

Теоретические вопросы зима

15 февраля 2022 г.

Оглавление

1	Модель атома Бора	3
2	Фотоэффект	5
3	Излучение темного тела	7
	Постановка проблемы	7
	Объяснение UV-катастрофы	8
4	Волна де Бройля. Волновые пакеты	10
5	Физический смысл волновой функции в квантовой механике	12
6	Операторы физических величин и их собственные значения	14
7	Операторы физических величин и матрицы	18
	Матричная формулировка квантовой механики	18
	Умножение матричных операторов	19
	След и его свойства (полезное дополнение)	20
8	Условие нормировки для волновых функций. Непрерывный и дискретный спектр	21
9	Непрерывный и дискретный спектр. Вырождение уровней	23
10	Вычисление средних величин в квантовой механике	25
11	Соотношение неопределенностей	26
12	Уравнение Шрёдингера	27
	Общие свойства УШ	27
13	Плотность потока вероятности. Уравнение непрерывности	29
14	Смена представления. Примеры. Представления Шрёдингера и Гейзенберга	31
15	Импульсное представление	34
16	Сохранение величин и симметрии	36
17	Четность состояния. Правило отбора по четности	38
18	Вариационный метод в квантовой механике	39

19 Общие свойства одномерного движения	41
20 Коэффициенты отражения и прохождения в одномерных задачах. Примеры	45
21 Гармонический осциллятор	47
А. Матричный метод	47
Б. Решение через УШ	49
22 Квантовомеханическая частица в однородном электрическом поле	51
23 Момент импульса	53
Введение. Определение момента импульса	53
Собственные значения оператора \hat{L}_z	54
Свойства	55
24 Собственные функции момента импульса	56
25 Сложение моментов	59
26 Частица в центральном поле	61
Общая задача взаимодействия двух частиц	61
Частица в центральном поле	61
Асимптотика решения при $r=0$	63
27 Сферические волны	64
28 Частица в кулоновом поле. Уровни энергии и волновые функции	67
29 Калибровочное преобразование в квантовой механике	69
30 Экспериментальные факты, указывающие на существование спина и внутреннего магнитного момента у электрона	71
31 Заряженная частица в однородном магнитном поле	74
32 То что знали, но всегда хотели узнать	76
Какой знак правильный?	76
Преподаватель на зачёте был не нужен	76

1 | Модель атома Бора

В 1904 году Д.Д. Томпсоном была представлена первая модель атома. Открытию предшествовало обнаружение электронов, а после формулировки гипотезы было обнаружено атомное ядро. Томпсон говорил, что атом является равномерно распределенным по всему объему зарядом со знаком $+$. Положительно заряженное «облако» содержит внутри небольшие электроны с отрицательным зарядом, расположение которых определено случайно. Общий заряд атома нейтрален, что обусловлено равенством по модулю суммарного заряда электронов и заряда «облака».

Модель Томпсона — объяснение излучения атомов. Однако формулы определенных химических элементов описали их спектры, но противоречили рассматриваемой модели. Не получилось объяснить дискретный характер, которым обладают спектры атомов (!). Проблема также заключалась в описании устойчивости атома (!). Представленная модель не могла охарактеризовать рентгеновское и гамма-излучения, которые испускают атомы. Отсутствовали пояснения относительно определения размеров атома. Модель противоречила опытам, направленным на изучение того, как распределяется положительный заряд в атоме (!).

В 1911 году была представлена более точная модель атома Резерфорда: положительный заряд расположен в малой области атома, а компенсирующие электроны окружают его. К такому утверждению ученый пришел в результате экспериментов по бомбардировке атомов. Не объясняет энергетическую устойчивость атома (!). Электрон вращается вокруг ядра, следовательно, имеет центростремительное ускорение, следовательно, излучает энергию, радиус вращения уменьшается и электрон должен упасть на ядро. А этого не происходит.

В 1913 году датский физик Н. Бор, проанализировав всю совокупность опытных фактов, пришел к выводу, что при описании поведения атомных систем следует отказаться от многих представлений классической физики. Он предположил, что сам факт существования атомов свидетельствует о том, что существуют минимальные «размеры», ближе которых к ядру электроны не могут подобраться. Бор вспоминал, что "будучи в Манчестере на стажировке у Резерфорда, он пришел к убеждению, что строение электронного роя в атоме управляется квантом действия – постоянной Планка". В статье "О строении атомов и молекул" он использовал гипотезу астрофизика Николсона, которая объясняла устойчивость «орбит» электронов кратностью их орбитального момента импульса величине постоянной Планка, уменьшенной в 2π раз. Это соответствовало требованию равенства длины орбиты целому числу длин волн де Бройля для электрона.

Итак, энергия есть интеграл движения, а согласно планетарной теории существует еще один. Это угловой момент, гипотеза Николсона:

$$L_z = n\hbar$$

Пусть орбита круговая, тогда есть центростремительное ускорение, а уравнение движения

выглядит следующим образом:

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{Ze^2}{r^2}$$

где Ze - заряд ядра (само Z — степень ионизации). Но по определению $L_z = mvr = \frac{Ze^2}{v}$, а полная энергия электрона E равна сумме его кинетической и потенциальной энергий:

$$E = \frac{mv^2}{2} - \frac{Ze^2}{r} = \frac{Ze^2}{2r} - \frac{Ze^2}{r} = -\frac{Ze^2}{2r} = -\frac{mv^2}{2} = -\frac{mZ^2e^4}{2L_z^2}$$

Т.к. L_z дискретно, то есть на каждом шаге добавляется \hbar : $\Delta L_z = \hbar$, если мы считаем эту добавку малой, то можно разложить энергию по формуле Тейлора и получить:

$$\Delta E = \frac{mZ^2e^4\Delta L_z}{L_z^3} = \frac{\hbar mZ^2e^4}{L_z^3} = \hbar \frac{v}{r}$$

С одной стороны, $\Delta E = \hbar\omega$, где ω — частота излучения света порциями, с другой — в пределе малого \hbar есть $\hbar \frac{v}{r} = \hbar\omega_o$, где ω_o — уже частота обращения электрона по орбите. Но эти частоты не могут быть равны: на самом деле, данным разложением мы пользоваться не имели права, т.к. изменение L_z может быть не мало, а малоблизкими изменениями энергии $n \rightarrow n+1$ ограничиваться нельзя, рассмотрим любые значения l и n , получив формулу Бальмера:

$$\hbar\omega_{ln} = \frac{me^4}{2\hbar^2} \left(\frac{1}{l^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

Константа для $z = 1$ $R_{\text{и}} = \frac{me^4}{2\hbar^2} = 13,606\text{эВ}$ называется ридберг. Полученная формула не имеет никакого отношения к частоте обращения, проблема была преодолена. Но данная теория не была последовательной. С одной стороны, она отвергает описание атома на основе классической физики, так как постулирует наличие стационарных состояний и правила квантования, непонятные с позиций механики и электродинамики. С другой стороны, для записи уравнения движения электрона по круговой орбите используются именно классические законы: второй закон Ньютона и закон Кулона. Несмотря на свои недостатки, теория Бора стала важнейшим этапом развития физики микромира. Спустя более чем десятилетие после создания первой квантово-механической модели атома водорода Бором была построена новая законченная и непротиворечивая квантово-механическая теория, в целом с успехом используемая до настоящего времени.

2 | Фотоэффект

Герц в 1887 году провел такой эксперимент: взял запаянный сосуд, 2 электрода, вольтметр и амперметр. Оказалось, что при подаче напряжения наиболее эффективно ток потечет, если 1 из электродов будет находиться под действием ЭМ-излучения (UV). Источник обсуждать не будем. Причем ток зависит от характеристик этого излучения. На электродах есть заряженные частицы, условно будем называть их электронами. Предположим, что при поглощении падающего света (как раз ЭМ-волна, которая содержит E) происходит раскачка заряженных частиц (движутся в этом поле), тогда они преобретают энергию. Посчитать её - задача сложная, ведь электроны привязаны к атомам, движутся вокруг них, рядом есть еще атомы.

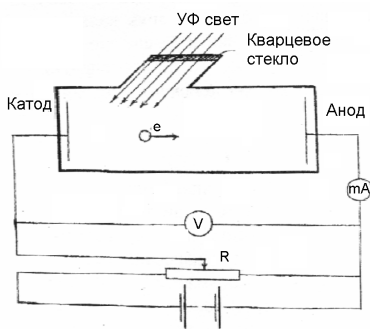


Рис. 2.1: Схема эксперимента

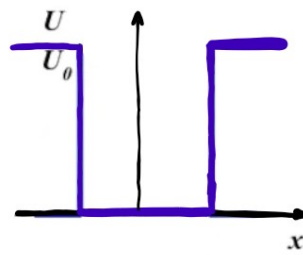


Рис. 2.2: Потенциальный барьер

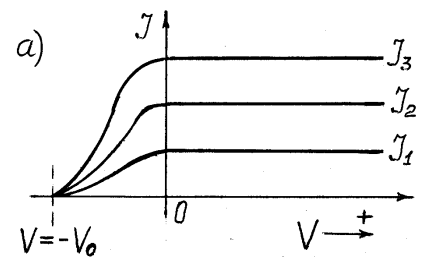


Рис. 2.3: Зависимость фототока от напряжения

Но с точки зрения потенциала U электрод - это ящик. Вообще есть и потенциалы атомов, действующих на этот электрод, забудем про них. Чтобы вылететь, электронам необходимо преодолеть этот потенциальный барьер.

Пусть $E \sim e^{i\omega t}$, тогда уравнение Ньютона будет выглядеть следующим образом (не забываем, что это грубая прикидка) $ma = eE_0 e^{i\omega t}$. Уравнение линейное, работать удобнее с комплексными экспонентами, в итоговом выражении возьмем действительную часть. Отсюда можем определить, что $v \sim e^{i\omega t}$, а ее амплитуда:

$$v_0 \simeq \frac{eE_0}{m\omega} \rightarrow E_{\text{кин}} = \frac{me^2 E_0^2}{2m^2 \omega^2} = \frac{e^2 E_0^2}{2m\omega^2}$$

Т.е. при низкой ω электроны быстро улетят, а поскольку приложено напряжение, потечет ток, но при облучении радиочастотной волной (от 3 кГц до 3000 ГГц) ничего не произойдет. На самом деле люди измеряют фототок как линейную функцию интенсивности $P = E_0^2$. С другой стороны, если измерить фототок в зависимости от поданного напряжения, то график окажется другим. Рассмотрим Рис.2.3, где три кривые обозначают три разные значения интенсивности: ток течет в случае $I(V = 0) \neq 0$ (светим на определенный электрод, видимо, электроны там так выбились, что некоторые из них "на издыхании" долетели до 2 электрода, дали немножко тока), далее, прикладываем напряжение отрицательное, т.е. которое мешает движению частиц,

лампа запирается, ток обращается в ноль. Запирающее напряжение не зависит от интенсивности облучения P , что странно. Увеличивая P , мы увеличиваем количество выбитых электронов, рассмотрим $|U_0|$ как функцию частоты: она растет с некоторого порогового значения ω_n - границы всего эффекта.

Запирающее напряжение в некотором смысле - мера энергии, которую мы сообщаем электрону при облучении, чтобы он вылетел, часть энергии может быть и остается, чтоб он куда-то летел. Эту самую избыточную энергию начинаем "душить создавая противодействующую его движению туда. Запирание в этом смысле - явление, когда электрон мог преодолеть потенциальный барьер, но никуда не полетел, ток не пошел. Значит, существует какая-то красная граница фотоэффекта (т.к. для низких частот, а красный свет ниже всех по частоте). Вообще не понятно, почему это зависит от частоты, тем более таким образом.

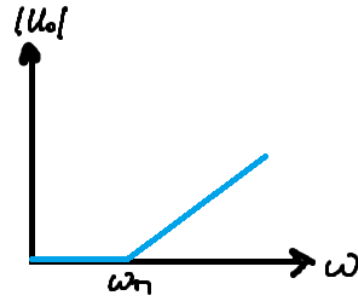


Рис. 2.4: $|U_0|(\omega)$

Если свет может излучаться/поглощаться порциями (квантами) с энергией $E = \hbar\omega$, то ситуация получается простая: энергия, которую имеет квант света, тратится на некоторую величину, называемой работой выхода (это та самая величина потенциальной энергии, необходимая для преодоления барьера), вместе с остаточной кинетической энергией они связаны соотношением $\hbar\omega = A_e + E_k$. Энергия отсечки (когда кинетическая энергия обращается в ноль и ее не хватает для преодоления вышеупомянутого барьера) здесь такая, что $\hbar\omega \leq A_e$.

3 | Излучение темного тела

Постановка проблемы

Пусть у нас есть некий ящик длиной l , нужно найти энергию поля $\rho(w)dw$, где $\rho(w)$ - спектральная плотность. Фактически, это энергия одной характерной моды, умноженная на число мод в интервале dw . Разберём, как определить последнее. ЭМ поля представляют собой плоские волны: $\vec{E} \sim e^{i\vec{k}\vec{r}}$. Нас интересуют граничные условия (далее - ГУ) на стенках ящика. Уравнение на поле по пространственным производным - это уравнение второго порядка, поэтому нужно задать либо какое-то значение на стенках, либо значение производной. Но т.к. ящик очень большой, воспользуемся следующим приемом: ГУ наложим периодические

$$f(x + l, y, z) = f(x, y, z)$$

$$f(x, y + l, z) = f(x, y, z)$$

$$f(x, y, z + l) = f(x, y, z)$$

То есть получается наш ящик оказывается и не ящиком, а кольцом в 1D, тор - в 2D, тор четырехмерного пространства - в 3D. Данное описание весьма извращенное, но пока мы не интересуемся маленькими ящиками и не хотим думать о модах, которые будут связаны с ГУ на краях ящика (а они могут и быть), то в принципе все равно, какие ГУ накладывать. Конкретные значения k_i дискретны, разные для каждого ГУ, но пока ящик большой, эта дискретность очень маленькая, почти непрерывна, поэтому нам совсем не важен вид ГУ. Подставляем трансляцию на размер ящика l в экспоненту, чтобы периодичность сохранилась, фазовый множитель должен быть равен единице, тогда сама фаза $2\pi n$:

$$k_x l = 2\pi n_x$$

$$k_y l = 2\pi n_y$$

$$k_z l = 2\pi n_z$$

Небольшой обман: если разделить ящик пополам, поставить новую стенку, решить задачу предыдущую, получить новые ГУ на этой стенке, и здесь уже ГУ начальной задачи важны. Но для более-менее разумных ГУ (нулевые значения функции/производной) это не имеет значения, хотя всегда можно найти ГУ, когда все будет плохо.

Вообще n - целые числа, а расстояния между соседними k это $\frac{1}{l}$, а при $l \rightarrow \infty$ у нас $r \rightarrow 0$, k - практически непрерывен. В каком интервале будем его считать? Дисперсионное уравнение дает модуль K , который есть $|\vec{k}| = \frac{w}{c}$. Если мы фиксируем какую-то w , то в пространстве k мы фиксируем сферу радиуса k . Сделаем приращение $k + dk$. Хотим сосчитать состояния в интервале $(w, w + dw)$, т.е. нужно сосчитать количество дискретных точек K , находящихся между получившимися двумя сферами.

В нашем случае объем бесконечно малого слоя между сферами $V_{\text{бм}} = 4\pi k^2 \Delta k$ (площадь сферы, домноженная на толщину слоя). На каждую точку приходится маленький кубик со стороной $\frac{2\pi}{l}$, нужно понять, сколько таких кубиков в сферическом слое. Для этого $V_{\text{бм}}$ делим на объем кубика V . Нам не важно, что есть кубики, вылезавшие за рамки слоя, т.к. они очень маленькие, имеют исчезающий размер, поэтому наш ответ верен в асимптотике $l \rightarrow \infty$. Учитывая, что у волн есть 2 поляризации, имеем:

$$dN = 2 \frac{4\pi k^2 dk l^3}{(2\pi)^3} = \frac{k^2 dk V}{\pi^2}$$

Подставим $k^2 = (\frac{w}{c})^2$, получим $dN_w = \frac{w^2 V dw}{c^3 \pi^2}$. Мы сосчитали число колебаний, для поиска $\rho(w)dw$ считаем dN_w , деленная на единицу объема V и домножаем на некое среднее характерное значение энергии, которая приходится на одну моду \bar{E}_w (ибо мы имеем дело с термодинамикой, флуктуации нас не интересуют). Для определения этого среднего необходимо рассмотреть вероятность обнаружения молекул в интервале скоростей $[V, V+dV]$: $f(V)d^3V$, где $f(V)$ - функция распределения. Когда имеем дело с термодинамическим равновесием, она имеет определенный вид, зависящий от температуры, хотя обычно обезразмеривают параметр, а так же принимают постоянную $k=1$: $f(\frac{E_k}{T})$. Распределение Гиббса (хотя вместо E обычно пишут $H(p, q)$):

$$f \sim e^{-\frac{E}{T}}$$

$$\bar{E}_w = \int_0^\infty E e^{-\frac{E}{T}} dE / \int_0^\infty e^{-\frac{E}{T}} dE$$

Это как бы энергия, взвешенная с числом состояний в интервале dE , а $e^{-\frac{E}{T}} dE$ - не число, а то, чему средняя энергия пропорциональна, поэтому нормируем на него, т.к. интеграл по всем энергиям даст нам единицу. Получим $\bar{E}_w = T$ (просто взяли интеграл). Закон Релея-Джинса

$$\rho(w) = \frac{w^2 T}{\pi^2 c^3}$$

Но если бы на самом деле $\rho(w) \sim w^2$, то тогда бы темное тело излучало: видимый свет, UV, рентгеновские лучи, γ -излучение, но этого не происходит. Аналог темного тела - печь, но многие рядом с печкой находились и оставались живы. Почему?

В 1896 г. экспериментально был установлен закон Вина: на больших w

$$\lim_{w \rightarrow \infty} \rho = e^{-\frac{bw}{T}}$$

В реальности интервал частот регулируется температурой (kT), поэтому существует ограничение полученной ранее несходимости, получившей название UV-катастрофы.

Объяснение UV-катастрофы

Планк утверждал, что проблема в расчете средней энергии моды. Предположение: E может принимать только дискретные значения: $E = nE_0$, где n - целое число, а E_0 что-то непонятное.

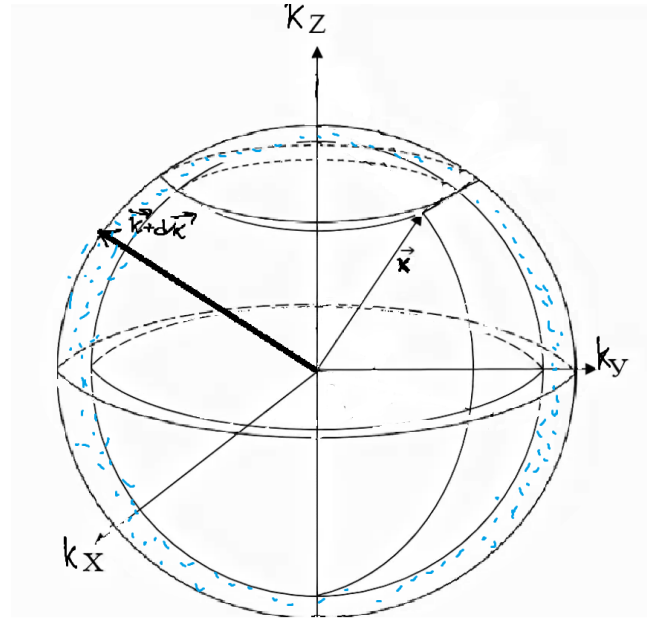


Рис. 3.1: Координатное пространство k

Вероятность того, что частица имеет энергию E_0 : $e^{-n\frac{E_0}{T}} = e^{-nE_0\beta}$, обозначение $\beta = \frac{1}{T}$. ЭМ-волны принимаются, поглощаются и излучаются стенками, причем это происходит только с дискретными энергиями. Далее вычислим среднюю энергию (в знаменателе сумма из условия нормировки, так же пользуемся суммой геометрической прогрессии):

$$\bar{E} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} nE_0 e^{-nE_0\beta}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-nE_0\beta}} = -\frac{d}{d\beta} \ln \sum_{n=0}^{\infty} e^{-nE_0\beta} = -\frac{d}{d\beta} \ln \frac{1}{1 - e^{-E_0\beta}} = \frac{E_0}{e^{E_0\beta} - 1}$$

Гипотеза Планка $E_0 = \hbar\omega$. Видно, что при $\omega \rightarrow \infty$ экспонента лидирует, получается закон Вина. Тогда при домножении \bar{E} на число мод все будет хорошо. Из этих соображений можно подобрать

$$\hbar = 1,05 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{с}$$

$$h = 2\pi\hbar$$

Отсюда

$$\rho(\omega) = \frac{1}{\pi^2 c^3} \frac{\hbar\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}$$

Максимум данного выражения по частоте наблюдается при $\frac{\hbar\omega_{max}}{T} = 2.84$ (Закон смещения Вина). При низких частотах $\hbar\omega \ll T$ можно разложить $e^{\frac{\hbar\omega}{T}} \approx 1 + \frac{\hbar\omega}{T}$, тогда $\rho(\omega) \approx \frac{1}{\pi^2 c^3} \frac{\hbar\omega^3 T}{\hbar\omega} = \frac{1}{\pi^2 c^3} \omega^2 T$ - получили тот же самый ответ, что и раньше для малых частот (учитываем, что E_0 мало по сравнению с T , а значит, суммирование заменяем интегрированием, т.к. функция на каждом шаге суммирования меняется очень мало). Для больших частот дело обстоит по-другому, как уже было сказано, в той области имеем экспоненциальное спадание, что тоже неплохо.

В качестве развлечения посчитаем полную энергию, получим закон Стефана-Больцмана:

$$U = \int_0^{\infty} \rho_{\omega} d\omega = \int_0^{\infty} \frac{1}{\pi^2 c^3} \frac{\hbar\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{T}} - 1} d\omega = \frac{T^4}{\hbar^3 \pi^2 c^3} \int_0^{\infty} \frac{z^3 dz}{e^z - 1} = \frac{T^4}{\hbar^2 \pi^2 c^3} \frac{\pi^4}{15} = \frac{T^4 \pi^2}{15 \hbar^2 c^3}$$

Словесная формулировка: *Энергия, излучаемая за единицу времени с единицы площади поверхности абсолютно черного тела во всем интервале частот от 0 до ∞ , пропорциональна четвертой степени абсолютной температуры черного тела.* Вообще, примеров, когда температура контролирует частоту максимального излучения, немало. Сам Стефан применил свой закон к излучению Солнца и определил температуру его поверхности - 5713 К (современное значение 5780 К, излучает оно больше в диапазоне зеленого света). Полученное им значение температуры Солнца оставалось самым точным в течение всего XIX века.

Длина волны, при которой энергия излучения абсолютно чёрного тела максимальна, определяется законом смещения Вина:

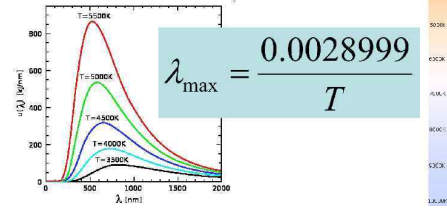


Рис. 3.2: Закон смещения Вина

4 | Волна де Бройля. Волновые пакеты

В 1924 г. французский физик Луи де Бройль выдвинул смелую гипотезу, согласно которой корпускулярно-волновой дуализм имеет универсальный характер. Согласно его гипотезе каждая материальная частица обладает волновыми свойствами, причем соотношения, связывающие волновые и корпускулярные характеристики частицы остаются такими же, как и в случае электромагнитного излучения: *"у каждой частицы есть некое поле, зависящее от \vec{r} , описывающее её, тогда можем это поле проквантовать (дискретизировать)"*. Т.е. с каждой частицей связана некая плоская волна какого-то комплексного поля $\psi(\vec{r}, t) = \psi_0 e^{i\vec{k}\vec{r} - i\omega t}$.

Возникает вопрос, что это за неизвестная функция и как она связана с движением частицы. Чисто эмпирически были выявлены следующие соотношения, связывающие волновые и корпускулярные свойства частицы: $\vec{p} = \hbar\vec{k}$, $E = \hbar\omega$ (*). Вычислим фазовую скорость, т.е. скорость, с которой распространяются точки волны с постоянной фазой:

$$v_{\Phi} = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} = \frac{p^2}{2mp} = \frac{v}{2}$$

Вот и 1 неприятность: можем отказаться от уравнений Ньютона, понятия траектории и постулировать, что скорость частицы как раз v , но это неправильно, ведь тогда придется отказаться от постулатов (*). Как быть? Во-первых, выражение для некой $\psi(\vec{r}, t)$ патологично, ведь эта функция делокализована в пространстве полностью. Пока мы толком не знаем, что такое электрон, но по неведомым причинам в классической механике это то, что считается шариком, распространено во всем пространстве и по модулю в квадрате описывается функцией, которая сюда войти не может, что не исключено, но странно (??? Не понятно, что он вообще имел в виду). Из соображения разумности хочется иметь описание, которое иногда приходило бы в движение шарика по орбите, иногда совершало бы какие-то чудеса (например, описывающее строение атома или еще что-нибудь), но эта функция не содержит ни намека на хороший переход к классике, т.е. не удовлетворяет ГУ. Как тогда с помощью ψ проэмитировать движение частицы? Исправить ситуацию может собрание *волнового пакета* - совокупности волн с разными импульсами (много фурье-гармоник), которую описывает волновая функция, заметно отличная от нуля только в очень малом участке пространства, размеры которого можно стремиться к нулю вместе с \hbar . Если проинтегрировать в k -пространстве $\int_{k-\Delta k}^{k+\Delta k} e^{ikx} dk = \frac{\sin x}{x}$, а в реальном пространстве эта функция локализована. Рассматривая совокупность плоских волн с близкими k в каком-то интервале, соберем пространственный импульс, получим некоторую область, где ψ -функция в реальном пространстве не равна нулю в какой-то области, так же требуем, чтоб центр волнового пакета перемещался по истинной траектории классической частицы. Попробуем для простоты в 1D случае:

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} c(p) \psi_0 e^{\frac{i(px - E(p)t)}{\hbar}} dp$$

Нормировка:

$$\int |\psi|^2 dx = \iint dp dp' c(p)c(p') |\psi_0|^2 e^{\frac{i(E'-E)t}{\hbar}} \underbrace{\int e^{\frac{i(p-p')x}{\hbar}} dx}_{\text{а это } 2\pi\hbar\delta(p-p')} = 2\pi\hbar |\psi_0|^2 \int |c|^2 dp$$

Подберем $\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$, дальше, если подобрать правильное поведение c на ∞ , можем обеспечить регулярный характер поведения этой нормы. Предположим, что зависимость такая: $c_0 = 1, p \in (p_0 - \Delta p, p_0 + \Delta p)$. Раскладываем вблизи p_0 энергию и ищем волновую функцию:

$$E(p) = E_0 + (p - p_0) \frac{dE}{dp} \Big|_{p=p_0}$$

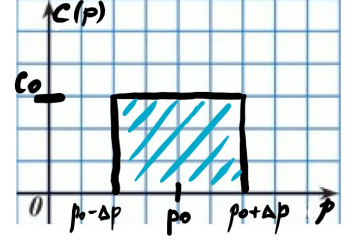


Рис. 4.1: Выбор константы

$$\begin{aligned} \psi &= c_0 \int_{p_0 - \Delta p}^{p_0 + \Delta p} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i(p x - E t)}{\hbar}} dp = \Big| p = p_0 + \hbar \xi \Big| = \frac{c_0 \hbar}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i(p_0 x - E_0 t)}{\hbar}} \int_{-\frac{\Delta p}{\hbar}}^{\frac{\Delta p}{\hbar}} e^{i\xi(x - \frac{dE}{dp}|_{p=p_0} t)} d\xi = \\ &= \frac{c_0 \hbar}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i(p_0 x - E_0 t)}{\hbar}} \cdot 2 \frac{\sin(\Delta p(x - \frac{dE}{dp}|_{p=p_0} t)/\hbar)}{(x - \frac{dE}{dp}|_{p=p_0} t)} \end{aligned}$$

Получилась функция $\frac{\sin(\frac{\Delta p x}{\hbar})}{x}$, которая локализована вблизи $x = 0$, т.е. центра масс пакета движется с групповой скоростью (максимум функции при любых временах лежит в одной точке) $x = \frac{dE}{dp}|_{p=p_0} t = \frac{p_0 t}{m} = v_0 t$ равномерно, что не противоречит II закону Ньютона ($\dot{v} = 0$ в отсутствии действия внешней силы). Что отсюда важного стоит извлечь: у этого пакета есть ширина, а сама функция отлична от нуля, когда ее аргумент порядка 1: $\frac{\Delta p \cdot \Delta x}{\hbar} \sim 1$. Т.е. пакет движется примерно по классической траектории частицы, но при этом точность определения ее зависит от точности определения импульса: при размывании Δp размывается и Δx . Возникает соотношение неопределенности $\Delta p \cdot \Delta x \sim 2\pi\hbar$.

Энергия связана с импульсом, мы предполагали, что $E \sim e^{-i\omega t}$, а значит, если посчитать то же самое при p^2 , пакет "расплывётся".

5 | Физический смысл волновой функции в квантовой механике

Проведем мысленный эксперимент: пусть есть два экрана, первый из которых имеет два отверстия. Если же разместить перед экранами источник света, мы увидим ожидаемую интерференционную картинку, даже если закроем одно из отверстий. Заменяем теперь источник света на источник электронов и зафиксируем наблюдения: если отверстия закрывать по очереди и посмотреть, какая картина будет суммарной, то получится совсем другой результат. Вывод: в некотором смысле частицы ведут себя точно так же, как волны, но вне зависимости от того, один электрон полетит или сразу пучок, при помещении лампочки перед экранами, картинка полностью пропадает.

Пусть летит 1 электрон. Но интерференция не имеет место в данном случае, получается крайне идиотская ситуация - один и тот же электрон идет и через 1ое отверстие, и через второе сразу. Поставим еще лампочку перед 2 экраном - картинка пропадет совсем, даже если "стрелять" по одному электрону. Лампочка здесь играет роль некоего источника ЭМ излучения, она позволяет увидеть (значит, измерить) рассеянное излучение - рассеяние частицы, но ведь выяснять уже нечего, т.к. картинки нет.

Значит, мы должны строить описание в терминах некоей функции распределения $P(\vec{r})$, т.ч. интеграл по объему даст вероятность увидеть эту частицу в данном объеме. В оптике или волновой теории необходимо описание в терминах амплитуды и фазы волны, значит, требуется некая комплексная функция $\psi(\vec{r}, t)$ и уравнение на нее. Знаем, что $|\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r$ может представлять собой вероятность (это действительная величина), так же ψ предполагает взаимодействие с классическим прибором для понимания определения этой функции - *волновой функции (комплексной амплитуды)*. Другими словами, посмотреть на электрон мы не можем, т.к. при отсутствии измерений нет и явлений, а при измерении прибором состояние сразу меняется. (О проблеме квантово-механического описания лучше не задумываться)

Пусть движение электрона через 1 отверстие описывает комплексная амплитуда ψ_1 , а через второй - ψ_2 (хотя на самом деле стоит вводить целое множество, поговорим хотя бы про 2). Классические пути при столкновении с экраном интерферируют, на последнем экране видим фактически их сумму $c_1\psi_1 + c_2\psi_2$, тогда взяв $|c_1\psi_1 + c_2\psi_2|^2$, получим распределение. Фазы комплексных функций будут зависеть от конкретных точек наблюдений. Анализируя эксперимент, мы должны складывать не вероятности прохождения, а комплексные амплитуды.

В классической механике движение происходит по траектории, отвечающей минимуму

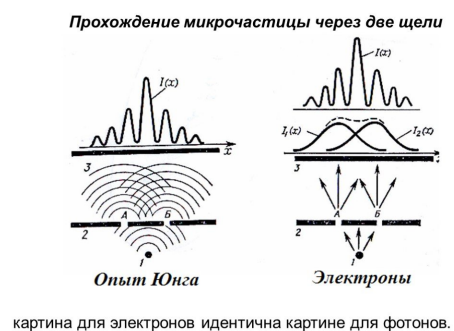
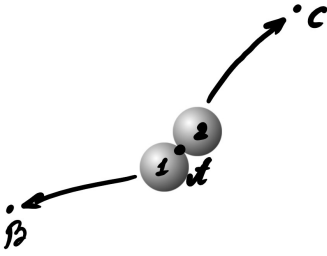


Рис. 5.1: Схема эксперимента

функционала действия, а квантомеханическая частица может двигаться по различным траекториям (все они равновероятны), причем одновременно. В пустом пространстве (без экранов и отверстий) все так же. Частица идет сразу по всем траекториям, каждой из которых соответствует некая ψ , результатом брать сумму всех таких пси по модулю в квадрате. В реальности частиц множество, как все устроено, если $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$?



Практически постулат: пока частицы не взаимодействуют, можем искать волновую функцию как $\psi_1(\vec{r}_1) \cdot \psi_2(\vec{r}_2)$. Это автоматически означает, что в уравнениях эти частицы подразумевают разделение переменных в таком пределе, т.е. они должны быть линейные. Допустим, в точке А было определенное состояние двух квантовомеханических частиц, их отпустили, частицы разлетелись далеко друг от друга. Проводя измерения в точке В, мы одновременно определим состояние 2^{ой} частицы в т. С, т.к. ψ - общая.

Рис. 5.2: Иллюстрация к тексту

Такая трактовка означает, что имеет место колоссальная степень нелокальности. При таком взгляде на вещи скорость света - не предел, но если мы измеряем что-то реальное, то расчеты дадут разумный результат, т.е. в ответах подобных парадоксов не возникает.

6 | Операторы физических величин и их собственные значения

Пусть у нас имеется несколько классических приборов, измеряющих некую физическую величину. Обозначим её f , каждой такой величине ставится в соответствие оператор \hat{f} , который может действовать на волновую функцию ψ . Процесс измерения заключается в том, что классический прибор и частица приходят во взаимодействие друг с другом, в результате чего прибор переходит из начального в некоторое другое состояние, и по этому состоянию мы судим о состоянии частицы. Описание состояний прибора осуществляется квазиклассическими волновыми функциями. Тогда в результате измерения величины f получим набор собственных значений f_n :

$$\hat{f}\psi_n(\vec{r}, t) = f_n\psi_n$$

С другой стороны, на вход прибора совершенно не обязательно приходит собственная функция, может быть и суперпозиция с некоторыми коэффициентами разложения, т.е. с прибора мы снимаем среднее значение величины f , а значит в каждом конкретном измерении получаем какое-то одно f_n , не меняя условий эксперимента и возвращая частицу к начальному состоянию, повторяем многократно, а затем усредняем результат:

$$\bar{f} = \int \psi^* \hat{f} \psi d^3r = \int \psi^* \hat{f} \psi dq$$

Условие нормировки $\int |\psi|^2 dq = 1$ (т.к. речь идет о вероятности найти частицу хоть где-то, о классе функций). Но так хорошо работать только с дискретным спектром собственных значений f_n , т.к. функция хорошо локализована в пространстве и интеграл существует. С непрерывным спектром оператора есть некоторые тонкости, о которых пока не будем говорить. Можно себя успокаивать так: любую частицу можем закрыть в ящике, где нормировка может быть осуществлена.

Конкретизируем аксиоматику (написать уравнение на волновую функцию, установить правила определения операторов физ. величин). Получить операторы физических величин нельзя, но можно ввести их, учитывая, что в конкретных пределах не должно быть отличия от классики. Начнем с вида волновой функции.

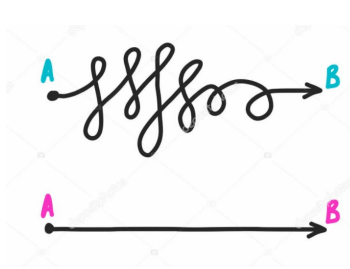


Рис. 6.1: Иллюстрация к принципу Ферма

В качестве классического предела для волновой функции рассмотрим $\psi \sim e^{i\frac{S}{\hbar}}$, где S - действие, эйконал. Все это представление должно срастить с уравнениями Ньютона, т.е. с экстремумом действия S . Для света длину оптического пути можно найти из принципа Ферма: свет выбирает из множества путей между двумя точками тот путь, который потребует наименьшего времени (по лучу). А значит, требуется найти минимум функционала $S = \int_A^B n dl$, где $n = \sqrt{\epsilon}$ - показатель преломления. Как это получить из уравнений Максвелла?

$\frac{\epsilon}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \vec{A} = \underbrace{-\frac{4\pi}{c} \vec{j}}_{\text{какие-то источники}}$. Векторный потенциал с полями связан следующим образом:

$$\vec{B} = \text{rot} \vec{A}$$

$$\vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} - \nabla \varphi$$

То, о чем мы говорим - приближение, которое верно при определенных условиях (ведь то, что свет пойдет по лучу - тоже приближение, не учитывающее дифракцию и интерференцию). Пусть n однородно, тогда ищем решения уравнения Максвелла в виде $e^{-i\omega t + i\vec{k}\vec{r}}$. Свет распространяется вдоль вектора \vec{k} , это и есть лучи из принципа Ферма. Можем попробовать искать поля $\vec{E}, \vec{B} \sim \vec{a} \cdot e^{i\varphi}$:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\omega$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \vec{r}} = \vec{k}(\vec{r})$$

Откуда

$$\varphi = -\omega t + \frac{\epsilon \omega}{c} \varphi_1$$

$$(\nabla \varphi_1)^2 = n^2(x, y, z) \implies \varphi_1 = \int n dl$$

Где φ_1 играет роль эйконала, а интегрирование ведется вдоль луча. Линии градиента можем воспринимать как эти лучи, они имеют смысл локального вектора \vec{k} . $\text{rot}(\nabla \varphi_1) = 0 \implies$ получим решение, которое работает, если масштаб изменения свойств среды $L(n) \gg \lambda$. (В лучевой $\lambda \approx 0$, а масштабы искривления много больше) Приближение геометрической оптики здесь называется *эйкональным приближением*.

Оптика	Хотим аналог в квантах
Эйконал S	Действие S
$\varphi, \vec{A} \sim e^{iS}$	$\psi \sim e^{i\frac{S}{\hbar}}$
лучи	траектории по Ньютону
принцип Ферма	принцип Мопертюи
$dS = -\omega dt + \frac{\omega}{c} \vec{k} d\vec{l}$	$dS = -H dt + \sum_i p_i dq_i$

Из теоретической механики знаем, что для нахождения минимума функционала действия, нужно проварьировать его и приравнять первую вариацию к нулю:

$$\delta S = \sum_i \left. \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta q_i \right|_{t_1}^t + \sum_i \int_{t_1}^t \underbrace{\left(\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right)}_{\text{для классической механики ноль}} \delta q_i dt$$

$$\delta q_i(t_1) = 0 \implies \delta S = \sum_i p_i \delta q_i$$

$$\frac{dS}{dt} = \frac{\partial S}{\partial t} + \sum \frac{\partial S}{\partial q_i} \dot{q}_i = \frac{\partial S}{\partial t} + \sum p_i \dot{q}_i \implies \frac{\partial S}{\partial t} = L - \sum_i p_i \dot{q}_i = -H$$

По аналогии с оптикой хочется, чтоб выполнялся закон сохранения энергии $E = H \implies S = \underbrace{\int \sum p_i dq_i}_{\text{укороченное действие } S_0} - E(t - t_0)$. Для материальной точки в 3D, например, $p = \sqrt{2m(E - U)}$,

$$S_0 = \int \vec{p} d\vec{r} = \int \sqrt{2m(E - U(\vec{r}))} dl$$

Назовем подынтегральное выражение показателем преломления n и получим аналог принципа Ферма - *принцип Мопертюи*.

В уравнении на ψ желательна некая линейность (ради выполнения принципа суперпозиции), рассмотрим:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}(e^{i\frac{S}{\hbar}}) = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial t} \Psi = \frac{i}{\hbar} (-H) \psi$$

Так называемое уравнение Шрёдингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$$

Теперь отказываемся от идеи $\psi \sim e^{i\frac{S}{\hbar}}$, запишем оператор Гамильтониана

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

Осталось определить, что есть оператор импульса и координаты и **как они действуют на ψ** .

$$\hat{p}\psi = \nabla S\psi \implies \hat{p} = -i\hbar \nabla$$

Уравнение без источника, значит, нужны условия на ψ : $\psi \neq 0$ + условие нормировки $\int |\psi|^2 d^3r = 1$. Продифференцируем последнее соотношение по времени:

$$\int dq (\dot{\psi}\psi^* + \psi\dot{\psi}^*) = \int dq (\psi^* \frac{\hat{H}}{i\hbar} \psi - \psi \frac{\hat{H}^*}{i\hbar} \psi^*) = \frac{1}{i\hbar} \int \psi^* \hat{H} \psi dq - \underbrace{\frac{1}{i\hbar} \int \psi^* \hat{\tilde{H}} \psi dq}_{\text{здесь поменяли местами } \psi^* \text{ и } \psi} = 0$$

Здесь $\hat{\tilde{H}}$ - транспонированный оператор, $\hat{\tilde{H}}^* = \hat{H}^+$ - оператор, эрмитово сопряженный исходному. Для выполнения верхнего равенства требуем эрмитовость оператора гамильтониана $\hat{H} = \hat{H}^+ (\forall \psi)$.

Небольшое отступление. Все ли операторы физических величин эрмитовы? Рассмотрим оператор импульса $\hat{p} = -i\hbar \nabla$: определению соответствует

$$\int \psi_1 \hat{p} \psi_2 dq = -i\hbar \int \left(\underbrace{\nabla(\psi_1 \psi_2)}_{\text{Хотим ноль на } \infty} - \psi_2 \nabla \psi_1 \right) dq = \int \psi_2 (i\hbar \nabla) \psi_1 dq \implies \hat{p}^T = -\hat{p}$$

$$\hat{p}^+ = -\hat{p}^* = \hat{p} \text{ эрмитов}$$

Для вычисления любой величины требуется найти среднее: $\bar{f} = \int \psi^* \hat{f} \psi dq$. Показания классического прибора должны быть действительными $\bar{f} \in \mathbb{R}$.

$$\bar{f}^* = \int \psi \hat{f}^* \psi^* dq = \int \psi^* \hat{f}^+ \psi dq$$

Это выполняется $\forall \psi$, следовательно, $\hat{f}^+ = \hat{f}$.

Итак, хотим найти собственные функции оператора импульса $\hat{p}\psi_p = \vec{p}\psi_p$, фактически, мы раскладываем ψ_p -функцию по базису из собственных функций оператора \hat{p} , получаем $\psi_p \sim e^{\frac{i\vec{p}\vec{r}}{\hbar}}$ - плоские волны.

Оператор координаты - это домножение на нее: $\hat{x}\psi = x_0\psi$, собственной функцией данного оператора является δ -функция. (Вообще именно поэтому мы не можем перейти от одного к другому, от δ -функции к плоским волнам: $[\hat{x}\hat{p}] = i\hbar$)

Теперь рассмотрим оператор параллельного переноса $\hat{T}_{\vec{a}}\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} + \vec{a})$. Для этого разложим $\psi(\vec{r} + \vec{a})$ в ряд Тейлора и заменим производную по r на известное нам действие оператора \hat{p} с соответствующими коэффициентами:

$$\psi(\vec{r} + \vec{a}) = \psi(\vec{r}) + \vec{a} \frac{\partial}{\partial r} \psi + \dots = (1 + \frac{i}{\hbar}(\vec{a}\hat{r}) + \frac{1}{2}(\frac{i}{\hbar}(\vec{a}\hat{r})^2) + \dots)\psi$$

Получим

$$\hat{T}_{\vec{a}} = e^{\frac{i}{\hbar}\vec{a}\hat{r}}$$

7 | Операторы физических величин и матрицы

Примеры операторов физических величин рассмотрены в предыдущем вопросе.

Матричная формулировка квантовой механики

Если мы фиксируем какое-то представление, а это представление дискретно в том смысле, что мы раскладываем по собственным функциям дискретного спектра, то каждому оператору в этом представлении можем поставить в соответствие некоторую матрицу.

Пусть есть разложение произвольной ψ -функции по некоторому базису (с коэффициентами) - полному дискретному набору собственных функций какого-то оператора - $\psi = \sum_n a_n \psi_n$, для перехода к новому представлению необходимо верно определить вычисление средних. Несложно видеть, что общее определение может быть записано в следующем виде:

$$\bar{f} = \sum_{nm} a_n^* a_m f_{nm}(t)$$

Причем матричный элемент $f_{nm}(t) = \int \psi_n^* \hat{f} \psi_m dq = f_{nm} e^{i w_{nm} t}$, здесь частота перехода $w_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar}$, а $f_{nm} = \int a_n^* \hat{f} \psi_m dq$. Предполагаем, что функции ψ_n и ψ_m соответствуют определенным энергиям, тогда на каждой "сидит" временная экспонента $\sim e^{\frac{i E_j t}{\hbar}}$, которую спокойно вынесли из-под интеграла.

Замечание 1. Почему можем сказать, что формула записана в представлении Гейзенберга? Вернемся к общему определению среднего. Здесь a_n^* и a_m играют роль волновой функции (мы так это записали, ввели без зависимости от времени), а вся зависимость от времени "сидит" в матрице f_{nm} , которая теперь играет роль оператора. В этом смысле запись подобна представлению Гейзенберга, но мы могли бы сделать и по-другому: временную зависимость "отправить" в a_n^* и a_m , получили бы некоторое другое выражение, но в том же духе. То есть этот экспоненциальный фактор можно либо оставить на матрице f , либо отправить на коэффициенты, это сейчас не важно.

Получившуюся f естественно называть матрицей физической величины f . Как определить производную по времени? Как и раньше, через производную по времени от среднего f :

$$\dot{\bar{f}} = \frac{d}{dt} \bar{f} = \sum_{mn} a_n^* a_m \dot{f}_{nm}(t)$$

где $\dot{f}_{nm}(t) = i w_{nm} f_{nm}(t)$.

Замечание 2. Что было бы с f_{nm} , если бы мы работали в базисе собственных функций оператора \hat{f} ? Естественно, была бы диагональной, но мы этого не предполагаем.

Можем определить матрицу эрмитово сопряженного оператора, используя определение транспонированного оператора: $(f^*)_{nm} = \int \psi_n^* \hat{f}^T \psi_m dq = \int \psi_m f^* \psi_n^* dq$. Тогда

$$(f^*)_{nm} = (f_{mn})^*$$

Для вещественной физической величины $f_{nm} = f_{mn}^*$.

Умножение матричных операторов

Как с точки зрения матриц устроено умножение операторов? Распишем действие оператора на волновую функцию:

$$\hat{f}\psi_n = \sum_m f_{mn}\psi_m$$

А теперь рассмотрим действие произведения операторов, используя вышеприведенную формулу сначала для оператора \hat{g} и "протаскивая" оператор \hat{f} (ведь он действует на волновую функцию), а потом и для \hat{f} :

$$\hat{f}\hat{g}\psi_n = \hat{f} \sum_k g_{kn} \hat{f}\psi_k = \sum_{km} g_{kn} f_{mk} \psi_m = \sum_m (fg)_{mn} \psi_m$$

Причем $f_{mk}g_{kn} = (fg)_{mn}$ - обычное матричное произведение. Пусть у нас есть задача на поиск собственных значений некоторого оператора f : $\hat{f}\psi = f\psi$. Подставим разложение собственной функции $\psi = \sum_m C_m \psi_m$, тогда получим:

$$\sum_m C_m \hat{f}\psi_m = f \sum_m C_m \psi_m$$

Скалярно домножим на ψ^* и проинтегрируем по пространству. Результат:

$$\sum_m f_{nm} C_m = f C_n$$

Как видно, задача на поиск собственных значений в матричном представлении сводится к вычислению собственных значений и векторов матрицы f . Согласно линейной алгебре, для существования нетривиального решения (т.к. есть линейно зависимые строки) $\det(f_{nm} - f_m \delta_{nm}) = 0 \rightarrow$ получим некоторое количество собственных значений. В базисе собственных функций матрица диагональна и представима в виде: $f_{nm} = f_m \delta_{nm}$. Часто используют **обозначения Дирака**:

$$f_{nm} \equiv \langle n | f | m \rangle$$

$$\langle n | m \rangle = \int \psi_n^* \psi_m dq$$

След и его свойства (полезное дополнение)

След матрицы - это сумма всех ее диагональных элементов. Обозначается как **Sp** (от нем. *Spur* — след) или **tr** (от англ. *trace* — след).

$$1^\circ. Spf = \sum_n f_{nn}$$

$$2^\circ. Sp(\hat{g}\hat{f}) = Sp(\hat{f}\hat{g})$$

$$3^\circ. Sp(abc) = Sp(cab)$$

Возможный вопрос на экзамене: как записать матрицу оператора рождения?

8 | Условие нормировки для волновых функций. Непрерывный и дискретный спектр

Рассмотрим нормировку собственных функций непрерывного спектра на примере оператора импульса: $\hat{p}\psi_p = \vec{p}\psi_p$. Под спектром всегда имеем в виду спектр собственных значений какого-то оператора.

$$-i\hbar\nabla\psi_p = \vec{p}\psi_p$$

$$\psi_p \approx e^{\frac{i\vec{p}\vec{r}}{\hbar}}$$

Фактически, волновую функцию раскладываем по базису из СФ оператора \hat{p} . Итак, пусть есть некая физическая величина f с СФ ψ_f : $\hat{f}\psi_f = f \cdot \psi_f$, нашли мысленно все орты в функциональном пространстве, перешли в f -представление, предполагая, что спектр непрерывный, тогда: $\psi(q) = \int a_f \psi_f df$, q - обобщенная координата. Это **общее устройство смены представления**. Хотим нормировку, характерную для плотности вероятности: $\int \psi \cdot \psi^* dq = \int |a_f|^2 df = 1$.

$$\int \psi \cdot \psi^* dq = \iint a_f^* \psi_f^* \psi df dq \longrightarrow a_f = \int \psi(q) \psi_f^*(q) dq$$

Подставим представление $\psi(q)$ в полученную формулу для a_f :

$$a_f = \int a_{f'} \underbrace{\left(\int \psi_{f'} \psi_f^* dq \right)}_{\text{должно быть } \delta(f-f')} df'$$

Возвращаемся к представлению $\psi(q)$:

$$\psi(q) = \int \psi(q') \underbrace{\left(\int \psi_f^*(q') \psi_f(q) df \right)}_{\text{еще условие } \delta(q-q')} dq'$$

Так же это называется *условием полноты*. Если полный спектр дискретен, то $\sum_n \psi_n^*(q') \psi_n(q) = \delta(q - q')$. Итого условие нормировки:

$$\int \psi_{p'}^* \psi_p d^3r = (2\pi\hbar)^3 \delta(\vec{p}' - \vec{p})$$

$$\psi(\vec{r}) = \int a(\vec{p}) \psi_p(r) \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}, \text{ где } a(\vec{p}) = \int \psi(\vec{r}) e^{-\frac{i\vec{p}\vec{r}}{\hbar}} d^3r$$

Вероятность того, что частица попадет в интервал импульса d^3p есть $|a(\vec{p})|^2 \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}$, здесь используется свойство δ -функции: $\frac{1}{2\pi} \int e^{i\alpha x} d\alpha = \delta(x)$.

Замечание 3. В соответствии с некоторыми математическими теоремами при "хороших" свойствах рассматриваемых операторов (а они должны быть такими, чтобы соответствовать физическим величинам). **Что значит "хорошими"?** Они должны быть эрмитовыми для вещественности собственных значений. (проблема необходимости и достаточности, требование вещественности всех средних).

Повторим предыдущие рассуждения для дискретного спектра: $\hat{f}\psi_n = f_n \cdot \psi_n$, разложим по (полной) системе СФ $\psi = \sum_n a_n \psi_n$, требуем $\sum_n a_n a_n^* = \int \psi^* \psi dq = 1$, т.к. $|a_n|^2$ - вероятность находиться частице в некотором n-ом состоянии. Домножим скалярно справа на волновую функцию выражение $\psi^* = \sum_n a_n^* \psi_n^*$ и проинтегрируем по dq :

$$\int \psi^* \psi dq = \sum_n a_n^* \int \psi_n^* \psi dq \rightarrow a_n = \int \psi \cdot \psi_n^* dq$$

Подставим разложение для волновой функции:

$$a_n = \sum_m a_m \int \psi_m \psi_n^* dq$$

Для выполнения условий требуем $\int \psi_m \psi_n^* dq = \delta_{nm}$

Все эти формулы выводим только для того, чтоб мы вникли в суть, все представления на самом деле равноправны, мы можем выбирать любое, здесь работали с f -представлением.

Возможный вопрос на экзамене: докажите, что в случае непрерывного спектра частица со временем уходит на бесконечность.

9 | Непрерывный и дискретный спектр. Вырождение уровней

Рассмотрим задачу о поиске собственных функций оператора кинетической энергии. Понятно, что это $p^2/2m$, причем каждому p^2 соответствует множество собственных функций - экспонент, у которых $|p| = \text{const}$ (это же целая сфера, вектор \hat{p} может иметь какое угодно направление). По определению о *вырождении уровней* говорят, если одному собственному значению оператора соответствует несколько функций. Любая их линейная комбинация будет соответствовать этому значению, выделим такой набор (не полная система, так скажем - поднабор) $f_n : \psi_1, \psi_2 \dots \psi_m$.

Замечание 4. Мы знаем, что собственные функции ортогональны, выполняется ли это для вырожденных уровней? Предположим, что выделенные функции не ортогональны, попытаемся выбрать новую функцию, составив ЛК $\psi'_2 = \sum_{i=1}^2 c_i \psi_i$, т.ч. она будет ортогональна ψ_1 ($(\psi'_2, \psi_1) = 0$) - получаем условие на c_i . Далее можем выбрать ψ'_3 , которая будет ортогональна и ψ_1 , и ψ'_2 , продолжаем процесс ортогонализации. Получается, что путем поворота базиса в подпространстве выбранных функций, соответствующих данному вырожденному собственному значению, всегда можем ортогонализировать систему полностью. Важно число вырождений. Оно может быть как конечно, так и бесконечно, но эта бесконечность гораздо меньше чем бесконечность собственных функций и внутри этой "подбесконечности" никакой проблемы в процессе ортогонализации не будет, все сойдется

Теорема 1. Пусть f и g - одновременно измеримые физические величины, тогда их операторы коммутируют: $[\hat{f}, \hat{g}] = 0$.

Доказательство: Будем рассматривать невырожденный случай, т.к. иначе нам одного классического прибора будет недостаточно. Измерение - это взаимодействие волновой функции с классическим прибором, которое переводит ψ в какую-то одну конкретную ψ_n . Если величины одновременно измеримы, то у них есть общая система собственных функций, причем если она существует, классический прибор позволяет определить в ψ_n некие значения величин f_n, g_n , если не существует - соответствующие значения f_n, g_n измерить одновременно невозможно. Итак,

$$\hat{f}\hat{g}\psi_n = \hat{f}g_n\psi_n = f_n g_n \psi_n$$

$$\hat{g}\hat{f}\psi_n = \hat{g}f_n\psi_n = f_n g_n \psi_n$$

Т.к. соотношения выполняются для $\forall \psi_n$, то $[\hat{f}, \hat{g}] = 0$. **Теорема доказана.**

Теорема 2. Вырождение уровней возникает, если есть две сохраняющиеся физические величины, операторы которых некоммутируют.

Доказательство: Пусть ψ - волновая функция некоторого стационарного состояния, в котором вместе с энергией имеет определенное значение величина f . Тогда $\hat{g}\psi$ не совпадает

с самой волновой функцией, но дает собственные функции оператора \hat{H} , т.к. ψ - это и есть фактически СФ оператора \hat{f} , причем сама ψ - тоже СФ \hat{H} . Величина сохраняется, поэтому она коммутирует с гамильтонианом (явной зависимости от времени нет):

$$\hat{H}(\hat{g}\psi) = \hat{g}\hat{H}\psi = E\hat{g}\psi$$

E здесь - собственное число, т.е. получается, что одному значению E соответствует как волновая функция, так и $\hat{g}\psi$, а значит, возникает вырождение уровней. **Теорема доказана.**

Вывод: любая ЛК волновых функций вырожденного уровня так же является собственной функцией уровня энергии E .

Теорема 3. (Обратная для Теоремы 1) Если операторы физических величин коммутируют, то у них есть общая система собственных функций, т.е. величины одновременно измеримы.

Доказательство: $[\hat{f}, \hat{g}] = 0$, отсюда $\hat{f}\hat{g} = \hat{g}\hat{f}$. Запишем в виде матричного произведения:

$$\sum_k f_{mk} g_{kn} = \sum_k g_{mk} f_{kn}$$

Пусть набор собственных функций, в котором мы записываем матрицы - есть собственные функции оператора \hat{f} , тогда f - диагональная матрица: $f_{mk} = 0$ при $m \neq k$, а значит,

$$g_{mn}(f_m - f_n) = 0$$

Если все f_i разные, то $\forall m \neq n$ выполняется $f_m - f_n \neq 0 \rightarrow g_{mn} = 0$, т.е. матрица может быть выбрана диагональной в данном базисе, тогда ψ_n - с.ф. и для \hat{g} . Если есть вырождение, всегда можно сделать поворот базиса вырожденных решений т.ч. $g_{mn} = 0$. **Теорема доказана.**

10 | Вычисление средних величин в квантовой механике

Рассмотрим, как на языке \hat{f} -представления найти среднее. Пусть спектр дискретен: $\hat{f}\psi = \sum_n a_n f_n \psi_n$, по определению среднего (на самом деле мы сначала покажем, что эта формула приведет к нужному соотношению, причем как в случае дискретного, так и в случае непрерывного спектра, а потом назовем ее определением) $\bar{g} = \int \psi^* \hat{g} \psi dq$, в нашем случае волновыми функциями выступают функции f (т.к. рассматриваем f -представление):

$$\bar{g} = \int f^* \hat{g} f dq = \int \left(\sum_m a_m f_m \right)^* \sum_n g_n a_n f_n dq = \sum_{m,n} a_m^* a_n \int f_m^* f_n g_n dq$$

Вспоминаем об ортогональности собственных функций: $\int f_m^* f_n g_n dq = \int \delta_{mn} g_n dq$. И если собственные числа g_n не зависят от координат, то получим, что среднее можно найти по формуле $\bar{g} = \sum_n g_n |a_n|^2$ (что очень даже логично: сумма всех собственных значений f_n , умноженных каждое на соответствующую вероятность $|a_n|^2$).

Из условия нормировки ранее получали $a_n = \sum_m a_m \int \psi_m \psi_n^* dq$, подставим это и получим интересную формулу:

$$\hat{f}\psi = \int K(q, q') \psi(q') dq', \text{ где } K(q, q') = \sum f_n \psi_n^*(q') \psi_n(q)$$

Отсюда следует, что всякий оператор представим в виде некоего интеграла со своим ядром.

Аналогично поступим с непрерывным спектром: $f(q) = \int a_m(q) f_m(r, q) dr$. Распишем среднее:

$$\begin{aligned} \bar{g} &= \int f^* \hat{g} f dq = \int dq \left(\int a_m^*(r) f_m^*(r, q) dr \right) g_k \left(\int a_k(p) f_k(p, q) dp \right) = \\ &= \int dr \int dp a_m^* a_k \left(\int g_k f_m^*(r, q) f_k(p, q) dq \right) \end{aligned}$$

Причем $\int f_m^* f_k dq = \delta_{mk} \delta(r - p)$. Получим $\bar{g} = \int dr a_m^*(r) a_k(r) g_k = \int g_k |a_k|^2 dr$ - верный ответ.

11 | Соотношение неопределенностей

Будем характеризовать неопределенности координаты и импульса их среднеквадратичными отклонениями: $\delta x = \sqrt{(x - \bar{x})^2}$, $\delta p_x = \sqrt{(p_x - \bar{p}_x)^2}$. Рассмотрим одномерный случай - пакет с волновой функцией $\psi(x)$. Для простоты предположим, что средние значения в этом состоянии $\bar{x} = \bar{p}_x = 0$. Исходим из неравенства

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left| \alpha x \psi + \frac{d\psi}{dx} \right|^2 dx \geq 0, \alpha \in \text{Re}$$

Оно несомненно верное, так как интеграл от квадрата модуля не может дать отрицательное значение. Распишем квадрат модуля:

$$\int \left(\alpha x \psi + \frac{d\psi}{dx} \right) \left(\alpha x \psi^* + \frac{d\psi^*}{dx} \right) dx = \alpha^2 \int x^2 |\psi|^2 dx + \alpha \int \left(x \psi \frac{d\psi^*}{dx} + x \frac{d\psi}{dx} \psi^* \right) dx + \int \frac{d\psi}{dx} \frac{d\psi^*}{dx} dx$$

Рассмотрим каждый интеграл отдельно: $\int x^2 |\psi|^2 dx = (\delta x)^2$ (по определению дисперсии с нулевым мат. ожиданием - средним значением x). Далее, используя интегрирование по частям и условие нормировки волновой функции, получим

$$\begin{aligned} \int \left(x \frac{d\psi^*}{dx} \psi + x \psi^* \frac{d\psi}{dx} \right) dx &= \int x \frac{d|\psi|^2}{dx} dx = \underbrace{x \cdot |\psi|^2}_{0} \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int |\psi|^2 dx = -1 \\ \int \frac{d\psi^*}{dx} \frac{d\psi}{dx} dx &= \underbrace{\frac{d\psi}{dx} \cdot \psi^*}_{0} \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int \psi^* \frac{d^2\psi}{dx^2} dx = \left(\frac{\delta p_x}{\hbar} \right)^2 \end{aligned}$$

Итого:

$$\alpha^2 (\delta x)^2 - \alpha + \left(\frac{\delta p_x}{\hbar} \right)^2 \geq 0$$

Т.к. вышеупомянутое должно быть верно при любых действительных значениях α , то дискриминант $D = 1 - 4(\delta x)^2 \left(\frac{\delta p_x}{\hbar} \right)^2$ должен быть неположительным, а значит,

$$\begin{aligned} \left(\frac{\delta p_x}{\hbar} \right)^2 &\geq \frac{1}{4(\delta x)^2} \\ \delta p_x \cdot \delta x &\geq \frac{\hbar}{2} \end{aligned}$$

Последнее соотношение называют **соотношением неопределенностей**. Наименьшее возможное значение произведение достигается в волновых пакетах, описываемых волновой функцией вида

$$\psi = \frac{1}{(2\pi)^{1/4} \sqrt{\delta x}} \exp \left(\frac{i}{\hbar} p_0 x - \frac{x^2}{4(\delta x)^2} \right)$$

Подробнее смотри в домашних задачах от 12.10.21.

12 | Уравнение Шрёдингера

Не доработано до свойств УШ

(Некоторый эмпирический вывод уравнения Шрёдингера приведен в билете №4)

Общие свойства УШ

1°. ψ -функция однозначна и непрерывна. Мы говорили, что $|\psi|^2 dV$ описывает вероятность нахождения частицы в данном элементе объема, не очень хорошо будет, если вероятность будет или одна, или другая, получится что-то непонятное. Про непрерывность: пусть волновая функция испытывает скачок в какой-то точке, тогда возникнут проблемы с дифференцированием, а производные входят в УШ (в виде импульса, а импульс - это поток, а бесконечные скорости движения частицы - это нехорошо).

2°. Производные волновой функции непрерывны, кроме случая, изображенного на Рис.12.1.

На самом деле, это следствие УШ, потому что это уравнение можно проинтегрировать по малой окрестности интересующей нас точки. В этом случае вторая производная станет скачком первой производной, а интеграл от потенциала по ε -окрестности даст ноль при условии, что потенциал не имеет никаких особенностей в данной точке и вообще меняется не очень фатально. Рассмотрим исключение: здесь это рассуждение не сработает, т.к. потенциал уходит на бесконечность, до стенки волновая функция подходит к ней с каким-то наклоном, а после нее просто нет. Как же быть с потоком: это не просто градиент ψ , это мнимая часть, что означает неопасность разрыва производной волновой функции (если вблизи этой точки поведение функции вида $\sin(x)$, то мнимая часть ноль, а вот если дана бегущая экспонента, то будет уже все плохо).

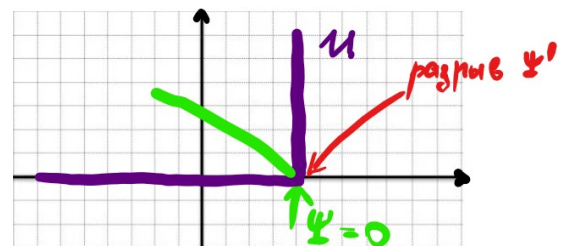


Рис. 12.1: Свойства УШ

3°. ψ конечна, если потенциал конечен, даже если $U \sim 1/r^s$, $s < 2$, т.к. соответствующий проблемный член из вариационного принципа (3d)- $\int d^3r U \psi^2 \sim \int d^3r 1/r^s \psi^2$ - конечный интеграл.

4°. $E_n > U_{min}$ (положительная определенность)

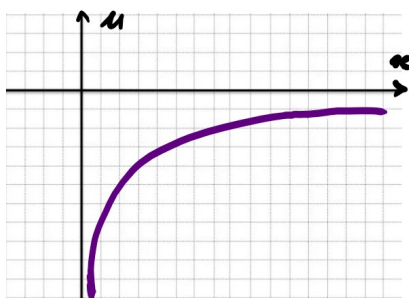


Рис. 12.2: Свойства УШ

5°. Пусть на бесконечности потенциал выходит на асимптоту (Рис. 12.2). При отрицательных энергиях получим связанное состояние (область классических движений - финитных), дискретный спектр, при положительных - непрерывный спектр.

6°. Потенциал в виде плавной стенки (Рис. 12.3). Фиксируем некоторый уровень энергии, слева от точки пересечения

с потенциалом - в смысле уравнений Ньютона мы имеем классически разрешенное движение, есть запас кинетической энергии, здесь ψ будет как-то осциллировать, но в запрещенной области $\psi \neq 0$, есть некоторый экспоненциальный хвост.

7°. **Случай центрального поля** типа поля притяжения $U \sim -\alpha/r^s$, $\alpha > 0$ (частице выгоднее понизить энергию, приближаясь к центру). Пусть в малой окрестности точки r радиуса r_0 волновая функция не зануляется, тогда $\delta p \sim \hbar/r_0$ (чисто соотношение неопределенности). Оценим среднюю энергию

$$\overline{E} \sim \frac{\hbar^2}{mr_0^2} - \frac{\alpha}{r_0^s} \xrightarrow{s>2, r_0 \rightarrow 0} -\infty$$

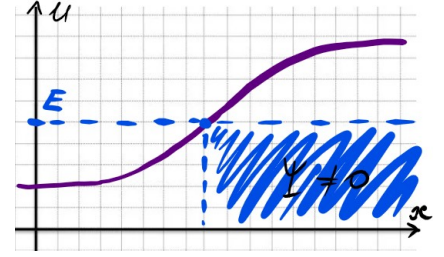


Рис. 12.3: Свойства УШ

Т.е. частица попадает на центр, а в случае $s < 2$ падения на центр нет. В классике попадание есть всегда, в этом случае $s = 2$.

8°. **Решение УШ без магнитного поля могут быть выбраны вещественными.** Если посмотреть на стационарное УШ, найти мнимую единицу невозможно, а значит, утверждение верное.

9°. **Обращение во времени** или

Теорема 4. *Теорема Крамерса при $t \rightarrow -t$, $\psi \rightarrow \psi^*$*

Доказательство: Возьмем полное УШ $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$ и обратим его во времени, тогда уравнение поменяется: $-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial (-t)} = \hat{H}\psi$, возьмем комплексное сопряжение и получим $i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial (-t)} = \hat{H}\psi^*$ - симметричное (в этом смысле) уравнение относительно обращения во времени.

13 | Плотность потока вероятности. Уравнение непрерывности

Запишем оператор гамильтониана для движения одной квантомеханической частицы в потенциале: $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\vec{r})$. УШ:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\vec{r})\right)\psi = E\psi$$

Волновую функцию ищем в виде $\psi = ae^{i\frac{S}{\hbar}}$, подставляем в УШ, разделяем действительную и мнимую части:

$$\underbrace{\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}(\nabla S)^2 + U}_{\text{уравнение Гамильтона-Якоби, если } S - \text{действие}} - \frac{\hbar^2}{2ma}\nabla a = 0$$

$$\frac{\partial a}{\partial t} + \frac{a}{2m}\nabla S + \frac{1}{m}\nabla S\nabla a = 0$$

Из последнего получим уравнение непрерывности для плотностей вероятности $a^2 = |\psi|^2$:

$$\frac{\partial a^2}{\partial t} + \text{div}\left(\underbrace{a^2 \frac{\nabla S}{m}}_{\text{роль потока энергии}}\right) = 0$$

Классическая скорость частицы связана с ее импульсом соотношением $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$, в квантовой механике имеет место такая же связь между операторами, вычислим оператор скорости как производную оператора координаты по общему правилу дифференцирования операторов по времени, получим:

$$\hat{V} = \dot{\hat{r}} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}\hat{r}] = \frac{i}{\hbar}\left(\frac{\hat{p}^2}{2m}\hat{r} + U\hat{r} - \hat{r}\frac{\hat{p}^2}{2m} - \hat{r}U\right) = \frac{i}{\hbar 2m}[\hat{p}^2\hat{r}] = -\frac{i\hbar}{2m}[\Delta\hat{r}] =$$

$$\left\{[\Delta\hat{r}]\psi = \frac{d^2}{dx^2}x\psi - x\frac{d^2}{dx^2}\psi = \frac{d}{dx}\left(\psi + x\frac{d\psi}{dx}\right) - x\frac{d^2}{dx^2}\psi = 2\frac{d\psi}{dx}\right\}$$

$$= -\frac{i\hbar}{2m}2\nabla = \frac{\hat{p}}{m}$$

Пусть есть некоторая физическая величина $f = f(\vec{r})$, тогда $[\hat{f}, \hat{V}] \neq 0$, т.к. скорость, как и импульс частицы, не может быть определенного значения одновременно с ее координатами.

$$\hat{f} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}f] = \frac{i}{2m\hbar}[\hat{p}^2, f] =$$

$$\left\{ [\mathbf{p}f]\psi = -i\hbar(\nabla(f\psi) - f\nabla\psi) = -i\hbar\psi\nabla f \right\}$$

$$= \frac{i}{2m\hbar} \left(\hat{p}(f\hat{p} - i\hbar\nabla f) - (\hat{p}f + i\hbar\nabla f)\hat{p} \right)$$

Тогда для оператора скорости имеем

$$\hat{V} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}\hat{V}] = \frac{1}{m\hbar} [\hat{H}\hat{p}] = \frac{i}{m\hbar} [\hat{U}, \hat{p}]$$

Отсюда $m\hat{V} = -\nabla U$ - по форме операторное уравнение в точности совпадает с уравнением движения классической механики. Продифференцируем интеграл от вероятности по некоторому конечному объему:

$$\frac{d}{dt} \int |\psi|^2 dV = \int \left(\psi \frac{d\psi^*}{dt} + \psi^* \frac{d\psi}{dt} \right) dV = \frac{i}{\hbar} \int (\psi \hat{H}^* \psi^* - \psi^* \hat{H} \psi) dV$$

Учитывая, что $\hat{H} = \hat{H}^* = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U$, а $\psi \Delta \psi^* - \psi^* \Delta \psi = \text{div}(\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi)$, получим минус интеграл от дивергенции некоторого вектора \vec{j} - *вектора плотности потока вероятности* или просто *плотности потока*. Интеграл от этого вектора уже по поверхности (используем теорему Гаусса) есть вероятность того, что в течение единицы времени частица пересечет эту поверхность.

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) = \frac{1}{2m} (\psi \hat{\mathbf{p}}^* \psi^* + \psi^* \hat{\mathbf{p}} \psi)$$

Если представить волновую функцию в виде $|\psi|e^{i\alpha}$, то $\mathbf{j} = \hbar|\psi|^2 \text{grad}(\alpha)/m$.

Из коммутации интегрирования по объему и дифференцирования по времени в данном случае получим *уравнение непрерывности* - аналогичное классическому уравнению непрерывности:

$$\frac{d}{dt} |\psi|^2 + \text{div} \vec{j} = 0$$

Возможный вопрос на экзамене: как записать плотность потока в классическом пределе? **Ответ:** волновую функцию подставляем в виде $\psi = ae^{i\frac{S}{\hbar}}$ (S - действие), получим

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m} \left(ae^{i\frac{S}{\hbar}} \nabla a^* e^{-i\frac{S}{\hbar}} - a^* e^{-i\frac{S}{\hbar}} \nabla ae^{i\frac{S}{\hbar}} \right) = \frac{i\hbar}{2m} |a|^2 \left(-\frac{i}{\hbar} - \frac{i}{\hbar} \right) \nabla S = \frac{|a|^2}{m} \nabla S = \frac{|a|^2}{m} \mathbf{p} = |a|^2 \mathbf{v}$$

14 | Смена представления. Примеры. Представления Шрёдингера и Гейзенберга

Не хватает только примеров из практики

Запишем УШ $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$, где $\psi = \psi(q, t)$, т.е. эволюция системы отражается в эволюции ψ -функции (*представление Шрёдингера*). Средние значения вычисляются как

$$\bar{f}(t) = \int \psi^*(q, t) \underbrace{\hat{f}_q}_{\text{действует на } q} \psi(q, t) dq$$

Хотим перенести зависимость от времени от волновой функции на оператор, т.е. будем рассматривать так называемое *представление Гейзенберга*:

$$\bar{f} = \int \psi^*(q, 0) \hat{f}_q(t) \psi(q, 0) dq$$

Обычные классические уравнения $\dot{\vec{p}} = -\nabla U$ хотим преобразовать в операторные $\dot{\hat{\vec{p}}} = -\nabla \hat{U}$. Применение различных представлений - лишь вопрос удобства.

Введем *оператор эволюции* $\hat{S} = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}$ (в предположении, что оператор гамильтона от времени не зависит). По определению, собственные функции оператора эволюции совпадают с собственными функциями оператора гамильтониана, т.е. с волновыми функциями стационарных состояний ψ_n ($\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n$). Этот оператор действует на волновую функцию и переводит её в функцию без зависимости от времени $\hat{S}\psi_n(q, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \psi_n(q)$. Переход между представлением Шрёдингера и Гейзенберга: $\psi(q, t) = \hat{S}\psi(q, 0)$, т.е. действие оператора эволюции приводит к переводу волновой функции системы в некоторый начальный момент времени в волновую функцию в произвольный момент времени.

Теорема 5. *Оператор эволюции унитарен*

$$\hat{S}^\dagger \hat{S} = 1$$

Доказательство:

Получим временное уравнение для оператора эволюции. С этой целью рассмотрим УШ для стационарного состояния и учтем действие оператора эволюции на волновую функцию:

$$\hat{S}\psi_n(q, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \psi_n(q)$$

$$\psi(q, t) = \hat{S}\psi(q, 0)$$

Получим

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{S}\psi(q, 0) = \hat{H}\hat{S}\psi(q, 0)$$

Поскольку это уравнение выполняется для любых $\psi(q, 0)$ (из гильбертова пространства), то $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{S} = \hat{H}\hat{S}$. Воспользуемся временным уравнением операторов эволюции \hat{S} и \hat{S}^+ :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{S} = \hat{H}\hat{S}, \text{ и } i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{S}^+ = -\hat{S}^+ \hat{H}$$

Рассмотрим производную по времени

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\hat{S}^+ \hat{S}) = i\hbar \frac{\partial \hat{S}^+}{\partial t} \hat{S} + i\hbar \hat{S}^+ \frac{\partial \hat{S}}{\partial t} = (-\hat{S}^+ \hat{H} \hat{S} + \hat{S}^+ \hat{H} + \hat{S}) = 0$$

В начальный момент времени оператор эволюции является единичным оператором и, следовательно, унитарным. Поскольку производная по времени от произведения операторов $\hat{S}^+ \hat{S}$ равна нулю, то это произведение не зависит от времени и $\hat{S}^+ \hat{S} = \hat{I}$, т.е. $\hat{S}^+ = \hat{S}^{-1}$ оператор эволюции унитарен.

Теорема доказана.

Итак, рассмотрим

$$\bar{f}(t) = \int \hat{S}\psi^* \hat{f} \hat{S}\psi dq = \int \psi^* \hat{S}^{*T} \hat{f} \hat{S}\psi dq = \int \psi^* \underbrace{\hat{S}^+ \hat{f} \hat{S}}_{\text{фактически новый оператор в представлении Гейзенберга}} \psi dq$$

$$\hat{f}_H(t) = \hat{S}^{-1} \hat{f}_\text{ш} \hat{S}$$

Оператор в новом представлении - это функция времени, можем записать уравнение движения.

$$\frac{\partial \hat{f}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{S}^+ \hat{f}_\text{ш} \hat{S} - \frac{i}{\hbar} \hat{S}^+ \hat{f}_\text{ш} \hat{S} \hat{H} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H} \hat{f}]$$

Если есть базис функций, который диагонализует \hat{H} , то есть фактически собственные функции этого оператора $\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n$, то фактически временная зависимость снимается с уравнения на эти функции $\psi_n = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \varphi_n(q)$.

Замечание 5. Если дана задача на УШ без начальных условий, тогда волновую функцию ищем как суперпозицию: $\psi = \sum_n a_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \varphi_n(q)$. В норме в этом спектре все энергии ограничены снизу, а $\min_n E_n$ отвечает основному состоянию. Дискретный спектр соответствует финитному движению (существует нормировочный интеграл), если никакая часть системы не уходит на ∞ , то состояние называют *связанным*. Волновые функции непрерывного спектра всегда уходят на бесконечность.

$$\psi = \int a_E e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \psi_E(q) dE$$

$$|\psi|^2 = \iint q_E q_E^* e^{\frac{i}{\hbar} (E' - E) t} \psi_E(q) \psi_E^*(q) dE dE'$$

При усреднении по времени и $t \rightarrow \infty$ получим $|\psi|^2 \rightarrow 0$.

Представление Гейзенберга используется в релятивистской теории, а также в задачах статистической физики.

Примеры см в домашней работе от 19 и 26.10.21:

Пример 1 (Ньютоновская механика). Операторы импульса и координаты.

Пример 2 (Гармонический осциллятор). Рассмотрим гамильтониан, описывающий квантовый гармонический осциллятор:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{mw^2x^2}{2}$$

Запишем производные по времени от операторов импульса и координаты в представлении Гейзенберга, получим уравнения Гамильтона.

15 | Импульсное представление

Найдем собственные функции и значения оператора импульса, которые определяются векторным уравнением:

$$-i\hbar\nabla\psi = \mathbf{p}\psi$$

Его решение имеет вид

$$\psi = const \cdot e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar}$$

Учтем условие нормировки: $\int \psi_{\mathbf{p}'}^* \psi_{\mathbf{p}} dV = \delta\left(\frac{\mathbf{p}' - \mathbf{p}}{2\pi\hbar}\right) = (2\pi\hbar)^3 \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p})$, тогда $const \equiv 1$. Разложение произвольной волновой функции $\psi(\mathbf{r})$ по собственным функциям оператора импульса - обычное разложение в интеграл Фурье по координате:

$$\psi(\mathbf{r}) = \int a(\mathbf{p}, t) \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} = \int a(\mathbf{p}, t) e^{\frac{i\mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}} \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3}$$

Причем коэффициенты разложения равны

$$a(\mathbf{p}, t) = \int \psi(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}) dV = \int \psi(\mathbf{r}) e^{-\frac{i\mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}} dV$$

Функцию $a(\mathbf{p}, t)$ можно рассматривать как волновую функцию частицы в **импульсном представлении**, а $|a(\mathbf{p}, t)|^2 \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3}$ - как вероятность импульсу иметь значения интервале $d^3 p$.

Знаем, что импульс можно записать в координатном представлении ($-i\hbar\nabla$) и в импульсном (просто домножение на \mathbf{p}), как записать оператор координат в импульсном представлении? Рассмотрим оператор координат, с его помощью можем определить среднее значение: $\bar{\mathbf{r}} = \int \psi^* \mathbf{r} \psi dV$, подействуем этим оператором на волновую функцию (в импульсном представлении):

$$\mathbf{r}\psi(\mathbf{r}) = \int \mathbf{r} a(\mathbf{p}, t) e^{\frac{i\mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}} \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3}$$

Учитывая, что $\vec{r} e^{\frac{i\vec{p}\vec{r}}{\hbar}} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{p}} e^{\frac{i\vec{p}\vec{r}}{\hbar}}$, а $\underbrace{\frac{\partial}{\partial \vec{p}} a \cdot e^{\frac{i\vec{p}\vec{r}}{\hbar}}}_{=0} \Big|_{-\infty}^{\infty} - \frac{\partial a}{\partial \vec{p}} \cdot e^{\frac{i\vec{p}\vec{r}}{\hbar}}$, что получается интегрированием

по частям, получим:

$$\vec{r}\psi(\vec{r}) = i\hbar \int e^{\frac{i\vec{p}\vec{r}}{\hbar}} \frac{\partial a}{\partial \vec{p}} \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3}$$

То есть мы переходим от $\psi(\vec{r})$ к $a(\vec{p})$, оператор координаты в этом представлении $\hat{\vec{r}} = i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{p}}$. Домножим скалярно получающееся равенство на ψ^* слева и проинтегрируем по всему объему.

$$\vec{r} = \iint \psi^*(r) i\hbar \frac{\partial a}{\partial \vec{p}} e^{\frac{i\vec{p}\vec{r}}{\hbar}} dV \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3}$$

Здесь скрыт сопряженный Фурье-образ $\int \psi^*(\vec{r}) e^{\frac{i\vec{p}\vec{r}}{\hbar}} dV = a^*(\vec{p})$, общий вид остался таким же с точностью до замен $\vec{r} \rightarrow \vec{p}$ и $\psi \rightarrow a$:

$$\vec{r} = \int i\hbar a^*(\vec{p}) \frac{\partial \vec{a}}{\partial \vec{p}} \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}$$

Оператор импульса диагонален в данном представлении.

16 | Сохранение величин и симметрии

В случае однородности пространства при любых трансляциях или поворотах *все будет тоже самое* - формульно изменение лагранжиана или гамильтониана должно быть равно нулю. Возникает подозрение, что с каждой симметрией задачи должен быть связан какой-то закон сохранения. Итак, пусть Лагранжиан явно от времени не зависит, т.е. имеет место однородность во времени:

$$\begin{aligned} \frac{dL}{dt} &= \sum \frac{\partial L}{\partial q_i} \dot{q}_i + \sum \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \ddot{q}_i = \left| \frac{\partial L}{\partial q_i} = \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right| = \sum \dot{q}_i \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} + \sum \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \ddot{q}_i = \sum \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i \right) \\ &\quad \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i - L \right) = \frac{dH}{dt} = 0 \end{aligned}$$

Получили ЗСЭ. С импульсом аналогично: запишем изменение лагранжиана, берем все трансляции одинаковые, равные ε :

$$\delta L = \sum \frac{\partial L}{\partial \vec{r}_\alpha} \delta \vec{r}_\alpha = \vec{\varepsilon} \sum_\alpha \frac{\partial L}{\partial \vec{r}_\alpha} = 0$$

Выполняется для $\forall \vec{\varepsilon}$, используем уравнения лагранжа $\longrightarrow \sum \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \vec{v}_\alpha} = 0$ (суммарный импульс сохраняется).

Как же обстоит дело в квантовой механике с законами сохранения, что значит сохранение физической величины с точки зрения квантовой механики? Но прежде - что вообще понимать под оператором производной по времени физической величины? Рассмотрим \hat{f} и $\hat{\bar{f}}$, запишем средние: $\bar{f} = \int \psi^* \hat{f} \psi dq$, $\bar{\bar{f}} = \int \psi^* \hat{\bar{f}} \psi dq = \bar{\dot{f}}$. Получили некоторое условие, распишем его:

$$\dot{\bar{f}} = \frac{d}{dt} \int \psi^* \hat{f} \psi dq = \int \psi^* \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} \psi dq + \int \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \hat{f} \psi dq + \int \psi^* \hat{f} \frac{\partial \psi}{\partial t} dq$$

Далее воспользуемся уравнением Шредингера (выразим $d\psi/dt$):

$$\dot{\bar{f}} = \int \psi^* \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} \psi dq + \int \psi^* \frac{i}{\hbar} [\hat{H} \hat{f}] \psi dq = \int \psi^* \left(\frac{\partial \hat{f}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H} \hat{f}] \right) \psi dq = \int \psi^* \hat{\dot{f}} \psi dq$$

Сохранение величины значит $\hat{\dot{f}} = 0$, а т.к. мы всегда рассматриваем величины, т.ч. $\frac{\partial \hat{f}}{\partial t} = 0$, то получим условие сохранения величины - они должны коммутировать с гамильтонианом: $[\hat{H}, \hat{f}] = 0$.

Вернемся к классике и рассмотрим уже функцию $f(q, p, t)$:

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \sum \frac{\partial f}{\partial q_i} \dot{q}_i + \sum \frac{\partial f}{\partial p_i} \dot{p}_i = \frac{\partial f}{\partial t} + \sum \left(\frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) = \frac{\partial f}{\partial t} + \sum \{f, H\}$$

Получается, что физические величины мы заменяем в квантах операторами, а скобки Пуассона $\{f, H\}$ - коммутаторами. Вот такой существует "рецепт" написания уравнений квантовой механики, если известны уравнения классической физики.

Как мы уже отметили, всякий закон сохранения следует из какой-либо симметрии. Что есть закон сохранения в квантовой механике? Например, импульс сохраняется, если его оператор коммутирует с гамильтонианом, как было показано выше: $[\hat{H}, \hat{p}] = 0$.

Возьмем ψ -функцию и небольшое приращение по координатам $\delta \mathbf{r}_i$, если трансляция мала, можем разложить волновую функцию в ряд Тейлора:

$$\psi(\{\vec{r}_i + \delta \vec{r}_i\}) \approx \psi(\{\vec{r}_i\}) + \sum \delta \vec{r}_i \nabla \psi(\{\vec{r}_i\})$$

В сумме оставляем те слагаемые, для которых $\delta \vec{r}_i = \delta \vec{r}_j \mathbf{y} 0$, и пускай $\delta \vec{r}_i = \delta \vec{r}$, тогда

$$\psi(\{\vec{r}_i + \delta \vec{r}_i\}) \approx \psi(\{\vec{r}_i\}) \delta \vec{r} \sum_j \nabla_j \psi$$

Рассмотрим малую трансляцию в уравнении Шредингера $\hat{H}\psi = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} (\square \hat{H}(\vec{k}))$. Система инвариантна, если $[\sum_i \nabla_i, \hat{H}] = 0$, а из классики знаем про ЗСИ, все хорошо. Вообще должен выполняться ЗСЭ, с точки зрения операторов все сошлется.

17 | Четность состояния. Правило отбора по четности

Не доработано

Из свойств нестационарного УШ в 1D: Если потенциал $U(x)$ - четная функция, то *все* решения есть четные или нечетные функции и симметрия решения всегда меньше симметрии уравнения. Для основного состояния ψ -функция всегда четная.

Нам потребуется оператор инверсии $\hat{P}\psi(\vec{r}) = \psi(-\vec{r})$. Его собственные числа ± 1 , т.к. если подействовать данным оператором два раза, то получится $P^2 = 1$. Следующее свойство: $[\hat{P}\hat{L}] = 0$.

Рассмотрим $I = \int \psi_n^* \hat{f} \psi_m dq$ и применим оператор инверсии, т.е. $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$, тогда

$$I = \begin{cases} -I, \rightarrow I = 0 \\ +I \end{cases}$$

Получили так называемое **правило отбора**. //куча пропущенных слов// Отбор возможных переходов собственных функций. Обозначения: g - четное состояние (от нем. *gerade*) и u - нечетное (от нем. *ungerade*). //здесь точно было пару примерчиков на лекции//

Действие оператора инверсии в декартовых и сферических координатах соответственно:

$$\begin{cases} x \rightarrow -x \\ y \rightarrow -y \\ z \rightarrow -z \end{cases} \quad \begin{cases} r \rightarrow -r \\ \varphi \rightarrow \varphi + \pi \\ \theta \rightarrow \pi - \theta \end{cases}$$

Применим его к функциям:

$$P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi} \rightarrow (-1)^m e^{im\varphi} (-1)^{l-m} P_l^m(\cos\theta)$$

Получается, что $P = (-1)^l$.

18 | Вариационный метод в квантовой механике

Написали стационарное УШ, верно ли что мы можем написать и функционал для него, определить некоторый принцип минимума, и при варьировании получить уравнение Шредингера? Ответ практически очевиден. Введем функционал $(\hat{H} - E)$, "обставим" его с двух сторон ψ и ψ^* , проинтегрируем по всем переменным. Возьмем первую вариацию полученного функционала:

$$\delta \int \psi^* (\hat{H} - E) \psi dq$$

Замечание 6. Стоит отметить, что ψ -функция комплексная, значит, это есть набор двух независимых действительных функций, отдельно будем варьировать по ψ и по ψ^* (к функции добавляем произвольное изменение, подставляем в функционал и выделяем линейную часть). Вообще это не очевидно, что можно варьировать отдельно, но если всю эту работу проделать, то можно увидеть одинаковый результат.

Итак, проварьируем по ψ^* , для наличия экстремума приравняем к нулю:

$$\int \delta \psi^* (\hat{H} - E) \psi dq = 0$$

Т.к. выполняться должно для любых отклонений $\delta \psi^*$, то получим УШ $\hat{H}\psi = E\psi$. На самом деле исходно варьируется функционал $\delta \int \psi^* \hat{H} \psi dq = 0$ при условии $\int |\psi|^2 dq = 1$. И если мы его проварьируем, то (определяем функционал как домноженный на константу) получим коэффициент - множитель Лагранжа, роль этого множителя как раз играет энергия.

Найденное $\min \int \psi^* \hat{H} \psi dq - 1^{oe}$ (наинизшее) собственное значение энергии. Соответствующая ψ_0 - волновая функция **основного состояния**, остальные $\psi_{n>0}$ дадут экстремумы функционала, но не минимум. Требуются условия ортогональности каждой из последующих функций к найденной (если нашли ψ_0 , говорим, что ψ_1 должно быть ей ортогонально; дальше опять ищем минимум ψ_1 и т.д.)

Подытожим: если $\psi_0, \psi_1 \dots \psi_{n-1}$ - первые n состояний по возрастанию энергий, то ψ_n даст минимум $\int \psi^* \hat{H} \psi dq$ при условиях $\int |\psi|^2 dq = 1$ и $\int \psi^* \psi_m dq = 0$ ($m = 0, 1 \dots n-1$).

Как можно было бы решать дальше задачу, не обращаясь к уравнениям Эйлера-Лагранжа, которые являются УШ? Это т.н. **практическая сторона вариационного принципа**: есть утверждение, что некоторый определенный функционал на определенном классе функций должен быть минимальным; как найти этот минимум - перебираем все функции (как минимум функции - по точкам), что не предоставляется возможным. Зачем же тогда нам это? Помимо последовательных действий существуют догадки: мы можем догадываться, какой вид функции должен дать минимум соответствующего функционала, каждый раз построение такой функции

- искусство, которое основано на определенных приемах. Допустим, в одномерной задаче есть потенциальная яма, как должна себя вести в ней волновая функция? Спадать вне нее. А по какому закону - черт знает с каким показателем, но экспоненциально. Записываем какую-нибудь функцию из данного класса, например, Гаусс $\exp(-\lambda x^2)$ с неизвестным показателем спада, это еще не решение нашей задачи, но очень похоже на него. Это **метод пробных функций**. Далее подставляем функцию в функционал, который можем спокойно вычислить (мы же не дураки, сложные функции рассматривать не будем), то есть взять интеграл по x . Полученную функцию параметра просто дифференцируем по λ и находим минимум. Т.о. мы найдем на данном (очень узком) классе функций минимум, который реализуется функцией Гаусса с вычисленным показателем. Конечно, мы не сумели верно перебрать все функции, но с другой стороны, эта функция может иметь среднюю энергию (в УШ) очень близкую к истинному минимуму.

Теорема 6. Волновая функция ψ_0 основного состояния не обращается в нуль (не имеет **узлов**) ни при каких конечных координатах.

Доказательство: Пусть не так, тогда возникает противоречие с принципом минимума из вариационного принципа, подробное доказательство под звездочкой (см Лаврентьев М.А., Люстерник Л.А. "Курс вариационного исчисления").

Следствие 1. Нижний уровень не вырожден.

Доказательство: Предположим обратное. Возьмем две собственные функции ψ_0, ψ'_0 , соответствующие нижнему уровню E_0 , тогда их линейная комбинация $s\psi_0 + s'\psi'_0$ так же будет являться собственной функцией, соответствующей энергии E_0 . Выбирая связь констант s и s' в ЛК всегда можем получить нуль в любой заданной точке пространства и противоречие с предыдущей теоремой об отсутствии узлов. **Следствие доказано**

Замечание 7. Функционал, который мы записали ранее, в явном виде выглядит вот так:

$$\int \psi^* \hat{H} \psi dq = \int \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \psi^* \Delta \psi + U |\psi|^2 \right) dq = \dots$$

Интегрируем по частям первый член и учитываем следующее тождество $\text{div}(\psi^* \nabla \psi) = |\nabla \psi|^2 + \psi^* \nabla^2 \psi$, результат:

$$\dots = \int \left(\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \psi|^2 + U |\psi|^2 \right) dq$$

Здесь предположили достаточно быстрое спадания на бесконечности, т.е. $\int \text{div}(\psi^* \nabla \psi) dq = \oint \psi^* \nabla \psi dS = 0$ (область устремляем в бесконечность) - спектр дискретный. Полученное выражение не бесполезно, оно говорит о том, что энергия имеет неотрицательный знак. Да, потенциал может менять знак, но если же потенциал не обращается в бесконечность, можем выбрать начало отсчета таким образом, что можно взять нижнюю грань и спектр волновой функции будет заведомо положительно определен.

19 | Общие свойства одномерного движения

1°. Если $U = U_1(x) + U_2(y) + U_3(z)$, то в силу аддитивности по каждой координате кинетической энергии работает принцип разделения переменных $\psi = \psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)$, т.е. для каждой из этих функций получим одномерную задачу.

2°. Обсудим одну из этих 1D задач.

Теорема 7. Для одномерного случая все уровни дискретного спектра не вырождены.

Доказательство: Пусть есть ψ_1 и ψ_2 , соответствующие одному значению энергии E . Тогда из УШ получим

$$\frac{\psi_1''}{\psi_1} = \frac{2m}{\hbar^2}(U - E) = \frac{\psi_2''}{\psi_2}$$

Тогда $\psi_1''\psi_2 - \psi_1\psi_2'' = 0$. Запишем в виде полной производной и проинтегрируем: $\psi_1'\psi_2 - \psi_1\psi_2' = \text{const}$. Рассмотрим предел $x \rightarrow \infty$: $\psi_{1,2} \rightarrow 0$. Т.к. состояние связанное (спектр дискретный), то $\text{const} \equiv 0$. Что из этого следует: $\frac{\psi_1'}{\psi_1} = \frac{\psi_2'}{\psi_2}$ и $\psi_1 = \text{const} \cdot \psi_2$. **Теорема доказана**

3° свойство:

Теорема 8. Осцилляционная теорема Если n нумерует энергии в порядке возрастания, то любая собственная функция ψ_n , соответствующая собственному значению E_n , обращается в нуль n раз (при конечных x).

Доказательство: Доказательство давал Антон Андреевич, оно под звездочкой, будет время - включим в документ.

4°. Классификация спектра.

Область II на Рис. 19.1 - область отрицательных энергий: на $\pm\infty$ энергия всегда будет меньше асимптотики потенциала $E < U_0$, поэтому в системе наблюдается затухание, спектр дискретный, т.к. движение финитно.

Область I соответствует непрерывному спектру ($0 < E < U_0$), но собственные значения E_n не вырождены, потому что на $+\infty$ у нас есть плоская волна, распространяющаяся налево, она отражается слева и бежит направо (налево пройти она не может, т.к. энергия меньше U_0 и волновая функция может только

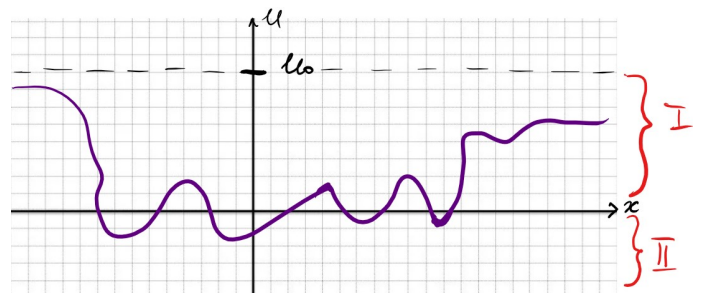


Рис. 19.1: Классификация спектра в случае несимметричного относительно ГУ на бесконечностях потенциала

затухнуть, потока на $-\infty$ нет), а значит, решение имеет вид типа косинуса.

$$\psi \rightarrow^{x \rightarrow \infty} a \cos(kx + \delta)$$

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Здесь δ - фаза рассеяния (некоторый набег фаз, образующийся при рассеянии волны упавшей и отраженной). Волновое число такое, потому что в асимптотике больших x потенциал стремиться в ноль, а для свободной частицы импульс и энергия связаны таким соотношением. Косинус выбрали, т.к. амплитуда упавшей и отраженной от стенки волн должны быть одинаковы (волновая функция никуда не может деваться, это плотность потока, теорема о непрерывности потока вероятности).

При $x \rightarrow -\infty$ получим уравнение

$$\psi'' - \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)\psi = 0$$

Тогда решение $\psi = be^{\kappa x}$, $\kappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}$ - затухание при отрицательных x .

На самом деле здесь 2 решения, но одно ведет себя "нехорошо об этом см далее (проблема экспоненциальной сходимости).

В неотмеченной области $E > U_0$ спектр непрерывный, но все уровни двухкратно вырождены, т.к. в асимптотике решение есть e^{ikx} и e^{-ikx} , они всегда двухкратно вырождены. Можем возразить: они могут отражаться от потенциала, даже при высоких энергиях есть e^{ikx} , есть отраженная волна и прошедшая налево. Все верно, но есть и обратная ситуация: слева есть падающая волна, она частично отражается и проходит. (Для пролетных частиц в адекватном формате обсудим все позже). Оба независимых решения на бесконечностях удовлетворяют хорошим ГУ: на самом деле УШ на всей оси x для любого значения энергии всегда имеет 2 решения (как уравнение 2 порядка), проблема в том, что не для всех энергий эти решения имеют регулярные асимптоты (экспоненциально расходятся), поэтому при накладывании ограничения - нормированности волновой функции - для большей части энергий, для которых невозможно обеспечить сходимость интеграла, решение пропадает, остается только одна волновая функция для выделенных значений энергии, отвечающая дискретному спектру, регулярно ведущая себя на $\pm\infty$.

Замечание 8. Мы говорили, что в области II спектр дискретный, понятно, что это какие-то потенциальные ямы. Вопрос: пусть есть потенциальная яма такая, что в асимптотике $\pm\infty$ она выходит симметрично на некоторую константу, для любой ли ямы есть дискретный спектр при $E < 0$? Если яма глубокая и широкая, то связанных состояний там очень много, дискретных уровней энергии тоже, начнем уменьшать ее глубину и ширину, количество уровней и связанных состояний уменьшается. Правда ли, что в очень узкой и малой яме может не остаться ни одного уровня? Ответ: в любой сколь угодно мелкой одномерной яме всегда должно быть хотя бы одно связанное состояние.

5°. Если потенциал $U(x)$ - четная функция, то мы можем определить **четность волновой функции**. Итак, $\psi(x)$ - решение УШ:

$$\hat{H}(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

Сменим x на $-x$ в этом уравнении $\hat{H}(-x)\psi(-x) = E\psi(-x)$. Т.к. потенциал - функция четная, как и $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$, то оператор Гамильтона не изменится, тогда $\psi(-x)$ - тоже решение УШ

$$\hat{H}(x)\psi(-x) = E\psi(-x)$$

Оба уравнения линейные, можем тогда сказать, что $\psi(-x) = C\psi(x)$, а если еще раз сменить $-x$ на x , то получим еще одну связь $\psi(x) = C^2\psi(x)$ (почему константа та же: каждый раз, когда мы меняем в уравнении x на $-x$, у нас получается константа в связи волновых функций, можем начать с другой стороны оси, с $-x$ на x , опять эта же константа) и константу $C = \pm 1$. Значит, *все решения есть четные или нечетные функции* и симметрия решения всегда меньше симметрии уравнения. Для основного состояния ψ -функция всегда четная (в противном случае у нее были бы узлы, чего быть не может).

6°. Нормировочный коэффициент непрерывного спектра

а) Рассмотрим волновую функцию для движения, инфинитного в одну сторону $x \rightarrow \infty$. Нормировочный интеграл расходится на бесконечности (волновая функция там не спадает) и это основной вклад в интеграл, поэтому не важно, от какой точки берем интеграл, левый предел интегрирования можно выбрать любым образом. Пусть, например, $x=0$

$$\int_0^\infty \psi_p^* \psi_{p'} dx = \delta\left(\frac{p-p'}{2\pi\hbar}\right) = 2\pi\hbar\delta(p-p')$$

где в качестве p мы можем взять любое число, которое нумерует нам уровни энергии, пусть это значение импульса на бесконечности. При $x \rightarrow \infty$ имеем асимптотику $\psi_p \approx 2\cos(kx + \delta) = e^{-i(kx+\delta)} + e^{i(kx+\delta)}$ - 2 стоячие волны, где δ - это некая неопределенная величина, а т.к. мы не конкретизируем потенциал, оставляем ее неизвестной. $p \rightarrow p'$, выкинем слагаемые с суммой k и k' , т.к. они не дадут δ -функцию (большой вклад, т.к. в ноль сумма не обращается):

$$\int \psi_p^* \psi_{p'} dx = \int_0^\infty e^{i(k'-k)x} dx + \int_0^\infty e^{-i(k'-k)x} dx = \int_{-\infty}^\infty e^{i(k'-k)x} dx = 2\pi\delta(k-k')$$

Получили такую же нормировку с учетом отличия k от p - **нормировка на значение импульса на ∞** .

б) Переход к **нормировке на δ -функцию по энергии**. Учтем связь между импульсом и энергией в ψ_p :

$$\frac{d\left(\frac{p}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}}{dE} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar V}}$$

Т.к. dE/dP есть скорость. Подставляем связь в интегралы. Волновая функция, нормированная на энергию, может быть записана в следующем виде:

$$\psi_E = \frac{\psi_p}{\sqrt{2\pi\hbar V}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar V}} (e^{-i(kx+\delta)} + e^{i(kx+\delta)})$$

Если взять 2 такие волновые функции - одна для E , другая для E' , тогда

$$\int \psi_E^* \psi_{E'} dx = 2\pi\hbar\delta(E-E')$$

Фактически, это преобразование координат (p на E).

Возможный вопрос на экзамене: Бывают ли в бесконечно мелкой ямке связанные состояния? А в 3D?

Примерная часть ответа: учитываем масштабы нашей задачи: $\psi \sim 1/\sqrt{L}$ (из нормировки квадрата модуля волновой функции), $\psi'_x \sim \psi/L$. Введем функционал

$$F = \int \left(\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla\psi|^2 + U|\psi|^2 \right) dV$$

Его минимум с учетом нормировки $\int |\psi|^2 dx = 1$ даст решение $\psi(x)$ (основное состояние). Проведем некоторые оценки: $|\nabla\psi|^2 \sim \psi^2/L^2 \sim 1/L^3$, $|\psi|^2 \sim 1/L$, тогда

$$\int \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla\psi|^2 dx \sim \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{L^3} L$$

$$\int U|\psi|^2 dx \sim -U_0 \frac{1}{L} a$$

И получается, что $F \sim \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{L^2} - \frac{U_0 a}{L}$, т.е. всегда существует минимум.

Поэтому всегда есть хотя бы одно связанное состояние.

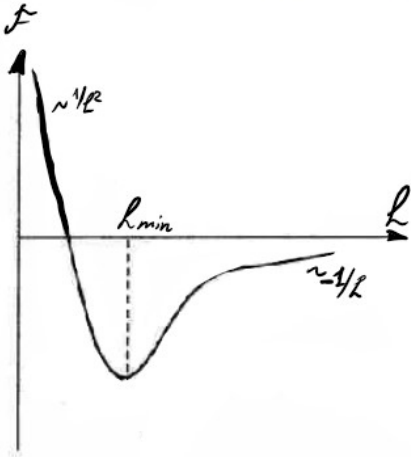


Рис. 19.3: К вопросу о бесконечно мелкой яме. Вид функционала

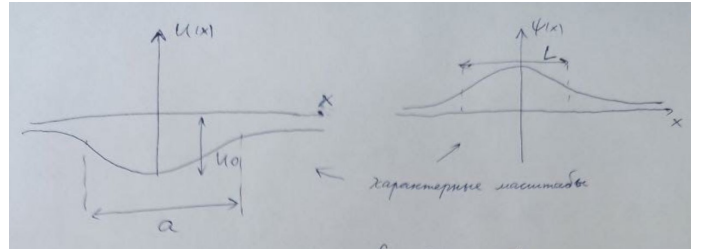


Рис. 19.2: К вопросу о бесконечно мелкой яме. Масштабы задачи

20 | Коэффициенты отражения и прохождения в одномерных задачах. Примеры

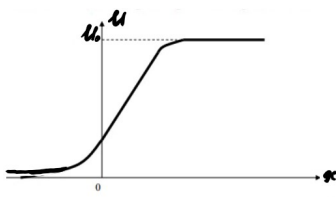


Рис. 20.1: Вид рассматриваемого потенциала

$$k_2 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - U_0)}.$$

При отрицательных больших значениях $x \rightarrow -\infty$ получим с выбранным первым единичным коэффициентом (здесь точно есть две волны, если один коэффициент положить 1 и найти это одно решение, то, домножив общее решение на некую общую константу, то получим искомое решение, но это уже вопрос нормировки амплитуды волны): $\psi = e^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$, где $k_1 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}$.

Замечание 9. Если взять энергию $E < U_0$, как определить связь коэффициентов? Далеко справа решение равно нулю, независимо от нашего желания выбирать коэффициенты, поэтому амплитуда прошедшей волны в этом смысле ноль. Слева есть коэффициент подающей волны, который можем положить равным единице, а потом домножить решение на общую константу, второй коэффициент (отраженной волны) с одной стороны неизвестен, а с другой мы знаем, что сохраняется поток, откуда модуль этого коэффициента тоже должен быть равен 1 (фазу коэффициента уже надо искать).

Плотность потока в падающей волне k_1 , в отраженной $k_1|B|^2$, в прошедшей $k_2|A|^2$. Коэффициент прохождения $T = \frac{k_2}{k_1}|A|^2$ - отношение плотностей потоков в прошедшей к потоку в падающей, коэффициент отражения $R = |B|^2 = 1 - T$ - отношение потоков в отраженной волне к потоку в падающей. Все это мы выводили на практике (дз от 26.10.21), можно эти задачки (а так же ЛЛ т.III стр. 108-111) взять в примеры.

Пусть дано произвольное стационарное состояние с $E > U_0$, зададим волновую функцию на $x = -\infty$ и $x = \infty$ соответственно, не предполагая пока ГУ:

$$\psi = A_1 e^{ik_1x} + B_1 e^{-ik_1x}, \text{ и } \psi = A_2 e^{ik_2x} + B_2 e^{-ik_2x}$$

Причем коэффициенты линейно связаны, т.к. представленные функции - это решения одного линейного дифференциального уравнения: пусть $A_2 = \alpha A_1 + \beta B_1$, где α и β - константы,

которые зависят от вида потенциала.

Знаем, что если ψ - решение, то и ψ^* тоже является решением (грубо говоря, мы инвертируем время $t \rightarrow -t$):

$$\psi^* = A_1^* e^{-ik_1 x} + B_1^* e^{ik_1 x} \text{ при } x \rightarrow -\infty, \text{ и при } x \rightarrow \infty \psi = A_2^* e^{-ik_2 x} + B_2^* e^{ik_2 x}$$

Роль A_2 теперь играет B_2^* , а т.к. это тоже решение, то можем определить связь коэффициентов:

$$B_2^* = \alpha B_1^* + \beta A_1^* \text{ или } B_2 = \alpha^* B_1 + \beta^* A_1$$

Постоянство потока даст $k_1(|A_1|^2 - |B_1|^2) = k_2(|A_2|^2 - |B_2|^2)$ или $|\alpha|^2 - |\beta|^2 = \frac{k_1}{k_2}$.

Утверждение 1. Коэффициенты отражения совпадают для частиц, движущихся по и против оси Ox .

Покажем это. Пусть $B_2 = 0$, тогда $\frac{B_1}{A_1} = -\frac{\beta^*}{\alpha^*}$ и коэффициент отражения слева $R_1 = |\frac{B_1}{A_1}|^2 = |\frac{\beta}{\alpha}|^2$. Теперь $A_1 = 0$ и $\frac{A_2}{B_2} = \frac{\beta}{\alpha^*}$, значит, коэффициент отражения справа $R_2 = |\frac{A_2}{B_2}|^2 = |\frac{\beta}{\alpha}|^2$, что мы и получали при вычислении коэффициента отражения слева.

21 | Гармонический осциллятор

Одна из базовых 1D задач. Запишем оператор Гамильтона, выбрав коэффициенты в потенциале таким образом, что при записи уравнений Гамильтона, а после из них уравнения Ньютона мы получили бы настоящий гармонический осциллятор с частотой w :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{mw^2x^2}{2}$$

Гармоническим он называется потому, что решением его называются гармонические функции - синусы и косинусы.

В УШ применим масштабное преобразование $x = y \cdot L$, обезразмерив его:

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{mw^2x^2}{2} \right) \psi &= E\psi \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2mL^2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{mw^2L^2}{2} y^2 \right) \psi &= E\psi \\ \left(-\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{mw^2L^4}{\hbar^2} y^2 \right) \psi &= \left(E \frac{2mL^2}{\hbar^2} \right) \psi \end{aligned}$$

Хотим, чтобы $\frac{mw^2L^4}{\hbar^2} = 1$, а значит, получим условие на $L = \sqrt{\frac{\hbar}{mw}}$. Оценим множитель перед ψ , содержащий энергию: $2EmL^2/\hbar^2 = E \frac{2}{\hbar w}$, получили безразмерное уравнение с единственным параметром $E \frac{2}{\hbar w}$.

Замечание 10. Чему равны уровни, если они есть? Чему бы ни были, этот параметр должен быть числом, и наверное, для нижнего уровня порядка единицы, тогда $E_{min} = \hbar w/2$ - и это правильный ответ. Все остальные уровни тоже должны быть пропорциональны $E \sim \hbar w$, но пока мы не знаем структуры этой пропорциональности.

Поскольку потенциальная энергия обращается в бесконечность при $x = \pm\infty$, то частица может совершать лишь финитные движения, а значит весь энергетический спектр дискретный. Найдем решение осциллятора двумя способами.

А. Матричный метод

Операторное уравнение движения $\hat{x} + w^2\hat{x} = 0$, запишем в матричном виде, здесь индексы отвечают каким-то базисным функциям (какие-то, потому что важно, что можно написать матричные элементы соотношения для любого их набора): $(\ddot{x})_{mn} + w^2x_{mn} = 0$. Перейдем к такому набору, в котором базисные функции \hat{H} диагонализуют его (т.е. базисные функции есть собственные функции гамильтониана), обозначение не будем менять. Тогда для явно не зависящего

от времени оператора производная есть i/\hbar на коммутатор самого оператора с гамильтонианом, если гамильтониан в нашем представлении диагонален, то матричный элемент H - это энергия E_n , домноженная на символ кронекера δ_{mn} , записывая коммутатор и сворачивая по индексам получим

$$(\ddot{x})_{mn} = iw_{mn}(\dot{x})_{mn} = \left| \text{здесь } w_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar} \right| = -w_{mn}^2 x_{mn}$$

Имеем связь матричных элементов спектра, которые мы не знаем, и самого спектра, который мы тоже не знаем: $(w_{mn}^2 - w^2)x_{mn} = 0$, тогда все матричные элементы $x_{mn} = 0$, за исключением тех, для которых $w_{mn} = \pm w$. Проведем нумеризацию состояний, т.ч. $\pm w$ будет соответствовать соседним уровням дискретного спектра - переходу $n \rightarrow n \mp 1$, т.е. $w_{n,n\mp 1} = \pm w$. Не равными нулю остаются только $x_{n,n\mp 1}$.

Пусть волновая функция есть функция действительная (а она всегда может быть выбрана таковой), тогда из эрмитовости оператора координат $\hat{x}^+ = \hat{x}$ имеем симметричность матрицы $x_{mn} = x_{nm}$. Рассмотрим коммутатор \hat{x} и \hat{x} : $[\hat{x}\hat{x}] = -i\frac{\hbar}{m}$

$$\left\{ (\hat{x}\hat{x} - \hat{x}\hat{x})\psi = \frac{1}{m}(\hat{p}x - x\hat{p})\psi = -\frac{i\hbar}{m}(\nabla x\psi - x\nabla\psi) = -\frac{i\hbar}{m}(\psi\nabla x) = -\frac{i\hbar}{m}\psi \right\}$$

Возьмем теперь матричные элементы от него, справа будет символ Кронекера в силу ортогональности собственных функций, слева - матричные элементы произведения матриц:

$$(\dot{x}x)_{mn} - (x\dot{x})_{mn} = -i\frac{\hbar}{m}\delta_{mn}$$

Выберем ситуацию, когда $m = n$, а произведения матриц запишем как произведения матрицы \dot{x} (которую распишем через соотношение для производной) на матрицу x , w - разность энергий, поэтому переставляя индексы, меняем знак: $w_{ln} = -w_{nl}$. Итого:

$$i \sum_l (w_{nl}x_{nl}x_{ln} - x_{nl}w_{ln}x_{ln}) = 2i \sum_l w_{nl}x_{nl}^2 = -i\frac{\hbar}{m}$$

Пусть $l = n \pm 1$ (выделим отличные от нуля элементы), тогда матрица x подчиняется следующему соотношению:

$$(x_{n+1,n})^2 - (x_{n,n-1})^2 = \frac{\hbar}{2mw}$$

Выберем $n = 0$ для основного состояния, понятно, что $x_{0,-1} = 0$, тогда имеем арифметическую прогрессию, ее сумма даст

$$(x_{n,n-1})^2 = \frac{n\hbar}{2mw} \rightarrow x_{n,n-1} = x_{n-1,n} = \sqrt{\frac{n\hbar}{2mw}}$$

Причем знак перед корнем - вопрос выбора системы функций.

Матрица оператора \hat{H} диагональна и матричные элементы H_{nn} представляют собой собственные значения энергии E_n осциллятора, вычислим их:

$$\begin{aligned} H_{nn} = E_n &= \frac{m}{2} ((\dot{x}^2)_{nn} + w^2(x^2)_{nn}) = \frac{m}{2} \left(\sum_l iw_{nl}x_{nl}iw_{ln}x_{ln} + w^2 \sum_l x_{nl}x_{nl} \right) = \\ &= \frac{m}{2} \sum_l (w^2 + w_{nl}^2)x_{ln}^2 = \frac{m}{2} 2w^2 \left(\frac{n\hbar}{2mw} + \frac{(n+1)\hbar}{2mw} \right) = m\frac{\hbar}{2}(2n+1) = \hbar w \left(n + \frac{1}{2} \right), \text{ где } n = 0, 1, 2... \end{aligned}$$

Получили искомый спектр.

Б. Решение через УШ

Запишем УШ - стандартное дифференциальное уравнение 2 порядка с неоднородностью вида y^2 :

$$\psi''_{yy} + \left(\frac{2E}{\hbar w} - y^2 \right) \psi = 0$$

Вообще решением являются спецфункции параболического цилиндра, но кто ж их запоминает для экзамена, будем смотреть асимптотики. При $y \rightarrow \infty$ уравнение принимает простой вид $\psi'' - y^2 \psi = 0$, значит, в асимптотике решение будет содержать

$$\psi = \chi(y) e^{-\frac{y^2}{2}}$$

Выбрали знак минус в экспоненте, т.к. при $y = \pm\infty$ волновая функция должна быть конечной. Обозначим $\frac{2E}{\hbar w} - 1 = 2n$, тогда $\chi'' - 2y\chi' + 2n\chi = 0$. При $y \rightarrow \pm\infty$ χ растет быстрее конечной степени y . Решение существует только для целых и положительных (включая ноль), что дает известные уже нам собственные значения. Это все потому, что область расходимости волновой функции отодвигается как можно дальше от начала координат в этом случае, получаем сходящиеся значения ψ (а значит, решение). Эти решения χ есть **полиномы Эрмита** $H_n(y)$:

$$H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2}$$

С учетом нормировки получим решение

$$\psi_n = \left(\frac{mw}{\pi \hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \exp \left(-\frac{mw}{2\hbar} x^2 \right) H_n \left(x \sqrt{\frac{mw}{\hbar}} \right)$$

Основное состояние $n = 0$ удовлетворяет условию отсутствия узлов при любых значений x :

$$\psi_0 = \left(\frac{mw}{\pi \hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \exp \left(-\frac{mw}{2\hbar} x^2 \right)$$

Понятно, что все эти формулы есть в справочниках, в которые на экзамене заглянуть не получится. Попробуем **найти волновые функции матричным методом**. Рассмотрим оператор и напомним его матричный элемент, используя предыдущие результаты

$$\left(\hat{x} - iw\hat{x} \right)_{n-1,n} = - \left(\hat{x} + iw\hat{x} \right)_{n,n-1} = i \sqrt{\frac{2\hbar wn}{m}}$$

Поддействуем этим оператором, например, на основную волновую функцию. Т.к. $\psi_{-1} = 0$, имеем $\left(\hat{x} - iw\hat{x} \right) \psi_0 = 0$ - дифференциальное уравнение 1 порядка на функцию ψ_0 . Нетрудно убедиться, что разделив переменные в этом уравнении, можно получить ответ (см. выше выражение для ψ_0). Подставляем $\hat{x} = -i\frac{\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial x}$, учитывая, что действие любого оператора на волновую функцию можно записать в виде суммы $\hat{f}\psi_n = \sum f_{mn} \psi_m$:

$$\left(\hat{x} + iw\hat{x} \right) \psi_{n-1} = \left(\hat{x} + iw\hat{x} \right)_{n,n-1} \psi_n = i \sqrt{\frac{2\hbar wn}{m}} \psi_n$$

Получили рекуррентную формулу, связывающую волновые функции

$$\psi_n = \underbrace{\sqrt{\frac{m}{2w\hbar n}} \left(-\frac{\hbar}{m} \frac{d}{dx} + wx \right)}_{\hat{a}^+} \psi_{n-1}$$

Если смотреть на выражение для спектра осциллятора как на энергию некоторого количества квантов (каждый с энергией $\hbar w$), тогда каждый уровень энергии может рассматриваться как n квантов энергии. Тогда \hat{a}^+ может трактоваться как **оператор рождения** кванта энергии в данном осцилляторе. Это значит, что действуя на некоторую n -ую функцию, он превращает ее в $n+1$. Можем таким же способом определить **оператор уничтожения** $\hat{a}^- \equiv \hat{a}$ - оператор, понижающий число квантов.

$$\hat{a}^+ = \sqrt{\frac{m}{2w\hbar n}} \left(-\frac{\hbar}{m} \frac{d}{dx} + wx \right) = \sqrt{\frac{m}{2w\hbar n}} \left(-i \frac{\hat{p}}{m} + wx \right)$$

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m}{2w\hbar n}} \left(\frac{\hbar}{m} \frac{d}{dx} + wx \right)$$

Если посчитать коммутатор ручками, получится, что $[\hat{a}\hat{a}^+] = 1$. Так же можно записать оператор Гамильтона через данные операторы, причем собственное число комбинации $\hat{a}^+\hat{a}$ есть число квантов в данной моде:

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

В будущем под этим n будем понимать не квант, а частицу, тогда $\hat{a}^+\hat{a}$ приобретет смысл числа частиц, операторы позволят рождать/уничтожать частицы. Но об этом - в следующем семестре.

Замечание 11. Если преподаватель говорит, что потенциал имеет вид x^2 и просит нарисовать волновую функцию с $n = 3$. Что делать, если не помним ни операторы рождения/уничтожения, ни полиномы Эрмита? Т.к. потенциал четный, то решение - либо четная, либо нечетная функция. Но нулей у основного состояния быть не может, значит, при $n = 3$ функция нечетная. На $\pm\infty$ происходит спадание, поэтому можем получить примерный график.

Возможный вопрос на экзамене: напишите собственные функции гамильтониана гармонического осциллятора.

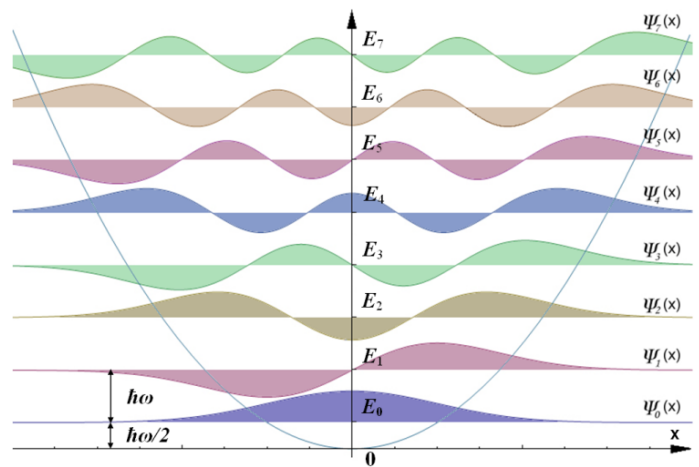


Рис. 21.1: Волновые функции в координатном представлении первых восьми состояний, $n = 0, \dots, 7$. По горизонтали отложена координата q , по вертикали — значение волновой функции $\psi_n(q)$. Графики не нормированы.

22 | Квантовомеханическая частица в однородном электрическом поле

Мы знаем, что на частицу с зарядом e в однородном электрическом поле действует сила $F = eE$, потенциал тогда $U = -Fx$ линейный. Запишем УШ

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

Поскольку потенциал стремится к ∞ при $x \rightarrow \infty$ и к $-\infty$ при $x \rightarrow -\infty$, то уровни энергии образуют непрерывный спектр, заполняющий весь интервал значений от $-\infty$ до ∞ . Все они не вырождены и соответствуют движению, финитному со стороны отрицательной оси x и инфинитному со стороны положительной. В импульсном представлении уравнение упрощается до 1 порядка ($\psi(x) \rightarrow a(p)$):

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} - i\hbar F \frac{d}{dp}$$

$$a(p) = \frac{1}{2\pi\hbar F} \exp\left(\frac{i}{\hbar F} \left(Ep - \frac{p^3}{2m}\right)\right)$$

Понятно, что для каждого уровня энергии есть точка, где энергия равна значению потенциала (см. Рис. 22.1) - **точка разворота**. С точки зрения классической частицы, слева от нее ничего не будет (классически запрещенная область), а справа - отразится. Как должна быть устроена волновая функция? Слева от точки разворота - затухание ψ , а справа - стоячая волна (падающая+отраженная), только это не просто e^{ikx} , т.к. потенциал линейный везде, частота волны будет переменной.

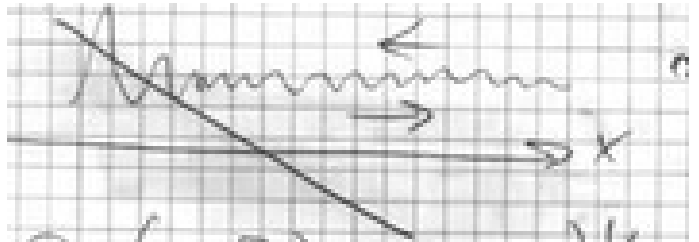


Рис. 22.1: Иллюстрация вида потенциала

Обратным Фурье-преобразованием найдем $\psi(x)$. Для этого обезразмерим уравнение, введя переменную

$$\xi = \left(x + \frac{E}{F}\right) \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/3}$$

$$\psi'' + \xi \psi = 0$$

Опять решение выражается в спец-функциях - **функциях Эйри** $\Phi(\xi)$:

$$\psi(\xi) = A\Phi(-\xi), \text{ где } \Phi(\xi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \cos\left(\frac{u^3}{3} + u\xi\right) du$$

Далее идет очень интересные и непонятно откуда взявшиеся соотношения.

Предлагаю не заморачиваться и просто ознакомиться.

Рассмотрим асимптотики (подробнее об этом см. в следующем семестре). При $\xi \rightarrow -\infty$ имеем $\psi \rightarrow \frac{A}{2|\xi|^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3}|\xi|^{3/2}\right)$ - затухание. При $\xi \rightarrow \infty$ соответственно $\psi \rightarrow \frac{A}{|\xi|^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3}\xi^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right)$ - стоячая волна с переменной частотой. Нормировка на энергию $\int \psi(\xi)\psi(\xi')d\xi = \delta(E' - E)$ получим полный ответ

$$\psi(\xi) = \frac{A}{2\xi^{1/4}} \left(\exp\left[i\left(\frac{2}{3}\xi^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right)\right] + \exp\left[-i\left(\frac{2}{3}\xi^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right)\right] \right)$$

Плотность потока в каждой волне

$$V \left(\frac{A}{2\xi^{1/4}} \right)^2 = \sqrt{\frac{2}{m}(E + Fx)} \left(\frac{A}{2\xi^{1/4}} \right)^2 = A^2 \frac{(2\hbar F)^{1/3}}{4m^{2/3}}$$

Приравниваем ее к $1/(2\pi\hbar)$ и получаем $A = \frac{(2m)^{1/3}}{\pi^{1/2}F^{1/6}\hbar^{2/3}}$.

Возможный вопрос на экзамене: как именно получить эти асимптотики?

23 | Момент импульса

Введение. Определение момента импульса

Однородность, симметрия и изотропия (эквивалентность всех направлений) пространства обеспечивают неизменность \hat{H} замкнутой системы при поворотах всей системы, откуда следует закон сохранения момента импульса. Достаточно потребовать выполнения этого условия для произвольного бесконечно малого поворота, пусть $\delta\vec{\varphi}$ вектор б.м. поворота, равный по величине углу поворота и направленный по оси вращения, тогда изменения радиус-векторов частиц \mathbf{r}_i при таком повороте равны $\delta\vec{r}_i = [\delta\vec{\varphi}, \vec{r}_i]$. Произвольная функция $\psi(\{\vec{r}_i\})$ при таком преобразовании переходит в функцию (которую разложим в ряд Тейлора):

$$\psi(\{\vec{r}_i + \delta\vec{r}_i\}) = \psi(\{\vec{r}_i\}) + \sum_i \delta r_i \nabla_i \psi = (1 + \underbrace{\delta\vec{\varphi} \sum_i [r_i \nabla_i]}_{\text{оператор б.м. поворота}}) \psi$$

Т.к. б.м. поворот не меняет гамильтониан системы, то их операторы коммутируют. Учитывая, что $\delta\vec{\varphi}$ есть постоянный вектор, получим некоторый закон сохранения:

$$\left[\sum_i [r_i \nabla_i], \hat{H} \right] = 0$$

Пространство однородно, поэтому должен сохраняться момент импульса. Поэтому оператор $\sum_i [r_i \nabla_i]$ с точностью до постоянного множителя должен соответствовать оператору импульса движения всей системы. Чтобы все соответствовало классическому выражению $[\mathbf{r}\mathbf{p}]$ (хотя на самом деле просто записываем операторы импульса и координат, а оператор момента импульса одной частицы \hat{l} определяем с точностью до постоянной Планка), требуем:

$$\hbar \hat{\vec{l}} = -i\hbar [\vec{r}\nabla]$$

Запишем среднее момента импульса системы частиц

$$\vec{\bar{L}} = -i\hbar \int \psi^+ \sum_i [r_i \nabla_i] \psi dq$$

Замечание 12. В невырожденном стационарном состоянии $\vec{\bar{L}} = 0$, т.к. при инвертировании времени в УШ $t \rightarrow -t$ получим $\psi \rightarrow \psi^*$, которые отличаются только фазовым множителем, иначе было бы вырождение, тогда волновая функция вещественна и $\vec{\bar{L}} = -\vec{\bar{L}}$, откуда и выходит, что $\vec{\bar{L}} = 0$.

Рассмотрим некоторые коммутаторы:

$$[\hat{l}_i, \hat{x}_k] = i\varepsilon_{ikj}\hat{x}_j, [\hat{l}_i, \hat{p}_k] = i\varepsilon_{ikj}\hat{p}_j, [\hat{l}_i, \hat{l}_k] = i\varepsilon_{ikj}\hat{l}_j$$

Все они находятся одинаково, например: $[\hat{l}_x \hat{y}] = \frac{1}{\hbar}(y\hat{p}_z - z\hat{p}_y)y - y(y\hat{p}_z - z\hat{p}_y)\frac{1}{\hbar} = -\frac{z}{\hbar}[\hat{p}_y y] = iz$.

Введем квадрат оператора момента импульса $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$. Он одновременно измерим с каждой из компонент, т.е. $[\hat{L}^2, \hat{L}_i] = 0$, $i = x, y, z$. Это можно показать, расписав отдельно три коммутатора $[\hat{L}_i^2, \hat{L}_x]$, $i = x, y, z$ и складывая полученные равенства. Другие удобные комбинации:

$$\begin{aligned}\hat{L}_{\pm} &= \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y, \quad [\hat{L}_+, \hat{L}_-] = 2\hat{L}_z, \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_-] = \hat{L}_-, \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_+] = \hat{L}_+, \\ \hat{L}^2 &= \hat{L}_- \hat{L}_+ + \hat{L}_z^2 + \hat{L}_z = \hat{L}_+ \hat{L}_- + \hat{L}_z^2 - \hat{L}_z\end{aligned}$$

Рассмотрим сферические координаты:

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

Запишем наши операторы (**Внимание! Далее вместо \hat{L} стоит читать \hat{l}** , но особого искажения смысла не наблюдается): $\hat{L}_z = -i\frac{\partial}{\partial \varphi}$, заметим, что \hat{L}^2 практически представляет угловую часть лапласиана:

$$\hat{L}_{\pm} = e^{\pm i\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad \hat{L}^2 = - \left(\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right)$$

Собственные значения оператора \hat{L}_z

$$-i\frac{\partial}{\partial \varphi}\psi = l_z\psi, \text{ откуда } \psi = f(r, \theta)e^{il_z\varphi}$$

Из однозначности ψ -функции получаем, что $l_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ (т.к. при поворота на 2π должно получаться то же значение). Заметим, что $\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(im\varphi)$, где $m = l_z$ и

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

Замечание 13. Поскольку направление по z ничем не выделено, то ясно, что такой же результат получится и для других компонент. Однако стоит иметь в виду, что единственная общая собственная функция операторов $\hat{l}_x, \hat{l}_y, \hat{l}_z$ соответствует одновременным значениям $l_x = l_y = l_z = 0$, не существует состояния, в которое разные составляющие момента имеют одновременно определенные ненулевые значения.

Свойства

1°. Можем еще и развернуть $z \rightarrow -z$, значит для любого состояния с m существует симметричное значение проекции $-m$.

2°. L - наибольшее возможное значение $|m|$ (проекция). Сам факт существования этого верхнего предела следует из того, что разность $\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 > 0$, поэтому собственные значения l_z ограничены сверху по модулю. Применим оператор $\hat{L}_z \hat{L}_\pm$ к собственной функции оператора \hat{L}_z : $\hat{L}_z \hat{L}_\pm \psi_M = (M \pm 1) \hat{L}_\pm \psi_M$, откуда видно, что

$$\begin{cases} \psi_{M+1} = \text{const} \hat{L}_+ \psi_M \\ \psi_{M-1} = \text{const} \hat{L}_- \psi_M \end{cases}$$

3°. Т.к. не существует состояний с $M > l$, то положим в полученных выше соотношениях $M=L$: $\hat{L}_+ \psi_l = 0$. Применим к данному равенству оператор $\hat{L}_- \hat{L}_+$ и распишем его через оператор квадрата импульса:

$$\hat{L}_- \hat{L}_+ \psi_l = (\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 - \hat{L}_z) \psi_l = 0$$

Поскольку ψ_l - общие с.ф. операторов \hat{L}^2 и \hat{L}_z , то $\hat{L}^2 \psi_l = L^2 \psi_l$, $\hat{L}_z^2 \psi_l = l^2 \psi_l$, $\hat{L}_z \psi_l = l \psi_l$, получим **собственные значения оператора**: $\hat{L}^2 \psi = l(l+1) \psi$, причем $M = l, l-1, \dots, -l$. Итого $2l+1$ значений M , поэтому уровень энергии, соответствующий моменту l , $(2l+1)$ -кратно вырожден. Состояние с равными нулю всеми тремя компонентами момента импульса не вырождено.

Возможный вопрос на экзамене: в задаче (16 билет) сделали поворот координат, совпадение ли это, что не появились перекрёстные члены после преобразования части, отвечающей за кинетическую энергию (сумма квадратов импульсов)? (**Примерный ответ:** лапласиан инвариантен относительно поворотов системы координат, поэтому это не совпадение.)

24 | Собственные функции момента импульса

Возьмем такое представление, в котором \hat{L}_z и \hat{L}^2 диагональны. Оно основано на их собственных функциях, при этом \hat{L}_x , \hat{L}_y , \hat{L}_\pm совершенно не обязательно диагональны. С другой стороны, обратим внимание вот на что: каждый из \hat{L}_i коммутирует к \hat{L}^2 , но между собой - нет. Это означает, что несмотря на отсутствие полной диагональности, если рассмотреть матричные элементы \hat{L}_x и \hat{L}_y между состояниями с разными l , то они должны быть равны нулю (т.к. коммутативность с квадратом импульса все еще есть, матрица \hat{L}_x в данном представлении не диагональная, но она блочная).

Замечание 14. Операторы \hat{L}_z и \hat{L}^2 коммутативны, можем их одновременно измерить. Существует ли еще какая-нибудь величина, которая будет измерима вместе с ними? Сколько вообще таких операторов может быть? Конечно, это зависит от задачи. Такой набор физических величин, который состоит из максимально возможного количества таких, что они одновременно измеримы, называется **полным набором**. Например, для свободной частицы $E = \frac{\vec{p}^2}{2m}$ есть 3 оператора $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ и все они меж собой коммутируют (с координатой - нет, добавить ничего нельзя, набор полный), каждый имеет свои собственные значения, знание которых полностью определит энергию. Видимо, понятие полного набора как-то связано с числом степеней свободы или с числом индексов, которые нумеруют волновую функцию (квантовые числа). В любой 1D задаче только 1 квантовое число (здесь всегда $p \equiv p_x$ - значит, одно собственное число), тогда и полный набор состоит из 1 оператора, в 2D уже не так (для плоской волны тривиально - 2 компоненты импульса, для потенциальной ямы, например $x^2 + y^2$, имеем 2 гармонических осциллятора с квантовыми числами m и n , опять два числа) - 2, в 3D соответственно 3 оператора (вид потенциала не важен). Мы рассматриваем 3D случай и у нас уже есть \hat{L}_z и \hat{L}^2 , не хватает еще одного оператора, и скорее всего эта третья физическая величина связана с радиальной компонентой.

Вспомним выражение $\hat{L}^2 = \hat{L}_+ \hat{L}_- + \hat{L}_z^2 - \hat{L}_z$ и определим матричные элементы, например вычисляем диагональный элемент выражения в состоянии l, m (первое слагаемое есть произведение двух матриц A и B , равное $\sum A_{ij} B_{jk}$, но оператор \hat{L}_+ соединяет своим действием функции, которые отличаются на единичку, и если написать $M+1$, то она поднимется до $M+2$, а она ортогональна M , поэтому единственный шанс не занулить слагаемое - оставить $M-1$, чтоб она поднялась до M ; аналогично и с оператором \hat{L}_-)

$$l(l+1) = \langle M | \hat{L}_+ | M-1 \rangle \langle M-1 | \hat{L}_- | M \rangle + M^2 - M$$

Т.к. операторы \hat{L}_+ и \hat{L}_- являются эрмитово сопряженными (из-за эрмитовости \hat{L}_x и \hat{L}_y), то $\langle M-1 | \hat{L}_- | M \rangle = \langle M | \hat{L}_+ | M-1 \rangle^*$, а значит, $|\langle M | \hat{L}_+ | M-1 \rangle|^2 = l^2 + l - M^2 + M + ML - ML = (l - M + 1)(l + M)$ и

$$\langle M | \hat{L}_+ | M-1 \rangle = \langle M-1 | \hat{L}_- | M \rangle = \sqrt{(l - M + 1)(l + M)}$$

Знак перед корнем - это фаза выбранных собственных функций базиса, в котором мы работаем.

Замечание 15. На самом деле в координатном представлении у нас эти операторы - вполне конкретные действия (дифференцирование, домножение на функции или константы), на практике не всегда можем ограничиться использованием так называемых *брекетов*, в пространстве распределение волновой функции нам наверняка нужно. **Пример:** электрон в атоме. Нужно знать, как ψ зависит и от радиуса, и от угловых переменных, потому что зависимость от последних дает тип орбитали.

Назовем Y_{lm} собственными функциями оператора \hat{L}^2 , где l - собственное число квадрата момента (которое из $l(l+1)$), а m - проекция. Естественно из условия нормировки волновой функции потребовать нормировку и радиальной, и угловой части (пока про первое забыли):

$$\int_0^{4\pi} |Y_{lm}|^2 d\Omega = 1, \quad d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$$

Выберем $Y_{lm} = \Phi_m(\varphi) F_{lm}(\theta)$, где $\Phi_m(\varphi)$ уже вывели, а значит, $\int_0^\pi |F_{lm}|^2 \sin\theta d\theta = 1$.

Запишем уравнение на собственные значения для оператора \hat{L}^2 :

$$\frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin\theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} + l(l+1)\psi = 0$$

Пользуемся методом разделения переменных, а из электродинамики знаем, что решение содержит **присоединенные полиномы Лежандра** $P_l^M(\cos\theta)$ с некоторой нормировкой:

$$F_{lm} = (-1)^M i^l \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-M)!}{(l+M)!}} P_l^M(\cos\theta)$$

Как это вспомнить на экзамене? Никак. Подействуем оператором \hat{L}_+ на функцию Y_{ll} или \hat{L}_- на $Y_{l,-l}$, чтобы получить ноль:

$$\hat{L}_+ Y_{ll} = 0 \quad | : F, \cdot d\theta | \text{ подставляем } Y_{ll} = \frac{1}{2\pi} e^{il\varphi} F_{ll}(\theta)$$

Пользуемся оператором \hat{L}_+ (вид его определяли в предыдущем билете):

$$\frac{dF_{ll}}{d\theta} - l \cdot \cot\theta F_{ll} = 0 \rightarrow F_{ll} = C \sin^l \theta$$

Отсюда с учетом нормировки $F_{ll} = (-i)^l \sqrt{\frac{(2l+1)!}{2}} \frac{1}{2^l l!} \sin^l \theta$. Шагаем вниз по правилу:

$$\hat{L}_- Y_{l,m+1} = \left(\hat{L}_- \right)_{m,m+1} Y_{l,m} = \sqrt{(l-m+1)(l-m)} Y_{lm}$$

Повторное применение этой формулы даст

$$\sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} Y_{lm} = \frac{1}{\sqrt{(2l)!}} \hat{L}_-^{l-m} Y_{ll}$$

Правую часть равенства можно найти с помощью оператора \hat{L}_- , согласно которому:

$$\hat{L}_- (F(\theta)e^{im\varphi}) = e^{i(m-1)\varphi} \sin^{l-1}\theta \frac{d}{d\cos\theta} (F \sin^m\theta)$$

Повторное применение формулы даст

$$\hat{L}_-^{l-m} e^{il\varphi} F_l(\theta) = e^{im\varphi} \sin^{-m}\theta \frac{d^{l-m}}{(d\cos\theta)^{l-m}} (\sin^l\theta F_l)$$

Используя эти соотношения и F_l , получим формулу:

$$F_{lm}(\theta) = (-i)^l \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l+M)!}{(l-M)!}} \frac{1}{2^l l! \sin^m\theta} \frac{d^{l-m}}{(d\cos\theta)^{l-m}} \sin^{2l}\theta$$

25 | Сложение моментов

Пусть есть 2 слабовзаимодействующие системы с соответствующими моментами импульса, квантовыми числами и волновыми функциями:

1 подсистема	2 подсистема
\hat{L}_1^2 и \hat{L}_{z1}	\hat{L}_2^2 и \hat{L}_{z2} ,
L_1 и M_1	L_2 и M_2
$\varphi_1(q_1)$	$\varphi_2(q_2)$

Масштаб характерной энергии для каждой из подсистем - это расстояние между уровнями дискретного спектра (может быть разное в зависимости от номера уровня, но тем не менее). При включении взаимодействия эти уровни начинают расходиться, волновые функции как-то искажаются, т.е. появляются матричные элементы взаимодействия $V_{nm} (<< E_n - E_m$ для слабого). Как сложить эти моменты? Можем определить оператор суммы и его квадрат, проекцию на Oz (это направление не выделено, пространство изотропно, поэтому можно найти проекцию на совершенно любую ось): $(\hat{L}_1 + \hat{L}_2)^2$. Тогда волновая функция $\varphi_{l_1, l_2, m_1, m_2}$ имеет $(2l_1 + 1)(2l_2 + 1)$ состояний. Хотим перенумеровать, т.е. определить индексы, содержащие квантовые числа полного момента и его проекции $\hat{\mathbf{L}}, \hat{L}_z$, перейти

$$\hat{L}_1^2, \hat{L}_{z2}, \hat{L}_1^2, \hat{L}_{z2} \longrightarrow \varphi_{l_1 l_2 l m}$$

Причем для двух слабовзаимодействующих подсистем волновую функцию можно найти как произведение волновых функций этих подсистем $\varphi = \varphi_1(q_1) \cdot \varphi_2(q_2)$, почему - смотри замечание ниже.

Замечание 16. Небольшое отступление. Если $\hat{H}(q_1, q_2) = \hat{H}_1(q_1) + \hat{H}_2(q_2)$ (нет члена, зависящего от произведения координат, т.к. взаимодействие слабое), то УШ допускает разделение переменных (утверждение мат.физики): $(\hat{H}_1(q_1) + \hat{H}_2(q_2)) \varphi_1(q_1) \cdot \varphi_2(q_2) = E \varphi_1(q_1) \cdot \varphi_2(q_2)$ и соответственно

$$\frac{\hat{H}_1(q_1)}{\varphi_1(q_1)} + \frac{\hat{H}_2(q_2)}{\varphi_2(q_2)} = E$$

Т.е. функция от одной переменной равна функции от другой переменной, а значит, имеем константы. Показали, что $\varphi = \varphi_1(q_1) \cdot \varphi_2(q_2)$ обращает уравнение в тождество, а значит, является решением и наше предположение было верным. Вопрос в том, **единственно ли это решение** ... Вспомнить матфиз!

Можем сравнительно просто сложить проекции моментов $(-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi})$. Наверно, можно утверждать, что имея какие-то l_1 и l_2 , можем определить проекцию момента всей системы как $l_1 + l_2$ (см. табличку).

M_1	M_2	M
l_1	l_2	$l_1 + l_2$
$\begin{cases} l_1 - 1 \\ l_1 \end{cases}$	$\begin{cases} l_2 \\ l_2 - 1 \end{cases}$	$\begin{cases} l_1 + l_2 - 1 \\ l_1 + l_2 - 1 \end{cases}$
\dots	\dots	\dots

Получается, одному значению суммарной проекции момента импульса могут соответствовать разные комбинации значений проекций моментов подсистем. При уменьшении M таких комбинаций будет все больше.

Рассмотрим несколько серий, каждая из которых соответствует определенному значению суммарного момента. В соответствии с общей теорией знаем, что M_i пробегают все значения через единицу от $-l_i$ до l_i , пусть первой серии соответствует $l = l_1 + l_2$, второй - $l_1 + l_2 - 1$ и т.д. Тогда понятно, откуда берется эти повторяющиеся комбинации. Причем их число будет увеличиваться до тех пор, пока не останется суммарное значение $|l_1 - l_2|$ (см. Рис. 25.1). Итого $l = \{l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 1, \dots, |l_1 - l_2|\}$.

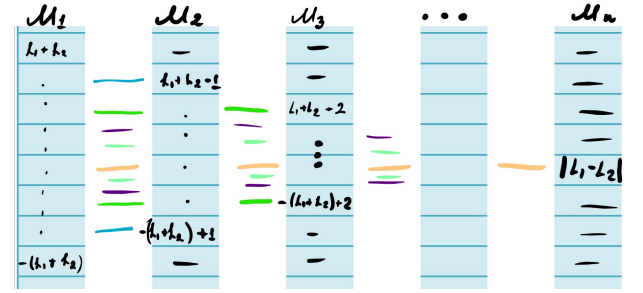


Рис. 25.1: Увеличивающееся число комбинаций

Итоговая четность состояния всей системы - грубо говоря перемножение четностей всех подсистем, а четность подсистемы $(-1)^l$, тогда ответ $(-1)^{l\Sigma}$.

26 | Частица в центральном поле

Общая задача взаимодействия двух частиц

Запишем оператор Гамильтона для данной ситуации, пользуясь однородностью пространства: $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial \vec{r}_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{\partial^2}{\partial \vec{r}_2^2} + U(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$. 1 ход в задаче двух тел. Сведем к движению в центральном поле с помощью замены переменных и введения радиус-вектора центра масс: $\vec{r} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1$, $\vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2}$, приведенная масса $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$. Тогда

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)} \frac{\partial^2}{\partial \vec{R}^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial \vec{r}^2} + U(\vec{r})$$

Далее решаем УШ, ищем собственную функцию в виде $\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = \varphi(\vec{R})\psi(\vec{r})$:

$$-\psi \frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \vec{R}^2} - \varphi \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \vec{r}^2} + U(\vec{r})\varphi(\vec{R})\psi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{R})\psi(\vec{r})$$

Разделяем переменные

$$\underbrace{-\frac{1}{\varphi} \frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \vec{R}^2}}_{\text{зависит только от } \vec{R}} \underbrace{-\frac{1}{\psi} \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \vec{r}^2} + U(\vec{r})}_{\text{только от } \vec{r}} = E$$

Тогда $-\frac{1}{\varphi} \frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)} \Delta \varphi = \epsilon$ или $\varphi'' + k^2 \varphi = 0$, где $k^2 = \frac{2(m_1 + m_2)\epsilon}{\hbar^2}$. Решение - $\varphi = Ae^{i\vec{k}\vec{R}} + Be^{-i\vec{k}\vec{R}}$ - плоская волна.

Частица в центральном поле

Запишем оставшееся уравнение, учитывая, что энергия уже не та: $\Delta \psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0$ - это уравнение движение частицы в центральном поле. Записываем операторы в сферической СК

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi = 0$$

Введем сюда оператор квадрата момента. При движении в центрально-симметричном поле момент импульса сохраняется, будем рассматривать стационарные состояния с определенными значениями момента l и его проекцией m . Заданием значений l и m определяется угловая зависимость волновых функций. Поэтому будем искать решение в виде $\psi = R(r) \cdot Y_{lm}(\theta, \varphi)$.

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

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{Y_{lm}}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{R}{r^2} l(l+1) Y_{lm} \right) + U R Y_{lm} = E R Y_{lm}$$

Можем сократить сферические гармоники, получим уравнение, которое вовсе не содержит значения $l_z = m$, что соответствует уже известному нам $2l+1$ -кратному вырождению уровней по направлениям момента:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} R + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) R = 0$$

Заменой $\chi = rR$ приводим к

$$\chi''_{rr} + \left(\frac{2m}{\hbar^2} (E - U(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \chi = 0$$

Если потенциальная энергия везде конечна, то должна быть конечной во всем пространстве и волновая функция ψ , а значит, и ее радиальная часть R . Задача определена на луче, требуем граничное условие $\chi(0) = 0$, иначе получим расходимость в нуле для $R = \frac{\chi}{r}$.

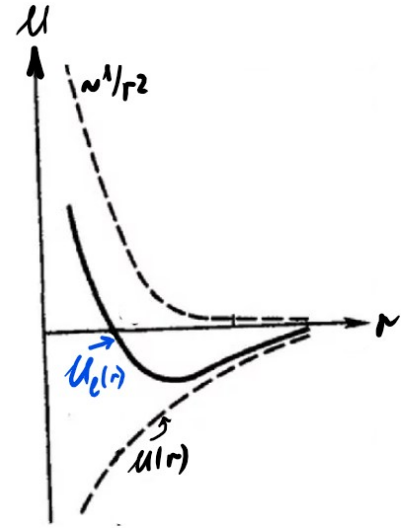


Рис. 26.1: Измененный потенциал

Уравнение по форме совпадает с УШ для одномерного движения с измененным потенциалом $U_l(r) = U(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2}$, где второе слагаемое описывает энергию вращения (центробежная энергия).

Итого свели к задаче об 1D движении в области, ограниченной с одной стороны, а мы знаем, что в таком случае уровни энергии не вырождены. Так же можем применить осцилляционную теорему: расположим собственные значения энергии дискретного спектра при заданном l в порядке возрастания, перенумеруем их порядковыми номерами n_r (минимальное - нуль). Тогда n_r определяет число узлов радиальной части волновой функции при конечных значениях r (не считая нулевого значения), а так же уровни в потенциале, это число называют - **кван-**

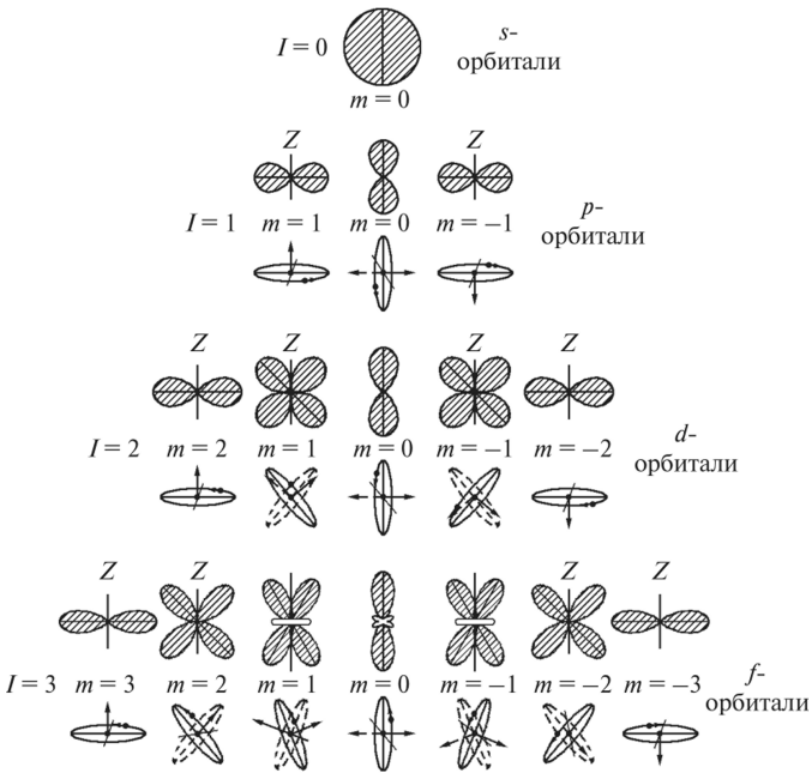


Рис. 26.2: Атомные орбитали
товое радиальное число. Кстати, полученные ранее числа l и m называются соответственно **квантовым азимутальным** и **квантовым магнитным числом.**

Из атомной физики. Магнитное квантовое число m описывает ориентацию орбиталей в пространстве. Для $l = 0$ возможно только одно значение: $m = 0$. Это значит, что s-орбиталь имеет только одну пространственную ориентацию. Для $l = 1$: $m = -1; 0; +1$ - p-орбиталь имеет три пространственные ориентации. Для $l = 2$: $m = -2; -1; 0; +1; +2$ - d-орбиталь имеет пять пространственных ориентаций.

Асимптотика решения при $r=0$

Будем считать, что $\lim_{r \rightarrow 0} U(r)r^2 = 0$.

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} R + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) R = 0$$

Ищем $R(r) = \text{const} \cdot r^s$, тогда предыдущее уравнение домножаем на r^2 :

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - l(l+1)R = 0$$

и переходим к $r \rightarrow 0$, учитывая, что $\frac{d}{dx} \sim \frac{1}{x}$:

$$s(s+1) = l(l+1)$$

Отсюда $s = l$ или $s = -(l+1)$. Второе решение не удовлетворяет необходимым условиям, ведь оно обращается в бесконечность при $r = 0$ (ведь $l \geq 0$). Т.е. вблизи начала координат волновые функции состояний с данным l пропорциональны r^l . Вероятность частице находиться на расстоянии от центра между r и $r + dr$ определяется величиной $r^2 |R|^2$ и поэтому пропорциональна $r^{2(l+1)}$. Чем быстрее она обращается в нуль в начале координат, тем больше значение l .

Возможный вопрос на экзамене: что Вы можете сказать про вырождение уровней энергии в атоме водорода?

27 | Сферические волны

Рассмотрим асимптотику в уравнении

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} R + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) R = 0$$

При $r \rightarrow 0$ уже рассматривали в прошлом вопросе, теперь узнаем, что будет при $r \rightarrow \infty$ (и выполнении условия $\lim_{r \rightarrow \infty} U = 0$) получим

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} R + \frac{2m}{\hbar^2} (E - \emptyset) R = 0$$

Получается задача о свободной частице с решением в виде плоских волн, тогда мы знаем, что $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ спектр непрерывный (k - импульс плоских волн, так по крайней мере для состояний с положительной энергией, там, возможно, есть связанные состояния в потенциале, но асимптотика такая). Проблема в 3D задаче - по всем направлениям \mathbf{k} спектр вырожденный, есть множество плоских волн. Когда перешли в сферическую СК, задача стала заключаться в следующем: пусть из непрерывного спектра дана какая-то конкретная энергия, и для этого значения энергии из всего континуума плоских волн с одинаковым модулем собрать множество решений с различными угловыми моментами l и различным поведением по радиусу.

Фактически, нам нужно перейти от плоских волн к сферическим в свободном пространстве. Мы привыкли выбирать решения в виде базиса плоских волн, т.ч. каждому значению k соответствует значение энергии, а каждому значению энергии - целая сфера из векторов \mathbf{k} , равных по модулю. Как же записать эти сферические волны?

Рассмотрим уравнение $\Delta\psi + k^2\psi = 0$ - сферически-симметричное решение есть потенциал сферического источника, при $k = 0$ это $1/r$. Введем индексы: k - модуль импульса, l - момент, как и было ранее.

$$R''_{kl} + \frac{2}{r} R'_{kl} + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R_{kl} = 0$$

Нормировка $\int_0^\infty r^2 R_{k'l} R_{kl} dr = 2\pi\delta(k' - k)$. Пусть $l = 0$, тогда $R_{k0} = 2 \frac{\sin kr}{r}$ - конечное при $r = 0$ (вообще перед $\frac{e^{\pm ikr}}{r}$ может быть любая константа, но именно двойка будет очень удобна). При $l \neq 0$ возьмем подстановку $R_{kl} = r^l \chi_{kl}(r)$. Уравнение на χ_{kl} :

$$\chi''_{kl} + \frac{2(l+1)}{r} \chi'_{kl} + k^2 \chi_{kl} = 0$$

Продифференцируем его $\frac{\partial}{\partial r}$:

$$\chi'''_{kl} + \frac{2(l+1)}{r} \chi''_{kl} + \left(k^2 - \frac{2(l+1)}{r^2} \right) \chi'_{kl} = 0$$

Возьмем подстановку $\chi'_{kl} = r\chi_{k,l+1}$, тогда, во-первых,

$$\chi''_{k,l+1} + \frac{2(l+2)}{r}\chi'_{k,l+1} + k^2\chi_{k,l+1} = 0$$

Вид этого уравнения действительно совпадает с тем, которому должна удовлетворять функция $\chi_{k,l+1}$. Во-вторых, $\chi_{kl} = \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr}\right)^l \chi_{k0}$. Получим

$$R_{kl} = (-1)^l 2 \frac{r^l}{k^l} \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr}\right)^l \frac{\sin kr}{r} = \sqrt{\frac{2\pi k}{r}} J_{l+1/2}(kr)$$

(множитель k^{-l} введен для нормировки, а $(-1)^l$ - из соображений удобства) или же

$$R_{kl} = 2kj_l(kr)$$

где $j_l(kr)$ - сферическая функция Бесселя (или функция Бесселя 2 рода - полуцелого порядка).

Графики функций Бесселя 1-го рода порядка n, $J_n(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k \left(\frac{x}{2}\right)^{2k+n}}{k! \Gamma(k+n+1)}$

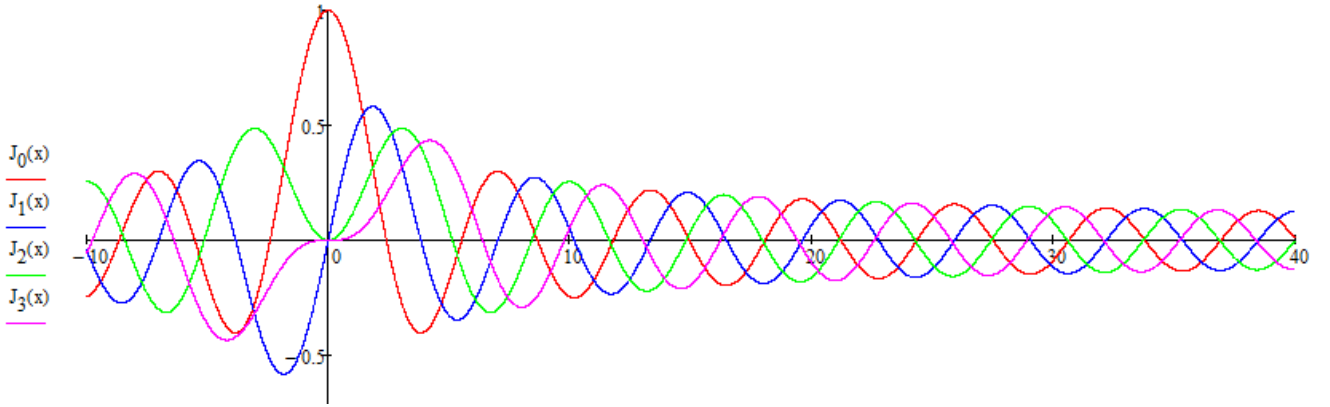


Рис. 27.1: Функции Бесселя 1 рода

Асимптотики решения

Рассмотрим $r \rightarrow \infty$: член, наименее быстро убывающий с r получается при l -кратном дифференцировании синуса. Поскольку каждое дифференцирование, $-d/dr$, синуса прибавляет член $-\pi/2$ в его аргументе, то получится следующее асимптотическое выражение:

$$R_{kl} \approx \frac{2}{r} \sin(kr - \pi l/2)$$

Сравнив асимптотическую формулу с нормированной функцией R_{kl} , видим, что функции R_{kl} с выбранным коэффициентом действительно нормированы должным образом.

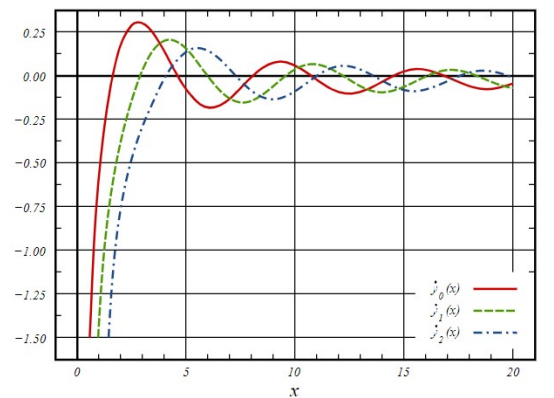


Рис. 27.2: Функции Бесселя 2 рода

Вблизи начала координат вводим, разложив $\sin(kr)$ в ряд и сохранив только член, дающий после дифференцирования наиболее низкую степень r :

$$\left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr}\right)^l \frac{\sin kr}{r} \approx \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr}\right)^l (-1)^l \frac{(kr)^{2l+1}}{r(2l+1)!} = \frac{(-1)^l k^{2l+1}}{(2l+1)!!}$$

Т.о. при $r \rightarrow 0$ получим согласно полученной ранее догадке ($R_l \sim r^l$):

$$R_{kl} \approx \frac{2k^{l+1}}{(2l+1)!!} r^l$$

Получается, мы нашли базис отличный от базиса плоских волн (базис сферических волн) для практически любой задачи в центральном поле. Понятно, что эти базисы эквивалентны в том смысле, что можем работать в любом из них в зависимости от нашего удобства. При данном значении энергии любая плоская волна может быть выражена как сумма сферических и наоборот. Спектр у нас вырожденный: либо по направлению k , либо для l . Выражение это можно получить (разложение плоской волны, ЛЛ III том, стр.147-150), в сферической системе координат $z = r \cos\theta$, приведем его **для интереса**:

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} (-i)^l (2l+1) P_l(\cos\theta) \frac{r^l}{k} \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right)^l \frac{\sin kr}{r}$$

Написали для e^{ikz} , но это не важно $\forall \vec{k}$ можем выбрать ось Oz вдоль этого направления и написать такое разложение, поэтому оно самого общего вида.

28 | Частица в кулоновом поле. Уровни энергии и волновые функции

Рассмотрим потенциал вида $U = -\alpha/r$, где $\alpha > 0$.

Замечание 17. Для атома водорода, например, $\alpha = e^2$. Почему именно про водород заговорили? Правда в том, что здесь электрон только один, а в более сложном атоме совершенно не факт, что мы можем рассматривать движение одного электрона в поле атома ядра без учета взаимодействий с другими электронами. Но это только часть правды. Пускай есть 2 электрона (типа атома гелия), что нас может беспокоить? Все наши уравнения и рассуждения говорят о том, что движение электрона не позволяет квантовомеханически определить одновременно его координату и импульс, т.к. у него нет траекторий. Отсюда следует неприятность: если есть 2 электрона, то мы их не можем отличить. Это должно вести к каким-то свойствам волновой функции. Если бы $\psi(x_1, x_2)$ была совсем нессиметрична относительно перестановок координат электронов, то мы бы сказали, что можно отличить частицы в зависимости от их "вклада" но ведь это невозможно, как для 2, так и для 500 электронов. Это есть еще одно усложнение, поэтому рассматриваем только 1 электрон.

Запишем уравнение в таком потенциале (вывод см. в предыдущем билете):

$$R''_{kr} + \frac{2}{r}R'_r - \frac{l(l+1)}{r^2}R + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{\alpha}{r} \right) R = 0$$

Введем переменные для длины, времени и энергии для обезразмеривания уравнения:

$$L = \frac{\hbar^2}{m\alpha}, \quad t = \frac{\hbar^2}{m\alpha^2}, \quad [E] = \frac{m\alpha^2}{\hbar^2}$$

Получим:

$$R''_{rr} + \frac{2}{r}R'_r - \frac{l(l+1)}{r^2}R + 2 \left(E + \frac{1}{r} \right) R = 0$$

Мы рассматриваем потенциальную яму, что можем ожидать? Ясно, что при $E > 0$ спектр непрерывный, но нас сейчас будет интересовать спектр состояний связанных, дискретных. Это, собственно, и есть уровни электрона в атоме. Потому что в непрерывном спектре он бы уже улетел (атом ионизованный).

Пусть еще $r = \frac{1}{\sqrt{-2E}}$ (энергии смотрим отрицательные, под корнем положительная величина, все хорошо) и $\rho = \frac{2r}{n}$, причем пока ничего не говорим о целости или положительности n :

$$R'' + \frac{2}{\rho}R' + \left(-\frac{1}{4} + \frac{n}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) R = 0$$

Асимптотики: на больших расстояниях от центра $\rho \rightarrow \infty$ и $R'' - \frac{1}{4}R = 0$, а значит, решение $R \sim e^{-\rho/2}$ (знак выбран таким образом, что все затухает на бесконечности); при малых $\rho \rightarrow 0$ асимптотика нам известна (ρ^l). Попробуем подстановку $R = \rho^2 e^{-\rho/2} W(\rho)$:

$$\rho W'' + (2l + 2 - \rho)W' + (n - l - 1)W = 0$$

Решением уравнения являются спец-функции (вырожденные гипергеометрические функции) - **полиномы Лагерра**, причем решение существует только при целых n и должно выполняться условие $(n - l - 1) \geq 0$ (для хорошего поведения на бесконечности). Можно ли в данном случае определить какие-то операторы, позволяющие переходить с уровня на уровень? (а ля операторов рождения и уничтожения или l_{\pm}) На самом деле да, но в этом году решили не рассматривать (см. III том ЛЛ)

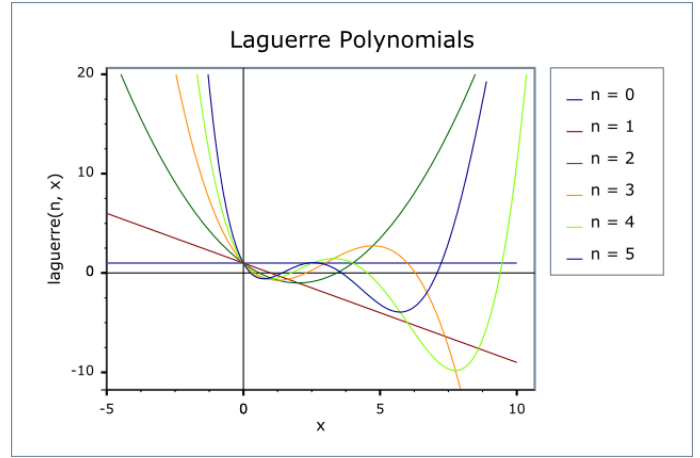


Рис. 28.1: Полиномы Лагерра

Т.к. n - целое, то сразу определяем энергию $E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2 n^2}$ с нижней границей $n \geq l + 1$, которая определяет **главное квантовое число**, связанное с радиальным и орбитальным квантовыми числами: $n_r = n - l - 1$, оно равно числу узлов радиальной части волновой функции. Перебираем значения l , для каждого l подбираем нижнюю границу для n , которое определяет энергию, и перебираем эти n . Как можно трактовать еще? Есть спектр, который ведет себя как 1^2 с точностью до коэффициента, но для каждого n существует набор l , которое ограничивает его значением $l + 1$. Например, для основного состояния $n = 1$ и $l = 0$ и только такое. Далее, $n = 2$, а у l появляется некоторый простор: 0 и 1. l - орбитали, которые мы уже обсуждали.

Число вырождения уровня при заданном n и при $l = \{0, 1, 2, \dots, n - 1\}$ равно $\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2$.

Еще какие-то замечания, числа, формулы: $\frac{\hbar^2}{ml^2} = 0.8 \cdot 10^{-8} \text{ см}$ - пол-Ангстрема, боровский радиус; $\frac{me^4}{\hbar^2} = 27.21 \text{ эВ}$ - масштаб/глубина энергии; Число Ридберга - $R_y = 0.5 \frac{me^4}{\hbar^2}$

29 | Калибровочное преобразование в квантовой механике

Не доработано

Запишем УШ для ЭМ поля, учитывая выражения полей через потенциалы $\vec{B} = \text{rot}\vec{A}$ и $\vec{E} = -\nabla\varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}$:

$$\left(\frac{(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{r}))^2}{2m} + U(\vec{r}) \right) \psi = i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t}$$

Всегда можем положить (т.н. **калибровочное преобразование**)

$$\begin{cases} \vec{\tilde{A}} = \vec{A} + \nabla f \\ \tilde{\varphi} = \varphi - \frac{1}{c}\dot{f} \end{cases}$$

поля останутся прежними, в задаче тогда измениться ничего не должно, но уравнения меняются, вопрос в том, как добиться такого же уравнения. Попробуем преобразовать ψ -функцию, добавив фазу (дабы избежать изменения вероятности): $\psi = \tilde{\psi}e^{i\alpha(\vec{r},t)}$. Подставим в Гамильтониан, сначала для одного действия оператора, а потом еще разок:

$$e^{i\alpha} \left(-i\hbar\nabla + \hbar\nabla\alpha - \frac{e}{c}\vec{A} - \frac{e}{c}\nabla f \right) \tilde{\psi} \\ \left(-i\hbar\nabla + \hbar\nabla\alpha - \frac{e}{c}(\vec{\tilde{A}} + \nabla f) \right)^2$$

Подчеркнутые слагаемые в сумме должны давать ноль, а значит, $\alpha = -\frac{ef}{\hbar c}$. Но тогда получается, что α - функция f и дифференцировать ее нужно как сложную функцию, получим $\dot{\alpha}$, а если же потенциал взять в виде $U(\vec{r}) = e\left(\tilde{\varphi} - \frac{1}{c}\dot{f}\right)$, то и этот фактор сократится.

Пускай ничего не знаем про всякие калибровки, но у нас есть УШ и оно симметрично относительно локальных фазовых преобразований волновой функции. Но при подстановке уравнения изменились, т.к. про векторный потенциал мы ничего не знаем. Вводим ЭМ поле как компенсацию изменения волновой функции (результат требования симметрии). Такие поля называются **калибровочными полями**. Сам заряд e получается так же как результат симметрии. //много слов, смысла мало//

Рассмотрим, в каком порядке нужно действовать операторами $\hat{\vec{p}}$ и $\hat{\vec{A}}$:

$$[\hat{\vec{p}}, \hat{\vec{A}}]\psi = (\hat{\vec{p}}\hat{\vec{A}} - \hat{\vec{A}}\hat{\vec{p}})\psi = -i\hbar\nabla(\psi\vec{A}) + i\hbar\vec{A}\nabla\psi = \left| \nabla(\psi\vec{A}) = \vec{A}\nabla\psi - \psi\text{div}\vec{A} \right| = -i\hbar\psi\text{div}\vec{A}$$

Выбор $div\vec{A}$ и есть **калибровка**. Уровнения от калибровочных преобразований зависеть не должны, а значит, коммутатор вводить не стоит, оставляем в Гамильтониане комбинацию $\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{r})$.

30 | Экспериментальные факты, указывающие на существование спина и внутреннего магнитного момента у электрона

Мы познакомились с механическим моментом количества движения. Понятно, что с ним связан магнитный момент. Допустим, знаем токи, как тогда найти момент? По аналогии $\mathbf{r} \times \mathbf{j}$, это все идет из уравнений Максвелла: $\text{rot } \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}$, предположим, что можно записать $\mathbf{j} = c \cdot \text{rot } \mathbf{M}$, откуда получим уравнение $\text{rot } (\mathbf{B} - 4\pi \mathbf{M}) = \text{rot } \mathbf{H} = 0$. Т.о. для нахождения момента по известному току, нужно записать УМ. Есть аналогичная задача - по известному току находится магнитное поле (закон Био-Савара-Лапласа), это и есть $\mathbf{r} \times \mathbf{j}$, в этом смысле задача не отличается ничем, кроме констант. Что любопытно: можем установить соответствие проекции магнитного момента на механический момент (**гиромангнитное отношение**) для электрона

$$\frac{M_z}{L_z} = \frac{e}{2mc}$$

Замечание 18. Вычислим силу кругового тока, обусловленного движением электрона по круговой орбите. По определению, сила тока — это количество заряда, протекающего через поперечное сечение за единицу времени. В данном случае электрон за 1 секунду пересечет воображаемое сечение ν раз, где ν — частота вращения электрона. Поэтому имеем

$$I = e\nu = e \frac{1}{T} = \frac{ev}{2\pi r}$$

Здесь T - период вращения, а v - линейная скорость электрона. Магнитный момент электрона, обусловленный вращением, равен

$$p_0 = IS = \frac{e}{t} \pi r^2 = \frac{evr}{2}$$

Направление вектора \mathbf{p}_0 определяется правилом правого винта. Данный магнитный момент принято называть *орбитальным магнитным моментом электрона*. Движущийся по круговой орбите электрон обладает моментом импульса, который равен:

$$\mathbf{L}_0 = \mathbf{r} \times m\mathbf{v}$$

Вектор \mathbf{L}_0 направлен противоположно вектору \mathbf{p}_0 , а его величина с учетом связи линейной и угловой скоростей движения равна:

$$L_0 = rmv = rm\omega r = \frac{2\pi}{T} r^2$$

Теперь можем найти соотношение, которое называется *гиромагнитным* (магнитомеханическим) отношением орбитальных моментов электрона.

$$\frac{p_0}{L_0} = \frac{e}{2m}$$

Мы считали, что электрон движется по круговой орбите, но можно показать, что такое же соотношение справедливо и при движении электрона по эллиптической орбите. Гиромагнитное отношение указывает на наличие связи между магнитными и механическими свойствами магнетика. Действительно, если изменились его магнитные свойства, то это должно привести к изменению механических свойств. Справедливо и обратное — изменение механических свойств должно привести к намагничению магнетика. **Конец замечания.**

Если мы перейдем к квантовой механике, \mathbf{L} становится оператором \hat{L}_z , имеющий некоторый дискретный набор собственных значений, тогда естественно предположить, что с точностью до коэффициента M_z повторяет L_z . Отсюда получим дискретные значения магнитного момента.

Для проверки данных соображений в 1921 году Штерном и Герлахом был проведен следующий эксперимент.

Ставили экран с щелью, посылали на него пучок атома водорода (в оригинале - серебра) в s-состоянии (волновая функция изотропна, $l=0$), далее была область неоднородного магнитного поля и ставили экран. Понятно, что энергия магнитного момента в магнитном поле $U = -\mathbf{M}\mathbf{B}$. Если \mathbf{B} неоднородно, а \mathbf{M} квантовано, то градиент потенциальной энергии даст силу, которая по-разному будет отклонять атомы, что даст какие-то дискретные следы на экране. В опыте получались 2 резких линии. Если бы это были классические частицы, мы бы получили некоторый разброс, но эта линия была бы одна и размытая. Вообще мы рассматриваем s-состояние, где нет орбитального и магнитного момента, о какой линии тогда может идти речь? Может, прогадали с условиями эксперимента, смотрим дальше: число проекций магнитного момента всегда нечетное (!), а получается явно две (!) полоски. Это был один из важных сигналов: волновая механика электрона в своей первоначальной форме не позволяет объяснить некоторых фактов магнитных и спектроскопических (см. далее) измерений.

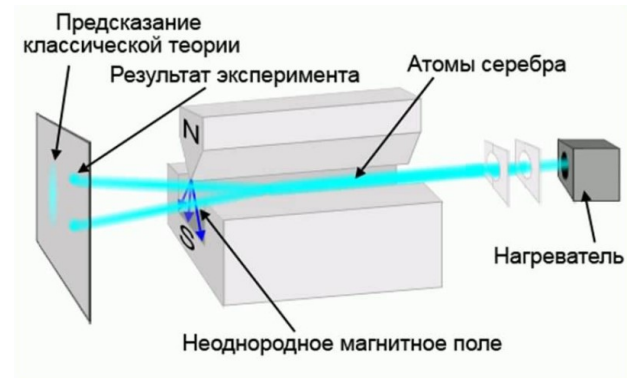


Рис. 30.1: Опыт Штерна и Герлаха

Второй звоночек. В натрии изучали переход состояния из $2p$ в $1s$ (первое число - это главное квантовое, s и p - квантовые). Увидели так называемый *дублет* - две близкие линии. Опять возвращаемся к уже полученному противоречию.



Рис. 30.2: Опыт Эйнштейна-де-Гааза

Еще ранее, в 1915 году, был проведен еще один эксперимент - опыт Эйнштейна и Де Гааза

Тонкий железный стержень (ферромагнитный цилиндр) подвешивался на упругой нити и помещался внутрь соленоида. Для усиления эффекта применен метод резонанса - по соленоиду протекал переменный ток, частота которого подбиралась равной собственной частоте механических колебаний стержня. При намагничивании стержня

магнитные моменты электронов установятся по направлению поля, а механические моменты против поля. В результате суммарный момент импульса электронов станет отличен от нуля. Момент импульса системы (стержень + электроны) должен остаться неизменным, поэтому стержень начнет закручиваться против вращения электронов. По измеренной амплитуде колебаний можно вычислить и механический момент, и гиромагнитное отношение, которое оказалось равным:

$$\frac{p_0}{L_0} = \frac{e}{m}$$

Отличие в 2 раза напрягало людей. В 1925 году Уленбек и Гюудсмит предположили, что у электрона, помимо того самого орбитального момента, который есть $\hbar m_z$, существует еще свой, **внутренний момент** - $S_z = \pm \hbar/2$ и магнитный момент, который удовлетворяет гиромагнитному отношению без двойки. Проблема "полуцелых" состояний: выполнено условие невыделенности направления оси М (допустимые состояния $-1/2$ и $1/2$), но волновая функция ψ этих состояний при повороте на 2π меняет знак, что на самом деле несколько тревожно. С другой стороны, нас интересует $|\psi|^2$, поэтому пока не будем обращать внимание на этот момент, посмотрим, что выйдет. Так появился **спин** - внутренний механический момент частицы.

Для спина собственных значений оператора \hat{S}^2 всего $s(s+1)$, для электрона $s = 1/2$. Как ввести оператор спина - об этом и о других интересных фактах из жизни электрона смотри в следующем семестре.

31 | Заряженная частица в однородном магнитном поле

Не доработано

Рассмотрим задачу о постоянном однородном электромагнитном поле. Нужно найти ψ и E :

$$\frac{(\hat{p} - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{r}))^2}{2m}\psi = E\psi$$

1. Ищем векторный потенциал. $\vec{B} = \mu\vec{H}$, $\vec{H} \uparrow\uparrow \vec{z}$.

$$\text{rot}\vec{A} = \begin{vmatrix} \vec{x}_0 & \vec{y}_0 & \vec{z}_0 \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ A_x & A_y & A_z \end{vmatrix} = \vec{x}_0 \left(\frac{\partial}{\partial y} A_z - \frac{\partial}{\partial z} A_y \right) - \vec{y}_0 \left(\frac{\partial}{\partial x} A_z - \frac{\partial}{\partial z} A_x \right) + \vec{z}_0 \left(\frac{\partial}{\partial x} A_y - \frac{\partial}{\partial y} A_x \right)$$

Т.к. \vec{B} имеет только одну компоненту, то

$$\frac{\partial}{\partial y} A_z - \frac{\partial}{\partial z} A_y = 0 \quad \frac{\partial}{\partial x} A_z - \frac{\partial}{\partial z} A_x = 0 \quad \frac{\partial}{\partial x} A_y - \frac{\partial}{\partial y} A_x = B_z$$

Тогда можем взять $\vec{A} = \frac{1}{2}(-y, x, 0)H$. Поскольку x -компонента пропорциональна $-y$, а y -компонента пропорциональна x , то вектор должен быть перпендикулярен вектору \vec{r} , проведенному от оси Oz . Кроме того, величина \vec{A} пропорциональна $\sqrt{x^2 + y^2}$ и, следовательно, пропорциональна \vec{r} . Поэтому для однородного поля можно записать $\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B} \times \vec{r}$ или же $A_\theta = \frac{1}{2}rH$ (**радиальная калибровка**). Векторный потенциал вращается вокруг оси Oz , как показано на рисунке 31.1. Если, например, поле \vec{B} есть поле внутри соленоида вдоль его оси, то векторный потенциал циркулирует точно таким же образом, как и токи в соленоиде.

Выберем калибровку $\vec{A} = (-y, 0, 0)H$.

2. Распишем уравнение покомпонентно.

$$\frac{(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x} - \frac{e}{c}(-Hy))^2}{2m}\psi - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2}\psi - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}\psi = E\psi$$

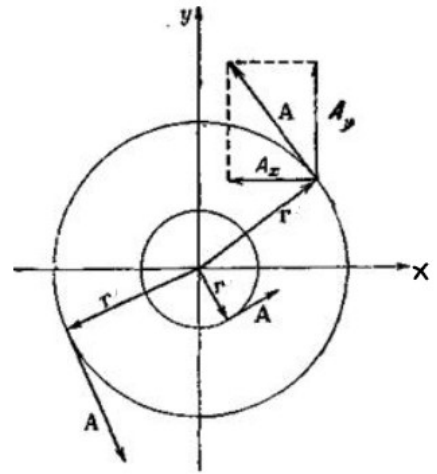


Рис. 31.1: Однородное магнитное поле \vec{B} , направленное по оси Oz , соответствует векторному потенциалу $A_\theta = \frac{1}{2}rH$, который вращается вокруг этой оси. r - расстояние до оси Oz .

Избавимся от производной по z : $\frac{(p_z)^2}{2m}$ - кинетическая энергия вдоль поля, частица не испытывает влияния, но в классике действует сила Лоренца и частица движется по окружности.

В уравнении нет в явном виде координат x и z - они циклические, значит, можем произвести разделение переменных, введя замену (а после опустить волну в уравнении):

$$\psi = \tilde{\psi} e^{ik_z z} e^{ik_x x}$$

$$\frac{1}{2m} \underbrace{\left(\hbar k_x + \frac{eH}{c} y \right)^2}_U \psi - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = \left(E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \right) \psi$$

где U - потенциал гармонического осциллятора со смещенной координатой y на $const$.

$$\psi'' + \left(\frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{p_z^2}{2m} \right) - \frac{m}{2} w_H^2 (y - y_0)^2 \right) \psi = 0$$

Здесь $y_0 = -\frac{cp_x}{eH}$ - положение центра орбиты, $e = -|e|$ - заряд электрона, $w_H = \frac{|e|\hbar H}{mc}$ - циклотронная частота. Спектр осциллятора:

$$E = \frac{p_z^2}{2m} + \hbar w_H (n + 1/2)$$

Это **уровень Ландау**. В 1930 году эту задачу решил Ландау (хотя Фок сделал это раньше), он вычислил измеримые величины (сказал, что диамагнетизм системы подвижных носителей зарядов связан с тем, что при помещении заряженных частиц в магнитном поле траектории свободного движения частиц искривляются и возникает добавочное магнитное поле, противоположное внешнему, т. е. у системы заряженных частиц появляется добавочный диамагнитный момент. Этот диамагнетизм заметно проявляется при низких температурах (ниже температуры вырождения) и может наблюдаться в вырожденном газе свободных электронов и у электронов проводимости в металлах, полуметаллах и полупроводниках).

Решение полученного дифференциального уравнение дается спец-функциями - функциями Эрмита: $\psi = \Phi\left(\frac{y-y_0}{L_H}\right)$, где $L_H = \sqrt{\frac{\hbar c}{eH}}$ - магнитная длина.

//куча слов//

Тот факт, что энергия не зависит от p_x (k_x) означает, что данные состояния вырождены, причем вырождение бесконечно-кратное. Куда делось движение по окружности при $\hbar \rightarrow 0$ - исчезла калибровочная инвариантность.

//Наверное, надо еще включить все остальное про ток, связанный с квантовомеханическим электроном, и про вывод плотности потока вероятности...//

Возможный вопрос на экзамене: вырождение уровней в уровнях Ландау.

32 | То что знали, но всегда хотели узнать

Разные интересные факты и их доказательства, а также расписанный ход мысли. Данная глава выступает всеобщим протестом против слов: очевидно, не трудно показать и тд...

Какой знак правильный?

Старый пряник однажды спросил у хорошего, но малознающего студента: *Почему у Вас уравнение Шрёдингера написано так: $-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{t})}{\partial\mathbf{t}} = \hat{\mathfrak{H}}\psi$* . Не очевидно, что принято записывать уравнение Шрёдингера так: $\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial\mathbf{t}} = \hat{\mathfrak{H}}\psi$.

На самом деле обе записи верны: сменой направления течения времени они сводятся друг к другу, то есть при замене $\mathbf{t} \rightarrow -\mathbf{t}$. Напомню, проблема с течением времени решается лишь только в некоторых областях физики при помощи добавления вероятности происхождения того или иного события, а также при помощи причинно-следственной связи.

Преподаватель на зачёте был не нужен

Все совпадения с реальными зачётами, где студенты понимали вопрос преподавателя, искажая его смысл, остаются глубоко в душе и требуют ответа. Тема этой секции - уравнение непрерывности:

$$\frac{\partial|\psi|^2}{\partial\mathbf{t}} + \operatorname{div}\left(\vec{\mathbf{j}}\right) = 0$$

Как вывести в общем виде, что $\frac{\partial|\psi|^2}{\partial\mathbf{t}}$ это есть дивергенция какого-то вектора и только?

Прежде чем решать такую сложную и общую задачу надо пытаться решать для более простой с гамильтонианом частного вида: $\hat{\mathfrak{H}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}$. При решении можно получить следующие важные сведения: во-первых, от импульса $\hat{\mathbf{p}} = -\mathrm{i}\hbar\vec{\nabla}$ нам важно $\hat{\mathbf{p}} \sim \vec{\nabla}$, поэтому для вывода уравнения непрерывности нам нужно следить за степенями $\hat{\mathbf{p}}$. Во-вторых, Гамильтониан применённый к пси функции должен выдавать скаляр умноженный на пси функцию, никак не вектор, следствием этого будет требование некоторых констант быть векторами. Из сказанного выше выпишем гамильтониан общего вида, разложив его в полином от, учитывая что коммутатор импульса и константа перед ними не коммутируют: $\hat{\mathbf{p}}$:

$$\hat{\mathfrak{H}} = \sum_{\mathfrak{s}=0}^{\mathfrak{k}} \mathfrak{A}_{\mathfrak{s}} \hat{\mathbf{p}}^{\mathfrak{s}} + \sum_{\mathfrak{s}=0}^{\mathfrak{k}} \hat{\mathbf{p}}^{\mathfrak{s}} \mathfrak{B}_{\mathfrak{s}}$$

Для нечётных \mathfrak{s} важное свойство $\mathfrak{A}_{\mathfrak{s}}$: $\mathfrak{A}_{2n+1} \equiv \vec{\mathfrak{A}}_{2n+1}$. Приведу вывод для коэффициентов, хотя, зная вид оператора импульса, можно сказать, что это уже было выведено. Воспользуемся

знанием, что $\hat{\mathfrak{H}}$ - эрмитов оператор: $(\hat{\mathfrak{H}}\psi, \psi) = (\psi, \hat{\mathfrak{H}}\psi)$

$$\begin{aligned} (\psi, \hat{\mathfrak{H}}\psi) &= \int \psi^* \hat{\mathfrak{H}}\psi \, d\mathfrak{q} = \int \psi^* \left(\sum_{s=0}^{\mathfrak{k}} \mathfrak{A}_s \hat{\mathfrak{p}}^s \right) \psi \, d\mathfrak{q} = \mathfrak{A}_0 \int |\psi|^2 \, d\mathfrak{q} + \int \psi^* \left(\sum_{s=1}^{\mathfrak{k}} \mathfrak{A}_s \hat{\mathfrak{p}}^s \right) \psi \, d\mathfrak{q} = \\ &= \mathfrak{A}_0 + \int \psi^* \left(\sum_{s=0}^{\mathfrak{k}-1} \mathfrak{A}_{s+1} \hat{\mathfrak{p}}^{s+1} \right) \psi \, d\mathfrak{q} = \mathfrak{A}_0 + \int \psi^* \hat{\mathfrak{p}} \left(\sum_{s=0}^{\mathfrak{k}-1} \mathfrak{A}_{s+1} \hat{\mathfrak{p}}^s \right) \psi \, d\mathfrak{q} \end{aligned}$$

Далее потребуется воспользоваться знанием что импульс это $\vec{\nabla}$ тогда можно записать подынтегральную функцию как $\nabla \left(\psi^* \left(\sum_{s=0}^{\mathfrak{k}-1} \mathfrak{A}_{s+1} \hat{\mathfrak{p}}^s \right) \psi \right) - \hat{\mathfrak{p}} \psi^* \left(\sum_{s=0}^{\mathfrak{k}-1} \mathfrak{A}_{s+1} \hat{\mathfrak{p}}^s \right) \psi$. По теореме Остроградского-Гаусса получим:

$$\begin{aligned} \mathfrak{A}_0 + \oint \psi^* \left(\sum_{s=0}^{\mathfrak{k}-1} \mathfrak{A}_{s+1} \hat{\mathfrak{p}}^s \right) \psi \, d\mathfrak{S} - \int \hat{\mathfrak{p}} \psi^* \left(\sum_{s=0}^{\mathfrak{k}-1} \mathfrak{A}_{s+1} \hat{\mathfrak{p}}^s \right) \psi \, d\mathfrak{q} &= \mathfrak{A}_0 - \mathfrak{A}_1 \int \hat{\mathfrak{p}} \psi^* \psi \, d\mathfrak{q} - \\ &- \int \hat{\mathfrak{p}} \psi^* \left(\sum_{s=0}^{\mathfrak{k}-2} \mathfrak{A}_{s+2} \hat{\mathfrak{p}}^{s+1} \right) \psi \, d\mathfrak{q} \end{aligned}$$

Далее действуем аналогично и получаем при некоторых условиях (чтобы интегралы по замкнутым поверхностям были нулями) получаем следующую формулу:

$$\int \psi^* \left(\sum_{s=0}^{\mathfrak{k}} \mathfrak{A}_s \hat{\mathfrak{p}}^s \right) \psi \, d\mathfrak{q} = \int \psi \left(\sum_{s=0}^{\mathfrak{k}} (-1)^s \mathfrak{A}_s \hat{\mathfrak{p}}^s \right) \psi^* \, d\mathfrak{q}$$

из определения сопряженного оператора следует, что справа написан комплексно сопряжённый оператор к $\hat{\mathfrak{H}}$, поэтому $\sum_{s=0}^{\mathfrak{k}} \mathfrak{A}_s^* \hat{\mathfrak{p}}^{*s} = \sum_{s=0}^{\mathfrak{k}} (-1)^s \mathfrak{A}_s \hat{\mathfrak{p}}^s$. Делаем вывод - определённый нами оператор импульса подходит под данных критерий, т.к. все его чётные степени при комплексном сопряжении не меняют знак, а нечётные - меняют. Определив так импульс, мы требуем от чисел (векторов) \mathfrak{A}_s действительность. Аналогично проделаем тоже самое с другой частью, в выводе главное следить за порядком действия \mathfrak{B} и $\hat{\mathfrak{p}}$. Сейчас у нас всё готово для доказательства в силу уравнения Шрёдингера:

$$\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} = \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} (\psi^* \hat{\mathfrak{H}}\psi - \psi \hat{\mathfrak{H}}^* \psi^*)$$

Из эрмитовости $\hat{\mathfrak{H}}$ (для проверки припишите слева ещё одну волновую функцию и воспользуйтесь определением сопряжённого оператора) получим:

$$\frac{i}{\hbar} (\psi^* \hat{\mathfrak{H}}\psi - \psi \hat{\mathfrak{H}}^* \psi^*) =$$

Из-за множителя $(-1)^s$ Останутся лишь нечётные элементы ряда, которые удвоятся. Выделим один $\hat{\mathfrak{p}}$ и распишем его через оператор набла, не забудем что нечётные \mathfrak{A}_s - действительные вектора, результат: $([\mathfrak{x}] - \text{целая часть числа } \mathfrak{x})$

$$\begin{aligned} 2\vec{\nabla} \left(\sum_{s=0}^{[\frac{\mathfrak{k}-1}{2}]} \mathfrak{A}_{2s+1} \vec{\mathfrak{p}}^{2s} |\psi|^2 \right) &\equiv -\text{div}(\vec{j}) \\ \vec{j} &= -2 \sum_{s=0}^{[\frac{\mathfrak{k}-1}{2}]} \mathfrak{A}_{2s+1} \vec{\mathfrak{p}}^{2s} |\psi|^2 \end{aligned}$$