} \sin^{2l} \theta e^{im\phi} = \\
&= \left(\frac{\partial}{\partial \theta} = -\sin \theta \frac{\partial}{\partial \cos \theta} \right) = \hbar e^{-i\phi} \mathcal{N}_l \sqrt{\frac{(l+m)!}{(l-m)!}} \left(m \operatorname{ctg} \theta \sin^{-m} \theta \frac{d^{l-m}}{d(\cos \theta)^{l-m}} \sin^{2l} \theta + \right. \\
&+ \left. \sin^{-m} \theta (\sin \theta) \frac{d^{l-m+1}}{d(\cos \theta)^{l-m+1}} \sin^{2l} \theta - m \operatorname{ctg} \theta \sin^{-m} \theta \frac{d^{l-m}}{d(\cos \theta)^{l-m}} \sin^{2l} \theta \right) e^{im\phi} = \\
&= \hbar \mathcal{N}_l \sqrt{\frac{(l+m)!}{(l-m)!}} \left(\sin^{-m+1} \theta \frac{d^{l-m+1}}{d(\cos \theta)^{l-m+1}} \sin^{2l} \theta \right) e^{i\phi(m-1)} = \\
&= \hbar Y_l^{m-1}(\theta, \phi) \sqrt{(l+m)(l-m+1)}.
\end{aligned}$$

Доказательство закончено.

Приложение В

Спин. Математический и физический подход

Рассказывать про спин в приложении – затея крайне непростая, так как его строгое математическое описание требует как минимум страниц 30 и пары-тройки семинаров. В связи с этим, я постараюсь дать базовое описание математики спиноров и физики спина. В конце я оставлю ссылки на источники, используя которые я разбирался в этой достаточно запутанной теме. Если вас заинтересует более глубокое понимание – обязательно пройдите по ссылкам, посмотрите видео и почитайте книги или статьи по этой теме.

Говорить мы будем в основном не про сам спин, а про объект, которым его описывают математический – *спинор*. Однако, я попытаюсь не уходить от основной темы и в случае чего всегда возвращаться к “физике” процесса. На этом лирические отступления закончены, давайте преступим к изучению спинов и спиноров.

Опыт Штерна – Герлаха

Наверняка подкованный читатель уже много раз слышал про этот эксперимент, однако для полноты картины я не могу обойти его стороной. Поэтому, если вы уверены, что хорошо понимаете суть опыта и вам не нужно напоминать про причину возникновения такого понятия как спин – можете спокойно пропустить этот параграф и пойти к следующему.

Опыт состоит в пропускании пучка нейтральных частиц (например, атомов серебра) через неоднородное магнитное поле. Схему установки можно посмотреть на рисунке 1. Во время проведения эксперимента главенствовала Боровская модель атома, представляющая собой ядро и крутящиеся вокруг него электроны. Исходя из этой модели, в нейтральных атомах магнитное поле, образованное орбитальным моментом, должно распределяться равномерно, образуя на экране прямую линию. На деле же оказалось, что после вылета из магнита частицы летели только в двух направлениях. Это повлекло за собой следующий вывод – у частиц есть “внутренний” магнитный момент, который ещё и квантуется. Его назвали *спин*, так как сначала было предположение, что электрон крутится вокруг своей оси. В итоге оказалось, что это предположение ошибочное и модель Бора в целом неверна, хотя и даёт правильный вектора понимания устройства атома.

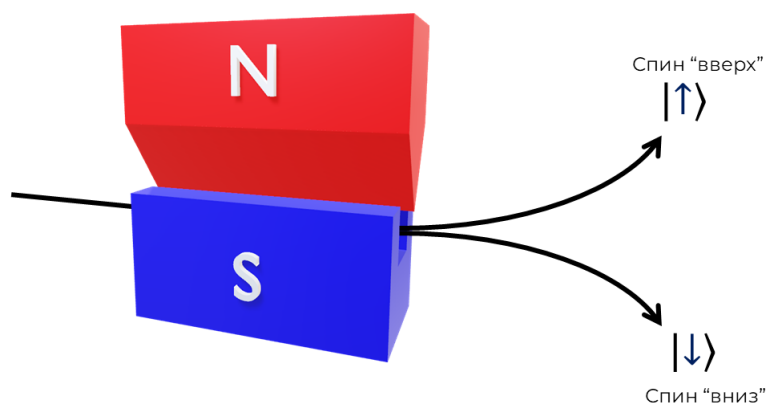


Рис. 1: Магнит с неоднородным магнитным полем. Частицы после вылета попадали на экран.

Итак, у нас есть два состояния – частица летит вверх и частица летит вниз. Пусть вертикальная ось будет ось Z. Обозначим тогда состояние частицы, спин которой направлен

"вверх" как $|z\rangle$. Тогда, для частицы со спином вниз будет $|-z\rangle$. Так как частица в момент измерения (т.е. в момент попадания на экран) может оказаться только в одном из состояний, мы считаем, что эти состояния ортогональны. Тогда, если добавить в установку 1 ещё один магнит, на пути верхней траектории, то частица после второго магнита полетит вверх с вероятностью 1. В формализме квантовой механики это можно записать как:

$$|\langle z|z\rangle|^2 = |\langle -z|-z\rangle|^2 = 1, \quad |\langle -z|z\rangle|^2 = 0$$

Если мы положим магнит на бок так, что магнитное поле будет направлено вдоль оси X, тогда у нас получится аналогичный результат для состояний $|x\rangle$ и $|-x\rangle$:

$$|\langle x|x\rangle|^2 = |\langle -x|-x\rangle|^2 = 1, \quad |\langle -x|x\rangle|^2 = 0$$

Разнообразим картину – пусть подряд идут два магнита, но с разными направлениями. Поставим на пути части, пролетевших первый магнит с состоянием $|z\rangle$, магнит, измеряющий состояние по оси X. Оказывается, вероятность пролететь в “положительном” или “отрицательном” направлении будет одинаковая и равна 1/2. Другими словами:

$$|\langle x|z\rangle|^2 = |\langle -x|z\rangle|^2 = 1/2$$

Как известно, состояние в квантовой механике можно представить в виде линейной комбинации “базисных” состояний. Тогда, разложим состояние $|x\rangle$ как:

$$|x\rangle = \alpha |z\rangle + \beta |-z\rangle$$

Из полученной выше вероятности легко найти коэффициенты перед z состояниями:

$$|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |z\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |-z\rangle$$

Из условия ортогональности, получим коэффициенты для состояния $|-x\rangle$:

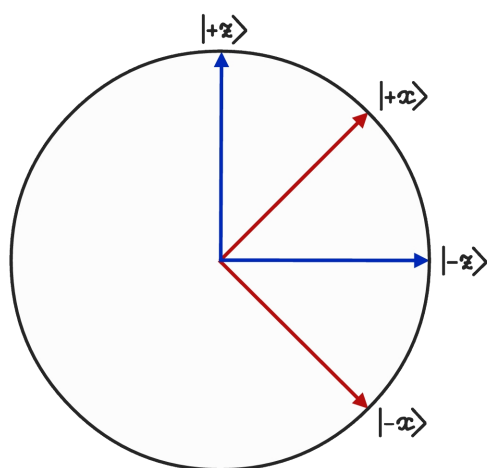
$$|-x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |z\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |-z\rangle$$

Для направления по оси Y распределение вероятностей будет точно такое же, как и для оси X. Но те же самые коэффициенты мы взять не можем. Поэтому, чтобы описать состояние $|y\rangle$, будем использовать комплексные числа:

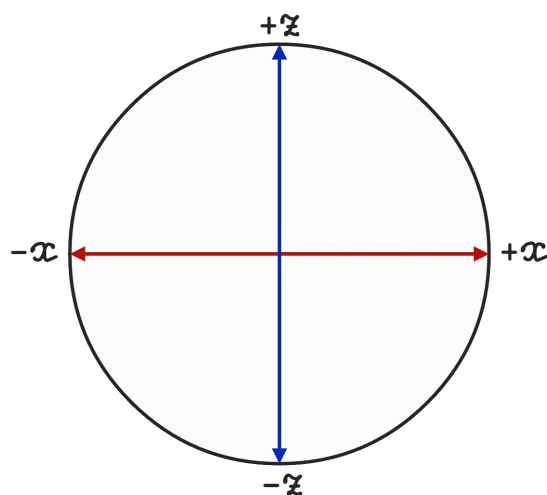
$$\begin{aligned} |y\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |z\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}} |-z\rangle \\ |-y\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |z\rangle - \frac{i}{\sqrt{2}} |-z\rangle \end{aligned}$$

Домножение на комплексный множитель не изменяет состояние при измерении, так как берётся квадрат модуля. Поэтому, результаты при подсчёте будут точно такие же.

Обратим внимание на следующий важный момент. Физически состояния z и $-z$ являются антипараллельными, так как частица летит либо вверх, либо вниз. В свою очередь состояния x и $-x$ ортогональны им (рисунок 2b). В это же время, соответствующие квантовые состояния имеют следующие отношения: $|z\rangle$ и $|-z\rangle$ ортогональны, а между $|x\rangle$ и $|z\rangle$ угол составляет 45 градусов (рисунок 2a). Таким образом, отношение углов между квантовыми состояниями и физическими состояниями соотносится как 1:2. Получается, для полного поворота на 360 градусов в пространстве квантовых состояний необходимо два



(a) Пространство квантовых состояний



(b) Физическое пространство

Рис. 2

полных поворота на 720° в физическом пространстве. Это проявление одного из свойств спиноров, о которых мы поговорим далее.

В физическом пространстве для представления двухуровневых квантовых состояний используется сфера блоха (рисунок 3). Так, состояние $|z\rangle$ можно представить как вектор, направленный вдоль положительной оси Z. Для того, чтобы разобраться, как описывать состояния со спином $1/2$ и разобраться со спинорами, нужно обсудить, каким образом вращаются и перемещаются по сфере квантовые состояния. Этим мы и будем заниматься в следующих параграфах.

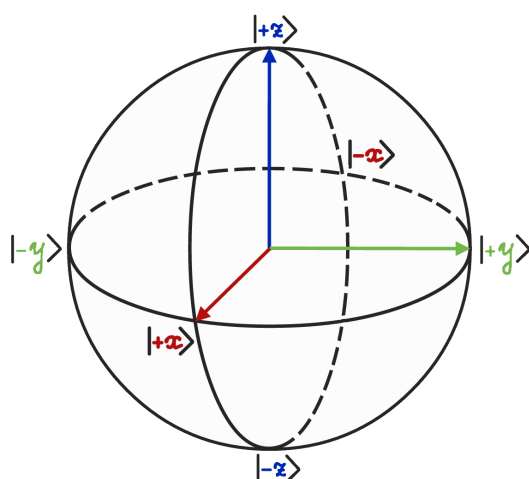


Рис. 3: Сфера блоха

Поляризация света

Сделаем небольшое отступление от квантовой механики в сторону оптики для того, чтобы укрепить связь между реальной физикой и объектами, используемыми для описания поворота в пространстве. Тем более, с курсом оптики вы уже знакомы, так что многое здесь для вас будет известным и понятным.

Векторы Джонса

Поляризацией света можно назвать направление вектора электрического или магнитного поля во время его распространения (рисунок 4). Далее в параграфе будем рассматривать только вектор, связанные с электрическим полем. Разложим его в линейную комбинацию трёх базисных векторов:

$$\vec{E} = E_x \vec{e}_x + E_y \vec{e}_y + E_z \vec{e}_z$$

Рассмотрим вертикальную поляризацию. В этом случае $E_z = E_x = 0$. Распишем компоненту E_y :

$$E_y = A_y \cos(\omega t - kz + \phi_y)$$

или, используя экспоненциальную форму

$$E_y = A_y e^{i\phi_y} e^{\omega t - kz}.$$

Замечу, что если во второй формуле взять реальную часть, получим первую. Так как у нас поляризация реально физическое явление, то в эксперименте мы рассматриваем как раз реальную часть, поэтому такой переход более чем законен.

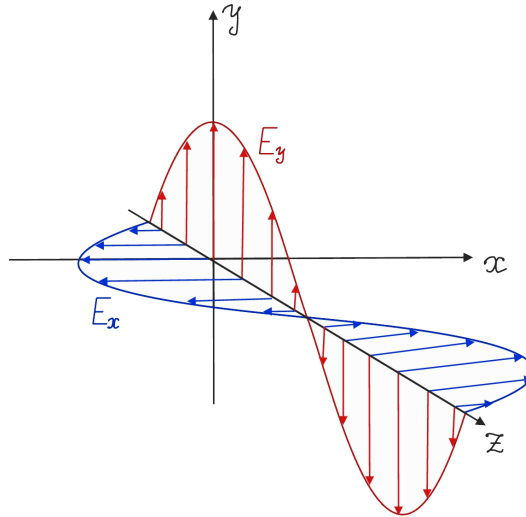


Рис. 4: Распространение волны вдоль оси Z

Для горизонтальной компоненты аналогично:

$$E_x = A_x e^{i\phi_x} e^{\omega t - kz}.$$

Компонента E_z в нашем случае определяет то, в какую сторону будет двигаться волна. Поэтому, мы всегда можем определить координаты так, чтобы эта компонента была равна 0. Тогда, вектор \vec{E} можно записать в виде

$$\begin{bmatrix} E_x \\ E_y \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_x e^{i\phi_x} e^{\omega t - kz} \\ A_y e^{i\phi_y} e^{\omega t - kz} \\ 0 \end{bmatrix}$$

Легко заметить, что для полного описания поляризации волны нам достаточно знать фазу ϕ и амплитуду A , так как множитель $e^{\omega t - kz}$ одинаковы для всех членов. Помимо этого, мы можем выкинуть из вектора третий член – при правильном выборе координат он всегда

будет равен 0. Таким образом, мы приходим к *векторам Джонса* – векторам с двумя членами, описывающими поляризацию волны.

$$\begin{bmatrix} A_x e^{i\phi_x} e^{\omega t - kz} \\ A_y e^{i\phi_y} e^{\omega t - kz} \\ 0 \end{bmatrix} \rightarrow \vec{J} = \begin{bmatrix} A_x e^{i\phi_x} \\ A_y e^{i\phi_y} \end{bmatrix}$$

Вектор Джонса можно записать в виде линейной комбинации вертикальной и горизонтальной поляризации:

$$\vec{J} = A_x e^{i\phi_x} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} + A_y e^{i\phi_y} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = A_x e^{i\phi_x} \vec{H} + A_y e^{i\phi_y} \vec{V}$$

Теперь найдём, как используя вектор Джонса описать известные нам диагональную и левую круговую поляризацию. Пусть в обоих членах амплитуда будет равна 1, а фаза равна 0. Тогда, получим сумму двух перпендикулярных векторов с длиной 1. Из прямоугольного треугольника, построенного на этих векторах, находим, что длина их суммы равна $\sqrt{2}$. Значит, чтобы суммарный вектор получился нормированным, необходимо оба члена разделить на $\frac{1}{\sqrt{2}}$. Назовём его \vec{D} и запишем его разложение:

$$\vec{D} = \frac{1}{\sqrt{2}} \vec{H} + \frac{1}{\sqrt{2}} \vec{V}$$

Ничего не напоминает? Не будем сильно спешить, но я думаю внимательный читатель уже заметил сходство с разложением состояния $|x\rangle$ по базисным состояниям $|z\rangle$ и $|-z\rangle$. Точно также мы можем представить антидиагональную поляризацию \vec{A} , поменяв сумму векторов на разность:

$$\vec{A} = \frac{1}{\sqrt{2}} \vec{H} - \frac{1}{\sqrt{2}} \vec{V}$$

Расположение векторов Джонса можно посмотреть на рисунке 5

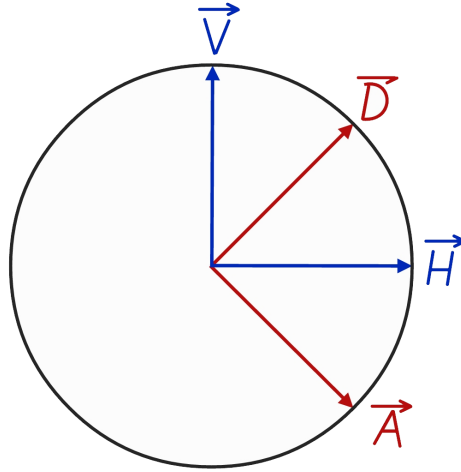


Рис. 5: Расположение векторов Джонса

Рассмотрим ещё одну, более сложную поляризацию. Пусть амплитуда так же равна единице, однако фаза при вертикальной поляризации равна $\pi/2$, то есть:

$$\vec{J} = \vec{H} + e^{i\frac{\pi}{2}} \vec{V}$$

Для анализа выберем частоту $\omega = 1$ и $z = 0$. Тогда, вспоминая про наш дополнительный член, который мы вынесли за вектор, можем сделать следующую цепочку преобразований:

$$\left(\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ e^{i\frac{\pi}{2}} \end{bmatrix} \right) e^{it} = \begin{bmatrix} 1 \\ e^{i\frac{\pi}{2}} \end{bmatrix} e^{it} = \begin{bmatrix} e^{it} \\ e^{i(\frac{\pi}{2}+t)} \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \cos t \\ \cos(\frac{\pi}{2} + t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos t \\ -\sin t \end{bmatrix}$$

Подставляя разные значения t , можно заметить, что поляризация вращается по часовой стрелке. Действительно, при $t = 0$ вектор Джонса будет равен \vec{H} , при $t = \frac{\pi}{2}$ вектор равен $-\vec{V}$ и так далее. Этот вектор будем называть левой круговой поляризацией и обозначать \vec{L} . Ортогональный ему, вектор правой круговой поляризации будем обозначать \vec{R} . Запишем их разложение через вектор \vec{H} и вектор \vec{V} сразу с нормировкой:

$$\begin{aligned} \vec{L} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \vec{H} + \frac{i}{\sqrt{2}} \vec{V} \\ \vec{R} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \vec{H} - \frac{i}{\sqrt{2}} \vec{V} \end{aligned}$$

Здесь, по формуле Эйлера мы заменили $e^{i\pi/2}$ на i .

Итак, как и в случае со спинами, мы нашли 6 состояний, которые описывают любую возможную поляризацию. На самом деле, вектора Джонса ведут себя точно так же, как и спиноры, поэтому являются отличной иллюстрацией последних. В физическом пространстве найденные вектора Джонса между собой ортогональны. Давайте покажем, что в “поляризационном” пространстве угол между векторами будет в два раза больше. Для этого посмотрим, как осуществляется переход от одного состояния к другому.

Матрицы Джонса. Сфера Пуанкаре

Для вращений векторов Джонса мы используем, как это не удивительно, матрицы Джонса. У них тоже есть физическое воплощение – волновые пластины. Так, четвертьволновой пластине, которая меняет фазу на $\pi/2$, соответствует матрица $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{bmatrix}$. Давайте посмотрим, как она будет действовать на диагональную поляризацию:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{bmatrix} \vec{D} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ i \end{bmatrix} = \vec{L}$$

Значит, диагональная поляризация под действием четвертьволновой пластинки переходит в левую круговую поляризацию. Если поставить ещё несколько пластинок, то цепочка переходов будет следующая: $\vec{D} \rightarrow \vec{L} \rightarrow \vec{A} \rightarrow \vec{R} \rightarrow \vec{D}$.

Если попробовать подействовать пластинкой на горизонтальную поляризацию, то легко убедиться, что ничего не поменяется. Однако, можно провести трюк – если повернуть пластину на 45° , то поляризация для неё станет диагональной. С математической точки зрения нам нужно повернуть сначала повернуть базис на $\pi/4$, затем подействовать пластинкой, затем повернуть базис обратно. Запишем матрицу, которая получится при последовательном выполнении этих действий:

$$\begin{bmatrix} \cos \frac{\pi}{4} & \sin \frac{\pi}{4} \\ -\sin \frac{\pi}{4} & \cos \frac{\pi}{4} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \frac{\pi}{4} & -\sin \frac{\pi}{4} \\ \sin \frac{\pi}{4} & \cos \frac{\pi}{4} \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1+i & -1+i \\ -1+i & 1+i \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{bmatrix} e^{i\frac{\pi}{4}}$$

Попробуем применить это преобразование к вектору Джонса \vec{H} , описывающему горизонтальную поляризацию:

$$e^{i\frac{\pi}{4}} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = e^{i\frac{\pi}{4}} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ i \end{bmatrix} = e^{i\frac{\pi}{4}} \vec{L}$$

Результат более чем ожидаемый. Далее я буду опускать фазовый множитель, так как он не влияет на поляризацию. Действительно, домножение элементов вектора Джонса на комплексное значение даст просто смещение волны относительно оси z , однако поляризация останется та же. Осталось определить матрицу для перехода от поляризации \vec{H} к поляризации \vec{A} :

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

Теперь у нас есть три матрицы, используя которые мы можем переходить к любой из найденных нами 6 поляризаций. Смотря на цепочки преобразований, можно составить сферу Пуанкаре (рисунок 6). По ней видно, что, в отличие от физического пространства, ортогональные поляризации (например \vec{H} и \vec{V}) находятся под углом 180° друг к другу. То есть ситуация аналогична ситуации со спинами.

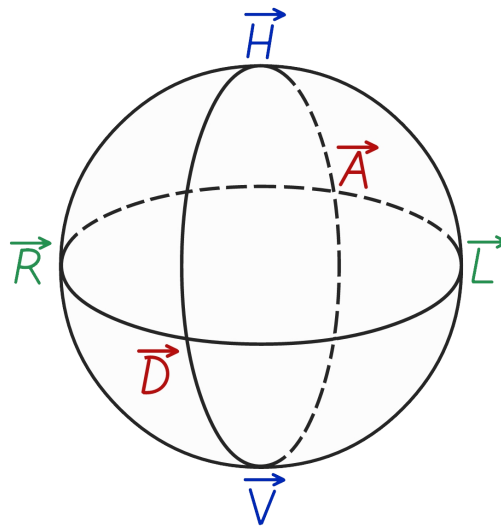


Рис. 6: Сфера Пуанкаре

Группа вращений $SO(3)$ и $SU(2)$, их связь

Теперь, когда мы рассмотрели физические примеры спиноров, давайте поговорим про то, каким образом описывается их поворот в пространстве. Для этого вспомним линейную алгебру и разберёмся с ортогональными и унитарными преобразованиями.

Итак, мы хотим поворачивать вектор в трёхмерном пространстве, не изменяя его длины. Так как длина вектора определяется как квадрат нормы, нам необходимо, чтобы выполнялось следующее условие:

$$\vec{v} \rightarrow R\vec{v}, \quad \|\vec{v}\|^2 = \|R\vec{v}\|^2$$

Тогда, записав норму как $\vec{v}^T \vec{v}$, получим ограничение на матрицу R :

$$\|\vec{v}\|^2 = \vec{v}^T \vec{v} = (R\vec{v})^T (R\vec{v}) = \vec{v}^T R^T R \vec{v} \implies R^T R = E$$

Матрицы, удовлетворяющие этому условию, называются ортогональными. Для обозначения множества этих матриц используют $O(3)$ (orthogonal, 3D). Однако, это не все условия, так как отражение тоже не изменяет длину вектора. Для того чтобы отделить вращения от отражения, необходимо посмотреть на детерминант матрицы.

$$\begin{aligned} R^T R = E &\implies \det(R^T) \det(R) = \det(E) \implies [\det(R)]^2 = 1 \\ &\implies [\det(R)] = \pm 1 \end{aligned}$$

Так как детерминант имеет смысл ориентированного объёма, то понятно, что для вращений нам нужно взять вариант с плюсом. Итак, дополнив условием на детерминант, получим специальную ортогональную группу $SO(3)$.

$$\begin{cases} [\det(R)] = +1 \\ R^T R = E \end{cases} \implies SO(3)$$

Группа $SO(3)$ отвечает за вращение векторов в 3D. Но объект нашего изучения – спиноры, комплексные вектора с двумя элементами. Так как квадрат в для комплексных чисел определяется как произведение комплексное на комплексно сопряженное, мы должны обновить условие для матриц:

$$||\vec{J}||^2 = J^\dagger J = ||U\vec{J}||^2 \implies U^\dagger U = E$$

Такие матрицы называются унитарными. Они образуют группу $U(2)$. С детерминантом ситуация похожая, но чуть более сложная:

$$|\det(U)|^2 = 1 \implies |\det(U)| = e^{i\phi}.$$

Аналогично, выбираем детерминант равный $+1$. Благо мы можем привести любую матрицу к этому детерминанту, так как домножение на комплексный множитель не влияет на спинор. Такая группа, как вы могли догадаться, называется $SU(2)$.

$$\begin{cases} [\det(U)] = +1 \\ U^\dagger U = E \end{cases} \implies SU(2)$$

Легко удостовериться, что матрицы, которые мы нашли до этого, как раз из $SU(2)$ группы:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} = E, & \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{vmatrix} &= \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1 \\ \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & -i \\ -i & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{bmatrix} &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} = E, & \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{vmatrix} &= \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1 \\ \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -i \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{bmatrix} &= E, & e^{-i\frac{\pi}{4}} \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{vmatrix} &= e^{i(-\frac{\pi}{4}-\frac{\pi}{4}+\frac{\pi}{2})} = 1 \end{aligned}$$

Во втором и третьем примерах мы домножили на $e^{-i\frac{\pi}{4}}$. Напомню, что домножение на комплексный множитель не меняет итогового значения поляризации. Благодаря этому факту, можно показать, что состояния в поляризационном пространстве 6 имеют в два раза больший угол между друг другом чем в физическом пространстве 5. Так, выполнив цепочку преобразований $\vec{V} \rightarrow \vec{D} \rightarrow \vec{H} \rightarrow \vec{A} \rightarrow \vec{V}$ мы получим

$$\begin{aligned} \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}^4 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} &= \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}^3 \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}^2 \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \end{bmatrix} = \\ &= \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 \\ -2 \end{bmatrix} = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 0 \\ -4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \end{bmatrix} = -\vec{V} \end{aligned}$$

Для описания поляризации этот минус не влияет, так как его можно представить в виде комплексного множителя $e^{i\pi}$. Другими словами, мы сделали полный круг и вернулись в первоначальное состояние. Однако в физическом пространстве мы повернули первоначальный вектор на 180 градусов. Если мы повторим эту цепочку, то придём к \vec{V} в обоих

пространствах. Получается, чтобы сделать полный круг в физическом пространстве, нужно сделать два круга для поляризационного пространства.

До этого момента в последних двух параграфах мы говорили только о поляризации и векторах Джонса. На самом деле, все полученные результаты можно перенести на спиновое состояние и спиноры. Действительно, если предположить, что вектор состояния $|z\rangle$ равен $\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$, а $|-z\rangle$ равен $\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$, то для оставшихся состояний получатся те же самые результаты. Последние рассуждения также можно перенести на спиновое пространство – для полного поворота вектора спина в пространстве квантовых состояний нам необходимо два поворота в физическом пространстве.

На данном этапе можно сказать, что спиноры – это вектора, состоящий из двух элементов, поворот которого осуществляется за счёт $SU(2)$ матрицы. И, умножение на комплексный множитель не меняет вектор, который он представляет (в случае векторов Джонса – вектор поляризации). Это неплохое физическое определение. Мы попробуем формализовать и развить его далее.

У тех, кто читал 8 семинар, может возникнуть закономерный вопрос: а где здесь матрицы Паули? Тем более, что они сами по себе хоть и унитарны, но не являются элементами $SU(2)$ группы. Действительно, детерминант всё трёх матриц Паули не будет равен $+1$. Значит, мы не можем с их помощью вращать спин? Это правда, но только отчасти.

Векторы и матрицы Паули

Давайте вспомним, что такое матрицы Паули. Для этого запишем их явный вид и посмотрим на их свойства. Свойства я буду проверять на одном примере, оставшиеся случаи можно проверить самостоятельно.

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

Во-первых, они унитарны и эрмитовы. Действительно

$$\sigma_z^\dagger \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} = E$$

Отсюда следует, что квадрат любой матрицы Паули будет равен единичной матрице.

$$\sigma_i^2 = E$$

Во-вторых, матрицы Паули антикоммутируют друг с другом. Проверим:

$$\begin{aligned} \sigma_y \sigma_z &= \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{bmatrix} \\ \sigma_z \sigma_y &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{bmatrix} \\ \sigma_y \sigma_z &= -\sigma_z \sigma_y \end{aligned}$$

В общем случае можно записать это свойство, используя скобки антикоммутации.

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} = 0, \quad i \neq j$$

Последнее свойство, которое нам понадобится позже, это нулевой след:

$$\text{Tr}(\sigma_z) = 1 - 1 = 0$$

или в общем случае

$$\text{Tr}(\sigma_i) = 0$$

Так как матрицы Паули унитарны, мы можем использовать их для вращения состояний, описываемых векторами с комплексными элементами. Но, мы знаем, что вращениям соответствуют матрицы с детерминантом $+1$, в то время как для отражений детерминант матриц равен -1 . Несложно убедиться, что детерминант матриц Паули равен как раз -1 :

$$\det(\sigma_z) = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix} = -1$$

Получается, действие матриц Паули соответствует отражению вектора. Перед нами сейчас стоит две задачи: разобраться, на как выглядит вектор, на который действуют матрицы Паули и как с помощью них осуществлять именно поворот. Пойдём по порядку.

Как известно, любой вектор можно представить в виде линейной комбинации базисных векторов. Попробуем сделать это, но вместо базисных векторов возьмём матрицы Паули:

$$V = x\sigma_x + y\sigma_y + z\sigma_z = \begin{bmatrix} 0 & x \\ x & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & -iy \\ iy & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} z & 0 \\ 0 & -z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} z & x - iy \\ x + iy & -z \end{bmatrix}$$

Получившийся вектор будем называть вектором Паули. Не удивляйтесь, что вектором мы называем матрицу. Поведения у него будет совсем такое же, как у обычного вектора, правда в другом пространстве. Легко проверить, что, исходя из свойств матриц Паули, вектора Паули имеет следующие свойства:

1. След от вектора Паули равен нулю: $\text{tr}(V) = 0$
2. Вектор Паули эрмитов: $V = V^\dagger$
3. Квадрат вектора Паули равен квадрату нормы обычного вектора, из которого он составлен, умноженного на единичную матрицу: $V^2 = ||v||^2 E$

Теперь, перейдём, наконец-то, к вращению. Предлагаю пошагово сконструировать формулу для поворотов, чтобы лучше в ней разобраться. Для этого сначала рассмотрим более простую версию перемещения вектора – отражение. Вспомним, что в случае трёхмерного вектора, отражение вдоль, например, оси z , производится заменой знака рядом с коэффициентом при базовом векторе z .

$$v = x\vec{e}_x + y\vec{e}_y + z\vec{e}_z \xrightarrow{\text{отражение}} x\vec{e}_x + y\vec{e}_y - z\vec{e}_z$$

Для того чтобы сделать то же самое при работе с вектором Паули, необходимо воспользоваться такой операцией как сопряжение (conjugation). Чтобы выполнить сопряжение, “зажмём” элемент, на который хотим подействовать, между сопрягаемыми элементами. Давайте посмотрим на примере сопряжение всех матриц Паули по матрице σ_z :

$$\begin{aligned} \sigma_x &\rightarrow \sigma_z \sigma_x \sigma_z^{-1} = (\sigma_z^2 = E) = \sigma_z \sigma_x \sigma_z = (\{\sigma_x, \sigma_z\} = 0) = -\sigma_z \sigma_z \sigma_x = -\sigma_x \\ \sigma_y &\rightarrow \sigma_z \sigma_y \sigma_z^{-1} = -\sigma_z \sigma_z \sigma_y = -\sigma_y \\ \sigma_z &\rightarrow \sigma_z \sigma_z \sigma_z^{-1} = \sigma_z \end{aligned}$$

Оказалось, сопряжение даёт обратный результат: все знаки, кроме z , поменялись на противоположные. Тогда, чтобы добиться нужного эффекта, будет использовать сопряжение с минусом, то есть $\sigma_i \rightarrow -\sigma_j \sigma_i \sigma_j^{-1}$. Давайте проверим, что это сработает с вектором Паули:

$$V \rightarrow -\sigma_z V \sigma_z = -\sigma_z (x\sigma_x + y\sigma_y + z\sigma_z) \sigma_z = -(-x\sigma_x - y\sigma_y + z\sigma_z) = x\sigma_x + y\sigma_y - z\sigma_z$$

Отражение работает для любого единичного вектора U в целом, не только для σ_z : $V \rightarrow -UVU$, где $U^2 = 1$.

Теперь, когда мы знаем, как делать отражение, можем построить операцию поворота. Действительно, ведь поворот – это просто два отражения. Представим прямые, относительно которых мы отражаем вектор. Угол между этими прямыми будет равен половине угла, на который будет произведён поворот (см. рисунок 7). Давайте проверим, как будет выглядеть поворот на 180 градусов. Для этого сначала отразим вдоль оси x , затем вдоль оси y .

$$V \rightarrow -\sigma_y (-\sigma_x V \sigma_x) \sigma_y = \sigma_y \sigma_x V \sigma_x \sigma_y = \sigma_y \sigma_x V (\sigma_y \sigma_x)^\dagger$$

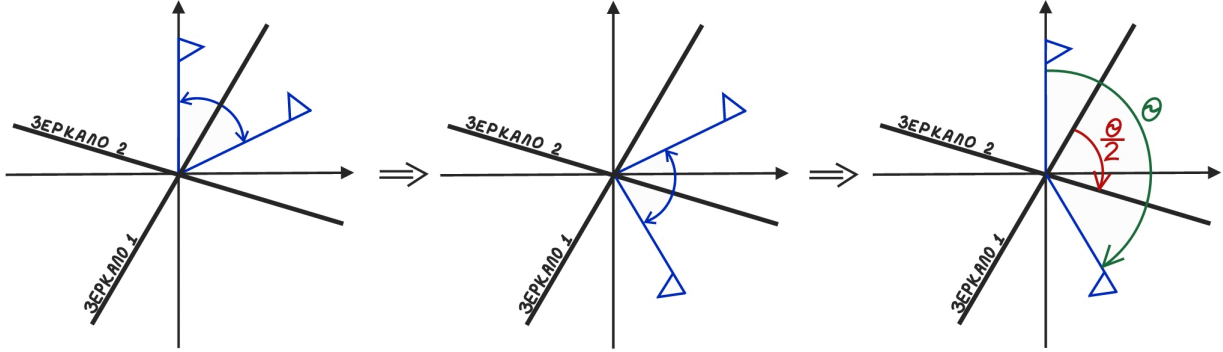


Рис. 7: Связь двух отражений и поворота.

Если честно расписать это выражение, можно заметить, что в векторе Паули коэффициенты при σ_x и σ_y поменяют знак. Значит, мы получили, что хотели. Теперь давайте обсудим, как выглядит поворот на произвольный угол θ . Для начала рассмотрим поворот в плоскости xy . Для этого, отразим сначала вдоль оси x , затем вдоль вектора τ , который составляет с осью x угол $\theta/2$ (см. рисунок 8). Вектор τ можно выразить через базовые матрицы Паули следующим образом: $\tau = \cos \frac{\theta}{2} \sigma_x + \sin \frac{\theta}{2} \sigma_y$. Тогда, итоговый поворот будет выглядеть следующим образом:

$$\begin{aligned} V \rightarrow \tau \sigma_x V \sigma_x \tau &= \left(\cos \frac{\theta}{2} \sigma_x + \sin \frac{\theta}{2} \sigma_y \right) \sigma_x V \sigma_x \left(\cos \frac{\theta}{2} \sigma_x + \sin \frac{\theta}{2} \sigma_y \right) = \\ &= \left(\cos \frac{\theta}{2} E + \sin \frac{\theta}{2} \sigma_y \sigma_x \right) V \left(\cos \frac{\theta}{2} E + \sin \frac{\theta}{2} \sigma_x \sigma_y \right) = \\ &= \left(\cos \frac{\theta}{2} E - \sin \frac{\theta}{2} \sigma_x \sigma_y \right) V \left(\cos \frac{\theta}{2} E - \sin \frac{\theta}{2} \sigma_x \sigma_y \right)^\dagger \end{aligned}$$

Аналогичная конструкция будет для поворота в плоскости yz и zx .

Теперь, когда мы знаем, как выглядит операция поворота вектора Паули, давайте посмотрим внимательнее на оператор, который этот поворот выполняет. Запишем его в виде матрицы:

$$\begin{aligned} \left(\cos \frac{\theta}{2} E - \sin \frac{\theta}{2} \sigma_x \sigma_y \right) &= \begin{bmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & 0 \\ 0 & \cos \frac{\theta}{2} \end{bmatrix} - \sin \frac{\theta}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} \cos \frac{\theta}{2} + i \sin \frac{\theta}{2} & 0 \\ 0 & \cos \frac{\theta}{2} - i \sin \frac{\theta}{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{i\frac{\theta}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\theta}{2}} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Читатель, наверное, уже догадался, что это за матрица. Действительно, это элементы группы $SU(2)$. Повороты в других плоскостях так же будут осуществляться с помощью

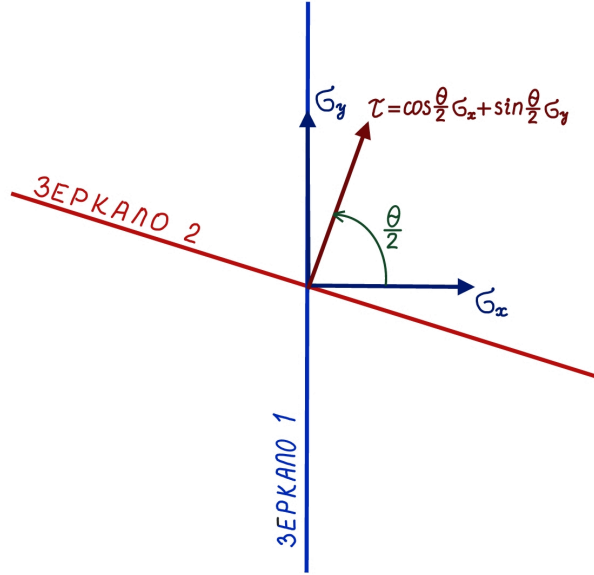


Рис. 8: Отражение от произвольного вектора

$SU(2)$ матриц. Важное замечание заключается в том, что, если мы возьмём матрицу со знаком минус, то мы получим тот же самый поворот, так как матрицы две. Это значит, что одной матрице поворота в $SO(3)$ соответствует две матрицы в $SU(2)$.

Чтобы доказать это более строго, достаточно показать, что при повороте вектора Паули $V \rightarrow AVB$ должны сохраняться следующие свойства:

1. Вектор V эрмитов: $V = V^\dagger$
2. Вектор V имеет нулевой след: $tr(V) = 0$
3. Поворот не меняет длину вектора $||v||^2 = x^2 + y^2 + z^2$.

Подбирая матрицы A и B такими, чтобы выполнялись эти условия, можно убедиться, что матрицы A и B являются элементами $SU(2)$ группы. Читатель может проделать это самостоятельно.

Мы разобрались с поворотом вектора Паули, но при чём тут спиноры? Оказывается, спиноры, как и вектор Паули, преобразуются с помощью $SU(2)$ матриц. Покажем этот факт в следующей главе.

Спиноры Паули

Итак, чтобы повернуть вектор Паули, мы закрываем его в две $SU(2)$ матрицы. Выглядит это следующим образом:

$$[SU(2)] \begin{bmatrix} z & x - yi \\ x + yi & -z \end{bmatrix} [SU(2)]^\dagger$$

Давайте попробуем факторизовать вектор Паули, то есть представить его как внешнее произведение (outer product) двух векторов. В рассматриваемом нами случае это будет столбец из двух элементов на строку из двух элементов. Из свойств внешнего произведения заключаем, что определитель матрицы должен быть равен нулю, чтобы её можно было

представить в таком виде. Тогда, найдём разложение для вектора Паули:

$$\begin{bmatrix} z & x-yi \\ x+yi & -z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c & d \end{bmatrix} \implies \begin{cases} ac = z \\ bc = x+yi \\ ad = x-yi \\ bd = -z \end{cases}$$

при условии, что $\det(M) = 0 \iff x^2 + y^2 + z^2 = 0$

Позанимаемся алгеброй и арифметикой:

$$\begin{aligned} x^2 + y^2 + z^2 = 0 &\implies z^2 = -(x^2 + y^2) \implies z = i\sqrt{x^2 + y^2} \implies z = i\sqrt{x^2 - (iy)^2} \implies \\ &\implies z = i\sqrt{x-iy}\sqrt{x+iy} \implies a = \sqrt{x-yi}, c = i\sqrt{x+yi} \end{aligned}$$

Несложными махинациями мы получили коэффициенты а и с. Давайте попробуем выразить b и d:

$$\begin{aligned} bc = x+yi &\implies bi\sqrt{x+yi} = x+yi \implies bi = \sqrt{x+yi} \implies \\ &\implies b = -c \\ ad = x-yi &\implies d\sqrt{x-yi} = x-yi \implies d = \sqrt{x-yi} \implies \\ &\implies d = a \end{aligned}$$

Значит мы можем разложить вектор Паули следующим образом:

$$\begin{bmatrix} z & x-yi \\ x+yi & -z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -b & a \end{bmatrix}, \text{ где } a = \sqrt{x-yi}, b = -i\sqrt{x+yi}$$

Обозначим элементы этих векторов более красивыми буквами: $a = \xi^1, b = \xi^2$. Теперь, можно сделать важное заявление: объект вида $\begin{bmatrix} \xi^1 \\ \xi^2 \end{bmatrix}$ и его эрмитово сопряжение будем называть *спинорами Паули*. Заметим, что при умножении, например, столбца на любое комплексное число $Ae^{i\phi}$, а строки на комплексное число, обратное ему $\frac{1}{Ae^{i\phi}}$ мы получим другие спиноры, но тот же самый вектор Паули. Это ожидаемо – когда мы рассматривали векторы Джонса, умножение на комплексный множитель так же не изменяло поляризацию волны.

Рассмотрим ситуацию, когда детерминант матрицы паули не равен нулю. Можно ли тогда представить её в виде спиноров? Оказывается, что да, но чуть менее тривиально. Разложим вектор Паули в сумму матриц с одним элементом и остальными нулями:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} z & x-yi \\ x+yi & -z \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} z & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ x+yi & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & x-yi \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -z \end{bmatrix} = \\ &= z \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + (x+yi) \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} + (x-yi) \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} - z \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \\ &= z \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} + (x+yi) \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} + (x-yi) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 \end{bmatrix} - z \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Таким образом мы разложили вектор Паули на сумму спиноров. Это должно напомнить вам разложение состояния по базовым кет векторам. Если напомнило, то можете считать себя внимательным читателем. Действительно, если мы определим базис в пространстве спиноров как $|s_1\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ и $|s_2\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$, то получим разложение следующего вида:

$$V = z |s_1\rangle \langle s_1| + (x+yi) |s_2\rangle \langle s_1| + (x-yi) |s_1\rangle \langle s_2| - z |s_2\rangle \langle s_2|$$

Так же становится понятно, что такое матрицы Паули. Так как вектор Паули получается путём действия матриц Паули на вектор, получается, что матрицы Паули – это линейное отображение из трёхмерного пространства в пространство пар спиноров вида $S \otimes S^{dual}$.

Итог

Спинор – достаточно абстрактный объект. Однако, с его физическими проявлениями мы встречаемся и в классической физике (поляризация света) и в квантовой (спин частиц). В этом приложении мы закончили на том, что спинор – это вектор с двумя элементами, который преобразуется с помощью $SU(2)$ матриц. Внешнее произведение спинора на самого себя образует оператор – матрицу, которая в квантовом случае описывает состояние, например, спина электрона. Умножение спинора на комплексный множитель не меняет этот оператор.

Когда мы говорим про состояние спина, которое обычно обозначаем как $\psi = \begin{bmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{bmatrix}$, мы имеем в виду как раз спинор. Если мы действуем на него матрицей Паули, то мы отражаем его относительно соответствующей оси. Если мы действуем на него двумя матрицами Паули, то мы поворачиваем его в соответствующей плоскости.

Спиноры могут быть определены более абстрактно. Однако, для этого необходимо обращаться к алгебре Клиффорда и группам Ли. Я это сделаю в отдельной небольшой справочной работе. После этого приложения, надеюсь, у вас сложилось более интуитивное понимание спиноров.

Если вы хотите углубиться в эту тему, посоветую вам посмотреть серию [видео про спиноры](#). Именно этими видео было вдохновлено данное приложение и без них оно не было бы возможным. Многие рассуждения взяты оттуда, как и идеи для визуализации. Отдаю дань уважения автору за раскрытие такой интересной темы.

Приложение С

Раскрытие некоторых математических аспектов квазиклассики на примере задач

Упражнение №С1

Пусть частица массой m находится на n -ом уровне гармонического осциллятора. Найдите точку поворота x_2 . Насколько далеко от точки поворота может улететь частица перед тем как ошибка из-за линейаризации потенциала достигнет 1%?. При $z \geq 5$ применение асимптотики для функции Эйри $Ai(z)$ даёт ошибку в 1%. Для расстояния вылета за точку поворота d найти наименьший уровень n , при котором $\alpha d \geq 5$.

Напомню, как выглядит энергия для квантового гармонического осциллятора:

$$E_n = \hbar\omega(n + 1/2).$$

Точку поворота можно найти из условия $p = 0$:

$$\begin{aligned} p(x_2) = \sqrt{2mE_n - m^2\omega^2 x_2^2} = 0 &\implies 2mE_n = m^2\omega^2 x_2^2 \implies \\ &\implies x_2 = \sqrt{\frac{(2n+1)\hbar}{m\omega}} \end{aligned}$$

Пусть d – искомое расстояние, на которое может улететь частица при сохранении ошибки в 1%. Тогда найдём d из следующей формулы:

$$\frac{V(x_2 + d) - V_{lin}(x_2 + d)}{V(x_2)} = 0.01$$

Напомню, что линейаризованный потенциал $V_{lin}(x)$ это

$$V_{lin}(x) = V(x_2) + V'(x_2)(x - x_2)$$

Подставим в него значения x_2 и получим:

$$\begin{aligned} V_{lin}(x) = V(x_2) + V'(x_2)(x - x_2) &= \frac{m\omega^2 x_2^2}{2} + (m\omega^2 x_2)(x - x_2) \implies \\ \implies V_{lin}(x_2 + d) &= \frac{m\omega^2 x_2^2}{2} + m\omega^2 x_2 d. \end{aligned}$$

Подставив это в формулу, получим:

$$\frac{V(x_2 + d) - V_{lin}(x_2 + d)}{V(x_2)} = \frac{\frac{m\omega^2 (x_2 + d)^2}{2} - \frac{m\omega^2 x_2^2}{2} - m\omega^2 x_2 d}{\frac{m\omega^2 x_2^2}{2}} = \left(\frac{d}{x_2}\right)^2 = 0.01$$

Тогда, расстояние d равно

$$d = 0.1x_2.$$

Найдём уровень энергии, при котором выполняется $\alpha d \geq 5$. Для этого вспомним, что

$$\alpha = (2m^2\omega^2 x_2 / \hbar)^{1/3}.$$

Пользуясь полученным выше соотношением:

$$0.1x_2 \left[\frac{2m^2\omega^2 x_2}{\hbar^2} \right]^{1/3} \geq 5 \implies \frac{2m^2\omega^2 x_2^4}{\hbar^2} \geq 50^3 \implies \implies \frac{2m^2\omega^2}{\hbar^2} \frac{(2n+1)^2 \hbar^2}{m^2\omega^2} \geq 50^3 \implies (2n+1)^2 \geq 50^2 \cdot 25 \implies n \geq 124.5$$

Получается, что при значениях $n \geq 125$ линейная аппроксимация и асимптотика функции Эйри не будут превышать ошибку в 1%. В квазиклассических системах n обычно сильно больше.



Упражнение №С2

Выведите формулы связи для убывающего потенциала (рисунок 1).

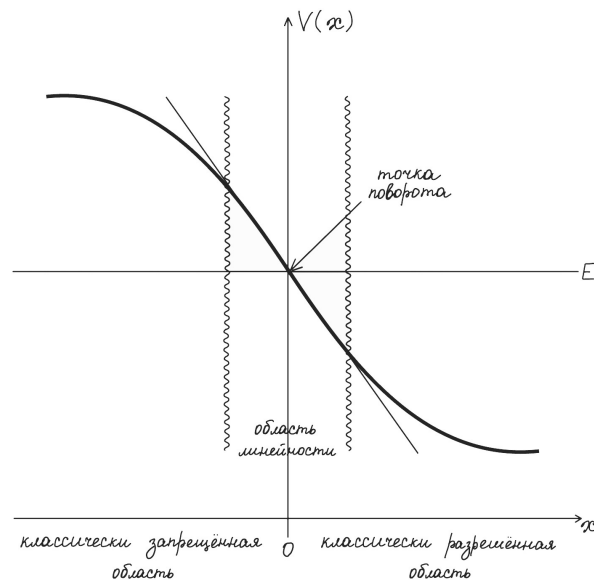


Рис. 1: Потенциальный барьер

Подход будет аналогичным, как и для правой точки. Для начала запишем волновую функцию, коэффициенты которой будем искать:

$$\psi(x) \simeq \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{|p|}} \left[A e^{-\frac{i}{\hbar} \int_x^0 |p| dx'} \right], & x < 0; \\ \frac{1}{\sqrt{p}} \left[B e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^x p dx'} + C e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^x p dx'} \right], & 0 < x. \end{cases}$$

Запишем линеаризованный потенциал (обращаю внимание на то, что в этот раз первая производная будет отрицательной, так как потенциал убывает) как $V(x) \approx E + V'(0)x$. Тогда уравнение Шрёдингера будет иметь следующий вид:

$$\frac{d^2\psi_T}{dx^2} = -\alpha^3 x \psi_p, \quad \alpha = \left(\frac{2m|V'(0)|}{\hbar^2} \right)^{1/3}$$

Решением этого дифференциального уравнения опять будут функции Эйри:

$$\psi_T(x) = aAi(-\alpha x) + bBi(-\alpha x)$$

Посчитаем импульс:

$$p \simeq \sqrt{2m|V'(0)|x} = \hbar\alpha^{3/2}\sqrt{x}$$

Подставим импульс в интеграл для классически запрещённой области:

$$\int_x^0 |p|dx' = \hbar\alpha^{3/2} \int_x^0 \sqrt{-x'}dx' = \frac{2}{3}\hbar(-\alpha x)^{3/2}$$

Запишем волновую функцию в той же области с полученным значением интеграла:

$$\psi(x) \simeq \frac{A}{\hbar^{1/2}\alpha^{3/4}(-x)^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2}}$$

Воспользуемся аппроксимацией для больших значений $-\alpha x \gg 0$:

$$\psi_T \approx \frac{a}{2\pi^{1/2}(-\alpha x)^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2}} + \frac{b}{\pi^{1/2}(-\alpha x)^{1/4}} e^{\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2}}$$

Сравнивая две функции, получим:

$$a = 2A\sqrt{\frac{\pi}{\alpha\hbar}}, \quad b = 0$$

Прделаем аналогичные рассуждения для классически разрешенной области:

$$\begin{aligned} \int_0^x p dx' &= \hbar\alpha^{3/2} \int_0^x \sqrt{x'} dx' = \frac{2}{3}\hbar(\alpha x)^{3/2} \implies \\ \implies \psi(x) &\simeq \frac{1}{\hbar^{1/2}\alpha^{3/4}x^{1/4}} \left[B e^{i\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}} + C e^{-i\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}} \right] \end{aligned}$$

В этот раз воспользуемся аппроксимацией для малых значений $\alpha x \ll 0$:

$$\psi_T \approx \frac{a}{\pi^{1/2}(\alpha x)^{1/4}} \sin \left[\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right] = \frac{a}{\pi^{1/2}(\alpha x)^{1/4}} \frac{1}{2i} \left[e^{i\frac{\pi}{4}} e^{i\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}} - e^{-i\frac{\pi}{4}} e^{-i\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}} \right].$$

Опять сравнив две волновые функции, получим:

$$B = \frac{a}{2i} \sqrt{\frac{\alpha\hbar}{\pi}} e^{i\frac{\pi}{4}}, \quad C = -\frac{a}{2i} \sqrt{\frac{\alpha\hbar}{\pi}} e^{-i\frac{\pi}{4}}$$

Подставим ранее полученную а, выраженную через коэффициент А:

$$B = -ie^{i\frac{\pi}{4}}A, \quad C = ie^{-i\frac{\pi}{4}}A$$

Подставляя эти значения в первоначальную функцию для $x > 0$, получим:

$$\psi(x) \simeq \frac{-iA}{\sqrt{p}} \left[e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^x p dx' + i\frac{\pi}{4}} - e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^x p dx' - i\frac{\pi}{4}} \right] = \frac{2A}{\sqrt{p}} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_0^x p dx' + \frac{\pi}{4} \right]$$

Запишем итоговый вид волновой функции для левой точки поворота:

$$\psi_L(x) \simeq \begin{cases} \frac{A}{\sqrt{|p|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} |p| dx'}, & x < x_1 \\ \frac{2A}{\sqrt{p}} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p dx' + \frac{\pi}{4} \right], & x > x_1 \end{cases}$$

Упражнение №СЗ

Рассмотрите задачу с потенциальным барьером (рисунок 2). Найдите волновую функцию. Запишите, какой в этом случае будет коэффициент прохождения T .

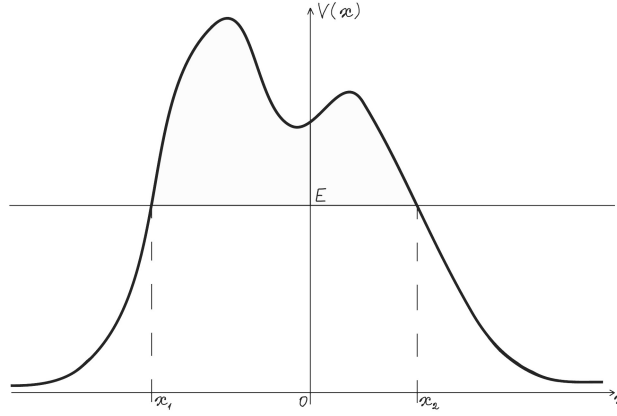


Рис. 2: Потенциальный барьер

Запишем общую волновую функцию:

$$\psi(x) \simeq \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{p}} \left[A e^{\frac{i}{\hbar} \int_x^{x_1} p dx'} + B e^{-\frac{i}{\hbar} \int_x^{x_1} p dx'} \right], & x < x_1; \\ \frac{1}{\sqrt{|p|}} \left[C e^{\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x |p| dx'} + D e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x |p| dx'} \right], & x_1 < x < x_2; \\ \frac{1}{\sqrt{p}} \left[F e^{\frac{i}{\hbar} \int_{x_2}^x p dx'} \right], & x > x_2. \end{cases}$$

Внутри барьера запрещённая область, поэтому импульс стоит под модулем. Слева приходит обычная волна и улетает отражённая, поэтому экспоненты две. Справа же только волна, которая прошла сквозь барьер, поэтому слагаемое только одно.

Для нахождения коэффициентов будем использовать тот же подход, что мы использовали в нахождении волновых функций для точек поворота в потенциальной яме. Тем более, что при аппроксимации функций Эйри получатся те же самые ψ_T . Итак, считаем интеграл от импульса, подставляем в волновую функцию для правой области левой точки поворота ($x_1 < x < x_2$), получим:

$$\psi(x) \simeq \frac{1}{\hbar^{1/2} \alpha^{3/4} x^{1/4}} \left[C e^{\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}} + D e^{-\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}} \right]$$

Аппроксимация остаётся такой же:

$$\psi_T \approx \frac{a}{2\pi^{1/2}(\alpha x)^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}} + \frac{b}{\pi^{1/2}(-\alpha x)^{1/4}} e^{\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2}}$$

Сравнивая, получим:

$$a = 2D \sqrt{\frac{\pi}{\alpha \hbar}}, \quad b = C \sqrt{\frac{\pi}{\alpha \hbar}}$$

Для левой области получим следующие волновые функции:

$$\begin{aligned}\psi(x) &\simeq \frac{1}{\hbar^{1/2}\alpha^{3/4}(-x)^{1/4}} \left[A e^{i\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}} + B e^{-i\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}} \right]; \\ \psi_T(x) &\approx \frac{a}{\pi^{1/2}(\alpha x)^{1/4}} \sin \left[\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right] + \frac{b}{\pi^{1/2}(\alpha x)^{1/4}} \cos \left[\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right] = \\ &= \frac{a}{2\pi^{1/2}(-\alpha x)^{1/4}} \left[(-ia + b) e^{i\frac{\pi}{4}} e^{i\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}} + (ia + b) e^{-i\frac{\pi}{4}} e^{-i\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}} \right].\end{aligned}$$

Вновь сравнивая, получим:

$$A = \sqrt{\frac{\hbar\alpha}{\pi}} \left(\frac{-ia + b}{2} \right) e^{i\frac{\pi}{4}}, \quad B = \sqrt{\frac{\hbar\alpha}{\pi}} \left(\frac{ia + b}{2} \right) e^{-i\frac{\pi}{4}}$$

Подставим ранее полученные значения коэффициентов а и b:

$$A = \left(\frac{C}{2} - iD \right) e^{i\frac{\pi}{4}}, \quad B = \left(\frac{C}{2} + iD \right) e^{-i\frac{\pi}{4}}$$

Для правой точки поворота перепишем волновую функцию для запрещённой области в следующем виде:

$$\psi(x) \simeq \frac{1}{\sqrt{|p|}} \left[C e^{\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} |p| dx + \frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x |p| dx'} + D e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} |p| dx - \frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x |p| dx'} \right]$$

Введём новые обозначения. Пусть $\gamma = \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} |p| dx$, $C' = D e^{-\gamma}$ и $D' = C e^{\gamma}$ и сместим ноль в правую точку поворота. Тогда волновая функция будет иметь следующий вид:

$$\psi(x) \simeq \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{|p|}} \left[C' e^{\frac{1}{\hbar} \int_x^0 |p| dx'} + D' e^{-\frac{1}{\hbar} \int_x^0 |p| dx'} \right], & x < 0; \\ \frac{1}{\sqrt{p}} \left[F e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^x p dx'} \right], & x > 0 \end{cases}$$

Далее делаем всё по аналогии:

$$\begin{cases} \psi(x) \simeq \frac{1}{\hbar^{1/2}\alpha^{3/4}(-x)^{1/4}} \left[C' e^{\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}} + D' e^{-\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}} \right] \\ \psi_T \approx \frac{a}{2\pi^{1/2}(-\alpha x)^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2}} + \frac{b}{\pi^{1/2}(-\alpha x)^{1/4}} e^{\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2}} \end{cases} \implies \begin{cases} a = 2\sqrt{\frac{\pi}{\hbar\alpha}} D' \\ b = \sqrt{\frac{\pi}{\hbar\alpha}} C' \end{cases}$$

Рассмотрим классически разрешённую область:

$$\begin{cases} \psi(x) \simeq \frac{1}{\hbar^{1/2}\alpha^{3/4}x^{1/4}} F e^{i\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}} \\ \psi_T \approx \frac{a}{2\pi^{1/2}(\alpha x)^{1/4}} \left[(-ia + b) e^{i\frac{\pi}{4}} e^{i\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}} + (ia + b) e^{-i\frac{\pi}{4}} e^{-i\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}} \right] \end{cases} \implies (ia + b) = 0.$$

Выразим коэффициенты а и b через F:

$$F = \sqrt{\frac{\hbar\alpha}{\pi}} \left(\frac{-ia + b}{2} \right) e^{i\frac{\pi}{4}} \implies b = \sqrt{\frac{\pi}{\hbar\alpha}} e^{-i\frac{\pi}{4}} F, \quad a = i\sqrt{\frac{\pi}{\hbar\alpha}} e^{-i\frac{\pi}{4}} F$$

Найдём связь коэффициентов C и D с коэффициентом F:

$$\begin{cases} C' = e^{-i\frac{\pi}{4}} F \\ D' = \frac{i}{2} e^{-i\frac{\pi}{4}} F \end{cases} \implies \begin{cases} D = e^{-i\frac{\pi}{4}} F e^{\gamma} \\ C = \frac{i}{2} e^{-i\frac{\pi}{4}} F e^{-\gamma} \end{cases}$$

Подставив их в формулу для A , получим нужную нам связь между A и F :

$$A = \left(\frac{C}{2} - iD \right) e^{i\frac{\pi}{4}} = i \left(\frac{e^{-\gamma}}{4} - e^{\gamma} \right) F$$

Коэффициент прохождения есть отношение коэффициента прошедшей к коэффициенту падающей волны $T = \frac{|F|^2}{|A|^2}$. Найдём его в нашей задаче:

$$T = \frac{1}{(e^{\gamma} - e^{-\gamma}/4)^2} = \frac{e^{-2\gamma}}{[1 - (e^{-\frac{\gamma}{2}})^2]^2}$$

При $\gamma \gg 1$ знаменатель близок к 1 и тогда можно записать коэффициент пропускания как

$$T = e^{-2\gamma}$$



Упражнение №С4

Частица массой m с энергией E “заперта” в области $r < r_1$, где $U(r) = -U_0$ (рис. 3). При $r > r_1$ потенциал имеет вид:

$$U(r) = \frac{2Ze^2}{r}; \quad E \ll \frac{2Ze^2}{r_1}$$

Воспользовавшись квазиклассическим приближением, найдите коэффициент прохождения сквозь барьер.

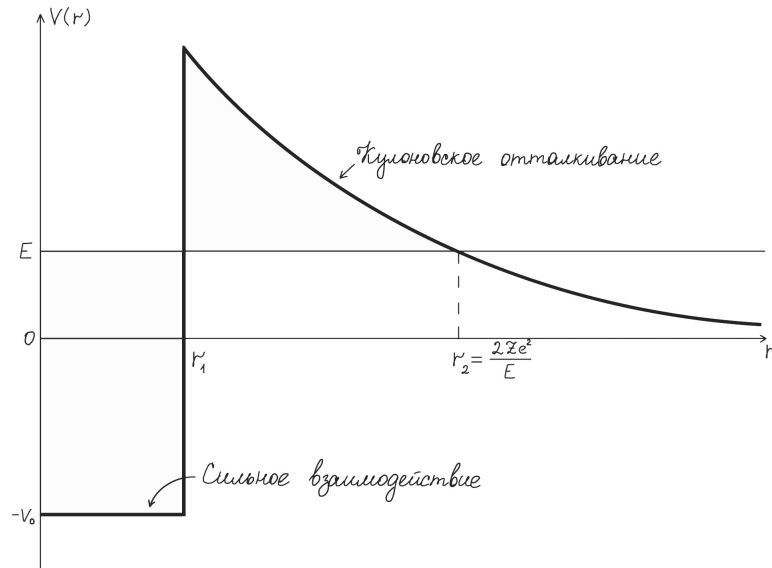


Рис. 3: Модель альфа излучения

Из предыдущей задачи мы знаем, что коэффициент прохождения можно выразить как $T = e^{-2\gamma}$, где $\gamma = \int_{x_1}^{x_2} p dx$. Определим правую точку поворота как $r_2 = 2Ze^2/E$. Посчитаем

гамму для нашей задачи:

$$\begin{aligned}\gamma &= \frac{1}{\hbar} \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{\frac{2Ze^2}{r} - E} dx = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{\frac{r_2}{r} - 1} dx = \\ &= (r = r_2 \sin^2 u) = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \left[r_2 \left(\frac{\pi}{2} - \arcsin \sqrt{\frac{r_1}{r_2}} \right) - \sqrt{r_1(r_2 - r_1)} \right]\end{aligned}$$

На практике оказывается, что $r_1 \ll r_2$. Тогда $\arcsin(x) \approx x$ и гамма равна

$$\gamma \simeq \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \left[\frac{\pi}{2} r_2 - 2\sqrt{r_1 r_2} \right] = K_1 \frac{Z}{\sqrt{E}} - K_2 \sqrt{Z r_1},$$

где $K_1 = \frac{e^2 \pi \sqrt{2m}}{\hbar}$ и $K_2 = \frac{4e\sqrt{m}}{\hbar}$. Тогда коэффициент прохождения равен

$$T = e^{-2\gamma} = e^{2K_2 \sqrt{Z r_1} - K_1 \frac{2Z}{\sqrt{E}}}$$



Благодарности

Первоначально эти записи подразумевались как конспекты, используя которые мне было бы проще рассказывать семинары. В какой-то момент пришло понимание, что эти записи могут стать полноценным самостоятельным учебным пособием, с погружением в теорию, подробным решением задач и красивыми картинками. Первоначально задача казалась неподъёмной. Оказалось, что это вполне посильно. Всё, что нужно, это люди, которые смогут помочь и поддержать в самые сложные и не очень моменты. Таким людям и посвящена эта глава.

Первым делом хочу сказать огромное спасибо Хамидуллиной Галие. Если вам понравились рисунки, вы не нашли опечатки в формулах или смогли разобраться, как себя ведёт частица в трёхмерном осцилляторе – это всё её работа. Помимо того, что она хорошо знает математику и может взять любой интеграл, она так же всегда готова помочь, когда это особенно необходимо. Без неё эта работа не получилось бы такой полноценной и самостоятельной. Не говоря уже о том, что она помогала мне и на моих обычных семинарах. Её по праву можно назвать соавтором как минимум этого пособия.

Когда пишешь такую работу, очень важно сохранять интерес и мотивацию. Это было бы невозможно без очень близкого и важного для меня человека – Койновой Наталии. Её постоянная поддержка и напоминание о том, насколько важна и интересна эта работа помогали мне на протяжении всего этапа написания семинаров. Когда я терял веру в себя, именно она помогала мне её найти и снова сесть за рабочий стол. Даже если бы я написал эту работу сам, без неё она бы никогда не вышла. Помимо психологической поддержки, Наташа идеально знает русский язык. Поэтому, она выступала в роли редактора этих семинаров. Надеюсь, от неё не ускользнула ни одна моя ошибка. Спасибо ей за всё.

Так же хочется сказать спасибо моему самому первому набору: Коле, Глебу, Алёне, Тимуру, Саше и Галие (уже упомянутой выше). Они смогли подарить мне уверенность в том, что эта работа действительно кому-то нужна и может помочь при решении домашнего задания, на сдачах и на экзамене. Самое важное, что они доверились мне, и пошли на ещё совсем сырые семинары. Благодаря им они стали гораздо лучше.

Последнюю благодарность я бы хотел выразить своему преподавателю по статистической физике – Суровцеву Евгению Владимировичу. И хоть мы встретились с ним, когда я уже начал рассказывать квантовую механику, он послужил для меня преподавательским ориентиром. Его очень доброе, местами ироничное отношение к студентам в совокупности с глубоким знанием предмета и большим желанием его понятно объяснить делают из него показательного лектора и семинариста. Если когда-нибудь я стану преподавателем, именно он будет той планкой, на которую я буду равняться.

Список литературы

- [1] А Львовский. «Отличная квантовая механика: Учеб. пособие: в 2 ч./Александр Львовский; Пер. с англ». В: М.: Альпина нон-фикшн (2019).
- [2] Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц. Квантовая механика: Нерелятивистская теория. Т. 3. Наука, 1989.
- [3] David J Griffiths и Darrell F Schroeter. Introduction to quantum mechanics. Cambridge university press, 2018.
- [4] ЮМ Белоусов, СН Бурмистров и АИ Тернов. «Задачи по теоретической физике». В: Долгопрудный: ИД Интеллект (2012).