

# Конспект лекций по курсу «Квантовая механика»

Галимзянов Т.Р.

## ОГЛАВЛЕНИЕ

<b>ЛЕКЦИЯ 1.</b> Конец прекрасной эпохи .....	4
Классическая физика.....	4
Свет.....	5
Атомы.....	7
Выходы. Матричная и волновая механика.....	9
<b>ЛЕКЦИЯ 2.</b> Квантовая суперпозиция. ....	11
Loss of Determinism .....	11
Quantum Superpositions .....	14
Entanglement. Запутанные состояния.....	19
<b>ЛЕКЦИЯ 3.</b> .....	22
Mach-Zehnder Interferometer. Интерферометр Маха-Зендера.....	22
Elitzur-Vaidman bomb-tester.....	28
Волны вещества .....	30
Волновой пакет. Групповая скорость.....	31
Расплывание волнового пакета .....	33
<b>ЛЕКЦИЯ 4.</b> .....	37
Уравнение Шрёдингера.....	37
Наблюдаемые, операторы, собственные функции и значения .....	38
Средние значения.....	40
<b>ЛЕКЦИЯ 5</b> .....	42
Эрмитовые операторы .....	42
Эрмитовость. Примеры. ....	43
Сложение и умножение операторов .....	45
Непрерывный спектр.....	48
<b>ЛЕКЦИЯ 6</b> .....	51
Предельный переход.....	51
Гамильтониан.....	52
Дифференцирование операторов по времени .....	53
Стационарные состояния .....	55
Матричная формулировка квантовой механики.....	57
<b>ЛЕКЦИЯ 7</b> .....	60
Неопределенность Гайзенберга.....	60
Свойства решений одномерного уравнения Шрёдингера .....	61
Границные условия. ....	63
Яма с бесконечно высокими стенками .....	63
<b>ЛЕКЦИЯ 8</b> .....	67
Осцилляционная теорема .....	67
Прямоугольная яма (в семинар).....	70
Плотность потока .....	76
Коэффициент прохождения .....	77

Прямоугольный барьер (в семинар) .....	78
Дельта-функционный барьер .....	79
<b>ЛЕКЦИЯ 9. Гармонический осциллятор I.</b> .....	<b>81</b>
Гармонический осциллятор. Решение УШ.....	81
<b>ЛЕКЦИЯ 10. Гармонический осциллятор II.</b> .....	<b>84</b>
Гармонический осциллятор. Операторное решение.....	84
Гармонический осциллятор. Матричное решение. ....	94
<b>ЛЕКЦИЯ 11. Оператор момента импульса</b> .....	<b>96</b>
Оператор момента импульса.....	96
Проекция момента импульса на ось $z - L_z$ .....	98
Квадрат момента импульса $L^2$ .....	99
Собственные функции оператора квадрата момента импульса .....	100
<b>ЛЕКЦИЯ 12. Движение в центрально-симметричном поле.</b> .....	<b>102</b>
Движение в центрально-симметричном поле. Общие свойства. ....	102
Движение в центрально-симметричном поле. Уравнение Шрёдингера. ....	103
<b>ЛЕКЦИЯ 13. Движение в кулоновском поле.</b> .....	<b>105</b>
Движение в кулоновском поле.....	105
<b>ЛЕКЦИЯ 14. Теория возмущений.</b> .....	<b>109</b>
Движение в магнитном поле. Уровни Ландау. ....	109
Стационарные возмущения в невырожденных системах. ....	111
<b>ЛЕКЦИЯ 15. Нестационарное возмущение.</b> .....	<b>115</b>
Вырожденные состояния .....	115
Плоский ротатор в магнитном поле. ....	116
Плоский ротатор в электрическом поле. (В семинар) .....	117
Линейный эффект Штарка.....	118
Нестационарное возмущение.....	119
Переходы под влиянием нестационарного возмущения .....	121
Переходы под влиянием периодического возмущения.....	122
<b>ЛЕКЦИЯ 16. Спин.</b> .....	<b>124</b>
Спин частицы.....	124
Спиновые матрицы (Паули) и спиновые функции. ....	125
<b>ЛЕКЦИЯ 17. Тождественность частиц.</b> .....	<b>128</b>
Синглетное и триплетное состояния .....	128
Тождественность частиц .....	130
Волновая функция системы тождественных частиц .....	131
Интерференция тождественных частиц .....	133
Обменное взаимодействие.....	134
<b>ЛЕКЦИЯ 18.</b> .....	<b>137</b>
Лекция про квантовые компьютеры.....	137
<b>Осталось, Не вошедшее в Лекции</b> .....	<b>138</b>
Правило квазиклассического квантования Бора-Зоммерфельда.....	138
<b>ЛЕКЦИЯ</b> .....	<b>139</b>
Теория рассеяния. Борновское приближение.....	139
3.2.3. Переходы электронов в атоме водорода .....	141
<b>ЛЕКЦИЯ</b> .....	<b>144</b>
Вариационный метод.....	144
Вариационный метод Ритца.....	144

Атом водорода вариационным методом .....	144
<b>ЛЕКЦИЯ .....</b>	<b>147</b>
Ион молекулы водорода.....	147
<b>ЛЕКЦИЯ .....</b>	<b>149</b>
Движение в центральном поле с аксиальной симметрией. В семинар!..	149
Матричные элементы оператора момента импульса и связанных.....	151
Теория возмущений. Particle in a box с электрическим полем. В Семинар.	151
Теория возмущений. Осциллятор в электрическом поле. В семинар .....	152
<b>Лекция .....</b>	<b>155</b>
Унитарная динамика .....	155

# ЛЕКЦИЯ 1. КОНЕЦ ПРЕКРАСНОЙ ЭПОХИ

## Классическая физика

Согласно **классической доктрине**, общепринятой среди физиков до начала XX века, описание эволюции физических систем производится с помощью некоторого числа величин, так называемых **динамических переменных**; все эти переменные в каждый момент времени имеют вполне определенные значения, так что задание всей совокупности этих значений определяет динамическое состояние системы в данный момент времени; принимается, кроме того, что эволюция физической системы во времени полностью задана, если известно ее состояние в некоторый начальный момент. Математически эта основная аксиома выражается тем фактом, что динамические переменные как функции времени удовлетворяют системе дифференциальных уравнений первого порядка. Программа классической теоретической физики включает, таким образом, определение динамических переменных исследуемой системы, а затем установление тех уравнений движения, которые описывают их изменение во времени в согласии с опытными данными.

С тех времен, когда Ньютон формулировал основные законы механики, и до конца XIX века эта программа развивалась вполне успешно, причем появлению новых экспериментальных фактов в теоретическом плане соответствовало либо введение новых динамических переменных и новых уравнений, либо изменение старых уравнений, что позволяло без больших затруднений включить новое явление в общую теоретическую схему. В течение всего этого периода ни один опытный факт, ни одно физическое открытие не поставили под сомнение строгую обоснованность самой программы. Напротив, классическая физика непрерывно прогрессировала в направлении наибольшей простоты и наибольшего согласия и единства в описании всей совокупности физических явлений. Это счастливое развитие продолжалось примерно до 1900 г., но в дальнейшем, по мере накопления и углубления знаний о физических явлениях на микроскопическом уровне, классическая теория столкнулась с целым рядом трудностей и противоречий. Быстро стало очевидным, что физические явления на атомном и субатомном уровнях вообще не могут быть описаны на основе классической доктрины и для их объяснения нужны совершенно новые принципы. Открытие и утверждение этих новых принципов прошло несколько этапов и только к 1925 году, к моменту появления квантовой механики, была построена связная и непротиворечивая теория микроскопических явлений.

В конце классического периода отдельные ветви физики объединились в единую и согласованную теоретическую картину мироздания, основные контуры которой таковы. В окружающей нас вселенной мы различаем две категории объектов: вещество и излучение. Вещество состоит из точно локализуемых корпускул, движение которых подчиняется законам механики Ньютона; состояние каждой корпускулы определяется в каждый момент ее положением и скоростью (или количеством движения — импульсом), т. е. всего шестью динамическими переменными. Излучение подчиняется законам электромагнитной теории Максвелла; динамические переменные излучения — число их бесконечно — суть составляющие в каждой точке пространства электрического и магнитного полей.

**Статистическая физика.** Действительно, согласно гипотезе макроскопические величины должны рассматриваться как средние значения динамических переменных системы, обладающей очень большим числом степеней свободы. Не может быть и речи о точном решении уравнений Движения такой системы и приходится прибегать к

статистическим методам исследования. Так родилась и стала развиваться новая дисциплина — статистическая механика. Новые результаты в исследовании газов (кинетическая теория газов) и термодинамике (статистическая термодинамика) позволили проверить качественно, а в рамках возможной точности расчетов и количественно, основные положения корпускулярной теории вещества.

## Свет

**Волновая теория** излучения также покоилась на солидной основе. В области оптики старое противоречие между волновой и корпускулярной природой света было разрешено в первой половине XIX века, когда решающие успехи в решении проблемы распространения волн (Френель) позволили исследовать все следствия волновой гипотезы и объяснить на основании этой гипотезы всю совокупность известных световых явлений, включая и **геометрическую оптику**.

Распространение волн в веществе никак не противоречит корпускулярной теории: здесь дело идет о макроскопическом явлении, которое нетрудно объяснить с точки зрения микроскопического движения, если принять существование подходящих сил взаимодействия. По аналогии физики классической эпохи искали соответствующую среду для распространения электромагнитных волн, некоторый материальный флюид, получивший наименование **эфира**, структура и механические свойства которого оставались неясными. Таким образом, основной субстанцией оказывалось некоторое вещество, подчиняющееся законам механики Ньютона и наделенное такими силами взаимодействия, что в определенных условиях в этом веществе проявляются волновые процессы, частным случаем которых являются электромагнитные волны.

Эта концепция (в дальнейшем полностью оставленная) в описываемую нами эпоху привела к постановке целой серии экспериментов, которые мало что дали для выяснения природы эфира, но один из них привел к революционному перевороту всей классической физики. Мы имеем в виду знаменитый **опыт Майкельсона — Морли** (1887 г.), поставленный с целью обнаружить движение Земли относительно эфира по изменению скорости света в зависимости от направления этого движения. После ряда более или менее искусственных попыток объяснить отрицательный результат этого опыта парадокс был окончательно разрешен Эйнштейном в 1905 г. в рамках его **теории относительности**, которая явилась результатом критического анализа понятий пространства и времени и привела к отказу от понятия абсолютного времени и ряда положений механики Ньютона.

Но принцип относительности не ставит под вопрос ни доктрину, ни программу классической физики, в том виде как они были сформулированы выше.

На рубеже нового века усилия экспериментаторов были направлены на разрешение двух тесно связанных проблем: выяснения истинной микроскопической структуры вещества и законов взаимодействия материальных корпускул между собой и с электромагнитным полем.

Спектр известных электромагнитных волн расширяется в направлении более коротких длин волн с открытием **рентгеновских лучей** (Рентген, 1895 г.), природа которых устанавливается опытами по дифракции в кристаллах (фон Лауз, 1912 г.). Для гамма-излучения это сделали позже.

Всё более-менее объяснялось, но накапливались противоречия. Типичный случай — излучение **абсолютно черного тела**. По классической формуле полная интенсивность излучения равна бесконечности.

$$B_\nu(T) = \frac{2\nu^2 k_B T}{c^2}.$$

В 1900 г. Макс Планк высказал гипотезу о том, что обмен энергией между веществом и излучением происходит не непрерывным образом, а путем передачи дискретных и неделимых порций энергии, или квантов энергии. Планк показал, что квант энергии пропорционален частоте  $\nu$  излучения света излучается и поглощается отдельными порциями — **квантами** (или фотонами). Энергия каждого фотона определяется формулой  $E = h\nu$ , где  $h$  — постоянная Планка, равная  $6.63 \cdot 10^{-34}$  Дж·с,  $\nu$  — частота света. Гипотеза Планка объяснила многие явления: в частности, явление **фотоэффекта**, открытого в 1887 г. Генрихом Герцем.

$$B_\nu(\nu, T) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1}$$

При появлении гипотезы Планка она казалась неприемлемой, подавляющее большинство физиков видело в ней только удобный математический прием, который в дальнейшем удастся объяснить на основе классической доктрины. Даже видимый успех теории Планка в объяснении результатов опыта не мог служить неопровергнутым доказательством того, что обмен энергией между веществом и излучением действительно происходит квантами

Однако гипотеза Планка была в дальнейшем подтверждена и дополнена целой серией опытов, позволивших анализировать элементарные процессы и доказать скачкообразность и прерывность эволюции физических систем на микроскопическом уровне, где классическая теория предсказывала непрерывную эволюцию.

Первая серия экспериментальных фактов привела к радикальному пересмотру теории излучения Максвелла — Лоренца и частичному возврату к старой корпускулярной теории; имеются в виду **фотоэлектрический эффект** и **эффект Комптона**.

В 1905 г. Альберт Эйнштейн построил **теорию фотоэффекта**. Данная теория была построена с целью развития идей Планка. Пойдя далее Планка, который ограничился введением дискретности только в самый механизм поглощения и испускания излучения, Эйнштейн постулировал, что само световое излучение представляет собой поток корпускул, фотонов, обладающих энергией  $h\nu$  и скоростью с Эйнштейн предположил, что свет не только испускается и поглощается, но и распространяется квантами. Следовательно, **дискретность** присуща самому свету.

В 1922 г. **Комптон** открыл явление, при котором происходит изменение частоты или длины волн фотонов при их рассеянии электронами. **Эффект Комптона** не находил объяснения в рамках классической электродинамики. Он наводил на мысль о корпускулярно-волновой природе света. Но это было явное противоречие, так как эти два явления не могли смешиваться.

$$\lambda' - \lambda = \lambda_k(1 - \cos\theta),$$

$$\text{где } \lambda_k = \frac{h}{m_e c} \text{ — } \text{комптоновская длина волны электрона, равная } \lambda_k = 2,4263 \cdot 10^{-12} \text{ м.}$$

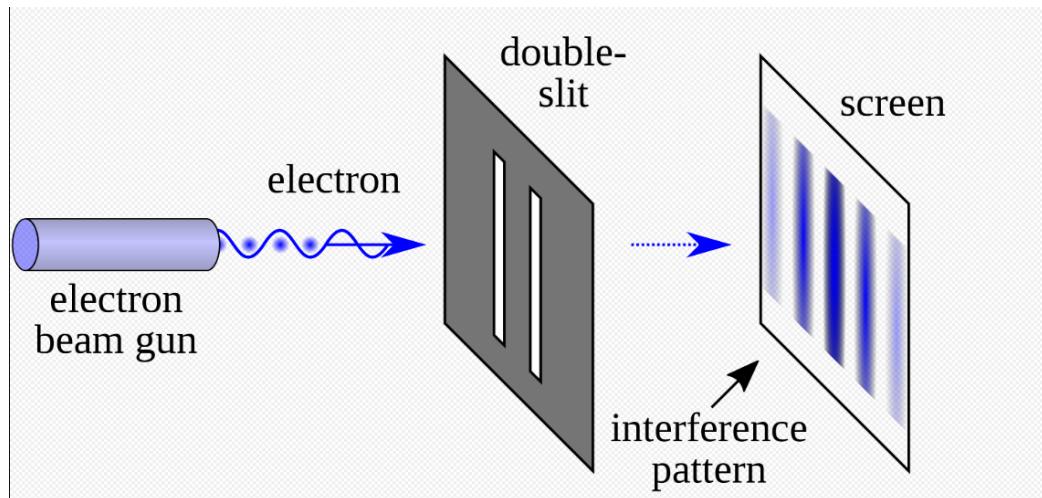
Объяснение эффекта Комптона в рамках классической электродинамики невозможно, так как рассеяние электромагнитной волны на заряде (томсоновское рассеяние) не меняет её частоты.

С корпускулярной природой света другие проблемы — интерференция на двух щелях. Заметим прежде всего, что фотоны движутся в пространстве независимо друг от друга.

[К содержанию](#)

друга, их взаимодействие пренебрежимо мало. Действительно, интерференционная картина не меняется, если уменьшить интенсивность источника света и, соответственно, увеличить продолжительность облучения так, чтобы количество света, падающее на решетку, оставалось постоянным. Иными словами, если мы посылаем некоторое (очень большое) число фотонов на решетку, то распределение сенсибилизованных точек на пластинке не зависит от группировки падающих фотонов; это справедливо и в предельном случае очень слабых интенсивностей, когда фотоны падают на решетку «по одному». То же самое распределение мы получим, если пошлем на решетку один-единственный фотон, а затем повторим этот опыт  $N$  раз.

Интерференционная картина же не должна меняться от наличия соседства щелей. Если, кроме того, источник света и чувствительная пластина достаточно удалены, распределения точек ударов фотонов, рассеянных обеими половинами, должны быть одинаковыми. При устранении, скажем, правой половины решетки измениться должна только интенсивность света, падающего на каждый участок пластины, но не интерференционная картина. Опыт противоречит этим предсказаниям и заставляет нас признать, что в процессе рассеяния света принимает участие вся решетка целиком.



Хотя наблюдаемые нарушения непрерывности могут быть объяснены только с помощью представления о световых корпускулах, не может быть и речи об отказе от понятия световой волны. Свет проявляется себя в двух аспектах: волновом и корпускулярном, в зависимости от того, какое явление мы изучаем. Существование **дуализма волна — корпускула** несовместимо с классической доктриной. Нельзя рассматривать свет ни как поток классических корпускул, ни как суперпозицию классических волн, не входя в противоречие с опытными данными.

Это очень плохо — откуда свету знать, в каких условиях мы проводим эксперимент.

## Атомы

Томсон в 1897 году открыл **электрон**, присутствии электромагнитного поля и построена полная теория взаимодействия между электроном и электромагнитными волнами. Появилась уверенность в существовании **атомов и молекул**. Измерение **элементарного заряда**. (измерение элементарного заряда электрона Милликеном в 1910 г., первые наблюдения траекторий заряженных частиц в камере Вильсона в 1912 г., первый счетчик Гейгера в 1913 г.).

[К содержанию](#)

**1896 – радиоактивность.** Направляя  $\alpha$ -излучение на различные мишени, Резерфорд (1911 г.) произвел систематическое исследование рассеяния а-частиц атомами и сумел таким путем построить первую современную модель атома.

**Атом Резерфорда** состоит из центрального ядра крайне малых размеров ( $10^{-13}$ – $10^{-12}$  см), вокруг которого движется некоторое число  $Z$  электронов. Почти вся масса атома сосредоточена в его ядре. Ядро обладает положительным электрическим зарядом  $Ze$ , который в точности компенсирует полный заряд совокупности электронов —  $Ze$ , так что в целом атом оказывается электрически нейтральным. Атом Резерфорда похож, таким образом, на солнечную систему в миниатюре, где гравитационные силы заменены на силы электромагнитные. Под действием этих сил — кулоновского притяжения со стороны ядра и кулоновского взаимного отталкивания — электроны движутся вокруг ядра по устойчивым орбитам, размеры которых порядка атомных размеров, т. е.  $10^{-8}$  см.

Одним из наиболее выдающихся фактов, обнаруженных в результате усовершенствования техники исследования спектров испускания и поглощения света веществом, явилось существование узких спектральных линий. Частоты испускаемого и поглощаемого излучения зависят от сорта изучаемых атомов; для атомов одного сорта спектры поглощения и излучения одинаковы. Каждый атом может быть идентифицирован по спектру; Эти экспериментальные факты находятся в явном противоречии с классической теорией атома Резерфорда; более того, сама модель атома Резерфорда сталкивается с серьезными противоречиями, если помимо кулоновского взаимодействия учесть более строгим образом взаимодействие атомных электронов с электромагнитным полем согласно электронной теории Лоренца. Двигаясь по своим орбитам, электроны должны излучать и, следовательно, терять свою кинетическую энергию, что неизбежно должно привести к их падению на ядро атома.

В 1913 году Нильс Бор предложил общую схему объяснения **атомных спектров**, дополнив гипотезу существования квантов света новым постулатом, несовместимым с классическими понятиями, а именно постулатом квантования энергетических уровней электронов, принадлежащих атому.

Согласно Бору электрон в атоме не ведет себя как классическая система, способная непрерывно излучать энергию. Он может пребывать только в некотором числе стационарных состояний, характеризуемых определенной энергией. Говорят, что энергия электрона квантуется. Энергия электрона может изменяться только скачкообразно, причем каждый скачок соответствует переходу из одного квантового состояния в другое.

#### Квантование магнитного момента атома (опыт Штерна и Герлаха)

Квантование некоторых физических величин — и это следует особенно подчеркнуть — есть экспериментальный факт, совершенно несовместимый с классической корпускулярной теорией вещества. Так, энергия системы классических корпускул есть по самой сути своей величина, изменяющаяся непрерывно. Как бы мы ни меняли законы взаимодействия, как бы ни выбирали динамические переменные, это основное положение нельзя изменить: тот факт, что энергия системы частиц может принимать только ряд определенных дискретных значений, есть результат, выходящий за рамки классической механики. То же замечание можно сделать относительно любой квантованной величины.

В соответствии с этим и изменение во времени квантованной величины не может быть описано в строго классических понятиях. Рассмотрим пример атома, первоначально находящегося в первом возбужденном состоянии  $E_1$  а затем испускающего фотон и переходящего в основное состояние. Если, пользуясь языком классической теории, мы будем пытаться описать изменение энергии такого атома во времени, то придется сделать заключение, что в некоторый момент энергия скачкообразно изменяется от  $E_1$  до  $E_0$ , поскольку всякое непрерывное изменение энергии запрещено. Однако нельзя

предсказать, в какой именно момент времени произойдет этот скачкообразный переход. Действительно, если динамическое состояние атома остается строго неизменным в течение всего времени, предшествующего скачку, то нет никаких оснований утверждать, что скачок произойдет именно в данный, а не в любой последующий момент времени. Можно говорить только о вероятности (в единицу времени) того, что скачок вообще произойдет. Классическая физика, следовательно, неспособна адекватно описать такую ситуацию; само представление о скачке, происходящем в точно определенный момент времени, оказывается некорректным.

Было придумано правило квантования Бора-Зомерфельда. Но оно эмпирическое, не обосновано строго.

Итого, грубо говоря, в классической физике на назрело два класса проблем – квантование физических величин и волновое поведение частиц в некоторых условиях. Для решения этих проблем было предложено два подхода.

## **Выходы. Матричная и волновая механика.**

Основание квантовой механики приходится на период между 1923 и 1927 годами. Почти одновременно были предложены две эквивалентные формулировки: матричная механика и волновая механика.

Исходным пунктом **матричной механики** явился критический анализ положений старой квантовой теории. Точка зрения Гейзенberга может быть выражена следующим образом. Во всякой физической теории следует отличать понятия и величины, **физически наблюдаемые** от физически ненаблюдаемых; первые по необходимости должны фигурировать в теории, вторые же без ущерба для теории могут быть модифицированы или вовсе опущены. При построении удовлетворительной теории микроскопических явлений следует по возможности исходить только из наблюдаемых величин. В старой квантовой теории некритически использовались многие понятия, не имеющие реальной экспериментальной основы; это и явилось причиной ее неудач. Примером экспериментально не обоснованного понятия является электронная орбита. Зададимся вопросом, можно ли на опыте проследить за движением электрона по боровской орбите атома водорода (Ограничения возможностей наблюдения, которые мы имеем в виду, не связаны с совершенством измерительной техники; эти границы ставит сама природа вещей.)? При наблюдении движения мы должны фиксировать последовательные положения электрона в пространстве, причем ошибка в измерении каждого положения должна, естественно, быть значительно меньше среднего радиуса  $a$  исследуемой орбиты. Подобные измерения можно было бы провести с помощью рентгеновских лучей достаточно малой длины волны  $\lambda \ll a$ . Однако столкновение каждого рентгеновского кванта с электроном, согласно теории эффекта Комптона, сопровождается передачей импульса порядка  $h/\lambda (>> h/a)$ , что существенно возмущает движение наблюдаемого электрона. Возмущение тем значительнее, чем меньше квантовое число, характеризующее орбиту; например, если электрон находится на основной орбите ( $n = 1$ ), то средняя энергия, передаваемая при столкновении, равна по меньшей мере энергии ионизации атома. Это неконтролируемое возмущение состояния наблюдаемой системы измерительным устройством ставит предел точности, которую можно надеяться получить при измерении орбиты электрона. При малых квантовых числах любое, даже достаточно грубое измерение параметров орбиты обречено на неудачу. Но поскольку не существует эксперимента, позволяющего доказать, что электрон в атоме водорода действительно перемещается по определенной орбите, ничто не мешает

нам отказаться от самого понятия орбиты электрона. Иначе говоря, из того факта, что атом находится в некотором состоянии с точно фиксированной энергией, не следует с необходимостью, что его электрон в каждый момент времени обладает строго определенными положением и импульсом.

**Матричная механика Гейзенберга, Борна и Иордана** не включает понятия электронной орбиты. Рассматривая только наблюдаемые на опыте величины, такие как частоты и интенсивности излучения атомов, теория каждой физической величине сопоставляет некоторую матрицу. В отличие от алгебры обычных величин матричная алгебра в общем случае некоммутативна, именно это существенное обстоятельство отличает новую матричную механику от механики классической. Уравнения движения динамических переменных квантовой системы являются матричными уравнениями. Следуя принципу соответствия, мы принимаем, что эти уравнения формально совпадают с уравнениями (содержащими обычные величины), которые описывают соответствующую классическую систему.

**Волновая механика Шредингера** внешне выглядит совершенно иной теорией. Истоки ее восходят к работам Луи де Броиля, посвященным материальным волнам (волнам вещества). Пытаясь установить основные принципы единой теории вещества и излучения, де Броиль выдвинул гипотезу, согласно которой корпускулярно-волновой дуализм выражает фундаментальное свойство **всех микроскопических объектов** и, следовательно, вещество, подобно излучению, также обнаруживает и волновые, и корпускулярные свойства. Установив соответствие между динамическими переменными корпускулы и величинами, характеризующими ассоциированную с корпускулой волну, он сумел с помощью полукалических рассуждений получить правила квантования Бора – Зоммерфельда. Предположение де Броиля о волновой природе частиц вещества получило непосредственное подтверждение через несколько лет в результате открытия явлений дифракции частиц, аналогичных соответствующим явлениям волновой оптики. Между тем Шредингер, развивая и обобщая понятие волн вещества, открыл уравнение распространения волновой функции, представляющей данную квантовую систему. Это фундаментальное уравнение может быть выведено путем применения простого правила соответствия из функции Гамильтона соответствующей классической системы. Уравнение Шредингера лежит в основе волновой механики.

Как показал Шредингер, волновая механика и матричная механика эквивалентны. Они дают две частные формулировки одной единой теории, которая может быть представлена в самом общем виде. Разработка общего формализма квантовой теории была осуществлена Дираком. В результате возникла квантовая нерелятивистская теория материальных частиц. Она была дополнена квантовой теорией электромагнитного поля, что привело к построению единого согласованного теоретического метода, позволяющего исследовать все задачи, касающиеся физики систем материальных частиц в нерелятивистском приближении и их взаимодействия с электромагнитным полем. Добавим, что внутренняя непротиворечивость теории и глубокое понимание физического смысла ее формализма были достигнуты только после работ Борна, Гейзенberга и Бора.

Наиболее элегантным и во многих отношениях наиболее удовлетворительным способом изложения квантовой теории является тот, который основывается на общем формализме, с него мы и начнём.

**Примечание:** материал для неторопливой лекции, может не хватить при бодром темпе.

## ЛЕКЦИЯ 2. КВАНТОВАЯ СУПЕРПОЗИЦИЯ.

Интерференция наблюдается и при одночастичном пропускании. Т.е. других частиц нет, а частица с чем-то интерферирует. Можно продолжить эту аналогию и сделать вывод, что наиболее простое истолкование дуализма волна — частица имеет статистическую основу в том смысле, что интенсивность волны в каждой точке экрана дает вероятность попадания электрона в эту точку.

### Loss of Determinism

Maxwell's crowning achievement was the realization that his equations of electromagnetism allowed for the existence of propagating waves. In particular, in 1865 he conjectured that light was an electromagnetic wave, a propagating fluctuation of electric and magnetic fields. He was proven right in subsequent experiments. Towards the end of the nineteenth century physicists were convinced that light was a wave. The certainty, however, did not last too long. Experiments on blackbody radiation and on the photoemission of electrons suggested that the behavior of light had to be more complicated than that of a simple wave. Max Planck and Albert Einstein were the most prominent contributors to the resolution of the puzzles raised by those experiments.

In order to explain the features of the photoelectric effect, Einstein postulated (1905) that in a light beam the energy comes in quanta – the beam is composed of packets of energy. Einstein essentially implied that light was made up of particles, each carrying a fixed amount of energy. He himself found this idea disturbing, convinced like most other contemporaries that, as Maxwell had shown, light was a wave. He anticipated that a physical entity, like light, that could behave both as a particle and as a wave could bring about the demise of classical physics and would require a completely new physical theory. He was in fact right. Though he never quite liked quantum mechanics, his ideas about particles of light, later given the name **photons**, helped construct this theory.

It took physicists until 1925 to accept that light could behave like a particle. The experiments of Arthur Compton (1923) eventually convinced most skeptics. Nowadays, particles of light, or photons, are routinely manipulated in laboratories around the world. Even if mysterious, we have grown accustomed to them. Each photon of visible light carries very little energy – a small laser pulse can contain many billions of photons. Our eye, however, is a very good photon detector: in total darkness, we are able to see light when as little as ten photons hit upon our retina. When we say that light behaves like a particle, we mean a quantum mechanical particle: a packet of energy and momentum that is not composed of smaller packets. We **do not** mean a classical point particle or Newtonian corpuscle, which is a zero-size object with definite position and velocity.

As it turns out, the energy of a photon depends only on the color of the light. As Einstein discovered the energy  $E$  and frequency  $\nu$  for a photon are related by

$$E = h\nu \tag{3.1}$$

The frequency of a photon determines the wavelength  $\lambda$  of the light through the relation  $\nu\lambda = c$ , where  $c$  is the speed of light. All green photons, for example, have the same energy. To increase the energy in a light beam while keeping the same color, one simply needs more photons.

As we now explain, the existence of photons implies that Quantum Mechanics is not deterministic. By this we mean that the result of an experiment cannot be determined, as it would in classical physics, by the conditions that are under the control of the experimenter.

Consider a polarizer whose preferential direction is aligned along the  $\hat{x}$  direction, as shown in Figure 1. Light that is linearly polarized along the  $\hat{x}$  direction namely, light whose electric field points in this direction, goes through the polarizer. If the incident light polarization is orthogonal to the  $\hat{x}$  direction the light will not go through at all. Thus light linearly polarized in the  $\hat{y}$  direction will be totally absorbed by the polarizer. Now consider light polarized along a direction forming an angle  $\alpha$  with the  $x$ -axis, as shown in Figure 2. What happens?

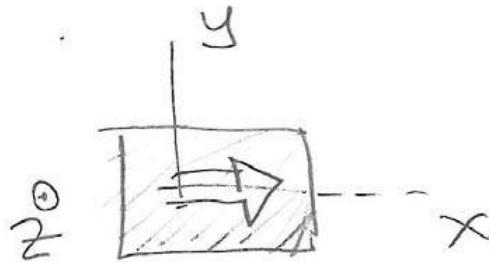


Figure 1: A polarizer that transmits light linearly polarized along the  $\hat{x}$  direction.

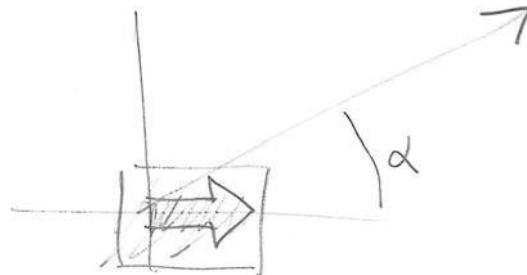


Figure 2: Light linearly polarized along the direction at an angle  $\alpha$  hitting the polarizer.

Thinking of the light as a propagating wave, the incident electric field  $\mathbf{E}_\alpha$  makes an angle  $\alpha$  with the  $x$ -axis and therefore takes the form

$$\mathbf{E}_\alpha = E_o \cos(\alpha) \hat{x} + E_o \sin(\alpha) \hat{y} \quad (3.2)$$

This is an electric field of magnitude  $E_o$ . In here we are ignoring the time and space dependence of the wave; they are not relevant to our discussion. When this electric field hits the polarizer, the component along  $\hat{x}$  goes through and the component along  $\hat{y}$  is absorbed. Thus

$$\text{Beyond the polarizer:} \quad \mathbf{E}_\alpha = E_o \cos(\alpha) \hat{x} \quad (3.3)$$

You probably recall that the energy in an electromagnetic wave is proportional to the square of the magnitude of the electric field. This means that the fraction of the beam's energy that goes through the polarizer is  $(\cos(\alpha))^2$ . It is also well known that the light emerging from the polarizer has the same *frequency* as the incident light.

So far so good. But now, let us try to understand this result by thinking about the photons that make up the incident light. The premise here is that all photons in the incident beam are identical. Moreover, the photons do not interact with each other. We could even imagine sending the whole energy of the incident light beam one photon at a time. Since all the light that emerges from the polarizer has the same frequency as the incident light, and thus the same frequency, we must conclude that each individual photon either goes through or is absorbed. If a fraction of a photon went through it would be a photon of lower energy and thus lower frequency, which is something that does not happen.

But now we have a problem. As we know from the wave analysis, roughly a fraction  $(\cos(\alpha))^2$  of the photons must go through, since that is the fraction of the energy that is transmitted. Consequently, a fraction  $1 - (\cos(\alpha))^2$  of the photons must be absorbed. But if all the photons are identical, why is it that what happens to one photon does not happen to all of them?

The answer in quantum mechanics is that there is indeed a loss of determinism. No one can predict if a photon will go through or will get absorbed. The best anyone can do is to predict probabilities. In this case there would be a probability  $(\cos(\alpha))^2$  of going through and a probability  $1 - (\cos(\alpha))^2$  of failing to go through.

Two escape routes suggest themselves. Perhaps the polarizer is not really a homogeneous object and depending exactly on where the photon hits it either gets absorbed or goes through. Experiments show this is not the case. A more intriguing possibility was suggested by Einstein and others. A possible way out, they claimed, was the existence of **hidden variables**. The photons, while apparently identical, would have other **hidden** properties, not currently understood, that would determine with certainty which photon goes through and which photon gets absorbed. Hidden variable theories would seem to be untestable, but surprisingly they can be tested. Through the work of John Bell and others, physicists have devised clever experiments that rule out most versions of hidden variable theories. No one has figured out how to restore determinism to quantum mechanics. It seems to be an impossible task.

When we try to describe photons quantum mechanically, we could use wavefunctions, or equivalently the language of states. A photon polarized along the **x** direction is not represented using an electric field, but rather we just give a name for its state:

$$|\mathbf{x}\rangle. \quad (3.4)$$

We will learn the rules needed to manipulate such objects, but for the time being you could think of it like a vector in some space yet to be defined. Another state of a photon, or vector is

$$|\mathbf{y}\rangle, \quad (3.5)$$

representing a photon polarized along **y**. These states are the wavefunctions that represent the photon. We now claim that the photons in the beam that is polarized along the direction  $\alpha$  are in a state  $|\alpha\rangle$  that can be written as a superposition of the above two states:

$$|\alpha\rangle = \cos(\alpha)|\mathbf{x}\rangle + \sin(\alpha)|\mathbf{y}\rangle. \quad (3.6)$$

This equation should be compared with (3.2). While there are some similarities –both are superpositions– one refers to electric fields and the other to “states” of a single photon. Any

photon that emerges from the polarizer will necessarily be polarized in the **x** direction and therefore it will be in the state

$$\text{Beyond the polarizer: } |\mathbf{x}\rangle. \quad (3.7)$$

This can be compared with (3.3) which with the factor  $\cos \alpha$  carries information about the amplitude of the wave. Here, for a single photon, there is no room for such a factor.

In the famous Fifth Solvay International Conference of 1927 the world's most notable physicists gathered to discuss the newly formulated quantum theory. Seventeen out of the twenty nine attendees were or became Nobel Prize winners. Einstein, unhappy with the uncertainty in quantum mechanics stated the nowadays famous quote: "God does not play dice", to which Niels Bohr is said to have answered: "Einstein, stop telling God what to do." Bohr was willing to accept the loss of determinism, Einstein was not.

## Quantum Superpositions

We have already discussed the concept of linearity; the idea that the sum of two solutions representing physical realities represents a new, allowed, physical reality. This superposition of solutions has a straightforward meaning in classical physics. In the case of electromagnetism, for example, if we have two solutions, each with its own electric and magnetic field, the "sum" solution is simply understood: its electric field is the sum of the electric fields of the two solutions and its magnetic field is the sum of the magnetic fields of the two solutions. In quantum mechanics, as we have explained, linearity holds. The interpretation of a superposition, however, is very surprising.

One interesting example is provided by a Mach-Zehnder interferometer; an arrangement of beam splitters, mirrors, and detectors used by Ernst Mach and Ludwig Zehnder in the 1890's to study interference between two beams of light.

A beam splitter, as its name indicates, splits an incident beam into two beams, one that is reflected from the splitter and one that goes through the splitter. Our beam-splitters will be balanced: they split a given beam into two beams of equal intensity (Figure 3). The light that bounces off is called the reflected beam, the light that goes through is called the transmitted beam. The incident beam can hit the beam splitter from the top or from the bottom.

The Mach-Zehnder configuration, shown in Figure 4, has a left beam splitter (BS1) and a right beam splitter (BS2). In between we have the two mirrors, M1 on the top and M2 on the bottom. An incoming beam from the left is split by BS1 into two beams, each of which hits a mirror and is then sent into BS2. At BS2 the beams are recombined and sent into two outgoing beams that go into photon detectors D0 and D1.

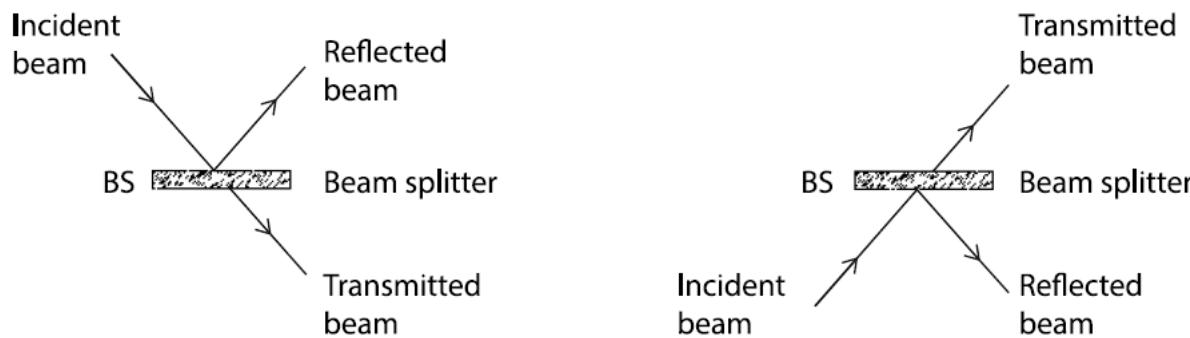


Figure 3: An incident beam hitting a beam-splitter results in a reflected beam and a transmitted beam. Left: incident beam coming from the top. Right: incident beam coming from the bottom.

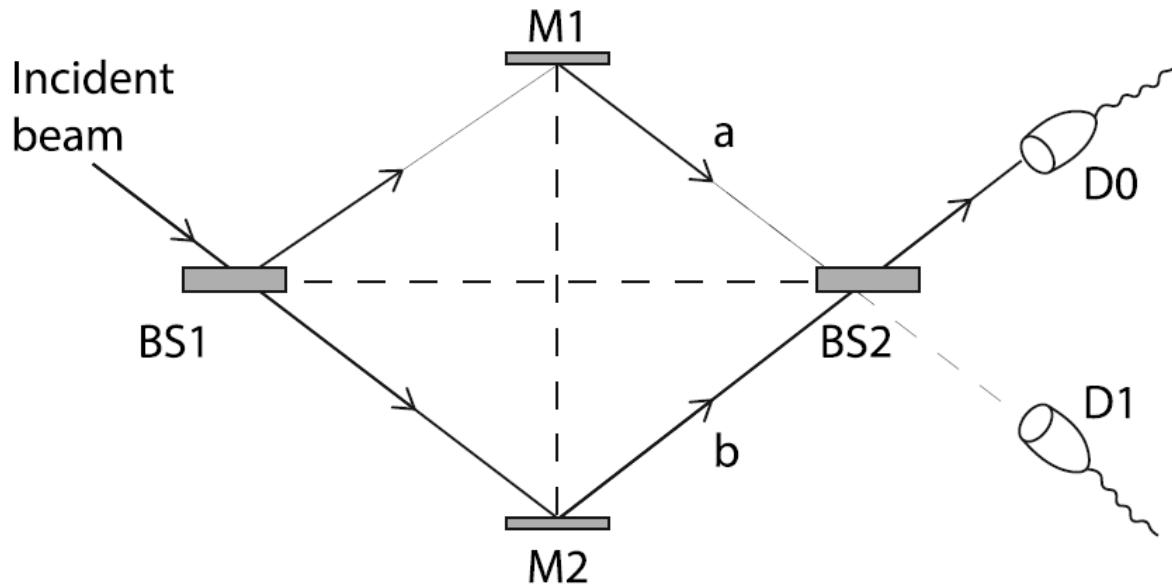


Figure 4: A Mach-Zehnder interferometer consists of two beam splitters BS1 and BS2, two mirrors M1 and M2, and two detectors Do and D1. An incident beam will be split into two beams by BS1. One beam goes through the upper branch, which contains M1, the other beam goes through the lower branch, which contains M2. The beams on the two branches recombine at BS2 and are then sent into the detectors. The configuration is prepared to produce an interference so that all incident photons end at the detector Do, with none at D1.

It is relatively simple to arrange the beam-splitters so that the incoming beam, upon splitting at BS1 and recombination at BS2 emerges in the top beam which goes into Do. In this arrangement no light at all goes into D1. This requires a precise interference effect at BS2. Note that we have two beams incident upon BS2; the top beam is called ‘a’ and the lower beam is called ‘b’. Two contributions go towards Do: the reflection of ‘a’ at BS2 and the transmission from ‘b’ at BS2. These two contributions interfere constructively to give a beam going into Do. Two contributions also go towards D1: the transmission from ‘a’ at BS2 and the reflection from ‘b’ at BS2. These two can indeed be arranged to interfere destructively to give no beam going into D1.

It is instructive to think of the incoming beam as a sequence of photons that we send into the interferometer, one photon at a time. This shows that, at the level of photons, the interference is not interference of one photon with another photon. Each photon must interfere with **itself** to give the result. Indeed, interference between two photons is not possible: destructive interference, for example, would require that two photons end up giving no photon, which is impossible by energy conservation.

Therefore, each photon does the very strange thing of going through both branches of the interferometer! Each photon is in a superposition of two states: a state in which the photon is in the top beam or upper branch, added to a state in which the photon is in the bottom beam or lower branch. Thus the state of the photon in the interferometer is a funny state in which the photon seems to be doing two incompatible things at the same time.

Equation (3.6) is another example of a quantum superposition. The photon state has a component along an  $x$ -polarized photon and a component along a  $y$ -polarized photon.

When we speak of a wavefunction, we also sometimes call it a state, because the wavefunction specifies the “state” of our quantum system. We also sometimes refer to states as vectors. A quantum state may not be a vector like the familiar vectors in three-dimensional space but it is a vector nonetheless because it makes sense to add states and to multiply states by numbers. Just like vectors can be added, linearity guarantees that adding wavefunctions or states is a sensible thing to do. Just like any vector can be written as a sum of other vectors in many different ways, we will do the same with our states. By writing our physical state as sums of other states we can learn about the properties of our state.

Consider now two states  $|A\rangle$  and  $|B\rangle$ . Assume, in addition, that when measuring some property  $Q$  in the state  $|A\rangle$  the answer is always  $a$ , and when measuring the same property  $Q$  in the state  $|B\rangle$  the answer is always  $b$ . Suppose now that our physical state  $|\Psi\rangle$  is the superposition

$$|\Psi\rangle = \alpha|A\rangle + \beta|B\rangle, \quad (4.1)$$

What happens now if we measure property  $Q$  in the system described by the state  $|\Psi\rangle$ ? It may seem reasonable that one gets some intermediate value between  $a$  and  $b$ , but this is not what happens. A measurement of  $Q$  will yield either  $a$  or  $b$ . There is no certain answer, classical determinism is lost, but the answer is always one of these two values and not an intermediate one. The coefficients  $\alpha$  and  $\beta$  in the above superposition affect the probabilities with which we may obtain the two possible values. In fact, the probabilities to obtain  $a$  or  $b$

$$\text{Probability}(a) \sim |\alpha|^2, \quad \text{Probability}(b) \sim |\beta|^2. \quad (4.2)$$

Since the only two possibilities are to measure  $a$  or  $b$ , the actual probabilities must sum to one and therefore they are given by

$$\text{Probability}(a) \sim \frac{|\alpha|^2}{|\alpha|^2 + |\beta|^2}, \quad \text{Probability}(b) \sim \frac{|\beta|^2}{|\alpha|^2 + |\beta|^2}. \quad (4.3)$$

If we obtain the value  $a$ , immediate repeated measurements would still give  $a$ , so the state after the measurement must be  $|A\rangle$ . The same happens for  $b$ , so we have

$$\begin{aligned} &\text{After measuring } a \text{ the state becomes } |\Psi\rangle = |A\rangle \\ &\text{After measuring } a \text{ the state becomes } |\Psi\rangle = |B\rangle \end{aligned} \quad (4.4)$$

In quantum mechanics one makes the following assumption: ***Superposing a state with itself doesn't change the physics***, nor does it change the state in a non-trivial way. Since superimposing a state with itself simply changes the overall number multiplying it, we have that  $\Psi$  and  $\alpha\Psi$  represent the same physics for any complex number  $\alpha$  different from zero. Thus, letting  $\cong$  represent physical equivalence

$$|A\rangle \cong 2|A\rangle \cong i|A\rangle \cong -|A\rangle \quad (4.5)$$

This assumption is necessary to verify that the polarization of a photon state has the expected number of degrees of freedom. The polarization of a plane wave, as one studies in electromagnetism, is described by two real numbers. For this consider an elliptically polarized wave, as shown in Figure 5. At any given point, the electric field vector traces an ellipse whose shape is encoded by the ratio  $a/b$  of the semi-major axes (the first real parameter) and a tilt encoded by the angle  $\theta$  (the second real parameter). Consider for this a general photon state formed by superposition of the two independent polarization states  $|\text{photon; x}\rangle$  and  $|\text{photon; y}\rangle$ :

$$\alpha|\text{x}\rangle + \beta|\text{y}\rangle, \quad \alpha, \beta \in \mathbb{C} \quad (4.6)$$

At first sight it looks as if we have two complex parameters  $\alpha$  and  $\beta$ , or equivalently, four real parameters. But since the overall factor does not matter we can multiply this state by  $1/\alpha$  to get the equivalent state that encodes all the physics

$$|\text{x}\rangle + \frac{\beta}{\alpha}|\text{y}\rangle, \quad (4.7)$$

showing that we really have one complex parameter, the ratio  $\beta/\alpha$ . This is equivalent to two real parameters, as expected.

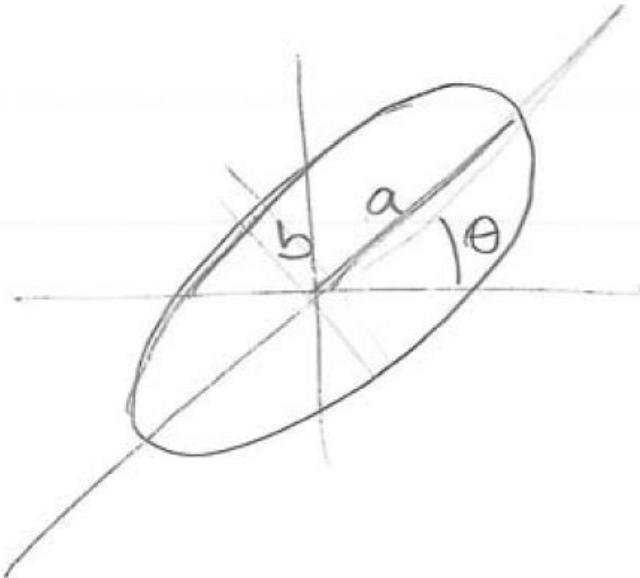


Figure 5: Parameters that define an elliptically polarized state.

Let us do a further example of superposition using electrons. Electrons are particles with spin. Classically, we imagine them as tiny balls spinning around an axis that goes through the particle itself. Once an axis is fixed, the electron has two and only two options: its rotation may be clockwise or counterclockwise about the axis, but in both cases, it spins at the same fixed rate. These opposite ways of spinning are called **spin up** and **spin down** along the axis (see Figure 6). The up and down refer to the direction of the angular momentum associated with the rotation, and it is indicated by an arrow. According to quantum mechanics, and as verified by multiple experiments, the same possibilities, up or down, arise **whatever** axis we use to measure the spin of the electron.

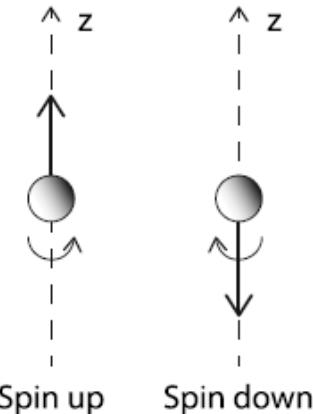


Figure 6: An electron with spin along the  $z$  axis. Left: the electron is said to have spin up along  $z$ . Right: the electron is said to have spin down along  $z$ . The up and down arrows represent the direction of the angular momentum associated with the spinning electron.

Physicists usually set up coordinate systems in space by choosing three orthogonal directions, the directions of the  $x$ ,  $y$ , and  $z$  axes. Let us choose to describe our spinning electrons using the  $z$  axis. One possible state of an electron is to be spin up along the  $z$  axis. Such a state is described as  $|\uparrow; z\rangle$ , with an arrow pointing up, and the label  $z$  indicating that the spin arrow points along the increasing  $z$  direction. Another possible state of an electron is spin down along the  $z$  axis. Such a state is described as  $|\downarrow; z\rangle$ , with an arrow pointing down, meaning this time that the spin points along the decreasing  $z$  direction. If these two are possible realities, so it would be the state  $|\Psi\rangle$  representing the sum

$$|\Psi\rangle = |\uparrow; z\rangle + |\downarrow; z\rangle.$$

The state  $|\Psi\rangle$  is in a superposition of a spin up and a spin down state. What kind of physics does this sum  $|\Psi\rangle$  represent? It represents a state in which a measurement of the spin along the  $z$  axis would result in two possible outcomes with equal probabilities: an electron with spin up or an electron with spin down. Since we can only speak of probabilities, any experiment must involve repetition until probabilities can be determined. Suppose we had a large ensemble of such electrons, all of them in the above state  $|\Psi\rangle$ . As we measured their spin along  $z$ , one at a time, we would find about half of them spinning up along  $z$  and the other half spinning down along  $z$ . There is no way to predict which option will be realized as we measure each electron. It is not easy to imagine superposition, but one may try as follows. An electron in the above state is in a different kind of existence in which it is able to both be spinning up along  $z$  and spinning down along  $z$  simultaneously! It is in such a ghostly, eerie state, doing incompatible things simultaneously, until its spin is measured. Once measured, the electron must immediately choose one of the two options; we always find electrons either spinning up or spinning down.

A critic of quantum mechanics could suggest a simpler explanation for the above observations. He or she would claim that the following simpler ensemble results in identical experimental results. In the critic's ensemble we have a large number of electrons with 50% of them in the state  $|\uparrow; z\rangle$  and 50% of them in the state  $|\downarrow; z\rangle$ . He or she would then state, correctly, that such an ensemble would yield the same measurements of spins along  $z$  as the ensemble of those esoteric  $|\Psi\rangle$  states. The new ensemble could provide a simpler explanation of the result without having to invoke quantum superpositions. Quantum mechanics, however, allows for

further experiments that can distinguish between the ensemble of our friendly critic and the ensemble of  $|\Psi\rangle$  states.

[Рассказать про коллапс функции.](#)

Повторим основные тезисы:

1. Экспериментально показана принципиальная недетерминированность результатов квантово-механических измерений. Квантовая механика — теория, которая описывает данные результаты и позволяет предсказывать результаты экспериментов в смысле вероятности измерения той или иной величины.

2. Система к квантовой механике описывается так называемым "состоянием". Задание состояния определяет результаты измерений величин в эксперименте над такой системой (опять, в смысле вероятности, конечно)

3. Суперпозиция (сумма) состояний  $c_1|A\rangle + c_2|B\rangle$  является состоянием, в котором система находится одновременно в состоянии  $|A\rangle$  и  $|B\rangle$ . Квадраты модулей коэффициентов определяют вероятности в результате измерения найти систему в состоянии  $|A\rangle$  или  $|B\rangle$ . Сами коэффициенты называются амплитудами вероятности, т.к. по аналогии с электромагнитными волнами, интенсивность (=вероятность) определяется квадратом амплитуды. Слово "одновременно" тут имеет следующий смысл: в результате эксперимента случайно вы получаете либо величину, соответствующую состоянию  $|A\rangle$ , либо  $|B\rangle$ . Причём случайность принципиальная — нет какого-либо параметра, знание которого позволило бы точно предсказать результат эксперимента.

4. При измерении система из суперпозиции элементарных состояний переходит в состояние с точно известным значением измеряемого параметра:  $c_1|A\rangle + c_2|B\rangle \rightarrow |A\rangle$ . Этот процесс называется коллапсом.

### **Entanglement. Запутанные состояния.**

When we consider superposition of states of two particles, we can get the remarkable phenomenon called **quantum mechanical entanglement**. Entangled states of two particles are those in which we can't speak separately of the state of each particle. The particles are bound together in a common state in which they are **entangled** with each other.

Let us consider two non-interacting particles. Particle 1 could be in any of the states

$$\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, \dots\}, \quad (5.1)$$

while particle 2 could be in any of the states

$$\{|v_1\rangle, |v_2\rangle, \dots\} \quad (5.2)$$

It may seem reasonable to conclude that the state of the full system, including particle 1 and particle 2 would be specified by stating the state of particle 1 and the state of particle 2. If that would be the case the possible states would be written as

$$|u_i\rangle \otimes |v_j\rangle, \quad i, j \in \mathbb{N}, \quad (5.3)$$

for some specific choice of  $i$  and  $j$  that specify the state of particle one and particle two, respectively. Here we have used the symbol  $\otimes$ , which means tensor product, to combine the two states into a single state for the whole system. We will study  $\otimes$  later, but for the time being we can think of it as a kind of product that distributes over addition and obeys simple rules, as follows

$$(\alpha_1|u_1\rangle + \alpha_2|u_2\rangle) \otimes (\beta_1|v_1\rangle + \beta_2|v_2\rangle) = \alpha_1\beta_1|u_1\rangle \otimes |v_1\rangle + \alpha_1\beta_2|u_1\rangle \otimes |v_2\rangle + \\ + \alpha_2\beta_1|u_2\rangle \otimes |v_1\rangle + \alpha_2\beta_2|u_2\rangle \otimes |v_2\rangle \quad (5.4).$$

The numbers can be moved across the  $\otimes$  but the order of the states must be preserved. The state on the left-hand side –expanded out on the right-hand side– is still of the type where we combine a state of the first particle ( $\alpha_1|u_1\rangle + \alpha_2|u_2\rangle$ ) with a state of the second particle ( $\beta_1|v_1\rangle + \beta_2|v_2\rangle$ ). Just like any one of the states listed in (5.3) this state is not entangled.

Using the states in (5.3), however, we can construct more intriguing superpositions. Consider the following one

$$|u_1\rangle \otimes |v_1\rangle + |u_2\rangle \otimes |v_2\rangle. \quad (5.5)$$

A state of two particles is said to be entangled if it cannot be written in the factorized form  $(\cdot \cdot) \otimes (\cdot \cdot)$  which allows us to describe the state by simply stating the state of each particle. We can easily see that the state (5.5) cannot be factorized. If it could it would have to be with a product as indicated in (5.4). Clearly, involving states like  $|u_3\rangle$  or  $|v_3\rangle$  that do not appear in (5.5) would not help. To determine the constants  $\alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2$  we compare the right hand side of (5.4) with our state and conclude that we need

$$\alpha_1\beta_1 = 1, \quad \alpha_1\beta_2 = 0, \quad \alpha_2\beta_1 = 0, \quad \alpha_2\beta_2 = 1. \quad (5.6)$$

It is clear that there is no solution here. The second equation, for example, requires either  $\alpha_1$  or  $\beta_2$  to be zero. Having  $\alpha_1 = 0$  contradicts the first equation, and having  $\beta_2 = 0$  contradicts the last equation. This confirms that the state (5.5) is indeed an entangled state. There is no way to describe the state by specifying a state for each of the particles.

Let us illustrate the above discussion using electrons and their spin states. Consider a state of two electrons denoted as  $|\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle$ . As the notation indicates, the first electron, described by the first arrow, is up along  $z$  while the second electron, described by the second arrow, is down along  $z$  (we omit the label  $z$  on the state for brevity). This is not an entangled state. Another possible state is one where they are doing exactly the opposite: in  $|\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle$  the first electron is down and the second is up. This second state is also not entangled. It now follows that by superposition we can consider the state

$$|\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle + |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle. \quad (5.7)$$

This is an entangled state of the pair of electrons.

In the state (5.7) the first electron is up along  $z$  if the second electron is down along  $z$  (first term), or the first electron is down along  $z$  if the second electron is up along  $z$  (second term). There is a correlation between the spins of the two particles; they always point in opposite directions. Imagine that the two entangled electrons are very far away from each other: Alice has one electron of the pair on planet earth and Bob has the other electron on the moon. Nothing we know is connecting these particles but nevertheless the states of the electrons are linked. Measurements we do on the separate particles exhibit correlations. Suppose Alice measures the spin of the electron on earth. If she finds it up along  $z$ , it means that the first summand in the above superposition is realized, because in that summand the first particle is up. As discussed before, the state of the two particles immediately becomes that of the first summand. This means that the electron on the moon will **instantaneously** go into the spin down-along- $z$  configuration, something that could be confirmed by Bob, who is sitting in the moon with that particle in his lab. This effect on Bob's electron happens before a message, carried with the speed of light, could reach the moon telling him that a measurement has been done by Alice on the earth particle and the result was spin up. Of course, experiments must be done with an ensemble that contains many pairs of particles, each pair in the same entangled state above. Half of the times the electron on earth will be found up, with the electron on the moon down and the other half of the times the electron on earth will be found down, with the electron on the moon up.

Our friendly critic could now say, correctly, that such correlations between the measurements of spins along  $z$  could have been produced by preparing a **conventional** ensemble in which 50% of the pairs are in the state  $|\uparrow\rangle\otimes|\downarrow\rangle$  and the other 50% of the pairs are in the state  $|\downarrow\rangle\otimes|\uparrow\rangle$ . Such objections were dealt with conclusively in 1964 by John Bell, who showed that if Alice and Bob are able to measure spin in **three** arbitrary directions, the correlations predicted by the quantum entangled state are different from the classical correlations of **any** conceivable conventional ensemble. Quantum correlations in entangled states are very subtle and it takes sophisticated experiments to show they are not reproducible as classical correlations. Indeed, experiments with entangled states have confirmed the existence of quantum correlations. The kind of instantaneous action at a distance associated with measurements on well-separated entangled particles does not lead to paradoxes nor, as it may seem, to contradictions with the ideas of special relativity. You cannot use quantum mechanical entangled states to send information faster than the speed of light.

(Может не хватить на одну лекцию, стоит добавить часть интерферометра Маха-Зендера из следующей лекции)

## ЛЕКЦИЯ 3.

### Mach-Zehnder Interferometer. Интерферометр Маха-Зендера.

We have discussed before the Mach-Zehnder interferometer, which we show again in Figure 1. It contains two beam-splitters BS1 and BS2 and two mirrors. Inside the interferometer we have two beams, one going over the upper branch and one going over the lower branch. This extends beyond BS2: the upper branch continues to D0 while the lower branch continues to D1.

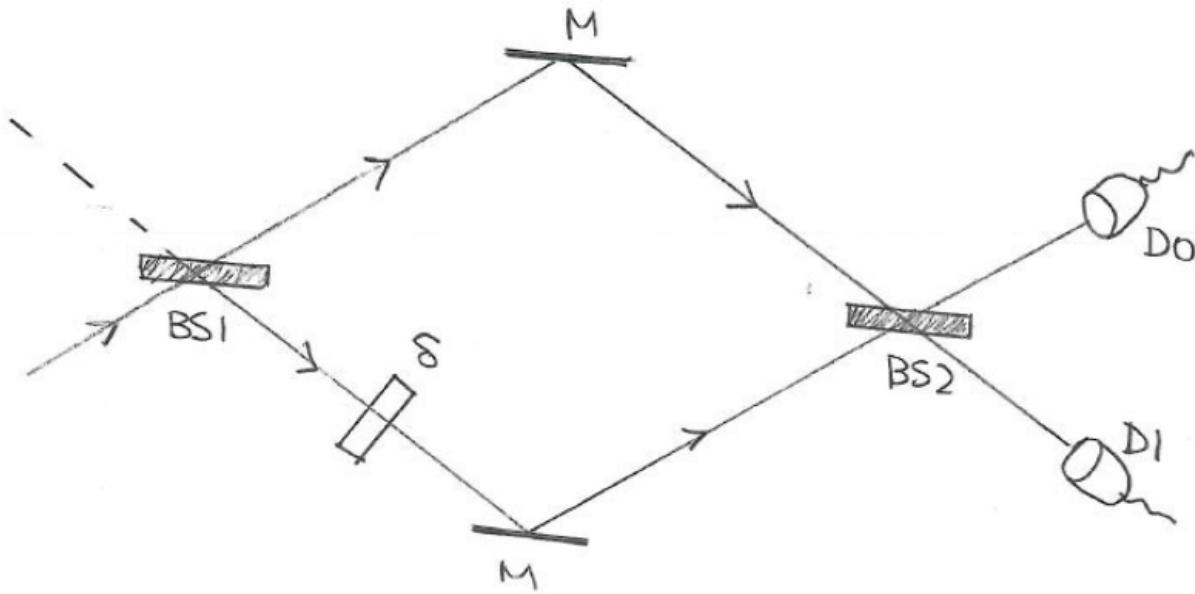


Figure 1: The Mach-Zehnder Interferometer

Vertical cuts in the above figure intersect the two beams and we can ask what is the probability to find a photon in each of the two beams at that cut. For this we need two probability **amplitudes**, or two complex numbers, whose norm-squared would give probabilities. We can encode this information in a two component vector as

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}. \quad (1.1)$$

Here  $\alpha$  is the probability amplitude to be in the upper beam and  $\beta$  the probability amplitude to be in the lower beam. Therefore,  $|\alpha|^2$  would be the probability to find the photon in the upper beam and  $|\beta|^2$  the probability to find the photon in the lower beam. Since the photon must be found in either one of the beams we must have

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1. \quad (1.2)$$

Following this notation, we would have for the cases when the photon is definitely in one or the other beam:

$$\text{photon on upper beam: } \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \text{photon on bottom beam: } \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (1.3)$$

We can view the state (1.1) as a superposition of these two simpler states using the rules of vector addition and multiplication:

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ \beta \end{pmatrix} = \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (1.4)$$

In the interferometer shown in Figure 1 we included in the lower branch a ‘phase shifter’, a piece of material whose only effect is to multiply the probability amplitude by a fixed phase  $e^{i\delta}$  with  $\delta \in \mathbb{R}$ . As shown in Figure 2, the probability amplitude  $\alpha$  to the left of the device becomes  $\alpha e^{i\delta}$  to the right of the device. Since the norm of a phase is one, the phase-shifter does not change the probability to find the photon. When the phase  $\delta$  is equal to  $\pi$  the effect of the phase shifter is to change the sign of the wavefunction since  $e^{i\pi} = -1$ .

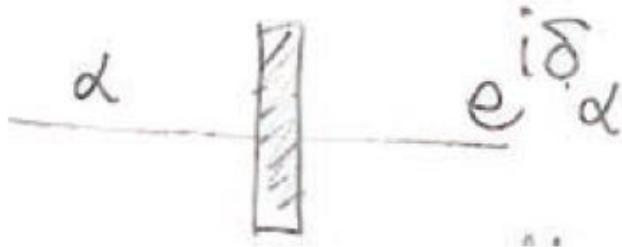


Figure 2: A phase shifter of phase factor  $e^{i\delta}$ . The amplitude gets multiplied by the phase.

Let us now consider the effect of beam splitters in detail. If the incoming photon hits a beam-splitter from the top, we consider this photon to belong to the upper branch and represent it by  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ . If the incoming photon hits the beam-splitter from the bottom, we consider this photon to belong to the lower branch, and represent it by  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ . We show the two cases in Figure 3. The effect of the beam splitter is to give an output wavefunction for each of the two cases:

$$\text{Left BS: } \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} s \\ t \end{pmatrix}, \quad \text{Right BS: } \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \quad (1.5)$$

As you can see from the diagram, for the photon hitting from above,  $s$  may be thought as a reflection amplitude and  $t$  as a transmission coefficient. Similarly, for the photon hitting from below,  $v$  may be thought as a reflection amplitude and  $u$  as a transmission coefficient. The four numbers  $s, t, u, v$ , by linearity, characterize completely the beam splitter. They can be used to

predict the output given any incident photon, which may have amplitudes to hit both from above and from below. Indeed, an incident photon state  $\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$  would give

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \rightarrow \alpha \begin{pmatrix} s \\ t \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \alpha s + \beta u \\ \alpha t + \beta v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s & u \\ t & v \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad (1.6)$$

In summary, we see that the BS produces the following effect

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} s & u \\ t & v \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}. \quad (1.7)$$

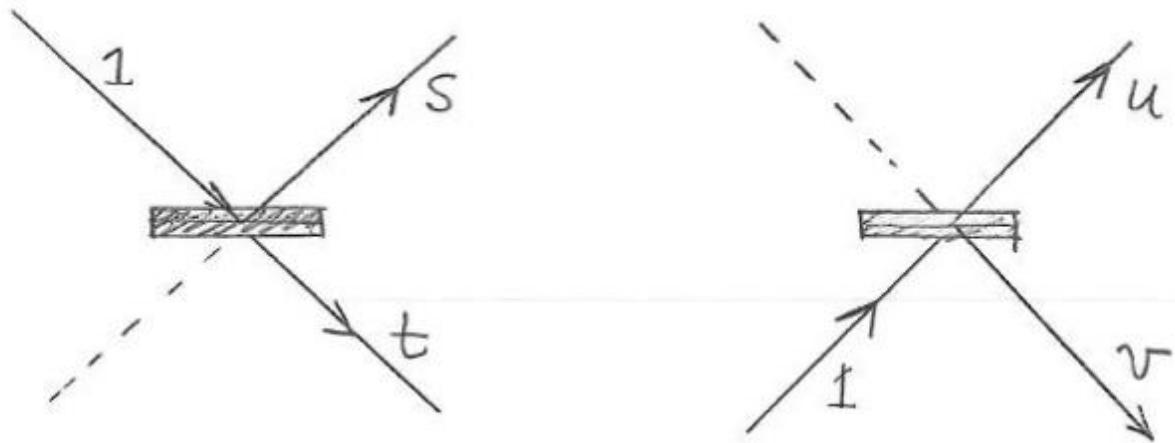


Figure 3: Left: A photon incident from the top;  $s$  and  $t$  are the reflected and transmitted amplitudes, respectively. Right: A photon incident from the bottom;  $v$  and  $u$  are the reflected and transmitted amplitudes, respectively.

We can represent the action of the beam splitter as matrix multiplication on the incoming wavefunction, with the two-by-two matrix

$$\begin{pmatrix} s & u \\ t & v \end{pmatrix} \quad (1.8)$$

We must now figure out the constraints on  $s, t, u, v$ . Because probabilities must add up to one, equation (1.5) implies that

$$|s|^2 + |t|^2 = 1, \quad (1.9)$$

$$|u|^2 + |v|^2 = 1. \quad (1.10)$$

The kind of beam splitters we use are called balanced, which means that reflection and transmission probabilities are the same. So, all four constants must have equal norm-squared:

$$|s|^2 = |t|^2 = |u|^2 = |v|^2 = \frac{1}{2}. \quad (1.11)$$

Let's try a guess for the values. Could we have

$$\begin{pmatrix} s & u \\ t & v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad (1.12)$$

This fails if acting on normalized wavefunctions (or column vectors) does not yield normalized wavefunctions. So, we try with a couple of wavefunctions

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (1.13)$$

While the first example works out, the second does not, as  $|1|^2 + |1|^2 = 2 \neq 1$ . An easy fix is achieved by changing the sign of  $v$ :

$$\begin{pmatrix} s & u \\ t & v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.14)$$

Let's check that this matrix works in general. Thus, acting on a state  $\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$  with  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$  we find

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \alpha + \beta \\ \alpha - \beta \end{pmatrix}. \quad (1.15)$$

Indeed, the resulting state is well normalized. The total probability is what we expect

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} |\alpha + \beta|^2 + \frac{1}{2} |\alpha - \beta|^2 &= \frac{1}{2} (|\alpha|^2 + |\beta|^2 + \alpha\beta^* + \alpha^*\beta) + \frac{1}{2} (|\alpha|^2 + |\beta|^2 - \alpha\beta^* - \alpha^*\beta) = \\ &= |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \end{aligned} \quad (1.16)$$

The minus sign in the bottom right entry of (1.14) means that a photon incident from below, as it is reflected, will have its amplitude changed by a sign or equivalently a phase shift by  $\pi$  (check this!). This effect, of course, is realized in practice. A typical beam splitter consists of a glass plate with a reflective dielectric coating on one side. The refractive index of the coating is chosen to be intermediate between that of glass and that of air. A reflection causes a phase shift only when light encounters a material of higher refractive index. This is the case in the transition of air to coating, but not in the transition from glass to coating. Thus, the beam splitter represented by (1.14) would have its coating on the bottom side. Transmitted waves have no phase shift.

Another possibility for a beam splitter matrix is

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (1.17)$$

which would be realized by a dielectric coating on the top side. You can quickly check that, like the previous matrix, its action also conserves probability. We will call the left beam-splitter BS1 and the right beam splitter BS2 and their respective matrices will be

$$\text{BS1: } \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad \text{BS2: } \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad (1.18)$$

The two beam splitters are combined to form the interferometer shown in Figure 4. If we now assume an input photon wavefunction  $\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$  from the left, the output wavefunction that goes into the detectors is obtained by acting first with the BS1 matrix and then with the BS2 matrix:

$$\text{input: } \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad \text{output: } \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ -2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta \\ -\alpha \end{pmatrix} \quad (1.19)$$

With the help of this result, for any input photon state we can write immediately the output photon state that goes into the detectors.

If the input photon beam is  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ , the output from the interferometer is  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ , and therefore a photon will be detected at D0. This is shown in Figure 5. We can make a very simple table with the possible outcomes and their respective probabilities P:

Outcome	P
photon at D0	1
photon at D1	0

(1.20)

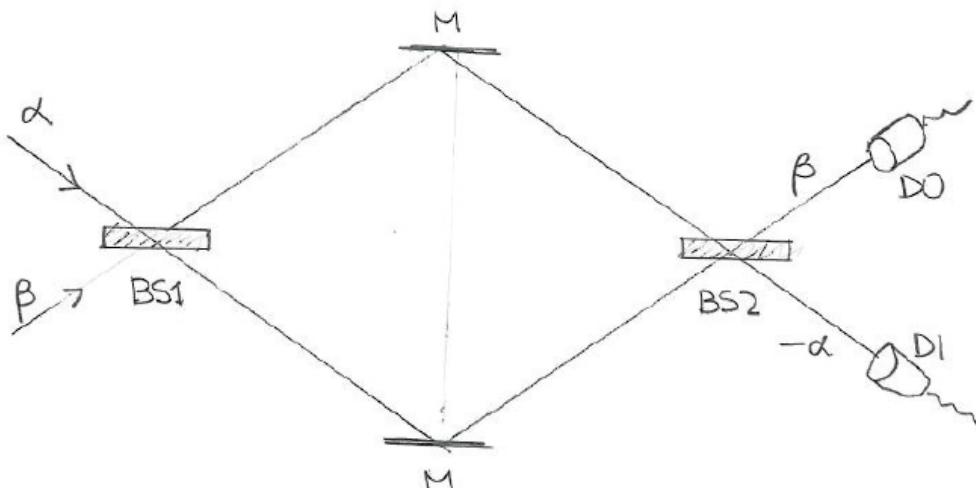


Figure 4: The Mach-Zehnder interferometer with input and output wavefunctions indicated.

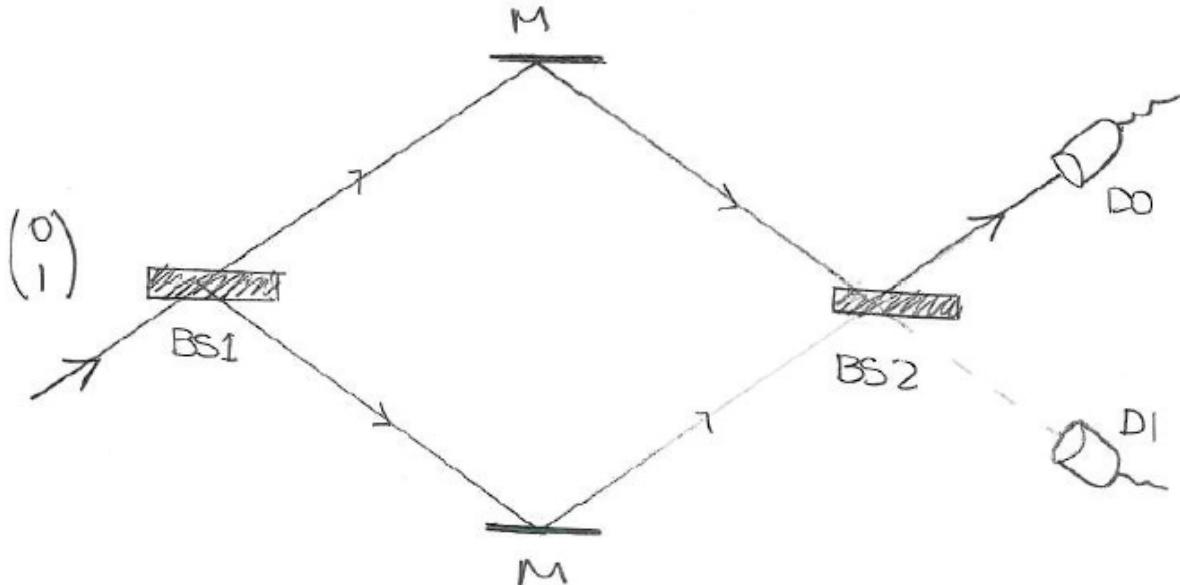


Figure 5: Incident photon from below will go into Do.

**ДЗ:** Записать матрицу, соответствующую (i) зеркалу; (ii) препятствию, блокирующему нижний луч; (iii) фазовой пластине, которая меняет фазу нижнего луча.

Now, block the lower path, as indicated in Figure 6. What happens then? It is best to track down things systematically. The input beam, acted by BS1 gives

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (1.21)$$

This is indicated in the figure, to the right of BS1. Then the lower branch is stopped, while the upper branch continues. The upper branch reaches BS2, and here the input is  $\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{pmatrix}$ , because nothing is coming from the lower branch. We therefore get an output

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (1.22)$$

In this experiment there are three possible outcomes: the photon can be absorbed by the block, or can go into any of the two detectors. As we see in the diagram, the probabilities are

Outcome	P
photon at block	$\frac{1}{2}$
photon at Do	$\frac{1}{4}$
photon at D1	$\frac{1}{4}$

(1.23)

It is noteworthy that before blocking the lower path we could not get a photon to D1. The probability to reach D1 is now  $1/4$  and was increased by blocking a path.

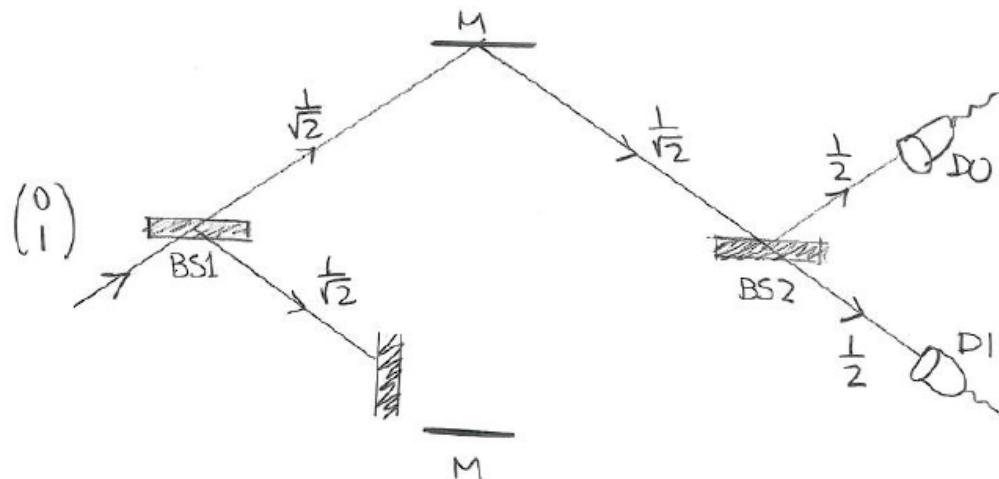


Figure 6: The probability to detect the photon at D1 can be changed by blocking one of the paths.

### Elitzur-Vaidman bomb-tester

Для общего понимания стоит начать так. Можно настроить интерферометр так, чтобы луч пущенный снизу всегда приходил в верхний детектор (этот случай мы ранее рассматривали). Теперь поставим препятствие. Это приведёт к тому, что фотон в половине случаев (= половина луча) поглотиться препятствием. Другая половина пройдёт, и на втором полупроницаемом зеркале луч разделится на две части (для фотона = вероятность пройти или отразиться будут равны). Таким образом в четверти всех случаев мы увидим фотон в нижнем детекторе. Но если мы его увидели, то он прошёл по верхнему пути, ничего не зная о препятствии! Таким образом мы получаем информацию о препятствии, не взаимодействуя с ним.

To see that allowing the photon to reach D1 by blocking a path is very strange, we consider an imaginary situation proposed by physicists Avshalom Elitzur and Lev Vaidman, from Tel-Aviv University, in Israel. They imagined bombs with a special type of trigger: a photon detector. A narrow tube goes across each bomb and in the middle of the tube there is a photon detector. To detonate the bomb, one sends a photon into the tube. The photon is then detected by the photon detector and the bomb explodes. If the photon detector is defective, however, the photon is not detected at all. It propagates freely through the tube and comes out of the bomb. The bomb does not explode.

Here is the situation we want to address. Suppose we have a number of Elitzur-Vaidman (EV) bombs, but we know that some of them have become defective. How could we tell if a bomb is operational without detonating it? Assume, for the sake of the problem, that we are unable to examine the detector without destroying the bomb.

We seem to be facing an impossible situation. If we send a photon into the detector tube and nothing happens, we know the bomb is defective, but if the bomb is operational it would simply explode. It seems impossible to confirm that the photon detector in the bomb is working without testing it. Indeed, it is impossible in classical physics. It is not impossible in quantum mechanics, however. As we will see, we can perform what can be called an interaction-free measurement!

We now place an EV bomb on the lower path of the interferometer, with the detector tube properly aligned. Suppose we send in a photon as pictured. If the bomb is defective it is as if there is no detector, the lower branch of the interferometer is free and all the photons that we send in will end up in  $D_0$ , just as they did in Figure 5.

Outcome	P
photon at $D_0$ no explosion	1
photon at $D_1$ no explosion	0
Bomb explodes	0

(2.24)

If the bomb is working, on the other hand, we have the situation we had in Figure 6, where we placed a block in the lower branch of the interferometer:

Outcome	P
photon at $D_0$ no explosion	$\frac{1}{4}$
photon at $D_1$ no explosion	$\frac{1}{4}$
Bomb explodes	$\frac{1}{2}$

(2.25)

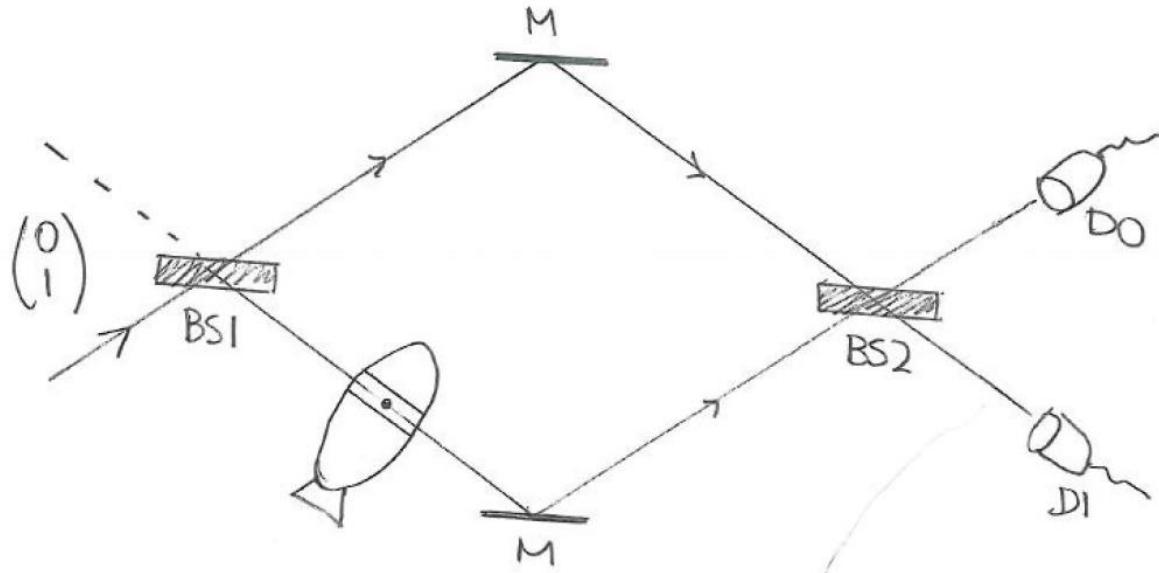


Figure 7: A Mach-Zehnder interferometer and an Elitzur-Vaidman bomb inserted on the lower branch, with the detector tube properly aligned. If the bomb is faulty all incident photons will end up at  $D_0$ . If a photon ends up at  $D_1$  we know that the bomb is operational, even though the photon never went into the bomb detector!

Assume the bomb is working. Then 50% of the times the photon will hit it and it will explode, 25% of the time the photon will end in  $D_0$  and we can't tell if it is defective or not. But 25% of the time the photon will end in  $D_1$ , and since this was impossible for a faulty bomb, we have learned that the bomb is operational! We have learned that even though the photon never made it

through the bomb; it ended on D1. If you think about this, you will surely realize it is extremely surprising and counterintuitive. But it is true, and experiments (without using bombs!) have confirmed that this kind of interaction-free measurement is indeed possible.

## Волны вещества

Предположим, что и вещество обладает аналогичными свойствами корпускулярно-волнового дуализма; подобно тому, как электромагнитная волна ассоциируется с фотоном, допустим, что каждой материальной частице сопоставлена волна, круговая частота которой  $\omega$  связана с энергией частицы  $E$  соотношением Эйнштейна  $E = \hbar\omega$ . Если принять эту точку зрения, то атом должен будет обладать свойствами резонирующей полости (резонатора) с дискретным рядом собственных частот; это позволит объяснить эффект квантования энергетических уровней атома.

При этом открывается возможность построить единую теорию, в которой вещество и излучение будут выступать как разновидности объектов одной природы, обладающих свойствами и волны, и корпускулы.

Основные свойства волн вещества получаются по аналогии с оптикой. Как и в случае фотонов, мы допускаем, что значение интенсивности ассоциированной волны в каждой точке пропорционально вероятности обнаружить частицу в этой точке. Частица будет локализованной в пространстве тем лучше, чем меньшую область в пространстве занимает волна. Условия справедливости классической механики реализуются тогда, когда в течение всего времени область локализации волны можно рассматривать как точку и приписать частице определенную траекторию движения. Аналогичная ситуация встречается в оптике, если длиной волны света можно пренебречь по сравнению с другими характерными длинами: это приближение геометрической оптики, когда волновые свойства не проявляются.

В 1924 г. Луи де Бройль выдвинул теорию, согласно которой каждой частице можно поставить волну, которая связана с импульсом частицы. Рассмотрим волновое движение в однородной и изотропной среде. Наиболее простым типом волны является плоская монохроматическая волна  $e^{i(kr-\omega t)}$  вида:

$$\psi(r, t) = \psi_0 e^{\frac{i(pr-Et)}{\hbar}} = \psi_0 e^{i(kr-\omega t)},$$

которая представляет колебание с длиной волны  $\lambda = \frac{2\pi}{k}$  распространяющееся в направлении волнового вектора  $k$  с постоянной скоростью. Скорость, о которой идет речь, есть скорость перемещения плоскости равной фазы, или фазовая скорость  $v_\phi = \frac{\omega}{k}$ .

Частота не зависит от направления вектора  $k$ , но, вообще говоря, может зависеть от абсолютной величины этого вектора. Поскольку всякая волна может рассматриваться как суперпозиция плоских монохроматических волн, знания «закона дисперсии»  $\omega(k)$  достаточно для исследования поведения любой волны с течением времени. Согласно гипотезе, каждая частота соответствует определенной энергии частицы

$$E = \hbar\omega.$$

Естественно поэтому сопоставить волну прямолинейному движению с энергией  $E$  в направлении  $k$ .

Подробнее рассмотрим волновую функцию  $\psi(q,t)$ , которая полностью описывает состояние системы. При этом квадрат модуля этой функции определяет распределение вероятностей значений координат. Иначе, значение  $|\psi(q,t)|^2 dq$  есть вероятность обнаружения значения координат в элементе объема  $dq$  конфигурационного пространства при произведенном над системой измерении. Очевидно, что сумма вероятностей всех возможных значений координат должна быть равна единице, то есть

$$\int |\psi(q,t)|^2 dq = 1.$$

Это равенство представляет собой условие нормировки волновых функций.

### **Волновой пакет. Групповая скорость.**

Изучение классического приближения позволит нам связать волновой вектор  $k$  с импульсом частицы  $p$ . Для этого следует сопоставить частице волну конечной протяженности. Однако плоская монохроматическая волна не удовлетворяет этому требованию, так как интеграл такой функции не сходится. Но ему можно удовлетворить, если воспользоваться суперпозицией волн с близкими волновыми векторами. Это значит, что следует рассмотреть волновой пакет

$$\psi(r,t) = \int f(k) e^{i(kr - \omega t)} dk.$$

Исследуем движение этого локализованного в  $k$ -пространстве волнового пакета. Запишем волновой пакет в следующем виде:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(k - k_0) e^{ikx - i\omega_k t} dk = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} f(k - k_0) e^{ikx - i\omega_k t} dk.$$

Разлагая частоту  $\omega_k$  в ряд по степеням  $k - k_0$ , получаем

$$\omega_k = \omega_{k_0} + \left( \frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0} (k - k_0) + \dots,$$

и вводя новую переменную  $\xi = k - k_0$ , находим

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_0 x - i\omega_{k_0} t} \int_{-\Delta k}^{\Delta k} f(\xi) e^{i\xi \left[ x - \left( \frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0} t \right]} d\xi.$$

Мы видим, что квадрат модуля функции в любой момент времени можно выразить через квадрат в начальный момент:

$$|\psi(x,t)|^2 = \left| \psi \left( x - \left( \frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0} \cdot t, 0 \right) \right|^2$$

Из этого видно, что волновая функция представляет собой некоторый профиль, движущийся равномерно со скоростью

$$v_g = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0},$$

которая называется групповой скоростью волны. Именно эта скорость, а не фазовая скорость, должна быть отождествлена со скоростью частицы в классическом приближении предельной локализации пакета:

$$v = \frac{dE}{dp} \quad (\approx \frac{p}{m} \text{ в нерелятивистском приближении}).$$

Из условия  $v=v_g$  и соотношения (2) находим соотношение де Бройля

$$p = \hbar k = \frac{h}{\lambda}.$$

Это рассуждение без труда обобщается на волновой пакет в трех измерениях: центр пакета равномерно перемещается со скоростью

$$v_g = \text{grad}_k \omega,$$

Причем групповая скорость должна быть отождествлена со скоростью частицы

$$v = \text{grad}_p E.$$

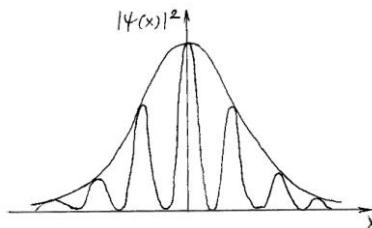
Последнее соотношение вместе с соотношением (2) позволяет найти связь между динамическими переменными частицы и величинами, характеризующими ассоциированную ей волну:

$$E = \hbar \omega, \quad p = \hbar k.$$

Если  $f(k)$  принять константой в заданном интервале, то интеграл можно взять, и мы получим:

$$\psi(x, t) = \frac{2A}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sin \left\{ \left[ x - \left( \frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0} t \right] \Delta k \right\}}{x - \left( \frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0} t} e^{ik_0 x - i\omega_{k_0} t} \equiv B(x, t) e^{ik_0 x - i\omega_{k_0} t}.$$

Функцию  $B(x, t)$  можно рассматривать как амплитуду почти монохроматической волны, а  $k_0 x - \omega_{k_0} t$  – как ее фазу. Вид функции  $\psi(x, t)$  показан на рис. 1.1. Своего наибольшего значения амплитуда  $B(x, t)$  достигает в точке  $x_{\max} = \left( \frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0} t$ . Отсюда следует, что центр группы волн движется с групповой скоростью, равной  $\left( \frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0}$ .



В частном случае гауссова волнового пакета, центрированного возле  $k = k_0$ , получим:

$$f(k) = \exp \left[ -\frac{(k - k_0)^2}{(\Delta k)^2} \right]$$

В этом случае волновая функция имеет вид:

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(k) e^{ikx} dk = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(k-k_0)^2}{2(\Delta k)^2} + ikx} dk = e^{ik_0 x - \frac{x^2 (\Delta k)^2}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(k-k_0)^2}{(\Delta k)^2} + i(k-k_0)x + \frac{x^2 (\Delta k)^2}{2}} dk = \\ &= \sqrt{\pi \Delta k} \exp \left[ ik_0 x - \frac{1}{2} x^2 (\Delta k)^2 \right].\end{aligned}$$

Результирующий пакет гауссовой формы имеет ширину  $\Delta x \sim \frac{1}{\Delta k}$ , так как эта функция быстро спадает до нуля при  $\Delta x > \frac{1}{\Delta k}$ . Отсюда следует, что произведение ширины пакета в

$k$ -пространстве на ширину в  $x$ -пространстве порядка единицы, т.е.  $\Delta k \Delta x > 1$ . С другой стороны, мы знаем, что  $p = \hbar k$ , тогда неравенство превратится в следующее выражение:

$$\Delta p \Delta x > \hbar$$

Причём это общая связь, она работает не только в гауссовом пакете. Позже мы вернёмся к этому неравенству, и получим его точнее

### Расплывание волнового пакета

Теперь найдем закон расплывания  $\Delta x(t)$  волнового пакета:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(k - k_0) e^{ikx - i\omega_k t} dk = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} f(k - k_0) e^{ikx - i\omega_k t} dk.$$

Разложение частоты  $\omega_k$  в ряд по  $k - k_0$  до первого порядка даёт нам групповую скорость. Пойдём дальше:

$$\omega_k = \omega_{k_0} + \left( \frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0} (k - k_0) + \frac{1}{2} \left( \frac{d^2\omega}{dk^2} \right)_{k_0} (k - k_0)^2,$$

Для свободной частицы:

$$\begin{aligned}\frac{d\omega}{dk} &= \frac{dE}{dp} = \frac{p}{m} \\ \frac{d^2\omega}{dk^2} &= \hbar \frac{d^2E}{dp^2} = \frac{\hbar}{m} \\ \frac{d^3\omega}{dk^3} &= \hbar^2 \frac{d^3E}{dp^3} = 0\end{aligned}$$

Заменим для удобства сразу:

$$\omega_k = \omega_0 + \frac{p}{m} (k - k_0) + \frac{\hbar}{2m} (k - k_0)^2,$$

и вводя новую переменную  $\xi = k - k_0$ , находим

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_0 x - i\omega_0 t} \int_{-\Delta k}^{\Delta k} f(\xi) e^{i\xi \left[ x - \frac{p}{m} t \right] - i \frac{\hbar}{m} \xi^2 t} d\xi.$$

Раньше мы пренебрегали последним слагаемым, и получался равномерно движущийся волновой пакет. Но это можно делать пока

$$\frac{\hbar}{m}(k - k_0)^2 t \ll 1$$

или, по-другому:

$$\frac{\hbar}{m} \Delta k^2 t \ll 1$$

Переходя к импульсам:

$$\frac{\hbar}{m} \left( \frac{\Delta p}{\hbar} \right)^2 t \ll 1$$

Заменяя неопределённость импульса с помощью соотношения  $\Delta p \Delta x \approx \hbar$ , получим:

$$\frac{m}{\hbar} (\Delta x)^2 \gg t$$

Или

$$\Delta v \cdot t \ll \Delta x$$

Видно, что с течением времени неопределённость в координате должна расти, чтобы удовлетворять условию. Почему пакет расплывается? Потому что групповая скорость не одинакова для всех  $k$ . В большей части всё определяется волновым вектором  $k_0$ . Но у нас есть неопределённость в волновом числе (=импульсе), и волновой пакет немного размазан по  $k$ , и каждая точка движется с немного разной групповой скоростью.

Покажем расплывание волнового пакета на примере гауссова пакета. Пусть он в начале имел ширину  $\Delta x$ :

$$\psi(x, 0) = \frac{\sqrt{\pi}}{\Delta x_0} \exp \left[ -\frac{x^2}{2(\Delta x_0)^2} \right]$$

(коэффициент перед экспонентой для нормировки функции)

Волновой пакет в момент  $t$  может быть записан в виде

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(k - k_0) e^{ikx - i\omega(k)t} dk, \quad (1)$$

где  $f(k)$  – Фурье-образ волнового пакета не зависит от времени и может быть найден по волновому пакету при  $t = 0$ , т.е.

$$f(k - k_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, 0) e^{-i(k-k_0)x} dx = \frac{1}{\sqrt{2\Delta x_0}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2(\Delta x_0)^2} - i(k-k_0)x} dx. \quad (2)$$

**Гауссов интеграл в более общей форме.** Интеграл такого типа может быть взят следующим образом. Во-первых, известно, что:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha(x-x_0)^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \quad (3)$$

Рассмотрим следующий интеграл:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\alpha x^2 + \beta x) dx$$

В подэкспоненциальном выражении можно выделить полный квадрат:

$$\begin{aligned}
-\alpha x^2 + \beta x &= -\alpha x^2 + 2\sqrt{\alpha}x \frac{\beta}{2\sqrt{\alpha}} - \left(\frac{\beta}{2\sqrt{\alpha}}\right)^2 + \left(\frac{\beta}{2\sqrt{\alpha}}\right)^2 = -\left(\sqrt{\alpha}x - \frac{\beta}{2\sqrt{\alpha}}\right)^2 + \left(\frac{\beta}{2\sqrt{\alpha}}\right)^2 = \\
&= -\alpha\left(x - \frac{\beta}{2\alpha}\right)^2 + \frac{\beta^2}{4\alpha}
\end{aligned}$$

Тогда искомый интеграл примет следующий вид:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\alpha x^2 + \beta x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\alpha\left(x - \frac{\beta}{2\alpha}\right)^2 + \frac{\beta^2}{4\alpha}\right) dx$$

Воспользуемся равенством (3), получим:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\alpha x^2 + \beta x) dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{\frac{\beta^2}{4\alpha}} \quad (5)$$

Таким образом, интеграл (2) примет следующий вид:

$$f(k - k_0) = \frac{1}{\sqrt{2\Delta x_0}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2(\Delta x_0)^2} - i(k - k_0)x} dx = \sqrt{\pi} e^{-\frac{(\Delta x_0)^2}{2}(k - k_0)^2} \quad (4)$$

Подставляя  $f(k - k_0)$  в формулу для  $\psi(x, t)$ , получаем

$$\begin{aligned}
\psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{(\Delta x_0)^2}{2}(k - k_0)^2 + ikx - i\left[\omega_0 + \frac{p}{m}(k - k_0) + \frac{\hbar}{2m}(k - k_0)^2\right]t\right) dk = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{ik_0 x - i\omega_0 t} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\left(\frac{(\Delta x_0)^2}{2} + i\frac{\hbar}{2m}t\right)(k - k_0)^2 + i(k - k_0)\left(x - \frac{p}{m}t\right)\right) d(k - k_0)
\end{aligned}$$

Мы знаем как брать такие интегралы. В результате получим:

$$\psi(x, t) = \sqrt{\frac{\pi}{(\Delta x_0)^2 + i\frac{\hbar}{m}t}} e^{ik_0 x - i\omega_0 t} \exp\left\{-\frac{\left(x - \frac{p}{m}t\right)^2}{2(\Delta x_0)^2 + i\frac{2\hbar}{m}t}\right\} \equiv B(x, t) e^{ik_0 x - i\omega_0 t}.$$

Модуляция амплитуды пакета определяется множителем

$$\exp\left\{-\frac{\left(x - \frac{p}{m}t\right)^2}{2(\Delta x_0)^2 + i\frac{2\hbar}{m}t}\right\} = \exp\left[-\frac{\left(x - \frac{p}{m}t\right)^2}{2(\Delta x)^2}\right] \exp\left\{\frac{i \cdot \hbar \cdot t}{2m} \frac{\left(x - \frac{p}{m}t\right)^2}{\left[(\Delta x_0)^4 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2}\right]}\right\},$$

$$\text{где введена новая ширина пакета } (\Delta x)^2 = (\Delta x_0)^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 (\Delta x_0)^2} = (\Delta x_0)^2 \left[1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 (\Delta x_0)^4}\right].$$

Таким образом, в  $x$ -пространстве получается пакет, максимум которого перемещается со скоростью  $v_{rp} = \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k_0}$ , а эффективная ширина изменяется со временем по закону

$$\Delta x(t) = (\Delta x_0) \sqrt{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 (\Delta x_0)^4}}.$$

Из полученной формулы следует, что для частицы с  $m = 1$  г расплывание  $\Delta x(t) \approx 10^{-1}$  см достигается через  $10^{25}$  с, т.е. волновой пакет практически не расплывается. Для электрона  $m \approx 10^{-27}$  г и  $\Delta x_0 \approx 10^{-8}$  см – через 1 с достигается расплывание  $\Delta x \approx 10^8$  см.

# ЛЕКЦИЯ 4.

## Уравнение Шрёдингера

(в лекциях оно было раньше, и в этой лекции про него не рассказывалось поэтому тайминг поплыл)

В 1926 г. Э. Шредингер, который, развивая оптико-механическую аналогию Гамильтона и используя соотношения де Броиля, установил свое знаменитое волновое уравнение.

Мы видели, что интенсивность ассоциированной волны в данной точке в данный момент времени дает вероятность найти частицу в этой точке в этот момент времени. В квантовой механике мы постулируем, что волновая функция  $\Psi$  квантовой системы полностью определяет динамическое состояние системы, т. е. что все предсказания, которые могут быть сделаны относительно различных динамических свойств системы в данный момент времени  $t$ , следуют из значения функции  $\Psi$  в этот момент времени  $t$ . Основная задача теории может быть сформулирована так: зная волновую функцию в начальный момент времени  $t_0$  определить ее значения в последующие моменты времени. Для этого необходимо знать уравнение распространения волны  $\Psi$ .

Вполне очевидно, что искомое уравнение не может быть получено путем какого-либо дедуктивного рассуждения. Как всякое уравнение математической физики оно должно быть постулировано; единственным оправданием того или иного выбора служит сравнение теоретических предсказаний, получаемых с помощью уравнения, с результатами эксперимента. Тем не менее выбор уравнения лимитируется *a priori* некоторыми условиями, вытекающими из требований, налагаемых на функцию:

- А) Уравнение должно быть линейным и однородным: тогда волна удовлетворяет принципу суперпозиции, характерному для любых волновых процессов. Если  $\psi_1$  и  $\psi_2$  являются решениями уравнения, то и всякая линейная комбинация  $\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2$  этих функций есть решение того же уравнения.
- Б) Уравнение должно быть дифференциальным уравнением первого порядка относительно времени; именно в этом случае знание  $\psi$  в данный начальный момент времени оказывается достаточным для определения последующей эволюции  $\psi$ , согласно гипотезе о том, что динамическое состояние физической системы полностью определяется заданием  $\psi$ .

Теория волн позволяет без затруднений написать волновое уравнение для свободной частицы в нерелятивистском приближении. Действительно, волна может быть представлена как суперпозиция

$$\psi(r, t) = \int \psi_0 F(p) e^{i(pr - Et)/\hbar} dp$$

плоских монохроматических волн  $\exp^{(i(pr - Et)/\hbar)}$ , причем частота  $E/\hbar$  связана с волновым вектором  $p/\hbar$  соотношением, связывающим энергию и импульс частицы

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

Образуя частные производные от обеих частей равенства, получим последовательно:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(r, t) = \int EF(p) e^{i(pr-Et)/\hbar} dp,$$

$$\frac{\hbar}{i} \nabla \psi(r, t) = \int pF(p) e^{i(pr-Et)/\hbar} dp,$$

$$-\hbar^2 \Delta \psi(r, t) = \int p^2 F(p) e^{i(pr-Et)/\hbar} dp.$$

Согласно соотношению, подынтегральные выражения в уравнениях пропорциональны друг другу, то же самое можно сказать и о самих интегралах. Поэтому

$$i\hbar \psi(r, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(r, t).$$

Добавить потенциал  $V(x)$

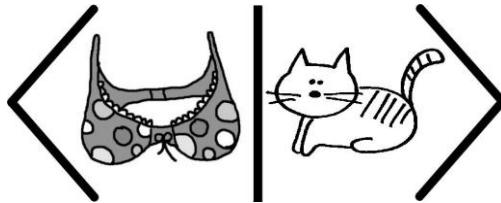
## Наблюдаемые, операторы, собственные функции и значения

В классической физике для описания системы задавались все её динамические переменные. Сейчас же задаётся только **состояние**, и динамические переменные (**наблюдаемые**) необходимо каким-то образом извлекать из этого состояния.

Что такое наблюдаемые? Это результат измерения. При измерении происходит коллапс ВФ до состояния с конкретным значением наблюдаемой. Рассмотрим некоторую физическую величину  $f$ , характеризующую состояние квантовой системы.

Мы видели, что некоторые величины могут принимать дискретные значения (магнитный момент), некоторые непрерывные (импульс, координата). Значения, которые может принимать данная физическая величина, называют в квантовой механике ее **собственными значениями**, а об их совокупности говорят как о **спектре собственных значений** данной величины. В классической механике величины пробегают, вообще говоря, непрерывный ряд значений. В квантовой механике тоже существуют физические величины (например, координаты), собственные значения которых заполняют непрерывный ряд; в таких случаях говорят о **непрерывном спектре** собственных значений. Наряду с этими величинами в квантовой механике существуют, однако, и другие, собственные значения которых образуют некоторый дискретный набор; в таких случаях говорят о **дискретном спектре**.

**Сказать про дираковские обозначения**



Будем считать сначала для простоты, что рассматриваемая величина  $f$  обладает дискретным спектром. Собственные значения величины  $f$  обозначим как  $f_n$ , где индекс  $n$  пробегает значения 0, 1, 2, 3, ... Обозначим волновую функцию системы в состоянии, в котором величина  $f$  имеет значение  $f_n$ , через  $\Psi_n$  (в дираковских  $|n\rangle$ ). Волновые функции  $\Psi_n$  называют собственными функциями данной физической величины  $f$ . Каждая из этих функций предполагается нормированной, так что

$$\int |\Psi_n|^2 dq = 1.$$

$$\langle n | n \rangle = 1$$

К содержанию

Если система находится в некотором произвольном состоянии с волновой функцией  $\Psi$ , то произведенное над нею измерение величины  $f$  даст в результате одно из собственных значений  $f_n$ . В соответствии с принципом суперпозиции можно утверждать, что волновая функция  $\Psi$  должна представлять собой линейную комбинацию тех из собственных функций  $\Psi_n$ , которые соответствуют значениям  $f_n$ , могущим быть обнаруженными с отличной от нуля вероятностью при измерении, произведенном над системой, находящейся в рассматриваемом состоянии. Поэтому в общем случае произвольного состояния функция  $\Psi$  может быть представлена в виде ряда:

$$\Psi = \sum_n a_n \Psi_n,$$

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$

где суммирование производится по всем  $n$ , а  $a_n$  — некоторые постоянные коэффициенты.

Но то же самое можно сделать и для любой другой наблюдаемой, т.к. волновая функция содержит информацию о всех наблюдаемых. Таким образом, мы приходим к выводу, что всякая волновая функция может быть, как говорят, разложена по собственным функциям любой физической величины. О системе функций, по которым можно провести такое разложение, говорят как о **полной системе функций**.

Как мы уже говорили, вероятность измерения некоторого значения  $f_n$  равна квадрату модуля коэффициента перед функцией в суперпозиции собственных функций ( $|a_n|^2$ ). Сумма вероятностей всех возможных значений  $f_n$  должна быть равна единице; другими словами, должно иметь место соотношение:

$$\sum_n |a_n|^2 = 1.$$

Если функции не нормированы, то можно записать следующее равенство:

$$\sum_n a_n a_n^* = \int \Psi \Psi^* dq. \quad (1)$$

С другой стороны, умножив на  $\Psi$  разложение  $\Psi^* = \sum_n a_n^* \Psi_n^*$  (в Дираковских нотациях  $\langle \Psi | = \sum_n c_n^* \langle n |$ ) комплексно сопряженной с  $\Psi$  функции  $\Psi^*$  и проинтегрировав, получим:

$$\int \Psi \Psi^* dq = \sum_n a_n^* \int \Psi_n^* \Psi dq$$

$$\langle \Psi \Psi \rangle = \sum_n c_n^* \langle n | \Psi \rangle$$

Заменяя левую часть с помощью (1), имеем:

$$\sum_n a_n a_n^* = \sum_n a_n^* \int \Psi_n^* \Psi dq,$$

$$\sum_n c_n c_n^* = \sum_n c_n^* \langle n | \Psi \rangle$$

Но это равенство должно выполняться для произвольного набора  $a_n$ , поэтому мы можем сказать, что коэффициенты  $a_n$  разложения функции  $\Psi$  по собственным функциям  $\Psi_n$  определяются следующим выражением:

$$a_n = \int \Psi \Psi_n^* dq$$

$$c_n = \langle n | \Psi \rangle$$
(2)

Если подставить сюда разложение  $\Psi$  по собственным функциям, получим:

$$a_n = \sum_m a_m \int \Psi_m \Psi_n^* dq,$$

$$c_n = \sum_m c_m^* \langle n | m \rangle$$

откуда видно, что собственные функции должны удовлетворять условиям:

$$\int \Psi_m \Psi_n^* dq = \delta_{nm},$$

$$\langle n | m \rangle = \delta_{nm}$$

О факте обращения в нуль интегралов от произведений  $\Psi_n \Psi_m^*$  с  $n \neq m$ , говорят как о взаимной ортогональности функций  $\Psi_n$ . Таким образом, совокупность собственных функций  $\Psi_n$  образует полную систему нормированных и взаимно ортогональных (или, как говорят для краткости, — ортонормированных) функций.

Заметим, что, вообще говоря, амплитуды  $c_p$ ,  $c_n$  (коэффициенты разложения состояния по собственным функциям) являются волновой функцией в соответствующем представлении, т.е. определяют это состояние равноправно (с точностью до вырожденных состояний) с координатной ВФ. Так, например,  $a_p$  — волновая функция в  $p$ -представлении и т.д.

**Сказать про то, как происходит измерение – коллапс ВФ.**

**Рассказать про одновременность измерения**

**Если одновременно измеримы, то наблюдаемые имеют общий набор собственных функций.**

## Средние значения

Введем понятие о среднем значении  $\bar{f}$  величины  $f$  в данном состоянии. Соответственно обычному определению средних значений определим  $\bar{f}$  как сумму всех собственных значений  $f_n$  данной величины, умноженных каждое на соответствующую вероятность  $|a_n|^2$  (здесь учтено условие нормировки):

$$\bar{f} = \sum_n f_n |a_n|^2$$
(3)

Запишем  $f$  в виде выражения, которое содержало бы не коэффициенты разложения функции  $\Psi$ , а самую эту функцию. Поскольку в (3) входят произведения  $a_n a_n^*$  то ясно, что искомое выражение должно быть билинейным по  $\Psi$  и  $\Psi^*$ . Введем некоторый математический оператор, который мы обозначим как  $\hat{f}$ , и определим следующим образом. Пусть  $(\hat{f}\Psi)$  обозначает результат действия оператора  $\hat{f}$  на функцию  $\Psi$ .

Мы определим  $\hat{f}$  так, чтобы интеграл от произведения  $(\hat{f}\Psi)$  на комплексно сопряженную функцию  $\Psi^*$  был равен среднему значению  $\bar{f}$ :

$$\bar{f} = \langle \Psi | \hat{f} \Psi \rangle = \int \Psi^* \hat{f} \Psi dq \quad (4)$$

Воспользовавшись выражением (2) для  $a_n$ , мы можем переписать определение среднего значения в виде:

$$\bar{f} = \sum_m f_n a_n a_n^* = \int \Psi^* \left( \sum_n a_n f_n \Psi_n \right) dq \equiv \sum_m f_n a_n \langle \Psi | n \rangle$$

Сравнивая с (4), мы видим, что результат действия оператора  $\hat{f}$  на функцию  $\Psi$  имеет вид:

$$(\hat{f}\Psi) \equiv \hat{f} |\Psi\rangle = \sum_n f_n a_n \Psi_n = \sum_n f_n a_n |\Psi_n\rangle \quad (5)$$

# ЛЕКЦИЯ 5

## Эрмитовые операторы

Таким образом, каждой физической величине в квантовой механике приводится в соответствие определенный линейный оператор. Из (5) видно, что если функцией  $\Psi$  является одна из собственных функций  $\Psi_n$  (так что все  $a_n$ , кроме одного, равны нулю), то в результате воздействия на нее оператора  $\hat{f}$  эта функция просто умножается на собственное значение  $f_n$  (ниже мы будем везде, где это не может привести к недоразумению, опускать скобки в выражении для  $(\hat{f}\Psi)$ , причем оператор предполагается действующим на написанное вслед за ним выражение):

$$\hat{f}|\Psi_n\rangle = f_n |\Psi_n\rangle \quad (6)$$

Таким образом, собственные функции данной физической величины  $f$  являются решениями уравнения

$$\hat{f}|\Psi\rangle = f |\Psi\rangle$$

где  $f$  — постоянная, а собственные значения — это те значения постоянной  $f$ , при которых написанное уравнение имеет решения, удовлетворяющие требуемым условиям. Как мы увидим ниже, вид операторов для различных физических величин может быть определен из прямых физических соображений, и тогда указанное свойство операторов дает возможность находить собственные функции и собственные значения посредством решения уравнений  $\hat{f}|\Psi\rangle = f |\Psi\rangle$ .

Как собственные значения вещественной физической величины, так и ее средние значения во всяком состоянии — вещественны. Это обстоятельство накладывает определенное ограничение на свойства соответствующих операторов. Приравняв выражение (4) комплексно ему сопряженному, получим соотношение

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \hat{f} \Psi \rangle &= \langle \Psi^* | \hat{f}^* \Psi^* \rangle \\ \int \Psi^* \hat{f} \Psi dq &= \int \Psi (\hat{f}^* \Psi^*) dq \end{aligned} \quad (3.13)$$

где  $\hat{f}^*$  обозначает оператор, комплексно сопряженный  $\hat{f}$  (По определению, если для оператора  $\hat{f}$  имеем  $\hat{f}\psi = \phi$ , то комплексно сопряженным оператором  $\hat{f}^*$  будет оператор, для которого имеет место  $\hat{f}^*\psi^* = \phi^*$ ). Для произвольного линейного оператора такое соотношение, вообще говоря, не имеет места, так что оно представляет собой некоторое ограничение, накладываемое на возможный вид операторов  $\hat{f}$ . Для произвольного оператора  $\hat{f}$  можно указать, как говорят, транспонированный с ним оператор  $\tilde{\hat{f}}$ , определяемый так, чтобы:

$$\begin{aligned}\langle \Phi | \hat{f} \Psi \rangle &= \left\langle \Psi^* \left| \tilde{\hat{f}} \Phi^* \right. \right\rangle \\ \int \Phi(\hat{f} \Psi) dq &= \int \Psi(\tilde{\hat{f}} \Phi) dq\end{aligned}\tag{3.14}$$

где  $\Phi, \Psi$  — две различные функции. Если выбрать в качестве функции  $\Phi$  сопряженную с  $\Psi$  функцию  $\Psi^*$ , то сравнение с (3.13) показывает, что должно быть

$$\tilde{\hat{f}} = \hat{f}^*\tag{3.15}$$

Операторы, удовлетворяющие этому условию, называют **эрмитовыми**. Таким образом, операторы, соответствующие в математическом аппарате квантовой механики вещественным физическим величинам, должны быть эрмитовыми.

Покажем, каким образом можно непосредственно доказать взаимную ортогональность собственных функций эрмитова оператора, соответствующих различным собственным значениям. Пусть  $f_n, f_m$  — два различных собственных значения вещественной величины  $f$ , а  $\Psi_n, \Psi_m$  — соответствующие им собственные функции:

$$\hat{f} \Psi_n = f_n \Psi_n, \quad \hat{f} \Psi_m = f_m \Psi_m$$

Умножив обе части первого из этих равенств на  $\Psi_m^*$ , а равенство, комплексно сопряженное второму, — на  $\Psi_n$  и, вычтя эти произведения почленно друг из друга, получим

$$\Psi_m^* \hat{f} \Psi_n - \Psi_n \hat{f}^* \Psi_m^* = (f_n - f_m^*) \Psi_m^* \Psi_n$$

Проинтегрируем обе части этого равенства по  $dq$ . Поскольку оператор удовлетворяет условию эрмитовости, т.е.  $\tilde{\hat{f}} = \hat{f}^*$ , и из-за действительности собственных значений  $f_m^* = f_m$ , то в силу (3.14) интеграл от левой части равенства обращается в нуль, так что получим

$$(f_n - f_m) \int \Psi_m^* \Psi_n dq = 0$$

откуда, ввиду  $f_n \neq f_m$ , и того, что собственные функции — не тождественный нуль (это условие нужно при  $n = m$ ) следует искомое свойство ортогональности функций  $\Psi_n$  и  $\Psi_m$ .

Мы все время говорим здесь только об одной физической величине  $f$ , между тем как следовало бы говорить, как было отмечено в начале параграфа, о полной системе одновременно измеримых физических величин. Тогда мы нашли бы, что каждой из этих величин  $f, g, \dots$  соответствует свой оператор  $\hat{f}, \hat{g}, \dots$ . Собственные функции  $\Psi_n$  соответствуют состояниям, в которых все рассматриваемые величины имеют определенные значения, т. е. соответствуют определенным наборам собственных значений  $f_n, g_n, \dots$  и являются совместными решениями системы уравнений

$$\hat{f} \Psi = f \Psi, \quad \hat{g} \Psi = g \Psi, \dots$$

### Эрмитовость. Примеры.

Оператор  $\hat{F}^+$  называется эрмитово сопряженным оператору  $\hat{F}$ , если:

[К содержанию](#)

$$\int \Psi_1^* \hat{F}^+ \Psi_2 dV = \int \Psi_2 \hat{F}^* \Psi_1^* dV.$$

Оператор  $\hat{F}^+$  называется эрмитовым если  $\hat{F}^+ = \hat{F}$ :

$$\int \Psi_1^* \hat{F} \Psi_2 dV = \int \Psi_2 \hat{F}^* \Psi_1^* dV.$$

Приведем ряд свойств эрмитового сопряжения:

Эрмитовое сопряжение произведения операторов  $\hat{F} = \hat{A} \hat{B}$ , :

$$\hat{F}^+ = \hat{B}^+ \hat{A}^+;$$

Двойное эрмитовое сопряжение возвращает начальный оператор

$$(\hat{F}^+)^+ = \hat{F}.$$

Свойства самосопряженных операторов:

- a) собственные значения вещественны;
- b) собственные функции самосопряженных операторов ортогональны.

Рассмотрим, например, оператор комплексного сопряжения, выясним, эрмитов ли он. По определению эрмитового (самосопряженного) оператора:

$$\int \Psi_1^* \hat{F} \Psi_2 dV = \int \Psi_2 \hat{F}^* \Psi_1^* dV.$$

В рассматриваемом случае

$$\int \Psi_1^* \hat{F} \Psi_2 dV = \int \Psi_1^* \Psi_2^* dV,$$

но

$$\int \Psi_2 \hat{F}^* \Psi_1^* dV = \int \Psi_2 (\hat{F} \Psi_1)^* dV = \int \Psi_1 \Psi_2 dV \neq \int \Psi_1^* \Psi_2^* dV.$$

Следовательно, оператор комплексного сопряжения  $\hat{F}$  неэрмитов.

Проверим эрмитовость оператора импульса  $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ . Для этого необходимо выполнения следующего условия:

$$\int \Psi_1^* \left( -i\hbar \frac{\partial \Psi_2}{\partial x} \right) dV = \int \Psi_2 \left( i\hbar \frac{\partial \Psi_1^*}{\partial x} \right) dV.$$

Возьмём второй интеграл по частям, учтя, что на бесконечности ВФ зануляется:

$$\int \Psi_2 \left( i\hbar \frac{\partial \Psi_1^*}{\partial x} \right) dV = \Psi_1^* i\hbar \Psi_2 \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int \Psi_1^* \left( i\hbar \frac{\partial \Psi_2}{\partial x} \right) dV = \int \Psi_1^* \left( i\hbar \frac{\partial \Psi_2}{\partial x} \right) dV$$

Теперь видно, что что искомое равенство выполняется, т.е. оператор импульса эрмитов. Заметим, что если бы в нём отсутствовала мнимая единица, то он был бы антиэрмитов (сам оператор равен сопряжённому, взятому с обратным знаком).

## Сложение и умножение операторов

Если  $\hat{f}$  и  $\hat{g}$  — операторы, отвечающие двум физическим величинам  $f$  и  $g$ , то сумме  $f + g$  отвечает оператор  $\hat{f} + \hat{g}$ . Смысл сложения различных физических величин в квантовой механике, однако, существенно различен в зависимости от того, измеримы ли эти величины одновременно или нет. Если величины  $f$  и  $g$  одновременно измеримы, то операторы  $f$  и  $g$  имеют совместные собственные функции, которые являются в то же время и собственными функциями оператора  $\hat{f} + \hat{g}$ , а собственные значения последнего оператора равны суммам  $f_n + g_n$ .

Если же величины  $f$  и  $g$  не могут иметь одновременно определенных значений, то смысл их суммы  $f + g$  более ограничен. Можно лишь утверждать, что среднее значение этой величины в произвольном состоянии равно сумме средних значений каждого из слагаемых в отдельности:

$$\overline{f + g} = \bar{f} + \bar{g} \quad (4.1)$$

Что же касается собственных значений и функций оператора  $\hat{f} + \hat{g}$ , то здесь они, вообще говоря, не будут иметь никакого отношения к собственным значениям и функциям величин  $f$  и  $g$ . Очевидно, что если операторы  $\hat{f}$  и  $\hat{g}$  — эрмитовы, то эрмитовым будет и оператор  $\hat{f} + \hat{g}$ , так что его собственные значения — вещественны и представляют собой собственные значения определенной таким образом новой величины  $f + g$ .

Отметим следующую теорему. Пусть  $f_0, g_0$  — наименьшие собственные значения величин  $f, g, (f + g)_0$  — то же для величины  $f + g$ . Тогда можно утверждать, что

$$(f + g)_0 \geq f_0 + g_0 - \quad (4.2)$$

Знак равенства имеет место, если величины  $f$  и  $g$  одновременно измеримы. Доказательство следует из очевидного факта, что среднее значение величины во всяком случае больше или равно ее наименьшему собственному значению. В состоянии, в котором величина  $(f + g)$  имеет значение  $(f + g)_0$ , имеем  $\overline{(f + g)} = (f + g)_0$  и поскольку, с другой стороны,  $\overline{(f + g)} = \bar{f} + \bar{g} \geq f_0 + g_0$  мы приходим к неравенству (4.2).

Пусть теперь снова  $f$  и  $g$  — одновременно измеримые величины. Наряду с их суммой можно ввести понятие и об их произведении как о величине, собственные значения которой равны произведениям собственных значений величин  $f$  и  $g$ . Легко видеть, что такой величине соответствует оператор, действие которого состоит в последовательном действии на функцию сначала одного, а затем другого оператора. Такой оператор изображается математически как произведение операторов  $\hat{f}$  и  $\hat{g}$ . Действительно, если  $\Psi_n$  — общие собственные функции операторов  $\hat{f}$  и  $\hat{g}$ , то имеем

$$\hat{f}\hat{g}\Psi_n = \hat{f}(\hat{g}\Psi_n) = \hat{f}g_n\Psi_n = g_n\hat{f}\Psi_n = g_nf_n\Psi_n$$

(символ  $\hat{f}\hat{g}$  обозначает оператор, действие которого на функцию  $\Psi$  заключается в последовательном действии сначала оператора  $\hat{g}$  на функцию  $\Psi$ , а затем оператора

$\hat{f}$  и  $\hat{g}$  на функцию  $\hat{g}\Psi$ ). С тем же успехом мы могли бы взять вместо оператора  $\hat{f}\hat{g}$  оператор  $\hat{g}\hat{f}$ , отличающийся от первого порядком множителей. Очевидно, что результат воздействия обоих этих операторов на функции  $\Psi_n$  будет одинаковым. Но поскольку всякая волновая функция  $\Psi$  может быть представлена в виде линейной комбинации функций  $\Psi_n$ , то отсюда следует, что одинаковым будет результат воздействия операторов  $\hat{f}\hat{g}$  и  $\hat{g}\hat{f}$  на произвольную функцию. Этот факт может быть записан в виде символического равенства  $\hat{f}\hat{g} = \hat{g}\hat{f}$  или

$$\hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f} = 0 \quad (4.3)$$

О таких двух операторах  $\hat{f}$  и  $\hat{g}$  говорят, как о коммутативных друг с другом. Таким образом, мы приходим к важному результату: если две величины  $f$  и  $g$  могут иметь одновременно определенные значения, то их операторы коммутативны друг с другом.

Может быть доказана и обратная теорема: если операторы  $\hat{f}$  и  $\hat{g}$  коммутативны, то у них все собственные функции можно выбрать общими, что физически означает одновременную измеримость соответствующих физических величин. Таким образом, коммутативность операторов является необходимым и достаточным условием одновременной измеримости физических величин.

Частным случаем произведения операторов является оператор, возвещенный в некоторую степень. На основании сказанного можно сделать вывод, что собственные значения оператора  $\hat{f}^p$  ( $p$  – целое число) равны собственным значениям оператора  $\hat{f}$ , возвещенным в ту же  $p$ -ю степень. Вообще, можно определить любую функцию оператора  $\phi(\hat{f})$  как оператор, собственные значения которого равны такой же функции  $\phi(f)$  собственных значений оператора  $\hat{f}$ . Если функция  $\phi(f)$  разложима в ряд Тэйлора, то таким разложением действие оператора  $\phi(\hat{f})$  сводится к действию различных степеней  $\hat{f}^p$ .

В частности, оператор  $\hat{f}^{-1}$  называется обратным оператору  $\hat{f}$ . Очевидно, что в результате последовательного воздействия операторов  $\hat{f}$  и  $\hat{f}^{-1}$  на произвольную функцию последняя остается неизменной, т.е.  $\hat{f}\hat{f}^{-1} = \hat{f}^{-1}\hat{f} = \hat{1}$ .

Если же величины  $f$  и  $g$  не измеримы одновременно, то понятие их произведения не имеет указанного выше прямого смысла. Это проявляется уже в том, что оператор  $\hat{f}\hat{g}$  в этом случае не будет эрмитовым, а поэтому не может соответствовать вещественной физической величине. Действительно, по определению транспонированного оператора, пишем

$$\int \Psi \hat{f} \hat{g} \Phi dq = \int \Psi \hat{f} (\hat{g} \Phi) dq = \int (\tilde{\hat{f}} \Psi) (\hat{g} \Phi) dq$$

Здесь оператор  $\tilde{\hat{f}}$  действует только на функцию  $\Psi$ , а оператор  $\hat{g}$  на  $\Phi$ , так что под интегралом стоит просто произведение двух функций:  $\hat{g}\Phi$  и  $\tilde{\hat{f}}\Psi$ . Применив еще раз определение транспонированного оператора, пишем

$$\int \Psi \hat{f} \hat{g} \Phi dq = \int \left( \tilde{\hat{f}} \Psi \right) (\hat{g} \Phi) dq = \int \Phi \tilde{\hat{g}} \tilde{\hat{f}} \Psi dq$$

Таким образом, мы получили интеграл, в котором по сравнению с первоначальным функции  $\Phi$  и  $\Psi$  поменялись местами. Другими словами, оператор  $\tilde{\hat{g}}\tilde{\hat{f}}$  есть оператор, транспонированный с  $\hat{f}\hat{g}$ , и мы можем написать

$$\hat{f}\hat{g} = \tilde{\hat{g}}\tilde{\hat{f}} \quad (4.4)$$

т. е. оператор, транспонированный с произведением  $\hat{f}\hat{g}$ , есть произведение транспонированных множителей, написанных в обратном порядке. Взяв комплексное сопряжение от обеих сторон равенства (4.4), найдем, что

$$(\hat{f}\hat{g})^+ = \hat{g}^+ \hat{f}^+$$

Если каждый из операторов  $\hat{f}$  и  $\hat{g}$  — эрмитов, то  $(\hat{f}\hat{g})^+ = \hat{g}\hat{f}$ . Отсюда следует, что оператор  $\hat{f}\hat{g}$  будет эрмитовым, только если множители  $\hat{f}$  и  $\hat{g}$  — коммутативны.

Отметим, что из произведений  $\hat{g}\hat{f}$  и  $\hat{f}\hat{g}$  двух некоммутативных эрмитовых операторов можно составить эрмитов же оператор — их **симметризованное произведение**

$$\frac{1}{2}(\hat{f}\hat{g} + \hat{g}\hat{f})$$

Легко также убедиться в том, что разность  $\hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f}$  есть «антиэрмитов» оператор (т. е. такой, для которого транспонированный оператор равен взятому с обратным знаком комплексно сопряженному). Он может быть сделан эрмитовым умножением на мнимую единицу  $i$ ; таким образом,

$$i(\hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f})$$

есть тоже эрмитов оператор.

В дальнейшем мы будем иногда пользоваться для краткости обозначением

$$[\hat{f}\hat{g}] = \hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f}$$

для так называемого коммутатора операторов. Легко убедиться в том, что имеет место соотношение

$$[\hat{f}\hat{g}, \hat{h}] = [\hat{f}, \hat{h}]\hat{g} + \hat{f}[\hat{g}, \hat{h}]$$

Заметим, что если  $[\hat{f}, \hat{h}] = 0$  и  $[\hat{g}, \hat{h}] = 0$ , то отсюда, вообще говоря, отнюдь не следует, что и  $\hat{f}$  и  $\hat{g}$  коммутативны.

### Непрерывный спектр

Все выведенные в соотношения, описывающие свойства собственных функций дискретного спектра, без труда могут быть обобщены на случай непрерывного спектра собственных значений.

Пусть  $f$  — физическая величина, обладающая непрерывным спектром. Ее собственные значения мы будем обозначать просто той же буквой  $f$  без индекса, а соответствующие собственные функции будем обозначать  $\Psi_f$ . Подобно тому как произвольная волновая функция  $\Psi$  может быть разложена в ряд (3.2) по собственным функциям величины с дискретным спектром, она может быть также разложена — на этот раз в интеграл — и по полной системе собственных функций величины с непрерывным спектром. Такое разложение имеет вид

$$\Psi(q) = \int a_f \Psi_f(q) df \quad (5.1)$$

где интегрирование производится по всей области значений, которые может принимать величина  $f$ .

Более сложным, чем в случае дискретного спектра, является вопрос о нормировке собственных функций непрерывного спектра. Требование равенства единице интеграла от квадрата модуля функции здесь, как мы увидим далее, невыполнимо. Вместо этого поставим себе целью нормировать функции  $\Psi_f$  таким

образом, чтобы  $|a_f|^2 df$  представляло собой вероятность рассматриваемой физической величине иметь в состоянии, описывающемся волновой функцией  $\Psi$ , значение в заданном интервале между  $f$  и  $f + df$ . Поскольку сумма вероятностей всех возможных значений  $f$  должна быть равна единице, то имеем

$$\int |a_f|^2 df = 1$$

(аналогично соотношению (3.3) для дискретного спектра).

(этот вывод можно пропустить) Поступая в точности аналогично тому, как мы делали при выводе формулы (3.5), и используя те же соображения, пишем, с одной стороны,

$$\int \Psi^* \Psi dq = \int |a_f|^2 df$$

и, с другой стороны,

$$\int \Psi^* \Psi dq = \int \int a_f^* \Psi_f^* \Psi_f df dq$$

Из сравнения обоих выражений находим формулу, определяющую коэффициенты разложения

$$a_f = \int \Psi(q) \Psi_f^*(q) df \quad (5.3)$$

в точности аналогичную (3.5).

Для вывода условия нормировки подставим теперь (5.1) в (5.3):

$$a_f = \int a_{f'} \left( \int \Psi_{f'} \Psi_f^* dq \right) df'.$$

Это соотношение должно иметь место при произвольных  $a_f$  и потому должно выполняться тождественно. Для этого необходимо прежде всего, чтобы коэффициент при  $a_f$  под знаком интеграла (т. е. интеграл  $\int \Psi_{f'} \Psi_f^* dq$ ) обращался в нуль при всех  $f' \neq f$ . При  $f' = f$  этот коэффициент должен обратиться в бесконечность (в противном случае интеграл по  $df$  будет равен просто нулю). Таким образом, интеграл  $\int \Psi_{f'} \Psi_f^* dq$  есть функция разности  $f' - f$ , обращающаяся в нуль при отличных от нуля значениях аргумента и в бесконечность при равном нулю аргументе. Обозначим эту функцию через  $\delta(f' - f)$ :

$$\int \Psi_{f'} \Psi_f^* dq = \delta(f' - f) \quad (5.4)$$

Способ обращения функции  $\delta(f' - f)$  в бесконечность при  $f' - f = 0$  определяется тем, что должно быть

$$\int a_{f'} \delta(f' - f) df' = a_f$$

Ясно, что для этого должно быть

$$\int \delta(f' - f) df' = 1$$

Определенная таким образом функция есть ни что иное, как  $\delta$ -функция Дирака.

Формула (5.4) выражает собой правило нормировки собственных функций непрерывного спектра; она заменяет собой условие (3.6) дискретного спектра. Мы видим,

что функции  $\Psi_f$  и  $\Psi_{f'}$  с  $f' \neq f$  по-прежнему ортогональны друг к другу. Интегралы же от квадратов  $|\Psi_f|^2$  функций непрерывного спектра расходятся.

Функции  $\Psi_f(q)$  удовлетворяют еще одному соотношению, сходному с (5.4). Для его вывода подставляем (5.3) в (5.1), что дает

$$\Psi(q) = \int \Psi(q') \left( \int \Psi_f^*(q') \Psi_f(q) df \right) dq'$$

откуда сразу заключаем, что должно быть

$$\int \Psi_f^*(q') \Psi_f(q) df = \delta(q - q') \quad (5.11)$$

Аналогичное соотношение может быть, разумеется, выведено и для дискретного спектра, где оно имеет вид

$$\sum_n \Psi_n^*(q') \Psi_n(q) = \delta(q - q')$$

Сравнив пару формул (5.1) и (5.4) с парой (5.3) и (5.11), мы видим, что, с одной стороны, функции  $\Psi_f(q)$  осуществляют разложение функции  $\Psi(q)$  с коэффициентами разложения  $a_f$ , а, с другой стороны, формулу (5.3) можно рассматривать как совершенно аналогичное разложение функции  $a_f \equiv a(f)$  по функциям, причем роль коэффициентов разложения играет  $\Psi(q)$ . Функция  $a(f)$ , как и  $\Psi(q)$ , вполне определяет состояние системы; о ней говорят как о волновой функции в  $f$ -представлении (а о функции  $\Psi(q)$  – как о волновой функции в  $q$ -представлении). Подобно тому как  $|\Psi(q)|^2$  определяет вероятность для системы иметь координаты в заданном интервале  $dq$ , так  $|a(f)|^2$  определяет вероятность значений величины  $f$  в заданном интервале  $df$ . Функции же  $\Psi_f(q)$  являются, с одной стороны, собственными функциями величины  $f$  в  $q$ -представлении и, с другой стороны, их комплексно сопряженные  $\Psi_f^*(q)$  представляют собой собственные функции координаты  $q$  в  $f$ -представлении.

# ЛЕКЦИЯ 6

## Предельный переход

### (потом переставить на пораньше, до операторов?)

Квантовая механика содержит в себе классическую механику в качестве предельного случая. Возникает вопрос о том, каким образом осуществляется этот предельный переход.

В квантовой механике электрон описывается волновой функцией, определяющей различные значения его координаты; об этой функции нам известно пока лишь то, что она является решением некоторого линейного дифференциального уравнения в частных производных. В классической же механике электрон рассматривается как материальная частица, движущаяся по траектории, вполне определяющейся уравнениями движения. Взаимоотношение, в некотором смысле аналогичное взаимоотношению между квантовой и классической механикой, имеет место в электродинамике между волновой и геометрической оптикой. В волновой оптике электромагнитные волны описываются векторами электрического и магнитного полей, удовлетворяющими определенной системе линейных дифференциальных уравнений (уравнений Максвелла). В геометрической же оптике рассматривается распространение света по определенным траекториям — лучам. Подобная аналогия приводит к заключению, что предельный переход от квантовой механики к классической происходит аналогично переходу от волновой оптики к геометрической.

Напомним, каким образом математически осуществляется этот последний переход. Пусть  $u$  — какая-нибудь из компонент поля в электромагнитной волне. Ее можно представить в виде  $u = a \cdot e^{i\phi}$  с вещественными амплитудой  $a$  и фазой  $\phi$  (последнюю называют в геометрической оптике эйконалом). Предельный случай геометрической оптики соответствует малым длинам волн, что математически выражается большой величиной изменения  $\phi$  на малых расстояниях; это означает, в частности, что фазу можно считать большой по своей абсолютной величине.

Соответственно этому исходим из предположения, что предельному случаю классической механики соответствуют в квантовой механике волновые функции вида  $\Psi = a \cdot e^{i\phi}$ , где  $a$  — медленно меняющаяся функция, а  $\phi$  принимает большие значения. Как известно, в механике траектория частиц может быть определена из вариационного принципа, согласно которому так называемое действие  $S$  механической системы должно быть минимальным (принцип наименьшего действия). В геометрической же оптике ход лучей определяется так называемым принципом Ферма, согласно которому должна быть минимальной «оптическая длина пути» луча, т. е. разность его фаз в конце и в начале пути.

Исходя из этой аналогии, мы можем утверждать, что фаза  $\phi$  волновой функции в классическом предельном случае должна быть пропорциональна механическому действию  $S$  рассматриваемой физической системы, т. е. должно быть  $S = \text{const} \cdot \phi$ . Коэффициент пропорциональности называется постоянной Планка и обозначается буквой  $\hbar$ . Она имеет размерность действия (поскольку  $\phi$  безразмерно) и равна

$$\begin{aligned}\hbar &= 1.05 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с} \\ h &= 2\pi\hbar = 6.63 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}\end{aligned}$$

Таким образом, волновая функция «почти классической» (или, как говорят, квазиклассической) физической системы имеет вид

$$\Psi = a \cdot e^{iS/\hbar} \quad (6.1)$$

Рассказать про формулировку квантовой механики через интегралы по траекториям.

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{Z} \int e^{iS[x, \dot{x}]/\hbar} Dx$$

### Гамильтониан

Волновая функция  $\Psi$  полностью определяет состояние физической системы в квантовой механике. Это означает, что задание этой функции в некоторый момент времени не только описывает все свойства системы в этот момент, но определяет ее поведение также и во все будущие моменты времени —конечно, лишь с той степенью полноты, которая вообще допускается квантовой механикой. Математически это обстоятельство выражается тем, что значение производной  $\partial\Psi/\partial t$  от волновой функции по времени в каждый данный момент времени должно определяться значением самой функции  $\Psi$  в тот же момент, причем зависимость эта должна быть, согласно принципу суперпозиции, линейной. В наиболее общем виде можно написать

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi \quad (8.1)$$

где  $\hat{H}$  — некоторый линейный оператор; множитель  $i\hbar$  введен здесь с целью, которая выяснится ниже. Поскольку интеграл  $\int \Psi^* \Psi dq$  есть постоянная, не зависящая от времени величина, то имеем

$$\frac{d}{dt} \int \Psi^* \Psi dq = \int \frac{d\Psi^*}{dt} \Psi dq + \int \Psi^* \frac{d\Psi}{dt} dq = 0$$

Подставив сюда (8.1) и применив в первом интеграле определение транспонированного оператора, получим (опустив общий множитель  $i/\hbar$ ):

$$\begin{aligned}\int \Psi \hat{H}^* \Psi^* dq - \int \Psi^* \hat{H} \Psi dq &= \int \Psi^* \tilde{\hat{H}}^* \Psi dq - \int \Psi^* \hat{H} \Psi dq = \\ &= \int \Psi^* (\tilde{\hat{H}}^* - \hat{H}) \Psi dq = \int \Psi^* (\hat{H}^+ - \hat{H}) \Psi dq = 0\end{aligned}$$

Поскольку это равенство должно выполняться для произвольной функции  $\Psi$ , то отсюда следует, что должно быть тождественно  $\hat{H}^+ = \hat{H}$ , т. е. оператор  $\hat{H}$  эрмитов.

Выясним, какой физической величине он соответствует. Для этого воспользуемся предельным выражением волновой функции (6.1) и запишем

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial t} \Psi$$

(медленно меняющуюся амплитуду  $a$  можно не дифференцировать). Сравнив это равенство с определением (8.1), мы видим, что в предельном случае оператор  $\hat{H}$  сводится к простому умножению на величину  $-dS/dt$ . Это значит, что последняя и есть та физическая величина, в которую переходит эрмитов оператор  $\hat{H}$ .

Но производная  $-dS/dt$  есть не что иное, как функция Гамильтона  $H$  механической системы. Таким образом,  $\hat{H}$  есть оператор, соответствующий в квантовой механике функции Гамильтона. Его называют гамильтоновым оператором или, короче, гамильтонианом системы. Если вид гамильтониана известен, то уравнение (8.1) определяет волновые функции данной физической системы. Это основное уравнение квантовой механики называется волновым уравнением.

### Дифференцирование операторов по времени

Понятие о производной физической величины по времени не может быть определено в квантовой механике в том смысле, какой оно имеет в классической механике. Действительно, определение производной в классической механике связано с рассмотрением значений величины в два близких, но различных момента времени. Но в квантовой механике величина, имеющая в некоторый момент времени определенное значение, не имеет в следующие моменты вообще никакого определенного значения; подробнее об этом шла речь в § 1.

Поэтому понятие производной по времени должно быть определено в квантовой механике иным образом. Естественно определить производную  $\dot{\bar{f}}$  от величины  $f$  как величину, среднее значение которой равно производной по времени от среднего значения  $\bar{f}$ . Таким образом, имеем, по определению,

$$\overline{\dot{f}} = \dot{\bar{f}}$$

Исходя из этого определения, нетрудно получить выражение для квантово-механического оператора  $\dot{\bar{f}}$ , соответствующего величине  $\dot{f}$ :

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

Здесь  $\frac{d\hat{f}}{dt}$  есть оператор, получающийся дифференцированием оператора  $\hat{f}$  по времени, от которого последний может зависеть, как от параметра. Подставляя для производных  $\frac{d\Psi}{dt}$ ,  $\frac{d\Psi^*}{dt}$  их выражения согласно (8.1), получим

$$\bar{\dot{f}} = \int \Psi^* \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} \Psi dq + \frac{i}{\hbar} \int (\hat{H}^* \Psi^*) \hat{f} \Psi dq + \int \Psi^* \hat{f} (\hat{H} \Psi) dq$$

Поскольку оператор  $\hat{H}$  эрмитов, то

$$\int (\hat{H}^* \Psi^*) \hat{f} \Psi dq = \int \Psi^* \hat{H} \hat{f} \Psi dq$$

таким образом имеем

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

Поскольку, с другой стороны, должно быть, по определению средних значений,  $\bar{\dot{f}} = \int \Psi^* \hat{f} \Psi dq$ , то отсюда видно, что выражение, стоящее в скобках под интегралом, представляет собой искомый оператор  $\hat{\dot{f}}$ :

$$\hat{\dot{f}} = \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H} \hat{f}]$$

В классической физике можно записать аналогичное выражение:

$$\dot{f} = \frac{\partial f}{\partial t} + \{Hf\}$$

Где  $\{ \}$  обозначают скобки Пуассона.

Если оператор  $\hat{f}$  не зависит от времени явно, то  $\hat{\dot{f}}$  сводится, с точностью до множителя, к коммутатору оператора  $\hat{f}$  с гамильтонианом.

Очень важной категорией физических величин являются те, операторы которых не зависят явно от времени и, кроме того, коммутативны с гамильтонианом, так что  $\hat{\dot{f}} = 0$ .

Такие величины называют сохраняющимися. Для них  $\bar{\dot{f}} = \dot{\bar{f}} = 0$ , т. е.  $\bar{\dot{f}} = const$ . Другими словами, среднее значение величины остается постоянным во времени. Можно также утверждать, что если в данном состоянии величина  $f$  имеет определенное значение (т. е. волновая функция является собственной функцией оператора  $\hat{f}$ ), то и в дальнейшие моменты времени она будет иметь определенное—то же самое—значение.

## Стационарные состояния

Гамильтониан замкнутой системы (а также системы, находящейся в постоянном — но не в переменном — внешнем поле) не может содержать времени явно. Это следует из того, что по отношению к такой физической системе все моменты времени эквивалентны. Поскольку, с другой стороны, всякий оператор, конечно, коммутативен сам с собой, то мы приходим к выводу, что у систем, не находящихся в переменном внешнем поле, функция Гамильтона сохраняется. Как известно, сохраняющаяся функция Гамильтона называется энергией. Смысл закона сохранения энергии в квантовой механике состоит в том, что если в данном состоянии энергия имеет определенное значение, то это значение остается постоянным во времени.

Состояния, в которых энергия имеет определенные значения, называются стационарными состояниями системы. Они описываются волновыми функциями  $\Psi_n$ , являющимися собственными функциями оператора Гамильтона, т. е. удовлетворяющими уравнению  $\hat{H}\Psi_n = E_n\Psi_n$ , где  $E_n$  — собственные значения энергии. Соответственно этому волновое уравнение (8.1) для функции  $\Psi_n$ :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_n}{\partial t} = \hat{H}\Psi_n = E_n\Psi_n$$

может быть непосредственно проинтегрировано по времени и дает:

$$\Psi_n = \psi_n(q) e^{-iE_n t / \hbar}$$

где  $\psi_n$  — функция только координат. Этим определяется зависимость волновых функций стационарных состояний от времени.

Малой буквой  $\psi$  мы будем обозначать волновые функции стационарных состояний без временного множителя. Эти функции, а также сами собственные значения энергии, определяются уравнением

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

Стационарное состояние с наименьшим из всех возможных значением энергии называется основным состоянием системы.

Разложение произвольной волновой функции  $\Psi$  по волновым функциям стационарных состояний имеет вид

$$\Psi = \sum_n a_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \psi_n(q)$$

Квадраты  $|a_n|^2$  коэффициентов разложения, как обычно, определяют вероятности различных значений энергии системы.

Распределение вероятностей для координат в стационарном состоянии определяется квадратом  $|\Psi_n|^2 = |\psi_n|^2$ ; мы видим, что оно не зависит от времени. То же

самое относится и к средним значениям  $\bar{f} = \int \Psi_n^* \hat{f} \Psi_n dq = \int \psi_n^* \hat{f} \psi_n dq$  всякой физической величины  $f$  (оператор которой не зависит от времени явно).

Как указывалось, оператор всякой сохраняющейся величины коммутативен с гамильтонианом. Это значит, что всякая сохраняющаяся физическая величина может быть измерена одновременно с энергией.

Среди различных стационарных состояний могут быть и такие, которые соответствуют одному и тому же собственному значению энергии (или, как говорят, **энергетическому уровню** системы), отличаясь значениями каких-либо других физических величин. О таких уровнях, которым соответствует по нескольку различных стационарных состояний, говорят как о **вырожденных**. Физически возможность существования вырожденных уровней связана с тем, что энергия, вообще говоря, не составляет сама по себе полной системы физических величин.

Уровни энергии системы, вообще говоря, вырождены, если имеются две сохраняющиеся физические величины  $f$  и  $g$ , операторы которых некоммутативны. Действительно, пусть  $\psi$  есть волновая функция стационарного состояния, в котором, наряду с энергией, имеет определенное значение величина  $f$ . Тогда можно утверждать, что функция  $\hat{g}\psi$  не совпадает (с точностью до постоянного множителя) с  $\psi$ ; противное означало бы, что имеет определенное значение также и величина  $g$ , что невозможно, так как  $f$  и  $g$  не могут быть измерены одновременно. С другой стороны, можно показать, что функция  $\hat{g}\psi$  есть собственная функция гамильтониана, соответствующая тому же значению  $E$  энергии, что и  $\psi$ :

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

Первое равенство было получено ввиду равенства нулю коммутатора  $[\hat{g}\hat{H}]$  (ведь  $g$  сохраняется!). Таким образом, мы видим, что энергии  $E$  соответствуют более чем одна собственная функция, т. е. уровень вырожден.

Спектр собственных значений энергии может быть как дискретным, так и непрерывным. Стационарное состояние дискретного спектра всегда соответствует финитному движению системы, т. е. движению, при котором система или какая-либо ее часть не уходит на бесконечность. Действительно, для собственных функций дискретного спектра интеграл  $\int |\Psi|^2 dq$ , взятый по всему пространству, конечен. Это, во всяком случае, означает, что квадрат  $|\Psi|^2$  достаточно быстро убывает, обращаясь на бесконечности в нуль. Другими словами, вероятность бесконечных значений координат равна нулю, т. е. система совершает финитное движение или, как говорят, находится в связанном состоянии.

Для волновых функций непрерывного спектра интеграл  $\int |\Psi|^2 dq$  расходится.

Квадрат волновой функции  $|\Psi|^2$  не определяет здесь непосредственно вероятности различных значений координат и должен рассматриваться лишь как величина, пропорциональная этой вероятности. Расходимость интеграла  $\int |\Psi|^2 dq$  всегда бывает

связана с тем, что  $|\Psi|^2$  не обращается на бесконечности в нуль (или обращается в нуль недостаточно быстро). Поэтому можно утверждать, что интеграл  $\int |\Psi|^2 dq$ , взятый по области пространства, внешней по отношению к любой сколь угодно большой, но конечной замкнутой поверхности, будет все же расходиться. Это значит, что в рассматриваемом состоянии система (или какая-либо ее часть) находится на бесконечности. Для волновой функции, представляющей собой суперпозицию волновых функций различных стационарных состояний непрерывного спектра, интеграл  $\int |\Psi|^2 dq$  может оказаться сходящимся, так что система находится в конечной области пространства. Однако с течением времени эта область будет неограниченно смещаться, и в конце концов система уходит на бесконечность. Таким образом, стационарные состояния непрерывного спектра соответствуют инфинитному движению системы.

## Матричная формулировка квантовой механики

Предположим для удобства, что рассматриваемая система обладает дискретным энергетическим спектром (все получаемые ниже соотношения непосредственным образом обобщаются и на случай непрерывного спектра). Пусть  $\Psi = \sum_n a_n \Psi_n(q)$  есть разложение произвольной волновой функции по волновым функциям  $\Psi_n$  стационарных состояний. Вообще говоря, можно раскладывать по собственным функциям любого другого эрмитового оператора. Если подставить это разложение в определение среднего значения некоторой величины  $f$ , то получим

$$\bar{f} = \sum_{n,m} a_n^* a_m f_{nm}$$

где  $f_{nm}$  обозначают интегралы

$$f_{nm} = \int \Psi_n^* \hat{f} \Psi_m dq$$

Совокупность величин  $f_{nm}$  со всеми возможными  $n, m$  называют **матрицей** величины  $f$ , а о каждом из  $f_{nm}$  говорят как о матричном элементе, соответствующем переходу из состояния  $m$  в состояние  $n$ .

Рассмотрим, какое условие налагает на матрицу  $f_{nm}$  требование действительности величины  $f$ . Запишем определение среднего, которое должно быть действительным:

$$\bar{f} = \bar{f}^* \rightarrow \sum_{n,m} a_n^* a_m f_{nm} = \sum_{n,m} a_n^* a_m^* f_{nm}^*$$

Поменяем немые индексы  $n$  и  $m$  между собой в первой части равенства:

$$\sum_{n,m} a_n^* a_m f_{nm} = \sum_{n,m} a_n^* a_m f_{mn}^*$$

Но это равенство должно выполняться для всех  $a_n, a_m$ , поэтому с необходимостью  $f_{nm} = f_{mn}^*$ , что является условием эрмитовости матрицы. Таким образом, матрица вещественных величин эрмитова также как и оператор соответствующей величины.

Можно показать, что матричный элемент произведения операторов есть произведение матриц соответствующих операторов:

$$(fg)_{mn} = \sum_k f_{mk} g_{kn}.$$

Рассмотрим, как формулируется уравнение на собственные значения в матричном представлении  $\hat{f}\Psi = f\Psi$ . Для этого подставим в это уравнение разложение функции  $\Psi$  по собственным функциям  $\Psi_n$ :

$$\sum_m a_m \hat{f}\Psi_m = \sum_m fc_m \Psi_m$$

Умножим это уравнение с обеих сторон на  $\Psi_n^*$  и проинтегрируем по  $dq$ :

$$\begin{aligned} \sum_m c_m \int \Psi_n^* \hat{f}\Psi_m dq &= \sum_m fc_m \int \Psi_n^* \Psi_m dq \\ \sum_m c_m \langle \Psi_n | \hat{f}\Psi_m \rangle &= \sum_m fc_m \langle \Psi_n | \Psi_m \rangle \end{aligned}$$

Интеграл в левой части – матричный элемент  $f$ , а в правой части – дельта-символ Кронекера:

$$\sum_m c_m f_{nm} = \sum_m fc_m \delta_{nm}$$

Или:

$$\sum_m c_m (f_{nm} - f \delta_{nm}) = 0 \quad (11.14)$$

Таким образом, мы получили систему алгебраических однородных уравнений первой степени (с неизвестными  $c_m$ ). Как известно, такая система обладает отличными от нуля решениями лишь при условии обращения в нуль определителя, составленного из коэффициентов в уравнениях, т. е. при условии:

$$|f_{nm} - f \delta_{nm}| = 0$$

Корни этого уравнения (в котором  $f$  рассматривается как неизвестное) и представляют собой возможные значения величины  $f$ . Совокупность же величин  $c_m$ , удовлетворяющих уравнениям (11.14) с  $f$ , равным какому-либо из этих значений, определяет соответствующую собственную функцию.

Таким образом, в матричном представлении динамические переменные описываются квадратными матрицами.

$$\begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & \dots & \dots \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & \dots & \dots \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & A_{nn} \end{vmatrix},$$

где матричные элементы  $A_{mn} = \int \varphi_m^* \hat{A} \varphi_n dV$ ,  $\varphi_m$  – собственные функции некоторого эрмитового оператора  $B$ .

Волновые функции  $\Psi$  и  $\Psi^*$  заменяются на матрицы-столбцы и матрицы-строчки:

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix}; \quad (a_1^*, a_2^*, \dots).$$

В этом случае говорится, что оператор  $\hat{A}$  задан на пространстве собственных функций оператора  $\hat{B}$  матрицей чисел  $A_{mn}$ . Если  $\hat{B}$  есть оператор импульса, то имеем дело с импульсным представлением ( $\vec{p}$ -представлением). Если  $\hat{B} = \hat{H}$ , то соответствующее представление называется энергетическим ( $E$ -представлением).

# ЛЕКЦИЯ 7

## Неопределённость Гайзенберга

Для случайных переменных неопределённость – это среднеквадратичное отклонение – квадратный корень из дисперсии случайной величины:

$$\Delta Q = \sqrt{\sum_i p_i (Q_i - \bar{Q})^2}$$

где среднее определяется следующим образом:

$$\bar{Q} = \sum_i p_i Q_i$$

где  $p_i$  – вероятности обнаружения величины  $Q_i$ , сумма вероятностей равна единице:  $\sum_i p_i = 1$ . Если раскрыть скобки в определении дисперсии, получим:

$$\Delta Q = \sqrt{\sum_i p_i Q_i^2 - 2\bar{Q} \sum_i p_i Q_i + \bar{Q}^2 \sum_i p_i} = \sqrt{\bar{Q}^2 - 2\bar{Q}^2 + \bar{Q}^2} = \sqrt{\bar{Q}^2 - \bar{Q}^2}$$

Т.е. квадрат неопределённости равен разности среднего квадрата величины и квадрата среднего.

Усреднение в квантовой механике иногда обозначается как  $\langle \rangle$ .

Найдём, какие ограничения устанавливаются на неопределённости координаты и импульса. Для этого рассмотрим одномерный случай – пакет с волновой функцией  $\psi(x)$ , зависящей только от одной координаты; предположим для простоты, что средние значения  $x$  и  $p_x$  в этом состоянии равны нулю. В этом случае неопределённость координаты и импульса сводится к среднему квадрату этих величин:

$$(\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle$$

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle$$

Запишем очевидное неравенство, которое выполняется при всех  $\alpha$  (будем считать его действительным):

$$F = \int_{-\infty}^{\infty} \left| \alpha x \psi + \frac{d\psi}{dx} \right|^2 dx \geq 0$$

Раскроем скобки:

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

Первое слагаемое:

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

Второе слагаемое:

$$\alpha \int_{-\infty}^{\infty} x \frac{d|\psi|^2}{dx} dx = x \frac{d|\psi|^2}{dx} \Big|_{-\infty}^{\infty} - \alpha \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = -\alpha$$

Третье слагаемое:

$$F = \int_{-\infty}^{\infty} \left| \frac{d\psi}{dx} \right|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\psi}{dx} \frac{d\psi^*}{dx} dx = \psi^* \frac{d\psi}{dx} \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{d^2}{dx^2} \psi dx = \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{p}^2 \psi dx = \frac{(\Delta p)^2}{\hbar^2}$$

Итого:

$$F = \alpha^2 (\Delta x)^2 - \alpha + \frac{(\Delta p)^2}{\hbar^2}$$

Для того чтобы этот квадратичный (по  $\alpha$ ) трехчлен был положительным при любых значениях  $\alpha$ , его дискриминант должен быть отрицательным. Отсюда получаем неравенство:

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

### Свойства решений одномерного уравнения Шрёдингера

Запишем одномерное уравнение Шрёдингера:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} = (V(x) - E)\Psi \quad (1)$$

Его же можно переписать в следующем виде:

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

У этого уравнения может быть два решения – локализованное и нелокализованное. Дискретный спектр, как мы показали, отвечает локализованному решению (на бесконечности волновая функция равна нулю).

Во-первых, отметим, что функции, отличающиеся на постоянный множитель, совпадают (модуль уносится нормировкой, а фаза при расчёте средних сокращается).

Покажем, что в случае дискретного случая вырождения в одномерной системе невозможно. Пусть две функции  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$  отвечают одному уровню энергии тогда, согласно (2):

$$\frac{\Psi_1''}{\Psi_1} = \frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E) = \frac{\Psi_2''}{\Psi_2}$$

или  $\Psi_1'' \Psi_2 = \Psi_2'' \Psi_1$ . Интегрируя это соотношение, находим:

$$\Psi_1' \Psi_2 - \Psi_2' \Psi_1 = const$$

Но мы рассматриваем локализованные решения, зануляющиеся на бесконечности, поэтому  $const = 0$ , тогда:

$$\frac{\Psi_1'}{\Psi_1} = \frac{\Psi_2'}{\Psi_2}$$

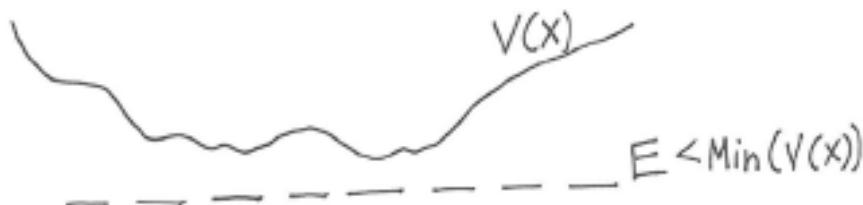
Интегрируя еще раз, получим  $\Psi_1 = c\Psi_2$ , т. е. обе функции по существу совпадают.

Точно также можно показать, что для дискретного спектра решение всегда можно сделать чисто действительным (для прямой и сопряжённой функции уравнения одинаковы, спектр должен быть невырожден – бинго).

Рассмотрим случай нелокализованного решения, но ограниченного с одной стороны: потенциальная энергия слева выше энергии частицы, справа – ниже, но выходит на константу. Т.к. слева функция должна быть ограничена, то предыдущее доказательство работает, и уровни всё ещё не вырождены.

Для волновых функций дискретного спектра может быть высказана следующая, так называемая, **осцилляционная теорема**: функция  $\phi_n(x)$ , соответствующая  $(n+1)$ -му по величине собственному значению  $E_n$ , обращается в нуль (при конечных значениях  $x$ )  $n$  раз.

**Во-вторых**, всегда существует низший уровень. Не может быть состояния с энергией ниже минимальной потенциальной энергии



Здесь два решения. 1. Отметим, что уравнение  $\frac{\Psi''}{\Psi} = \frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E)$  требует, чтобы

функция была выпукла на всей числовой оси. Но это невозможно – это приведёт к неограниченному решению везде.

2. Считая ВФ действительной (спектр дискретный!) можно домножить на  $\Psi$  обе части и проинтегрировать по  $x$ :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi'' \Psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E) \Psi^2 dx$$

Правая часть всегда больше нуля, а левую проинтегрируем по частям, учтя ограниченность функции, получим следующее неравенство:

$$-\int_{-\infty}^{\infty} (\Psi')^2 dx < 0,$$

которое, очевидно противоречиво.

Таким образом в системе всегда есть **ground state** (есть исключения, когда потенциал уходит на минус бесконечность)

**Во-третьих**, для симметричного потенциала решения бывают только двух типов – симметричные и антисимметричные.

Общие свойства, происходящие из (2) и действительности функций: под потенциалом функция чисто убывает, т.к. должна быть везде выпукла. Осцилляции только в области над потенциалом.

## **Граничные условия.**

1. Для дискретного спектра – затухание в нуле.
2. Далее, интегрированием уравнения в окрестности любой точки

$$\int_{x_0-\delta}^{x_0+\delta} \frac{\hbar^2}{2m} \Psi'' = \int_{x_0-\delta}^{x_0+\delta} (V(x) - E) \Psi$$

Если потенциал нигде не обращается в бесконечность (а сама ВФ везде конечна!), то при стремлении  $d$  к нулю, правая часть зануляется. В левой части интеграл берётся, и мы получим:

$$\Psi'(x_0 - \delta) = \Psi'(x_0 + \delta)$$

а это определение непрерывности производной функции. Таким образом, в хороших потенциалах (пусть даже не непрерывных) производная ВФ непрерывна. Но если потенциал обращается в бесконечность где-нибудь, то надо быть осторожным. Аналогично можно показать, что волновая функция непрерывна, причём даже в плохих потенциалах. Иначе уравнение не удовлетворяется.

## **Яма с бесконечно высокими стенками**

Infinite potential well forces a particle to live on an interval of the real line, the interval conventionally chosen to be  $x \in [0, a]$ . At the ends  $0$  and  $a$  of the interval there are hard walls that prevent the particle from going to  $x > a$  and  $x < 0$ .

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a \\ \infty, & x \leq 0, x \geq a \end{cases} \quad (1.1)$$

The potential is defined as follows and shown in figure 1.

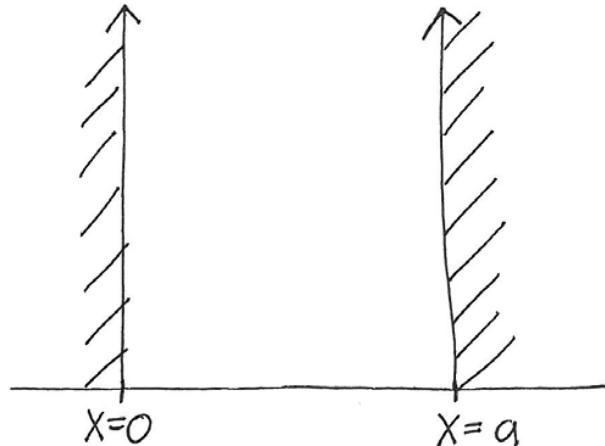


Figure 1: The infinite square well potential

It is reasonable to assume that the wavefunction must vanish in the region where the potential is infinite. Classically any region where the potential exceeds the energy of the particle is forbidden. Not so in quantum mechanics. But even in quantum mechanics a particle can't be in a region of **infinite** potential. We will be able to justify these claims by studying the more

complicated ***finite*** well in the limit as the height of the potential goes to infinity. But for the meantime we simply state the fact:

$$\psi(x) = 0 \quad \text{for } x \leq 0 \text{ and for } x \geq a \quad (1.2)$$

Since the wavefunction must be continuous we must have that it should vanish at  $x = 0$  and at  $x = a$ :

1.  $\psi(x = 0) = 0$ .
2.  $\psi(x = a) = 0$ .

These are our boundary conditions. You may wonder about the continuity of the first derivative  $\psi'(x)$ . This derivative vanishes outside the interval and continuity would say that  $\psi'$  should vanish at  $0$  and at  $a$ . But this is impossible. A solution of Schrödinger's equation (a second order differential equation) for which both the wavefunction and its derivative vanishes at a point is identically zero! If a solution exists, we must accept that  $\psi'$  can have discontinuities at an infinite wall. Therefore, we do not impose any boundary condition on  $\psi'$ . The two conditions above will suffice to find a solution. In that solution  $\psi$  is discontinuous at the endpoints.

In the region  $x \in [0, a]$  the potential vanishes and the Schrödinger equation takes the form

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi, \quad (1.3)$$

and as we did before, one can show that the energy  $E$  must be positive (do it!). This allows us to define, as usual, a real quantity  $k$  such that

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \rightarrow E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (1.4)$$

The differential equation is then

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi, \quad (1.5)$$

and the general solution can be written as

$$\psi(x) = c_1 \cos(kx) + c_2 \sin(kx) \quad (1.6)$$

with constants  $c_1$  and  $c_2$  to be determined. For this we use our boundary conditions.

The condition  $\psi(x = 0) = 0$  implies that  $c_1$  in Eq 1.6 must be zero. The coefficient of  $\sin(kx)$  need not be, since this function vanishes automatically for  $x = 0$ . Therefore, the solution so far reads

$$\psi(x) = c_2 \sin(kx) \quad (1.7)$$

Note that if we demanded continuity of  $\psi'$  we would have to ask for  $\psi'(x = 0) = 0$  and that would make  $c_2$  equal to zero, and thus  $\psi$  identically zero. That is **not** a solution. There is no particle if  $\psi = 0$ .

At this point we must impose the vanishing of  $\psi$  at  $x = a$ .

$$c_2 \sin(ka) = 0 \rightarrow ka = n\pi \rightarrow k_n = \frac{n\pi}{a}. \quad (1.8)$$

Here  $n$  must be an integer and the solution would be

$$\psi_n(x) = N \sin\left(\frac{\pi nx}{a}\right), \quad (1.9)$$

with  $N$  a normalization constant. Which integers  $n$  are acceptable here? Well,  $n = 0$  is not acceptable, because it would make the wavefunction zero. Moreover,  $n$  and  $-n$  give the same wavefunction, up to a sign. Since the sign of a wavefunction is irrelevant, it would thus be double counting to include both positive and negative  $n$ 's. We restrict ourselves to  $n$  being positive integers.

To solve for the coefficient, we utilize the normalization condition; every  $\psi_n(x)$  must be normalized.

$$1 = N^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{\pi nx}{a}\right) dx = N^2 \frac{1}{2} a \rightarrow N = \sqrt{\frac{2}{a}}. \quad (1.10)$$

Therefore, all in all, our solutions are:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi nx}{a}\right), \quad E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (1.11)$$

Each value of  $n$  gives a different energy, implying that in the one-dimensional infinite square well there are no degeneracies in the energy spectrum! The ground state – the lowest energy state – corresponds to  $n = 1$  and has nonzero energy.

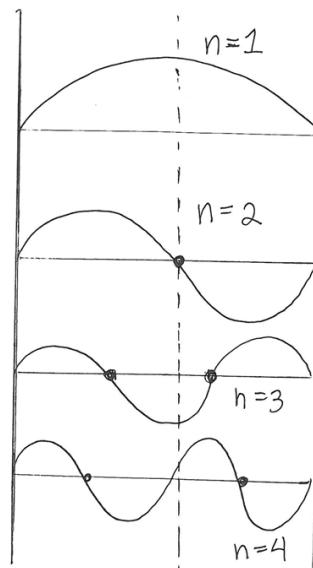


Figure 2: The four lowest energy eigenstates for the infinite square well potential. The  $n$ -th wavefunction solution  $\psi_n$  has  $(n - 1)$  nodes. The solutions are alternately symmetric and antisymmetric about the midpoint  $x = a/2$ .

Figure 2 shows the first four solutions to the 1D infinite square well, labeled from  $n = 1$  to  $n = 4$ . We note a few features:

1. The ground state  $n = 1$  has no nodes. A node is a zero of the wavefunction that is not at the ends of the domain of the wavefunction. The zeroes at  $x = 0$  and  $x = a$  do not count as nodes. Clearly  $\psi_1(x)$  does not vanish anywhere in the interior of  $[0, a]$  and therefore it has no nodes. It is in fact true that any normalizable ground state of a one-dimensional potential does not have nodes.

The first excited state,  $n = 2$  has one node. It is at  $x = a$ , the midpoint of the interval. The second excited state,  $n = 3$  has two nodes. The pattern in fact continues. The  $n$ -th excited state will have  $n$  nodes.

2. In figure 3 the dotted vertical line marks the interval midpoint  $x = a$ . We note that the ground state is symmetric under reflection about  $x = a$ . The first excited state is antisymmetric, indeed its node is at  $x = a$ . The second excited state is again symmetric. Symmetry and antisymmetry alternate forever.

The symmetry just noted is not accidental. It holds, in general for potentials  $V(x)$  that are even functions of  $x$ :  $V(-x) = V(x)$ . Our potential does not satisfy this equation, but this could have been changed easily and with no consequence. We could shift the well over so that rather

than having  $V(x) = 0$  from  $0 \leq x \leq a$ , it extends from  $-\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}$  and then it would be symmetric about the origin  $x = 0$  (see Figure 3). We will later prove that the bound states of a one-dimensional even potential are either even or odd! Here we are just seeing an example of such result.

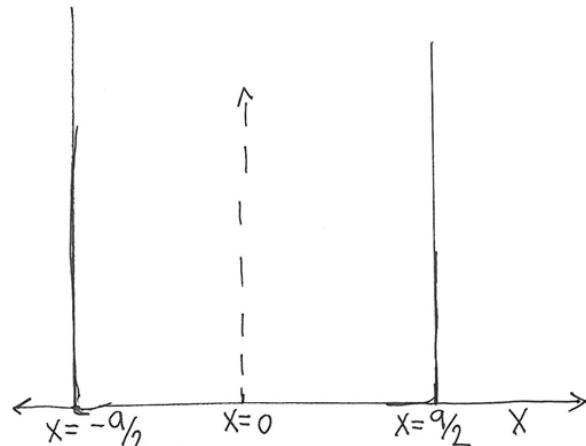


Figure 3: The infinite square well shifted to the left to make it symmetric about the origin.

The wavefunctions  $\psi_n(x)$  with  $n = 1, 2, \dots$  form a complete set that can be used to expand any function in the interval  $x \in [0, a]$  that vanishes at the endpoints. If the function does not vanish at the endpoints, the convergence of the expansion is delicate, and physically such wavefunction would be problematic as one can verify that the expectation value of the energy is infinite

**Поговорить про размерное квантование.**  
**Рассказать про квантование в твёрдом теле**

# ЛЕКЦИЯ 8

## Оцилляционная теорема

Recall the infinite well potential

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a \\ \infty, & x \leq 0, \quad x \geq a \end{cases} \quad (2.18)$$

The bound states take the form

$$\psi_n(x) = N \sin\left(\frac{\pi n x}{a}\right), \quad (2.19)$$

and corresponding energies

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}, \quad n=1,2,\dots \quad (2.20)$$

Note that  $\psi_n$  has  $(n - 1)$  nodes (zeroes). (The points  $x = 0$  and  $x = a$  are not nodes, but rather endpoints.)

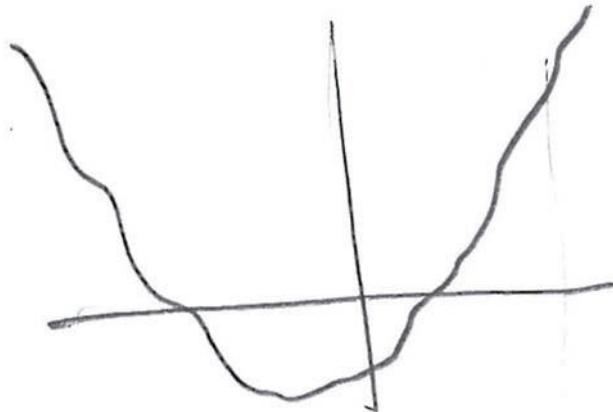


Figure 3: A smooth potential that goes to infinity as  $|x| \rightarrow \infty$ .

This leads us to the **node theorem**. Consider a potential  $V(x)$  that is continuous and satisfies  $V(x) \rightarrow \infty$  as  $|x| \rightarrow \infty$  (Fig. 3). This potential has a number of bound states (energy eigenstates that satisfy  $\psi \rightarrow 0$  as  $|x| \rightarrow \infty$ ), which we index  $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots$ . Recall also that there are no degenerate bound states in one dimension. The node theorem states that  $\psi_n$  has  $(n - 1)$  nodes. We will give an intuitive, non-rigorous explanation of this phenomenon.

For this argument we also recall that  $\psi(x_0) = \psi'(x_0) = 0$  implies that  $\psi(x) = 0$  for all  $x$ . One cannot have vanishing derivative at a zero of the wavefunction. That applies to nodes or finite endpoints.

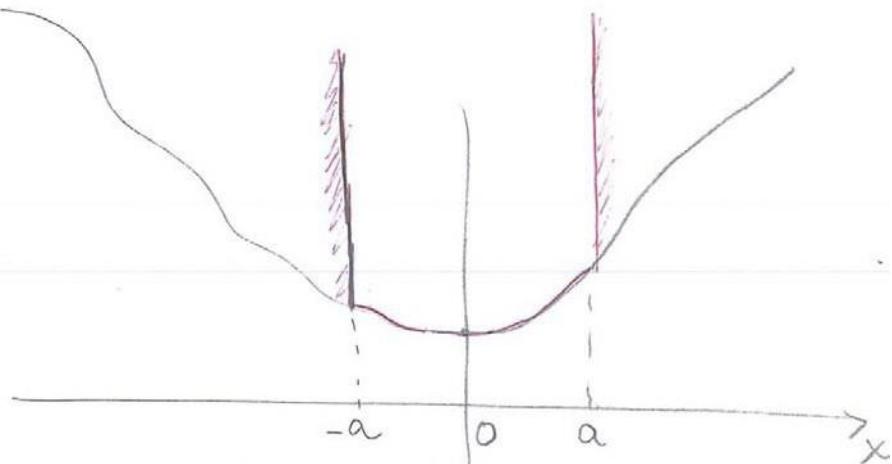


Figure 4: The screened potential  $V_a(x)$ .

First, we examine the potential and fix the location of  $x = 0$  at a minimum. We then define the screened potentials  $V_a(x)$  as follows:

$$V(x) = \begin{cases} V(x), & |x| < a \\ \infty, & |x| \geq a \end{cases} \quad (2.21)$$

As shown in Fig. 4, the screened potential  $V_a(x)$  is an infinite well of width  $2a$  which bottom is taken from  $V(x)$ . The argument below is based on two plausible assumptions. First: As  $a \rightarrow \infty$  the bound states of  $V_a(x)$  become the bound states of  $V(x)$ . Second: As  $a$  is increased the wavefunction and its derivative are continuously stretched and deformed.

When  $a$  is very small,  $V_a(x)$  is approximately a very narrow infinite well with a flat bottom – an infinite **square** well. This is because we chose  $x = 0$  to be a minimum and any minimum is locally flat. On this infinite square well the node theorem holds. The ground state, for example, will vanish at the endpoints and will have no nodes. We will now argue that as the screen is enlarged, we can't generate a node. This applies to the ground state, as we explicitly discuss below, and to all other states too. If we can't generate nodes by screen enlargement the node theorem applies to  $V(x)$ .

Why is this the case? Consider how we might develop an additional node while stretching the screen. To start with, consider the ground state in the top part of Figure 5. There is no node at this value of the screen, and we have  $\psi'(-a) > 0$  (left wall) and  $\psi'(a) < 0$  (right wall). Suppose that as we increase  $a$  we produce a node, shown for the larger screen  $a'$  below. For this to happen the sign of  $\psi'$  at one of the endpoints must change. In the case shown it is the right endpoint that experiences a change in the sign of  $\psi'$ . With the assumption of continuous stretching there would have to be some intermediate screen at which  $\psi' = 0$  at the right endpoint. But in that case,  $\psi = \psi' = 0$  at this endpoint, and then  $\psi(x) = 0$  for all  $x$ , which is clearly impossible.

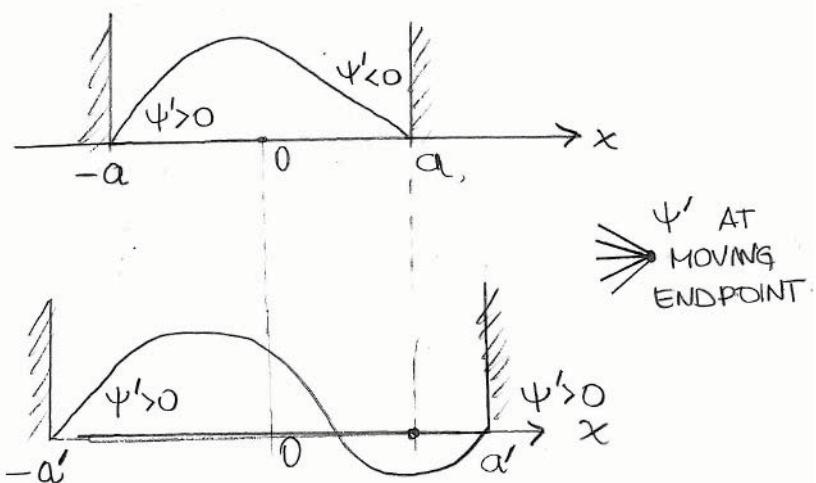


Figure 5: Introducing a single node requires changing the sign of the derivative at the right endpoint:  $\psi'(a) < 0$  but  $\psi'(a') > 0$ . At some intermediate screen, the value of  $\psi'$  at the right endpoint must become zero. But this is impossible.

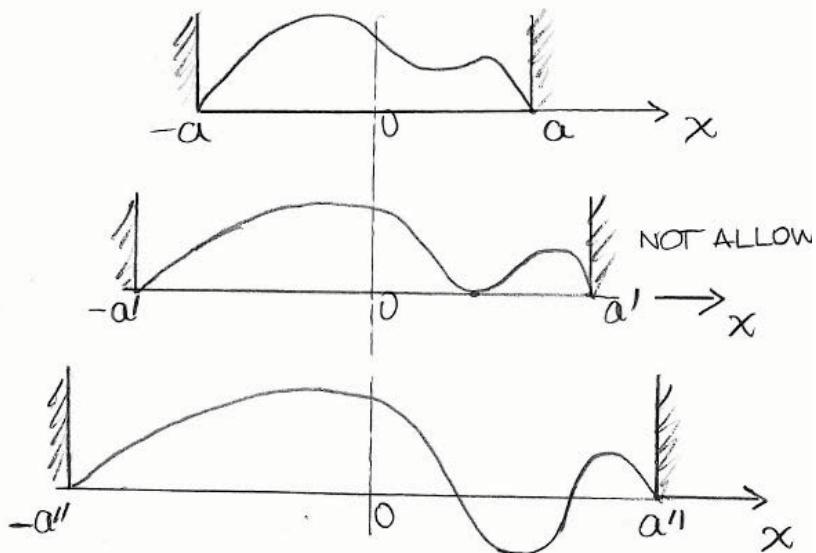


Figure 6: Introducing two nodes by having the wavefunction cross the  $x$ -axis in between the two boundaries (compare top and bottom). This is not possible as it would require in an intermediate screen (middle) in which  $\psi = \psi' = 0$  at some point.

It is possible to introduce nodes without changing the sign of  $\psi'$  at either endpoint. In this process, shown in Fig. 6, the wavefunction dips and produces two new nodes. This process can't take place, however. Indeed, for some intermediate screen the wavefunction must be tangential to the  $x$  axis and at this point we will have  $\psi = \psi' = 0$ , which is impossible.

We conclude that we cannot change the number of nodes of **any** wavefunction as we stretch the screen. The  $n$ -th excited state of the tiny infinite square well, with  $(n - 1)$  nodes will turn into the  $n$ -th excited state of  $V(x)$  with  $(n - 1)$  nodes. In the tiny infinite square well the energy levels are ordered in increasing energy by the number of nodes. The same is true at all stages of the stretching screen and therefore for true for  $V(x)$ . Any two consecutive energy levels

cannot get permuted because, by continuity, this would require a situation where we have a degeneracy, which is not possible.

### Прямоугольная яма (в семинар)

We now examine the finite square well, defined as follows and shown in figure 4.

$$V(x) = \begin{cases} -V_0, & |x| < a \\ 0, & |x| \geq a \end{cases} \quad (2.12)$$

Note that the potential energy is zero for  $|x| > a$ . The potential energy is negative and equal to  $-V_0$  in the well, because we defined  $V_0$  to be a positive number. The width of the well is  $2a$ . Note also that we have placed the bottom of the well differently than in the case of the infinite square well. The bottom of the infinite square well was at zero potential energy. If we wanted to obtain the infinite square well as a limit of the finite square well, we would have to take  $V_0$  to infinity, but care is needed to compare energies. The ones in the infinite square well are measured with respect to a bottom at zero energy. The ones in the finite square well are measured with respect to a bottom at  $-V_0$ .

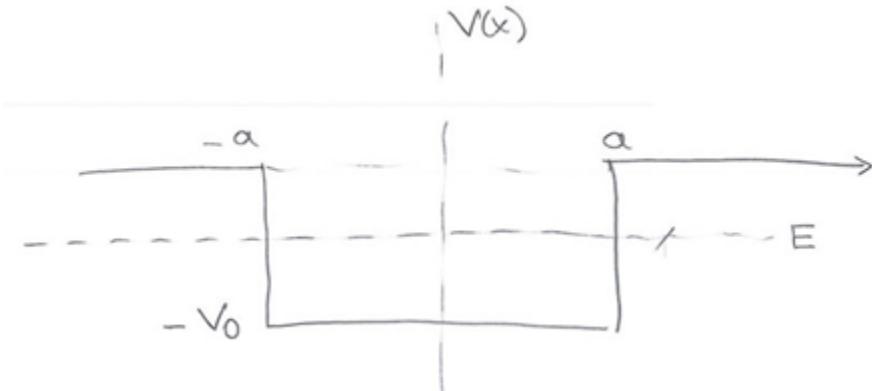


Figure 4: The finite square well potential

We will be interested in bound states namely, energy eigenstates that are normalizable. For this the energy  $E$  of the states must be negative. This is readily understood. For a bound state of energy  $E$ , the energy  $\tilde{E}$  measured with respect to the bottom of the potential is

$$\tilde{E} = E - (-V_0) = V_0 - |E| > 0 \quad (2.14)$$

Those  $\tilde{E}$  are the ones that can be compared with the energies of the infinite square well in the limit as  $V_0 \rightarrow \infty$ .

What are the bound state solutions to the Schrödinger equation with this potential? We have to examine how the equation looks in the various regions where the potential is constant and then use boundary conditions to match the solutions across the points where the potential is discontinuous.

We have the equation. Let's examine the regions, where, for simplicity, we define  $a(x)$  by

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi = \alpha(x)\psi,$$

where we have defined the factor  $\alpha(x)$  that multiplies the wavefunction on the right-hand side of the Schrödinger equation. We then consider the two regions

- region  $|x| > a$ :  $\alpha(x)$  is a positive constant. The wavefunction in this region constructed with real exponentials.
- region  $|x| < a$ :  $\alpha(x)$  is a negative constant. The wavefunction in this region is constructed with trigonometric functions.

The potential  $V(x)$  for the finite square well is an even function of  $x$ :  $V(-x) = V(x)$ . We can therefore use the theorem cited earlier (and proven later!) that for an even potential the bound states are either symmetric or antisymmetric. We begin by looking for even solutions, that is, solutions  $\psi$  for which  $\psi(-x) = \psi(x)$ .

**Even solutions.** Since the potential is piecewise continuous, we must study the differential equation in two regions:

- $|x| < a$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - (-V_0))\psi = -\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - |E|)\psi, \quad (2.16)$$

$V_0 - |E|$  is a positive constant thus define a real  $k > 0$  by

$$k^2 \equiv \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - |E|) > 0, \quad k > 0. \quad (2.17)$$

It is interesting to note that this equation is not too different from the free-particle equation  $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ . Indeed,  $(V_0 - |E|)$  is the kinetic energy of the particle and thus  $k$  has the usual interpretation. The differential equation to be solved now reads

$$\psi'' = -k^2\psi, \quad (2.18)$$

for which the only possible even solution is

$$\psi(x) = \cos(kx) \quad (2.19)$$

We are not including a normalization constant because, at this state we do not aim for normalized eigenstates. We will get an eigenstate and while it will not be normalized, it will be **normalizable**, and that's all that is essential. We are after is the possible energies. Normalized wavefunctions would be useful to compute expectation values.

- $|x| > a$

$$\psi'' = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - 0)\psi = \frac{2m|E|}{\hbar^2}\psi, \quad (2.20)$$

This time we define a real positive constant  $\kappa$  with the relation

$$\kappa^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2}, \quad \kappa > 0 \quad (2.21)$$

The differential equation to be solved now reads

$$\psi'' = \kappa^2\psi, \quad (2.22)$$

and the solutions are exponentials. In fact, we need exponentials that decay as  $x \rightarrow \pm\infty$ , otherwise the wavefunction will not be normalizable. This should be physically intuitive, in a classically forbidden region the probability to be far away from the well must be vanishingly small. For  $x > a$  we choose the decaying exponential

$$\psi(x) = A \cdot e^{-\kappa x} \quad (2.23)$$

where  $A$  is a normalization constant to be determined by the boundary conditions. More generally, given that the solution is even, we have

$$\psi(x) = A \cdot e^{-\kappa|x|} \quad (2.24)$$

It is now useful to note that  $\kappa^2$  and  $k^2$  satisfy a simple relation. Using their definitions above we see that the energy  $|E|$  drops out of their sum and we have

$$k^2 + \kappa^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \quad (2.25)$$

At this point we make progress by introducing unit free constants  $\xi$ ,  $\eta$ , and  $z_0$  as follows:

$$\begin{aligned} \eta &= ka > 0, \\ \xi &= \kappa a > 0, \\ z_0^2 &= \eta^2 + \xi^2 = (ka)^2 + (\kappa a)^2 = \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} \end{aligned} \quad (2.26)$$

Clearly  $\xi$  is a proxy for  $\kappa$  and  $\eta$  is a proxy for  $k$ . Both depend on the energy of the bound state. The parameter  $z_0$ , unit-free, just depends on the data associated with the potential (the depth  $V_0$  and the width  $2a$ ) and the mass  $m$  of the particle. If you are given a potential, you know the number  $z_0$ . A very deep and/or wide potential has very large  $z_0$ , while a very shallow and/or narrow potential has small  $z_0$ . As we will see the value of  $z_0$  tells us how many bound states the square well has.

Let us make clear that solving for  $\xi$  is actually like solving for the energy. From Eq. (2.21), we can see

$$\xi^2 = (\kappa a)^2 = \frac{2m|E|a^2}{\hbar^2} = \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} \frac{|E|}{V_0} = z_0^2 \frac{|E|}{V_0} \quad (2.28)$$

and from this we get

$$\frac{|E|}{V_0} = \left( \frac{\xi}{z_0} \right)^2 \quad (2.29)$$

This is a nice equation, the left-hand side gives the energy as a fraction of the depth  $V_0$  of the well and the right-hand side involves  $\xi$  and the constant  $z_0$  of the potential. The quantity  $\eta$  also encodes the energy in a slightly different way. From (2.17) we have

$$\eta^2 = (ka)^2 = \frac{2ma^2}{\hbar^2} (V_0 - |E|), \quad (2.30)$$

and using (2.14) we see that this provides the energy  $\tilde{E}$ , measured relative to the bottom of the potential

$$\tilde{E} = (V_0 - |E|) = \eta^2 \frac{\hbar^2}{2ma^2} \quad (2.31)$$

This formula is convenient to understand how the infinite square energy levels appear in the limit as the depth of the finite well goes to infinity. Note that the above answer for the energies is given by the unit free number  $\eta$  multiplied by the characteristic energy of an infinite well of width  $a$ .

Let us finally complete the construction. We must impose the continuity of the wavefunction and the continuity of  $\psi'$  at  $x = a$ . Using the expressions for  $\psi$  for  $x < a$  and for  $x > a$  these conditions give

$$\begin{aligned} \psi \text{ continuous at } x=a &\Rightarrow \cos(ka) = Ae^{-\kappa a} \\ \psi' \text{ continuous at } x=a &\Rightarrow -k \sin(ka) = -\kappa A e^{-\kappa a} \end{aligned} \quad (2.32)$$

Dividing the second equation by the first we eliminate the constant  $A$  and find a second relation between  $k$  and  $\kappa$ . This is exactly what is needed. The result is

$$k \tan(ka) = \kappa \rightarrow ka \tan(ka) = \kappa a \rightarrow \xi = \eta \tan(\eta) \quad (2.33)$$

Our task of finding the bound states is now reduced to finding solutions to the simultaneous equations

$$\text{Even solutions: } z_0^2 = \eta^2 + \xi^2, \quad \xi = \eta \tan(\eta), \quad \xi, \eta > 0 \quad (2.34)$$

These equations can be solved numerically to find all solutions that exist for a given fixed value of  $z_0$ . Each solution represents one bound state. We can understand the solution space by plotting these two equations in the first quadrant of an  $(\eta, \xi)$  plane, as shown in figure 5.

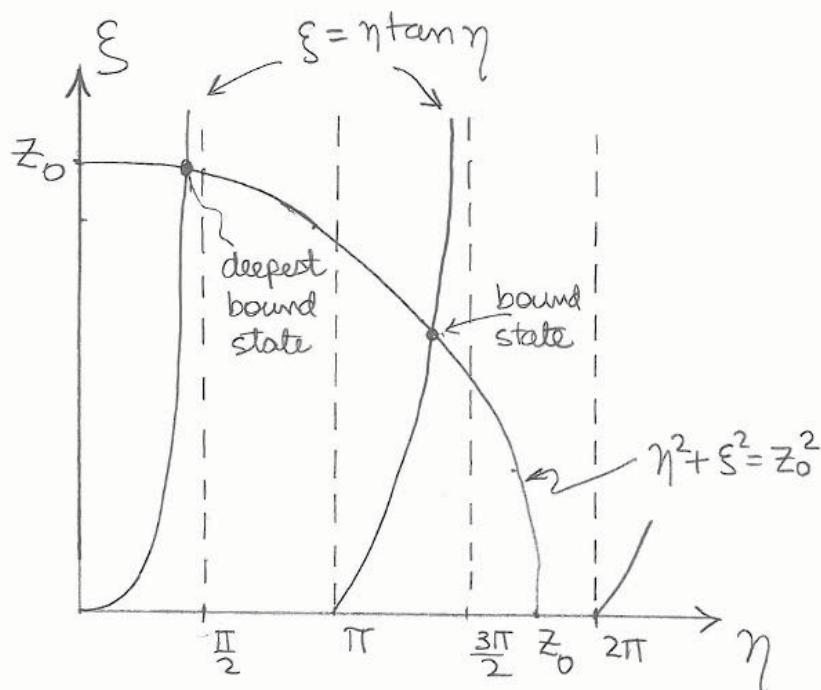


Figure 5: Graphical representation of the simultaneous equations (2.34). The intersections of the circle with the  $\eta \tan(\eta)$  function represent even bound state solutions in the finite square well potential. The deepest bound state is the one with lowest  $\eta$ .

The first equation in (2.34) is a piece of a circle of radius  $z_0$ . The second equation,  $\xi = \eta \tan(\eta)$ , gives infinitely many curves as  $\eta$  grows from zero to infinity. The value of  $\xi$  goes to infinity for  $\eta$  approaches each odd multiple of  $\pi/2$ . The bound states are represented by the intersections in the plot (heavy dots).

In the figure we see two intersections, which means two bound states. The first intersection takes place near  $\eta = \pi/2$  and with large  $\xi \sim z_0$ . This is the ground state, or the most deeply bound state. This can be seen from (2.29). Alternatively, it can be seen from equation (2.31), noting that this is the solution with smallest  $\eta$ . The second solution occurs for  $\eta$  near  $3\pi/2$ . As the radius of the circle becomes bigger, we get more and more intersections;  $z_0$  controls the number of even bound states. Finally, note that there is always an even solution, no matter how small  $z_0$  is, because the arc of the circle will always intersect the first curve of the  $\xi = \eta \tan(\eta)$  plot. Thus, at least one bound state exists however shallow the finite well is.

**Odd solutions.** For odd solutions all of our definitions ( $k, \kappa, z_0, \eta, \xi$ ) remain the same. The wave-function now is of the form

$$\psi(x) = \begin{cases} \sin(kx), & |x| < a \\ A \text{sign}(x) e^{-k|x|}, & |x| > a \end{cases} \quad (2.35)$$

Matching  $\psi$  and  $\psi'$  at  $x = a$  now gives  $\xi = -\eta \cot(\eta)$  (do it!). As a result, the relevant simultaneous equations are now

Odd solutions:  $\eta^2 + \xi^2 = z_0^2$ ,  $\xi = -\eta \cot(\eta)$ ,  $\xi, \eta > 0$  (2.36)

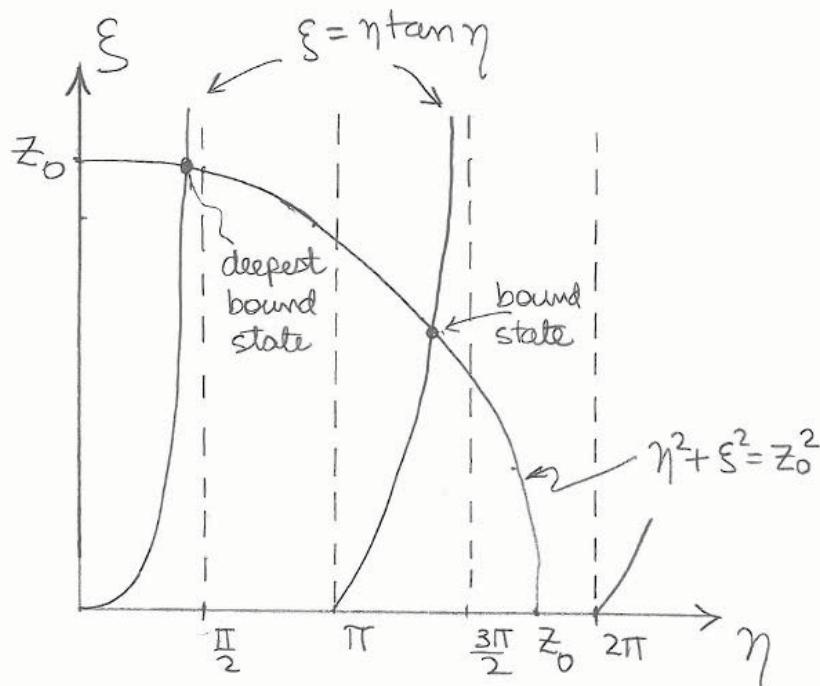


Figure 6: Graphical representation of (2.36). The intersections of the circle with the curves  $\xi = -\eta \cot(\eta)$  are odd bound-state solutions in the finite square-well potential. In the case displayed there is just one bound state.

In figure 6 the curve  $\xi = -\eta \cot(\eta)$  does not appear for  $\eta < \pi/2$  because  $\xi$  is then negative. For  $z_0 < \pi$  there are no odd bound-state solutions, but we still have the even bound state.

We could have anticipated the quantization of the energy by the following argument. Suppose you try to calculate energy eigenstates which, as far as solving the Schrödinger equation, are determined up to an overall normalization. Suppose you don't know the energy is quantized and you fix some arbitrary fixed energy and calculate. In both even and odd cases, we can set the coefficient of the  $\sin(kx)$  or  $\cos(kx)$  function inside the well equal to one. The coefficient of the decaying exponential outside the well was undetermined, we called it  $A$ . Therefore, we just have one unknown,  $A$ . But we have two equations, because we impose continuity of  $\psi$  and of  $\psi'$  at  $x = a$ . If we have one unknown and two equations, we have no reason to believe there is a solution. Indeed, generally there is none. But then, if we think of the energy  $E$  as an unknown, that energy appears at various places in the equations (in  $k$  and  $\kappa$ ) and therefore having two unknowns  $A$  and  $E$  and two equations, we should expect a single solution! This is indeed what happened.

In figure 7 we sketch the energy eigenstates of a square-well potential with three bound states of energies  $E_1 < E_2 < E_3$ . A few features of the wavefunctions are manifest: they alternate as even, odd, and even. They have zero, one, and two nodes, respectively. The second derivative of  $\psi$  is negative for  $|x| < a$  and positive for  $|x| > a$  (it is in fact discontinuous at  $x = \pm a$ ). The exponential decay in the region  $|x| > a$  is fastest for the ground state and slowest for the least bound state.

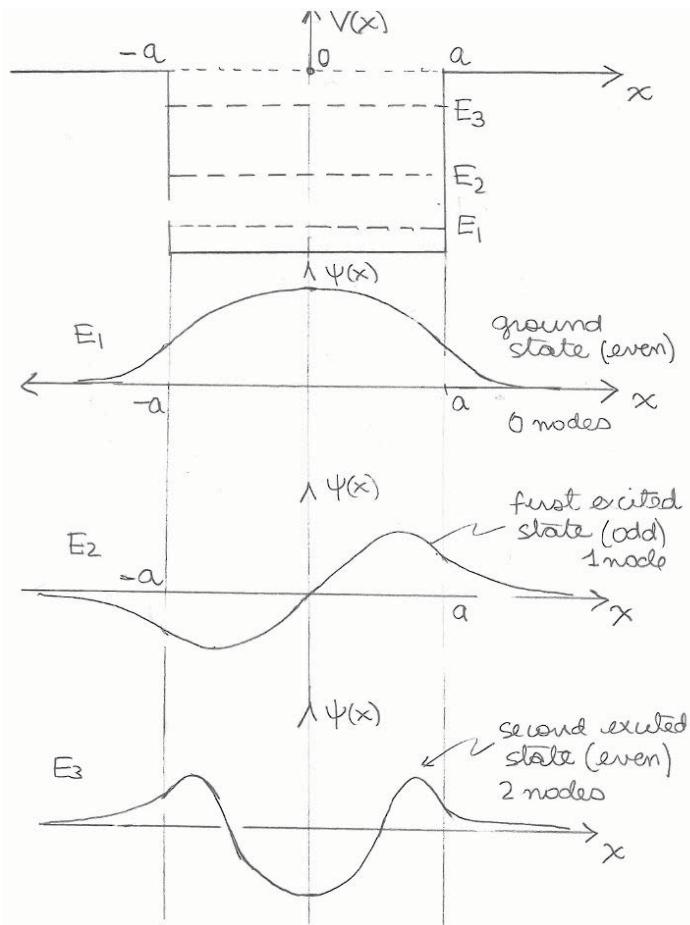


Figure 7: Sketching eigenstates of a finite square well potential. The energies are  $E_1 < E_2 < E_3$ .

### Плотность потока

Мы увидели, что локализованные состояниями имеют дискретный спектр. Теперь изучим состояния в не ограничивающих условиях. Для этого сначала найдём выражение для оператора потока частиц.

Интеграл  $\int |\Psi|^2 dV$ , взятый по некоторому конечному объему  $V$ , представляет собой вероятность нахождения частицы в этом объеме. Вычислим производную от этой величины по времени. Имеем

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

Подставив сюда

$$\hat{H} = \hat{H}^* = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(x, y, z)$$

и использовав тождество

$$\Psi\Delta\Psi^* - \Psi^*\Delta\Psi = \operatorname{div}(\Psi\nabla\Psi^* - \Psi^*\nabla\Psi),$$

получим

$$\frac{d}{dt} \int |\Psi|^2 dV = - \int \operatorname{div} \mathbf{j} dV,$$

где  $\mathbf{j}$  обозначает вектор<sup>1)</sup>

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m}(\Psi \operatorname{grad} \Psi^* - \Psi^* \operatorname{grad} \Psi) = \frac{1}{2m}(\Psi \hat{\mathbf{p}}^* \Psi^* + \Psi^* \hat{\mathbf{p}} \Psi). \quad (19.4)$$

Интеграл от  $\operatorname{div} \mathbf{j}$  может быть преобразован, согласно теореме Гаусса, в интеграл по замкнутой поверхности, окружающей объем  $V$ :

$$\frac{d}{dt} \int |\Psi|^2 dV = - \oint \mathbf{j} d\mathbf{f}. \quad (19.5)$$

Отсюда видно, что вектор  $\mathbf{j}$  может быть назван вектором **плотности потока вероятности** или просто **плотностью потока**. На примере состояния с известным импульсом можно показать, чему равна плотность потока.

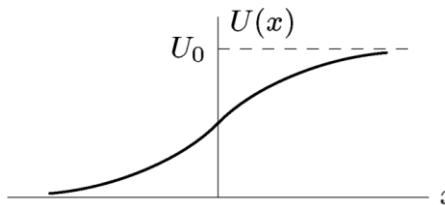
Интеграл от этого вектора по поверхности есть вероятность того, что в течение единицы времени частица пересечет эту поверхность. Вектор  $\mathbf{j}$  и плотность вероятности  $|\Psi|^2$  удовлетворяют уравнению.

$$\frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0,$$

аналогичному классическому уравнению непрерывности.

### Коэффициент прохождения

Рассмотрим движение частиц в поле потенциала-ступеньки:  $U(x)$  монотонно возрастает от одного постоянного предела ( $U = 0$  при  $x \rightarrow \infty$ ) до другого ( $U = U_0$  при  $x \rightarrow -\infty$ ).



Согласно классической механике частица с энергией  $E < U_0$ , движущаяся в таком поле слева направо, дойдя до потенциальной стенки, отражается от нее, начиная двигаться в обратном направлении; если же  $E > U_0$ , то частица продолжает двигаться в прежнем направлении с уменьшенной скоростью (заметим, что состояние стационарное, и технически нельзя говорить о движении, только о среднем значении скорости. Для примера для состояния  $e^{ikx}$  найдите вероятность встретить частицу возле некоторой точки  $x_0$ ). В квантовой механике возникает новое явление — даже при  $E > U_0$  частица может

отразиться от потенциальной стенки. Вероятность отражения должна вычисляться в принципе следующим образом.

Пусть частица движется слева направо. При больших положительных значениях  $x$  волновая функция должна описывать частицу, прошедшую «над стенкой» и движущуюся в положительном направлении оси  $x$ , т. е. должна иметь асимптотический вид:

$$\text{при } x \rightarrow \infty : \quad \psi \approx Ae^{ik_2x}, \quad k_2 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - U_0)}$$

асимптотическое выражение при  $x \rightarrow -\infty$  является линейной комбинацией двух решений уравнения свободного движения – распространяющегося вперёд и назад, т. е. имеет вид:

$$\text{при } x \rightarrow -\infty : \quad \psi \approx e^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}, \quad k_1 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}.$$

Первый член соответствует падающей на стенку частице (предполагаем ф нормированной таким образом, чтобы коэффициент при этом члене был равен единице); второй же член изображает отраженную от стенки частицу. Плотность потока в падающей волне

**(показать!)** пропорциональна  $k_1$ , в отраженной:  $k_1|B|^2$ , а в прошедшей:  $k_2|A|^2$ .

Определим **коэффициент прохождения**  $D$  частицы как отношение плотности потока в прошедшей волне к плотности потока в падающей:

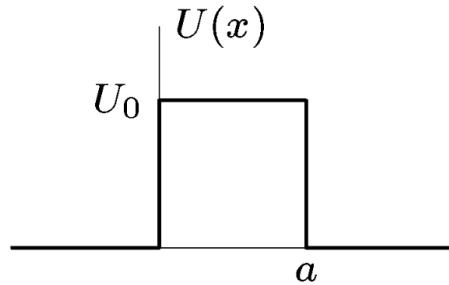
$$D = \frac{k_2}{k_1}|A|^2.$$

Аналогично можно определить коэффициент отражения  $R$  как отношение плотности отраженного потока к падающему; очевидно, что  $R = 1 - D$ :

$$R = |B|^2 = 1 - \frac{k_2}{k_1}|A|^2$$

### Прямоугольный барьер (в семинар)

Определить коэффициент прохождения частицы через прямоугольный потенциальный барьер



Пусть  $E > U_0$  и падающая частица движется слева направо. Тогда имеем для волновой функции в различных областях выражения вида

$$\psi = e^{ik_1x} + Ae^{-ik_1x} \quad \text{при } x < 0,$$

$$\psi = Be^{ik_2x} + B'e^{-ik_2x} \quad \text{при } 0 < x < a,$$

$$\psi = Ce^{ik_1x} \quad \text{при } x > a$$

(со стороны  $x > a$  должна быть только прошедшая волна, распространяющаяся в положительном направлении оси  $x$ ). Постоянные  $A, B, B'$ ,  $C$  определяются из условий непрерывности  $\psi$  и  $d\psi/dx$  в точках  $x = 0, a$ . Коэффициент прохождения определяется как  $D = k_1 |C|^2 / k_1 = |C|^2$ . Вычисление приводит к результату:

$$D = \frac{4k_1^2 k_2^2}{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 ak_2 + 4k_1^2 k_2^2}$$

При  $E < U_0$   $k_2$  — чисто мнимая величина; соответствующие выражения для  $D$  получаются заменой  $k_2$  на  $i\kappa_2$ , где  $\hbar\kappa_2 = \sqrt{2m(U_0 - E)}$ :

$$D = \frac{4k_1^2 \kappa_2^2}{(k_1^2 + \kappa_2^2)^2 \operatorname{sh}^2 a\kappa_2 + 4k_1^2 \kappa_2^2}.$$

### Дельта-функциональный барьер

Найдём параметры дельта-функционального барьера  $U(x) = \alpha \cdot \delta(x)$  — коэффициенты отражения и прохождения. Разобьём систему на две части —  $x < 0$  и  $x > 0$ . В обеих областях волновая функция удовлетворяет уравнению свободной частицы:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi,$$

Решение этого уравнения в обеих областях представляет суперпозицию экспонент:

$$\begin{aligned}\psi(x) &= c_1 e^{ikx} + c_2 e^{-ikx} \\ k &= \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0\end{aligned}$$

Решения должны быть сплошны в точке  $x = 0$ . Как мы отмечали значение волновой функции должно быть непрерывно при любом виде потенциала. Но требование непрерывности производной выполняется лишь для конечных потенциалов. Выведем условие на спивку волновых функций для случая дельта-функционального потенциала. Запишем соответствующее уравнение Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \alpha\delta(x)\psi = E\psi,$$

Проинтегрируем это уравнение в окрестности точки  $x = 0$  по интервалу  $[-dx, dx]$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-dx}^{dx} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \int_{-dx}^{dx} \alpha\delta(x)\psi = \int_{-dx}^{dx} E\psi,$$

Первый интеграл берётся, т.к. под интегралом стоит полный дифференциал, второй интеграл берётся в виду свойства дельта-функции. В третьем же интеграле мы учтём конечность волновой функции при малых  $dx$  можно заменить  $\int_{-dx}^{dx} E\psi = 2dx \cdot E\psi(0)$ . Но в

пределе  $dx \rightarrow 0$  и при конечной волновой функции, это выражение равно нулю. Таким образом, получим следующее уравнение:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\psi'(dx) - \psi'(-dx)) + \alpha\psi(0) = 0,$$

Устремляя  $dx \rightarrow 0$ , получим, что в случае дельта-функционного потенциала, производная волновой функции испытывает скачок:

$$\Delta\psi'(0) = \frac{2m}{\hbar^2}\alpha\psi(0)$$

Выберем направление падения частицы слева направо. В правой части присутствует только прошедшая волна, в левой – суперпозиция прошедшей и отражённой. Таким образом, волновая функция, являющаяся решением уравнения Шредингера при искомых значениях энергии, имеет вид

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + B \cdot e^{-ikx}, & x < 0 \\ A \cdot e^{ikx}, & x > 0 \end{cases}$$

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0$$

Уравнения сшивки принимают следующий вид:

$$1 + B = A$$

$$ikA - ik(1 - B) = \frac{2m}{\hbar^2}\alpha A$$

Решение этих уравнений следующее:

$$B = \frac{1}{\frac{i\hbar^2 k}{m\alpha} - 1}, \quad A = 1 + B$$

Как мы показали в прошлом разделе, коэффициент прохождения  $D$  и отражения  $R$  барьера равен

$$D = |A| = \frac{1}{1 + \left(\frac{m\alpha}{\hbar^2 k}\right)^2}$$

$$R = 1 - D = \frac{1}{\left(\frac{\hbar^2 k}{m\alpha}\right)^2 + 1}$$

Видно, что при увеличении массы частицы (классический предел) или силы потенциала  $\alpha$  коэффициент прохождения стремится к 0, а коэффициент отражения к 1, как и следовало ожидать. И наоборот при увеличении энергии барьер становится всё более проницаем ( $D \rightarrow 1$ ).

# ЛЕКЦИЯ 9. ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР I.

## Гармонический осциллятор. Решение УШ.

Найдем уровни энергии и волновые функции стационарных состояний линейного гармонического осциллятора.

Квантово-механический осциллятор является квантовым аналогом частицы, совершающей малые линейные колебания около положения равновесия. Потенциальная энергия линейного осциллятора

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

уравнение Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \Psi = E\Psi. \quad (1)$$

Введем обозначения

$$\frac{2E}{\hbar\omega} = \varepsilon; \quad \xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x; \quad \frac{d^2\Psi}{dx^2} = \frac{m\omega}{\hbar} \frac{d^2\Psi}{d\xi^2}$$

и перепишем уравнение (1) в виде

$$\Psi'' + (\varepsilon - \xi^2)\Psi = 0 \quad (2)$$

Исследуем асимптотику решения уравнения (2) при  $\xi \rightarrow \pm\infty$ . При больших  $x$  в уравнении (2) можно опустить член  $\kappa^2\Psi$  и уравнение приобретет вид

$$\Psi'' - \xi^2\Psi_\infty = 0. \quad (3)$$

Решения уравнения (3) ищем в виде  $\Psi = \exp(-k\xi^2)$ . Подставляя  $\Psi$  в (2), получаем

$$4k^2\xi^2 - 2k - \xi^2 = 0,$$

Сохраняя только старшие по  $\xi$  член, получим  $k = \pm\frac{1}{2}$ . Таким образом, получим асимптотику функции:

$$\Psi_\infty = c_1 e^{-\frac{\xi^2}{2}} + c_2 e^{\frac{\xi^2}{2}}.$$

Из условия ограниченности  $\Psi$  при  $\xi \rightarrow \pm\infty$  следует, что  $c_2 = 0$ . Таким образом, асимптотическое решение уравнения (1.20) при  $\xi \rightarrow \infty$  есть

$$\Psi_\infty = c_1 e^{-\frac{\xi^2}{2}}. \quad (4)$$

Общее решение уравнения (2) будем искать в виде

$$\Psi = \Psi_\infty F(\xi), \quad (5)$$

где  $F(\xi)$  – новая неизвестная функция, которая при  $\xi \rightarrow \infty$  ведет себя как  $\xi^n$  (т.к. экспоненциальную часть мы уже нашли). Подставляя (5) в (2), получаем следующее уравнение для  $F$ :

$$F'' - 2\xi F' + (\varepsilon - 1)F = 0 \quad (6)$$

Точка  $\xi = 0$  не является особой точкой этого уравнения, поэтому его решение мы можем искать в виде степенного ряда

$$F = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^n .$$

Из физических соображений члены с отрицательными  $n$  отбрасываем, чтобы волновая функция не расходилась. Итак,

$$\begin{aligned} F &= \sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^n ; \quad F' = \sum_{n=0}^{\infty} n a_n \xi^{n-1} ; \\ F'' &= \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)(n+2) a_{n+2} \xi^n . \end{aligned}$$

Подставляя полученные выражения в уравнение (6) и группируя члены с одинаковыми степенями, получаем

$$\sum_n \xi^n \left[ (n+2)(n+1)a_{n+2} + (\varepsilon - 1 - 2n)a_n \right]$$

Приравнивая нулю, коэффициенты при одинаковых степенях  $\xi^n$ , найдем рекуррентное соотношение для определения коэффициентов

$$a_{n+2} = a_n \frac{2n+1-\varepsilon}{(n+2)(n+1)} \quad (7)$$

Это соотношение связывает коэффициенты  $a_{n+2}$  с  $a_n$ , и поэтому чётные и нечётные члены ряда  $F(\xi)$  будут независимы. Но мы знаем, что в симметричном потенциале собственные функции могут быть либо симметричными, либо антисимметричными, поэтому мы можем рассматривать отдельно два эти случая:

$$F = \sum_{n=0,2,4} a_n \xi^n \text{ либо } F = \sum_{n=1,3,5} a_n \xi^n$$

Теперь рассмотрим асимптотику искомого ряда при больших  $n$  выполняется следующее примерное равенство:

$$\frac{a_{n+2}}{a_n} = \frac{2n+1-\varepsilon}{(n+2)(n+1)} \approx \frac{2}{n} \quad (8)$$

Рассмотрим функцию  $e^{x^2}$ , которую можно разложить в ряд:

$$e^{x^2} = 1 + \frac{x^2}{1!} + \frac{x^4}{2!} + \dots = \sum_{k=0}^{\infty} B_k x^k ,$$

где  $B_k = 0$  для нечётных  $k$ , а для чётных  $B_k = \frac{1}{(k/2)!}$ . Для членов такого ряда можно

записать соотношение:

$$\frac{B_{k+2}}{B_k} = \frac{k!}{\left(\frac{k}{2} + 1\right)!} = \frac{1}{\frac{k}{2} + 1} \sim \frac{2}{k}.$$

Следовательно,  $F(\xi)$  ведет себя так же, как  $e^{\xi^2}$ . То же самое можно показать, если заметить, что соотношение (8) ведёт к факториальной зависимости коэффициентов.

Но в таком случае волновая функция  $\Psi = \Psi_\infty F(\xi) \sim e^{\xi^2/2}$ , т.е. становится опять расходящейся. Таким образом это решение нам не подходит. Однако есть решение – ряд (7) может оборваться если и таково, что  $2n+1-\varepsilon=0$  для какого-либо  $n$ . Тогда  $a_{n+2}$  и все последующие коэффициенты обращаются в ноль. Таким образом, уравнение Шредингера имеет ограниченные решения при условии:

$$2n+1-\varepsilon=0 \quad (9)$$

Если  $n$  чётное, то решения – чётные, а если нечётное, то решения нечётные. Перейдём в условии (9) от безразмерных единиц:

$$E = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

**Отметим равноудаленность последовательных энергетических уровней!**

Характерным для полученного решения является наличие нулевой энергии  $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$ . (заметим, что, вообще говоря, это типично для любого потенциала – например для ямы с бесконечно высокими стенками).

Найдем волновую функцию гармонического осциллятора

$$\Psi_n(\xi) = e^{-\frac{\xi^2}{2}} F_n(\xi).$$

Конечный степенной ряд для функции  $F_n(\xi)$  представляет собой известный в математической физике полином Эрмита:

$$F_n(\xi) = H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2},$$

Этот ответ можно подставить в уравнение (6) и проверить, но непросто (**дома!**). Нужно вывести рекуррентную формулу для  $F_n(x)$ , а также использовать формулу производной от произведения:

$$(fg)^{(n)} = \sum_{k=0}^n C_n^k f^{(n-k)} g^{(k)}, \text{ где } C_n^k \text{ – биномиальные коэффициенты.}$$

В качестве примера выпишем полином Эрмита для  $n = 0, 1, 2$ :

$$H_0(\xi) = 1; \quad H_1(\xi) = 2\xi; \quad H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2; \quad H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi \text{ и т.д.}$$

Итак, искомое решение уравнения Шредингера для линейного осциллятора имеет вид

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

## ЛЕКЦИЯ 10. ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР II.

### Гармонический осциллятор. Операторное решение.

We have already seen how to calculate energy eigenstates for the simple harmonic oscillator by solving a second-order differential equation, the time-independent Schrödinger equation.

Let us now try to factorize the harmonic oscillator Hamiltonian. By this we mean, roughly, writing the Hamiltonian as the product of an operator times its Hermitian conjugate. As a first step we rewrite the Hamiltonian as

$$\hat{H} = \frac{1}{2}m\omega^2 \left( \frac{\hat{p}^2}{m^2\omega^2} + \hat{x}^2 \right). \quad (1.1)$$

Motivated by the identity  $a^2 + b^2 = (a - ib)(a + ib)$ , holding for numbers  $a$  and  $b$ , we examine if the expression in parenthesis can be written as a product

$$\left( \hat{x} - \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right) \left( \hat{x} + \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right) = \hat{x}^2 + \frac{\hat{p}^2}{m^2\omega^2} + \frac{i}{m\omega} (\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}) = \hat{x}^2 + \frac{\hat{p}^2}{m^2\omega^2} - \frac{\hbar}{m\omega} 1. \quad (1.2)$$

where the extra terms arise because  $\hat{x}$  and  $\hat{p}$ , as opposed to numbers, do not commute. 1 – единичный оператор. We now define the right-most factor in the above product to be  $V$ :

$$\hat{V} \equiv \left( \hat{x} + \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right), \quad (1.3)$$

Since  $\hat{x}$  and  $\hat{p}$  are Hermitian operators, we then have

$$\hat{V}^+ = \left( \hat{x} - \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right), \quad (1.4)$$

and this is the left-most factor in the product! We can therefore rewrite (1.2) as

$$\hat{x}^2 + \frac{\hat{p}^2}{m^2\omega^2} = V^+ V + \frac{\hbar}{m\omega} 1. \quad (1.5)$$

and therefore, back in the Hamiltonian (1.1) we find,

$$\hat{H} = \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{V}^+ \hat{V} + \frac{1}{2}\hbar\omega \cdot 1. \quad (1.6)$$

This is a factorized form of the Hamiltonian: up to an additive constant  $E_0$ ,  $\hat{H}$  is the product of a positive constant times the operator product  $V^+V$ . We note that the commutator of  $V$  and  $V^+$  is simple

$$\begin{aligned} [\hat{V}, \hat{V}^+] &= \left[ \hat{x} - \frac{i\hat{p}}{m\omega}, \hat{x} + \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right] = [\hat{x}, \hat{x}] + \frac{i}{m\omega} [\hat{x}, \hat{p}] - \frac{i}{m\omega} [\hat{p}, \hat{x}] + \frac{1}{m\omega} [\hat{p}, \hat{p}] = \\ &= \frac{i}{m\omega} [\hat{x}, \hat{p}] - \frac{i}{m\omega} [\hat{p}, \hat{x}] = \frac{2\hbar}{m\omega} \mathbf{1}. \end{aligned} \quad (1.7)$$

This implies that

$$\left[ \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{V}, \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{V}^+ \right] = \mathbf{1}. \quad (1.8)$$

This suggests the definition of unit-free operator operators  $\hat{a}$  and  $\hat{a}^+$ :

$$\begin{aligned} \hat{a} &\equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{V}, \\ \hat{a}^+ &\equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{V}^+. \end{aligned} \quad (1.8)$$

Due to the scaling, we have

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = \mathbf{1}. \quad (1.10)$$

The operator  $\hat{a}$  is called annihilation operator and  $\hat{a}^+$  is called a creation operator. The justification for these names will be seen below. From the above definitions we read the relations between  $(\hat{a}, \hat{a}^+)$  and  $(\hat{x}, \hat{p})$ :

$$\begin{aligned} \hat{a} &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( \hat{x} + \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right) \\ \hat{a}^+ &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( \hat{x} - \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right) \end{aligned} \quad (1.11)$$

The inverse relations are many times useful as well,

$$\begin{aligned} \hat{x} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a}^+ + \hat{a}) \\ \hat{p} &= i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (\hat{a}^+ - \hat{a}) \end{aligned} \quad (1.12)$$

While neither  $\hat{a}$  nor  $\hat{a}^+$  is hermitian (they are hermitian conjugates of each other), the above equations are consistent with the hermiticity of  $\hat{x}$  and  $\hat{p}$ . We can now write the Hamiltonian in terms of the  $\hat{a}$  and  $\hat{a}^+$  operators. Using (1.9) we have

$$\hat{V}^+ \hat{V} = \frac{2\hbar}{m\omega} \hat{a}^+ \hat{a} \quad (1.13)$$

and therefore, back in (1.6) we get

$$\hat{H} = \hbar\omega \left( \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left( \hat{N} + \frac{1}{2} \right), \quad \hat{N} \equiv \hat{a}^\dagger \hat{a} \quad (1.14)$$

The above form of the Hamiltonian is factorized: up to an additive constant  $\hat{H}$  is the product of positive constant times the operator product  $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ . In here we have dropped the identity operator, which is usually understood. We have also introduced the number operator  $\hat{N}$ . This is, by construction, a hermitian operator and it is, up to a scale and an additive constant, equal to the Hamiltonian. An eigenstate of  $\hat{H}$  is also an eigenstate of  $\hat{N}$  and it follows from the above relation that the respective eigenvalues  $E$  and  $N$  are related by

$$E = \hbar\omega \left( N + \frac{1}{2} \right). \quad (1.15)$$

Let us now show the powerful conclusions that arise from the factorized Hamiltonian. On any state  $\psi$  that is normalized we have

$$\langle \hat{H} \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{H} \psi \rangle = \hbar\omega \langle \psi | \hat{a}^\dagger \hat{a} \psi \rangle + \frac{1}{2} \hbar\omega \langle \psi | \psi \rangle, \quad (1.16)$$

and moving the  $\hat{a}^\dagger$  to the first input, we get

$$\langle \hat{H} \rangle_\psi = \hbar\omega \langle \hat{a} \psi | \hat{a} \psi \rangle + \frac{1}{2} \hbar\omega \geq \frac{1}{2} \hbar\omega, \quad (1.17)$$

The inequality follows because any expression of the form  $\langle \psi | \psi \rangle$  is greater than or equal to zero. This shows that for any energy eigenstate with energy  $E$ :  $\hat{H}\psi = E\psi$  we have

$$\text{Energy eigenstates: } E \geq \frac{1}{2} \hbar\omega. \quad (1.18)$$

This important result about the spectrum followed directly from the factorization of the Hamiltonian. **Т.е. это свойство любого Гамильтониана, который вот так факторизуется.**

But we also get the information required to find the ground state wavefunction. The minimum energy  $\frac{1}{2} \hbar\omega$  will be realized for a state  $\psi$  if the term  $\langle \hat{a} \psi | \hat{a} \psi \rangle$  in (1.17) vanishes. For this to vanish  $\hat{a}\psi$  must vanish. Therefore, the ground state wavefunction  $\phi_0$  must satisfy

$$\hat{a}\phi_0 = 0. \quad (1.19)$$

The operator  $\hat{a}$  annihilates the ground state and this why  $\hat{a}$  is called the annihilation operator. Using the definition of  $\hat{a}$  in (1.11) and the position space representation of  $\hat{p}$ , this becomes

$$\left( x + \frac{i}{m\omega} (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x} \right) \varphi_0(x) = 0 \rightarrow \left( x + \frac{\hbar}{m\omega} \frac{\partial}{\partial x} \right) \varphi_0(x) = 0 \quad (1.20)$$

Remarkably, this is a **first order** differential equation for the ground state. Not a second order equation, like the Schrödinger equation that determines the general energy eigenstates. This is a dramatic simplification afforded by the factorization of the Hamiltonian into a product of first-order differential operators. The above equation is rearranged as

$$\frac{\partial \varphi_0}{\partial x} = -\frac{m\omega}{\hbar} x \varphi_0. \quad (1.21)$$

Solving this differential equation yields

$$\varphi_0(x) = \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \quad (1.22)$$

where we included a normalization constant to guarantee that  $\langle \varphi_0 \varphi_0 \rangle = 1$ . Note that  $\varphi_0$  is indeed an energy eigenstate with energy  $E_0$ :

$$\hat{H}\varphi_0 = \hbar\omega \left( \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \varphi_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega \varphi_0 \rightarrow E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega \quad (1.23)$$

## Operator manipulation and the spectrum

We have seen that all energy eigenstates are eigenstates of the Hermitian number operator  $\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$ . This is because  $\hat{H} = \hbar\omega \left( \hat{N} + \frac{1}{2} \right)$ . Note that since  $\hat{a}\varphi_0 = 0$  we also have

$$\hat{N}\varphi_0 = 0. \quad (2.1)$$

We can quickly check that

$$[\hat{N}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger \hat{a}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}] \hat{a} = -\hat{a} \quad (2.2)$$

which we summarize as

$$\begin{aligned} [\hat{N}, \hat{a}] &= -\hat{a} \\ [\hat{N}, \hat{a}^+] &= \hat{a}^+ \end{aligned} \tag{2.3}$$

Для коммутатора произведения операторов можно записать следующее выражение:

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$$

Используя его раскроем коммутатор оператора  $N$  с оператором уничтожения  $a$ :

$$[\hat{N}, \hat{a}^k] = [\hat{N}, \hat{a}^{k-1}\hat{a}] = [\hat{N}, \hat{a}^{k-1}]\hat{a} + \hat{a}^{k-1}[\hat{N}, \hat{a}] = [\hat{N}, \hat{a}^{k-1}]\hat{a} - \hat{a}^k$$

Ту же процедуру можно применить к слагаемому  $[\hat{N}, \hat{a}^{k-1}]\hat{a}$  и далее по индукции, постепенно снижая степень  $a$  под коммутатором, и добавляя операторы  $a$  ко второму слагаемому. То же самое можно провести для коммутатора  $[\hat{N}, (\hat{a}^+)^k]$ . Получим:

$$\begin{aligned} [\hat{N}, (\hat{a})^k] &= -k(\hat{a})^k \\ [\hat{N}, (\hat{a}^+)^k] &= k(\hat{a}^+)^k \end{aligned} \tag{2.4}$$

These relations suggest why  $N$  is called the number operator. Acting on powers of creation or annihilation operators by commutation it gives the same object multiplied by (plus or minus) the number of creation or annihilation operators,  $k$  in the above. Closely related commutators are also useful:

$$\begin{aligned} [\hat{a}^+, (\hat{a})^k] &= -k(\hat{a})^{k-1} \\ [\hat{a}, (\hat{a}^+)^k] &= k(\hat{a}^+)^{k-1} \end{aligned} \tag{2.5}$$

These commutators are analogous to  $[\hat{p}, (\hat{x})^k]$  and  $[\hat{x}, (\hat{p})^k]$ . We will also make use of the following Lemma which helps in evaluations where we have an operator  $\hat{A}$  that kills a state  $\psi$  and we aim to simplify the action of  $\hat{A}\hat{B}$ , where  $\hat{B}$  is another operator, acting on  $\psi$ . Here is the result

$$\text{If } \hat{A}\psi = 0, \text{ then } \hat{A}\hat{B}\psi = [\hat{A}, \hat{B}]\psi = 0. \tag{2.6}$$

This is easily proved. First note that

$$\hat{A}\hat{B} = [\hat{A}, \hat{B}] + \hat{B}\hat{A}, \tag{2.7}$$

as can be quickly checked expanding the right-hand side. It then follows that

$$\hat{A}\hat{B}\psi = [\hat{A}, \hat{B}]\psi + \hat{B}\hat{A}\psi = [\hat{A}, \hat{B}]\psi, \quad (2.8)$$

because  $\hat{B}\hat{A}\psi = \hat{B}(\hat{A}\psi) = 0$ . This is what we wanted to show. This is all we need to know about commutators, and we can now proceed to construct the states of the harmonic oscillator.

Since  $\hat{a}$  annihilates  $\phi_0$  consider acting on the ground state with  $\hat{a}^+$ . It is clear that  $\hat{a}^+$  cannot also annihilate  $\phi_0$ . If that would happen acting with both sides of the commutator identity  $[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$  on  $\phi_0$  would lead to a contradiction: the left-hand side would vanish, but the right-hand side would not. Thus, consider the wavefunction

$$\phi_1 \equiv \hat{a}^+ \phi_0. \quad (2.9)$$

We are going to show that this is an energy eigenstate. For this purpose, we act on it with the number operator:

$$\hat{N}\phi_1 = \hat{N}\hat{a}^+ \phi_0 = [\hat{N}, \hat{a}^+] \phi_0, , \quad (2.10)$$

where we noted that  $\hat{N}\phi_0 = 0$  and used Lemma (2.6). Given that  $[\hat{N}, \hat{a}^+] = \hat{a}^+$ , we get

$$\hat{N}\phi_1 = \hat{a}^+ \phi_0 = \phi_1. \quad (2.11)$$

Thus,  $\phi_1$  is an eigenstate of the operator  $\hat{N}$  with eigenvalue  $N = 1$ . Since  $\phi_0$  has  $\hat{N}$  eigenvalue zero, the effect of acting on  $\phi_0$  with  $\hat{a}^+$  was to increase the eigenvalue of the number operator by one unit. The operator  $\hat{a}^+$  is called the **creation** operator because it creates a state out of the ground state. Alternatively, it is called the **raising** operator, because it raises (by one unit) the eigenvalue of  $\hat{N}$ . Since  $N = 1$  for  $\phi_1$  it follows that  $\phi_1$  is an energy eigenstate with energy  $E_1$  given by

$$E_1 = \hbar\omega \left(1 + \frac{1}{2}\right) = \frac{3}{2} \hbar\omega. \quad (2.12)$$

Можно также показать, что функция  $\Phi_n \equiv (\hat{a}^+)^n \phi_0$  также является собственной функцией оператора  $\hat{N}$ . Подействуем оператором  $\hat{N}$  на функцию  $\Phi_n$ :

$$\hat{N}\phi_n = \hat{N}(\hat{a}^+)^n \phi_0 = \left[ \hat{N}, (\hat{a}^+)^n \right] \phi_0 = n(\hat{a}^+)^n \phi_0 = n\phi_n, , \quad (2.13)$$

Thus,  $\phi_n$  is an eigenstate of the operator  $\hat{N}$  with eigenvalue  $N = n$ . Since  $N = n$  for  $\phi_n$  it follows that  $\phi_n$  is an energy eigenstate with energy  $E_n$  given by

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right). \quad (2.14)$$

It also turns out that  $\phi_1$  is properly normalized:

$$\langle \phi_1 | \phi_1 \rangle = \langle \hat{a}^+ \phi_0 | \hat{a}^+ \phi_0 \rangle = \langle \phi_0 | \hat{a} \hat{a}^+ \phi_0 \rangle, , \quad (2.15)$$

where we used the Hermitian conjugation property to move the  $\hat{a}^+$  acting on the left input into the right input, where it goes as  $(\hat{a}^+)^+ = \hat{a}$ . We then have

$$\langle \phi_1 | \phi_1 \rangle = \langle \phi_0 | \hat{a} \hat{a}^+ \phi_0 \rangle = \langle \phi_0 | [\hat{a} \hat{a}^+] \phi_0 \rangle = \langle \phi_0 | \phi_0 \rangle = 1, \quad (2.16)$$

where we used (2.6) in the evaluation of  $\hat{a} \hat{a}^+ \phi_0$ . Indeed, the state  $\phi_1$  is correctly normalized.

Next consider the state  $\Phi_n = (\hat{a}^+)^n \phi_0$

$$\langle \Phi_n | \Phi_n \rangle = \langle (\hat{a}^+)^n \phi_0 | (\hat{a}^+)^n \phi_0 \rangle = \langle \phi_0 | \hat{a}^n (\hat{a}^+)^n \phi_0 \rangle, \quad (2.17)$$

Вспомним, что  $\hat{A}\hat{B}\psi = [\hat{A}, \hat{B}] \psi = 0$  если  $\hat{A}\psi = 0$ . Учитывая, что  $\hat{a}\phi_0 = 0$ , мы можем аналогично записать:

$$\hat{a}^n (\hat{a}^+)^n \phi = \hat{a}^{n-1} \hat{a} (\hat{a}^+)^n \phi_0 = \hat{a}^{n-1} [\hat{a}, (\hat{a}^+)^n] \phi_0 = n \hat{a}^{n-1} (\hat{a}^+)^{n-1} \phi_0 \quad (2.18)$$

В последнем равенстве использовали соотношения (2.5). Повторяя эту операцию, получим:

$$\hat{a}^n (\hat{a}^+)^n \phi = n! \phi_0 \quad (2.19)$$

Подставив это выражение в (2.17), получим:

$$\langle \varphi_n | \varphi_n \rangle = \left\langle \varphi_0 \left| \hat{a}^n \left( \hat{a}^+ \right)^n \varphi_0 \right. \right\rangle = n! \langle \varphi_0 | \varphi_0 \rangle = n! \quad (2.20)$$

Таким образом, правильно нормированное определение  $\phi_n$  следующее:

$$\varphi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left( \hat{a}^+ \right)^n \varphi_0 \quad (2.21)$$

Эта функция соответствует состоянию с энергией

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

Since the various states  $\phi_n$  are eigenstates of a Hermitian operator (the Hamiltonian  $\hat{H}$ ) with different eigenvalues, they are orthonormal:

$$\langle \varphi_n | \varphi_m \rangle = \delta_{nm}$$

We now note that  $\hat{a}\varphi_n$  is a state with  $n - 1$  operators  $\hat{a}^\dagger$  acting on  $\varphi_0$  because the  $\hat{a}$  eliminates one of the creation operators in  $\phi_n$ . Thus, we expect  $\hat{a}\varphi_n \sim \varphi_{n-1}$ . We can make this precise

$$\hat{a}\varphi_n = \hat{a} \frac{1}{\sqrt{n!}} \left( \hat{a}^+ \right)^n \varphi_0 = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left[ \hat{a}, \left( \hat{a}^+ \right)^n \right] \varphi_0 = \frac{n}{\sqrt{n!}} \left( \hat{a}^+ \right)^{n-1} \varphi_0. \quad (2.22)$$

At this point we use (2.21) with  $n$  set equal to  $n - 1$  and thus get

$$\hat{a}\varphi_n = \frac{n}{\sqrt{n!}} \sqrt{(n-1)!} \varphi_n = \sqrt{n} \varphi_n. \quad (2.23)$$

By the action of  $\hat{a}^+$  on  $\phi_n$  we get

$$\hat{a}^\dagger \varphi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left( \hat{a}^\dagger \right)^{n+1} \varphi_0 = \frac{1}{\sqrt{n!}} \sqrt{(n+1)!} \cdot \varphi_{n+1} = \sqrt{n+1} \cdot \varphi_{n+1}. \quad (2.24)$$

Collecting the results, we have

$$\begin{aligned}\hat{a}\varphi_n &= \sqrt{n}\varphi_n, \\ \hat{a}^\dagger\varphi_n &= \sqrt{n+1}\cdot\varphi_{n+1}\end{aligned}\tag{2.25}$$

These relations make it clear that  $\hat{a}$  lowers the number of any energy eigenstate by one unit, except for the vacuum  $\phi_0$  which it kills. The raising operator  $\hat{a}^\dagger$  increases the number of any eigenstate by one unit.

**Exercise:** Calculate the uncertainty  $\Delta x$  of position in the  $n$ -th energy eigenstate.

**Solution:** By definition,

$$(\Delta x)_n^2 = \langle \hat{x}^2 \rangle_{\varphi_n} - \langle \hat{x} \rangle_{\varphi_n}^2 \tag{2.26}$$

The expectation value  $\langle \hat{x} \rangle_{\varphi_n}$  vanishes for any energy eigenstate since we are integrating  $x$ , which is odd, against  $|\varphi_n(x)|^2$ , which is always even. Still, it is instructive to see how this happens explicitly:

$$\langle \hat{x} \rangle_{\varphi_n} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle \varphi_n | (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \varphi_n \rangle, \tag{2.27}$$

using the formula for  $\hat{x}$  in terms of  $\hat{a}$  and  $\hat{a}^\dagger$ . The above overlap vanishes because  $\hat{a}\varphi_n \sim \varphi_{n-1}$  and  $\hat{a}^\dagger\varphi_n \sim \varphi_{n+1}$ , and both  $\varphi_{n-1}$  and  $\varphi_{n+1}$  are orthogonal to  $\varphi_n$ . Now we compute the expectation value of  $\hat{x}^2$

$$\begin{aligned}\langle \hat{x}^2 \rangle_{\varphi_n} &= \langle \varphi_n | \hat{x}^2 \varphi_n \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \varphi_n | (\hat{a}^\dagger + \hat{a})(\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \varphi_n \rangle = \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \varphi_n | (\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger + \hat{a} \hat{a}) \varphi_n \rangle\end{aligned}\tag{2.28}$$

Since  $\hat{a}\hat{a}\varphi_n \sim \varphi_{n-2}$  and  $\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\varphi_n \sim \varphi_{n+2}$ , and both  $\varphi_{n-2}$  and  $\varphi_{n+2}$  are orthogonal to  $\varphi_n$ , the  $\hat{a}\hat{a}$  and  $\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger$  terms do not contribute. We are left with

$$\langle \hat{x}^2 \rangle_{\varphi_n} = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \varphi_n | (\hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger) \varphi_n \rangle \tag{2.29}$$

At this point we recognize that  $\hat{a}\hat{a}^\dagger = \hat{N}$  and that  $\hat{a}\hat{a}^\dagger = [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] + \hat{a}^\dagger \hat{a} = 1 + \hat{N}$ . As a result

$$\langle \hat{x}^2 \rangle_{\varphi_n} = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \varphi_n | (2\hat{N} + 1) \varphi_n \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} (2n + 1) \quad (2.30)$$

We therefore have

$$(\Delta x)_n^2 = \frac{\hbar}{m\omega} \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (2.31)$$

The position uncertainty grows linearly with the number.

### **Задача про нахождение неопределённости импульса. (на дом)**

Тем же способом можно получить неопределённость импульса:

$$\langle \Delta p \rangle_n^2 = \langle \hat{p}^2 \rangle_{\varphi_n} - \langle \hat{p} \rangle_{\varphi_n}^2$$

Вспомним выражение для оператора импульса через операторы рождения и уничтожения:  $\hat{p} = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (\hat{a}^+ - \hat{a})$ , получим:

$$\langle \hat{p}^2 \rangle_{\varphi_n} = \frac{m\omega\hbar}{2} \langle \varphi_n | (\hat{a}^+ \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^+) \varphi_n \rangle = (\Delta p)_n^2 = m\omega\hbar \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

Таким образом, соотношение неопределённости для осциллятора запишется следующим образом:

$$\Delta x \Delta p = \hbar \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

Заметьте, что для основного состояния осциллятора неравенство Гайзенберга сводится к равенству!

## Гармонический осциллятор. Матричное решение.

Определим уровни энергии осциллятора с помощью матричного метода. Будем исходить из уравнений движения в классической форме; в данном случае они дают:

$$\ddot{x} + \omega^2 x = 0.$$

В матричном виде это уравнение имеет вид

$$(\ddot{x})_{mn} + \omega^2 x_{mn} = 0.$$

Для матричных элементов ускорения имеем, согласно известным формулам  $(\ddot{x})_{mn} = i\omega_{mn}(\dot{x})_{mn} = -\omega_{mn}^2 x_{mn}$ . Поэтому получаем:

$$(\omega_{mn}^2 - \omega^2)x_{mn} = 0.$$

Отсюда видно, что равны нулю все матричные элементы  $x_{mn}$ , за исключением тех, для которых  $\omega_{mn} = \pm\omega$ . Пронумеруем все стационарные состояния таким образом, чтобы частоты  $\pm\omega$  соответствовали переходам  $n \rightarrow n \mp 1$ , т.е.  $\omega_{n,n\mp 1} = \pm\omega$ . Тогда отличными от нуля матричными элементами будут лишь  $x_{n,n\mp 1}$ . Будем предполагать, что волновые функции  $\psi_n$  выбраны вещественными. Поскольку  $x$  есть величина вещественная, то такими же будут и все матричные элементы  $x_{mn}$ . Условие эрмитовости оператора координат приводит теперь к тому, что матрица  $x_{mn}$  симметрична:

$$x_{mn} = x_{nm}$$

Для вычисления отличных от нуля матричных элементов координаты воспользуемся правилом коммутации

$$\hat{x}\hat{x} - x\hat{x} = -i\frac{\hbar}{m}$$

написав его в матричном виде

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

С помощью правила умножения матриц имеем отсюда:

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

В этой сумме отличны от нуля только члены с  $l = n \pm 1$ , так что получаем:

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

Из этого равенства видно, что величины  $(x_{n+1,n})^2$  образуют арифметическую прогрессию, неограниченную сверху, но непременно ограниченную снизу, так как в ней могут содержаться только положительные члены. Поскольку мы пока установили только относительное расположение номеров состояний  $n$ , но не их абсолютные значения, то мы можем произвольно выбрать значение  $n$ , соответствующее первому — нормальному — состоянию осциллятора. Положим его равным нулю. Соответственно этому  $x_{0,-1}$  надо

считать тождественно равным нулю, и последовательное применение рекрентных уравнений с  $n = 0, 1, \dots$  приводит к результату:

$$(x_{n,n-1})^2 = \frac{n\hbar}{2m\omega}.$$

Таким образом, окончательно получаем следующее выражение для отличных от нуля матричных элементов координаты:

$$x_{n,n-1} = x_{n-1,n} = \sqrt{\frac{n\hbar}{2m\omega}}.$$

Матрица оператора  $H$  диагональна и матричные элементы  $H_{nn}$  представляют собой искомые собственные значения энергии  $E_n$  осциллятора. Для их вычисления имеем

$$\begin{aligned} H_{nn} &= E_n = \frac{m}{2}[(\dot{x}^2)_{nn} + \omega^2(x^2)_{nn}] = \\ &= \frac{m}{2} \left[ \sum_l i\omega_{nl}x_{nl}i\omega_{ln}x_{ln} + \omega^2 \sum_l x_{nl}x_{ln} \right] = \frac{m}{2} \sum_l (\omega^2 + \omega_{nl}^2)x_{ln}^2. \end{aligned}$$

В сумме по  $l$  отличны от нуля только члены с  $l = n \pm 1$ ; подставляя общую формулу для  $x_{n,n-1}$ , получаем

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

Таким образом, уровни энергии осциллятора расположены через равные интервалы  $\hbar\omega$ . Энергия нормального состояния ( $n = 0$ ) равна  $\hbar\omega/2$  подчеркнем, что она оказывается отличной от нуля.

# ЛЕКЦИЯ 11. ОПЕРАТОР МОМЕНТА ИМПУЛЬСА

## Оператор момента импульса.

Из принципа соответствия можно записать оператор момента импульса:

$$\hbar \hat{\mathbf{I}} = [\mathbf{r} \hat{\mathbf{p}}] = -i\hbar[\mathbf{r} \nabla] \quad (26.2)$$

или в компонентах:

$$\hbar \hat{l}_x = y \hat{p}_z - z \hat{p}_y, \quad \hbar \hat{l}_y = z \hat{p}_x - x \hat{p}_z, \quad \hbar \hat{l}_z = x \hat{p}_y - y \hat{p}_x.$$

Заметим, что в этом определении оператор  $\hat{l}$  безразмерен.

Для системы, находящейся во внешнем поле, момент импульса в общем случае не сохраняется. Однако сохранение момента все же может иметь место при определенной симметрии поля. Так, если система находится в центрально-симметричном поле, то все направления в пространстве, исходящие из центра, эквивалентны, и поэтому будет сохраняться момент количества движения относительно этого центра. Аналогично, в аксиально-симметричном поле сохраняется составляющая момента вдоль оси симметрии. Все эти законы сохранения, имеющие место в классической механике, остаются в силе и в квантовой механике.

У системы с не сохраняющимся моментом в стационарных состояниях момент не имеет определенных значений. В таких случаях иногда представляет интерес среднее значение момента в данном стационарном состоянии. Легко видеть, что во всяком невырожденном стационарном состоянии среднее значение момента равно нулю. Действительно, при изменении знака времени энергия не меняется, и поскольку данному уровню энергии соответствует всего одно стационарное состояние, то, следовательно, при замене  $t$  на  $-t$  состояние системы должно оставаться неизменным. Это значит, что должны оставаться неизменными и средние значения всех величин, в частности момента. Но при изменении знака времени момент импульса меняет знак, и мы получили бы  $\bar{\mathbf{L}} = -\bar{\mathbf{L}}$ ; отсюда следует, что  $\bar{\mathbf{L}} = 0$ . Тот же результат можно получить и исходя из математического определения среднего значения  $\bar{\mathbf{L}}$  как интеграла от  $\psi^* \hat{\mathbf{L}} \psi$ . Волновые функции невырожденных состояний вещественны. Поэтому выражение

$$\bar{\mathbf{L}} = -i\hbar \int \psi^* \left( \sum_a [\mathbf{r}_a \nabla_a] \right) \psi dq$$

чисто мнимо, а поскольку  $\bar{\mathbf{L}}$  должно быть, разумеется, вещественной величиной, то  $\bar{\mathbf{L}} = 0$ .

Коммутационные соотношения следующие:

$$\begin{aligned} \{\hat{l}_x, x\} &= 0, & \{\hat{l}_x, y\} &= iz, & \{\hat{l}_x, z\} &= -iy, \\ \{\hat{l}_y, y\} &= 0, & \{\hat{l}_y, z\} &= ix, & \{\hat{l}_y, x\} &= -iz, \\ \{\hat{l}_z, z\} &= 0, & \{\hat{l}_z, x\} &= iy, & \{\hat{l}_z, y\} &= -ix. \end{aligned}$$

Все соотношения (26.3) могут быть написаны в тензорном виде

$$\{\hat{l}_i, x_k\} = ie_{ikl}x_l, \quad (26.4)$$

Легко убедиться, что аналогичные соотношения коммутации имеют место для операторов момента и импульса

$$\begin{aligned}\{\hat{l}_i, \hat{p}_k\} &= ie_{ikl}\hat{p}_l. & (26.5) \\ \hat{l}_x\hat{l}_y - \hat{l}_y\hat{l}_x &= i\hat{l}_z; \\ \hat{l}_y\hat{l}_z - \hat{l}_z\hat{l}_y &= i\hat{l}_x; \\ \hat{l}_z\hat{l}_x - \hat{l}_x\hat{l}_z &= i\hat{l}_y;\end{aligned}$$

Эти соотношения легко получить исходя из правил работы с коммутаторами:

$$\begin{aligned}[A, B] &= -[B, A]; \\ [A, B + C] &= [A, B] + [A, C]; \\ [A, BC] &= [A, B]C + B[A, C]; \\ [A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] &= 0.\end{aligned}$$

Вводят так же оператор полного момента  $\mathbf{L}$  – сумма по всем частицам. Соотношения коммутации показывают, что три компоненты момента не могут одновременно иметь определенные значения (за исключением только случая, когда все три компоненты одновременно равны нулю—см. ниже). В этом отношении момент существенно отличается от импульса, у которого три компоненты одновременно измеримы. Далее мы будем использовать большую букву  $L$ , т.е. рассматривать полный момент импульса системы (но он всё же по определению безразмерен).

Из операторов  $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$  составим оператор квадрата абсолютной величины вектора момента:

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2. \quad (26.9)$$

Этот оператор коммутативен с каждым из операторов  $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ :

$$\{\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_x\} = 0, \quad \{\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_y\} = 0, \quad \{\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z\} = 0. \quad (26.10)$$

Действительно, используя (26.8), имеем, например,

$$\begin{aligned}\{\hat{L}_x^2, \hat{L}_z\} &= \hat{L}_x\{\hat{L}_x, \hat{L}_z\} + \{\hat{L}_x, \hat{L}_z\}\hat{L}_x = -i(\hat{L}_x\hat{L}_y + \hat{L}_y\hat{L}_x), \\ \{\hat{L}_y^2, \hat{L}_z\} &= i(\hat{L}_x\hat{L}_y + \hat{L}_y\hat{L}_x), \\ \{\hat{L}_z^2, \hat{L}_z\} &= 0.\end{aligned}$$

Физически соотношения коммутации квадрата с компонентами означают, что квадрат момента (т. е. его абсолютная величина) может иметь определенное значение одновременно с одной из его составляющих.

Вместо операторов  $L_x, L_y$  часто бывает удобнее пользоваться их комплексными комбинациями

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y, \quad \hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y.$$

Легко убедиться прямым вычислением, что для этих комбинаций справедливы следующие правила коммутации:

$$\{\hat{L}_+, \hat{L}_-\} = 2\hat{L}_z, \quad \{\hat{L}_z, \hat{L}_+\} = \hat{L}_+, \quad \{\hat{L}_z, \hat{L}_-\} = -\hat{L}_-.$$

Нетрудно также проверить, что

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_+ \hat{L}_- + \hat{L}_z^2 - \hat{L}_z = \hat{L}_- \hat{L}_+ + \hat{L}_z^2 + \hat{L}_z.$$

Наконец, выпишем часто используемые выражения для оператора момента отдельной частицы в сферических координатах. Вводя последние, согласно обычным соотношениям:

$$x = r \sin(\theta) \cos(\phi); \quad y = r \sin(\theta) \sin(\phi); \quad z = r \cos(\theta)$$

получим после простого вычисления следующие выражения:

$$\hat{l}_z = -i \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad (26.14)$$

$$\hat{l}_{\pm} = e^{\pm i \varphi} \left( \pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right). \quad (26.15)$$

Подставив их в (26.13), получим оператор квадрата момента частицы в виде

$$\hat{\mathbf{l}}^2 = - \left[ \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right]. \quad (26.16)$$

Обратим внимание на то, что это есть, с точностью до множителя, угловая часть оператора Лапласа.

#### Вывод:

$$x = r \sin(\theta) \cos(\phi); \quad y = r \sin(\theta) \sin(\phi); \quad z = r \cos(\theta)$$

$$\frac{\partial}{\partial \phi} = \frac{\partial x}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial z} = -r \sin(\theta) \sin(\phi) \frac{\partial}{\partial x} + r \sin(\theta) \cos(\phi) \frac{\partial}{\partial y} + 0 \frac{\partial}{\partial z} = -y \frac{\partial}{\partial x} + x \frac{\partial}{\partial y}$$

Отсюда:

$$\hat{L}_z = -i \hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}.$$

Заметим, что в этой записи в моменте импульса присутствует размерный множитель – постоянная Планка. Далее в зависимости от обстоятельств мы будем его опускать.

### Проекция момента импульса на ось z – $L_z$

Найдем собственные функции и собственные значения оператора проекции момента импульса  $\hat{L}_z = -i \hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$ . (момент импульса размерный, чтобы увидеть его настоящие собственные значения)

Уравнение на собственные значения оператора  $\hat{L}_z$  имеет вид

$$\begin{aligned} \hat{L}_z \Phi(\varphi) &= L_z \Phi(\varphi); \\ -i \hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \Phi(\varphi) &= L_z \Phi(\varphi); \\ \frac{\partial \Phi(\varphi)}{\Phi(\varphi)} &= i L_z \frac{\partial}{\partial \varphi}; \end{aligned}$$

$$\Phi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$$

и так как  $\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi)$ , то  $L_z = M = \hbar m$ , где  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ .

Поскольку направление оси  $z$  заранее ничем не выделено, то ясно, что тот же результат получится для  $L_x$ ,  $L_y$ , и вообще для составляющей момента по любому направлению, — все они могут принимать лишь целые значения. Этот результат может показаться, на первый взгляд, парадоксальным, особенно если применить его к двум бесконечно близким направлениям. В действительности, однако, надо иметь в виду, что единственная общая собственная функция операторов  $L_x$ ,  $L_y$ ,  $L_z$  соответствует одновременным значениям  $L_x = L_y = L_z = 0$ ; в этом случае вектор момента импульса, а поэтому и его проекция на любое направление равны нулю. Если же хотя бы одно из собственных значений  $L_x$ ,  $L_y$ ,  $L_z$  отлично от нуля, то общих собственных функций у соответствующих операторов нет. Другими словами, не существует такого состояния, в котором две или три составляющие момента по различным направлениям имели бы одновременно определенные (отличные от нуля) значения, так что мы можем говорить лишь о целочисленности одной из них.

Стационарные состояния системы, отличающиеся только значением  $M$ , обладают одинаковой энергией — это следует уже из общих соображений, связанных с тем, что направление оси  $z$  заранее ничем не выделено. Таким образом, энергетические уровни системы с сохраняющимся (отличным от нуля) моментом во всяком случае вырождены.

## Квадрат момента импульса $L^2$

Перейдем теперь к отысканию собственных значений квадрата момента и покажем, каким образом можно найти эти значения, исходя из одних только правил коммутации. Обозначим через  $\psi_M$  волновые функции стационарных состояний с одинаковым значением квадрата  $L^2$ , относящихся к одному вырожденному уровню энергии и отличающихся значением  $M$ .

Прежде всего замечаем, что поскольку оба направления оси  $z$  физически эквивалентны, то для каждого возможного положительного значения  $M = |M|$  существует такое же отрицательное  $M = -|M|$ . Обозначим через  $L$  (целое положительное число или нуль) наибольшее возможное (при заданном  $L^2$ ) значение  $|M|$ . Самый факт существования такого верхнего предела следует из того, что разность  $L^2 - L_z^2 = L_x^2 + L_y^2$  есть оператор существенно положительной физической величины и потому его собственные значения не могут быть отрицательными.

Подействуем на уравнение  $\hat{L}_z \Psi_M = M \Psi_M$  оператором  $\hat{L}_+$ :

$$\hat{L}_+ \hat{L}_z \Psi_M = M \cdot \hat{L}_+ \Psi_M;$$

Используя коммутатор операторов  $\hat{L}_+$  и  $\hat{L}_z$  ( $[\hat{L}_z \hat{L}_\pm] = \pm \hat{L}_\pm$ ), получаем

$$\hat{L}_z \hat{L}_+ \Psi_M = (\hat{L}_+ \hat{L}_z + \hat{L}_+) \Psi_M = (\hat{L}_+ M \Psi_M + \hat{L}_+ \Psi_M) = (M + 1) \hat{L}_+ \Psi_M$$

Аналогично можем получить общее выражение:

$$\hat{L}_z \hat{L}_\pm \Psi_M = (M \pm 1) \hat{L}_\pm \Psi_M.$$

Таким образом из полученных соотношений следует, что функция  $\hbar \hat{L}_\pm \Psi_M$  есть собственная функция, соответствующая значению  $\hbar(m \pm 1)$  величины  $\hat{L}_z$ . Следовательно,

$$\hat{L}_+ \Psi_M = \text{const} \Psi_{M+1};$$

$$\hat{L}_- \Psi_M = \text{const} \Psi_{M-1}.$$

Поскольку состояний с  $M > L$  нет, то  $\Psi_{L+1} = 0$ , т.е.

$$\hat{L}_+ \Psi_L = \text{const} \cdot \Psi_{L+1} = 0.$$

Применяя к этому равенству оператор  $\hat{L}_-$ , получаем

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

Учитывая, что  $\hat{L}_z^2 \Psi_L = \hat{L}_z \hat{L}_z \Psi_L = L^2 \Psi_L$  и  $\hat{L}_z \Psi_L = l \Psi_L$ . Отсюда следует, что

$$\hat{\mathbf{L}}^2 \Psi_L = \hat{L}_z^2 \Psi_L + \hat{L}_z \Psi_L = \hbar^2 L(L+1) \Psi_L,$$

Следовательно, собственные значения оператора  $\hat{\mathbf{L}}^2$  равны

$$\mathbf{L}^2 = \hbar^2 L(L+1).$$

### **Собственные функции оператора квадрата момента импульса**

Теперь найдем собственные функции оператора квадрата момента импульса  $\hat{\mathbf{L}}^2$ . Уравнение

$$\hat{L}^2 Y(\theta, \varphi) = a Y$$

определяет задачу на собственные значения для оператора  $\hat{L}^2$ . В сферических координатах

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

следовательно,

$$-\frac{\hbar^2}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial Y(\theta, \varphi)}{\partial \theta} - \frac{\hbar^2}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y(\theta, \varphi)}{\partial \varphi^2} = a Y(\theta, \varphi).$$

Решениями полученного уравнения являются сферические функции (гармоники);  $Y(\theta, \varphi)$  — класс функций, заданных на сфере единичного радиуса. Решения уравнения существуют при  $a = \hbar^2 l(l+1)$  и имеют вид

$$Y(\theta, \varphi) = Y_{lm}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\varphi},$$

где  $l = 0; 1; 2; \dots$ ;  $m = 0; \pm 1; \pm 2; \dots \pm l$ ;  $P_l^m(\cos \theta) = P_l^m(x) = (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x)$  —

присоединенный полином Лежандра, в котором  $P_l(x)$  — полином Лежандра, определяемый формулой Родрига:

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l.$$

Фазовый множитель в  $Y$  в Ландау определён по-другому, но не будем загромождать формулу. Полином Лежандра образует полную ортонормированную систему функций на интервале. Сферические функции также образуют полную ортонормированную систему функций на интервале  $-1 \leq x \leq 1$ :

$$\int_{-1}^{+1} P_l(x) P_{l'}(x) dx = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}.$$

Приведем несколько значений функций:

$$Y_{0,0} = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}}; \quad Y_{1,1} = \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin \theta e^{i\varphi}; \quad Y_{1,0} = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \cos \theta; \quad Y_{1,-1} = \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin \theta e^{-i\varphi}.$$

При  $l = m = 0$  (так что и  $t = 0$ ) шаровая функция сводится к постоянной. Другими словами, волновые функции состояний частицы с равным нулю моментом зависят только от  $r$ , т. е. обладают полной шаровой симметрией — в соответствии со сделанным в § 27 общим утверждением.

## ЛЕКЦИЯ 12. ДВИЖЕНИЕ В ЦЕНТРАЛЬНО-СИММЕТРИЧНОМ ПОЛЕ.

### Движение в центрально-симметричном поле. Общие свойства.

Предположим, что  $U$  в некоторой точке (которую выберем в качестве начала координат) обращается в  $-\infty$  по закону

$$U \approx -\alpha / r^s$$

Рассмотрим волновую функцию, конечную в некоторой малой области (радиуса  $r_0$ ) вокруг начала координат и равную нулю вне ее. Неопределенность в значениях координат частицы в таком волновом пакете порядка  $\Delta r \sim r_0$ ; поэтому неопределенность в значении импульса  $\Delta p \sim \hbar / \Delta r \sim \hbar / r_0$ . Среднее значение кинетической энергии в этом состоянии порядка величины  $E_{kin} \sim \hbar^2 / mr_0^2$  а среднее значение потенциальной энергии порядка  $-E_{pot} \sim -\alpha / r_0^s$ . Предположим сначала, что  $s > 2$ . Тогда полная энергия  $E = \hbar^2 / mr_0^2 - \alpha / r_0^s$  при достаточно малых  $r_0$  принимает сколь угодно большие по абсолютной величине отрицательные значения. Но если средняя энергия может принимать такие значения, то это во всяком случае означает, что существуют отрицательные собственные значения энергии, сколь угодно большие по абсолютной величине. Уровням энергии с большим  $|E|$  соответствует движение частицы в очень малой области пространства вокруг начала координат. «Нормальное» состояние будет соответствовать частице, находящейся в самом начале координат, т. е. произойдет **«падение» частицы** в точку  $r = 0$ .

Если же  $s < 2$ , то энергия не может принимать сколь угодно больших по абсолютной величине отрицательных значений. Спектр энергий начинается с некоторого конечного отрицательного значения. Падения частицы на центр в этом случае не происходит. Обратим внимание на то, что в классической механике падение частицы на центр в принципе возможно во всяком поле притяжения (т. е. при любом положительном  $s$ ).

Далее, исследуем характер энергетического спектра в зависимости от поведения поля на больших расстояниях. Предположим, что при  $r \rightarrow \infty$  потенциальная энергия, будучи отрицательной, стремится к нулю по тому же степенному закону  $U \approx -\alpha / r^s$  (в этой формуле теперь  $r$  велико). Рассмотрим волновой пакет, «заполняющий» шаровой слой большого радиуса  $r_0$  и толщины  $\Delta r \ll r_0$ . Тогда снова порядок величины кинетической энергии будет  $E_{kin} \sim \hbar^2 / mr_0^2$ , а потенциальной:  $E_{pot} \sim -\alpha / r_0^s$ . Будем увеличивать  $r_0$ , увеличивая одновременно и  $\Delta r$ , так, чтобы  $\Delta r$  росло пропорционально  $r_0$ :  $\Delta r = \beta r_0$ . Такая связь накладывается в виду того, что неопределённость координаты в таком шаровом слое пропорциональна радиусу – ведь частица может быть в любой точке этого слоя, при этом считается, что толщина этого слоя существенно не изменяется. Если  $s < 2$ , то при достаточно больших  $r_0$  сумма  $E = \hbar^2 / (m \cdot \Delta r) - \alpha / r_0^s = \hbar^2 / (m\beta^2 r_0^2) - \alpha / r_0^s$  станет отрицательной. Отсюда следует, что существуют стационарные состояния с отрицательной энергией, в которых частица может с заметной вероятностью находиться на больших расстояниях от начала координат. Но это означает, что существуют сколь угодно малые по

абсолютной величине отрицательные уровни энергии (надо помнить, что в области пространства, где  $U > E$ , волновые функции быстро затухают). Таким образом, в рассматриваемом случае дискретный спектр содержит **бесконечное множество уровней**, которые сгущаются по направлению к уровню  $E = 0$ .

Если же на бесконечности поле спадает, как  $-\alpha / r_0^s$  с  $s > 2$ , то сколь угодно малых по абсолютной величине отрицательных уровней нет. Дискретный спектр кончается уровнем с отличным от нуля абсолютным значением.

*То есть при  $s < 2$  уровни энергии ограничены снизу, но бесконечно близко приближаются к снизу нулю. При  $s > 2$  уровни энергии не ограничены снизу, но положение верхнего уровня ограничено конечной величиной, отличной от нуля.*

## Движение в центрально-симметричном поле. Уравнение Шрёдингера.

Задача о движении двух взаимодействующих друг с другом частиц в квантовой механике может быть сведена к задаче об одной частице, — аналогично тому, как это может быть сделано в классической механике. Гамильтониан двух частиц (с массами  $m_1$ ,  $m_2$ ), взаимодействующих по закону  $U(r)$  ( $r$  — расстояние между частицами), имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_2 + U(r), \quad (32.1)$$

где  $\Delta_1$ ,  $\Delta_2$  — операторы Лапласа по координатам частиц. Введем вместо радиусов-векторов частиц  $\mathbf{r}_2$  и  $\mathbf{r}_1$  новые переменные  $\mathbf{R}$  и  $\mathbf{r}$ :

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, \quad \mathbf{R} = \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}; \quad (32.2)$$

$\mathbf{r}$  — вектор взаимного расстояния, а  $\mathbf{R}$  — радиус-вектор центра инерции частиц. Простое вычисление приводит к результату;

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)}\Delta_R - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(r) \quad (32.3)$$

( $\Delta_R$  и  $\Delta$  — операторы Лапласа соответственно по компонентам векторов  $\mathbf{R}$  и  $\mathbf{r}$ ;  $m_1 + m_2$  — полная масса системы;  $m = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$  — приведенная масса).

Таким образом, гамильтониан распадается на сумму двух независимых частей.

Соответственно этому, можно искать  $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  в виде произведения  $\varphi(\mathbf{R})\psi(\mathbf{r})$ , где функция  $\varphi(\mathbf{R})$  описывает движение центра инерции (как свободное движение частицы с массой  $m_1 + m_2$ ), а  $\psi(\mathbf{r})$  описывает относительное движение частиц (как движение частицы массы  $m$  в центрально-симметричном поле  $U = U(r)$ ).

Уравнение Шредингера для движения частицы в центрально-симметричном поле имеет вид:

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}[E - U(r)]\psi = 0.$$

Воспользовавшись известным выражением для оператора Лапласа в сферических координатах, напишем это уравнение в виде:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2} \left( \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \right] \psi + V(r) \psi = E \psi.$$

Если ввести сюда оператор квадрата момента, то мы получим:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{1}{r^2} \frac{\mathbf{L}^2}{\hbar^2} \right] \psi + V(r) \psi = E \psi$$

При движении в центрально-симметричном поле момент импульса сохраняется. Будем рассматривать стационарные состояния с определенными значениями момента  $l$  и его проекций  $m$ . Заданием значений  $l$  и  $m$  определяется угловая зависимость волновых функций. Соответственно этому, ищем решения уравнения Шредингера в виде:

$$\psi = R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

*Почему можно искать решения в таком виде? Если подставить решение в таком виде в уравнение Шредингера и поделить на эту функцию, то мы получим сумму частей, зависящих либо от  $r$ , либо от углов. Это уравнение должно удовлетворяться при любых значениях углов и  $r$ , но это возможно только если каждая из функций от  $r$  и от углов равна константе.*

где  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  — сферические функции. Поскольку  $\hat{\mathbf{P}}^2 Y_{lm} = l(l+1) Y_{lm}$ , то для «радиальной функции»  $R(r)$  получаем уравнение

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} R + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] R = 0. \quad (32.8)$$

Это уравнение не содержит вовсе значения  $l_z = m$ , что соответствует известному уже нам  $(2l+1)$ -кратному вырождению уровней по направлениям момента.

Займемся исследованием радиальной части волновых функций. Подстановкой

$$R(r) = \frac{\chi(r)}{r}$$

уравнение для радиальной части приводится к виду:

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

Если потенциальная энергия  $U(r)$  везде конечна, то должна быть конечной во всем пространстве, включая начало координат, также и волновая функция  $\psi$ , а следовательно, и ее радиальная часть  $R(r)$ . **Отсюда следует, что  $\chi(r)$  должна обращаться при  $r = 0$  в нуль.** В действительности это условие сохраняется также и для поля, обращающегося при  $r = 0$  в бесконечность.

Полученное уравнение по форме совпадает с уравнением Шредингера для одномерного движения в поле с потенциальной энергией

$$U_l(r) = U(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2},$$

который можно назвать центробежной энергией. Таким образом, задача о движении в центрально-симметричном поле сводится к задаче об одномерном движении в области, ограниченной с одной стороны (граничное условие при  $r = 0$ ). «Одномерный характер» имеет также и условие нормировки для функций  $\chi$ , определяющееся интегралом

$$\int_0^\infty |R|^2 r^2 dr = \int_0^\infty |\chi|^2 dr.$$

# ЛЕКЦИЯ 13. ДВИЖЕНИЕ В КУЛОНОВСКОМ ПОЛЕ.

## Движение в кулоновском поле

Очень важным случаем движения в центрально-симметричном поле является движение в притягивающем кулоновом поле

$$U = -\frac{\alpha}{r}$$

( $\alpha$  — положительная постоянная). Как мы обсуждали ранее, спектр отрицательных собственных значений энергии будет дискретным, ограниченным снизу (с бесконечным числом уровней, приближающихся к нулю снизу).

Уравнение Шрёдингера для радиальных функций имеет вид:

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

В вычислениях, связанных с кулоновским полем, удобно пользоваться вместо обычных особыми единицами для измерения всех величин, которые мы будем называть кулоновыми единицами. Именно, в качестве единиц измерения массы, длины и времени выберем соответственно

$$m, \quad \frac{\hbar^2}{m\alpha}, \quad \frac{\hbar^3}{m\alpha^2}.$$

Все остальные единицы выводятся отсюда; так, единицей энергии будет  $E_{xap} = \frac{m\alpha^2}{\hbar^2}$ . Ниже мы везде (где это не оговорено особо) пользуемся этими единицами  $E_{xap}$ . Характерная величина длины равна  $\sim 0.5 \text{ \AA}$ , а энергия  $\sim 27.2 \text{ eV}$ .

Уравнение в новых единицах принимает вид:

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

Дополнительно перенормируем энергию:

$$\kappa^2 = \frac{1}{-2E/E_{xap}}; \quad \rho = \frac{2r}{\kappa a_{xap}}$$

И уравнение примет вид:

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

**При малых  $\rho$**  решение, удовлетворяющее необходимым условиям конечности, пропорционально  $\rho^l$ .

Для выяснения асимптотического поведения  $R$  при **больших  $\rho$**  опускаем в уравнении члены с  $1/\rho$  и  $1/\rho^2$  и получаем уравнение:

$$R'' - \frac{R}{4} = 0$$

откуда  $R = e^{\pm \rho/2}$ . Интересующее нас решение исчезает на бесконечности, следовательно, при больших  $\rho$  ведет себя, как  $e^{-\rho/2}$ . Ввиду этого естественно сделать подстановку:

$$R = \rho^l e^{-\rho/2} f(\rho)$$

после чего уравнение принимает вид

$$\rho f'' + (2l + 2 - \rho) f' + (\kappa - l - 1) f = 0$$

Решение этого уравнения должно расходиться на бесконечности не быстрее конечной степени  $\rho$ , а при  $\rho = 0$  должно быть конечным. Будем искать решение в виде ряда по  $\rho$ :

$$f = \sum_{m=0}^{\infty} a_m \rho^m.$$

Из физических соображений (сходимость в нуле) члены с отрицательными  $n$  отбрасываем, чтобы волновая функция не расходилась. Итак,

$$\begin{aligned} f &= \sum_{m=0}^{\infty} a_m \xi^m; \quad f' = \sum_{m=0}^{\infty} m \cdot a_m \rho^{m-1} = \sum_{m=0}^{\infty} (m+1) a_{m+1} \rho^m; \\ f'' &= \sum_{m=0}^{\infty} m(m-1) a_m \rho^{m-2} = \sum_{m=0}^{\infty} m(m+1) a_{m+1} \rho^{m-1}. \end{aligned}$$

Подставляя полученные выражения в уравнение на функцию  $f$  и группируя члены с одинаковыми степенями, получаем

$$\begin{aligned} \sum_m \rho^m &\left[ m(m+1) a_{m+1} + 2(l+1)(m+1) a_{m+1} - m \cdot a_m + (\kappa - l - 1) a_m \right] = \\ &= \sum_m \rho^m \left[ (m+2(l+1))(m+1) a_{m+1} + (\kappa - l - 1 - m) a_m \right] \end{aligned}$$

Приравнивая нулю, коэффициенты при одинаковых степенях  $\xi^n$ , найдем рекуррентное соотношение для определения коэффициентов

$$a_{m+1} = \frac{l+1+m-\kappa}{(m+2(l+1))(m+1)} a_m \quad (7)$$

Рассмотрим асимптотику искомого ряда при больших  $m$  выполняется следующее примерное равенство:

$$a_{m+1} \approx \frac{1}{m} a_m \quad (8)$$

Решением этого рекуррентного соотношения является  $a_m = m!$ . Но ряд  $f = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\rho^m}{m!} = e^{\rho}$ . Это

приводит к расходящейся на бесконечности волновой функции.

Таким решением этого уравнения расходятся. Но расходимость можно снять, оборвав ряд. Это возможно, если для какого-либо  $m$  выполнится равенство  $(l+1+m-\kappa)=0$ , где  $m \geq 0$ . Это возможно, если  $\kappa = m + l + 1$ , где  $m = 0, 1, 2, \dots$ . Но так как  $l \geq 0$ , то  $\kappa$  является

целым числом больше нуля. Обозначим его за  $n$ . Тогда для энергии получим следующее выражение:

$$E = -\frac{E_{xap}}{2n^2} = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2 n^2}$$

где  $n \geq l + 1$ .

Число  $n$  называется **главным квантовым числом**. При заданном значении главного квантового числа число  $l$  может принимать значения

$$l = 0, 1, \dots, n-1$$

всего  $n$  различных значений. Проекция момента импульса может принимать следующие значения:

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

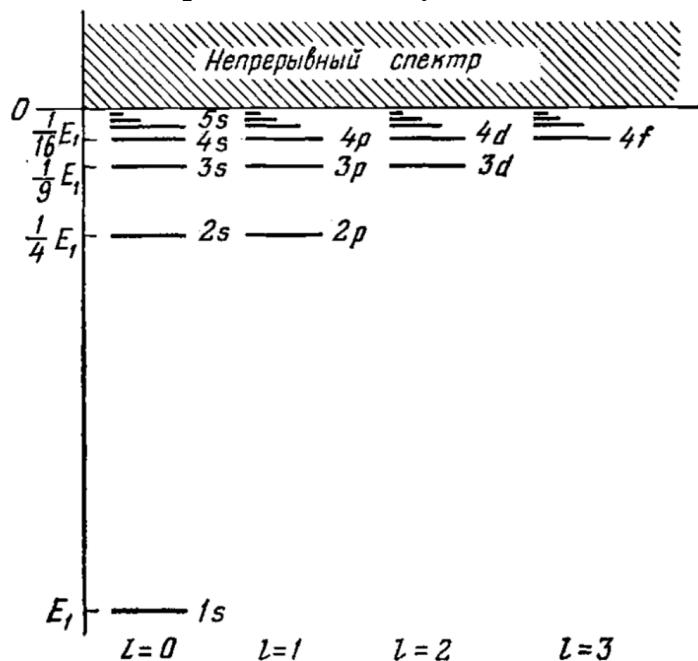
В выражение для энергии входит только число  $n$ . Поэтому все состояния с различными  $l$ , но одинаковыми  $n$  обладают одинаковой энергией. Таким образом, каждое собственное значение оказывается вырожденным не только по магнитному квантовому числу  $m$  (как при всяком движении в центрально-симметричном поле), но и по числу  $l$ . Это последнее **вырождение** (о нем говорят, как о **случайном** или **кулоновом**) специфично именно для кулоновского поля. Каждому данному значению  $l$  соответствует  $2l + 1$  различных значений  $m$ , поэтому кратность вырождения  $n$ -го уровня энергии равна  $n^2$ .

Для обозначения состояний с различными значениями момента  $l$  частицы существует общепринятая символика; состояния обозначаются буквами латинского алфавита со следующим соответствием:

$l =$	0	1	2	3	4	5	6	7	$\dots$
	$s$	$p$	$d$	$f$	$g$	$h$	$i$	$k$	$\dots$

Основным состоянием при движении частицы в центрально-симметричном поле всегда является  $s$ -состояние.

Спектр электрона в атоме водорода имеет следующий вид:



Провести аналог с периодической таблицей. Но на третьем периоде там  $d$ -орбиталь не появляется, т.к. там куча других электронов – настоящее уравнение гораздо сложнее.

Оценить длину волны света, испускаемого при переходе электрона в атоме водорода с первого возбуждённого на основной уровень.

# ЛЕКЦИЯ 14. ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ.

## Движение в магнитном поле. Уровни Ландау.

В нерелятивистской квантовой механике магнитное поле может рассматриваться только в качестве внешнего поля. Магнитное взаимодействие частиц друг с другом является релятивистским эффектом, и его учет требует последовательной релятивистской теории.

В классической теории функция Гамильтона заряженной частицы в электромагнитном поле имеет вид:

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

где  $\phi$  — скалярный,  $\mathbf{A}$  — векторный потенциал поля,  $\mathbf{p}$  — обобщенный импульс частицы. Спин мы пока не рассматриваем. Этот Гамильтониан легко квантуется:

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

При раскрытии квадрата  $(\mathbf{p} - (e/c)\mathbf{A})^2$  надо иметь в виду, что оператор  $\mathbf{p}$ , вообще говоря, не коммутативен с вектором  $\mathbf{A}$ , являющимся функцией координат. Поэтому надо писать:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{p}}^2 - \frac{e}{2mc} (\hat{\mathbf{p}}\mathbf{A} + \mathbf{A}\hat{\mathbf{p}}) + \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2$$

Согласно правилу коммутации оператора импульса с любой функцией координат имеем:

$$\hat{\mathbf{p}}\mathbf{A} - \mathbf{A}\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \operatorname{div} \mathbf{A}.$$

Таким образом,  $\mathbf{p}$  и  $\mathbf{A}$  коммутативны, если  $\operatorname{div}(\mathbf{A}) = 0$  (кулоновская калибровка). Это, в частности, имеет место для однородного поля, если выбрать его векторный потенциал в виде

$$\mathbf{A} = (1/2)[\mathbf{H}\mathbf{r}].$$

Определим уровни энергии частицы в постоянном однородном магнитном поле. Примером выбора векторного потенциала  $\vec{A}$ , соответствующего постоянному внешнему магнитному полю  $\vec{H} = \{0, 0, H_0\}$  и удовлетворяющей кулоновской калибровке, является выбор

$$A_x = -H_0 y; \quad A_y = A_z = 0.$$

При таком выборе векторного потенциала гамильтониан совпадает с таковым для квантового гармонического осциллятора:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left[ \hat{p}_x - \frac{eH}{c} y \right]^2 + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m}$$

Гамильтониан этого уравнения не содержит явно координат  $x$  и  $z$ . Поэтому с ним коммутативны также и операторы  $p_x$  и  $p_z$  (дифференцирования по  $x$  и  $z$ ), т.е.  $x$ - и  $z$ -компоненты обобщенного импульса сохраняются. Соответственно этому ищем  $\psi$  в виде

$$\Psi = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (p_x x + p_z z) \right\} \phi(y) \tag{1}$$

Поскольку  $A_z = 0$ , то  $z$ -компоненты обобщенного импульса совпадают с компонентой обычного импульса  $mv_z$ . Таким образом, скорость частицы в направлении поля может иметь произвольное значение; можно сказать, что движение вдоль поля «не квантуется».

Подставив (1) в уравнение Шредингера, получим:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\phi'' + \left( \frac{m\omega_H^2}{2}(y - y_0)^2 + \frac{p_z^2}{2m} \right) = E\phi;$$

где:  $y_0 = -cp_x/eH$ ;  $\omega_H = \frac{|e|H}{mc}$ .

Записанное уравнение по форме совпадает с уравнением Шредингера для линейного осциллятора, колеблющегося с частотой  $\omega_H$ . Поэтому мы можем сразу заключить, энергия этой системы, может принимать значения:

$$E = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_H + \frac{p_z^2}{2}$$

и соответствующие им собственные функции  $\phi_n(y)$ , выраженные через полиномы Эрмита  $H_n\left(\frac{y - y_0}{a_H}\right)$ , где магнитная длина равна:  $a_H = \sqrt{\hbar/m\omega_H}$ :

$$\phi_n = \text{const} \exp\left\{-\frac{(y - y_0)^2}{2a_H^2}\right\} H_n\left(\frac{y - y_0}{a_H}\right)$$

Таким образом, состояние в этой системе локализовано возле координаты  $y_0$ . В классике результатом является движение по окружности возле какого-то центра.

**Вопрос:** откуда берётся нарушение симметрии, чем выделено направление  $y$ ? Наверное, потому что эти состояния сильно вырождены, и правильной комбинацией состояний можно составить симметричную функцию.

Поскольку энергия не содержит величины  $p_x$ , пробегающей непрерывный ряд значений, уровни энергии вырождены с непрерывной кратностью. Кратность вырождения, однако, становится конечной, если движение в плоскости  $xy$  ограничено большой, но конечной площадью  $S = L_x L_y$ . Число различных (теперь дискретных) значений  $p_x$  в интервале  $\Delta p_x$  равно  $\frac{L_x}{2\pi\hbar} \Delta p_x$  (квант импульса в яме с бесконечно высокими

стенками  $\frac{2\pi\hbar}{L_x}$ ). Допустимы все значения  $p_x$ , для которых центр орбиты находится внутри  $S$  (мы пренебрегаем радиусом орбиты по сравнению с большим  $L_y$ ). Из условий  $0 < y_0 < L_y$  имеем  $\Delta p_x = eHL_y/c$ . Следовательно, число состояний (для заданных  $n$  и  $p_z$ ) есть

$$N = \frac{eHL_x L_y}{2\pi\hbar c} = \frac{eHS}{2\pi\hbar c}.$$

Таким образом вырожденность состояния пропорциональна магнитному потоку через плоскость  $xy$ . Заметим, что  $\frac{2\pi\hbar c}{e} = \Phi_0$  – квант магнитного потока.

## Стационарные возмущения в невырожденных системах.

Точное решение уравнения Шредингера может быть найдено лишь в сравнительно небольшом числе простейших случаев. Большинство задач квантовой механики приводит к слишком сложным уравнениям, которые не могут быть решены точным образом. Часто, однако, в условиях задачи фигурируют величины разного порядка; среди них могут оказаться малые величины, после пренебрежения которыми задача упрощается настолько, что делается возможным ее точное решение. В таком случае первый шаг в решении поставленной физической задачи состоит в точном решении упрощенной задачи, а второй — в приближенном вычислении поправок, обусловленных малыми членами, отброшенными в упрощенной задаче. Общий метод для вычисления этих поправок называется **теорией возмущений**.

Предположим, что гамильтониан данной физической системы имеет вид

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V}$$

где  $\hat{H}_0$  — гамильтониан невозмущенной системы, для которого известно точное решение уравнения:

$$\hat{H}_0 \psi_n^{(0)} = E_0 \psi_n^{(0)}$$

$V$  — оператор возмущения;  $\lambda$  — безразмерный параметр малости.

Возмущения бывают стационарные и нестационарные. Рассмотрим сначала стационарное возмущение, при котором оператор возмущения не зависит от времени.

Задача теории возмущений для дискретного спектра может быть сформулирована следующим образом. Предполагается, что собственные функции  $\psi_n^{(0)}$  и собственные значения оператора  $H_0$  известны. Требуется найти приближенные решения уравнения

$$(\hat{H} + \hat{V}) \psi_n = E \psi_n \quad (1)$$

т.е. приближенные выражения для собственных функций  $\psi_n$  и значений  $E_n$  возмущенного оператора  $H$  вырождены. Для упрощения выводов будем считать сначала, что имеется только дискретный спектр уровней энергии.

Вычисления удобно производить в матричном виде. Для этого разложим искомую функцию  $\psi$  по функциям  $\psi_n^{(0)}$ :

$$\psi = \sum_m c_m \psi_m^{(0)};$$

Подставляя это разложение в (2), получим:

$$\sum_m c_m (E_m^{(0)} + \hat{V}) \psi_m^{(0)} = \sum_m c_m E \psi_m^{(0)}$$

а умножив это равенство с обеих сторон на  $\psi_k^{(0)}$  и интегрируя, найдем

$$(E - E_k^{(0)}) c_k = \sum_m c_m V_{km} \quad (2)$$

Здесь введена матрица  $V_{km}$  оператора возмущения  $V$ , определенная с помощью невозмущенных функций  $\psi_m^{(0)}$ :

$$V_{km} = \int \psi_k^{(0)*} \hat{V} \psi_m^{(0)} dq$$

Разложим энергию и функцию возле некоторого невозмущённого состояния  $\psi_n^{(0)}$ . Чтобы указать около какого состояния мы раскладываемся, укажем это верхним индексом  $n$  в коэффициентах и нижним индексом в энергии:

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \dots, \quad c_m^n = c_m^{n,(0)} + c_m^{n,(1)} + c_m^{n,(2)} + \dots, \quad (3)$$

Подставим разложение (3) в уравнение (2).

Подставим это разложение в (2), учитывая, что матричный элемент  $V_{km}$  имеет первый порядок малости:

$$\left( E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} - E_k^{(0)} \right) \left( c_k^{n,(0)} + c_k^{n,(1)} + c_k^{n,(2)} \right) = \sum_m \left( c_m^{n,(0)} + c_m^{n,(1)} \right) V_{km}$$

1. Рассмотрим **нулевой порядок** малости:

$$\left( E_n^{(0)} - E_k^{(0)} \right) c_k^{n,(0)} = 0 \quad (4)$$

Напомним, что мы рассматриваем невырожденную систему, т.е.  $E_n^{(0)} \neq E_k^{(0)}$  для  $n \neq k$ . Тогда уравнение (4) при условии нормировки имеет следующее решение:

$$c_k^{n,(0)} = \delta_{nk} \quad (5)$$

Собственно, это очевидный результат – нулевой порядок и должен давать состояние, к которому ищется поправка.

2. Рассмотрим **первый порядок** малости, учтя решение (5):

$$\left( E_n^{(0)} + E_n^{(1)} - E_k^{(0)} \right) \left( \delta_{nk} + c_k^{n,(1)} \right) = \sum_m \delta_{nm} V_{km}$$

Упростим:

$$E_k^{(1)} + \left( E_n^{(0)} - E_k^{(0)} \right) c_k^{n,(1)} = V_{kn}$$

Записывая это выражение для  $k = n$  получим выражение для **первой поправки к энергии**:

$$E_n^{(1)} = V_{nn} \quad (6)$$

Записывая это выражение для  $k \neq n$  получим выражение для **первой поправки к коэффициентам** с:

$$c_k^{n,(1)} = \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} (1 - \delta_{kn}) \quad (7)$$

$(1 - \delta_{kn})$  введена для удобства, чтобы обозначить, что  $c_n^{n,(1)} = 0$ . Последнее можно показать из условия нормировки.

Таким образом, первая поправка к функции имеет вид:

$$\psi_n^{(1)} = \sum_{k \neq n} \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \psi_k^{(0)} ; \quad (8)$$

3. Рассмотрим **второй порядок** малости, учтя найденные решения (6-8):

$$\left( E_n^{(0)} + V_{kn} \delta_{kn} + E_n^{(2)} - E_k^{(0)} \right) \left( \delta_{kn} + \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} (1 - \delta_{kn}) + c_k^{n,(2)} \right) = \sum_m \left( \delta_{mn} + \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} (1 - \delta_{mn}) \right) V_{km}$$

Раскроем скобки и упростим:

[К содержанию](#)

$$c_k^{n,(2)} \left( E_n^{(0)} - E_k^{(0)} \right) + E_n^{(2)} \delta_{kn} = \sum_{m \neq n} \left( \frac{V_{mn} V_{km}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \right)$$

Записывая это выражение для  $k = n$  получим выражение для **второй поправки к энергии**:

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|V_{mk}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

Записывая это выражение для  $k \neq n$  получим выражение для **второй поправки к собственным функциям**:

$$c_k^{n,(2)} = \frac{1 - \delta_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \sum_{m \neq n} \left( \frac{V_{mn} V_{km}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \right)$$

$c_n^{n,(2)}$  может быть найдена из условия нормировки.

Таким образом мы получили следующие выражения для поправок теории возмущений:

$$c_k^{n,(0)} = \delta_{nk}$$

$$E_n^{(1)} = V_{nn}$$

$$c_k^{n,(1)} = \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} (1 - \delta_{kn})$$

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|V_{mk}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

$$c_k^{n,(2)} = \frac{1 - \delta_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \sum_{m \neq n} \left( \frac{V_{mn} V_{km}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \right)$$

### Вывод из Ландау (не рассказывается).

Будем искать значения коэффициентов  $c_m$  и энергии  $E$  в виде рядов

$$E = E^{(0)} + E^{(1)} + E^{(2)} + \dots, \quad c_m = c_m^{(0)} + c_m^{(1)} + c_m^{(2)} + \dots, \quad (3')$$

где величины  $E^{(1)}, c_m^{(1)}$  — того же порядка малости, что и возмущение  $V$ , величины  $E^{(2)}, c_m^{(2)}$  — второго порядка малости, и т.д. Такое разложение можно представить следующим образом. Рассмотрим некоторый невозмущённый уровень  $n$ . У него состояние  $\psi_n^{(0)}$ , это означает, что  $c_n^{(0)}$ , а все остальные  $c_m^{(0)} = 0$ .

Определим поправки к  $n$ -му собственному значению и собственной функции, соответственно чему полагаем:  $c_n^{(0)} = 1$ ,  $c_m^{(0)} = 0$ ,  $m \neq n$ . Для отыскания первого приближения подставим в уравнение (38.4)  $E = E_n^{(0)} + E_n^{(1)}$ ,  $c_k = c_k^{(0)} + c_k^{(1)}$ , сохранив только члены первого порядка. Уравнение с  $k = n$  дает

$$E_n^{(1)} = V_{nn} = \int \psi_n^{(0)*} \hat{V} \psi_n^{(0)} dq. \quad (38.6)$$

Таким образом, поправка первого приближения к собственному значению  $E_n$  равна среднему значению возмущения в состоянии  $\psi_n^{(0)}$

Уравнение (2) с  $k \neq n$  дает

$$c_k^{(1)} = \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}};$$

а  $c_n^{(1)}$  остается произвольным и оно должно быть выбрано так, чтобы функция  $\Psi_m = \Psi_m^{(0)} + \Psi_m^{(1)}$  была нормирована с точностью до членов первого порядка включительно. Для этого надо положить  $c_n^{(1)} = 0$ . Таким образом, первая поправка к функции имеет вид:

$$\Psi_n^{(1)} = \sum_{k \neq n} \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \Psi_k^{(0)}; \quad (4')$$

Эта функция ортогональна к  $\Psi_n^{(0)}$  а поэтому интеграл от  $|\Psi_m^{(0)} + \Psi_m^{(1)}|^2$  отличается от единицы лишь на величину второго порядка малости.

Формула (4) определяет поправку первого приближения к волновым функциям. Из нее, кстати, видно, каково условие применимости рассматриваемого метода. Именно, должно иметь место неравенство

$$V_{kn} \ll |E_n^{(0)} - E_k^{(0)}|$$

т. е. матричные элементы возмущения должны быть малы по сравнению с соответствующими разностями невозмущенных уровней энергии.

Определим еще поправку второго приближения к собственному значению  $E_n^{(0)}$ . Для этого подставляем в (38.4)  $E = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)}$ ,  $c_k = c_k^{(0)} + c_k^{(1)} + c_k^{(2)}$  и рассматриваем члены второго порядка малости. Уравнение с  $k = n$  дает

$$E_n^{(2)} c_n^0 = \sum_m' V_{nm} c_m^{(1)},$$

откуда

$$E_n^{(2)} = \sum_m' \frac{|V_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad (38.10)$$

(мы подставили  $c_m^{(1)}$  из (38.7) и воспользовались тем, что в силу эрмитовости оператора  $\hat{V}$ :  $V_{mn} = V_{nm}^*$ ).

Отметим, что поправка второго приближения к энергии нормального состояния всегда отрицательна. Действительно, если  $E_n$  соответствует наименьшему значению, то все члены в сумме (38.10) отрицательны.

# ЛЕКЦИЯ 15. НЕСТАЦИОНАРОЕ ВОЗМУЩЕНИЕ.

## Вырожденные состояния

Обратимся теперь к случаю, когда невозмущенный оператор  $\hat{H}_0$  имеет вырожденные собственные значения. Будем обозначать посредством  $\psi_n^{(0)}, \psi_{n'}^{(0)}, \dots$  собственные функции, относящиеся к одному и тому же собственному значению энергии  $E_n^{(0)}$ . Выбор этих функций, как мы знаем, неоднозначен — вместо них можно выбрать любые  $s$  ( $s$  — кратность вырождения уровня  $E_n^{(0)}$ ) независимых линейных комбинаций этих же функций. Он перестает, однако, быть произвольным, если мы подчиним волновые функции требованию, чтобы их изменение под влиянием приложенного малого возмущения было малым.

Пока что будем подразумевать под  $\psi_n^{(0)}, \psi_{n'}^{(0)}, \dots$  некоторые произвольно выбранные невозмущенные собственные функции. Правильные функции нулевого приближения — линейные комбинации вида

$$c_n^{(0)}\psi_n^{(0)} + c_{n'}^{(0)}\psi_{n'}^{(0)} + \dots$$

Коэффициенты в этих комбинациях определяются, вместе с поправками первого приближения к собственным значениям, следующим образом.

Уравнение (2) из прошлой лекции:

$$(E - E_k^{(0)})c_k = \sum_m c_m V_{km} \quad (2)$$

Выпишем уравнения (2) с  $k = n, n', \dots$ , подставив в них в первом приближении  $E = E_n^{(0)} + E^{(1)}$  причем для величин  $c_k$  достаточно ограничиться нулевыми значениями  $c_n = c_n^{(0)}, c_{n'} = c_{n'}^{(0)}; c_m = 0$  при  $m \neq n, n', \dots$  Тогда получим

$$E_n^{(1)}c_n^{(0)} = \sum_{n'} V_{nn'} c_{n'}^{(0)} \quad (4)$$

или

$$\sum_{n'} (V_{nn'} - E_n^{(1)}\delta_{nn'}) c_{n'}^{(0)} = 0 \quad (4')$$

где  $n, n'$  пробегают все значения, нумерующие состояния, относящиеся к данному невозмущенному собственному значению  $E_n^{(0)}$ . Эта система однородных линейных уравнений для величин  $c_n^{(0)}$  имеет отличные от нуля решения при условии обращения в нуль определителя, составленного из коэффициентов при неизвестных. Таким образом, получаем уравнение

$$|V_{nn'} - E^{(1)}\delta_{nn'}| = 0 \quad (5)$$

В более развёрнутом виде:

$$\begin{vmatrix} V_{11} - E^{(1)} & V_{12} & \dots \\ V_{21} & V_{22} - E^{(1)} & \dots \\ V_{31} & V_{32} & \dots \\ \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & V_{ss} - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0,$$

Это уравнение  $s$ -степени по  $E^{(1)}$  и имеет, вообще говоря,  $s$  различных вещественных корней. Эти корни и представляют собой искомые поправки первого приближения к собственным значениям. Уравнение (5) называют **секулярным**.

Подставляя поочередно корни уравнения (5) в систему (4) и решая последнюю, найдем коэффициенты  $c_n^{(0)}$  и таким образом определим собственные функции нулевого приближения.

В результате возмущения первоначально вырожденный уровень энергии перестает, вообще говоря, быть вырожденным (корни уравнения (5)), вообще говоря, различны); как говорят, **возмущение «снимает» вырождение**. Снятие вырождения может быть как полным, так и частичным (в последнем случае после наложения возмущения остается вырождение меньшей кратности, чем первоначальная).

Поправка к энергии второго порядка формально совпадает с аналогичным выражением для невырожденных состояний:

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|V_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}.$$

### Плоский ротатор в магнитном поле.

Найдем расщепление уровней плоского ротатора во внешнем постоянном магнитном поле. Направление поля  $\vec{H}$  перпендикулярно плоскости ротатора.

Гамильтониан возмущения

$$\hat{V} = -\frac{e}{2\mu c} \vec{L} \vec{H} = -\frac{e}{2\mu c} L_z H_z = i \frac{eH\hbar}{2\mu c} \frac{d}{d\phi},$$

где  $\vec{L}$  – оператор момента количества движения ротатора.

$$V_{mm'} = \langle m | \hat{V} | m' \rangle = -i \frac{eH\hbar}{2\mu c} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} im' e^{i(m'-m)\phi} d\phi = \frac{eH\hbar}{2\mu c} m \delta_{mm'}$$

Детерминант секулярного уравнения тривиален, матрица диагональна. При этом поправки к вырожденным уровням  $E_{\pm m}$  разные, что снимает вырождение. Каждый уровень расщепляется на два подуровня (нормальный эффект Зеемана).

## Плоский ротатор в электрическом поле. (В семинар)

Пусть плоский заряженный ротатор с моментом инерции  $I$  помещен во внешнее электрическое поле  $\epsilon$ . Найдем сдвиг уровней энергии ротатора и вычислим коэффициент электрической восприимчивости.

Гамильтониан возмущения имеет вид

$$\hat{V} = -(\vec{d} \cdot \hat{\vec{\epsilon}}) = -d \cdot \epsilon \cos \phi.$$

Невозмущенные волновые функции и уровни энергии равны:

$$\phi_m^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi};$$

$$E_m^{(0)} = \frac{\hbar^2 m^2}{2I};$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Матричные элементы гамильтониана возмущения

$$V_{mm'} = \langle m | \hat{V} | m' \rangle = -\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \cdot \epsilon \cos \phi e^{i(m'-m)\phi} d\phi = \begin{cases} 0 & \text{for } m' \neq m+1; \\ -\frac{d \cdot \epsilon}{2} & \text{for } m' = m \pm 1. \end{cases}$$

Секулярное уравнение тривиально, изменять функции не надо. Поправка первого порядка к уровню энергии

$$E_m^{(1)} = V_{mm} = \langle m | \hat{V} | m \rangle = 0$$

Поправка второго порядка

$$E_m^{(2)} = \frac{\left| \langle m | \hat{V} | m-1 \rangle \right|^2}{E_m^{(0)} - E_{m-1}^{(0)}} + \frac{\left| \langle m | \hat{V} | m+1 \rangle \right|^2}{E_m^{(0)} - E_{m+1}^{(0)}} = \frac{I \cdot d^2 \epsilon^2}{2\hbar^2} \left[ \frac{1}{m^2 - (m-1)^2} + \frac{1}{m^2 - (m+1)^2} \right] = \frac{I \cdot d^2 \epsilon^2}{\hbar^2 (4m^2 - 1)}.$$

Результирующая энергия равна:

$$E_m = \frac{\hbar^2 m^2}{2I} + \frac{I \cdot d^2 \epsilon^2}{\hbar^2 (4m^2 - 1)}$$

При помещении квантово-механической системы во внешнее электрическое поле  $\vec{\epsilon}$  происходит поляризация системы. Работа поляризации  $-\frac{\vec{P} \cdot \vec{\epsilon}}{2}$ , где  $\vec{P}$  – вектор поляризации, равный среднему дипольному моменту системы. Так как  $\vec{P} = \alpha \vec{\epsilon}$ , где  $\alpha$  – коэффициент электрической восприимчивости, то изменение энергии системы в результате поляризации равно  $\Delta E = -\frac{\alpha \cdot \epsilon^2}{2}$ . Если ротатор находится в состоянии  $\phi_m$ , то из равенства  $\Delta E = E_m^{(2)}$  получаем коэффициент электрической восприимчивости ротатора

$$\alpha = -\frac{I \cdot d^2}{\hbar^2 (4m^2 - 1)}.$$

При  $m \neq 0$ ,  $\alpha < 0$ , т.е. средний дипольный момент противоположен внешнему электрическому полю. При  $m = 0$   $\alpha > 0$ , как в нормальных материалах.

Так как уровни энергии невозмущенного ротатора дважды вырождены, то на первый взгляд кажется, что поправка первого порядка должна быть отлична от нуля, т.е. должен существовать линейный эффект Штарка. В действительности вырождение ротатора не снимается в постоянном и однородном электрическом поле вплоть до второго приближения по возмущению включительно.

### Линейный эффект Штарка

Найдем сдвиг уровней энергии с главным квантовым числом  $n = 2$  (линейный эффект Штарка) для атома водорода, находящегося во внешнем электрическом поле  $\vec{\epsilon}$ .

Ось  $z$  направлена вдоль внешнего электрического поля. Тогда гамильтониан возмущения можно написать в виде  $\hat{V} = e \cdot \hat{z} \cdot \epsilon = e \cdot \epsilon \cdot r \cos(\theta)$ .

Невозмущенные волновые функции четырехкратно вырожденного уровня  $n = 2$  имеют вид:

$$\Psi_{2s0} = \frac{2 - \frac{r}{a}}{4\sqrt{2\pi a^3}} e^{-\frac{r}{2a}}; \quad \Psi_{2p1} = \frac{\frac{r}{a}}{8\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{2a}} \sin(\theta) e^{i\phi};$$

$$\Psi_{2p0} = \frac{\frac{r}{a}}{8\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{2a}} \sqrt{2} \cos(\theta); \quad \Psi_{2p(-1)} = \frac{\frac{r}{a}}{8\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{2a}} \sin(\theta) e^{-i\phi},$$

где  $a$  – боровский радиус.

Оператор  $\hat{L}_z$  коммутирует с полным гамильтонианом, так как  $[\hat{L}_z, z] = 0$ , поэтому магнитное квантовое число  $m$  сохраняется в присутствии электрического поля.

Вычислим матрицу гамильтониана возмущения в подпространстве вырожденных собственных функций уровня  $n = 2$ . Ввиду сохранения магнитного квантового числа  $m$ , матричные элементы между состояниями с различными значениями  $m$  равны нулю (математически – это просто констатация факта:  $\int_0^{2\pi} e^{im\phi} d\phi = 0$ ,  $m \neq 0$ ):

$$\langle 2s0 | \hat{V} | 2p1 \rangle = 0$$

$$\langle 2s0 | \hat{V} | 2p, -1 \rangle = 0$$

$$\langle 2p, +1 | \hat{V} | 2p, -1 \rangle = 0$$

Другие интегралы зануляются из-за интегрирования по  $\theta$ :

$$\langle 2s0 | \hat{V} | 2s0 \rangle = \frac{e \cdot \epsilon}{32\pi a^3} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \left(2 - \frac{r}{a}\right)^2 e^{-\frac{r}{a}} r^3 \cos(\theta) \sin(\theta) dr \cdot d\theta \cdot d\phi = 0$$

$$\langle 2p0 | \hat{V} | 2p0 \rangle = \frac{e \cdot \epsilon}{32\pi a^3} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{r^5}{a^2} e^{-\frac{r}{a}} \cos^3(\theta) \sin(\theta) dr \cdot d\theta \cdot d\phi = 0$$

Следующие матричные элементы отличны от нуля:

$$\begin{aligned}\langle 2s0 | \hat{V} | 2p0 \rangle &= \frac{e \cdot \varepsilon}{32\pi a^3} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} e^{-\frac{r}{a}} \left( 2 - \frac{r}{a} \right)^2 \frac{r^4}{a} \cos^2(\theta) \sin(\theta) dr \cdot d\theta \cdot d\varphi = \\ &= \frac{e \cdot \varepsilon}{32\pi a^3} \frac{4\pi}{3} \int_0^\infty e^{-\frac{r}{a}} \left( 2 - \frac{r}{a} \right) r^4 dr = \frac{e \cdot \varepsilon}{32\pi a^4} \frac{4\pi}{3} \{ 48a^4 - 120a^4 \} = -3e\varepsilon a.\end{aligned}$$

Матрица гамильтониана возмущения имеет вид

$$e\varepsilon \begin{pmatrix} 0 & -3a & 0 & 0 \\ -3a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Приведём эту матрицу к диагональному виду, для чего секулярный детерминант приравняем нулю:

$$e\varepsilon \begin{vmatrix} -\lambda & -3a & 0 & 0 \\ -3a & -\lambda & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\lambda \end{vmatrix} = 0.$$

Корни этого уравнения

$$\lambda_1 = +3e\varepsilon a, \quad \lambda_2 = -3e\varepsilon a, \quad \lambda_3 = \lambda_4 = 0$$

Смысл этого уравнения заключается в том, что в электрическом поле снимается вырождение состояний  $2s0$  и  $2p0$ , причем величина расщепления равна  $6e\varepsilon a$ , а состояния  $2p1$  и  $2p(-1)$  остаются вырожденными.

### Нестационарное возмущение

Рассмотрим нестационарное возмущение. Говорить о поправках к собственным значениям энергии в этом случае вообще нельзя, поскольку при зависящем от времени гамильтониане (каковым будет возмущенный оператор  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ ) энергия вообще не сохраняется, так что стационарных состояний не существует. Задача заключается здесь в приближенном вычислении волновых функций по волновым функциям стационарных состояний невозмущенной системы. Будем искать решение возмущённого уравнения

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (\hat{H}_0 + \hat{V}) \Psi$$

в виде суммы

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_n a_n(t) \psi_n(\vec{r}) e^{\frac{-i E_n t}{\hbar}},$$

где  $\Psi_n^{(0)}(t, \vec{r}) = \psi_n^{(0)}(\vec{r}) e^{\frac{-i E_n t}{\hbar}}$  – собственные функции невозмущенного гамильтониана, удовлетворяющие уравнению

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_n^{(0)}(t, r)}{\partial t} = \hat{H}_0 \Psi_n^{(0)}(t, r)$$

Подстановкой во временное уравнение Шредингера получим:

$$i\hbar \sum_n \Psi_n^{(0)} \frac{da_n}{dt} = \sum_n a_n \hat{V} \Psi_n^{(0)}.$$

Умножив обе части равенства слева на  $\Psi_m^{(0)*}$  и интегрируя, получим

$$i\hbar \frac{da_n}{dt} = \sum_k a_k V_{nk}(t)$$

где

$$\begin{aligned} V_{nk}(t) &= \int \Psi_n^{(0)*} \hat{V} \Psi_k^{(0)} dq = V_{nk} e^{i\omega_{nk} t} \\ \omega_{nk} &= \frac{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}{\hbar} \end{aligned}$$

матричные элементы возмущения, включающие временной множитель (надо, впрочем, иметь в виду, что при зависящем явно от времени  $V$  величины  $V_{mn}$  тоже являются функциями времени).

В качестве невозмущенной волновой функции выберем волновую функцию  $n$ -го стационарного состояния, чему соответствуют значения коэффициентов  $a_n^{(0)} = 1$ ,  $a_k^{(0)} = 0$  при  $k \neq n$ . Для определения первого приближения ищем  $a_k$  в виде  $a_k = a_k^{(0)} + a_k^{(1)}$ . Это дает:

$$i\hbar \frac{da_k^{(1)}}{dt} = V_{kn}(t) \quad (6)$$

Для того чтобы указать, к какой из невозмущенных функций вычисляется поправка, введем второй индекс у коэффициентов  $a_k$ , написав

$$\Psi_n = \sum_k a_{kn}(t) \Psi_k^{(0)}$$

Соответственно этому, напишем результат интегрирования уравнения (6) в виде

$$a_{kn}^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} \int V_{kn}(t) dt = -\frac{i}{\hbar} \int V_{kn} e^{i\omega_{kn} t} dt \quad (7)(40.5)$$

Этим определяются волновые функции первого приближения.

## Переходы под влиянием нестационарного возмущения

пределы интегрирования в (40.5) выбраны таким образом, чтобы при  $t \rightarrow -\infty$  все  $a_{kn}^{(1)}$  обращались в нуль. По истечении времени действия возмущения (или в пределе  $t \rightarrow \infty$ ) коэффициенты  $a_{kn}$  принимают постоянные значения  $a_{kn}(\infty)$ , и система будет находиться в состоянии с волновой функцией

$$\Psi = \sum_k a_{kn}(\infty) \Psi_k^{(0)},$$

снова удовлетворяющей невозмущенному волновому уравнению, но отличной от первоначальной функции  $\Psi_n^{(0)}$ . Согласно общим правилам квадрат модуля коэффициента  $a_{kn}(\infty)$  определяет вероятность системе иметь энергию  $E_k^{(0)}$ , т. е. оказаться в  $k$ -м стационарном состоянии.

Таким образом, под влиянием возмущения система может перейти из первоначального стационарного состояния в любое другое. Вероятность перехода из первоначального ( $i$ -го) в конечное ( $f$ -е) стационарное состояние равна<sup>1</sup>)

$$w_{fi} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} V_{fi} e^{i\omega_{fi} t} dt \right|^2. \quad (41.2)$$

Рассмотрим теперь возмущение, которое, раз возникнув, продолжает затем действовать неограниченно долго (оставаясь, разумеется, все время малым). Другими словами, стремится к нулю при  $t \rightarrow -\infty$  и к конечному, отличному от нуля, пределу при  $t \rightarrow \infty$ . Формула (41.2) здесь непосредственно неприменима, так как стоящий в ней интеграл расходится. Эта расходимость, однако, с физической точки зрения несущественна и может быть легко устранена. Для этого напишем, интегрируя по частям:

$$a_{fi} = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t V_{fi} e^{i\omega_{fi} t} dt = -\frac{V_{fi} e^{i\omega_{fi} t}}{\hbar \omega_{fi}} \Big|_{-\infty}^t + \int_{-\infty}^t \frac{\partial V_{fi}}{\partial t} \frac{e^{i\omega_{fi} t}}{\hbar \omega_{fi}} dt.$$

Значение первого члена на нижнем пределе исчезает, а на верхнем пределе формально совпадает с коэффициентами разложения в формуле (38.8) (наличие лишнего периодического множителя связано просто с тем, что  $a_{fi}$  — коэффициенты разложения

полной волновой функции  $\Psi$ , а  $c_{fi}$  в § 38 — коэффициенты разложения не зависящей от времени функции  $\psi$ ). Поэтому ясно, что его предел при  $t \rightarrow \infty$  определяет просто изменение первоначальной волновой функции  $\Psi_i^{(0)}$  под влиянием «постоянной части»  $V(+\infty)$  возмущения и не имеет, следовательно, отношения к переходам в другие состояния. Вероятность же перехода определяется квадратом второго члена и равна

$$w_{fi} = \frac{1}{\hbar^2 \omega_{fi}^2} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial V_{fi}}{\partial t} e^{i\omega_{fi}t} dt \right|^2. \quad (41.3)$$

В обратном предельном случае очень быстрого, *внезапного*, включения возмущения производные  $\partial V_{fi}/\partial t$  обращаются в бесконечность в «момент включения». В интеграле от  $\frac{\partial V_{fi}}{\partial t} e^{i\omega_{fi}t}$  можно тогда вынести из-под знака интеграла сравнительно медленно меняющийся множитель  $e^{i\omega_{fi}t}$ , взяв его значение в этот момент. После этого интеграл сразу берется, и мы получаем

$$w_{fi} = \frac{|V_{fi}|^2}{\hbar^2 \omega_{fi}^2}. \quad (41.5)$$

Вероятности перехода при внезапных возмущениях могут быть найдены и в тех случаях, когда возмущение не является малым.

### Переходы под влиянием периодического возмущения.

Другого рода результаты получаются для вероятности перехода в состояния непрерывного спектра, происходящего под влиянием периодического возмущения. Предположим, что в некоторый начальный момент времени  $t = 0$  система находится в  $i$ -м стационарном состоянии дискретного спектра. Частоту  $\omega$  периодического возмущения будем предполагать такой, что

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

где  $E_{\min}$  — значение энергии, с которого начинается непрерывный спектр. Основную роль будут играть состояния непрерывного спектра со значениями энергии  $E_f$  в непосредственной близости к «резонансной» энергии  $E_i^{(0)} + \hbar\omega$ , т. е. такие, для которых разность  $\omega_{fi} - \omega$  мала. По этой причине периодическое возмущение запишем в следующем виде:  $\hat{V}(t) = \hat{F}e^{i\omega t}$ . Подставляя этот член в (7) и интегрируя, получим:

$$a_{fi} = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t V_{fi}(t) dt = -F_{fi} \frac{e^{i(\omega_{fi}-\omega)t} - 1}{\hbar(\omega_{fi} - \omega)}$$

Нижний предел интегрирования выбран таким образом, чтобы при  $t = 0$  было  $a_{fi} = 0$  в соответствии с поставленным начальным условием. Для квадрата модуля  $a_{fi}$  отсюда находим:

$$|a_{fi}|^2 = |F_{fi}|^2 \frac{4 \sin^2 \left( \frac{\omega_{fi} - \omega}{2} t \right)}{\hbar^2 (\omega_{fi} - \omega)^2}$$

Легко видеть, что при больших  $t$  стоящая здесь функция может быть представлена как пропорциональная  $t$ . Для этого замечаем, что имеет место следующая формула:

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

Соответственно этой формуле мы можем написать при больших  $t$ :

$$|a_{fi}|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |F_{fi}|^2 \pi t \delta \left( \frac{\omega_{fi} - \omega}{2} \right)$$

или, подставив  $\hbar\omega_{fi} = E_f - E_i^{(0)}$  и воспользовавшись тем, что  $\delta(ax) = \delta(x)/a$ :

$$|a_{fi}|^2 = \frac{2\pi}{\hbar} |F_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i^{(0)} - \hbar\omega) t$$

*Выражение  $|a_{fi}|^2 dv_f$  есть вероятность перехода из первоначального состояния в состояния, находящиеся в заданном интервале  $dv_f$  (плотность состояний с энергией  $E_f$ ). Мы видим, что при больших  $t$  она оказывается пропорциональной истекшему с момента  $t = 0$  промежутку времени. Вероятность же  $dw_{fi}$  перехода в течение единицы времени равна*

$$dw_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |F_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i^{(0)} - \hbar\omega) dv_f$$

В соответствии с тем, что и ожидалось, она отлична от нуля лишь для переходов в состояния с энергией  $E_f = E_i^{(0)} + \hbar\omega$ . Если энергетические уровни непрерывного спектра не вырождены, так что под  $v_f$  можно понимать значения одной только энергии, то весь «интервал» состояний  $dv_f$  сводится к одному состоянию с энергией  $E = E_i^{(0)} + \hbar\omega$ , и вероятность перехода в это состояние есть

$$w_{Ei} = \frac{2\pi}{\hbar} |F_{Ei}|^2$$

# ЛЕКЦИЯ 16. СПИН.

## Спин частицы.

До сих пор мы предполагали, что состояние отдельной микрочастицы (а элементарные частицы считаются точечными согласно теории относительности) задано, если известны три ее координаты или три проекции импульса или вообще величины, образующие полный набор. Оказалось, что целый ряд экспериментальных фактов указывает на существование у ряда микрочастиц, например, у электронов, протонов, нейтронов, специфической внутренней степени свободы. С этой внутренней степенью свободы связан некоторый собственный механический момент частицы, не зависящий от ее орбитального движения. Этот механический момент частицы получил название спина (от английского слова *to spin* — вращаться). Существование у электрона спина было установлено еще до создания квантовой механики. Были сделаны попытки интерпретировать спин как проявление вращения частицы вокруг собственной оси (отсюда и его название). Однако такая классическая трактовка оказалась несостоятельной. Все попытки получить правильное значение отношения между механическим и магнитным моментом для системы распределенного вращающегося заряда, оказались безуспешными. Что же касается модели твердого вращающегося шарика (для которой можно получить любое значение этого отношения), то она противоречит общим положениям теории относительности — поперечная скорость на поверхности шарика оказывается выше скорости света. Разрешение этого противоречия было найдено в квантовой механике. Как мы увидим ниже, внутренняя степень свободы и связанный с ней спин имеют специфический квантовый характер. При переходе к классической механике  $\hbar \rightarrow 0$  спин обращается в нуль. Поэтому спин не имеет никаких классических аналогов и не допускает интерпретации классического характера. Первоначально гипотеза о существовании спина была выдвинута в связи с расшифровкой спектров щелочных металлов. Позднее был установлен целый ряд фактов, позволивших однозначно установить правильность этой гипотезы.

В опытах Штерна и Герлаха непосредственно наблюдался магнитный момент, не связанный с орбитальным движением электронов. Именно в этих опытах было установлено, что если через неоднородное магнитное поле пропускать пучок атомов водорода находящихся в  $s$  состоянии, то этот пучок расщепляется на два. Между тем в  $s$  состоянии орбитальный механический момент, а, следовательно, и орбитальный магнитный момент, отсутствует, и пучок должен был бы проходить магнитное поле, не испытывая никакого отклонения. Двукратное расщепление свидетельствует о двух возможных ориентациях магнитного момента электрона. По величине расщепления можно определить значение спинового магнитного момента. Прямые опыты, проведенные Эйнштейном и де Гаазом, позволили определить отношение собственного механического и магнитного моментов спина электрона. Собственный механический момент обладает общими свойствами квантово-механического момента. Строго это было доказано с помощью аппарата теории групп.

Для частиц, обладающих спином, описание состояния с помощью волновой функции должно определять не только вероятности ее различных положений в пространстве, но и вероятности различных возможных ориентаций ее спина. Другими словами, волновая функция должна зависеть не только от трех непрерывных переменных — координат частицы, но и от одной дискретной спиновой переменной, указывающей значение проекции спина на некоторое избранное направление в пространстве (ось  $z$ ) и

пробегающей ограниченное число дискретных значений (которые мы будем обозначать далее буквой  $\sigma$ ).

Пусть  $\psi(x, y, z; \sigma)$  — такая волновая функция. По существу, она представляет собой совокупность нескольких различных функций координат, отвечающих различным значениям  $\sigma$ ; об этих функциях мы будем говорить как о спиновых компонентах. И часто её бывает удобно представлять в виде столбца:

$$\psi(x, y, z; \sigma) = \begin{pmatrix} \psi(x, y, z; \sigma_1) \\ \psi(x, y, z; \sigma_2) \\ \dots \\ \psi(x, y, z; 2s+1) \end{pmatrix}$$

где  $s$  — максимальное значение проекции спина на ось  $z$ . При этом интеграл

$$\int |\psi(x, y, z; \sigma)|^2 dV$$

определяет вероятность частице иметь определенное значение  $\sigma$ . Вероятность же частице находиться в элементе объема  $dV$ , имея произвольное значение  $\sigma$ , есть

$$dV \sum_{\sigma} |\psi(x, y, z; \sigma)|^2.$$

Квантово-механический оператор спина при применении его к волновой функции действует именно на спиновую переменную  $\sigma$ . Другими словами, он каким-то образом преобразует друг через друга компоненты волновой функции.

Операторы проекций спина  $\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z$  удовлетворяют таким же условиям коммутации, что и операторы орбитального момента.

### Спиновые матрицы (Паули) и спиновые функции.

Сказать, что матричные элементы оператора момента импульса (представляются через суммы  $L_+$  и  $L_-$ ) имеют только около-диагональные элементы. (скопировать это в раздел с моментом импульса)

В случае полуцелого значения квантового числа квадрата момента импульса  $l = \frac{1}{2}$ , операторам проекций момента импульса на декартовы оси координат отвечают матрицы:

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_z ; \quad \hat{L}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_y ;$$

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_x ,$$

где  $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$  — спиновые матрицы Паули. Случай  $l = \frac{1}{2}$  соответствует спину электрона.

1. Покажем, что спиновые матрицы Паули являются унитарными и эрмитовыми.
2. Проверим коммутационные и антакоммутационные соотношения для спиновых матриц Паули:

$$\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y - \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x = 2i \hat{\sigma}_z ; \quad \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x = 0 ;$$

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z - \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_y &= 2i \hat{\sigma}_x; & \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z + \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_y &= 0; \\ \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x - \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_z &= 2i \hat{\sigma}_y; & \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x + \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_z &= 0.\end{aligned}$$

3. Покажем, что

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}_x^2 &= \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = I; \quad \hat{\sigma}^2 = 3I; \\ \hat{S}^2 &= \frac{\hbar^2}{4} (\hat{\sigma}_x^2 + \hat{\sigma}_y^2 + \hat{\sigma}_z^2) = \frac{3\hbar^2}{4} I.\end{aligned}$$

где  $I$  – единичная матрица.

**Пример 1.** Найти собственные функции и собственные значения операторов проекций спина электрона в  $\hat{S}_z$ -представлении.

### Решение

Уравнение для собственных функций  $\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$  и собственных значений  $S_x$  оператора  $\hat{S}_x$  имеет вид

$$\hat{S}_x \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = S_x \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}.$$

Так как  $S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{2} \hat{\sigma}_x$ , получаем

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = S_x \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}; \quad \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{2} & c_2 \\ \frac{\hbar}{2} & c_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_x & c_1 \\ S_x & c_2 \end{pmatrix}.$$

Раскрывая это равенство, имеем

$$\begin{cases} (\hbar/2) c_2 = S_x c_1; \\ (\hbar/2) c_1 = S_x c_2, \end{cases}$$

отсюда следует  $S_x = \pm \frac{\hbar}{2}$ .

При  $S_x = +\frac{\hbar}{2}$   $c_1 = c_2$  и так как  $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$  (условие нормировки), то окончательно получаем

$$\varphi_{S_x} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} e^{i\alpha_1},$$

где  $\alpha_1$  – произвольная фаза.

При  $S_x = -\frac{\hbar}{2}$   $c_1 = -c_2$

$$\varphi_{S_x} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} e^{i\alpha_2}.$$

Аналогичным образом находятся собственные функции и собственные значения операторов  $\hat{S}_y$  и  $\hat{S}_z$  (сделать самостоятельно).

**Пример 2 (может уйти в семинар).** В однородном магнитном поле, параллельном оси  $z$ , находится электрон. Измерения показали, что в момент времени  $t = 0$  спин электрона был направлен по оси  $x$ . Провести квантовомеханический расчёт вероятности того, что электрон в момент  $t > 0$  будет в состоянии

$$a) S_x = \frac{1}{2}; \quad b) S_x = -\frac{1}{2}; \quad c) S_x = \frac{1}{2}$$

### Решение

В качестве гамильтониана электрона возьмём  $H = \mu_0 B \sigma_z$ , где  $\mu_0$  – магнитный момент электрона,  $B$  – напряжённость магнитного поля.

Спиновая волновая функция удовлетворяет уравнению

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

Есть два варианта решения. Первая – в лоб. Представить  $\psi = \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix}$ . Причём мы

знаем, что начальный момент времени был равен  $\phi_{x+} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ . Далее нужно найденное

решение разложить по  $\phi_{x+} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$  и  $\phi_{x-} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ .

Можно искать решение в виде суперпозиции  $\phi_{x-}$  и  $\phi_{x+}$ . Тогда проще находить вероятности спинов вдоль  $x$ , а для  $z$  придётся разложить по собственным функциям  $\phi_z$ , но это просто – функции вверху столбца и внизу.

# ЛЕКЦИЯ 17. ТОЖДЕСТВЕННОСТЬ ЧАСТИЦ.

## Синглетное и триплетное состояния

Найдём собственные функции и собственные значения операторов квадрата полного спина  $\hat{\Sigma}^2$  и проекции полного спина  $\hat{\Sigma}_z^2$  двух частиц со спином  $1/2$ .

Суммарный спин двух частиц

$$\hat{\Sigma} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2,$$

где  $\hat{S}_1$  и  $\hat{S}_2$  – операторы спина первой и второй частицы, действующие на спиновые координаты своей частицы, соответственно

$$\begin{aligned}\hat{\Sigma}^2 &= \hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + 2\hat{S}_1\hat{S}_2 = \frac{3}{2}\hbar^2 I + 2\hbar^2 \frac{1}{4}\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2 \\ \hat{\Sigma}_z &= \frac{\hbar}{2}(\hat{\sigma}_{1z} + \hat{\sigma}_{2z})\end{aligned},$$

где  $I$  – единичная матрица. Значение  $S^2$  было найдено в прошлой лекции и показано, что сумма квадратов матриц Паули равна  $3I$ .

Одночастичные спиновые функции мы знаем:

$$\varphi_{\uparrow} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \varphi_{\downarrow} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Эти функции определены для каждой из частиц. Обозначим  $\varphi_{\uparrow}(1) = \begin{pmatrix} f(r_1) \\ 0 \end{pmatrix}$  – волновую функцию частицы 1 со спином верх, где  $f(r)$  – некоторая координатная волновая функция.

Можно построить четыре независимые функции или системы двух частиц

$$\begin{aligned}|\uparrow\uparrow\rangle &= \Psi_1 = \varphi_{\uparrow}(1)\varphi_{\uparrow}(2); \\ |\uparrow\downarrow\rangle &= \Psi_2 = \varphi_{\uparrow}(1)\varphi_{\downarrow}(2); \\ |\downarrow\uparrow\rangle &= \Psi_3 = \varphi_{\downarrow}(1)\varphi_{\uparrow}(2); \\ |\downarrow\downarrow\rangle &= \Psi_4 = \varphi_{\downarrow}(1)\varphi_{\downarrow}(2);\end{aligned}$$

Произвольная функция  $\Psi$  может быть разложена в ряд по этим функциям:

$$\Psi = \sum_i a_i \Psi_i,$$

где  $\sum_i |a_i|^2 = 1$ .

Можно показать, что (проверить самостоятельно)

$$\hat{\Sigma}_z \Psi_1 = \hbar \Psi_1; \quad \hat{\Sigma}_z \Psi_2 = \hat{\Sigma}_z \Psi_3 = 0; \quad \hat{\Sigma}_z \Psi_4 = -\hbar \Psi_4.$$

Таким образом, в состояниях 1–4 проекции полного спина на ось  $z$  равны  $1\hbar$ ; 0, 0;  $-1\hbar$ , соответственно.

Определим собственные функции, принадлежащие одновременно операторам  $\hat{\Sigma}^2$  и  $\hat{\Sigma}_z$  (т.е.  $\hat{\Sigma}_z$  и  $\hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2$ ):

$$\hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2 = \hat{\sigma}_{1x} \hat{\sigma}_{2x} + \hat{\sigma}_{1y} \hat{\sigma}_{2y} + \hat{\sigma}_{1z} \hat{\sigma}_{2z}.$$

Проверкой убедимся, что

$$(\hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2) \Psi_1 = \Psi_1;$$

$$(\hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2) \Psi_2 = -\Psi_2 + 2\Psi_3; \quad (3.32)$$

$$(\hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2) \Psi_3 = -\Psi_3 + 2\Psi_2; \quad (3.33)$$

$$(\hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2) \Psi_4 = \Psi_4.$$

(просто матрицы Паули умножаем на вектора функций)

Таким образом, лишь  $\Psi_1$  и  $\Psi_4$  являются собственными функциями оператора  $\hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2$  с собственными значениями  $\sigma_1 \sigma_2 = 1$ . Остальные две функции не являются собственными. Найдём собственную функцию  $\hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2$  в виде линейной комбинации  $b\Psi_2 + c\Psi_3$  из решения уравнения

$$\hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2 (b\Psi_2 + c\Psi_3) = \lambda(b\Psi_2 + c\Psi_3).$$

Подставляя (3.32) и (3.33) в (3.34), получаем

$$\Psi_2(-b+2c) + \Psi_3(-c+2b) = \lambda(b\Psi_2 + c\Psi_3).$$

Умножая на  $\Psi_2^*$  и суммируя по индексам спинов, имеем

$$-b+2c=\lambda b.$$

Умножая на  $\Psi_3^*$ , имеем

$$-c+2b=\lambda c.$$

Решая эти уравнения относительно  $\lambda$ , получим

$$\lambda = -1 \pm 2.$$

Следовательно, собственные значения  $\lambda$  равны 1 и  $-3$ .

Таким образом, соответствующие нормированные собственные функции равны:

$$\Psi_5 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_2 + \Psi_3) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_{\uparrow}(1)\varphi_{\downarrow}(2) + \varphi_{\downarrow}(1)\varphi_{\uparrow}(2)];$$

$$\Psi_6 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_2 - \Psi_3) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_{\uparrow}(1)\varphi_{\downarrow}(2) - \varphi_{\downarrow}(1)\varphi_{\uparrow}(2)];$$

Функции  $\Psi_1$ ,  $\Psi_4$ ,  $\Psi_5$  являются собственными функциями оператора  $\hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2$  с собственным значением, равным единице, и соответственно оператора  $\hat{\Sigma}^2 = \frac{\hbar^2}{2} (3\hat{I} + \hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2)$  с собственным значением  $2\hbar^2$ . Но так как

[К содержанию](#)

$$\hat{\Sigma}^2 \Psi = \hbar^2 \Sigma (\Sigma + 1) \Psi ;$$

$$\hbar^2 \Sigma (\Sigma + 1) = 2 \hbar^2 ,$$

то  $\Sigma = 1$ .

Функция  $\Psi_6$  соответствует  $\sigma_1 \sigma_3 = -3$  и соответственно  $\Sigma = 0$ .

Таким образом, получаются три состояния, образующие триплет  $\Psi_1, \Psi_4, \Psi_5$  с полным спином  $\Sigma = 1$  и проекцией спина  $\Sigma_z$ , равной  $1\hbar, -1\hbar$ , и одно состояние  $\Psi_6$  синглет с антипараллельными спинами  $\Sigma = 0, \Sigma_z = 0$ . Синглет – спутанное состояние.

### Тождественность частиц

В классической механике одинаковые частицы (скажем, электроны), несмотря на тождественность их физических свойств, не теряют все же своей «индивидуальности»: можно представить себе частицы, входящие в состав данной физической системы, в некоторый момент времени «перенумерованными» и в дальнейшем следить за движением каждой из них по своей траектории; тогда в любой момент времени частицы можно будет идентифицировать. В квантовой же механике положение совершенно меняется. Уже неоднократно указывалось, что в силу принципа неопределенности понятие о траектории электрона полностью теряет смысл. Если положение электрона точно известно в настоящий момент времени, то уже в следующий момент его координаты вообще не имеют никакого определенного значения. Поэтому, локализовав электроны и перенумеровав их в некоторый момент времени, мы этим ничего не добьемся для целей их идентификации в дальнейшие моменты времени; локализовав один из электронов в другой момент времени в некоторой точке пространства, мы не сможем указать, какой именно из электронов попал в эту точку. Таким образом, в квантовой механике принципиально не существует никакой возможности следить в отдельности за каждой из одинаковых частиц и тем самым различать их. Можно сказать, что в квантовой механике одинаковые частицы полностью теряют свою «индивидуальность».

Однаковость частиц по их физическим свойствам имеет здесь весьма глубокий характер – она приводит к их полной неразличимости. Этот, как говорят, принцип неразличимости одинаковых частиц играет основную роль в квантовой теории систем, состоящих из одинаковых частиц. Начнем с рассмотрения системы, состоящей всего из двух частиц. В силу их тождественности состояния системы, получающиеся друг из друга просто перестановкой обеих частиц, должны быть физически полностью эквивалентными. Это значит, что в результате такой перестановки волновая функция системы может измениться только на несущественный фазовый множитель. Пусть  $\Psi(q_1, q_2)$  – волновая функция системы, причем  $q_1, q_2$  условно обозначают совокупности трех координат и проекции спина каждой из частиц. Тогда должно быть:

$$\Psi(q_2, q_1) = e^{i\alpha} \Psi(q_1, q_2)$$

где  $\alpha$  – некоторая вещественная постоянная. В результате повторной перестановки мы вернемся к исходному состоянию, между тем как функция  $\Psi$  окажется умноженной на  $e^{2i\alpha}$ . Отсюда следует, что  $e^{2i\alpha} = 1$  или  $e^{i\alpha} = \pm 1$ . Итак,  $\Psi(q_2, q_1) = \pm \Psi(q_1, q_2)$

Мы приходим к результату, что имеется всего две возможности—волновая функция либо симметрична (т.е. совершенно не меняется в результате перестановки частиц), либо антисимметрична (т.е. при перестановке меняет знак). Очевидно, что волновые функции всех состояний одной и той же системы должны иметь одинаковую симметрию; в противном случае волновая функция состояния, представляющего собой суперпозицию состояний различной симметрии, была бы ни симметрична, ни антисимметрична. Этот результат непосредственно обобщается на системы, состоящие из произвольного числа одинаковых частиц. Действительно, в силу одинаковости частиц ясно, что если какая-либо их пара обладает свойством описываться, скажем, симметричными волновыми функциями, то и всякая другая пара таких же частиц будет обладать тем же свойством. Поэтому волновая функция одинаковых частиц должна либо совершенно не меняться при перестановке любой пары частиц (а потому и при всякой вообще взаимной перестановке частиц), либо менять знак при перестановке каждой пары. В первом случае говорят о симметричной, а во втором случае — об антисимметричной волновой функции. Свойство описываться либо симметричными, либо антисимметричными волновыми функциями зависит от рода частиц. О частицах, описывающихся антисимметричными функциями, говорят, как о подчиняющихся **статистике Ферми-Дирака** или о **фермионах**, а о частицах, описывающихся симметричными функциями, — как подчиняющихся **статистике Бозе-Эйнштейна** или о **бозонах**.

Из законов релятивистской квантовой механики оказывается возможным показать, что статистика, которой подчиняются частицы, однозначно связана с их спином: частицы с полуцелым спином являются фермионами, а с целым спином — бозонами.

Статистика сложных частиц определяется четностью числа входящих в их состав элементарных фермионов. Действительно, перестановка двух одинаковых сложных частиц эквивалентна одновременной перестановке нескольких пар одинаковых элементарных частиц. Перестановка бозонов не изменяет волновой функции вообще, а перестановка фермионов меняет ее знак. Поэтому сложные частицы, содержащие нечетное число элементарных фермионов, подчиняются статистике Ферми, а содержащие четное число их, — статистике Бозе. Этот результат находится, конечно, в согласии с указанным выше общим правилом: сложная частица имеет целый или полуцелый спин в зависимости от того, четно или нечетно число входящих в ее состав частиц с полуцелым спином.

Так, атомные ядра с нечетным атомным весом (т. е. состоящие из нечетного числа протонов и нейтронов) подчиняются статистике Ферми, а с четным весом — статистике Бозе. Для атомов же, содержащих наряду с ядрами также и электроны, статистика определяется, очевидно, четностью или нечетностью суммы атомного веса и атомного номера.

## Волновая функция системы тождественных частиц

Рассмотрим систему, состоящую из  $N$  одинаковых частиц, взаимодействием которых друг с другом можно пренебречь. Пусть  $\psi_1, \psi_2, \dots$  —волновые функции различных стационарных состояний, в которых может находиться каждая из частиц в отдельности. Состояние системы в целом можно определять перечислением номеров состояний, в которых находятся отдельные частицы. Возникает вопрос о том, каким образом должна быть составлена из функций  $\psi_1, \psi_2, \dots$  волновая функция  $\psi$  всей системы в целом.

Пусть  $p_1, p_2, \dots, p_N$  — номера состояний, в которых находятся отдельные частицы (среди этих номеров могут быть и одинаковые). Для системы бозонов волновая функция  $\psi(q_1, q_2, \dots, q_N)$  выражается суммой произведений вида

$$\psi_{p_1}(q_1)\psi_{p_2}(q_2)\dots\psi_{p_N}(q_N) \quad (1)$$

со всеми возможными перестановками различных индексов  $p_1, p_2, \dots, p_N$  такая сумма обладает, очевидно, требуемым свойством симметрии. Так, для системы из двух частиц, находящихся в различных ( $p_1 \neq p_2$ ) состояниях симметричное состояние будет иметь следующий вид:

$$\psi(q_1, q_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{p_1}(q_1)\psi_{p_2}(q_2) + \psi_{p_1}(q_2)\psi_{p_2}(q_1)]$$

Множитель  $1/\sqrt{2}$  введен для нормировки (все функции  $\psi_1, \psi_2, \dots$  взаимно ортогональны и предполагаются нормированными). В общем же случае системы произвольного числа частиц  $N$  нормированная волновая функция

$$\psi_{N_1 N_2 \dots} = \sqrt{\frac{N_1! N_2! \dots}{N!}} \sum_{\{p_1, p_2, \dots, p_N\}} \psi_{p_1}(q_1)\psi_{p_2}(q_2)\dots\psi_{p_N}(q_N) \quad (2)$$

где сумма берется по всем перестановкам различных из индексов  $\{p_1, p_2, \dots, p_N\}$ , а числа  $N_i$  указывают, сколько из всех этих индексов имеют одинаковые значения  $i$  (при этом  $\sum N_i = N$ ). При интегрировании квадрата  $|\psi|^2$  по  $dq_1 dq_2 \dots dq_N$  обращаются в нуль все члены, за исключением только квадратов модулей каждого из членов суммы; поскольку общее число членов в сумме (2) равно, очевидно,  $N!/(N_1!N_2!\dots)$ , то отсюда и получается нормировочный коэффициент в (2).

Для системы фермионов волновая функция  $\psi$  есть антисимметричная комбинация произведений (1). Так, для системы из двух частиц имеем

$$\psi(q_1, q_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{p_1}(q_1)\psi_{p_2}(q_2) - \psi_{p_1}(q_2)\psi_{p_2}(q_1)]$$

Чтобы сделать общую формулу (2) антисимметричной, можно вставить символ Леви-Чевита в члены суммы.

$$\psi_{N_1 N_2 \dots} = \sqrt{\frac{1}{N!}} \sum_{\{p_1, p_2, \dots, p_N\}} \epsilon_{p_1, p_2, \dots, p_N} \psi_{p_1}(q_1)\psi_{p_2}(q_2)\dots\psi_{p_N}(q_N)$$

Но такая сумма есть просто детерминант:

$$\psi_{N_1 N_2 \dots} = \sqrt{\frac{1}{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{p_1}(q_1) & \psi_{p_1}(q_1) & \dots & \psi_{p_1}(q_N) \\ \psi_{p_2}(q_1) & \psi_{p_2}(q_2) & \dots & \psi_{p_2}(q_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_{p_N}(q_N) & \psi_{p_N}(q_N) & \dots & \psi_{p_N}(q_N) \end{vmatrix} \quad (3)$$

Этот детерминант называется **детерминантом Слэттера**

Перестановка двух частиц соответствует здесь перестановка двух столбцов определителя, в результате чего последний меняет знак.

Из выражения следует важный результат: если среди номеров  $p_1, p_2, \dots$  есть два одинаковых, то две строки определителя окажутся одинаковыми и весь определитель обратится тождественно в нуль. Он будет отличным от нуля только в тех случаях, когда все номера  $p_1, p_2, \dots, p_N$  различны. Таким образом, в системе одинаковых фермионов не могут одновременно находиться в одном и том же состоянии две (или более) частицы. Это — так называемый **принцип Паули**.

## Интерференция тождественных частиц

Рассмотрим систему двух невзаимодействующих частиц. Для начала рассмотрим пару бозонов с общим спином 0. В системе двух одинаковых бозонов со спином  $s = 0$  одна частица находится в состоянии, описываемом волновой функцией  $\Psi_1(r)$ , другая –  $\Psi_2(r)$ . Эти функции нормированы на единицу и имеют определенные четности относительно оси  $z$  (по аргументу  $z$ ). Найдем в указанном состоянии системы распределение по координатам одной частицы при произвольном (не фиксированном) положении другой. Определим также каковы вероятности того, что в области пространства  $z \geq 0$  находятся обе частицы одновременно. Для нескоррелированных частиц такая вероятность очевидно равна  $1/4$ .

Нормированная волновая функция рассматриваемого состояния системы

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \Psi_1(\vec{r}_1) \Psi_2(\vec{r}_2) + \Psi_2(\vec{r}_1) \Psi_1(\vec{r}_2) \}$$

Квадрат модуля волновой функции:

$$|\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2 = \frac{1}{2} \left( |\Psi_1(\vec{r}_1)|^2 |\Psi_2(\vec{r}_2)|^2 + |\Psi_1(\vec{r}_2)|^2 |\Psi_2(\vec{r}_1)|^2 + 2 \Psi_1^*(\vec{r}_1) \Psi_2(\vec{r}_1) \Psi_2^*(\vec{r}_2) \Psi_1(\vec{r}_2) \right)$$

Распределение по координатам одной частицы при произвольном положении другой имеет вид:

$$dw = \left( \int |\Psi(\vec{r}_1 = \vec{r}, \vec{r}_2)|^2 dV_2 \right) dV = \frac{1}{2} \left( |\Psi_1(\vec{r})|^2 + |\Psi_2(\vec{r})|^2 \right) dV. \quad (4)$$

(здесь учтена ортогональность функций  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$ ).

По своей форме (4) представляет распределение по координатам первой частицы; в силу симметрии волновой функции точно такой же вид имеет распределение по координатам второй частицы; распределение же по координатам одной из двух одинаковых частиц представляет полусумму (для нормировки на 1) указанных одночастичных распределений и, ввиду их одинаковости, совпадает с каждым из них.

Вероятности нахождения каждой из частиц в верхнем или правом полупространстве равны из условия симметричности/антисимметричности волновых функций:

$$\int_{z \geq 0} |\Psi_{1,2}(\vec{r})|^2 dV = \frac{1}{2} \int |\Psi_{1,2}(\vec{r})|^2 dV = \frac{1}{2}$$

легко находим с помощью (4), что вероятность нахождения одной частицы в области полупространства  $z \geq 0$  равна  $W_1(z \geq 0) = \frac{1}{2}$  (при этом положение другой частицы не фиксируется), а вероятность нахождения в области  $z \geq 0$  обеих частиц одновременно

$$\begin{aligned} W_2(z_{1,2} \geq 0) &= \int_{z_1 > 0} \int_{z_2 > 0} |\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2 dV_1 dV_2 = \\ &= \int_{z_1 > 0} \int_{z_2 > 0} \frac{1}{2} \left( |\Psi_1(\vec{r}_1)|^2 |\Psi_2(\vec{r}_2)|^2 + |\Psi_1(\vec{r}_2)|^2 |\Psi_2(\vec{r}_1)|^2 + 2 \Psi_1^*(\vec{r}_1) \Psi_2(\vec{r}_1) \Psi_2^*(\vec{r}_2) \Psi_1(\vec{r}_2) \right) dV_1 dV_2 = \\ &= \frac{1}{4} + \int_{z_1 > 0} \int_{z_2 > 0} \Psi_1^*(\vec{r}_1) \Psi_2(\vec{r}_1) \Psi_2^*(\vec{r}_2) \Psi_1(\vec{r}_2) dV_1 dV_2 = \\ &= \frac{1}{4} + \int_{z_1 > 0} \Psi_1^*(\vec{r}_1) \Psi_2(\vec{r}_1) dV_1 \int_{z_2 > 0} \Psi_1(\vec{r}_2) \Psi_2^*(\vec{r}_2) dV_2 = \frac{1}{4} + |S|^2 = \frac{1}{4} (1 + 4|S|^2); \\ S &= \int_{z \geq 0} \Psi_1^*(\vec{r}) \Psi_2(\vec{r}) dV, \end{aligned} \quad (5)$$

что отличается от значения  $\frac{1}{4}$  для различимых частиц (в последнем случае не требуется производить симметризацию волновой функции). Полученный результат (5) иллюстрирует существование интерференции амплитуд различных (но тождественных!) частиц. Качественно эту интерференцию амплитуд бозонов можно охарактеризовать как тенденцию к взаимному сближению:

$$W_2 > W_{\text{разл}} = \frac{1}{2}.$$

Решим задачу, аналогичную предыдущей, для случая системы, состоящей из двух одинаковых фермионов, находящихся в одном и том же спиновом состоянии. В случае двух тождественных фермионов, находящихся в разных состояниях, волновая функция имеет вид:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \Psi_1(\vec{r}_1) \Psi_2(\vec{r}_2) - \Psi_2(\vec{r}_1) \Psi_1(\vec{r}_2) \} ,$$

Тут пропущена спиновая зависимость, но, думаю, это не так важно

Распределение по координатам одной частицы при произвольном положении другой имеет точно такой же вид, как и в предыдущем случае с бозонами. Для вероятности нахождения в области  $z \geq 0$  обеих частиц получается выражение

$$W_2(z_{1,2} \geq 0) = \frac{1}{4} \{ 1 - 4|S|^2 \}.$$

Полученный результат, как и в предыдущей задаче, иллюстрирует существование интерференции между различными тождественными частицами. Однако в случае фермионов характер интерференции противоположен тому, который имеет место для бозонов, и качественно его можно описать как тенденцию фермионов к взаимному отталкиванию.

### **Обменное взаимодействие.**

Тот факт, что в уравнении Шредингера не учитывается наличие у частиц спина, отнюдь не обесценивает это уравнение и все получающиеся с его помощью результаты. Дело в том, что электрическое взаимодействие частиц не зависит от их спинов).

Математически это означает, что гамильтониан системы электрически взаимодействующих частиц (в отсутствие магнитного поля) не содержит операторов спина и потому при применении его к волновой функции никак не воздействует на спиновые переменные. Поэтому уравнению Шредингера удовлетворяет в действительности каждая из компонент волновой функции; другими словами, волновая функция системы частиц может быть написана в виде произведения

$$\psi = \chi(\sigma_1, \sigma_2, \dots) \phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots)$$

где функция ( $\phi$  зависит только от координат частиц, а функция  $\chi$  — только от их спинов; о первой будем говорить как о координатной или орбитальной, а о второй — как о спиновой волновой функции).

Уравнение Шредингера определяет, по существу, только координатную функцию  $\phi$ , оставляя функцию  $\chi$  произвольной. Во всех случаях, когда сам спин частиц нас не интересует, можно, следовательно, применять уравнение Шредингера, рассматривая в качестве волновой функции одну только координатную функцию, что и делалось в предыдущих главах.

Однако оказывается, что, несмотря на указанную независимость электрического взаимодействия частиц от их спина, существует своеобразная зависимость энергии системы от ее полного спина, проистекающая в конечном итоге из принципа неразличимости одинаковых частиц.

Рассмотрим систему, состоящую всего из двух одинаковых частиц. В результате решения уравнения Шредингера мы найдем ряд уровней энергии, каждому из которых соответствует определенная симметричная или антисимметричная координатная волновая функция  $\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ .

Предположим сначала, что частицы имеют спин нуль. Спиновый множитель для таких частиц вообще отсутствует, и волновая функция сводится к одной лишь координатной функции  $\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ , которая должна быть симметричной (поскольку частицы со спином нуль подчиняются статистике Бозе). Таким образом, не все из уровней энергии, получающихся при формальном решении уравнения Шредингера, могут в действительности осуществляться; те из них, которым соответствуют антисимметричные функции ( $\phi$ , для рассматриваемой системы невозможны).

Далее, пусть система состоит из двух частиц со спином  $1/2$  (скажем, электронов). Тогда полная волновая функция системы (т.е. произведение функции  $\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  и спиновой функции  $\chi(\sigma_1, \sigma_2)$ ) должна быть непременно антисимметричной по отношению к перестановке обеих частиц. Поэтому при симметричной координатной функции спиновая функция должна быть антисимметричной, и наоборот.

Мы анализировали симметрию спиновой функции в разделе «**синглетное и триплетное состояния**», где показали, что система двух частиц со спином  $1/2$  может находиться в четырех состояниях – трёх симметричных триплетных и одном синглетном, которое является антисимметричным. Если частица находится в антисимметричном синглетном состоянии, то координатная функция  $\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  должна быть симметричной. Волновые функции системы двух частиц, находящихся в триплетных состояниях, являются антисимметричными.

Другими словами, возможные значения энергии системы электронов оказываются зависящими от ее полного спина. На этом основании можно говорить о некотором своеобразном взаимодействии частиц, приводящем к этой зависимости. Это взаимодействие называют **обменным**. Оно представляет собой чисто квантовый эффект, полностью исчезающий (как и самий спин) при предельном переходе к классической механике.

Покажем, как обменное взаимодействие приводит к расщеплению уровней энергии. Рассмотрим два электрона, взаимодействующих по закону  $U(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ , которое рассматривается как возмущение. Состояниям с полным спином  $S = 0$  (антипараллельные спины) и  $S = 1$  (параллельные спины) соответствуют симметризованная ( $\Psi_+(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ ) и антисимметризованная ( $\Psi_-(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ ) волновые функции:

$$\Psi_{\pm}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \Psi_1(\vec{r}_1) \Psi_2(\vec{r}_2) \pm \Psi_2(\vec{r}_1) \Psi_1(\vec{r}_2) \}$$

Заметим, что здесь написана только координатная часть волновой функции, поэтому рассматривается оба варианта – симметричный и антисимметричный. Полная же функция двух электронов должна быть антисимметрична.

Средние значения оператора взаимодействия  $U(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ , рассматриваемого как возмущение, дают поправки к энергии невзаимодействующих электронов в состояниях  $\Psi_{\pm}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ :

$$E_{\pm}^{(1)} = E_0^{(1)} \pm J;$$

$$E_0^{(1)} = \iint U |\Psi_1(\vec{r}_1)|^2 |\Psi_2(\vec{r}_2)|^2 dV_1 dV_2;$$

$$J = \iint U \Psi_1(\vec{r}_1) \Psi_1^*(\vec{r}_2) \Psi_2^*(\vec{r}_1) \Psi_2(\vec{r}_2) dV_1 dV_2$$

интеграл  $J$  называется **обменным**. Поскольку знак перед  $J$  зависит от полного спина электронов, энергию можно записать в виде:

$$E_{\pm}^{(1)} = E_0^{(1)} - \frac{1}{2} J \left( 1 + 4 \hat{S}_1 \hat{S}_2 \right)$$

Тем самым объясняется природа магнитного взаимодействия на микроскопическом уровне.

## ЛЕКЦИЯ 18.

### **Лекция про квантовые компьютеры.**

**Не входит в экзамен.**

# ОСТАЛОСЬ, НЕ ВОШЕДШЕЕ В ЛЕКЦИИ

## **Правило квазиклассического квантования Бора-Зоммерфельда.**

Квантовые состояния частицы с большим порядковым номером  $n$  состояния дискретного спектра квазиклассичны, поскольку длина волны частицы мала по сравнению с размером области движения в отношении  $1/n \ll 1$ . Пусть, например, движение происходит в одномерном потенциале  $U(x)$ , имеющем две точки поворота  $a > b$ , которые определяются из уравнения классической механики:  $U(x=a, b) = E$ , где  $E$  - полная энергия частицы. Согласно результатам квазиклассического решения стационарного уравнения Шрёдингера с потенциалом  $U(x)$  и собственным значением  $E$  волновая функция  $\Psi_>$ , справа от точки  $b$  и слева от точки  $a$ ,  $\Psi_<$ , имеют вид:

$$\Psi_> = \frac{C}{\sqrt{p}} \cos \left( \frac{1}{\hbar} \int_b^x p dx - \frac{\pi}{4} \right), \quad \Psi_< = \frac{C'}{\sqrt{p}} \cos \left( \frac{1}{\hbar} \int_x^a p dx - \frac{\pi}{4} \right)$$

Условием совпадения этих функций во всей области  $a \geq x \geq b$  и является правило квантования Бора-Зоммерфельда, обеспечивающее равенство целому кратному  $\pi$  суммы фаз косинусов входящих в  $\Psi_>$  и  $\Psi_<$ :

$$\oint p(x) dx = 2\pi\hbar \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (6.3)$$

где интеграл берется по полному периоду классического движения частицы, а связь импульса с энергией дается классической формулой:

$$p(x) = \sqrt{2m[E - U(x)]}. \quad (6.4)$$

# ЛЕКЦИЯ

## Теория рассеяния. Борновское приближение

- Основными характеристиками рассеяния частиц являются амплитуда рассеяния  $f$  и дифференциальное сечение рассеяния  $d\sigma = |f|^2 d\Omega$ , где  $d\Omega$  – элемент телесного угла. При этом полное сечение рассеяния

$$\sigma = \int |f|^2 d\Omega.$$

Покажем, что амплитуда рассеяния частицы в произвольном внешнем поле может быть выражена через волновую функцию в области действия потенциала:

$$f(\vec{k}_0, \vec{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} U(\vec{r}) \psi_{\vec{k}_0}^+(\vec{r}) dV,$$

- где  $\vec{k}_0$ ,  $\vec{k}$  – волновые векторы частицы до и после рассеяния;  $\psi_k^{(+)}$  – волновая функция, имеющая при  $r \rightarrow \infty$  асимптотическое поведение вида

$$\psi_{\vec{k}_0}^{(+)}(\vec{r}) \approx e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}} + \frac{f(\vec{k}_0, \vec{k})}{\vec{r}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}.$$

- Отыскание решения уравнения Шредингера ( $k = \sqrt{2mE/\hbar^2} > 0$ )
- имеющего приведенную в условии задачи асимптотику при  $r \rightarrow \infty$ , эквивалентно решению интегрального уравнения

$$\left[ \Delta + k^2 \right] \psi_{\vec{k}_0}^{(+)} = \frac{2m}{\hbar^2} U(\vec{r}) \psi_{\vec{k}_0}^{(+)},$$

- Переход от дифференциальной формы уравнения Шредингера к интегральной осуществляется стандартным образом с помощью функции Грина  $G_E^{(+)}$  уравнения Шредингера для свободных частиц, имеющей вид

$$G_E^{(+)}(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{4\pi |\vec{r} - \vec{r}'|} e^{ik|\vec{r} - \vec{r}'|};$$

$$(\Delta + k^2) G_E^{(+)}(\vec{r} - \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}').$$

- При  $r \rightarrow \infty$  имеем

$$\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} e^{ik|\vec{r} - \vec{r}'|} \approx \frac{1}{r} e^{ikr} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}'}, \quad \vec{k} = k \frac{\vec{r}}{r},$$

- и соотношение (6.1) принимает вид

$$\psi_k^{(+)}(\vec{r}) \approx e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}} + \frac{1}{r} e^{ikr} \left( -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right) \int e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}'} U(\vec{r}') \psi_{\vec{k}_0}^{(+)}(\vec{r}') dV', \quad (5.12)$$

- из которого и вытекает приведенное в условии задачи представление амплитуды рассеяния, удобное для различных приближенных расчетов. Так, при  $\psi_{\vec{k}_0}^{(+)} \approx e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}}$  из (6.2) получаем амплитуду рассеяния в первом борновском приближении.

**Пример 1.** Найдем дифференциальное сечение рассеяния заряженной частицы с зарядом  $z e$  в поле заряженного центра с зарядом  $Z e$ .

- Дифференциальное сечение рассеяния в потенциальном поле  $V(x)$  в борновском приближении

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{4\pi^2 \hbar^4} \frac{p^2}{v^2} |u(\bar{p} - \bar{p}')|^2,$$

где  $v$  – начальная скорость частицы;  
 $d\Omega$  – элемент телесного угла;

$$u(\bar{p} - \bar{p}') \equiv \langle \bar{p} | u | \bar{p}' \rangle = \frac{1}{v} \int u(\bar{r}) e^{i(\bar{p}-\bar{p}')\bar{r}} d^3 r;$$

- $\bar{p}$  – импульс падающей частицы;
- $\bar{p}'$  – импульс рассеянной частицы.
- В нашей задаче потенциальная энергия заряда в поле заряда  $Ze$

$$u = z Z e^2 / r.$$

- Матричный элемент этой потенциальной энергии, взятой по плоским волнам,

$$u(\bar{p} - \bar{p}') = z Z e^2 \int \frac{1}{|\bar{r}|} e^{-\frac{i}{\hbar}(\bar{p}-\bar{p}')\bar{r}} d^3 r.$$

- Для вычисления этого интеграла учтем соотношение

$$\nabla^2 \frac{1}{|\bar{r}|} = -4\pi \delta(\bar{r}).$$

- Это равенство следует из того факта, что решение уравнения Пуассона для электростатического потенциала единичного точечного заряда, помещенного в начале координат, имеет вид  $-\frac{1}{|\bar{r}|}$  (закон Кулона). Фурье-образ этого равенства имеет вид

$$\int \frac{e^{ikr}}{|\bar{r}|} d^3 r = \frac{4\pi}{k^2}.$$

- При выводе этой формулы мы учли, что

$$\delta(\bar{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\bar{k}\bar{r}} d^3 k.$$

- Таким образом, окончательно получаем матричный элемент потенциальной энергии

$$u(\bar{p} - \bar{p}') = \frac{4\pi z Z e^2}{\frac{1}{\hbar^2} |\bar{p} - \bar{p}'|^2} = \frac{4\pi \hbar^2 z Z e^2}{4p^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}},$$

- где  $|\bar{p}| = |\bar{p}'|$ , так как столкновение упругое;
- $\theta$  – угол между импульсами  $\bar{p}$  и  $\bar{p}'$ .
- Дифференциальное сечение рассеяния

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{z^2 Z^2}{4} \left( \frac{\mu e^2}{p^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} -$$

- это - формула Резерфорда.
- Этот результат получается не только в борновском приближении, но и при точном решении для случая кулоновского поля. Критерий применимости рассматриваемого решения для кулоновского поля

$$-\sqrt{\frac{\mu}{2E}} \frac{v a}{\hbar} \sim \frac{Z e^2}{\hbar v} \ll 1, \text{ где } v \text{ – скорость частицы; } a \text{ – область, в которой}$$

действует поле,

- означает малость изменения фазы волны.
- Полученный критерий применимости можно записать в другом виде:

$$2\alpha \frac{c}{v} \ll 1, \quad \text{где } \alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}.$$

### 3.2.3. Переходы электронов в атоме водорода

Пусть на атом водорода, находящийся в основном состоянии, действует однородное, периодическое во времени электрическое поле. Найдем минимальную частоту, необходимую для ионизации атома, и вычислить вероятность ионизации в единицу времени.

- Вероятность перехода из состояния дискретного спектра в интервал непрерывного спектра под действием периодического поля с частотой  $\omega$  равна

$$dW_{nv} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| <n| \hat{A} |v> \right|^2 \delta(E_v - E_n^{(0)} - \hbar\omega) dv,$$

где  $v$  – набор величин, характеризующих состояние непрерывного спектра;  $n$  – набор квантовых чисел, характеризующих состояние дискретного спектра;  $\hat{A}$  – амплитуда гамильтониана возмущения.

- Для нашей задачи гамильтониан возмущения
- $\hat{H}'(t) = e^{i\omega t} \hat{r} \vec{\epsilon}(t) = \hat{A} e^{i\omega t} + \hat{A}^+ e^{-i\omega t},$
- где  $\hat{A} = \frac{1}{2} e (\hat{r} \vec{\epsilon}_0).$
- Сохранение энергии при ионизации обеспечивается наличием  $\delta$ -функции от энергии в выражении для вероятности перехода:

$$\hbar \omega = E_v - E_n^{(0)}.$$

- Для атома водорода в основном состоянии  $E_1 = \frac{m e^4}{2\hbar^2}$ , поэтому  $\omega_{\min} = \frac{m e^4}{2\hbar^3}$ .
- Вычислим матричный элемент  $\langle n | \hat{A} | v \rangle = \int \Psi_n^{*(0)} \hat{A} \Psi_v d\tau$ .
- Волновые функции электрона в связанном и свободном состояниях имеют вид

$$\Psi_n^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}};$$

$$\Psi_v \equiv \Psi_k(\vec{r}) = \frac{1}{\frac{1}{2}(2\pi)^3} e^{i(\vec{k}\vec{r})}.$$

- Матричный элемент принимает вид
- $\langle n | \hat{A} | v \rangle = \frac{i e}{2(2\pi)^{\frac{3}{2}} (\pi a^3)^{\frac{1}{2}}} \int e^{-\frac{r}{a} + i(\vec{k}\vec{r})} (\vec{\epsilon}_0 \vec{r}) d^3 r$ .
- Введем сферическую систему координат с полярной осью вдоль  $\vec{k}$ , угол между  $\vec{k}$  и  $\vec{\epsilon}_0$  обозначим через  $\lambda$  (рис. 3.14). Тогда  $(\vec{\epsilon}_0 \vec{r}) = \epsilon_0 r [\cos \lambda \cos \theta + \sin \lambda \sin \theta \cos(\varphi - \varphi_0)]$ ,
- где  $\varphi_0$  – азимутальный угол  $\vec{\epsilon}_0$ .

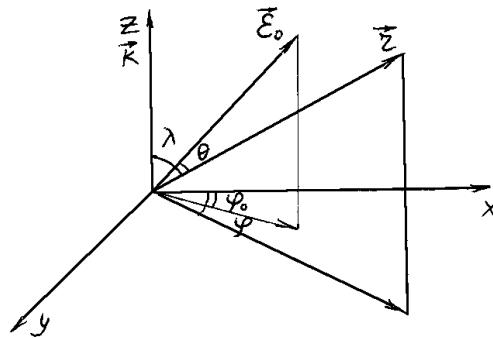


Рис. 3.1

- После подстановки в матричный элемент второй член после интегрирования по  $\varphi$  дает нуль. Полагая  $\cos \theta \equiv s$ , получаем

$$\langle n | \hat{A} | v \rangle = \frac{i e}{2^{\frac{5}{2}} \pi^{\frac{3}{2}} a^{\frac{1}{2}}} 2\pi \delta_0 \cos \lambda \int_{-1}^{+1} \left\{ \int_0^{\infty} e^{i k r s} e^{-\frac{r}{a}} r^3 dr \right\} s ds =$$

$$= \frac{i e \delta_0 \cos \lambda}{\pi (2a)^{\frac{3}{2}}} \int_{-1}^{+1} \frac{3! s \, ds}{(\frac{1}{a} - i k s)^4} = \frac{e \varepsilon_0 \cos \lambda}{\pi (2a)^{\frac{3}{2}}} \cdot \frac{18 k a^5}{(1 + k^2 a^2)^3}.$$

– Так как  $E_v = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$ , интервал состояний для свободной частицы

$$d\nu = d^3 k = k^2 dk d\Omega_k = k^2 \frac{dk}{dE_v} d\Omega_k dE_v = \frac{\mu k}{\hbar^2} d\Omega_k dE_v,$$

– где  $d\Omega_k$  – элемент телесного угла с осью вдоль вектора  $\vec{k}$ .

– Вероятность вылета электрона в состояние, принадлежащее интервалу  $d\Omega_k dE_v$ :

$$dW_{nv} = \frac{2^6}{\pi} \frac{m a^7 e^2}{\hbar^3} \frac{\varepsilon_0^2 k^3 \cos^2 \lambda}{(1 + k^2 a^2)^6} \delta(E_v - E_n^{(0)} - \hbar\omega) d\Omega_k dE_v.$$

– Проинтегрируем  $dW_{nv}$  по  $E_v$ , учитывая свойство  $\delta$  – функции:

$$dW_k = \frac{64 a^3}{\pi \hbar} \delta_0^2 \left( \frac{\omega_0}{\omega} \right)^6 \left( \frac{\omega}{\omega_0} - 1 \right)^{\frac{3}{2}} \cos \lambda d\Omega_k.$$

– При выводе этой формулы мы учли следующие соотношения:

$$E_v = E_n^{(0)} + \hbar \omega; \quad k^2 = \frac{2\mu E_v}{\hbar^2} = \frac{2\mu}{\hbar} (\omega - \omega_0);$$

$$E_n^{(0)} = -\frac{\mu e^4}{4\hbar^2} = -\hbar \omega_0; \quad a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}; \quad 1 + k^2 a^2 = \frac{\omega}{\omega_0}.$$

– Угловое распределение электронов имеет осевую симметрию. Это совершенно естественно, так как в задаче имеется только одно выделенное направление, задаваемое внешним полем.

# ЛЕКЦИЯ

## Вариационный метод

- Вариационный метод наряду с теорией возмущения широко применяется для приближенных расчетов квантовых систем. Наиболее часто он используется для расчета основного (ништого) состояния системы. Вариационный метод основан на неравенстве

$$E_0 \leq \int \psi^*(\vec{r}) \hat{H} \psi(\vec{r}) d^3r \equiv I, \quad (4.1)$$

- где  $\psi(\vec{r})$  – произвольная пробная волновая функция, удовлетворяющая условию нормировки:

$$\int \psi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) d^3r = 1. \quad (4.2)$$

- Равенство (т.е. абсолютный минимум интеграла  $I$ ) в соотношении (4.1) достигается, если  $\psi(\vec{r})$  точная собственная функция основного состояния гамильтониана  $\hat{H}$ . Чем меньше отличается пробная функция от точной собственной функции, тем ближе интеграл  $I$  к энергии основного состояния.

## Вариационный метод Ритца.

Рассмотрим один из вариационных методов – метод Ритца. В этом методе выбирается класс пробных функций, зависящих от нескольких параметров. Выбор класса пробных функций производится на основании предварительных оценок и из физических соображений. Пробные функции должны достаточно близко воспроизводить особенности поведения точной собственной функции.

- Пусть  $\psi(\vec{r}, \alpha, \beta, \dots)$  – пробная функция, зависящая от параметров  $\alpha, \beta, \dots$ . Интеграл  $I$  также будет зависеть от параметров  $\alpha, \beta, \dots$ . Из условия минимума интеграла  $I(\alpha, \beta, \dots)$  можно найти пробную функцию, наиболее близкую к точной собственной функции. Отыскание минимума сводится к решению системы уравнений

$$\frac{\partial I}{\partial \alpha} + \frac{\partial I}{\partial \beta} + \dots = 0. \quad (4.3)$$

- Корни этой системы  $\alpha_0, \beta_0, \dots$  после подстановки в интеграл  $I$  дают наименьшее, т.е. наиболее близкое к истинному, приближенное значение энергии

$$E = I(\alpha_0, \beta_0, \dots) = \min I(\alpha, \beta, \dots). \quad (4.4)$$

## Атом водорода вариационным методом

Вычислим энергию основного состояния атома водорода вариационным методом Ритца, используя два типа пробных функций:

- 1)  $f_1 = A(1 + \alpha r) \exp(-\alpha r)$ ;

– 2)  $f_2 = B \exp\left(-\alpha \frac{r^2}{2}\right)$ .

– Нормирующие множители пробных функций

$$A = \frac{\alpha^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{7\pi}}; \quad B = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{3}{4}}.$$

– Вычислим среднее значение гамильтониана на пробной функции

$$\begin{aligned} E(\alpha) &= \frac{\hbar^2}{2\mu} \int |\nabla f_1(r)|^2 d^3r - e^2 \int \frac{1}{r} |f_1(r)|^2 d^3r = \\ &= \frac{\hbar^2}{2\mu} 4\pi A^2 \int_0^\infty r^4 e^{-2\alpha r} dr - e^2 4\pi A^2 \int \frac{1}{r} (1 + \alpha r)^2 e^{-2\alpha r} r^2 dr = \\ &= \frac{13}{14} \frac{\hbar^2 \alpha^2}{\mu} - \frac{9}{7} e^2 \alpha. \end{aligned}$$

– Из условия минимума  $E(\alpha)$  находим минимизирующее значение параметра  $\alpha_0$ :

$$\frac{\partial E(\alpha)}{\partial \alpha} \Big|_{\alpha_0} = \frac{\hbar^2}{\mu} \alpha - 3e^2 \Big|_{\alpha_0} = 0; \quad \alpha_0 = \frac{3\mu e^2}{\hbar^2}.$$

– Приближенное значение энергии основного состояния

$$E(\alpha_0) = -\frac{27}{59} \frac{\mu e^4}{\hbar^2} \approx -\frac{m e^4}{2,07 \hbar^2}.$$

– Далее вычислим аналогичным образом приближенное значение энергии основного состояния по функции  $f_2(r)$ :

$$\begin{aligned} E(\alpha) &= \frac{\hbar^2}{2\mu} 4\pi B^2 \int_0^\infty (\alpha r)^2 e^{-\alpha r^2} r^2 dr - e^2 4\pi B^2 \int_0^\infty e^{-\alpha r^2} r^4 dr = \\ &= \frac{\hbar^2}{\mu} \frac{3}{4} \alpha - 2e^2 \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/2}. \end{aligned}$$

– Вариационный параметр  $\alpha_0$  находим из уравнения

$$\frac{\partial E(\alpha)}{\partial \alpha} \Big|_{\alpha_0} = \frac{3}{2} \frac{\hbar^2}{\mu} - 2e^2 (\alpha \pi)^{1/2} \Big|_{\alpha_0} = 0.$$

– Получаем  $\alpha_0 = \frac{\mu c^4}{\hbar^4} \frac{16}{9\pi}$ .

– Следовательно, соответствующий уровень энергии

$$E(\alpha_0) = -\frac{48}{36\pi} \frac{\mu e^4}{\hbar^2} \approx -\frac{m e^4}{2,3 \hbar^2}.$$

– Сравнение с точным значением энергии основного состояния  $E_0 = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}$  показывает, что функция  $f_1(r)$  лучше аппроксимирует точную волновую функцию атома водорода, чем функция  $f_2(r)$ .

# ЛЕКЦИЯ

## Ион молекулы водорода

Получим выражение для энергии  $E_0(R)$  основного терма иона молекулы водорода  $H_2^+$  вариационным методом, аппроксимируя волновую функцию терма функцией вида

$$\Psi_{\text{проб}}(r) = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi R^3}} e^{-\alpha r/R},$$

где  $r$  – расстояние электрона от центра отрезка, соединяющего ядра – протоны;  $\alpha$  – вариационный параметр.

– Выбрав в полученном выражении  $E_0(R, \alpha)$  параметр  $\alpha = 1,9$  (при таком значении  $\alpha$  функция двух переменных  $E_0(R, \alpha)$  имеет абсолютный минимум при некотором  $R_0$ , которое следует определить), найти размер иона ( $R_0$  – расстояние между ядрами иона в положении равновесия), минимальную энергию терма  $E_0$  и энергию нулевых колебаний ядер – протонов иона  $E_{\text{кол,о}}$ . Сравним полученные результаты с экспериментальными данными  $R_0 \approx 2,0$  ат. ед.,  $E_{\text{кол,о}} \approx 0,0044$  ат. ед.

– Среднее значение оператора Гамильтона, записанное в атомных единицах  $\hbar = m = 1$ :

$$\hat{H}_{\text{эл}} = -\frac{1}{2} \Delta - \frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}/2|} - \frac{1}{|\vec{r} + \vec{R}/2|} + \frac{1}{|\vec{R}|},$$

– в состоянии, описываемом волновой функцией  $\Psi_{\text{проб}}(r)$ , равно

$$E_0(R, \alpha) = \overline{\hat{H}_{\text{эл}}} = \frac{\alpha^2}{2R^2} - \frac{1}{R} [3 - 2(2 + \alpha) e^{-\alpha}]. \quad (4.5)$$

– Учитывая, что пробная функция имеет вид «водородной» функции, для средних  $\overline{|\vec{R}|}$  и  $\overline{|\vec{r} \pm \vec{R}/2|}^{-1}$ , можно использовать хорошо известные значения. В частности,  $\overline{|\vec{r} \pm \vec{R}/2|}^{-1}$  определяется с использованием формулы (4.5), если в ней принять  $r = R/2$ ,  $a = R/\alpha$ ,  $l = 1$  и вычесть слагаемое  $2/R$ , описывающее потенциал ядра:

$$\overline{|\vec{r} \pm \vec{R}/2|}^{-1} = [2 - (2 + \alpha) e^{-\alpha}] / R.$$

– Выражение (4.5) в соответствии с общей идеей вариационного метода можно рассматривать как некоторое приближенное значение истинной энергии  $E_0(R)$  основного терма, причем наилучшее приближение получается при таком выборе параметра  $\alpha$ , при котором это выражение принимает минимальное значение (как функция переменной  $\alpha$ ; значение  $\alpha(R)$  определяется условием  $\partial E_0(R, \alpha) / \partial \alpha = 0$  и является функцией переменной  $R$ ). Ограничившись указанным в условии задачи значением  $\alpha = 1,9$ , имеем, согласно (4.5), приближенное выражение для энергии основного терма иона  $H_2^+$  вида

$$E_0(R) = \frac{1,80}{R^2} - \frac{1,83}{R}. \quad (4.6)$$

– С помощью (4.6) находим искомые характеристики терма:  $R_0 = 1,97$  ат. ед. (из условия  $\partial E_0(R_0) / \partial R = 0$ ),  $E_0 \equiv E_0(R_0) - 0,47$  ат. ед.,

$$E_{\text{кол},0} = \omega_l / 2 = \frac{1}{2} \sqrt{E_0''(R_0) (2m_l / m_p)} = 0,008 \text{ ат. ед.}$$

– В рассматриваемом приближении значение  $E_0 = -0,47$  ат. ед. выше энергии основного состояния атома водорода, равной  $-0,50$  ат. ед., и нельзя сделать вывод о существовании устойчивого иона. Значительное расхождение рассчитанного и экспериментального значений энергии нулевых колебаний ядер  $H^{+}_2$  – протонов легко объяснить тем, что при расчетах не производилось варьирование параметра  $\alpha$  и поэтому график зависимости  $E_0(R)$  из выражения (4.6) вблизи точки минимума  $R_0$  идет вверх более круто, чем график более точной зависимости, получаемой из (4.5) при варьировании  $\alpha$ . Это приводит к завышенному значению величины  $E_0''(R_0)$ , а с нею и энергии нулевых колебаний.

м (атомарном и межатомном) уровне в Природе.

# ЛЕКЦИЯ

**Движение в центральном поле с аксиальной симметрией. В семинар!**

Гамильтониан частицы в цилиндрических переменных  $\rho, \varphi, z$  имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] + U(\rho). \quad (2.1)$$

Операторы проекций импульса и момент импульса  $\hat{p}_z$  и  $\hat{M}_z$  на ось симметрии коммутируют друг с другом и с гамильтонианом  $\hat{H}$ . Поэтому собственные функции операторов  $\hat{p}_z$ ,  $\hat{M}_z$  и  $\hat{H}$ , образующие полную систему функций, могут быть записаны в виде, разделенном по цилиндрическим переменным, т.е. по радиусу-вектору  $\rho$  и азимутальному углу  $\varphi$  в плоскости, перпендикулярной к оси цилиндрической симметрии,  $z$ :

$$\Psi_{n_\rho, m, p_z} = \frac{1}{\sqrt{4\pi^2 \hbar}} \exp \left[ i \left( \frac{p_z z}{\hbar} + m\varphi \right) \right] \theta_{n_\rho, |m|}(\rho), \quad (2.2)$$

где  $\theta_{n_\rho, |m|}(\rho)$  – решение радиального уравнения Шредингера для «поперечного» движения частицы в плоскости, перпендикулярной к оси  $z$ :

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[ -\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \rho \frac{d}{d\rho} + \frac{m^2}{\rho^2} \right] \theta_{n_\rho, |m|}(\rho) + U(\rho) \theta_{n_\rho, |m|}(\rho) = E_{n_\rho, |m|} \theta_{n_\rho, |m|}(\rho) \quad (2.3)$$

значения  $E_{n_\rho, |m|}$  задают энергетический спектр «поперечного» движения частицы;  $n_\rho$  – радиальное квантовое число, совпадающее с числом нулей радиальной функции (не считая нулей при  $\rho = 0$  и  $\rho = \infty$ ). Волновой функции (2.2) отвечает энергия частицы

$$E_{n_\rho, |m|, p_z} = E_{n_\rho, |m|} + p_z^2 / 2\mu.$$

Квантовое число  $m = 0, \pm 1, \dots$  характеризует величину момента импульса  $M_z = m \hbar$ .

– **Задача .** Найти энергетические уровни дискретного спектра частицы в двумерном поле  $U(\rho) = -\alpha / \rho$ . Определить кратность вырождения уровней. Сравнить с кулоновским полем  $U(r) = -\alpha/r$ .

– **Решение**

– Уравнение Шредингера для радиальной части собственной функции гамильтониана

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[ \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{m^2}{\rho^2} \right] \chi_{n_\rho, |m|} - \frac{\alpha}{\rho} \chi_{n_\rho, |m|} = E_{n_\rho, |m|} \chi_{n_\rho, |m|}$$

– заменой функции  $\chi_{n_\rho, |m|} = u_{n_\rho, m} / \sqrt{\rho}$  приводится к виду

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[ \frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{m^2 - 1/4}{\rho^2} \right] u_{n_\rho, m} - \frac{\alpha}{\rho} u_{n_\rho, m} = E_{n_\rho, |m|} u_{n_\rho, m}. \quad (2.4)$$

Это уравнение и граничные условия  $u_{n_p m}(0) = 0$ ,  $u_{n_p m}(\infty) = 0$  совершенно аналогичны тем, которые возникают при нахождении радиальной волновой функции  $u_{n_p l}$  и уровней энергии частицы в кулоновском поле  $U(r) = -\alpha / r$ , если записать собственную функцию гамильтониана в виде  $\Psi_{n_r l m} = Y_{l m} u_{n_r l}(r) / r$ . Различие состоит только в замене множителя  $l \cdot (l + 1)$  (в центробежной энергии) на величину  $m^2 - 1/4$ . Учитывая хорошо известное выражение

$$E_{n_r l} = -\frac{\mu \alpha^2}{2\hbar^2 (n_r + l + 1)^2} \quad (2.5)$$

– для энергетических уровней частицы в кулоновском поле и заменяя, согласно сказанному выше, величину  $l + 1/2$  на  $|m|$ , находим энергетический спектр частицы в двумерном поле  $U(\rho) = -\alpha / \rho$

$$E_{n_p |m|} = -\frac{\mu \alpha^2}{2\hbar^2 (n_p + |m| + 1/2)^2}. \quad (2.6)$$

– Из выражения (2.6) видно, что в рассматриваемом поле, как и в кулоновском, имеет место случайное вырождение, так как энергия зависит только от комбинации  $n_p + |m|$  квантовых чисел  $n_p$  и  $m$ . Если ввести квантовое число  $N = n_p + |m| + 1$  (являющееся аналогом главного квантового числа  $n = n_r + l + 1$  в кулоновском поле), то выражение (2.6) можно записать в виде

$$E_N = -\frac{\mu \alpha^2}{2\hbar^2 (N - 1/2)^2}, \quad N = 1, 2, \dots \quad (2.5)$$

– Энергетический уровень  $E_N$  имеет, очевидно, следующую кратность вырождения:

$$g(N) = 1 + \sum_{|m|=1}^{N-1} 2 = 2N - 1.$$

## **Матричные элементы оператора момента импульса и связанных.**

Найдем матрицы операторов проекций момента импульса  $\hat{L}(\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z)$  в  $(\hat{L}^2, \hat{L}_z)$ -представлении.

Матрицы операторов  $\hat{L}^2$  и  $\hat{L}_z$  диагональные, собственные значения  $\hat{L}_z$  равны  $\hbar m$ , причем  $m^2 \hbar^2 < L^2$ , где  $L^2$  – собственные значения оператора  $\hat{L}^2$ .

Найдем матричные элементы операторов  $\hat{L}_+$  и  $\hat{L}_-$ .

$$L_{+m'm} = \int \Psi_{+m'}^* L_+ \Psi_m dV = \text{const} \delta_{+m'm+1},$$

т.е. не равны нулю только матричные элементы  $(L_+)_{m+1,m}$ . Соответственно для  $\hat{L}_-$  не равны нулю только  $(L_-)_{m-1,m}$ . Поскольку операторы  $\hat{L}_x, \hat{L}_y$  – эрмитовы (т.е.  $\hat{L}_x = \hat{L}_x^+$ ), то

$$(\hat{L}_-)_{m-1,m} = (\hat{L}_+)^*_{m-1,m}.$$

Воспользовавшись равенством  $\hat{L}^2 = \hat{L}_+ \hat{L}_- + \hat{L}_-^2 - \hbar \hat{L}_z$ , получаем  $\hat{L}_+ \hat{L}_-$ .

$$\text{Отсюда } (L_-)_{m-1,m} = (L_+)_{m,m-1} = \hbar \sqrt{(l+m)(l-m+1)}.$$

Поскольку  $\hat{L}_x = \frac{1}{2}(\hat{L}_+ + \hat{L}_-)$ ,  $\hat{L}_y = -\frac{i}{2}(\hat{L}_+ - \hat{L}_-)$ , то для матричных элементов  $\hat{L}_x$  и  $\hat{L}_y$

получим

$$(L_x)_{m,m-1} = (L_x)_{m-1,m} = \frac{\hbar \sqrt{(l+m)(l-m+1)}}{2};$$

$$(L_y)_{m,m-1} = -(L_y)_{m-1,m} = \frac{-i \hbar \sqrt{(l+m)(l-m+1)}}{2}.$$

Найдем теперь матричные элементы операторов  $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$  для различных значений квантового числа  $l$ :

- а)  $l = 0$  – нулевая матрица;
- б)  $l = 1$ :

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{L}_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ i & 0 & i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{L}_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix};$$

## **Теория возмущений. Particle in a box с электрическим полем. В Семинар.**

Рассмотрим электрон в одномерной бесконечно глубокой яме, где действует постоянное электрическое поле  $\vec{\epsilon}$ . Найдем сдвиг уровней энергии.

– Оператор взаимодействия электрона с внешним электрическим полем имеет вид

$$\hat{H}' = -(\hat{\alpha} \vec{\epsilon}),$$

- где  $\hat{a} = e \hat{r}$  – оператор дипольного момента. В данной одномерной задаче  $\vec{\varepsilon} \parallel \vec{r}$ , поэтому  $\hat{H}' = -e \hat{x} \varepsilon$ .
- Поправка первого порядка к уровню энергии

$$E_n^{(1)} = \langle n | \hat{H}' | n \rangle = -e \frac{a}{2} \varepsilon.$$

- Поправка второго порядка к энергии  $E_n$

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} &= \sum_m' \frac{|\langle n | \hat{H}' | m \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = \\ &= e^2 \varepsilon^2 \sum_{\substack{m-n=2k+1 \\ k=0,1,2,\dots}}' \left( \frac{8a m n}{\pi^2 (m^2 - n^2)^2} \right)^2 \frac{1}{\frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu a^2} (n^2 - m^2)} = \\ &= \frac{128e^2 \varepsilon^2 \mu}{\hbar^2 \pi^6} \sum_{m-n=2k+1} \frac{m^2 n^2}{(n^2 - m^2)^5}. \end{aligned}$$

- Поправка первого порядка  $E_n^{(1)}$  не имеет физического смысла. Дело в том, что в одномерной яме все уровни энергии невырождены, а для невырожденного состояния сдвиг энергии в электрическом поле в первом приближении равен нулю (отсутствует линейный эффект Штарка). Полученный сдвиг  $E_n^{(1)}$  не зависит от номера уровня, т.е. весь энергетический спектр сдвигается на постоянную величину. Этот фиктивный сдвиг легко исключить, если начало координат поместить в середину ямы. Тогда  $\langle n | \hat{x} | n \rangle = 0$ ,  $E_n^{(1)} = 0$  для всех  $n$ .

## Теория возмущений. Осциллятор в электрическом поле. В семинар

Пусть линейный осциллятор помещен в постоянное электрическое поле  $\vec{\varepsilon}$ . Найдем сдвиг уровней энергии осциллятора.

- Задачу решим двумя способами: точным методом и с помощью теории возмущений.

### Точное решение

Уравнение Шредингера для линейного осциллятора во внешнем электрическом поле имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} \Psi_n(x) + \left( \frac{\mu \omega^2 x^2}{2} - e x \varepsilon \right) \Psi_n(x) = E_n \Psi_n(x),$$

где  $\mu$  – масса частицы;  $\omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$  – классическая частота осциллятора;  $k$  – коэффициент возвращающей силы.

Сделаем тождественную подстановку:

$$\frac{\mu \omega^2 x^2}{2} - ex\varepsilon = \frac{\mu \omega^2}{2} \left( x - \frac{e \varepsilon}{\mu \omega^2} \right)^2 - \frac{e^2 \varepsilon^2}{2\mu \omega^2}.$$

– Уравнение Шредингера принимает вид

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} \Psi_n(x) + \frac{\mu \omega^2}{2} \left( x - \frac{e \varepsilon}{\mu \omega^2} \right)^2 = \left( E_n + \frac{e^2 \varepsilon^2}{2\mu \omega^2} \right) \Psi_n(x).$$

– Из вида уравнения можно сделать вывод, что во внешнем постоянном электрическом поле все уровни энергии осциллятора изменяются на  $\frac{e^2 \varepsilon^2}{2\mu \omega^2}$ , т.е.

$$E_n = \hbar \omega \left( n + \frac{1}{2} \right) - \frac{e^2 \varepsilon^2}{2\mu \omega^2},$$

– а среднее значение координаты осциллятора сдвигается от нуля на  $\frac{e \varepsilon}{\mu \omega^2}$ .

### *Приближенное решение*

Оператор возмущения для линейного осциллятора во внешнем электрическом поле имеет вид

$$\hat{H}' = -e \hat{x} \varepsilon.$$

– Матричные элементы координаты осциллятора равны:

$$\langle n | \hat{x} | n+1 \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu \omega}} \sqrt{n+1};$$

$$\langle n | \hat{x} | n-1 \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu \omega}} \sqrt{n}.$$

– Остальные матричные элементы равны нулю. Невозмущенные уровни энергии

$$E_n^{(0)} = \hbar \omega \left( n + \frac{1}{2} \right).$$

– В первом порядке по возмущению поправка к энергии  $E_n^{(1)}$  равна нулю:

$$E_n^{(1)} = \langle n | \hat{H}' | n \rangle = -e \varepsilon \cdot \langle n | \hat{x} | n \rangle = 0.$$

– Во втором порядке по возмущению поправка к энергии

$$E_n^{(2)} = \sum_{n'} \frac{|\langle n | \hat{H}' | n' \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}} =$$

$$= e^2 \epsilon^2 \left\{ \frac{\left| \langle n | x | n+1 \rangle \right|^2}{-\hbar \omega} + \frac{\left| \langle n | x | n-1 \rangle \right|^2}{\hbar \omega} \right\} = -\frac{e^2 \epsilon^2}{2\mu \omega^2}.$$

Во втором порядке по возмущению поправка к уровню энергии приводит к точному результату. Этот исключительный результат объясняется особыми правилами отбора для матричных элементов координаты осциллятора и эквидистантностью спектра энергии осциллятора.

# ЛЕКЦИЯ

## Унитарная динамика

**Не входит в экзамен.**

Предварительная лекция к квантовым компьютерам. Файл Unitary\_evolution.pdf  
8 стр.