

Конспект лекций по курсу «Квантовая механика»

Галимзянов Т.Р.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Список литературы	4
ЛЕКЦИЯ 1. Конец прекрасной эпохи	5
Классическая физика.....	5
Свет	6
Атомы.....	9
Выходы. Матричная и волновая механика.	10
Утрата детерминизма.....	12
ЛЕКЦИЯ 2. Квантовая суперпозиция.	15
Квантовая суперпозиция.....	15
Запутанные состояния.....	17
ЛЕКЦИЯ 3.....	20
Интерферометр Маха-Цендера	20
Elitzur-Vaidman bomb-tester	26
Неравенства Белла	29
Лекция 4. Волны вещества	35
Волны вещества	35
Волновой пакет. Групповая скорость.	36
Расплывание волнового пакета	38
Уравнение Шредингера.....	41
ЛЕКЦИЯ 5.....	43
Предельный переход	43
Наблюдаемые, собственные функции и значения.....	44
Средние значения, операторы.....	47
Эрмитовые операторы	48
Эрмитовость. Примеры.	50
ЛЕКЦИЯ 6	52
Сложение и умножение операторов. Коммутаторы.	52
Неопределенность Гайзенберга	55
Непрерывный спектр.....	56
ЛЕКЦИЯ 7	60
Гамильтониан	60
Дифференцирование операторов по времени.....	61
Стационарные состояния	62
Матричная формулировка квантовой механики	65
ЛЕКЦИЯ 8	68
Свойства решений одномерного уравнения Шредингера	68
Границные условия.....	69
Яма с бесконечно высокими стенками	70
ЛЕКЦИЯ 9	75
Осцилляционная теорема	75

[К содержанию](#)

Плотность потока	78
Коэффициент прохождения	79
Дельта-функционный барьер	80
ЛЕКЦИЯ 10. Гармонический осциллятор I.....	82
Гармонический осциллятор. Решение УШ.....	82
ЛЕКЦИЯ 11. Гармонический осциллятор II.....	86
Гармонический осциллятор. Операторное решение.....	86
Гармонический осциллятор. Матричное решение.....	96
ЛЕКЦИЯ 12. Оператор момента импульса	98
Оператор момента импульса.	98
Проекция момента импульса на ось $z - L_z$	100
Квадрат момента импульса L^2	101
Собственные функции оператора квадрата момента импульса	102
ЛЕКЦИЯ 13. Движение в центрально-симметричном поле.....	104
Движение в центрально-симметричном поле. Общие свойства.....	104
Движение в центрально-симметричном поле. Уравнение Шрёдингера.....	105
ЛЕКЦИЯ 14. Движение в кулоновском поле.....	107
Движение в кулоновском поле	107
ЛЕКЦИЯ 15. Теория возмущений.....	111
Движение в магнитном поле. Уровни Ландау.....	111
Стационарные возмущения в невырожденных системах.....	112
ЛЕКЦИЯ 16. Нестационарное возмущение.	117
Вырожденные состояния	117
Плоский ротатор в магнитном поле.	118
Линейный эффект Штарка	119
Нестационарное возмущение	120
Переходы под влиянием нестационарного возмущения	122
Переходы под влиянием периодического возмущения	123
ЛЕКЦИЯ 17. Спин.	125
Спин частицы.....	125
Спиновые матрицы (Паули) и спиновые функции.....	126
ЛЕКЦИЯ 18. Тождественность частиц.	129
Синглетное и триплетное состояния	129
Тождественность частиц	131
Волновая функция системы тождественных частиц	132
Интерференция тождественных частиц.....	134
Обменное взаимодействие.	135
ЛЕКЦИЯ 19.	138
Лекция про квантовые компьютеры.....	138
Осталось, Не вошедшее в Лекции.....	139
Правило квазиклассического квантования Бора-Зоммерфельда.....	139
Разные задачи	140
Прямоугольная яма (в семинар)	140
Прямоугольный барьер (в семинар)	146
Плоский ротатор в электрическом поле. (В семинар).....	147
ЛЕКЦИЯ	149
Теория рассеяния. Борновское приближение	149

3.2.3. Переходы электронов в атоме водорода	151
Вариационный метод	154
Вариационный метод.....	154
Вариационный метод Ритца.	154
Атом водорода вариационным методом	154
Ион молекулы водорода.....	156
ЛЕКЦИЯ	158
Движение в центральном поле с аксиальной симметрией. В семинар! ..	158
Матричные элементы оператора момента импульса и связанных.....	160
Теория возмущений. Particle in a box с электрическим полем. В Семинар!	160
Теория возмущений. Осциллятор в электрическом поле. В семинар	161
Лекция.....	164
Унитарная динамика	164

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. "Курс теоретической физики. Том III. Квантовая механика", 2004.
2. Мессиа А., «Квантовая механика», т. 1, 1978.
3. Мессиа А., «Квантовая механика», т. 2, 1978.
4. Лекции по квантовой механике в MIT (Quantum Physics I):
<https://ocw.mit.edu/courses/physics/8-04-quantum-physics-i-spring-2016/>

Дополнительная литература (не использованная в конспекте):

- 1.

ЛЕКЦИЯ 1. КОНЕЦ ПРЕКРАСНОЙ ЭПОХИ

Источники:

А. Мессиа, т. 1, гл. 1, §1-10.

<https://ocw.mit.edu/courses/physics/8-04-quantum-physics-i-spring-2016/> (Лекция 1)

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. Заметим, что в механике уравнения движения второго порядка. Это потому, что полной системой динамических переменных являются координата и импульс. Если записать уравнения движения для них (уравнения Гамильтона), то последние являются уравнениями 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, и дальнейший анализ этих уравнений или их решений.

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 (теория ЭМ тому пример) и новых уравнений, либо изменение старых уравнений (общая/специальная теория относительности), 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**. 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.

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 оказалось 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.), волновая природа которых устанавливается опытами по дифракции в кристаллах (фон Лауэ, 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.

$$B_v(T) = \frac{2\nu^2 k_B T}{c^2} \quad (1.1)$$

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 ν излучения свет 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, ν – частота света. Гипотеза Планка объяснила многие явления: в частности, явление **фотоэффекта**, открытого в 1887 г. Генрихом Герцем.

$$B_v(T) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1} \quad (1.2)$$

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, взаимодействующих энергией $h\nu$ и скоростью c . 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 волны 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.

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

где $\lambda_k = \frac{h}{m_e c}$ — [комптоновская длина волны электрона](#), равная $\lambda_k = 2,4263 \cdot 10^{-12}$ 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, 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 сенсибилизированных 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.

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

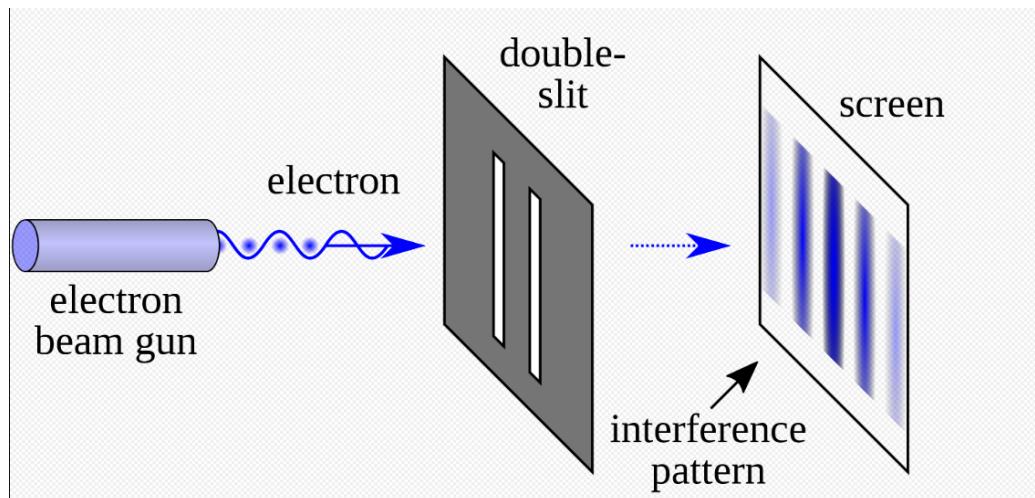


Рисунок 1.1. Схематическое изображение двухщелевого опыта.

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**, и была построена полная теория взаимодействия между электроном и электромагнитными волнами. Появилась уверенность в существовании **атомов и молекул**. 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.

1896 – **радиоактивность**. Направляя α -излучение на различные мишени, Резерфорд (1911 г.) произвел систематическое исследование рассеяния α -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 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 Бройля, посвященным материальным волнам (волнам вещества). Пытаясь установить основные принципы единой теории вещества и излучения, де Бройль 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 Бройля 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.

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.

Утрата детерминизма

В начале 20 века эксперименты по изучению фотоэлектрического эффекта и рассеянию света на свободных движущихся заряженных частицах показали корпускулярную природу света. Теория фотоэффекта Эйнштейна и описание излучения абсолютно чёрного тела Максом Планком заложили теоретическую основу для описания света как потока квантов, несущих фиксированное количество энергии. И хотя Эйнштейн никогда не нравилась квантовая механика, его идеи о частицах света, позже получивших название **фотонов**, помогли построить эту теорию.

Фотоны являются очень удобными инструментами исследования законов квантовой механики из-за простоты их генерации и манипуляций с ними. Надо отметить, что, когда мы говорим, что свет ведет себя как частица, мы имеем в виду квантово-механическую частицу: неделимый пакет энергии и импульса. Мы не имеем в виду классическую точечную частицу или ньютоновскую корпускулу, представляющую собой объект нулевого размера с определенным положением и скоростью. Энергия фотона E зависит только от его “цвета” – его частоты ν :

$$E = h\nu \quad (3.1)$$

Частота фотона определяет длину волны света λ через соотношение $\nu\lambda = c$, где c – скорость света. Например, все “зеленые” фотоны имеют одинаковую энергию. Чтобы увеличить энергию светового луча при сохранении того же цвета, нужно просто больше фотонов.

Как мы сейчас объясним, существование фотонов подразумевает, недетерминированность квантовая механики. Под этим мы подразумеваем, что результат эксперимента не может быть однозначно и точно предсказан, как это было бы в классической физике, условиями, которые находятся под контролем экспериментатора.

Рассмотрим поляризатор, направленный вдоль оси \hat{x} , как показано на рисунке 1.2 (a). Свет, линейно поляризованный вдоль направления \hat{x} , т.е. электрическое поле которого направлено вдоль \hat{x} , проходит через поляризатор. Если поляризация падающего света ортогональна направлению \hat{x} , свет вообще не будет проходить, и полностью поглощаться поляризатором. Теперь рассмотрим свет, поляризованный вдоль направления, образующего угол α с осью x , как показано на рисунке 1.2 (b). Что произойдёт в этом случае?

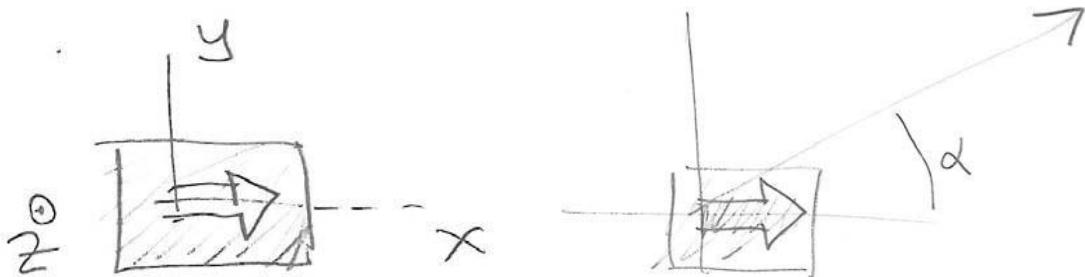


Рисунок 1.2. (a) Поляризатор, пропускающий свет с линейной поляризацией вдоль направления \hat{x} . (b) Свет, линейно поляризованный вдоль направления под углом α , падает на поляризатор.

Если рассматривать свет как распространяющуюся электромагнитную волну, падающее электрическое поле составляет угол α с осью x и, следовательно, принимает следующий вид:

$$\mathbf{E}_\alpha = E_o \cos(\alpha) \hat{x} + E_o \sin(\alpha) \hat{y} \quad (1.3)$$

Это электромагнитная волна амплитуды E_o . Здесь мы игнорируем зависимость волны от времени и пространства; они не имеют отношения к нашему обсуждению. Когда это электрическое поле попадает на поляризатор, компонента вдоль оси его пропускания проходит, а перпендикулярная компонента поглощается. Таким образом, за поляризатором электрическое поле имеет следующий вид:

$$\mathbf{E}_\alpha = E_o \cos(\alpha) \hat{x} \quad (1.4)$$

Вы, наверное, помните, что энергия электромагнитной волны пропорциональна квадрату амплитуды электрического поля. Это означает, что доля энергии луча, проходящая через поляризатор, равна $(\cos(\alpha))^2$. Также хорошо известно, что свет, выходящий из поляризатора, имеет ту же частоту, что и падающий свет.

Пока всё идет нормально. Но теперь давайте попробуем понять этот результат, подумав об отдельных фотонах, которые составляют падающий свет. Все они в падающем луче идентичны. Более того, фотоны не взаимодействуют друг с другом. Поскольку весь свет, который выходит из поляризатора, имеет ту же частоту, что и падающий свет, и, следовательно, ту же частоту, мы должны сделать вывод, что каждый отдельный фотон либо проходит, либо поглощается. Если бы часть фотона прошла, это был бы фотон с меньшей энергией и, следовательно, с меньшей частотой, чего не происходит.

Но теперь у нас проблема. Как мы знаем из волнового анализа, часть $(\cos(\alpha))^2$ фотонов должна пройти, поскольку это часть передаваемой энергии. Следовательно, часть $1 - (\cos(\alpha))^2$ фотонов должна быть поглощена. Но если все фотоны идентичны, почему то, что происходит с одним фотоном, не происходит со всеми?

Ответ квантовой механики состоит в том, что детерминизма нет. Никто не может предсказать, пройдет ли фотон или поглотится. Лучшее, что можно сделать это предсказать

вероятности результатов экспериментов. В этом случае будет $(\cos(\alpha))^2$ соответствует вероятность фотона пройти через поляризатор, $1 - (\cos(\alpha))^2$ – вероятности поглотиться.

ЛЕКЦИЯ 2. КВАНТОВАЯ СУПЕРПОЗИЦИЯ.

Источники:

<https://ocw.mit.edu/courses/physics/8-04-quantum-physics-i-spring-2016/> (Лекция 1)

Квантовая суперпозиция

Концепция линейности состоит в том, что сумма двух решений, представляющих физическую картину, представляет собой новую физическую картину. Эта суперпозиция решений имеет прямой смысл в классической физике. В случае электромагнетизма, например, если у нас есть два решения, каждое из которых представляет распределение электрического и магнитного поля в пространстве и времени, «суммированное» решение понимается просто: его электрическое поле является суммой электрических полей двух решений и его магнитное поле – сумма магнитных полей двух решений. В квантовой механике, однако, интерпретация суперпозиции другая и очень удивительна.

В квантовой механике описание системы сводится к заданию её **состояния**, которое полностью определяет поведение системы и результаты всех возможных измерений этой системы (в вероятностном смысле). Состояния обозначаются такими скобками $| \rangle$. Consider now two states $|A\rangle$ and $|B\rangle$. Например, это могут проекции спина (момента импульса) частицы на ось z – $|\uparrow; z\rangle$, $|\downarrow; z\rangle$ или поляризации фотона на оси x или y ($|\mathbf{x}\rangle$, $|\mathbf{y}\rangle$). Измерение некоторой величины Q точно заданной в состоянии $|A\rangle$ с единичной вероятностью будет давать некоторое значение a (т.н. Born rule), то же можно сказать для какого-либо другого состояния $|B\rangle$, которому соответствует значение b параметра Q . Рассмотрим теперь состояние $|\Psi\rangle$, являющееся суперпозицией состояний $|A\rangle$ и $|B\rangle$.

$$|\Psi\rangle = \alpha|A\rangle + \beta|B\rangle, \quad (2.1)$$

Что будет теперь, если мы измерим свойство Q в системе, описываемой этим состоянием? Может показаться разумным, что можно получить какое-то промежуточное значение между a и b , например среднее взвешанное по коэффициентам α и β , но это не то, что происходит на самом деле. Измерение Q даст либо a , либо b совершенно случайным образом. Мы не можем предсказать какое именно – классический детерминизм утерян, но ответ всегда одно из этих двух значений, а не промежуточное. Коэффициенты α и β в вышеуказанной суперпозиции влияют на вероятности, с которыми мы можем получить два возможных значения:

$$\text{Probability}(a) \sim |\alpha|^2, \quad \text{Probability}(b) \sim |\beta|^2. \quad (2.2)$$

Поскольку в результате измерения можно получить только a или b , вероятности должны в сумме равняться единице, и поэтому они определяются как

$$\text{Probability}(a) \sim \frac{|\alpha|^2}{|\alpha|^2 + |\beta|^2}, \quad \text{Probability}(b) \sim \frac{|\beta|^2}{|\alpha|^2 + |\beta|^2}. \quad (2.3)$$

Если мы получим значение a , повторные измерения будут давать a , поэтому состояние после измерения переходит из суперпозиции в чистое $|A\rangle$. То же самое происходит и с b , поэтому мы можем сказать, что:

$$\begin{aligned} \text{Если при измерении было получено значение } a, \text{ состояние становится } |\Psi\rangle = |A\rangle \\ \text{Если при измерении было получено значение } b, \text{ состояние становится } |\Psi\rangle = |B\rangle \end{aligned} \quad (2.4)$$

Суперпозиция состояния сама с собой не влияет на результаты измерений и не меняет состояние нетривиальным образом. Поскольку наложение состояния на себя просто изменяет множитель перед ним, Ψ и $a\Psi$ представляют одну и ту же «физику» для любого комплексного числа a , отличного от нуля. Таким образом, можно записать следующие равенства:

$$|A\rangle \equiv 2|A\rangle \equiv i|A\rangle \equiv -|A\rangle \quad (2.5)$$

где посредством \equiv мы обозначили обозначает физическую эквивалентность состояний.

Рассмотрим следующую суперпозицию состояний:

$$|\Psi\rangle = |\uparrow; z\rangle + |\downarrow; z\rangle. \quad (2.6)$$

$|\Psi\rangle$ является суперпозицией состояний со спином вверх и вниз некоторой частицы. Т.е. измерение проекции спина этой частицы на ось z приведет к двум возможным результатам с равной вероятностью: электрон со спином вверх или электрон со спином вниз. Поскольку мы можем говорить только о вероятностях, эксперимент должен быть проведён множество раз, чтобы определить вероятности получения величин. Предположим, у нас есть большой ансамбль таких электронов, все они находятся в указанном выше состоянии. При измерении их спина по одному, мы обнаружим, что примерно половина из них имеет спин вверх, а другая – вниз. Невозможно предсказать, какой вариант будет реализован, поскольку мы измеряем каждую частицу по отдельности.

Критик квантовой механики мог бы предложить более простое объяснение приведенным выше наблюдениям – действительно, следующий более простой ансамбль приводит к идентичным экспериментальным результатам. В ансамбле критика большое количество электронов, 50% из которых находятся в состоянии $|\uparrow; z\rangle$, а 50% – в состоянии $|\downarrow; z\rangle$. Критик может справедливо заявить, что такой ансамбль приведёт к тем же результатам измерения спинов, что и ансамбль экзотических состояний в суперпозиции. Такой ансамбль более простое объяснение результата, не прибегая к квантовым суперпозициям. Эксперименты показывают, что это не так. Эйнштейн и другие предложили другое объяснение. Они утверждали, что возможным выходом из положения является наличие **скрытых** переменных. По этой гипотезе частицы, хотя и кажущиеся идентичными, имеют другие скрытые свойства, которые в настоящее время не изучены, которые с уверенностью определяют, какой фотон проходит и какой фотон поглощается. Теории скрытых переменных кажутся непроверяемыми, но, как ни странно, их можно проверить. Благодаря работе Джона Белла физики разработали эксперименты, которые

исключают большинство версий теории скрытых переменных. Никто не придумал, как восстановить детерминизм в квантовой механике. Это кажется невыполнимой задачей.

На знаменитой Пятой Сольвеевской международной конференции 1927 года самые известные физики мира собрались, чтобы обсудить недавно сформулированную квантовую теорию. Семнадцать из двадцати девяти участников были или стали лауреатами Нобелевской премии. Эйнштейн, недовольный недетерминированностью квантовой механики, высказал известную ныне цитату: «Бог не играет в кости», на которую, как говорят, Нильс Бор ответил: «Эйнштейн, перестань указывать Богу, что делать». Бор был готов смириться с потерей детерминизма, Эйнштейн – нет.

Повторим основные тезисы приведённые в этом разделе:

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 в квантовой механике описывается так называемым "состоянием". Состояние задёт эволюцию системы и определяет результаты измерений величин в эксперименте над такой системой (опять, в вероятностном смысле, 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 $|B\rangle$. 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. 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.

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.

Запутанные состояния.

Когда мы рассматриваем суперпозицию состояний двух частиц, мы можем получить замечательное явление, называемое квантово-механической запутанностью. Запутанные состояния двух частиц – это те состояния, в которых мы не можем говорить о состоянии каждой частицы отдельно. Частицы связаны вместе в общем состоянии, в котором они сцеплены друг с другом.

Рассмотрим две невзаимодействующие частицы. Частица 1 может находиться в любом из состояний

$$\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, \dots\}, \quad (2.7)$$

а частица 2 может находиться в любом из состояний

$$\{|v_1\rangle, |v_2\rangle, \dots\} \quad (2.8)$$

Может показаться разумным заключить, что состояние всей системы, включая частицу 1 и частицу 2, может быть определено путем указания состояния частицы 1 и состояния частицы 2. Если бы это было так, возможные состояния были бы записаны как

$$|u_i\rangle \otimes |v_j\rangle, \quad i, j \in \mathbb{N}, \quad (2.9)$$

для некоторого конкретного значения i и j , которые определяют состояние частицы 1 и частицы 2, соответственно. Здесь мы использовали символ \otimes , который означает тензорное произведение, чтобы объединить два состояния в одно состояние для всей системы. Можно думать об этой операции как о некотором произведении, который подчиняется правилам дистрибутивности:

$$\begin{aligned} (\alpha_1|u_1\rangle + \alpha_2|u_2\rangle) \otimes (\beta_1|v_1\rangle + \beta_2|v_2\rangle) = & \alpha_1\beta_1|u_1\rangle \otimes |v_1\rangle + \alpha_1\beta_2|u_1\rangle \otimes |v_2\rangle + \\ & + \alpha_2\beta_1|u_2\rangle \otimes |v_1\rangle + \alpha_2\beta_2|u_2\rangle \otimes |v_2\rangle \end{aligned} \quad (2.10).$$

Скалярные множители можно перемещать через оператор тензорного умножения \otimes , но порядок состояний должен сохраняться. Как и любое из состояний, перечисленных в (2.9), это состояние не запутано.

Однако, используя состояния в (2.9), мы можем построить более необычные состояния. Рассмотрим следующее выражение

$$|u_1\rangle \otimes |v_1\rangle + |u_2\rangle \otimes |v_2\rangle. \quad (2.11)$$

Состояние двух частиц называется запутанным, если оно не может быть записано в факторизованной форме $(\cdot \cdot) \otimes (\cdot \cdot)$, которая позволяет нам описать состояние, просто указав состояние каждой частицы. If it could it would have to be with a product as indicated in (2.9). 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

$$\alpha_1\beta_1 = 1, \quad \alpha_1\beta_2 = 0, \quad \alpha_2\beta_1 = 0, \quad \alpha_2\beta_2 = 1. \quad (2.11)$$

It is clear that there is no solution here. The second equation, for example, requires either α_1 or β_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 (2.10) is indeed an entangled state. Невозможно описать состояние такой системы, указав состояние для каждой частицы по отдельности.

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

Проиллюстрируем сказанное выше, используя электроны и их спиновые состояния. Рассмотрим состояние двух электронов, обозначенное как $|\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle$. Как видно из обозначений, спин первого электрона, обозначенный первой стрелкой, направлен вверх, а

другой, описанный второй стрелкой, направлен вниз. Это не запутанное состояние. Другое возможное состояние – это прямо противоположное состояние, спин первой частицы направлен внизу, а второй – вверх. Это второе состояние также не запутано. Суперпозиция этих состояний уже представляет собой запутанное состояние:

$$|\uparrow\rangle\otimes|\downarrow\rangle+|\downarrow\rangle\otimes|\uparrow\rangle. \quad (2.12)$$

В состоянии (2.12) спин первого электрона направлен вверх, если спин второго направлен вниз (первое слагаемое), или спин первого электрона направлен вниз, если спин второго – вверх (второе слагаемое). Между спинами двух частиц существует корреляция; они всегда указывают в противоположные направления. Представьте, что два запутанных электрона находятся очень далеко друг от друга: у Алисы один электрон из пары находится на планете Земля, а у Боба – другой электрон на Марсе. Нет никаких известных взаимодействий, связывающих эти частицы, но, тем не менее, состояния электронов связаны. Измерения, которые мы проводим на отдельных частицах, покажут корреляцию. Предположим, Алиса измеряет спин электрона на Земле, и он оказывается направленным вверх. Как обсуждалось ранее, состояние двух частиц сразу становится состоянием, соответствующему первому слагаемому. Это означает, что электрон на Марсе **мгновенно** перейдет в состояние со спином вниз, что может быть подтверждено Бобом, который сидит на Марсе с этой частицей в своей лаборатории. Это воздействие на электрон Боба произойдет до того, как сообщение, передаваемое со скоростью света, может достигнуть Марса, сообщит Бобу, что Алиса провела измерение земной частицы, и результат оказался спин вверх. Конечно, эксперименты должны проводиться с ансамблем, который содержит множество пар частиц, каждая пара которого находится в запутанном состоянии. В половине случаев электрон на Земле будет находиться в состоянии спин вверх, при этом электрон на Марсе находится в состоянии спин вниз, а в другой половине случаев спин электрона на Земле будет направлен вниз, на Марсе – вверх.

Наш дружелюбный критик мог бы справедливо указать, что такие корреляции между измерениями спинов могли быть получены путем подготовки обычного ансамбля, в котором 50% пар находятся в состоянии $|\uparrow\rangle\otimes|\downarrow\rangle$, а остальные 50% пар находятся в состоянии $|\downarrow\rangle\otimes|\uparrow\rangle$. Но как мы отмечали выше, такие возражения были окончательно рассмотрены в 1964 году Джоном Беллом, который показал, что, если Алиса и Боб могут измерять спин в трех произвольных направлениях, корреляции, предсказываемые квантовым запутанным состоянием, отличаются от классических корреляций любого мыслимого обычного ансамбля. Эксперименты с запутанными состояниями подтвердили существование квантовых корреляций. Отметим, что мгновенное действие между запутанными частицами на большом расстоянии, связанное с их измерением, не приводит ни к парадоксам, ни, как может показаться, к противоречиям с идеями специальной теории относительности. Вы не сможете использовать квантово-механические запутанные состояния для передачи информации со скоростью, превышающей скорость света из-за другой квантово-механической специфики – принципиальной недетерминированности результата измерения. (Для одной мало – надо будет взять часть из следующей)

ЛЕКЦИЯ 3.

Источники:

<https://ocw.mit.edu/courses/physics/8-04-quantum-physics-i-spring-2016/> (Лекция 2)
<http://www.eslitak.com/index/o-6>

Интерферометр Маха-Цендера

Любопытную демонстрацию суперпозиции состояний дает интерферометр Маха-Цендера; устройство, состоящее из светоделителей (полупрозрачных зеркал), зеркал и детекторов, использовавшееся Эрнстом Махом и Людвигом Цендером в 1890-х годах для изучения интерференции между двумя лучами света.

Делитель луча, как следует из его названия, разделяет падающий луч на два: один отражается от делителя, а другой проходит через него. Мы будем рассматривать сбалансированные светоделители: они разделяют падающий луч на два луча равной интенсивности (рисунок 3.1). Падающий луч может попасть на светоделитель сверху или снизу. Типичный светоделитель состоит из стеклянной пластины с отражающим диэлектрическим покрытием с одной стороны. Показатель преломления покрытия выбирается промежуточным между показателем преломления стекла и воздуха. При отражении света от материала с более высоким показателем преломления его фаза сдвигается на π . Это происходит при отражении от покрытия в воздухе, но фаза не набегает при отражении от покрытия в стекле. Прошедший луч своей фазы не меняет.

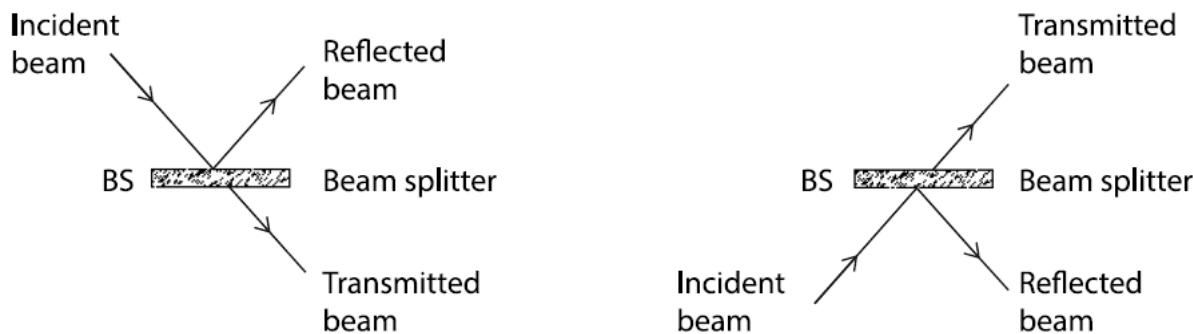


Рисунок 3.1. Падающий луч, попадающий на светоделитель, делится на два: отраженный и проходящий. Слева: падающий луч сверху. Справа: падающий луч снизу.

Конфигурация устройства Маха-Цендера, показанная на рисунке 3.2, имеет левый светоделитель (BS1) и правый светоделитель (BS2). Между ними есть два зеркала: M1 вверху и M2 внизу. Входящий слева луч разделяется в BS1 на два, каждый из которых попадает в зеркало, а затем отправляется в BS2. В BS2 лучи рекомбинируются и направляются в два исходящих луча, которые попадают в детекторы фотонов D0 и D1.

Относительно просто расположить светоделители так, чтобы входящий луч после разделения в BS1 и рекомбинации в BS2 шёл вверх, попадая D0 и вообще не попадая в D1. Это требует точной интерференции на светоделителе BS2. Обратите внимание, что на BS2 падают два луча; верхний обозначен «*a*», а нижний – «*b*». Луч, идущий в сторону D0 состоит из двух вкладов: отражённая на BS2 часть «*a*» и прошедшая часть «*b*». Эти два вклада конструктивно интерферируют, давая луч, идущий в D0. Луч, идущий в сторону D1

состоит из других вкладов: прошедшая через BS2 часть «*a*» и отражённая часть «*b*». Эти два вклада устроены так, что они деструктивно интерферируют, и луч не попадает в D1.

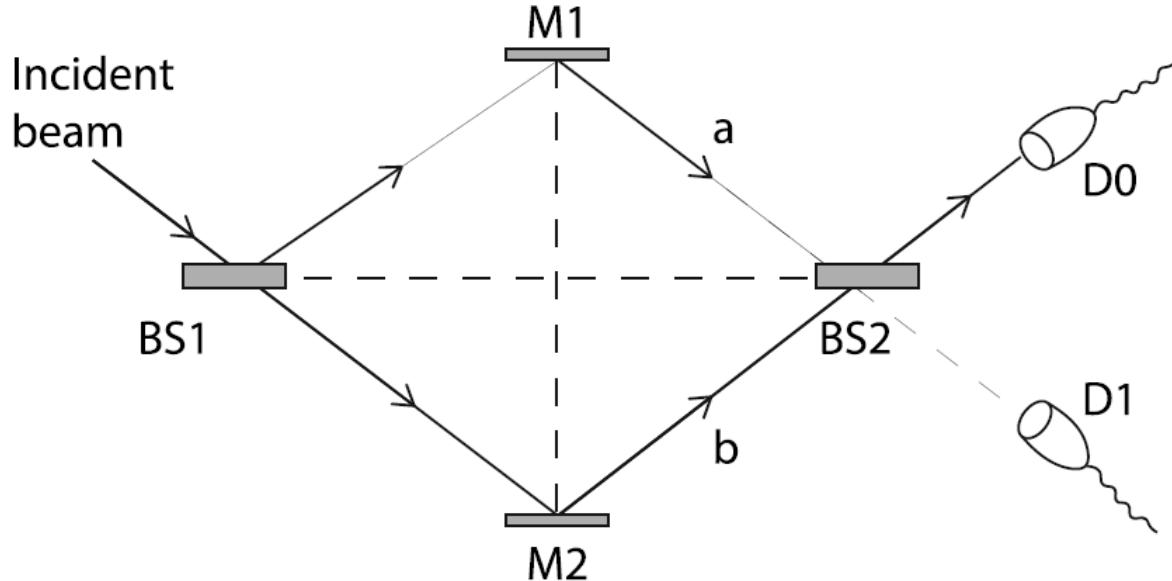


Figure 3.2: Схематическое изображение интерферометра Маха-Цендера. Представленная конфигурация устроена так, чтобы все падающие фотоны попадают в детектор D0, а не на D1 из-за соответствующей интерференции.

Полезно рассматривать входящий луч света как последовательность фотонов, которые мы посыпаем в интерферометр, по одному за раз. Это демонстрирует, что на уровне фотонов интерференция не является интерференцией одного фотона с другим. Каждый фотон должен интерферировать сам с собой, чтобы дать результат, получаемый в эксперименте. Действительно, интерференция между двумя фотонами невозможна: например, деструктивная интерференция потребовала бы, чтобы два фотона исчезали, что невозможно из-за сохранения энергии. Следовательно, каждый фотон делает очень странную вещь, проходя через обе ветви интерферометра. Каждый фотон находится в суперпозиции двух состояний, в которых фотон находится в верхней или нижней ветви прибора. Таким образом, состояние фотона в интерферометре – забавное состояние, в котором фотон, кажется, делает две несовместимые вещи одновременно.

Давайте опишем математически данную ситуацию. Спросим себя, какова вероятность найти фотон в каждом из двух лучей? Для этого нам нужны две амплитуды вероятности или два комплексных числа, квадрат модуля которых дает искомые вероятности. Квантовое состояние может не быть вектором в строгом смысле этого слова, как знакомые нам векторы в трехмерном пространстве, но, тем не менее, их можно описывать этими терминами, потому что они обладают многими соответствующими свойствами. Точно так же, как любой вектор, состояние может быть представлено в виде суммы других состояний, что поможет нам узнать о свойствах нашего состояния. Мы можем закодировать информацию о состоянии в двухкомпонентном векторе:

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}. \quad (3.1)$$

Здесь α – амплитуда вероятности фотона оказаться в верхнем луче, а β – амплитуда вероятности фотона оказаться в нижнем луче. Следовательно, $|\alpha|^2$ – вероятность найти

[К содержанию](#)

фотон в верхнем луче и $|\beta|^2$ – вероятность найти фотон в нижнем луче. Поскольку фотон должен находиться в хоть в каком-то из лучей, имеет место условие:

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1. \quad (3.2)$$

Следуя этим обозначениям, для случаев, когда фотон определенно находится в том или ином пучке мы можем записать:

$$\begin{aligned} \text{фотон в верхнем луче: } & \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ \text{фотон в нижнем луче: } & \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Мы можем рассматривать состояние (3.1) как суперпозицию этих двух более простых состояний, используя правила сложения и умножения векторов:

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ \beta \end{pmatrix} = \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

Давайте разберёмся как записать действие светоделителей математически. Если входящий фотон попадает в светоделитель сверху, мы считаем этот фотон принадлежащим к верхнему лучу и обозначаем его $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$. Если входящий фотон попадает в светоделитель снизу, мы считаем этот фотон принадлежащим к нижней ветви и обозначаем его $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. Эти два случая изображены на рисунке 3.3. Светоделителя состояния в каждом из двух случаев:

$$\text{Левый BS: } \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} s \\ t \end{pmatrix}, \quad \text{Правый BS: } \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

Как видно из диаграммы, для фотона, падающего сверху, s можно рассматривать как амплитуду отражения, а t – прохождения. Точно так же для фотона, падающего снизу, u можно рассматривать как амплитуду отражения, а v – прохождения. Четыре числа s, t, u и v полностью характеризуют светоделитель. Их можно использовать для прогнозирования выходного сигнала для любого падающего фотона в любом состоянии или их суперпозиции. Действительно, состояние падающего фотона $\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$ дало бы следующий результат:

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \rightarrow \alpha \begin{pmatrix} s \\ t \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \alpha s + \beta u \\ \alpha t + \beta v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s & u \\ t & v \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

Таким образом, мы видим, что математически светофильтр можно представить матрицей, а его действие – умножением матрицы на вектор состояния.

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} s & u \\ t & v \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}. \quad (3.7)$$

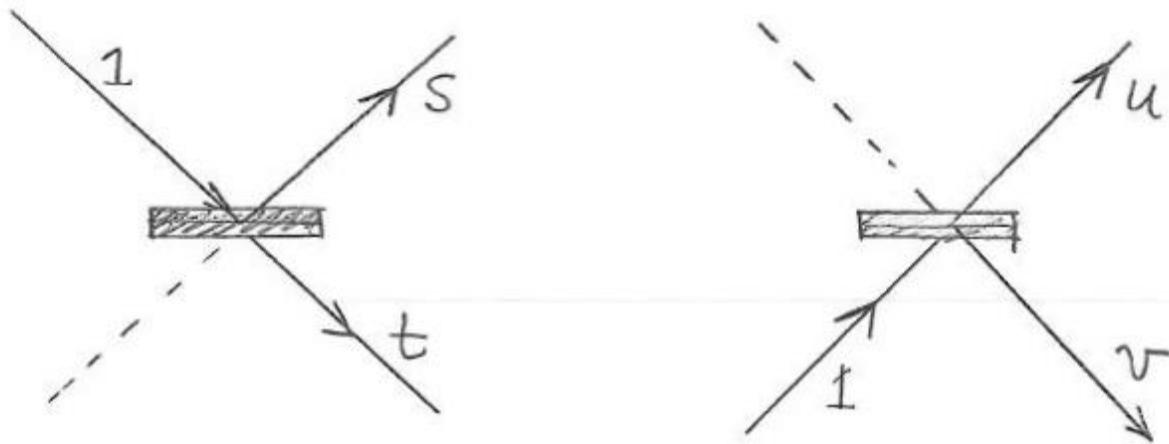


Рисунок 3.3. Слева: фотон, падающий сверху; s и t – отраженная и прошедшая амплитуды соответственно. Справа: фотон, падающий снизу; v и u – отраженная и прошедшая амплитуды соответственно.

Определим теперь ограничения на компоненты матрицы s, t, u, v . Поскольку мы считаем, что светофильтр не поглощает фотоны, сумма вероятностей должна составлять единицу, уравнение (3.5) накладывает следующие ограничения:

$$\begin{aligned} |s|^2 + |t|^2 &= 1 \\ |u|^2 + |v|^2 &= 1 \end{aligned} \quad (3.8)$$

Используемые нами светофильтры называются сбалансированными, что означает, что вероятность отражения и прохождения фотонов одинакова. Это означает, что все четыре константы должны иметь равный квадрат модуля:

$$|s|^2 = |t|^2 = |u|^2 = |v|^2 = \frac{1}{2}. \quad (3.9)$$

Давайте попробуем угадать значения. Мы могли бы записать матрицу так:

$$\begin{pmatrix} s & u \\ t & v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

Однако этот вариант не работает, т.к. действие такой матрицы на нормированные волновые функции (векторы-столбцы) меняет их норму. Протестируем матрицу на паре состояний:

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

Первый пример работает, второй - нет, т.к. $|1|^2 + |1|^2 = 2 \neq 1$. Это легко исправить, изменив знак перед v :

$$\begin{pmatrix} s & u \\ t & v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.12)$$

Вообще говоря, матрица, сохраняющая норму вектора должна быть унитарной, т.е. удовлетворять следующему равенству:

$$UU^\dagger = I \quad (3.13)$$

Здесь I – единичная матрица, а знак \dagger обозначает эрмитово сопряжение – транспонирование матрицы и последующее комплексное сопряжение её компонентов: $U^\dagger \equiv (U^T)^*$. В случае, если пространство векторов действительно, то матрицы сохраняющие норму называются ортогональными, и удовлетворяют следующему условию:

$$UU^T = I \quad (3.14)$$

Унитарная матрица, состоящая из действительных компонент, является также ортогональной. Из свойства унитарных и ортогональных матриц (3.13), (3.14) следует, что модуль их детерминанта равен 1. Отсюда становится понятно, почему матрица (3.10) не смогла послужить матрицей светоделителя – её детерминант равен 0.

Задача: проверить, что матрица (3.12) является унитарной. Проверить это также в явном виде, на состоянии $\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$, что эта матрица сохраняет норму вектора.

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

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \alpha + \beta \\ \alpha - \beta \end{pmatrix}. \quad (3.15)$$

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

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} |\alpha + \beta|^2 + \frac{1}{2} |\alpha - \beta|^2 &= \frac{1}{2} (|\alpha|^2 + |\beta|^2 + \alpha \beta^* + \alpha^* \beta) + \frac{1}{2} (|\alpha|^2 + |\beta|^2 - \alpha \beta^* - \alpha^* \beta) = \\ &= |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \end{aligned} \quad (3.16)$$

Знак минус в правом нижнем углу (3.12) означает, что амплитуда фотона, идущий снизу, при отражении изменит знак, что эквивалентно, сдвигу фазы на π , т.е. светоделитель (3.12) имеет диэлектрическое покрытие на нижней стороне.

Есть также другой вариант матрицы светоделителя:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.17)$$

который реализуется при нанесении диэлектрического покрытия на верхнюю стороне.

Задача: проверить, что матрица (3.17) является унитарной.

Мы будем называть светоделитель, определяющийся матрицей (3.12), BS1 и светоделитель, определяющийся матрицей (3.17) – BS2:

$$BS1: \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad BS2: \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad (3.18)$$

В интерферометр, можно также включать «фазовращатель», кусок материала, который изменяет фазу прошедшего света на δ , т.е. умножает амплитуду вероятности на фиксированную фазу $e^{i\delta}$, $\delta \in \mathbb{R}$ (см. рисунок 3.4), амплитуда вероятности а слева от устройства становится справа от устройства. Поскольку норма фазы равна единице, фазовращатель не изменяет вероятность нахождения фотона. Когда фаза δ равна π , эффект фазовращателя заключается в изменении знака волновой функции, поскольку $e^{i\pi} = -1$.

Зеркала в данной схеме прибора не изменяют вероятности нахождения фотонов в том или ином луче, но должны сдвигать фазу фотона на π .

Задача: Записать матрицы, соответствующие (i) зеркалам в приборе, изображённом на рис. 2.2 (одна матрица на оба зеркала); (ii) фазовращателя, находящегося в нижней части прибора; (iii) блокатору пути, находящемуся в верхней части прибора. Унитарны ли эти матрицы?

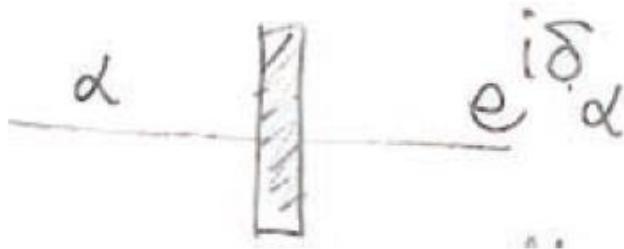


Рисунок 3.4. Фазовращатель с фазовым множителем $e^{i\delta}$.

Интерферометр Маха-Цендера , изображённый на рисунке 3.5 состоит из двух светоделителей. Если фотон в состоянии $\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$ падает слева, выходное состояние, которое поступает в детекторы, получается путем воздействия сначала с матрицей BS1, а затем с матрицей BS2 (по последовательности):

$$\text{вход: } \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad \text{выход: } \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ -2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta \\ -\alpha \end{pmatrix} \quad (3.19)$$

Если на вход подаётся фотон в состоянии $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, то на выходе интерферометра мы получим $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, т.е. фотон будет обнаружен в детекторе D0. Мы можем составить простую таблицу с вероятностями возможных исходов:

Исход	Вероятность
фотон в D0	1
фотон в D1	0

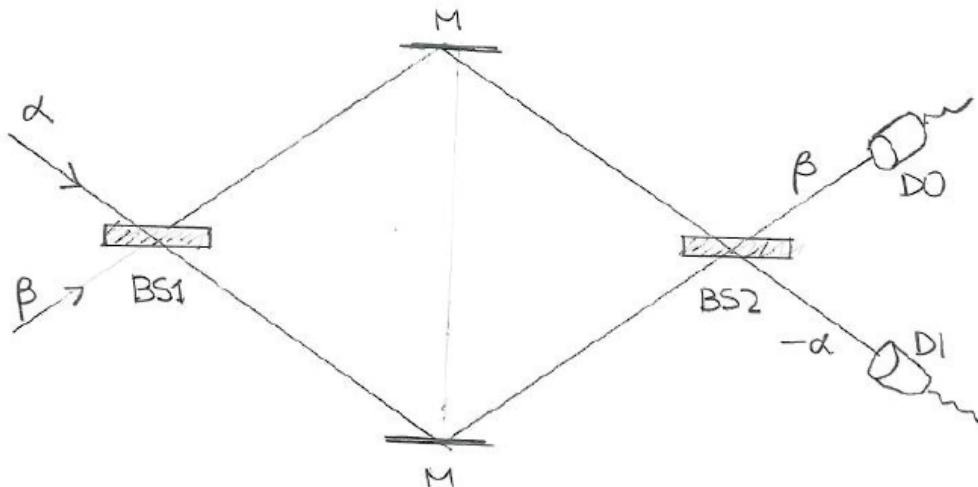


Рисунок 3.5. Интерферометр Маха-Цендера с входящим фотоном в общем состоянии.

Задача: Записать матрицы интерферометра Маха-Цендера (произведение матриц всех составляющих элементов), содержащего (i) светофильтры BS1 и BS2; (ii) светофильтры BS1 и BS1; (iii) светофильтры BS2 и BS2 и вращатель фазы на π в верхней части прибора. Записать векторы выходных фотонов этих приборов при входном векторе $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$.

Elitzur-Vaidman bomb-tester

Теперь заблокируем нижний путь, как показано на рисунке 3.6. К чему это приведёт? Действие BS1 на входной луч даст следующий результат, как показано на рисунке:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.21)$$

Затем нижня часть луча поглощается, а верхняя проходит дальше, что превратит состояние (3.21) в $\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{pmatrix}$. Дальнейшее пропускание этого состояния через BS2 даст:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (3.22)$$

Видно, что теперь результирующий луч распределяется равномерно между детекторами D0 и D1. В этом эксперименте есть три возможных исхода: фотон может быть поглощен блокатором или может попасть в любой из двух детекторов:

Исход	Вероятность
фотон в блокаторе	$\frac{1}{2}$
фотон в D0	$\frac{1}{4}$
фотон в D1	$\frac{1}{4}$

(3.23)

Примечательно, что до блокировки нижнего пути фотон не мог попасть в D1. Теперь же вероятность попадания в D1 равна $\frac{1}{4}$, и увеличилась за счет блокировки пути.

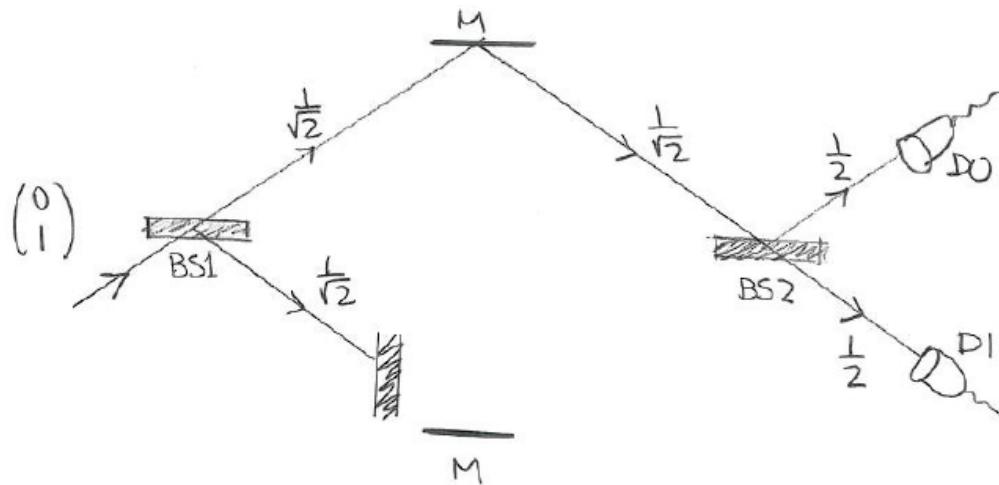


Рисунок 3.6. Вероятность обнаружения фотона в точке D1 можно изменить, заблокировав один из путей.

Чтобы увидеть, насколько странным является достижение фотоном детектора D1 при блокировке пути, рассмотрим воображаемую ситуацию, предложенную физиками Авшаломом Элициуром и Львом Вайдманом. Они вообразили бомбы со специальным триггером: детектором фотонов. Если детектор фотонов неисправен, фотон вообще не обнаруживается, проходит сквозь бомбу, и она не взрывается. Предположим, у нас есть несколько бомб Элициура-Вайдмана (EV), и мы знаем, что некоторые из них вышли из строя. Можем ли мы определить, работает ли бомба, не взорвав ее, и не исследуя датчик другими способами?

Кажется, что эта задача неразрешима. Если мы посылаем фотон в бомбу и ничего не происходит, мы знаем, что бомба неисправна, но, если бомба находится в рабочем состоянии, она просто взорвётся. Невозможно подтвердить, что детектор фотонов в бомбе работает, не послав в неё свет. Действительно, в классической физике это невозможно. Однако в квантовой механике это не так. Как мы увидим, мы можем выполнять то, что можно назвать измерением без взаимодействия (interaction free measurement)!

Теперь поместим бомбу в нижний путь интерферометра. Предположим, мы отправляем фотон, как показано на рисунке 3.6. Если бомба неисправна, что соответствует отсутствию детектора, нижняя ветвь интерферометра свободна, и все фотоны, которые мы посыпаем, попадут в D_0 , как это было на рис. 3.6.

Исход	Вероятность
Фотон в D_0 нет взрыва	1
Фотон в D_1 нет взрыва	0
Бомба взрывается	0

(3.24)

С другой стороны, если бомба работает результаты изменятся следующим образом, конфигурация прибора изображена на рисунке 3.8:

Исход	Вероятность
Фотон в D_0 нет взрыва	$1/4$
Фотон в D_1 нет взрыва	$1/4$
Бомба взрывается	$1/2$

(3.25)

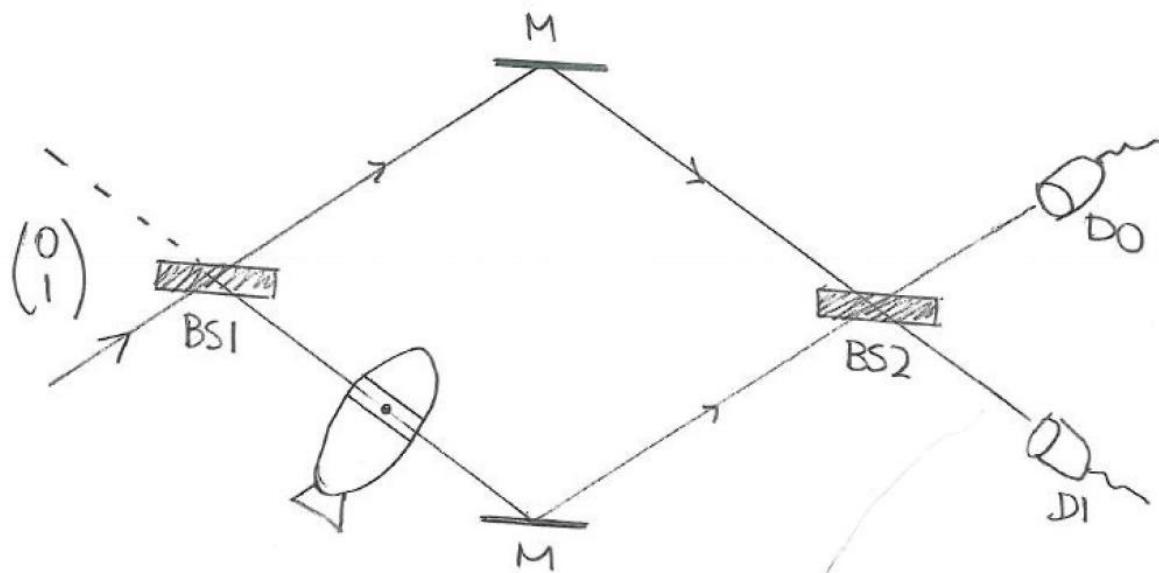


Рисунок 3.7. Интерферометр Маха-Цендера с бомбой Элицира-Вайдмана расположенной в нижней ветви. Если бомба неисправна, все падающие фотоны попадут в точку D_0 . Если

[К содержанию](#)

фотон попадает в точку D1, мы знаем, что бомба работоспособна, хотя фотон никогда не попадал в детектор бомбы!

Т.е. если бомба исправна, в 50% случаев фотон попадет в неё, и взорвет, в 25% случаев фотон попадает в D0, и мы не сможем сказать, исправна бомба или нет. Но в 25% случаев фотон попадает в D1, и, поскольку это было невозможно при неисправной бомбе, мы узнали, что бомба работоспособна! Мы узнали об этом, при том, что фотон не прошел через бомбу. Если задуматься об этом, то это кажется чрезвычайно удивительным и нелогичным. Но это то как устроена природа, и эксперименты подтвердили, что такого рода измерения без взаимодействия действительно возможны [Kwiat, Paul, et al. "Interaction-free measurement." Physical Review Letters 74.24 (1995): 4763].

Неравенства Белла

Как мы отмечали выше, существуют аргументы против недетерминизма квантовой механики. Одно такое возражение выражается возможности наличия **скрытых** переменных. По этой гипотезе частицы, хотя и кажущиеся идентичными, имеют другие скрытые свойства, которые в настоящее время не изучены, которые с достоверно определяют, какой фотон проходит и какой фотон поглощается. Можно сказать, что корреляция между спутанными частицами может быть двух "сортов". Во-первых, корреляция состояний двух различных объектов может объясняться тем, что оба объекта одинаково "запрограммированы" (имеют скрытый параметр, определяющий их поведение), при этом параметры частиц запутанной пары взаимно согласованы, что и обеспечивает корреляцию результатов.

Во-вторых, корреляция может быть вызвана тем, что между объектами существует какая-то «оперативная» связь, и изначально никакого параметра, предопределяющего результат измерения, нет. Для той частицы запутанной пары, которая первой достигает своего прибора, выбор результата измерения осуществляется абсолютно случайно. В этот момент вторая частица получает от первой некоторый «сигнал» и для неё выбор уже предопределен. Рассмотрим постановку эксперимента, который позволяет определить какая из версий верна.

Рассмотрим пару запутанных частиц с противоположными спинами, которые посылаются в приборы, измеряющие проекцию спина. Назовём их П1 и П2. Если приборы ориентированы одинаково, и первая частица направляется в плюс-канал П1 («спин вверх»), то вторая должна оказаться в минус-канале П2 («спин вниз»). Давайте в рамках этой логичной классической версии спрогнозируем статистику измерений для разных ориентаций П1 и П2, и сравним эту статистику с результатами реальных экспериментов.

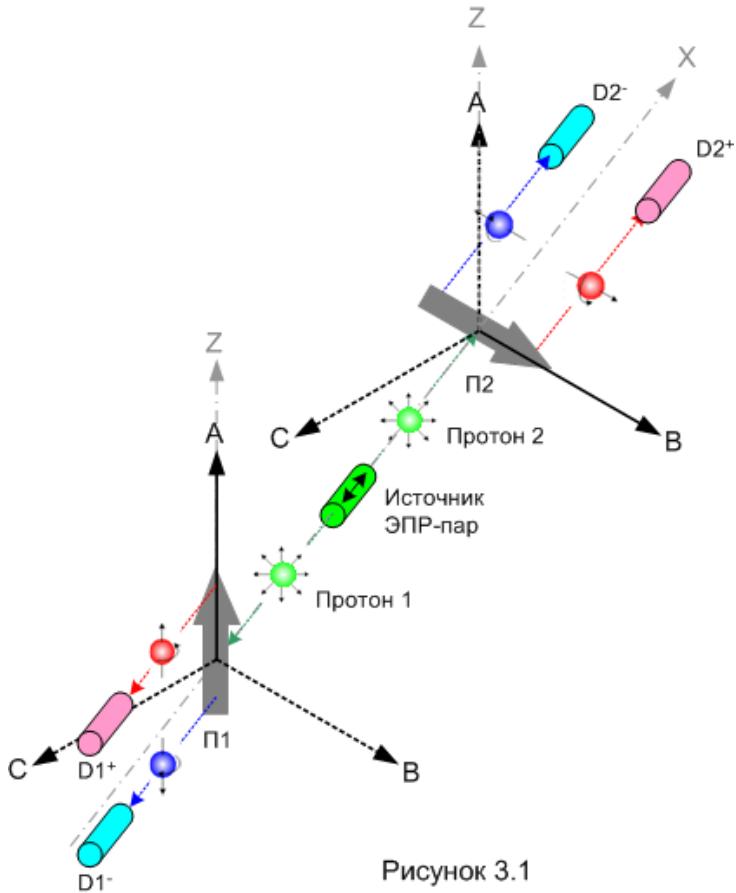


Рисунок 3.1

Рисунок 3.8. Схема эксперимента в постановке Белла.

Приборы Π_1 и Π_2 могут поворачиваться вокруг оси X , мы будем ориентировать их только в трёх направлениях, обозначенных на рисунке как A , B , C . На рисунке показана ситуация, когда прибор Π_1 ориентирован в направлении A , прибор Π_2 ориентирован в направлении B . Такую конфигурацию приборов мы обозначим $\{A, B\}$ – слева от запятой указана ориентация прибора Π_1 , справа – ориентация прибора Π_2 . Аналогичным образом обозначим и другие возможные конфигурации: $\{A, C\}$, $\{A, A\}$, $\{B, A\}$ и так далее.

Эксперимент будем проводить следующим образом. В каждой попытке случайным образом ориентируем приборы в одну из девяти возможных конфигураций, «выстреливаем» запутанную пару частиц и фиксируем результат. В каждой из шести конфигураций, в которых ориентации приборов не совпадают, возможны четыре исхода. Например, в конфигурации $\{A, B\}$ показанной на рисунке 3.8, возможны следующие исходы:

$[A^+, B^+]$ – в Π_1 и Π_2 сработали плюс-детекторы;

$[A^+, B^-]$ – в Π_1 сработал плюс-детектор, в Π_2 сработал минус-детектор;

$[A^-, B^+]$ – в Π_1 сработал минус-детектор, в Π_2 сработал плюс-детектор;

$[A^-, B^-]$ – в П1 и П2 сработали минус-детекторы.

Аналогично будем обозначать исходы, полученные в прочих конфигурациях: $[C^+, B^+]$, $[B^-, A^+]$ и так далее. Всего для «разнонаправленных» конфигураций возможны 24 разных исхода.

В каждой конфигурации с одинаковой ориентацией приборов возможны только два исхода. Например, для ориентации приборов $\{A, A\}$ возможны такие два исхода: $[A^+, A^-]$ и $[A^-, A^+]$. Исходы такого типа, коих для трёх «параллельных» конфигураций может быть всего шесть. Они служат для контроля корректности работы экспериментальной установки. Ведь, во-первых, если нам время от времени будут встречаться исходы типа $[B^+, B^+]$ или $[C^-, C^-]$, значит, наш источник запутанных пар или приборы работают некорректно – на одинаковых ориентациях приборов мы должны получать только противоположные результаты. Во-вторых, если после большого числа «выстрелов» обнаружится некоторый «перекос» в пользу одного из «параллельных» исходов, допустим, количество исходов $[A^+, A^-]$ окажется значительно большим, чем количество исходов $[B^+, B^-]$, то это будет означать, что спины частиц, выпускаемых источником, распределены по углу неравномерно. То есть, не совсем случайно. Каждый из этих случаев указывает на недостоверность результатов эксперимента.

Попробуем предсказать результаты нашего эксперимента в рамках классического подхода. Мы предполагаем, что каждая из запутанных частиц несёт в себе скрытый X-параметр, однозначно определяющий результат измерения спина. Иными словами, в частицу «записана» её реакция на любую ориентацию прибора. Скажем, в нашем эксперименте частица 1 может быть «запрограммирована», например, таким образом:

- в приборе с ориентацией $\{A\}$ идти в плюс-канал ($X = +1$ для направления A);
- в приборе с ориентацией $\{B\}$ идти в плюс-канал ($X = +1$ для направления B);
- в приборе с ориентацией $\{C\}$ идти в минус-канал ($X = -1$ для направления C).

Эту «программу» будет удобно коротко записать так: $\langle A^+, B^+, C^- \rangle$

Знак скрытого X-параметра для каждого направления показан соответствующим верхним индексом. Возможные конфигурации приборов мы обозначили фигурными скобками $\{ \}$, результаты измерений – квадратными скобками $[]$, а возможные «программы» частиц – угловыми скобками $\langle \rangle$.

Разумеется, в рамках таких классических «рассуждений» мы полагаем также, что в частице «записано» значение X-параметра и для всех прочих направлений ориентации прибора. Но на результаты нашего эксперимента влияют значения X-параметра только для направлений A, B, C. С этой точки зрения все протоны мы можем разделить на восемь «сортов»:

$$\begin{aligned} & \langle A^+, B^+, C^+ \rangle, \langle A^+, B^+, C^- \rangle, \langle A^+, B^-, C^+ \rangle, \langle A^+, B^-, C^- \rangle, \\ & \langle A^-, B^+, C^+ \rangle, \langle A^-, B^+, C^- \rangle, \langle A^-, B^-, C^+ \rangle, \langle A^-, B^-, C^- \rangle, \end{aligned}$$

Заметим, что мы имеем дело с запутанными парами, в которых частица 1 и частица 2 для одинаково ориентированных приборов всегда дают противоположные результаты. Это должно означать, что X-параметры двух запутанных частиц для одного направления всегда противоположны по знаку. Например, если частица 1 «запрограммирована» так: $\langle A^+, B^+, C^- \rangle$, то частица 2 обязательно «запрограммирована» противоположным образом: $\langle A^-, B^-, C^+ \rangle$.

Теперь поставим следующий вопрос: какова вероятность получить тот или иной исход одного "выстрела"? Например, такой: $[A^+, B^+]$? Очевидно, что такой исход может быть получен только в конфигурации приборов $\{A, B\}$. Так же понятно, что этот исход могут дать только пары, в которых частица 1 несёт набор X-параметров (напомним, что спины частиц разнонаправлены):

$$\langle A^+, B^-, C^+ \rangle \text{ или } \langle A^+, B^-, C^- \rangle$$

Значит, формулу для вероятности исхода $[A^+, B^+]$ мы можем записать так:

$$P[A^+, B^+] = P\{A, B\} (P\langle A^+, B^-, C^+ \rangle + P\langle A^+, B^-, C^- \rangle) \quad (3.26)$$

Здесь $P\{A, B\}$ – вероятность конфигурации $\{A, B\}$. У нас конфигурации переключаются случайным образом, и все 9 возможных конфигураций равновероятны. Следовательно:

$$P\{A, B\} = \frac{1}{9} \quad (3.27)$$

$P\langle A^+, B^-, C^+ \rangle, P\langle A^+, B^-, C^- \rangle$ в формуле (3.26) – это вероятности генерации источником первой частицы соответствующего сорта. Эти вероятности нам неизвестны. С учётом (3.27) формулу (3.26) мы можем переписать так:

$$P[A^+, B^+] = \frac{1}{9} (P\langle A^+, B^-, C^+ \rangle + P\langle A^+, B^-, C^- \rangle) \quad (3.28)$$

Путём аналогичных рассуждений получим также следующие формулы:

$$\begin{aligned} P[B^-, C^-] &= \frac{1}{9} (P\langle A^+, B^-, C^+ \rangle + P\langle A^-, B^-, C^+ \rangle) \\ P[A^+, C^+] &= \frac{1}{9} (P\langle A^+, B^+, C^- \rangle + P\langle A^+, B^-, C^+ \rangle) \end{aligned} \quad (3.29)$$

Теперь сложим формулы (3.29):

$$P[B^-, C^-] + P[A^+, C^+] = \\ = \frac{1}{9} (P\langle A^+, B^-, C^+ \rangle + P\langle A^-, B^-, C^+ \rangle + P\langle A^+, B^+, C^- \rangle + P\langle A^+, B^-, C^- \rangle) \quad (3.30)$$

Сумма первого и четвёртого членов в правой части выражения – это вероятность $P[A^+, B^+]$ (3.28). Тогда получается:

$$P[B^-, C^-] + P[A^+, C^+] = P[A^+, B^+] + \frac{1}{9} (P\langle A^-, B^-, C^+ \rangle + P\langle A^+, B^+, C^- \rangle) \quad (3.31)$$

Значит, должно выполняться следующее неравенство:

$$P[A^+, B^+] \leq P[B^-, C^-] + P[A^+, C^+] \quad (3.32)$$

Это и есть искомое неравенство Белла.

Мы можем переписать его в таком виде, добножив обе части на общее количество попыток:

$$N[A^+, B^+] \leq N[B^-, C^-] + N[A^+, C^+] \quad (3.33)$$

где $N[\]$ – количество попыток ("выстрелов"), в которых получен результат соответствующего вида.

С точки зрения классического подхода это неравенство **должно выполняться при любых направлениях A , B , C .** Если в опыте выяснится, что это не так, значит, классический подход не состоятелен.

Теперь выведем аналогичное неравенство для квантового подхода. В этом случае частица, подлетевшая к прибору, не имеет "готовой программы", её спин не предопределён. Так что та частица запутанной пары, которая подлетела к своему прибору первой, "выбирает" плюс-канал или минус-канал случайно. При этом происходит "сеанс телепатии" между частицами пары: спин второй частицы ориентируется строго противоположно тому направлению спина, которое измерено для первой частицы. Например, если первая дала результат $[A^+]$, то вторая немедленно переключится из неопределенного состояния в определённое состояние $\langle A^- \rangle$. Рассчитаем вероятность исхода $[A^+, B^+]$ в квантовом подходе. Без ограничения общности предположим, что первым сработал П1, а вторым – П2. В таком случае вероятность исхода определяется произведением трёх вероятностей:

$$P[A^+, B^+] = P\{A, B\} \cdot P[A^+] P[\text{совп}] \quad (3.34)$$

где

$$P\{A, B\} = \frac{1}{9}, \text{ как мы выяснили выше.}$$

$P[A^+]$ – вероятность того, что первая частица попадёт в плюс-канал П1. Здесь выбор абсолютно случаен, и эта вероятность всегда равна $1/2$.

$P[\text{совп}]$ – вероятность совпадения результатов П1 и П2 для данной взаимной ориентации приборов. Можно показать, что её можно записать в следующем виде:

$$P[\text{совн}] = \sin^2\left(\frac{AB}{2}\right) \quad (3.35)$$

Здесь (AB) – угол между направлениями А и В. Теперь мы можем переписать формулу (3.34) так:

$$P[A^+, B^+] = \frac{1}{18} \sin^2\left(\frac{AB}{2}\right) \quad (3.36)$$

Рассуждая аналогичным образом, мы можем получить формулы для вероятностей следующих исходов:

$$\begin{aligned} P[B^-, C^-] &= \frac{1}{18} \sin^2\left(\frac{BC}{2}\right) \\ P[A^+, C^+] &= \frac{1}{18} \sin^2\left(\frac{AC}{2}\right) \end{aligned} \quad (3.37)$$

Теперь подставим полученные выражения (3.36, 3.37) в неравенство Белла (3.32) и сократив на общий множитель, получим:

$$\sin^2\left(\frac{AB}{2}\right) \leq \sin^2\left(\frac{BC}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{AC}{2}\right) \quad (3.38)$$

Классический подход утверждает, что неравенство (3.32) должно всегда выполняться, однако при использовании квантового подхода **можно выбрать такие взаимные ориентации направлений A, B, C, для которых это неравенство не выполняется.**

Например, это неравенство не выполняется для следующей комбинации углов:

$$AB = 240^\circ$$

$$BC = 60^\circ$$

$$AC = 300^\circ$$

Значит, для такой взаимной ориентации направлений в реальных опытах не должно выполняться и неравенство (3.32, 3.33) если квантовый подход верен, и должно выполняться, если верен классический подход. Эксперимент показывает, что неравенство Белла нарушается. Следовательно, «победа присуждается» квантовому подходу. А классический подход с его абсолютным детерминизмом и локальностью оказывается несостоятельным.

Поговорить про нелокальности в присутствии скрытых переменных

ЛЕКЦИЯ 4. ВОЛНЫ ВЕЩЕСТВА

Источники:

А. Мессиа, т. 1, гл. 2, §2, 3, 11-13

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 ω связана с энергией частицы E соотношением Эйнштейна $E = \hbar\omega$. Это открывает 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:

$$\psi(r, t) = \psi_0 e^{i \frac{pr - Et}{\hbar}} = \psi_0 e^{i(kr - \omega t)}, \quad (4.1)$$

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

$$E = \hbar\omega. \quad (4.2)$$

Волновой пакет. Групповая скорость.

Естественно поэтому сопоставить волну прямолинейному движению с энергией E в направлении k . Частица иммет конечные размеры, поэтому ей должна быть сопоставлена волна конечной протяженности. Плоская монохроматическая волна не удовлетворяет этому требованию. Но ему можно удовлетворить, если рассмотреть суперпозицию волн с близкими волновыми векторами (волновой пакет):

$$\psi(r, t) = \int f(k) e^{i(kr - \omega_k t)} dk, \quad (4.3)$$

где $f(k)$ имеет резкий максимум полушириной Δk в окрестности некоторой точки k_0 , т.е. пакет локализован в k -пространстве.

Как было отмечено выше, значение $|\psi(r, t)|^2 dr$ определяет вероятность обнаружения частицы в элементе объема dr конфигурационного пространства. Очевидно, что сумма вероятностей всех возможных значений координат должна быть равна единице, то есть

$$\int |\psi(r, t)|^2 dr = 1. \quad (4.4)$$

Это равенство представляет собой условие нормировки волновых функций.

Заметим: распределение амплитуд волн в пакете, которое задаётся функцией $f(k)$ равноценно с функцией $\psi(r, t)$ может быть использована для описания волнового пакета. В последнем случае говорят, что состояние частицы задано в координатном представлении, а при использовании функции $f(k)$ говорят о, как мы позже покажем, импульсном представлении.

Исследуем движение волнового пакета. Условие его локализованности в k -пространстве означает, что основной вклад в интеграл (4.3) даёт интервал $[k - \Delta k, k + \Delta k]$. Это приближение позволяет записать волновой пакет в следующем виде:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(k - k_0) e^{ikx - i\omega_k t} dk = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} f(k - k_0) e^{ikx - i\omega_k t} dk. \quad (4.5)$$

В данной окрестности мы можем также разложить частоту ω_k в ряд по степеням $k - k_0$:

$$\omega_k = \omega_{k_0} + \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0} (k - k_0) + \dots . \quad (4.6)$$

Введём новую переменную $\xi = k - k_0$:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_0 x - i\omega_{k_0} t} \int_{-\Delta k}^{\Delta k} f(\xi) e^{i\xi \left[x - \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0} t \right]} d\xi. \quad (4.7)$$

Видно, что квадрат модуля данной функции в любой момент времени можно выразить через её квадрат модуля в начальный момент:

$$|\psi(x, t)|^2 = \left| \psi \left(x - \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0} \cdot t, 0 \right) \right|^2 \quad (4.8)$$

А так как квадрат модуля функции определяет плотность вероятности нахождения частицы в окрестности заданной координаты, можно заключить, что рассмотренная волновая функция представляет собой некоторый профиль, движущийся равномерно со скоростью

$$v_g = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0}, \quad (4.9)$$

которая называется групповой скоростью волны. Именно эта скорость, а не фазовая скорость, должна быть отождествлена со скоростью частицы в классическом приближении. Последняя, как известно, может быть выражена следующим образом:

$$v = \frac{dE}{dp} \approx \frac{p}{m} \quad (4.10).$$

Сравнивая выражения (3.9) и (3.10), а также используя соотношение для энергии (4.2) мы можем найти соотношение де Бройля:

$$p = \hbar k = \frac{\hbar}{\lambda}. \quad (4.11)$$

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 (4.2) позволяет найти связь между динамическими переменными частицы и величинами, характеризующими ассоциированную ей волну:

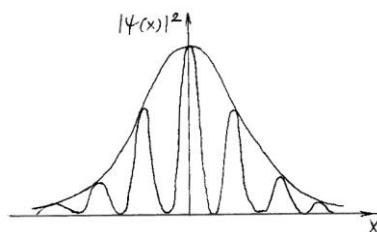
$$E = \hbar \omega, \quad p = \hbar k.$$

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:

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

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 более строгим способом.

Расплывание волнового пакета

Можно тезисно, не подробно и без вывода.

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 ω_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

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

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 Δx :

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

(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:

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

Модуляция амплитуды пакета определяется множителем

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

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.

Уравнение Шрёдингера

Мы рассмотрели основные свойства волнового пакета, который может описывать частицу и даже описали один из аспектов его эволюции - расплывание. Но изучаемые системы не ограничиваются свободными частицами с известными начальными формами волновых пакетов. Для полноценного описания природы нам необходимо получить уравнение эволюции волновой функции частиц в заданных внешних условиях. 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 Ψ 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 Ψ 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.

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 ψ_1 и ψ_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 ψ в данный начальный момент времени оказывается достаточным для определения последующей эволюции ψ , согласно гипотезе о том, что динамическое состояние физической системы полностью определяется заданием ψ .

Волновая теория позволяет без затруднений написать волновое уравнение для свободной частицы в нерелятивистском приближении. Действительно, волновая функция может быть представлена как суперпозиция плоских монохроматических волн $e^{i(\mathbf{p}\mathbf{r}-Et)/\hbar}$:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \int \psi_0(\mathbf{p}) F(\mathbf{p}) e^{i(\mathbf{p}\mathbf{r}-Et)/\hbar} d\mathbf{p}, \quad (3.33)$$

причем частота E/\hbar связана с волновым вектором p/\hbar соотношением, связывающим энергию и импульс частицы

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \quad (3.34)$$

Если частица находится в потенциальном поле, то выражение для энергии примет более общий вид:

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \quad (3.35)$$

Образуя частные производные от обеих частей равенства, получим последовательно следующие соотношения:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) &= \int E \cdot F(\mathbf{p}) e^{i(\mathbf{p}\mathbf{r}-Et)/\hbar} d\mathbf{p}, \\ -\hbar^2 \Delta \psi(\mathbf{r}, t) &= \int \mathbf{p}^2 F(\mathbf{p}) e^{i(\mathbf{p}\mathbf{r}-Et)/\hbar} d\mathbf{p}. \end{aligned} \quad (3.36)$$

В координатном представлении, действие потенциальной энергии $V(x)$ сводится к простому умножению каждой плоской волны в пакете на функцию координат $V(x)$:

$$V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}, t) = \int V(\mathbf{r}) \cdot F(\mathbf{p}) e^{i(\mathbf{p}\mathbf{r}-Et)/\hbar} d\mathbf{p}, \quad (3.37)$$

Подынтегральные выражения в уравнениях (3.36, 3.37) должны удовлетворять соотношению (3.35), и то же самое можно сказать и о самих интегралах, т.е. левых частях уравнения. Поэтому мы можем записать итоговое уравнение эволюции волновой функции:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}, t). \quad (3.38)$$

Данное соотношение является базовым и самым известным уравнением квантовой теории и называется **уравнения Шрёдингера**. Забегая вперёд, отметим, что в этой форме (3.38) называется **нестационарным уравнением Шрёдингера**.

ЛЕКЦИЯ 5.

Предельный переход

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 ϕ (последнюю называют в геометрической оптике эйконалом). Предельный случай геометрической оптики соответствует малым длинам волн, что математически выражается большой величиной изменения ϕ 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 ϕ 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 ϕ 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 ϕ безразмерно) и равна

$$\hbar = 1.05 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}$$

$$h = 2\pi\hbar = 6.63 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}$$

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

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

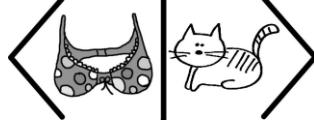
Рассказать про формулировку квантовой механики через интегралы по траекториям.

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

Наблюдаемые, собственные функции и значения

В классической физике для описания системы задавались все её динамические переменные. Однако, в квантовой механике задаётся только **состояние**, определяемое волновой функцией, и динамические переменные (**наблюдаемые**) необходимо каким-то образом извлекать из этого состояния. Что такое наблюдаемые? Это результат измерения соответствующей величины. Если перед измерением система находилась в суперпозиции состояний с различными значениями наблюдаемой, то при измерении происходит коллапс волновой функции до состояния с конкретным значением наблюдаемой.

Состояния в квантовой механике могут задаваться различными способами. Во втором разделе мы задавали их двух-компонентными векторами, в третьем мы вводили волновые функции, задавая их в виде функций от координат или волновых векторов. Есть более общая нотация записи состояния – так называемые дираковские обозначения. В данной нотации состояние формально записывается в таком виде: $|\Psi\rangle$, называемым **кет**-вектором, и под которым может пониматься как функция, так и вектор-столбец. Также вводится **бра**-вектор $\langle\Psi|$, который соответствует транспонированному и комплексно-сопряжённому вектору (или функции), описывающему состояние Ψ . При этом следующая комбинация $\langle\Psi|\Phi\rangle$ обозначает скалярное произведение векторов $\langle\Psi|$ и $|\Phi\rangle$, или свёртку функций, если **бра**- и **кет**-вектора соответствуют некоторой функции:

$$\langle\Psi|\Phi\rangle = \int \Psi^* \Phi dq$$


Далее в этом разделе мы постараемся записывать формулы в обеих нотациях для закрепления понимания связи между ними. Стоит отметить, что названия бра и кет произошли от разделения английского слова bracket на две части – *bra* и *ket*. В ранней русскоязычной традиции этот термин пробовали переводить как *ско* и *бка*, но названия не прижились.

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**.

Рассмотрим некоторую физическую величину f , характеризующую состояние квантовой системы. 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 Ψ_n (в дираковских обозначениях для сокращения мы можем опустить букву Ψ и под знаком кет-вектора написать просто номер состояния $|n\rangle$). Волновые функции Ψ_n называют собственными функциями данной физической величины f . Каждая из этих функций предполагается нормированной, так что

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

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

Если система находится в некотором произвольном состоянии с волновой функцией Ψ , 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 Ψ должна представлять собой линейную комбинацию тех из собственных функций Ψ_n , которые соответствуют значениям f_n , которые могут быть обнаружены с отличной от нуля вероятностью при измерении, произведенном над системой, находящейся в рассматриваемом состоянии. Поэтому в общем случае произвольного состояния функция Ψ 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 c_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 ($|c_n|^2$). 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:

$$\sum_n a_n a_n^* = \int \Psi \Psi^* dq. \tag{1}$$

С другой стороны, умножив на Ψ разложение $\Psi^* = \sum_n a_n^* \Psi_n^*$ (в Дираковских нотациях $\langle \Psi | = \sum_n c_m^* \langle n |$) комплексно сопряженной с Ψ функции Ψ^* 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 Ψ по собственным функциям Ψ_n определяются следующим выражением:

$$a_n = \int \Psi \Psi_n^* dq \quad (2)$$

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

Если подставить сюда разложение Ψ 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 Ψ_n . Таким образом, совокупность собственных функций Ψ_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, операторы

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):

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

Запишем f в виде выражения, которое содержало бы не коэффициенты разложения функции Ψ , а самую эту функцию. Поскольку в (3) входят произведения $a_n a_n^*$ то ясно, что искомое выражение должно быть билинейным по Ψ и Ψ^* . 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 Ψ . Мы определим \hat{f} так, чтобы интеграл от произведения $(\hat{f}\Psi)$ на комплексно сопряженную функцию Ψ^* 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:

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

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

$$\begin{aligned} (\hat{f}\Psi) &= \sum_n f_n c_n \Psi_n \\ \hat{f} |\Psi\rangle &\equiv \sum_n f_n c_n |\Psi_n\rangle \end{aligned} \quad (5)$$

Из (5) видно, что если функцией Ψ является одна из собственных функций Ψ_n (так что все c_n , кроме одного, равны нулю), то в результате действия на нее оператора \hat{f} эта функция просто умножается на собственное значение f_n , причем оператор предполагается действующим на написанное вслед за ним выражение):

$$\begin{aligned} \hat{f}\Psi_n &= f_n \Psi_n \\ \hat{f} |\Psi_n\rangle &= f_n |\Psi_n\rangle \end{aligned} \quad (6)$$

Таким образом, собственные функции данной физической величины f являются решениями уравнения на собственные значения оператора \hat{f} .

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

где f — постоянная, а собственные значения — это те значения постоянной f , при которых написанное уравнение имеет решения, удовлетворяющие требуемым условиям. 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 наблюдаемых посредством решения уравнений на собственные значения.

Таким образом, каждой физической величине в квантовой механике приводится в соответствие определенный линейный оператор, а решения уравнения на собственные значения дают спектр значений наблюдаемой и состояния (функции), соответствующие данному спектру.

Мы здесь говорили только об одной физической величине f , между тем как следовало бы говорить 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 . При этом, если эти величины измеримы одновременно, то у них есть общий набор собственных функций. Это легко видеть на следующем примере.

Важно! Одновременная измеримость величин f и g означает, что их последовательные измерения должны давать одни и те же результаты. Представим, что мы измерили величину f , получив значение f_1 . Затем мы измерим величину g у системы полученной в результате прошлого измерения, что даст нам значение g_n и состояние Φ_n . Если величины f и g одновременно измеримо, то последующее измерение f у системы в состоянии Φ_n даст величину f_n и состояние Φ_n , как и все последующие измерения f и g независимо от их последовательности. Т.е. мы можем задать состояние Φ_n для которого достоверно известны результаты измерений величин f и g . Таким образом, эти величины имеют общий набор собственных функций $\{\Phi_n\}$, соответствующий набору пар собственных значений $\{f_n, g_n\}$. Если бы набор функций не был общим, то на каждом этапе последовательных измерений входное состояние бы раскладывалось по собственным функциям соответствующего оператора, и выходное состояние случайно выбиралось бы с вероятностью, пропорциональной квадратам модулей коэффициентов разложения, и результат измерений был бы не детерминирован. Это и означало бы, что величины не измеримы одновременно, т.е. мы не можем задать состояние, для которого мы достоверно можем предсказать результат измерения обеих величин.

Ввести операторы физических величин – импульса, момента импульса и прочих!

Эрмитовые операторы

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 (4.7) комплексно ему сопряженному, получим соотношение

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

$$\langle \Psi | \hat{f} \Psi \rangle = \langle \Psi^* | \hat{f}^* \Psi^* \rangle \quad (4.12)$$

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:

$$\langle \Phi | \hat{f} \Psi \rangle = \langle \Psi^* | \tilde{\hat{f}} \Phi^* \rangle$$

$$\int \Phi (\hat{f} \Psi) dq = \int \Psi (\tilde{\hat{f}} \Phi) dq \quad (4.13)$$

где Φ, Ψ – две различные функции. Если выбрать в качестве функции Φ сопряженную с Ψ функцию Ψ^* , то сравнение с (4.12) показывает, что должно быть

$$\tilde{\hat{f}} = \hat{f}^* \quad (4.14)$$

Операторы, удовлетворяющие этому условию, называют **эрмитовыми**. Таким образом, операторы, соответствующие в математическом аппарате квантовой механики вещественным физическим величинам, должны быть эрмитовыми. Заметим, что хотя, мы исследовали вопрос действительности средних, мы можем применить данные рассуждения для любого состояния, в том числе собственного состояния оператора \hat{f} для которого среднее будет равно собственному значению. Из этого следует, что собственные значения эрмитовых операторов должны быть действительны.

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 Ψ_n, Ψ_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 Ψ_m^* , а равенство, комплексно сопряженное второму, – на Ψ_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 Ψ_n и Ψ_m .

Мы все время говорим здесь только об одной физической величине f , между тем как следовало бы говорить 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 Ψ_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:

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

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 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).

ЛЕКЦИЯ 6

Сложение и умножение операторов. Коммутаторы.

Определим теперь операции над операторами. Если \hat{f} и \hat{g} отвечают 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 \hat{f} и \hat{g} , как было отмечено выше, имеют общий набор собственных функций, 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 измеримы одновременно, 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:

$$\overline{f + g} = \bar{f} + \bar{g} \quad (6.1)$$

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 . Можно лишь сказать, 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).

Рассмотрим одновременно измеримые величины f и g . 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 $\hat{f}\hat{g}$. Действительно, если Ψ_n — общие собственные функции операторов \hat{f} и \hat{g} , то имеем

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

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 Ψ_n будет одинаковым. Но поскольку всякая волновая функция Ψ может быть представлена в виде линейной комбинации функций Ψ_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 говорят, как о коммутирующих друг с другом, а разность $\hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f}$ называют коммутатором операторов \hat{f} и \hat{g} и обозначают следующим образом:

$$[\hat{f}, \hat{g}] \stackrel{\text{def}}{=} \hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f} \quad (4.4)$$

Таким образом, мы приходим к важному результату: если две величины f и g могут иметь одновременно определенные значения (одновременно измеримы), то их операторы коммутативны друг с другом, их коммутатор равен 0.

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.

Может быть доказана и обратная теорема: если операторы \hat{f} и \hat{g} коммутативны, то у их 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 . Также можно ввести оператор \hat{f}^{-1} , называемый обратным оператору \hat{f} . В результате

последовательного воздействия операторов \hat{f} и \hat{f}^{-1} на произвольную функцию последняя остается неизменной $\hat{f}\hat{f}^{-1}\Psi = \Psi$, 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 описанного 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 Ψ , а оператор \hat{g} на Φ , так что под интегралом стоит просто произведение двух функций: $\hat{g} \Phi$ и $\tilde{\hat{f}} \Psi$. Применив еще раз определение транспонированного оператора, пишем

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

Таким образом, мы получили интеграл, в котором по сравнению с первоначальным функции Φ и Ψ 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 не коммутирующих эрмитовых операторов можно составить эрмитов же оператор — их **симметризованное произведение**

$$\frac{1}{2} (\hat{f} \hat{g} + \hat{g} \hat{f}) \quad (4.34)$$

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 комплексно сопряженному [К содержанию](#))

взятыому с обратным знаком). Он может быть сделан эрмитовым умножением на мнимую единицу i ; таким образом,

$$i(\hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f}) \quad (4.35)$$

есть уже эрмитов оператор.

Легко убедиться в следующих базовых свойствах коммутаторов:

1. Антикоммутативность:

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

2. Дистрибутивность

$$[\alpha\hat{A} + \beta\hat{B}, \hat{C}] = \alpha[\hat{A}, \hat{C}] + \beta[\hat{B}, \hat{C}]$$

3. Следующее тождество:

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

4. Тождество Якоби в форме 1:

$$[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0$$

5. Тождество Якоби в форме 2:

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{B}\hat{C}, \hat{A}] + [\hat{C}\hat{A}, \hat{B}] = 0$$

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.

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 неопределенность 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 действительных α :

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

Будем считать, что $\psi(x)$ определяет локализованный нормированный волновой пакет.

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 α) трехчлен был положительным при любых значениях α , его дискриминант должен быть отрицательным. Отсюда получаем неравенство:

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

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 Ψ_f . Подобно тому как произвольная волновая функция Ψ 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 Ψ_f таким образом, чтобы $\left|a_f\right|^2 df$ представляло собой вероятность рассматриваемой физической величине иметь в состоянии, описываемом волновой функцией Ψ , значение в заданном интервале между f и $f + df$. Поскольку сумма вероятностей всех возможных значений f должна быть равна единице, то имеем

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

(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,

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

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

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

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 ничто иное, как δ -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 Ψ_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. Заметим, что в дискретном спектре при равенстве чисел f и f' в правой части (5.4) стоит 1. Другими словами, волновые функции нормированы на 1. В непрерывном же случае при $f = f'$ в правой части стоит бесконечность (дельта-функция от 0). В этом случае говориться, что функции нормированы на дельта-функцию.

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 7

Гамильтониан

Волновая функция Ψ 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 Ψ 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):

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

Поскольку это равенство должно выполняться для произвольной функции Ψ , 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 Лекции 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

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

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

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

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

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

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{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 $\dot{f} = 0$.

Такие величины называют сохраняющимися. Для них $\bar{\hat{f}} = \dot{\hat{f}} = 0$, т. е. $\bar{f} = const$. 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 Ψ_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 Ψ_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 ψ_n — функция только координат. Этим определяется зависимость волновых функций стационарных состояний от времени.

Малой буквой ψ 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 Ψ 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 ψ 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 ψ ; 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 ψ :

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

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 Ψ_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 Ψ по собственным функциям Ψ_n :

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

Умножим это уравнение с обеих сторон на Ψ_n^* и проинтегрируем по dq :

$$\sum_m c_m \int \Psi_n^* \hat{f} \Psi_m dq = \sum_m f c_m \int \Psi_n^* \Psi_m dq$$

$$\sum_m c_m \langle \Psi_n | \hat{f} \Psi_m \rangle = \sum_m f c_m \langle \Psi_n | \Psi_m \rangle$$

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

$$\sum_m c_m f_{nm} = \sum_m f c_m \delta_{nm} \quad (11.13)$$

Или:

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

Выражение (11.13) есть не что иное, как уравнение на собственные значения матрицы f_{nm} . Решение этого уравнения даёт спектр собственных значений и собственных векторов (состояний) величины f . Так, например, известно, что система типа (11.13, 11.14) 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) представляют собой возможные собственные значения величины f . Совокупность же величин c_m , удовлетворяющих уравнениям (11.14) с f , равным какому-либо из этих значений, определяет соответствующий собственный вектор (состояние) величины f .

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

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

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

Волновые функции Ψ и Ψ^* заменяются на матрицы-столбцы и матрицы-строчки:

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

В этом случае говорится, что оператор \hat{A} задан на пространстве собственных функций оператора \hat{B} матрицей чисел A_{mn} . Так, 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 8

Свойства решений одномерного уравнения Шрёдингера

Стационарное уравнение Шрёдингера является линейным дифференциальным уравнением второго порядка с переменными коэффициентами. Оно гораздо сложнее, чем уравнение движения в классической механике, которое в одномерном случае элементарно интегрируется. Со своей стороны, даже в этом простом случае уравнение Шрёдингера имеет аналитическое решение лишь для небольшого набора потенциалов $V(x)$. Задачу усложняет также то, что данное уравнение является уравнением на собственные значения, что дополнительно затрудняет его анализ и численное решение. В данном разделе мы обсудим общие свойства одномерного уравнения Шрёдингера. В наиболее привычной записи оно имеет следующий вид:

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

Данное уравнение можно переписать в более удобном для дальнейшего анализа 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 видели, отвечает локализованному решению – на бесконечности волновая функция быстро стремится к нулю. Покажем, что в случае дискретного случая вырождения в одномерной системе невозможно. Для этого напомним, что функции, отличающиеся на постоянный множитель, соответствуют одним и тем же состояниям. Пусть две функции Ψ_1 и Ψ_2 отвечают одному уровню энергии тогда, согласно (5.15) можем записать:

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

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

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

Это тождество должно быть верно при всех x . Но мы рассматриваем локализованные решения, зануляющиеся на бесконечности, поэтому константа в правой части должна быть равна нулю. Это приводит нас к следующему уравнению:

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

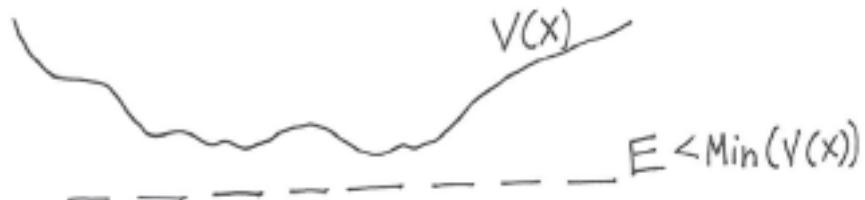
Интегрируя еще раз, получим $\Psi_1 = c\Psi_2$, т. е. обе функции совпадают с точностью до умножения на константу, что соответствует одинаковым состояниям. Таким образом, мы показали, что в одномерном уровне энергии дискретного спектра (соответствующие локализованным состояниям) невырождены.

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 Ψ 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.

Границные условия.

Полное решение дифференциального уравнения требует задания граничных условий. Более того, мы нередко будем пользоваться разрывными потенциалами, и даже более экзотическими – содержащими дельта-функцию. Поэтому нужно сформировать список ограничений, накладываемых на волновую функцию.

- В случае дискретного спектра, т.е. локализованных состояний, таких состояний, полная энергия которых меньше, чем асимптотика потенциальной энергии на бесконечности, волновая функция должна стремиться к нулю достаточно быстро при больших значениях координаты. Слова «достаточно быстро» означают, что

нормировочный интеграл $\int \Psi^* \Psi dV$ должен сходиться. Для одномерия, например, это условие требует, чтобы волновая функция убывала быстрее, чем $\frac{1}{\sqrt{x}}$.

- В любых потенциалах, которые мы будем рассматривать, волновая функция должна быть непрерывно, что следует из уравнения Шредингера.
- В любых потенциалах, которые на обращаются в бесконечность, производная волновой функции должна быть непрерывна. Это можно показать 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 δ к нулю, правая часть зануляется. В левой части интеграл берётся, и мы получим:

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

что является определением непрерывности производной функции. Если потенциал обращается в бесконечность где-нибудь, то надо быть осторожным. Мы рассмотрим такие случаи в следующем разделе.

Яма с бесконечно высокими стенками

В этом разделе на примере простых одномерных потенциалов мы рассмотрим основные методы и подходы решения уравнения Шредингера для подобных систем. Начнём мы с задачи о так называемой яме с бесконечно высокими стенками – частице, движение которой ограничено отрезком $x \in [0, a]$. На концах отрезка ($x = 0$ и $x = a$) находятся твердые стенки, препятствующие продвижению частицы во внешнюю область. Потенциал такой системы может быть записан в следующем виде (см. рис. 6.1):

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a \\ \infty, & x \leq 0, \quad x \geq a \end{cases} \quad (6.1)$$

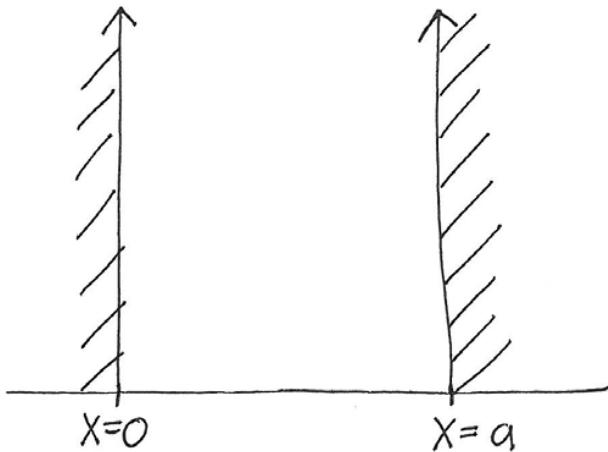


Рисунок 6.1. Потенциал ямы с бесконечно высокими стенками.

Рассмотрим, какие граничные условия на волновую функцию накладывает данный потенциал. Вообще, как мы видели выше, в квантовой механике, в отличие от классической, частица может находиться в областях, где потенциал превышает энергию частицы, главное, чтобы волновая функция стремилась к нулю на бесконечности. Но рассматриваемый здесь потенциал накладывает более жёсткие ограничения – отсутствие частицы вне отрезка $[0, a]$. Это означает, что её волновая функция в этой области должна быть равна нулю, ведь именно $|\psi(x)|^2$ даёт плотность вероятности обнаружить частицу в окрестности точки x :

$$\psi(x) = 0, \quad x \notin [0, a] \quad (6.2)$$

Непрерывность волновой функции требует зануления волновой функции на концах отрезка:

$$\begin{aligned} \psi(0) &= 0, \\ \psi(a) &= 0. \end{aligned} \quad (6.3)$$

Теперь обратимся к вопросу о производной волновой функции. Она тождественно равна нулю вне рассматриваемого интервала, и условие непрерывности говорит о том, что она должна равняться нулю и на концах отрезка $[0, a]$. Но мы оговаривались, что условие непрерывности производной волновой функции выполняется для потенциалов, не обращающихся в бесконечность, что не является нашим случаем. Более того, решение уравнения Шредингера (дифференциального уравнения второго порядка), для которого и волновая функция, и ее производная равны нулю в какой-либо точке, тождественно равно нулю. Поэтому, если решение существует, а оно должно быть – никакие физические законы не запрещают нахождение частицы между двух бесконечно высоких стенок, – мы должны признать, что производная волновой функции у стенок должна быть разрывна. Поэтому мы не накладываем никаких граничных условий на неё.

В области $x \in [0, a]$ потенциал обращается в ноль и уравнение Шредингера принимает вид:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi. \quad (6.4)$$

Как мы показывали ранее, энергия E должна быть положительной. Это позволяет произвести следующую замену переменных:

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \rightarrow E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (6.5)$$

Вид дифференциального уравнения упрощается:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi, \quad (6.6)$$

а его общее решение можно записать в следующем виде:

$$\psi(x) = c_1 \cos(kx) + c_2 \sin(kx) \quad (6.7)$$

с неопределёнными константами c_1 и c_2 , которые будут найдены из граничных условий. Условие $\psi(0) = 0$ означает, что коэффициент c_1 в (6.7) должен быть равен нулю. Следовательно, искомое решение выглядит так:

$$\psi(x) = c_2 \sin(kx) \quad (6.8)$$

Теперь мы наложим второе граничное условие $\psi(a) = 0$:

$$c_2 \sin(ka) = 0. \quad (6.9)$$

Это простое тригонометрическое уравнение имеет следующее решение:

$$ka = n\pi \rightarrow k_n = \frac{n\pi}{a}, \quad (6.10)$$

где n – целое число. Итого, искомая волновая функция принимает следующий вид:

$$\psi_n(x) = N \sin\left(\frac{\pi nx}{a}\right), \quad (6.11)$$

где N – нормировочная константа. Все ли целые числа n дают нам независимые решения уравнения Шрёдингера? Очевидно, что значение $n = 0$ неприемлемо, так как это приводит к тому, что волновая функция тождественно равна нулю, и означает отсутствие частицы вообще. Это решение тривиальное. Числа n и $-n$ дают одну и ту же волновую функцию с точностью до знака. Поскольку волновые функции, отличающиеся постоянным множителем, соответствуют одному состоянию, мы должны учитывать n только с одним знаком. Мы ограничимся $n > 0$.

Чтобы найти коэффициент N , мы используем условие нормировки:

$$1 = N^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{\pi nx}{a}\right) dx = N^2 \frac{1}{2} a \rightarrow N = \sqrt{\frac{2}{a}}. \quad (6.12)$$

Итого, полное решение уравнение Шрёдингера может быть записано в следующем виде:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi n x}{a}\right), \quad E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (6.13)$$

Каждое значение n дает разную энергию, что означает, что в одномерной бесконечной яме нет вырожденных уровней энергий, что подтверждает теорему, которую мы доказали в прошлом разделе. **Основное состояние** – состояние с наименьшей энергией – соответствует $n = 1$ и имеет ненулевую энергию.

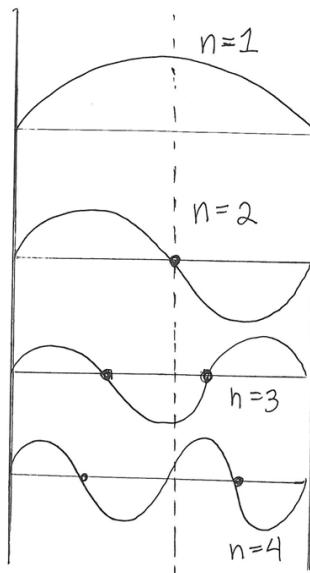


Рис. 2. Четыре собственных состояния с наименьшей энергией в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Решение n -й волновой функции ψ_n имеет $(n - 1)$ узлов. Решения попарно симметричны и антисимметричны относительно середины отрезка существования частицы $x = a/2$.

На рисунке 2 показаны первые четыре собственных состояния в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Отметим несколько особенностей найденного решения:

1. Основное состояние $n = 1$ не имеет узлов, т. е. нулей волновой функции, которые не находятся на концах области её определения (нули в $x = 0$ и $x = a$ не считаются узлами). На самом деле можно сделать более общее утверждение – любое нормируемое основное состояние одномерного потенциала не имеет узлов.

Первое возбужденное состояние, $n = 2$, имеет один узел. Он находится в точке $x = a$, в середине интервала. Второе возбужденное состояние, $n = 3$, имеет два узла. Далее картина продолжается аналогичным образом – в n -м возбужденном состоянии будет n узлов. Как мы отмечали такое поведение описывается осцилляционной теоремой и верно для любого локализующего одномерного потенциала.

2. На рисунке 3 пунктирной вертикальной линией отмечена середина интервала $x = a$. Видно, что основное состояние симметрично относительно этой точки. Первое возбужденное состояние антисимметрично, а второе возбужденное снова симметрично. Симметричные и антисимметричные состояния всегда чередуются. Это утверждение верно для любого симметричного одномерного потенциала.

3. Волновые функции $\psi_n(x)$ с $n = 1, 2, \dots$ образуют полный набор, который можно использовать для разложения любой функции на отрезке $[0, a]$, обращающейся в нуль на концах отрезка.

Рассмотренная задача является основой ряда эффектов в твёрдых телах, т. к. они являются естественными примерами этой простой модели. Действительно, носители заряда в твёрдых телах – металлах или полупроводниках – свободны и ограничены в своём движении границами тела. Хотя они и могут покинуть твёрдое тело при определённых условиях (см. например фотоэффект или термоэлектрический эффект), но всё же барьер на уход настолько высок, что при обычных условиях вероятностью преодоления барьера частицами можно пренебречь, и считать его бесконечным.

В образцах большого размера рассмотренный эффект приводит к тому, что спектр электронов в твёрдом теле является не непрерывным, как это было бы для свободных частиц, а «квази-непрерывным». Это означает, что энергетический спектр дискретен, но расстояние между уровнями настолько мало, что это практически не заметно кроме одного важного проявления. Минимизируя свою полую энергию, в непрерывном спектре электроны бесконечно плотно расположились бы у основного состояния, а в дискретном спектре (несколько электронов будучи в одном состоянии не могут занимать один и тот же уровень энергии) из-за своего большого количества, они вынуждены подниматься достаточно высоко по энергетической лестнице, достигая так называемого «уровня Ферми».

В телах малых размеров (нанометрового масштаба) дискретность уровней уже начинает проявлять себя более явно, что приводит к так называемым эффектам размерного квантования – термодинамические и кинетические свойства подобных кристаллов начинают отличаться от свойств крупных образцов. Данный эффект применяется в частности «квантовых точках» – фрагментах проводника или полупроводника, носители заряда которого ограничены в пространстве по всем трём измерениям, – которые используются в том числе в некоторых современных мониторах, и являются перспективными материалами в медицине, биологии, оптике, оптоэлектронике, микроэлектронике, полиграфии, энергетике.

ЛЕКЦИЯ 9

Осцилляционная 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 ψ_n has $(n - 1)$ nodes (zeroes). (The points $x = 0$ and $x = a$ are not nodes, but rather endpoints.)

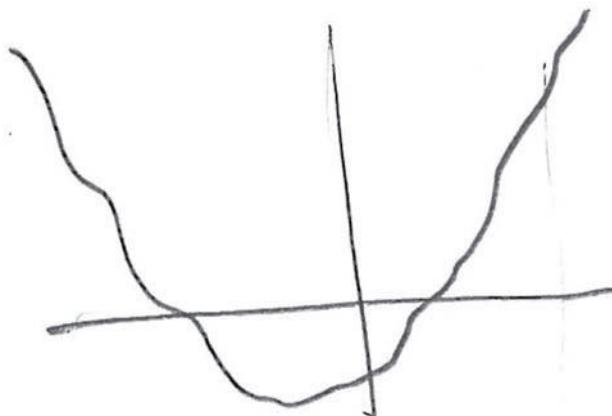


Figure 3: A smooth potential that goes to infinity as $|x| \rightarrow \infty$.

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 ψ_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.

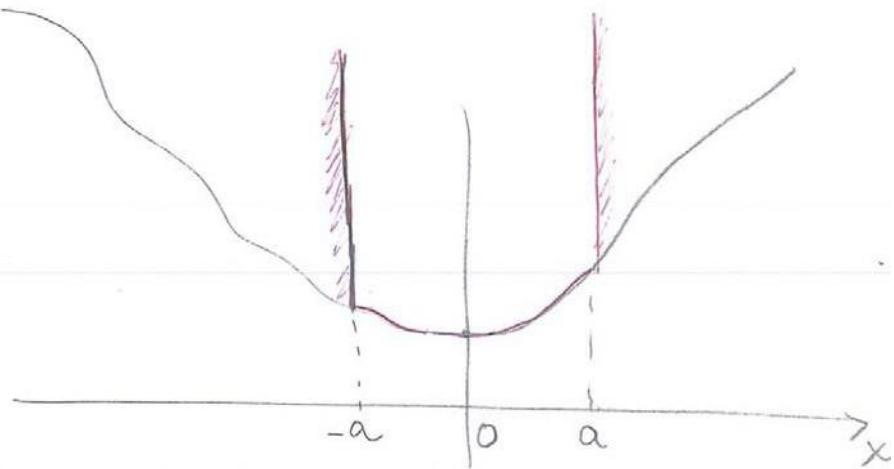


Figure 4: The screened potential $V_a(x)$.

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 ψ' at one of the endpoints must change. In the case shown it is the right endpoint that experiences a change in the sign of ψ' . 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.

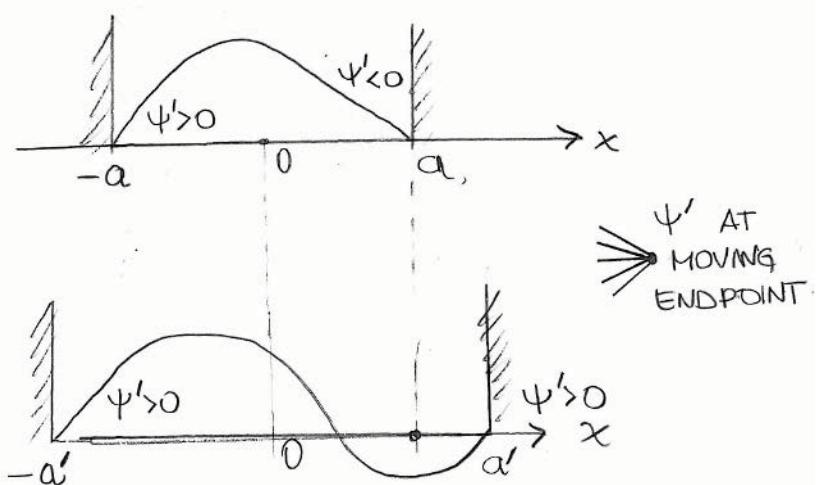


Figure 5: Introducing a single node requires changing the sign of the derivative at the right endpoint: $\psi'(a) < 0$ but $\psi'(a') > 0$. At some intermediate screen, the value of ψ' at the right endpoint must become zero. But this is impossible.

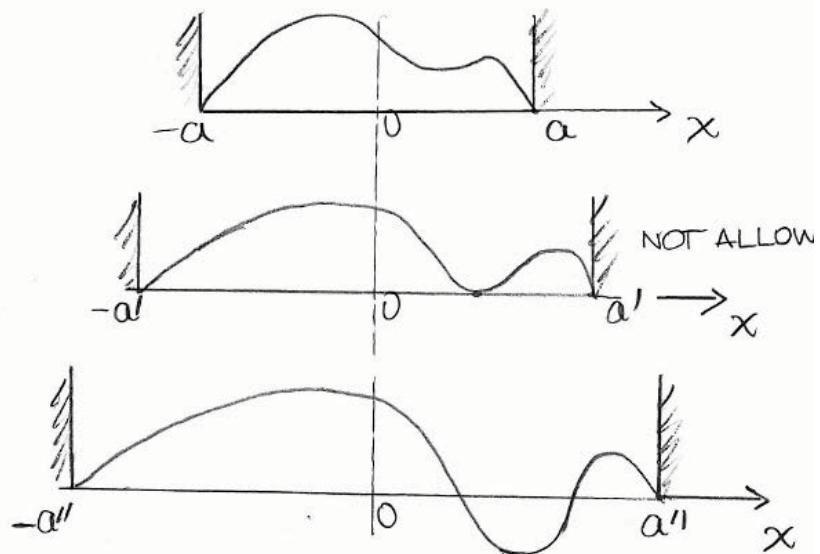


Figure 6: Introducing two nodes by having the wavefunction cross the x -axis in between the two boundaries (compare top and bottom). This is not possible as it would require in an intermediate screen (middle) in which $\psi = \psi' = 0$ at some point.

It is possible to introduce nodes without changing the sign of ψ' 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.

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 используя 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 вектор¹⁾

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

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

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

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.

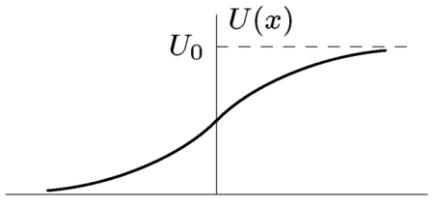
Интеграл от этого вектора по поверхности есть вероятность того, что в течение единицы времени частица пересечет эту поверхность. Вектор \mathbf{j} и плотность вероятности $|\Psi|^2$ удовлетворяют уравнению.

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

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:

$$\text{при } x \rightarrow \infty : \quad \psi \approx A e^{ik_2 x}, \quad k_2 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - U_0)}$$

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

$$\text{при } x \rightarrow -\infty : \quad \psi \approx e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x}, \quad k_1 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}.$$

Первый член соответствует падающей на стенку частице (предполагаем φ 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 $R = 1 - D$:

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

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 сшиты 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 сшивку 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-функционального 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:

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

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

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

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

Видно, что при увеличении массы частицы (классический предел) или силы потенциала α 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 10. ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР I.

Гармонический осциллятор. Решение УШ.

22.11 Правил отсюда до конца осциллятора

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 $\varepsilon\Psi$ и уравнение приобретет вид

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

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

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

Сохраняя только старшие по ξ 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 Ψ 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 ξ^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 ξ^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:

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

Если рассмотреть, например, чётные элементы, мы можем сделать такую замену:

$$n = 2k$$

$$\begin{aligned} b_k &= a_{2k} = a_n \\ b_{k+1} &= a_{2(k+1)} = a_{2k+2} = a_{n+2} \end{aligned} .$$

Тогда, соотношение (8) превращается в $\frac{b_{k+1}}{b_k} \approx \frac{1}{k}$, что немедленно выдаёт явное выражение для $b_k \approx \frac{1}{(k-1)!}$. Можно подойти с другой стороны, и рассмотреть 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^{ξ^2} .

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 Шрёдингера 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 $n = 0, 1, 2$:

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

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 11. 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. Напомним, что $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \cdot 1$ – 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

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

and this is the left-most factor in the product! We can therefore rewrite (1.2) as

$$\hat{x}^2 + \frac{\hat{p}^2}{m^2\omega^2} = V^\dagger V + \frac{\hbar}{m\omega} 1. \quad (1.5)$$

and therefore, back in the Hamiltonian (1.1) we find,

$$\hat{H} = \frac{1}{2}m\omega^2 V^\dagger V + \frac{1}{2}\hbar\omega \cdot 1. \quad (1.6)$$

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 $V^\dagger V$. We note that the commutator of V and V^\dagger is simple

$$\begin{aligned} [\hat{V}, \hat{V}^+] &= \left[\hat{x} + \frac{i\hat{p}}{m\omega}, \hat{x} - \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right] = [\hat{x}, \hat{x}] - \frac{i}{m\omega} [\hat{x}, \hat{p}] + \frac{i}{m\omega} [\hat{p}, \hat{x}] + \frac{1}{m\omega} [\hat{p}, \hat{p}] = \\ &= -\frac{i}{m\omega}(i\hbar) + \frac{i}{m\omega}(-i\hbar) = \frac{2\hbar}{m\omega} 1. \end{aligned} \quad (1.7)$$

This implies that

$$\left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{V}, \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{V}^+ \right] = 1.. \quad (1.8)$$

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

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1. \quad (1.10)$$

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 ψ 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 ψ 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 ϕ_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 φ_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

$$\hat{N} \varphi_0 = 0. \quad (2.1)$$

Напомним, что $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$. We can quickly check that

$$[\hat{N}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger \hat{a}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}] \hat{a} = -\hat{a} \quad (2.2)$$

Последнее можно следовать из следующей цепочки выражений:

$$[AB, B] = ABB - BAB = (AB - BA)B = [A, B]B$$

which we summarize as

$$\begin{aligned} [\hat{N}, \hat{a}] &= -\hat{a} \\ [\hat{N}, \hat{a}^+] &= \hat{a}^+ \end{aligned} \tag{2.3}$$

Вторую строку из (2.3) можно легко доказать, взяв эрмитове сопражение первой строчки, и использовав соотношение $([A, B])^+ = -[A^+, B^+]$, которое легко доказывается:

$$([A, B])^+ = (AB)^+ - (BA)^+ = B^+ A^+ - A^+ B^+ = [B^+, A^+] = -[A^+, B^+]$$

Для коммутатора произведения операторов можно записать следующее выражение (доказывается легко раскрытием всех коммутаторов):

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$$

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 ψ and we aim to simplify the action of $\hat{A}\hat{B}$, where \hat{B} is another operator, acting on ψ . Here is the result

$$\text{If } \hat{A}\psi = 0, \text{ then } \hat{A}\hat{B}\psi = [\hat{A}, \hat{B}]\psi. \tag{2.6}$$

This is easily proved. First note that

$$\hat{A}\hat{B} = [\hat{A}, \hat{B}] + \hat{B}\hat{A}, \quad (2.7)$$

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 ϕ_0 consider acting on the ground state with \hat{a}^+ . It is clear that \hat{a}^+ cannot also annihilate ϕ_0 . If that would happen acting with both sides of the commutator identity $[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$ on ϕ_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, ϕ_1 is an eigenstate of the operator \hat{N} with eigenvalue $N = 1$. Since ϕ_0 has \hat{N} eigenvalue zero, the effect of acting on ϕ_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 ϕ_1 it follows that ϕ_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 $\varphi_n \equiv (\hat{a}^+)^n \varphi_0$ также является собственной функцией оператора \hat{N} . Подействуем оператором \hat{N} на функцию φ_n :

$$\hat{N}\varphi_n = \hat{N}(\hat{a}^+)^n \varphi_0 = \left[\hat{N}, (\hat{a}^+)^n \right] \varphi_0 = n(\hat{a}^+)^n \varphi_0 = n\varphi_n, \quad (2.13)$$

Thus, φ_n is an eigenstate of the operator \hat{N} with eigenvalue $N = n$. Since $N = n$ for φ_n it follows that φ_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 φ_1 is properly normalized:

$$\langle \varphi_1 | \varphi_1 \rangle = \langle \hat{a}^+ \varphi_0 | \hat{a}^+ \varphi_0 \rangle = \langle \varphi_0 | \hat{a} \hat{a}^+ \varphi_0 \rangle, \quad (2.15)$$

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

$$\langle \varphi_1 | \varphi_1 \rangle = \langle \varphi_0 | \hat{a} \hat{a}^+ \varphi_0 \rangle = \langle \varphi_0 | [\hat{a} \hat{a}^+] \varphi_0 \rangle = \langle \varphi_0 | \varphi_0 \rangle = 1, \quad (2.16)$$

where we used (2.6) in the evaluation of $\hat{a} \hat{a}^+ \varphi_0$. Indeed, the state φ_1 is correctly normalized.

Next consider the state $\varphi_n = (\hat{a}^+)^n \varphi_0$

$$\langle \varphi_n | \varphi_n \rangle = \left\langle (\hat{a}^+)^n \varphi_0 \middle| (\hat{a}^+)^n \varphi_0 \right\rangle = \left\langle \varphi_0 \middle| \hat{a}^n (\hat{a}^+)^n \varphi_0 \right\rangle, \quad (2.17)$$

Вспомним, что $\hat{A}\hat{B}\psi = [\hat{A}, \hat{B}]\psi$ если $\hat{A}\psi = 0$. Учитывая, что $\hat{a}\varphi_0 = 0$, мы можем аналогично записать:

$$\hat{a}^n (\hat{a}^+)^n \varphi = \hat{a}^{n-1} \hat{a} (\hat{a}^+)^n \varphi_0 = \hat{a}^{n-1} [\hat{a}, (\hat{a}^+)^n] \varphi_0 = n \hat{a}^{n-1} (\hat{a}^+)^{n-1} \varphi_0 \quad (2.18)$$

В последнем равенстве использовали соотношения (2.5). Повторяя эту операцию, получим:

[К содержанию](#)

$$\hat{a}^n \left(\hat{a}^+ \right)^n \varphi = n! \varphi_0 \quad (2.19)$$

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 ϕ_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 ϕ_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}^+ acting on φ_0 because the \hat{a} eliminates one of the creation operators in ϕ_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

$$\hat{a}\varphi_n = \frac{n}{\sqrt{n!}} \sqrt{(n-1)!} \varphi_{n-1} = \sqrt{n} \varphi_{n-1}. \quad (2.23)$$

By the action of \hat{a}^+ on ϕ_n we get

$$\hat{a}^+ \varphi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^+)^{n+1} \varphi_0 = \frac{1}{\sqrt{n!}} \sqrt{(n+1)!} \cdot \varphi_{n+1} = \sqrt{n+1} \cdot \varphi_{n+1}. \quad (2.24)$$

Collecting the results, we have

$$\begin{aligned} \hat{a} \varphi_n &= \sqrt{n} \varphi_{n-1}, \\ \hat{a}^+ \varphi_n &= \sqrt{n+1} \cdot \varphi_{n+1} \end{aligned} \quad (2.25)$$

These relations make it clear that \hat{a} lowers the number of any energy eigenstate by one unit, except for the vacuum ϕ_0 which it kills. The raising operator \hat{a}^+ increases the number of any eigenstate by one unit.

Exercise: Calculate the uncertainty Δx of position in the n -th energy eigenstate.

Solution: By definition,

$$(\Delta x)_n^2 = \langle \hat{x}^2 \rangle_{\varphi_n} - \langle \hat{x} \rangle_{\varphi_n}^2 \quad (2.26)$$

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:

$$\langle \hat{x} \rangle_{\varphi_n} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle \varphi_n | (\hat{a}^+ + \hat{a}) \varphi_n \rangle, \quad (2.27)$$

using the formula for \hat{x} in terms of \hat{a} and \hat{a}^+ . The above overlap vanishes because $\hat{a}\varphi_n \sim \varphi_{n-1}$ and $\hat{a}^+\varphi_n \sim \varphi_{n+1}$, and both φ_{n-1} and φ_{n+1} are orthogonal to φ_n . Now we compute the expectation value of \hat{x}^2

$$\begin{aligned} \langle \hat{x}^2 \rangle_{\varphi_n} &= \langle \varphi_n | \hat{x}^2 \varphi_n \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \varphi_n | (\hat{a}^+ + \hat{a})(\hat{a}^+ + \hat{a}) \varphi_n \rangle = \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \varphi_n | (\hat{a}^+ \hat{a}^+ + \hat{a}^+ \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^+ + \hat{a} \hat{a}) \varphi_n \rangle \end{aligned} \quad (2.28)$$

Since $\hat{a}\hat{a}\varphi_n \sim \varphi_{n-2}$ and $\hat{a}^+\hat{a}^+\varphi_n \sim \varphi_{n+2}$, and both φ_{n-2} and φ_{n+2} are orthogonal to φ_n , the $\hat{a}\hat{a}$ and $\hat{a}^+\hat{a}^+$ terms do not contribute. We are left with

$$\langle \hat{x}^2 \rangle_{\varphi_n} = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \varphi_n | (\hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger) \varphi_n \rangle \quad (2.29)$$

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:

$\hat{p} = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (\hat{a}^\dagger - \hat{a})$, получим:

$$\langle \hat{p}^2 \rangle_{\varphi_n} = \frac{m\omega\hbar}{2} \langle \varphi_n | (\hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger) \varphi_n \rangle = (\Delta p)_n^2 = m\omega\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

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 $\omega_{mn} = \pm\omega$. Заметим, что матрица ω_{mn} – это матрица разностей энергий, поэтому если для какой-то $\omega_{mn} = \pm\omega$, то для той же m и других n' $\omega_{mn'} \neq \pm\omega$. 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 $x_{n,n\mp 1}$. Рассматриваемый потенциал имеет минимум, поэтому должен существовать минимальный уровень энергии, который мы обозначим $n = 0$. Состояний с энергией $n < 0$ не существует, поэтому, соответствующие матричные элементы должны быть равны нулю (например $x_{0,-1} = 0$). Будем предполагать, что волновые функции ψ_n выбраны вещественными. Поскольку x есть величина вещественная, то такими же будут и все матричные элементы x_{mn} . Условие эрмитовости оператора координаты приводит теперь к тому, что матрица x_{mn} симметрична:

$$x_{mn} = x_{nm}$$

Для вычисления отличных от нуля матричных элементов координаты воспользуемся правилом коммутации

$$\hat{x}\hat{x} - x\hat{\hat{x}} = -i\frac{\hbar}{m}$$

написав его в матричном виде

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

Рассмотрим $m = n$. С помощью правила умножения матриц имеем отсюда:

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

Здесь мы использовали условие симметричности матриц наблюдаемых (см. выше). 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 рекуррентных 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 12. 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

$$\begin{aligned}\{\hat{l}_i, \hat{p}_k\} &= ie_{ikl}\hat{p}_l. \\ \hat{l}_x\hat{l}_y - \hat{l}_y\hat{l}_x &= i\hat{l}_z; \\ \hat{l}_y\hat{l}_z - \hat{l}_z\hat{l}_y &= i\hat{l}_x; \\ \hat{l}_z\hat{l}_x - \hat{l}_x\hat{l}_z &= i\hat{l}_y;\end{aligned}\tag{26.5}$$

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:

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2.\tag{26.9}$$

Этот оператор коммутативен с каждым из операторов $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$:

$$\{\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_x\} = 0, \quad \{\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_y\} = 0, \quad \{\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z\} = 0.\tag{26.10}$$

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 \mathbf{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 ψ_m волновые функции стационарных состояний с одинаковым значением квадрата \mathbf{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 \mathbf{L}^2) значение $|M|$. Самый факт существования такого верхнего предела следует из того, что разность $\mathbf{L}^2 - L_z^2 = L_x^2 + L_y^2$ 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 оператор \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:

$$\hat{L}_z \hat{L}_\pm \Psi_M = (M \pm 1) \hat{L}_- \Psi_M.$$

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 13. 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 Δr , так, чтобы Δr росло пропорционально r_0 : $\Delta r = \beta r_0$. Такая связь накладывается в виду того, что неопределенность 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 Шредингера.

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 Δ_1, Δ_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;

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)}\Delta_R - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(r) \quad (32.3)$$

(Δ_R и Δ — 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 ψ , а следовательно, и ее радиальная часть $R(r)$. **Отсюда следует, что $\chi(r)$ должна обращаться 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 χ , определяющееся интегралом

$$\int_0^\infty |R|^2 r^2 dr = \int_0^\infty |\chi|^2 dr.$$

ЛЕКЦИЯ 14. ДВИЖЕНИЕ В КУЛОНОВСКОМ ПОЛЕ.

Движение в кулоновском поле

Очень важным случаем движения в центрально-симметричном поле является движение в притягивающем кулоновом поле

$$U = -\frac{\alpha}{r}$$

(α — положительная постоянная). Как мы обсуждали ранее, спектр отрицательных собственных значений энергии будет дискретным, ограниченным снизу (с бесконечным числом уровней, приближающихся к нулю снизу).

Уравнение Шредингера 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 $E_{\text{хап}} = \frac{m\alpha^2}{\hbar^2}$

. Ниже мы везде (где это не оговорено особо) пользуемся этими единицами $E_{\text{хап}}$. 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:

$$\kappa^2 = \frac{1}{-2E/E_{\text{хап}}}; \quad \rho = \frac{2r}{\kappa a_{\text{хап}}}$$

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 ρ решение, удовлетворяющее необходимым условиям конечности, пропорционально ρ^l .

Для выяснения асимптотического поведения R при **больших ρ** 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 ρ 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 ρ , а при $\rho = 0$ должно быть конечным. Будем искать решение в виде ряда по ρ :

$$f = \sum_{m=0}^{\infty} a_m \rho^m.$$

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

$$\begin{aligned} \sum_m \rho^m [m(m+1)a_{m+1} + 2(l+1)(m+1)a_{m+1} - m \cdot a_m + (\kappa - l - 1)a_m] &= \\ = \sum_m \rho^m [(m+2(l+1))(m+1)a_{m+1} + (\kappa - l - 1 - m)a_m] \end{aligned}$$

Приравнивая нуль, коэффициенты при одинаковых степенях ξ^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 κ 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:

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

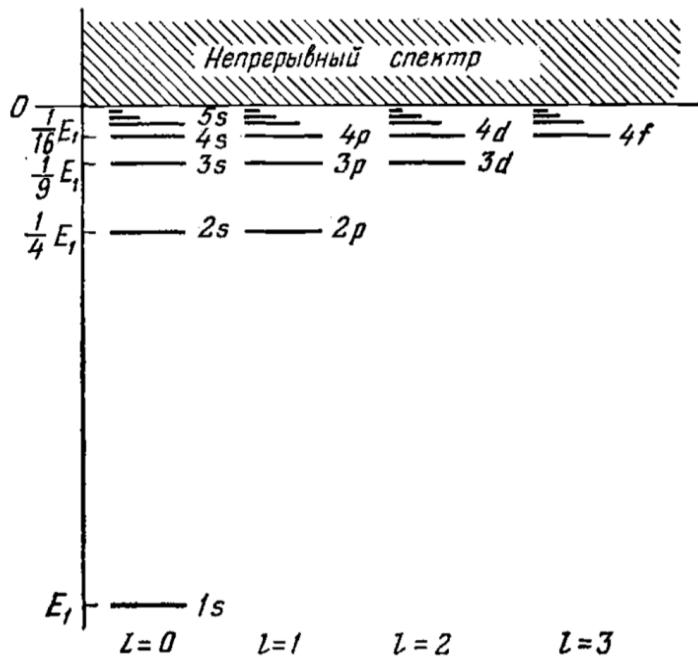
В выражение для энергии входит только число n . Поэтому все состояния с различными l , но одинаковыми n обладают одинаковой энергией. Таким образом, каждое собственное значение оказывается вырожденным не только по магнитному квантовому числу m (как при всяком движении в центрально-симметричном поле), 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:

$$\begin{array}{cccccccccc} l & = & 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & \dots \\ s & p & d & f & g & h & i & k & \dots \end{array}$$

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 15. 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 ϕ — 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 ψ 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 ω_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 Δp_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,

[К содержанию](#)

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; λ — 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 ψ_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 ψ 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:

$$c_k^{n,(2)} \left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)} \right) + E_n^{(2)} \delta_{kn} = \sum_{m \neq n} \left(\frac{V_{mn} V_{km}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \right)$$

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:

$$\begin{aligned} c_k^{n,(0)} &= \delta_{nk} \\ E_n^{(1)} &= V_{nn} \\ c_k^{n,(1)} &= \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} (1 - \delta_{kn}) \\ E_n^{(2)} &= \sum_{m \neq n} \frac{|V_{mk}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \\ c_k^{n,(2)} &= \frac{1 - \delta_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \sum_{m \neq n} \left(\frac{V_{mn} V_{km}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \right) \end{aligned}$$

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 16. 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.

$$V_{mm'} = \langle m | \hat{V} | m' \rangle = -i \frac{eH\hbar}{2\mu \cdot c} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} im' e^{i(m'-m)\phi} d\phi = \frac{eH\hbar}{2\mu \cdot c} m \delta_{mm'}$$

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).

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: $\int_0^{2\pi} e^{im\phi} d\phi = 0$, $m \neq 0$):

$$\begin{aligned}\langle 2s0 | \hat{V} | 2p1 \rangle &= 0 \\ \langle 2s0 | \hat{V} | 2p, -1 \rangle &= 0 \\ \langle 2p, +1 | \hat{V} | 2p, -1 \rangle &= 0\end{aligned}$$

Другие интегралы зануляются из-за интегрирования по θ .

$$\begin{aligned}\langle 2s0 | \hat{V} | 2s0 \rangle &= \frac{e \cdot \epsilon}{32\pi a^3} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \left(2 - \frac{r}{a}\right)^2 e^{-\frac{r}{a}r^3} \cos(\theta) \sin(\theta) dr \cdot d\theta \cdot d\varphi = 0 \\ \langle 2p0 | \hat{V} | 2p0 \rangle &= \frac{e \cdot \epsilon}{32\pi a^3} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{r^5}{a^2} e^{-\frac{r}{a}} \cos^3(\theta) \sin(\theta) dr \cdot d\theta \cdot d\varphi = 0\end{aligned}$$

Следующие матричные элементы отличны от нуля:

$$\begin{aligned}\langle 2s0 | \hat{V} | 2p0 \rangle &= \frac{e \cdot \epsilon}{32\pi a^3} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} e^{-\frac{r}{a}} \left(2 - \frac{r}{a}\right)^2 \frac{r^4}{a} \cos^2(\theta) \sin(\theta) dr \cdot d\theta \cdot d\varphi = \\ &= \frac{e \cdot \epsilon}{32\pi a^3} \frac{4\pi}{3} \int_0^\infty e^{-\frac{r}{a}} \left(2 - \frac{r}{a}\right)^2 r^4 dr = \frac{e \cdot \epsilon}{32\pi a^4} \frac{4\pi}{3} \{48a^4 - 120a^4\} = -3e\epsilon a.\end{aligned}$$

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 $\Psi_n^{(0)*}$ и интегрируя, получим

$$i \hbar \frac{da_n}{dt} = \sum_k a_k V_{nk}(t)$$

где

$$V_{nk}(t) = \int \Psi_n^{(0)*} \hat{V} \Psi_k^{(0)} dq = V_{nk} e^{i\omega_{nk} t}$$

$$\omega_{nk} = \frac{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}{\hbar}$$

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, чьему 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 равна¹⁾

$$w_{fi} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} V_{fi} e^{i\omega_{fi} t} dt \right|^2. \quad (41.2)$$

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 Ψ , а c_{fi} в § 38 — коэффициенты разложения не зависящей от времени функции ψ). 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 ω 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 17. 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 σ).

Пусть $\psi(x, y, z; \sigma)$ — такая волновая функция. По существу, она представляет собой совокупность нескольких различных функций координат, отвечающих различным значениям σ ; 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 σ . Вероятность же частице находиться в элементе объема dV , имея произвольное значение σ , 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 σ . 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 антисимметрические соотношения для спиновых матриц Паули:

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y - \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x &= 2i \hat{\sigma}_z; & \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x &= 0; \\ \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z - \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_y &= 2i \hat{\sigma}_x; & \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z + \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_y &= 0; \\ \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x - \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_z &= 2i \hat{\sigma}_y; & \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x + \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_z &= 0.\end{aligned}$$

3. Покажем, что

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}_x^2 &= \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = I; & \hat{\sigma}^2 &= 3I; \\ \hat{S}^2 &= \frac{\hbar^2}{4} (\hat{\sigma}_x^2 + \hat{\sigma}_y^2 + \hat{\sigma}_z^2) = \frac{3\hbar^2}{4} I.\end{aligned}$$

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

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = S_x \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}; \quad \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{2} & c_2 \\ c_1 & \frac{\hbar}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_x & c_1 \\ S_x & c_2 \end{pmatrix}.$$

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 α_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

$$\text{а) } S_x = \frac{1}{2}; \quad \text{б) } S_x = -\frac{1}{2}; \quad \text{в) } S_x = \frac{1}{2}$$

Решение

В качестве гамильтониана электрона возьмём $H = \mu_0 B \sigma_z$, где μ_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 Φ_{x-} и Φ_{x+} . Тогда проще находить вероятности спинов вдоль x , а для z придётся разложить по собственным функциям Φ_z , но это просто – функции вверху столбца и внизу.

ЛЕКЦИЯ 18. 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

$$\begin{aligned}\hat{\Sigma}^2 &= \hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + 2\hat{S}_1\hat{S}_2 = \frac{3}{2}\hbar^2\hat{I} + 2\hbar^2\frac{1}{4}\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2 \\ \hat{\Sigma}_z &= \frac{\hbar}{2}(\hat{\sigma}_{1z} + \hat{\sigma}_{2z})\end{aligned},$$

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 Ψ 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 Ψ_1 и Ψ_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 Ψ_2^* и суммируя по индексам спинов, имеем

$$-b+2c=\lambda b.$$

Умножая на Ψ_3^* , имеем

$$-c+2b=\lambda c.$$

Решая эти уравнения относительно λ , получим

$$\lambda = -1 \pm 2.$$

Следовательно, собственные значения λ равны 1 и -3 .

Таким образом, соответствующие нормированные собственные функции равны:

$$\begin{aligned} \Psi_5 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_2 + \Psi_3) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_{\uparrow}(1)\varphi_{\downarrow}(2) + \varphi_{\downarrow}(1)\varphi_{\uparrow}(2)]; \\ \Psi_6 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_2 - \Psi_3) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_{\uparrow}(1)\varphi_{\downarrow}(2) - \varphi_{\downarrow}(1)\varphi_{\uparrow}(2)]; \end{aligned}$$

Функции Ψ_1 , Ψ_4 , Ψ_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

$$\hat{\Sigma}^2 \Psi = \hbar^2 \Sigma (\Sigma + 1) \Psi ;$$

$$\hbar^2 \Sigma (\Sigma + 1) = 2\hbar^2 ,$$

то $\Sigma = 1$.

Функция Ψ_6 соответствует $\sigma_1 \sigma_3 = -3$ и соответственно $\Sigma = 0$.

Таким образом, получаются три состояния, образующие триплет Ψ_1 , Ψ_4 , Ψ_5 с полным спином $\Sigma = 1$ и проекцией спина Σ_z , равной $1\hbar$, $-1\hbar$, и одно состояние Ψ_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 проекций спина каждой из частиц. Тогда должно быть:

$$\Psi(q_2, q_1) = e^{i\alpha} \Psi(q_1, q_2)$$

где α — некоторая вещественная постоянная. В результате повторной перестановки мы вернемся к исходному состоянию, между тем как функция Ψ окажется умноженной на e^{2ia} . Отсюда следует, что $e^{2ia} = 1$ 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 ψ_1, ψ_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 ψ_1, ψ_2, \dots волновая функция ψ 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 ψ_1, ψ_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 ψ 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 $\Psi_1(\vec{r})$, другая — $\Psi_2(\vec{r})$. 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 Ψ_1 и Ψ_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

$$\begin{aligned} W_2(z_{1,2} \geq 0) &= \int_{z_1 > 0} \int_{z_2 > 0} |\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2 dV_1 dV_2 = \\ &= \int_{z_1 > 0} \int_{z_2 > 0} \frac{1}{2} \left(|\Psi_1(\vec{r}_1)|^2 |\Psi_2(\vec{r}_2)|^2 + |\Psi_1(\vec{r}_2)|^2 |\Psi_2(\vec{r}_1)|^2 + 2 \Psi_1^*(\vec{r}_1) \Psi_2(\vec{r}_1) \Psi_2^*(\vec{r}_2) \Psi_1(\vec{r}_2) \right) dV_1 dV_2 = \\ &= \frac{1}{4} + \int_{z_1 > 0} \int_{z_2 > 0} \Psi_1^*(\vec{r}_1) \Psi_2(\vec{r}_1) \Psi_2^*(\vec{r}_2) \Psi_1(\vec{r}_2) dV_1 dV_2 = \\ &= \frac{1}{4} + \int_{z_1 > 0} \Psi_1^*(\vec{r}_1) \Psi_2(\vec{r}_1) dV_1 \int_{z_2 > 0} \Psi_1(\vec{r}_2) \Psi_2^*(\vec{r}_2) dV_2 = \frac{1}{4} + |S|^2 = \frac{1}{4} (1 + 4|S|^2); \end{aligned} \quad (5)$$

$$S = \int_{z \geq 0} \psi_1^*(\vec{r}) \psi_2(\vec{r}) dV,$$

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 ϕ зависит только от координат частиц, а функция χ — 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 ϕ , оставляя функцию χ 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 (ϕ , 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 рассматриваются 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:

$$E_{\pm}^{(1)} = E_0^{(1)} - 4J \cdot \hat{\vec{S}}_1 \hat{\vec{S}}_2$$

Тем самым объясняется природа магнитного взаимодействия на микроскопическом уровне.

ЛЕКЦИЯ 19.

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 $a \geq x \geq b$ является правило квантования Бора-Зоммерфельда, обеспечивающее равенство целому кратному π 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:

$$p(x) = \sqrt{2m[E - U(x)]}. \quad (6.4)$$

РАЗНЫЕ ЗАДАЧИ

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 $-V_0$.

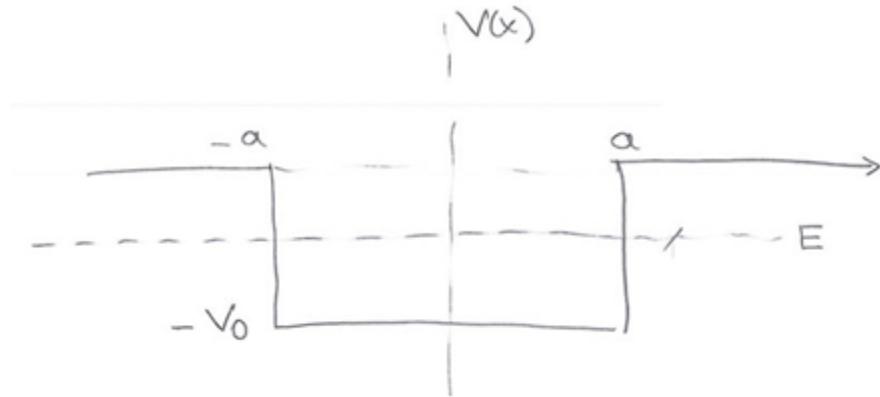


Figure 4: The finite square well potential

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 ψ 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 κ 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 κ^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 ξ , η , 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 ξ is a proxy for κ and η 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 ξ 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 ξ and the constant z_0 of the potential. The quantity η 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 η 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 ψ' at $x = a$. Using the expressions for ψ 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 κ . 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 (η, ξ) plane, as shown in figure 5.

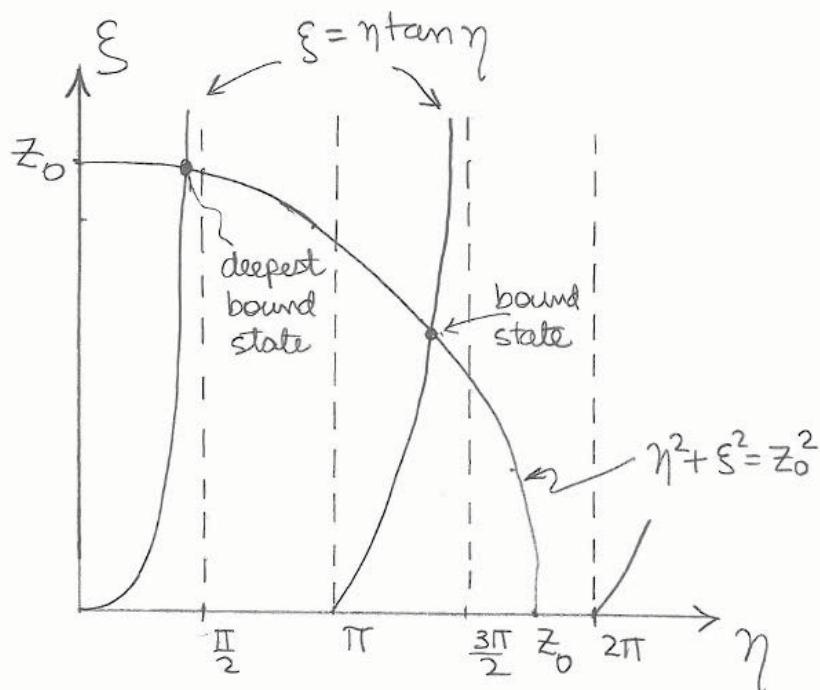


Figure 5: Graphical representation of the simultaneous equations (2.34). The intersections of the circle with the $\eta \tan(\eta)$ function represent even bound state solutions in the finite square well potential. The deepest bound state is the one with lowest η .

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 η grows from zero to infinity. The value of ξ goes to infinity for η 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 η . The second solution occurs for η 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 wavefunction 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 Ψ and ψ' 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)

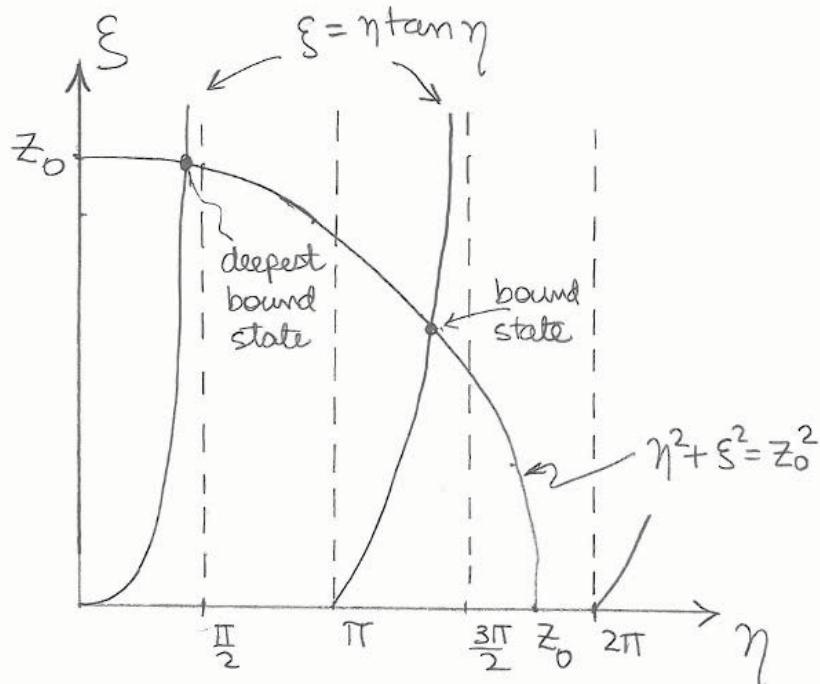


Figure 6: Graphical representation of (2.36). The intersections of the circle with the curves $\xi = -\eta \cot(\eta)$ are odd bound-state solutions in the finite square-well potential. In the case displayed there is just one bound state.

In figure 6 the curve $\xi = -\eta \cot(\eta)$ does not appear for $\eta < \pi/2$ because ξ 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 Ψ and of ψ' 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 κ) 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 ψ 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.

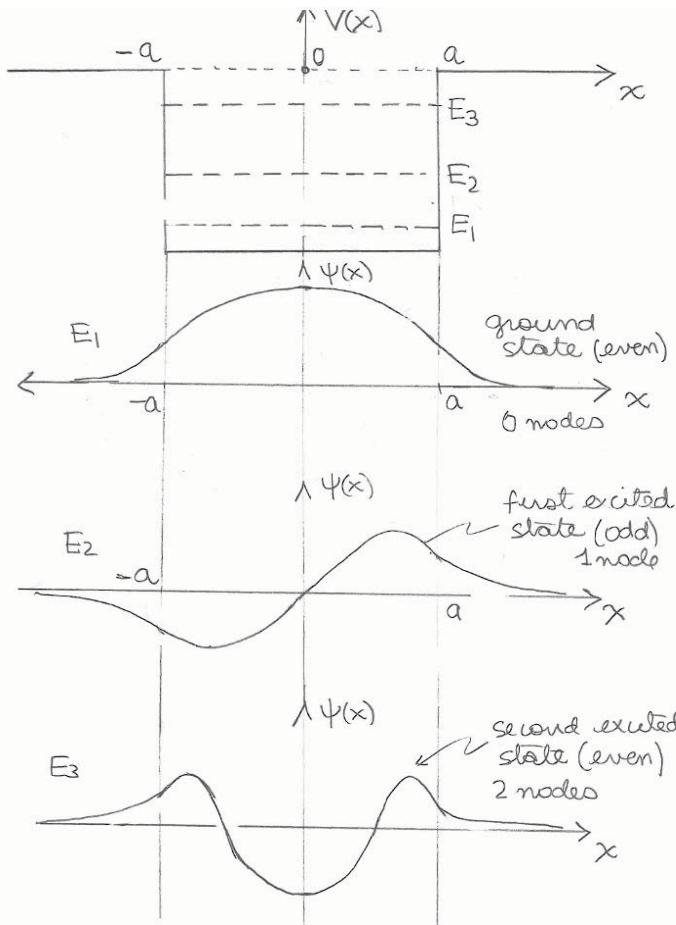
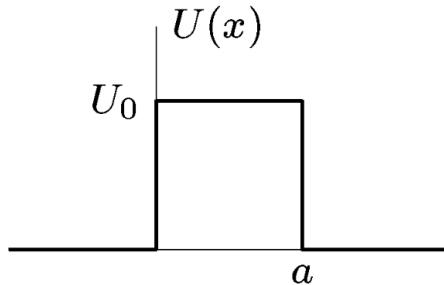


Figure 7: Sketching eigenstates of a finite square well potential. The energies are $E_1 < E_2 < E_3$.

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

$$\begin{aligned}\psi &= e^{ik_1 x} + A e^{-ik_1 x} && \text{при } x < 0, \\ \psi &= B e^{ik_2 x} + B' e^{-ik_2 x} && \text{при } 0 < x < a, \\ \psi &= C e^{ik_1 x} && \text{при } x > a\end{aligned}$$

(со стороны $x > a$ должна быть только прошедшая волна, распространяющаяся в положительном направлении оси x). Постоянны A, B, B', C определяются из условий непрерывности ψ 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 $\hbar\kappa_2 = \sqrt{2m(U_0 - E)}$:

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

Плоский ротатор в электрическом поле. (В семинар)

Пусть плоский заряженный ротатор с моментом инерции I помещен во внешнее электрическое поле ϵ . Найдем сдвиг уровней энергии ротора и вычислим коэффициент электрической восприимчивости.

Гамильтониан возмущения имеет вид

$$\hat{V} = -(\hat{\vec{d}} \cdot \vec{\epsilon}) = -d \cdot \epsilon \cos \phi.$$

Невозмущенные волновые функции и уровни энергии равны:

$$\begin{aligned}\phi_m^{(0)} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}; \\ E_m^{(0)} &= \frac{\hbar^2 m^2}{2I}; \\ m &= 0, \pm 1, \pm 2, \dots.\end{aligned}$$

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

$$E_m^{(2)} = \frac{\left| \langle m | \hat{V} | m-1 \rangle \right|^2}{E_m^{(0)} - E_{m-1}^{(0)}} + \frac{\left| \langle m | \hat{V} | m+1 \rangle \right|^2}{E_m^{(0)} - E_{m+1}^{(0)}} = \frac{I \cdot d^2 \varepsilon^2}{2\hbar^2} \left[\frac{1}{m^2 - (m-1)^2} + \frac{1}{m^2 - (m+1)^2} \right] = \frac{I \cdot d^2 \varepsilon^2}{\hbar^2 (4m^2 - 1)}.$$

Результирующая энергия равна:

$$E_m = \frac{\hbar^2 m^2}{2I} + \frac{I \cdot d^2 \varepsilon^2}{\hbar^2 (4m^2 - 1)}$$

При помещении квантово-механической системы во внешнее электрическое поле $\vec{\mathcal{E}}$ происходит поляризация системы. Работа поляризации $-\frac{\vec{P} \cdot \vec{\mathcal{E}}}{2}$, где \vec{P} – вектор поляризации, равный среднему дипольному моменту системы. Так как $\vec{P} = \alpha \vec{\mathcal{E}}$, где α – коэффициент электрической восприимчивости, то изменение энергии системы в результате поляризации равно $\Delta E = -\frac{\alpha \cdot \varepsilon^2}{2}$. Если ротор находится в состоянии Φ_m , то из равенства $\Delta E = E_m^{(2)}$ получаем коэффициент электрической восприимчивости ротора

$$\alpha = -\frac{I \cdot d^2}{\hbar^2 (4m^2 - 1)}.$$

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 ротора 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 ротора не снимается в постоянном и однородном электрическом поле вплоть до второго приближения по возмущению включительно.

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; $\psi_{\vec{k}}^{(+)}$ – 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

$$[\Delta + k^2] \psi_{\vec{k}_0}^{(+)} = \frac{2m}{\hbar^2} U(\vec{r}) \psi_{\vec{k}_0}^{(+)},$$

- Переход от дифференциальной формы уравнения Шредингера к интегральной осуществляется стандартным образом с помощью функции Грина $G_E^{(+)}$ уравнения Шредингера для свободных частиц, имеющей вид

$$G_E^{(+)}(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{4\pi(\vec{r} - \vec{r}')} e^{i\vec{k}|\vec{r} - \vec{r}'|};$$

$$(\Delta + k^2) G_E^{(+)}(\vec{r} - \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}').$$

- При $r \rightarrow \infty$ имеем

$$\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} e^{i\vec{k}|\vec{r} - \vec{r}'|} \approx \frac{1}{r} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}'}, \quad \vec{k} = k \frac{\vec{r}}{r},$$

- и соотношение (6.1) принимает вид

$$\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}) \approx e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}} + \frac{1}{r} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \left(-\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}'} U(\vec{r}') \psi_{\vec{k}_0}^{(+)}(\vec{r}') dV' \right), \quad (5.12)$$

- 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;
- θ – 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 ω равна

$$dW_{nv} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle n | \hat{A} | v \rangle \right|^2 \delta(E_v - E_n^{(0)} - \hbar\omega) dv,$$

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
- $\hat{H}'(t) = e(\hat{r} \vec{\epsilon}(t)) = \hat{A} e^{i\omega t} + \hat{A}^+ e^{-i\omega t},$
- где $\hat{A} = \frac{1}{2} e(\hat{r} \vec{\epsilon}_0).$

- Сохранение энергии при ионизации обеспечивается наличием δ -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

$$\Psi_n^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}};$$

$$\Psi_v \equiv \Psi_k(\vec{r}) = \frac{1}{\frac{2}{(2\pi)^3}} e^{i(\vec{k}\vec{r})}.$$

- Матричный элемент принимает вид

$$\langle n | \hat{A} | v \rangle = \frac{i e}{2(2\pi)^2 (\pi a^3)^2} \int e^{-\frac{r}{a} + i(\vec{k}\vec{r})} (\vec{\epsilon}_0 \vec{r}) d^3 r.$$

- Введем сферическую систему координат с полярной осью вдоль \vec{k} , угол между \vec{k} и $\vec{\epsilon}_0$ обозначим через λ (рис. 3.14). Тогда

$$(\vec{\epsilon}_0 \vec{r}) = \epsilon_0 r [\cos \lambda \cos \theta + \sin \lambda \sin \theta \cos (\phi - \phi_0)],$$

- где ϕ_0 – азимутальный угол $\vec{\epsilon}_0$.

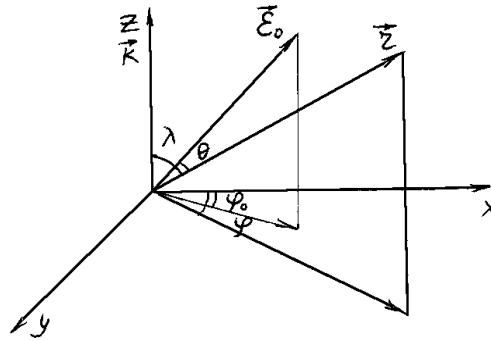


Рис. 3.1

- После подстановки в матричный элемент второй член после интегрирования по ϕ дает нуль. Полагая $\cos \theta \equiv s$, получаем

$$\langle n | \hat{A} | v \rangle = \frac{i e}{\frac{5}{2} \pi^2 a^{\frac{3}{2}}} 2\pi \delta_0 \cos \lambda \int_{-1}^{+1} \left\{ \int_0^{\infty} e^{i k r s} e^{-\frac{r}{a}} r^3 dr \right\} s ds =$$

$$= \frac{i e \delta_0 \cos \lambda}{\pi (2a)^{\frac{3}{2}}} \int_{-1}^{+1} \frac{3! s ds}{(\frac{1}{a} - i k s)^4} = \frac{e \varepsilon_0 \cos \lambda}{\pi (2a)^{\frac{3}{2}}} \cdot \frac{18 k a^5}{(1 + k^2 a^2)^3}.$$

– Так как $E_v = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$, интервал состояний для свободной частицы

$$dv = d^3 k = k^2 dk d\Omega_k = k^2 \frac{dk}{dE_v} d\Omega_k dE_v = \frac{\mu k}{\hbar^2} d\Omega_k dE_v,$$

– 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 δ – 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.

ВАРИАЦИОННЫЙ МЕТОД

Вариационный метод

- Вариационный метод наряду с теорией возмущения широко применяется для приближенных расчетов квантовых систем. Наиболее часто он используется для расчета основного (ништего) 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 α, β, \dots . Интеграл I также будет зависеть от параметров α, β, \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 α_0, β_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 α_0 :
- $$\frac{\partial E(\alpha)}{\partial \alpha} \Bigg|_{\alpha_0} = \frac{\hbar^2}{\mu} \alpha - 3e^2 \Bigg|_{\alpha_0} = 0; \quad \alpha_0 = \frac{3\mu e^2}{\hbar^2}.$$
- 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 α_0 находим из уравнения
- $$\frac{\partial E(\alpha)}{\partial \alpha} \Bigg|_{\alpha_0} = \frac{3}{2} \frac{\hbar^2}{\mu} - 2e^2 (\alpha \pi)^{1/2} \Bigg|_{\alpha_0} = 0.$$
- 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 $f_2(r)$.

Ион молекулы водорода

Получим выражение для энергии $E_o(R)$ основного терма иона молекулы водорода H_2^+ вариационным методом, аппроксимируя волновую функцию терма функцией вида

$$\Psi_{\text{проб}}(r) = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi R^3}} e^{-\alpha r/R}, \quad \text{где}$$

r —расстояние электрона от центра отрезка, соединяющего ядра —протоны;
 α —вариационный параметр.

- Выбрав в полученном выражении $E_o(R, \alpha)$ параметр $\alpha = 1,9$ (при таком значении α функция двух переменных $E_o(R, \alpha)$ имеет абсолютный минимум при некотором R_o , которое следует определить), найти размер иона (R_o — расстояние между ядрами иона в положении равновесия), минимальную энергию терма E_o и энергию нулевых колебаний ядер — протонов иона $E_{\text{кол},o}$. Сравним полученные результаты с экспериментальными данными $R_o \approx 2,0$ ат. ед., $E_{\text{кол},o} \approx 0,0044$ 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

$$E_o(R, \alpha) = \overline{\hat{H}_{\text{эл}}} = \frac{\alpha^2}{2R^2} - \frac{1}{R} [3 - 2(2 + \alpha) e^{-\alpha}]. \quad (4.5)$$

- 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 $E_o(R)$ основного терма, причем наилучшее приближение получается при таком выборе параметра α , при котором это выражение принимает минимальное значение (как функция переменной α ; значение $\alpha(R)$ определяется условием $\partial E_o(R, \alpha) / \partial \alpha = 0$ 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 α 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 α . 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 ρ, ϕ, z имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] + U(\rho). \quad (2.1)$$

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 ρ и азимутальному углу ϕ в плоскости, перпендикулярной к оси цилиндрической симметрии, z :

$$\Psi_{n_\rho, m, p_z} = \frac{1}{\sqrt{4\pi^2 \hbar}} \exp \left[i \left(\frac{p_z z}{\hbar} + m\phi \right) \right] \theta_{n_\rho, |m|}(\rho), \quad (2.2)$$

где $\theta_{n_\rho, |m|}(\rho)$ – решение радиального уравнения Шредингера для «поперечного» движения частицы в плоскости, перпендикулярной к оси z :

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[-\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \rho \frac{d}{d\rho} + \frac{m^2}{\rho^2} \right] \theta_{n_\rho, |m|}(\rho) + U(\rho) \theta_{n_\rho, |m|} = E_{n_\rho, |m|} \theta_{n_\rho, |m|} \quad (2.3)$$

значения $E_{n_\rho, |m|}$ задают энергетический спектр “поперечного” движения частицы; n_ρ – 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

$$\left(\hat{L}_- \right)_{m-1,m} = \left(\hat{L}_+ \right)_{m-1,m}^*.$$

Воспользовавшись равенством $\hat{L}^2 = \hat{L}_+ \hat{L}_- + \hat{L}_z^2 - \hbar \hat{L}_z$, 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 $\hat{\alpha} = e \hat{r}$ – 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 μ – 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.